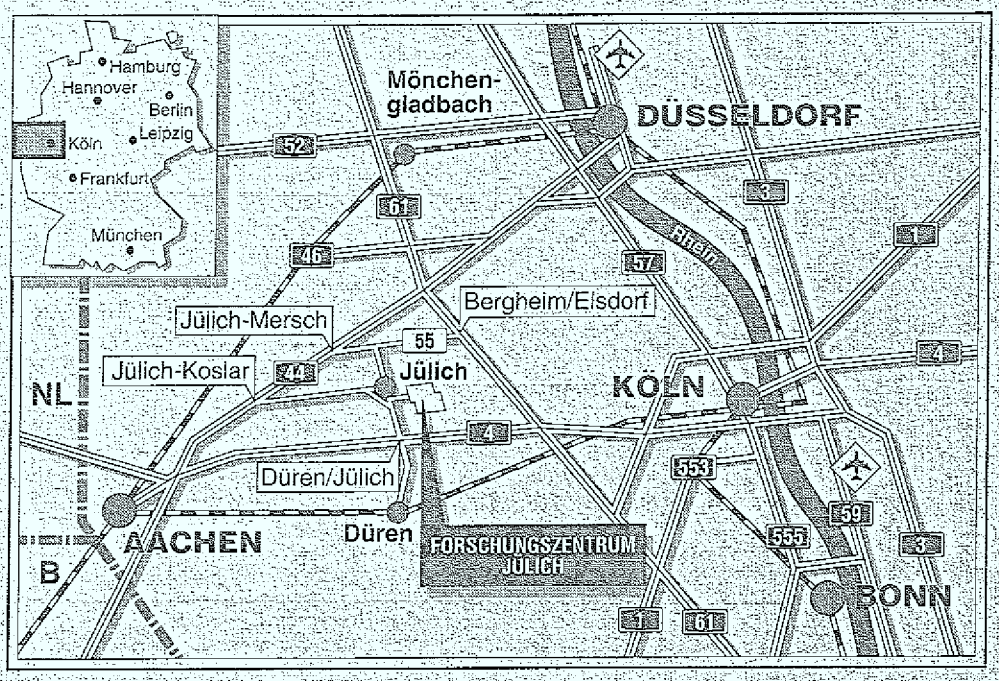
FORSCHUNGSZENTRUM JÜLICH GmbH KFA

Institut für Schicht- und Ionentechnik

$Ga_{1-x}In_xAs/InP$-Heterostrukturen für die Höchstfrequenzelektronik

Herstellung und Charakterisierung

Ralf Meyer



Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 2985
ISSN 0944-2952
Institut für Schicht- und Ionentechnik Jül-2985
D 82 (Diss. RWTH Aachen)

Zu beziehen durch: Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek
D-52425 Jülich · Bundesrepublik Deutschland
Telefon: 02461/61-6102 · Telefax: 02461/61-6103 · Telex: 833556-70 kfa d

$Ga_{1-x}In_xAs/InP$-Heterostrukturen für die Höchstfrequenzelektronik

Herstellung und Charakterisierung

Ralf Meyer

Inhalt

Einleitung

In den letzten zwei Jahrzehnten hat sich die Informationstechnologie und darunter besonders die Halbleitertechnik zu einer der Schlüsselindustrien der modernen Wirtschaft entwickelt. Ihre Produkte haben mittlerweile in allen Gebieten vom produzierenden Gewerbe über den Dienstleistungssektor bis in den privaten Bereich hinein Einzug gehalten und diese zum Teil grundlegend verändert. Man denke dabei nur an die industrielle Automatisierung, alle Formen der Datenverarbeitung, die Satellitenkommunikation und die Glasfasertechnik, das Global Positioning System oder das Kabelfernsehen, sowie Funktelefon und Videotechnik.

Mit dem Wandel zur Informationsgesellschaft ging die Notwendigkeit immer schnellerer Übertragung und Verarbeitung immer größerer Datenmengen einher. Dabei war für die Erschließung neuer Übertragungswege wie zum Beispiel der Glasfasertechnologie zunächst die Entwicklung entsprechender Materialien und Bauelemente erforderlich. Bereits Mitte der 60er Jahre wurden die besonderen Möglichkeiten der Glasfaser für die Übermittlung von Signalen in optischer Form erkannt [1]. Die technische Realisierung der optischen Nachrichtentechnik begann jedoch erst Anfang der 80er Jahre, nachdem auf der Basis von III-V-Verbindungshalbleitern geeignete LASER zur Erzeugung der optischen Signale hergestellt werden konnten.

Auch in der Satellitenkommunikationstechnik fanden diese Materialien Anwendung. Denn gegenüber Silizium, dem sonst am häufigsten für Halbleiterbauelemente benutzten Material, besitzen die III-V-Verbindungen neben der Eigenschaft als direkte Halbleiter Licht aussenden zu können, den weiteren Vorteil deutlich höherer Elektronenbeweglichkeiten. Daher können hieraus sehr schnelle und besonders rauscharme Transistoren gefertigt werden, die zum Beispiel als Verstärker in DBS-Empfängern (Direkt Broadcast Satellite) eingesetzt werden (Übertragungsfrequenzen beim Satellitenfernsehen liegen im Bereich von $10 - 30$ GHz).

Die weitergehende Entwicklung setzt bei der monolithischen Integration vieler Elemente an, um kompaktere Bauweise, niedrigere Fertigungskosten und größere Schaltgeschwindigkeiten erreichen zu können oder auch um neue Funktionen zu realisieren.

Aus der Zusammenfassung von LASER-Dioden, Photodioden und Transistoren auf einem Chip werden Baugruppen für die integrierte Optoelektronik entwickelt (OEIC, OptoElectronic Integrated Circuits). Ebenso wird die Integration von Transistoren auf der Basis von III-V-ern für extrem schnelle Logik-Schaltkreise verfolgt. Eine Voraussetzung für solche und ähnliche Projekte ist dabei immer die Herstellung maßgeschneiderter Halbleiterschichten, in denen die Eigenschaften unterschiedlicher Verbindungen optimal miteinander kombiniert und auf das entsprechende Bauelement abgestimmt werden. Mit Blick auf Transistoranwendungen ist diese Problematik der zentrale Punkt dieser Arbeit.

Kapitel 1

Konzeptionelle Überlegungen

Der Schwerpunkt dieser Arbeit wird die Abscheidung und Charakterisierung geeigneter Schichtstrukturen für Transistoranwendungen sein. Dabei müssen allerdings schon bei der Auswahl der abzuscheidenden Halbleiterverbindungen die Anforderungen und charakteristischen Eigenschaften des geplanten, erst am Ende der Entwicklung stehenden Transistors berücksichtigt werden. In diesem Kapitel soll daher zunächst eine kurze Beschreibung des Aufbaus und der Funktionsweise der ins Auge gefaßten modulationsdotierten Feldeffekttransistoren gegeben werden (siehe dazu zum Beispiel auch Ref. [2] oder [3]). Ausgehend von den Zusammenhängen zwischen Transistorparametern und Materialeigenschaften kann dann ein kritischer Vergleich verschiedener möglicher Materialkombinationen vorgenommen werden. Diese Gegenüberstellung wird die Grundlage für die Auswahl des herzustellenden Materialsystems sein und damit die Zielrichtung dieser Arbeit und in groben Zügen auch die Vorgehensweise bei der Realisierung definieren.

1.1 Aufbau und Funktionsweise von MODFETs

Seit der Erfindung des Transistors gegen Ende der 40er Jahre sind eine Reihe verschiedener Konzepte für den Aufbau von Transistoren entwickelt worden, um möglichst schnelle, leistungsstarke und rauscharme Bauelemente herstellen zu können. Am Anfang standen bipolare Elemente auf Si- oder Ge-Basis. In ihnen sind beide Ladungsträgerarten, also sowohl Elektronen als auch Löcher, am Stromtransport beteiligt, und durch eine Verschiebung des Gleichgewichtes zwischen beiden durch eine von außen angelegte Spannung wird der Stromfluß kontrolliert. Mit einem GaAs-Feldeffekttransistor (FET) wurde 1966 erstmals ein unipolares Element aus einem III-V-Verbindungshalbleiter vorgestellt. Bei diesem Transistortyp wird der Strom nur von einer Ladungsträger-

sorte getragen und allein durch ein äußeres elektrisches Feld gesteuert. Feldeffekttransistoren zeichnen sich gegenüber bipolaren Bauelementen durch geringere Verlustleistungen und einen einfacheren Aufbau aus. Die Weiterentwicklung dieses Typs führte 1980 zum modulationsdotierten Feldeffekttransistor (MODFET), für den die Verwendung zweier verschiedener Halbleitermaterialien, eines davon dotiert, das andere undotiert, charakteristisch ist. Derartige Transistoren stellen heutzutage und wohl auch für die absehbare Zukunft die schnellsten aktiven Elemente aus halbleitendem Material dar. Zu ihren herausragenden Grenzfrequenzen gesellt sich noch eine besondere Rauscharmut als weiterer Pluspunkt hinzu.

An Stelle der Bezeichnung MODFET sind noch eine Reihe anderer Namen für derartige Transistoren gebräuchlich. Bei einem n-Kanal-Typ, der in dieser Arbeit im Vordergrund stehen wird, wird ein und dieselbe Struktur oft auch als SDHT (Selectively Doped Heterojunction Transistor), TEGFET (Two dimensional Electron Gas Field Effect Transistor) oder als HEMT (High Electron Mobility Transistor) bezeichnet. Diese Vielzahl von Namen gründet sich auf die verschiedenen Besonderheiten einer solchen Transistorstruktur.

Ein wesentliches Charakteristikum ist die Verwendung von zwei Halbleitermaterialien mit unterschiedlicher Bandlücke (s. Abb. 1.1). Solch eine Heterostruktur wird epitaktisch auf ein semiisolierendes Substrat abgeschieden, wobei ein Teil der Schicht des Materials mit größerer Bandlücke gezielt dotiert wird.

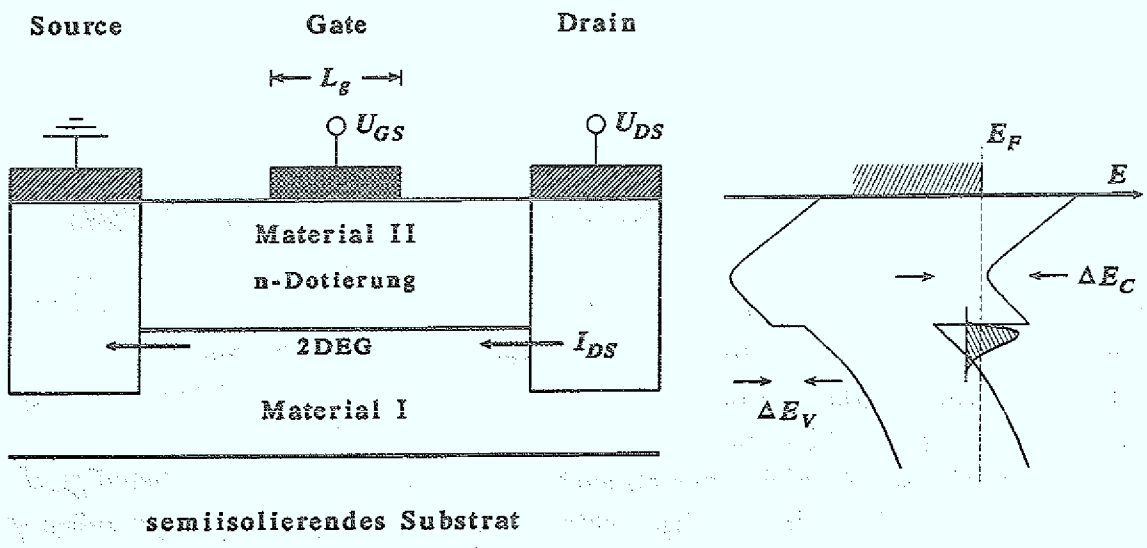


Abb. 1.1: Schematische Darstellung des Aufbaus eines n-Kanal-MODFETs (HEMT) und des Bandverlaufes unter dem Gate

Wichtiger als die absoluten Größen der Bandlücken selbst ist, daß an der Grenzfläche, also dort, wo die beiden Materialien aneinanderstoßen, abrupte Sprünge in der Bandstruktur auftreten (ΔE_c : Leitungsband-Offset, ΔE_v : Valenzband-Offset). Der Versatz im Leitungsband führt dazu, daß die freien Elektronen aus dem n-dotierten Bereich in Material II in das energetisch tieferliegende Material I überwechseln und sich dort an der Grenzfläche ansammeln, bis im Gleichgewicht die Fermi-Energie über die Grenzfläche hinweg konstant ist. Bei entsprechender Dimensionierung der Konzentration des Dotierstoffes und der Schichtdicken treten alle freien Elektronen über, und ihre Aufenthaltswahrscheinlichkeit entspricht der schraffierten Fläche. Die Raumladungen bewirken eine Krümmung der Energiebänder, die auf der Seite des Material I zu einem annähernd dreieckigen Potentialtopf führt. In diesem Potentialtopf ist die Bewegung der Elektronen auf die Ebene parallel zur Grenzfläche, das heißt auf zwei Dimensionen, beschränkt. Die Elektronen bilden damit ein quasi zweidimensionales Gas. In diesem Topf sind die Elektronen jetzt räumlich von den Donatoratomen getrennt, so daß die Streuung an diesen ionisierten Störstellen einen wesentlich geringeren Einfluß auf die Beweglichkeit der Elektronen hat. Modulationsdotierte Strukturen weisen daher im Vergleich zu gleichmäßig dotierten einfachen Schichten bei gleicher Ladungsträgerdichte deutlich höhere Beweglichkeiten der Ladungsträger auf.

Bei der Herstellung eines Transistors wird das zweidimensionale Elektronengas (2DEG) durch Einlegieren von Metallen kontaktiert. Diese ohmschen Kontakte bilden die stromführenden Anschlüsse Source und Drain. Der dazwischenliegende Steuerkontakt, das Gate, muß dagegen nichtleitend mit dem Halbleiter verbunden sein. Der Stromfluß über das Gate wird durch eine Barriere unterdrückt, die im allgemeinen aus einem Oxid, einer zusätzlichen Isolationsschicht, einer Schottky-Barriere oder einem p-n-Übergang bestehen kann. Bei Transistoren auf Si-Basis läßt sich leicht ein sehr gut isolierendes Oxid herstellen, was zum Namen MOSFET (Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor) für derartige Bauelemente geführt hat. Dagegen ist im Fall der III-V-Halbleiter sowohl ein Oxid wie auch eine zusätzliche Isolationschicht als Barriere ungeeignet, da es an der Grenzfläche zu einer hohen Dichte an Oberflächenzuständen kommt, die beim Schalten umgeladen werden müssen und so die Schalteigenschaften des Transistors verschlechtern. Daher können bei III-V-Verbindungen nur die Schottky-Barriere zwischen Gate-Metall und Halbleiter oder ein zusätzlicher, geeignet dimensionierter p-n-Übergang als Barriere zwischen dem Gate und dem 2D-Kanal ausgenutzt werden.

Über eine an das Gate angelegte Spannung läßt sich dann die Leitfähigkeit des 2DEG kontrollieren. Die Steuerwirkung beruht dabei auf der Beeinflussung der Anzahl der Ladungsträger im Kanal. Für eine theoretische Beschreibung der Funktionsweise eines MODFETs kann zur Vereinfachung die Berechnung der Ladungsträger-

verteilung (senkrecht zur Oberfläche) vom Transport (parallel zur Oberfläche) abgetrennt und separat behandelt werden. In einem einfachen Modell zur Berechnung der Ladungsträgerdichte im Kanal (*Linear Charge Control Model*) kann das Gate zusammen mit dem 2DEG als ein Plattenkondensator aufgefaßt werden, da die Verarmungszone unter dem Gate bei negativen Spannungen immer bis zum 2DEG reicht und dieses quasi metallischen Charakter hat. Der Abstand der Platten entspricht dabei der Strecke zwischen der Oberfläche der Probe und dem Schwerpunkt der Wellenfunktion der Elektronen. Die nach diesem Modell für einen dreieckigen Potentialtopf vorhergesagte lineare Abhängigkeit der flächenbezogenen Ladungsträgerdichte im Kanal von der Gate-Spannung [4] beschreibt das Verhalten eines Transistors bei tiefen Temperaturen sehr gut. Die bei Raumtemperatur beobachteten Abweichungen lassen sich theoretisch allerdings erst erfassen, wenn die Verteilung der Ladungsträger durch selbstkonsistente Lösung der Schrödinger- und der Poisson-Gleichung numerisch berechnet wird.

Zur Berechnung des Stromes zwischen Drain und Source ist die Dichte der Elektronen im Kanal mit deren Geschwindigkeit zu gewichten. Die Geschwindigkeit der Elektronen ist für kleine Felder ($E \leq 10^3$ V/cm) eine lineare Funktion der elektrischen Feldstärke bzw. der angelegten Spannung. Bei sehr hohen Feldstärken kommt es jedoch unter stationären Bedingungen zu einer Sättigung der Geschwindigkeit bei etwa 1×10^7 cm/s. [1]

Für die Güte des Transistors ist es entscheidend, wie effektiv dieser Strom über eine an das Gate angelegte Spannung gesteuert werden kann. Die entsprechende Größe wird als Steilheit g_m bezeichnet und ist definiert als das Verhältnis aus der Änderung des Drain-Source-Stromes I_{DS} zur Spannungsänderung am Gate unter ansonsten konstanten Bedingungen. Im Fall eines idealen MODFETs, bei dem sich alle Elektronen im Kanal befinden und sich gleichmäßig mit der Sättigungsgeschwindigkeit v_{sat} bewegen, ergibt sich für g_m:

$$g_m = \left.\frac{\partial I_{DS}}{\partial U_{GS}}\right|_{U_{DS}=const.} \sim \frac{v_{sat}}{d} \tag{1.1}$$

Als Sättigungsgeschwindigkeit kann dabei die Spitzengeschwindigkeit der Elektronen in Bulk-Material angesetzt werden.

Mit Hilfe der Steilheit läßt sich nun auch berechnen, bis zu welcher Frequenz noch eine Stromverstärkung mit dem Transistor möglich ist. Diese Transitfrequenz f_T wird

[1] Die Sättigung der Geschwindigkeit ist auf die Streuung der Elektronen aus dem Γ-Tal in Nebentäler der Bandstruktur zurückzuführen. Dieser Prozeß benötigt allerdings eine gewisse Zeit, die in der Größenordnung einer Picosekunde liegt. Innerhalb der Relaxationszeit können die Elektronen daher durchaus wesentlich höhere Geschwindigkeiten bis zu 10^8 cm/s erreichen. Dieser Vorgang wird als *velocity overshoot* bezeichnet.

von der Steilheit sowie der Gesamtkapazität C_G des Gates gegenüber dem 2DEG bestimmt. Dabei gilt:

$$f_T = \frac{1}{2\pi} \frac{g_m}{C_G} \sim \frac{v_{sat}}{L_G} \tag{1.2}$$

Die Steilheit und die Transitfrequenz eines idealen MODFETs hängen demnach nur von der Sättigungsgeschwindigkeit der Elektronen in dem jeweiligen Halbleitermaterial und dem Abstand des Gates vom 2DEG, sowie von der Länge des Gates ab.

In einem realen MODFET sind die Verhältnisse allerdings etwas komplizierter. So ist die Feldverteilung und damit auch die Geschwindigkeit der Elektronen unter dem Gate nicht konstant. Damit verbunden ist auch eine Ortsabhängigkeit der Ladungsträgerdichte (Stromerhaltung!). Die Dichte der Elektronen nimmt vom Niederfeldbereich an der Source-Seite des Gates zum Hochfeldbereich an der dem Drain-Kontakt zugewandten Seite hin ab (→ *Gradual Channel Approximation* nach Shockley). Darüber hinaus können sich weitere freie Elektronen noch im dotierten Bereich von Material II aufhalten oder dort in tiefen Störstellen gebunden sein. Diese Ladungen, die sich nicht mit der Sättigungsgeschwindigkeit bewegen, tragen vergleichsweise wenig zum Strom I_{DS} bei, werden aber bei einer Änderung der Gate-Spannung mitmoduliert. Die Änderung von I_{DS} ist dadurch geringer als sie im Idealfall sein könnte. Anders ausgedrückt bedeutet das, daß die zusätzlichen Ladungsanteile (mit $v < v_{sat}$) die schnellen Elektronen des 2DEG zum Teil gegenüber dem Gate abschirmen.

Um diesem Effekt Rechnung zu tragen, wurde das Modell der *Modulationseffizienz* entwickelt [5]. In diesem Modell wird die Ladung unter dem Gate künstlich in drei Anteile aufgespalten. Der erste Teil entspricht der Menge an Elektronen, die notwendig ist um den Strom zwischen Drain und Source sicherzustellen, wobei sich alle Elektronen gleichmäßig mit der Sättigungsgeschwindigkeit bewegen sollen (idealer MODFET). Der zweite Teil berücksichtigt die Inhomogenität der Elektronendichte im Kanal entlang des Gates, während der letzte die parasitären Ladungsanteile außerhalb des Kanals umfaßt. Für die Elektronen dieser beiden Teile wird angenommen, daß sie sich nicht bewegen. Die Modulationseffizienz η drückt nun aus, wie groß bei einer Änderung der Spannung am Gate der Anteil der Ladungsänderung von Elektronen, die sich mit der Sättigungsgeschwindigkeit bewegen, im Vergleich zur insgesamt modulierten Ladung ist. Dieser Parameter η geht direkt in die Größen g_m und f_T ein. Für schnelle Transistoren muß daher η maximiert werden. Dazu ist es zum einen erforderlich, daß die Dichte der Elektronen im Kanal möglichst groß gegenüber der Elektronenkonzentration in anderen Bereichen der Schichtstruktur ist und zum anderen sich ein hoher Anteil der 2D-Elektronen mit der maximalen Geschwindigkeit bewegt. Der erste Punkt läßt sich durch einen hohen Leitungsband-Offset erreichen, der ein besseres Confinement der Elektronen im Quantentopf gewährleistet. Für den zweiten ist die Beweglichkeit der

Elektronen zu optimieren, um die Ausdehnung des Bereiches, in dem sich die Elektronen mit kleineren Geschwindigkeiten als der Sättigungsgeschwindigkeit bewegen klein zu halten.

Geht man noch einen Schritt weiter und betrachtet zusätzliche Transistorkenngrößen wie die extrinsische Steilheit oder die maximale Schwingfrequenz f_{max} (Frequenz, bei der die Leistungsverstärkung auf 1 abgefallen ist), so erkennt man, daß diese nicht nur durch die intrinsischen Eigenschaften des HEMTs, sondern maßgeblich auch durch parasitäre Widerstände und Kapazitäten mitbestimmt werden und zum Teil auch durch die Wahl des Halbleitermaterialsystems beeinflußt werden können. So ist zum Beispiel der Bahnwiderstand R_S zwischen Source-Kontakt und dem Gate-Bereich zu minimieren. Gerade aber im Bereich zwischen Source und Gate, wo das elektrische Feld relativ schwach ist, spielt neben der Dichte auch wieder die Beweglichkeit der Elektronen eine entscheidende Rolle für die Höhe des Widerstandes.

Alles in allem erfordert demnach die Herstellung schneller Transistoren neben möglichst kurzen Gate-Längen vor allem eine Materialkombination, die eine hohe Spitzengeschwindigkeit und Beweglichkeit der Elektronen aufweist, hohe Ladungsträgerdichten im 2DEG erlaubt, das heißt ein hohes ΔE_c hat und Strukturen mit geringen Abständen des 2DEGs zur Oberfläche. Unter diesen Gesichtspunkten sollen im folgenden die Vor- und Nachteile verschiedener möglicher Kombinationen einander gegenübergestellt werden.

1.2 Vergleich möglicher Materialsysteme

Durch den Einsatz moderner Epitaxieverfahren ist es heutzutage möglich, III-V-Verbindungshalbleiter in praktisch allen erreichbaren Mischungsformen herzustellen. Bei der Abscheidung von Heterostrukturen ist jedoch zu beachten, daß die vom Substrat vorgegebene Kristallstruktur nur dann in der aufgebrachten Schicht erhalten bleibt, wenn beide dieselbe Gitterkonstante haben. Andernfalls treten Spannungen zwischen Schicht und Substrat auf, die zunächst zwar durch eine elastische Verformung des Gitters aufgefangen werden, wenn sie zu groß sind aber zu Störungen im Kristall führen (Ausbildung von Versetzungen). Als Substratmaterial dienen bei den III-V-Halbleitern meist binäre Verbindungen, die in Abb. 1.2 als Punkte in ein Diagramm der Materialparameter Gitterkonstante und Bandlücke eingetragen sind. Die verbindenden Linien entsprechen den jeweiligen ternären Mischkristallen und die dazwischen liegenden Flächen den quaternären Verbindungen. Aus diesem Diagramm läßt sich ersehen, welche Materialkombinationen gitterangepaßt aufeinander abgeschieden werden können.

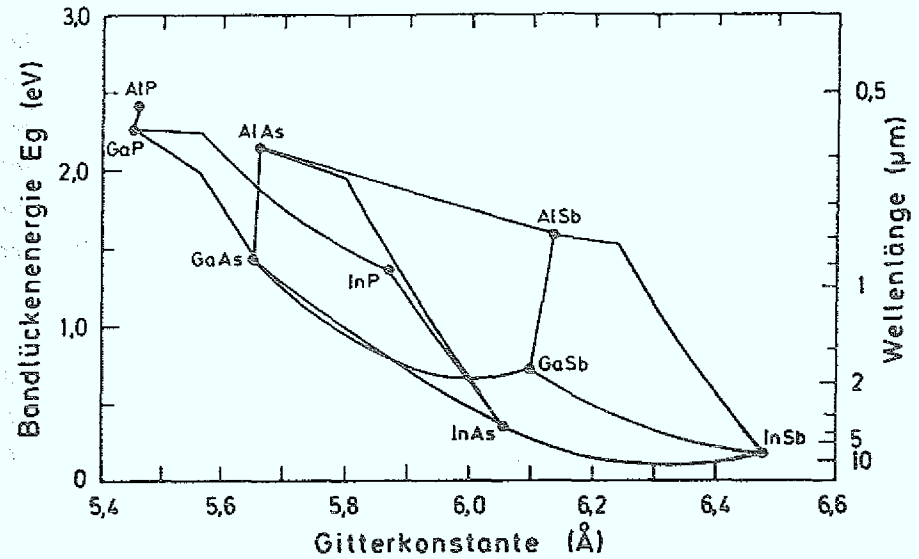


Abb. 1.2: Gitterkonstanten und Bandlückenenergien von III-V-Halbleitern (aus Ref. [6])

Für die Herstellung von Heterostrukturen sind GaAs, InP und InAs die wichtigsten Substratmaterialien. Einige der auf diesen Substraten gitterangepaßt abscheidbaren Mischkristalle sind in Tab. 1.1 aufgelistet.

Tabelle 1.1: Die wichtigsten III-V-Substratmaterialien und einige der darauf gitterangepaßt abscheidbaren Mischkristalle

Substrat	gitterangepaßte Verbindung
GaAs	$Al_xGa_{1-x}As$; $0 \leq x \leq 1$ $Ga_{0,51}In_{0,49}P$
InP	$Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ (nur ein Parameter frei wählbar); insbesondere aber auch $Ga_{0,47}In_{0,53}As$ $Al_{0,48}In_{0,52}As$
InAs	nur Sb-haltige Verbindungen in entsprechenden Mischungsverhältnissen

Das bisher am intensivsten untersuchte III-V-System ist die schon beinahe als klassisch zu bezeichnende Kombination $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$, mit der auch der erste MODFET realisiert wurde. Auf Grund der schwachen Abhängigkeit der Gitterkonstanten vom Al-Gehalt können AlGaAs-Schichten in allen Zusammensetzungen nahezu uneingeschränkt auf GaAs deponiert werden. Die gewünschten Heterostrukturen lassen sich zum Beispiel mittels Molekularstrahlepitaxie (MBE, Molecular Beam Epitaxy) in hoher Reinheit und kristalliner Perfektion herstellen. Doch trotz der unbestreitbaren Vorteile, was etwa die Komplexität des Abscheidungsprozesses oder aber den Preis der Substrate verglichen zum Beispiel mit InP angeht, ist das AlGaAs/GaAs-System nicht das optimale Materialsystem für die Herstellung von MODFETs. Ein Problem dieser Materialkombination ist die hohe Affinität des Aluminiums zu Sauerstoff. Ohne eine schützende Schicht der Luft ausgesetzt oxidieren Al-haltige Schichten. Eine Passivierung aller Oberflächen in einem Bauelement ist daher notwendig, um eine Degradation zu vermeiden. In n-dotierten AlGaAs-Schichten findet man darüber hinaus Störstellen mit tief in der Bandlücke liegenden Energieniveaus, sogenannte DX-Zentren, die Elektronen binden, so daß es zu einer Anhäufung von Ladung außerhalb des Kanals kommt. Diese tiefen Störstellen machen sich besonders bei Al-Gehalten zwischen 20 und 80 % bemerkbar. Abgesehen von diesen materialbedingten Problemen im AlGaAs/GaAs-System sind andere Kombinationen auch auf Grund ihrer elektrischen Eigenschaften für die Produktion von MODFETs geeigneter.

Wie in Abschnitt 1.1 erläutert, muß die ideale Heterostruktur, eine möglichst hohe Dichte der Ladungsträger im Kanal bei gleichzeitig maximaler Beweglichkeit und Spitzengeschwindigkeit gewährleisten. Die maximale Anzahl an Ladungsträgern, die aus dem dotierten Bereich in den 2D-Kanal gelangen kann, hängt aber direkt von der Höhe der Potentialstufe ab. Je höher der Band-Offset, desto mehr Ladungsträger können in dem Kanal gesammelt werden. In Tab. 1.2 sind daher die Band-Offsets für die verschiedenen Heterostrukturen zusammen mit den Elektronenbeweglichkeiten und Spitzengeschwindigkeit im jeweiligen Kanalmaterial aufgelistet.

Nach diesen Daten hat die Kombination von AlSb mit InAs die vielversprechensten physikalischen Voraussetzungen für die Herstellung von n-Kanal-MODFETs. Hier vereint sich der höchste Offset im Leitungsband mit der höchsten in III-V-Heterostrukturen erreichbaren Beweglichkeit. Leider wirft diese Kombination auch die größten technologischen Schwierigkeiten auf. Einerseits ist InAs als Substratmaterial nicht in Form von semiisolierenden Wafern erhältlich, was für den Einsatz in MODFET-Strukturen ein Nachteil ist, und andererseits ist die Epitaxie von Sb-haltigen Verbindungen auf Grund seiner physikalischen und chemischen Eigenschaften besonders problematisch, so daß die herausragenden physikalischen Eigenschaften technisch noch nicht genutzt werden können.

Tabelle 1.2: Band-Offsets in verschiedenen Heterostrukturen (nach [7]) sowie Elektronenbeweglichkeiten und Spitzengeschwindigkeiten im Kanalmaterial (für reine Materialien) bei Raumtemperatur (aus [8] bzw. [9])

Materialsystem		ΔE_c	ΔE_v	μ_e	v_p
Barriere	Kanal	eV	eV	cm^2/Vs	10^7 cm/s
AlAs	GaAs	0,29	0,44		
$Al_{0,30}Ga_{0,70}As$	GaAs	0,26	0,13	9.200	2,1
$Ga_{0,51}In_{0,49}P$	GaAs	0,22	0,24		
InP	$Ga_{0,47}In_{0,53}As$	0,20	0,40	13.800	2,8
$Al_{0,48}In_{0,52}As$	$Ga_{0,47}In_{0,53}As$	0,50	0,21		
$Al_{0,48}In_{0,52}As$	InP	0,30	−0,19	5.400	2,4
GaSb	InAs	0,88	−0,51	30.000	4,0
AlSb	InAs	1,37	−0,11		

Doch nicht nur im InAs, auch in der Verbindung $Ga_{0,47}In_{0,53}As$, die sich gitterangepaßt auf InP abscheiden läßt, haben die Elektronen eine höhere Beweglichkeit und erreichen höhere Spitzengeschwindigkeiten als im GaAs. Die Verwendung von InP als Substratmaterial eröffnet zudem Möglichkeiten für die Integration mit optoelektronischen Bauelementen. Glasfaserkabel haben ihre günstigsten Eigenschaften bei Wellenlängen des eingestrahlten Lichts von 1,3 μm (minimale Dispersion) bzw. 1,55 μm (geringste Absorption). Halbleiter-LASER, die Licht bei diesen Wellenlängen emittieren, werden aus GaInAsP (ebenfalls gitterangepaßt auf InP, vgl. Abb. 1.2) hergestellt. Die Fertigung von schnellen Transistoren auf InP-Basis bietet somit die Möglichkeit, LASER oder Detektoren und die notwendige Elektronik auf einem Chip unterzubringen.

Für die Herstellung von HEMTs auf InP-Substraten und mit GaInAs als Kanalmaterial kommen für die Barrieren zwei Verbindungen, genauer gesagt InP und $Al_{0,48}In_{0,52}As$, in Frage. Das AlInAs bietet dabei den Vorteil des höheren Leitungsband-Offsets zum $Ga_{0,47}In_{0,53}As$. Die bis heute schnellsten n-Kanal-MODFETs wurden daher auch mit eben dieser Materialkombination gefertigt [10]. Die Schwierigkeiten, die die Verwendung von Aluminium schon beim AlGaAs mit sich brachte, werden dadurch jedoch nicht gelöst. So wurden auch in Heterostrukturen mit AlInAs-Schichten tiefe Störstellen beobachtet [11, 12, 13, 14]. Außerdem beeinträchtigt Oxidation weiterhin die Langzeitstabilität der Transistoren.

Diese mit dem Aluminium verbundenen Problemen können durch die Verwendung von InP als Barrierenmaterial umgangen werden. Der Preis für den Vorteil, ohne Aluminium auszukommen, ist allerdings ein wesentlich geringerer Offset im Leitungsband. An dieser Stelle sollte jedoch noch ein weiterer Punkt berücksichtigt werden. Denkt man an die Fertigung logischer Schaltungen, so ist für einen geringen Leistungsverbrauch eine komplementäre Auslegung mit sowohl n- als auch p-leitenden Transistoren erforderlich. Derartige Schaltkreise sind in der Si-Technologie als CMOS-Schaltungen (Complementary Metal Oxide Semiconductor) Stand der Technik. Die Beweglichkeiten von Löchern betragen jedoch auch in III-V-Halbleitern nur einige Hundert cm^2/Vs und sind somit um über eine Größenordnung kleiner als die der Elektronen. Der Nachteil, der sich daraus für die Leitfähigkeit eines 2D-Löcher-Kanals ergibt, läßt sich nur dann wenigstens ansatzweise ausgleichen, wenn dafür höhere Ladungsträgerdichten eingesetzt werden können. Gerade in diesem Punkt liegt ein weiterer Vorteil des InP/GaInAs-Systems, denn die Valenzbanddiskontinuität ist hier größer als bei den meisten anderen Kombinationen.

Alles in allem betrachtet erscheint daher das Materialsystem GaInAs/InP wegen der Vermeidung von Aluminium mit all seinen bekannten Problemen, der Integrationsfähigkeit mit der Optoelektronik, sowie wegen des besonders hohen Valenzband-Offsets und der damit verbundenen Aussicht auf die Herstellung schneller komplementärer Schaltungen als besonders interessant für die Fabrikation von MODFETs.

1.3 Vorgehensweise bei der Realisierung

Die Fähigkeit zur Abscheidung Phosphor-haltiger Materialien ist eine Stärke der metallorganischen Gasphasenepitaxie (MOVPE, MetalOrganic Vapor Phase Epitaxy). Mit einer entsprechenden Anlage sollen daher im Rahmen dieser Arbeit GaInAs/InP-Heterostrukturen hergestellt und deren Eignung für die Fertigung von MODFETs untersucht werden. Dabei müssen die abzuscheidenden Schichten eine Reihe von Anforderungen erfüllen.

Von der Materialseite her gesehen müssen zunächst einmal möglichst reine Halbleiter mit hoher kristalliner Qualität hergestellt werden können. Darüber hinaus erfordert die Realisierung von Modulationsdotierungen eine exakt kontrollierbare Dotierung der Schichten und zwar sowohl in Bezug auf die Konzentration wie auch auf die Verteilung des Dotierstoffes. In Heterostrukturen sind zudem scharfe Grenzflächen zwischen den InP- und GaInAs-Schichten notwendig, da sich nur dann zweidimensionale Elektronengase mit sehr hohen Beweglichkeiten ausbilden.

Für die Transistoren ist andererseits erforderlich, daß sich auf diesen Schichten neben ohmschen Kontakten (Source und Drain) mit geringen Widerständen auch Schottky-Kontakte (Gates) mit hinreichend hohen Barrieren anfertigen lassen. Außerdem ist eine hohe Leitfähigkeit im 2D-Kanal zu gewährleisten, um hohe Grenzfrequenzen und große Steilheiten erreichen zu können. Zielvorgabe für die Materialherstellung ist daher die Abscheidung einer Schichtstruktur mit größtmöglicher Ladungsträgerdichte bei gleichzeitig höchster Beweglichkeit.

Aus diesem Anforderungsprofil ergibt sich das Programm für diese Arbeit, die sich auf die Herstellung von Material für n-Kanal-Transistoren, also HEMTs, beschränken wird, wie folgt: Zu Beginn werden einfache InP- und GaInAs-Schichten hergestellt und charakterisiert, um die Qualität des abgeschiedenen Materials zu optimieren. Im Anschluß daran wird mit ersten modulationsdotierten Einfach-Heterostrukturen (GaInAs auf InP) das zweidimensionale Elektronengas etwas näher untersucht. Die Höhe der Schottky-Barriere zwischen einem Metall und dem GaInAs ist mit etwa 0,2eV allerdings zu niedrig, um in einem Transistor eine effektive Steuerwirkung des Gates erreichen zu können. Die Barriere muß daher in geeigneter Weise erhöht werden, wofür verschiedene Formen von Zwischenschichten getestet werden. Mit einem ersten HEMT soll dann die Einsetzbarkeit der Materialien am Bauelement selbst demonstriert werden. Die anschließende Optimierung des Schichtaufbaus erfolgt im Hinblick auf die Maximierung der Leitfähigkeit des 2D-Kanals.

Einen besonderen Freiheitsgrad hierfür erhält man, wenn auf die Gitteranpassung des GaInAs-Kanals verzichtet wird. Eine Erhöhung des In-Gehaltes hat eine Verringerung der Bandlücke und damit eine Vergrößerung der Banddiskontinuität zur Folge, so daß mehr Ladungsträger im Kanal gesammelt werden können. Gleichzeitig erhöht sich ihre Beweglichkeit aufgrund der Verringerung ihrer effektiven Masse.[2] Die Aufgabe der Gitteranpassung zieht allerdings eine Beschränkung in der Dicke der abscheidbaren Filme nach sich. Die durch eine Gitterfehlpassung zwischen Schicht und Substrat entstehende Spannung im Kristall kann zwar zunächst durch eine elastische Verzerrung des Gitters aufgefangen werden, wird jedoch eine gewisse kritische Schichtdicke, deren Größe vom In-Gehalt abhängt, überschritten, so tritt eine Degradation des Kristalls durch die Bildung von Versetzungen ein. Wachstum und Eigenschaften verspannter GaInAs-Schichten, sowie ihre Auswirkungen auf ein 2DEG sind daher etwas einge-

[2]Dieser Punkt ist besonders für p-Kanal-Transistoren interessant. In unverspanntem Material sind die Zustände der leichten und schweren Löcher am Γ-Punkt entartet. Diese Entartung wird durch eine Spannung im Kristall aufgehoben [15]. Mit steigender Spannung verschieben sich die Energieniveaus immer mehr gegeneinander. Die Richtung der Verschiebung hängt dabei von der Art der Spannung (Zug- oder Druckspannung) ab. Bei In-reichem GaInAs zeigen die Zustände höchster Energie im Valenzband parallel zur Grenzfläche, also in Richtung des Stromflusses, leichtlochartigen Charakter, so daß deutlich höhere Löcherbeweglichkeiten in MODFET-Strukturen beobachtet werden [16, 17].

hender zu analysieren. Unter dem Einsatz solcher verspannten Schichten in HEMT-Strukturen bleibt abschließend noch die Verteilung des Dotierstoffes zu optimieren.

Zusammenfassend sieht der Weg zur Herstellung von GaInAs/InP-Heterostrukturen für HEMT-Anwendungen also folgendermaßen aus:

- Optimierung des Depositionsprozesses und der Materialqualität
- Untersuchung des Ladungsträgertransportes im 2DEG
- Erhöhung der Schottky-Barriere auf n-GaInAs und Herstellung einer ersten Transistorteststruktur
- Analyse der strukturellen, optischen und elektrischen Eigenschaften verspannter $Ga_{1-x}In_xAs$/InP-Heterostrukturen
- Optimierung der Leitfähigkeit des 2DEG für HEMT-Anwendungen

Mit der so gewonnenen Struktur sollte dann der materialmäßige Grundstein für die Fertigung von besonders schnellen n-Kanal-MODFETs bzw. HEMTs, die gänzlich ohne Al-haltige Verbindungen auskommen, gelegt sein.

Kapitel 2

MOVPE von III-V-Halbleitern

2.1 Grundlagen des Kristallwachstums

Grundsätzlich handelt es sich bei der MOVPE um ein Verfahren zur Abscheidung dünner, einkristalliner Schichten aus einer Gasphase heraus. Ausgangsstoffe sind dabei chemische Verbindungen mit hinreichend hohen Dampfdrücken, deren gasförmige Phasen mittels eines Trägergases (meistens Wasserstoff) zu einem beheizten Reaktor transportiert werden. Bei der Deposition von III-V-Halbleiterschichten werden als Quellen für die Gruppe-III-Elemente metallorganische Verbindungen benutzt, woraus sich auch der Name des Verfahrens ableitet. Die organischen Reste bilden üblicherweise Methyl- oder Ethyl-Gruppen, daneben werden aber auch Propyl- oder Buthyl-Verbindungen eingesetzt. Für die Gruppe-V-Verbindungen sind deren Hydride am gebräuchlichsten, obwohl sie hochgradig toxisch sind und der Umgang mit ihnen daher mit hohen Sicherheitsanforderungen verbunden ist (so beträgt zum Beispiel die zulässige maximale Arbeitsplatzkonzentration von Arsin (AsH_3) 50 ppb). Aus diesen Verbindungen müssen während des Prozesses zunächst einmal die Atome der Gruppe-III- und Gruppe-V-Elemente durch Abspalten der Reste freigesetzt werden, bevor sie auf der Oberfläche eines Substratkristalls in das Kristallgitter eingebaut werden können. Für die Abscheidung einer GaAs-Schicht aus den Verbindungen Trimethylgallium (TMGa) und Arsin sieht die Nettoreaktion dieses Prozesses folgendermaßen aus:

$$(CH_3)_3\,Ga \;+\; AsH_3 \;\rightarrow\; GaAs_{(s)} \;+\; 3\,CH_4 \tag{2.1}$$

Eine detaillierte Beschreibung gestaltet sich jedoch schwierig, da der Gesamtprozeß vom Einlaß der Verbindungen in den Reaktor bis zum endgültigen Einbau einzelner Atome in den Kristall über eine Vielzahl von Zwischenschritten abläuft, die einer expe-

rimentellen Analyse unter realistischen Epitaxiebedingungen nur begrenzt zugänglich sind. Obwohl die MOVPE bereits in den späten 60er Jahren entwickelt wurde, basierend damals auf den Arbeiten von H. M. Manasevit ([18], [19]), existiert bis heute keine geschlossene, alles umfassende Theorie über die Vorgänge beim Kristallwachstum. Vorstellungen und Modelle gibt es nur zu einzelnen Aspekten des Verfahrens. Soweit sie für ein Grundverständnis der Abläufe und die Auslegung der Prozeßführung wesentlich sind, sollen die wichtigsten Punkte in diesem Kapitel vorgestellt werden. Eine ausführliche Darstellung der Grundlagen zur Beschreibung des MOVPE-Prozesses und eines auf der Basis der bisher verfügbaren Daten entwickelten Wachstumsmodells findet sich in dem Buch: *Organometallic Vapor-Phase Epitaxy: Theory and Practice* von G. B. Stringfellow [20].

Die Situation in einem horizontalen Kaltwandreaktor, wie er hier für die Experimente benutzt wird, stellt sich folgendermaßen dar (s. Abb. 2.1): Innerhalb des Reaktors befindet sich ein Suszeptor, der durch Infrarot-Strahler beheizt wird und auf dem das Substrat liegt. Durch den Reaktor strömt das Trägergas (zum Beispiel Wasserstoff), dem zu einigen Prozent die reaktiven Ausgangsstoffe beigemischt sind. Das Ganze bildet ein zweiphasiges System, bei dem die Zusammensetzungen der verschiedenen Phasen im Gleichgewicht und für konstante Temperatur und konstanten Druck thermodynamisch beschrieben werden können. Bei der MOVPE handelt es sich jedoch, wie bei jedem Schichtwachstumsprozeß, eindeutig um einen *Nichtgleichgewichtsprozeß*, das heißt Gasphase und Festkörper stehen nicht miteinander im Gleichgewicht. Bei Temperaturen zwischen 500 und 750 °C wird die Gasphase gezielt übersättigt und das System so dazu getrieben, Feststoff zu bilden. Eine thermodynamische Betrachtung kann aber nur Aussagen über die treibende Kraft der Reaktion oder die Anzahl und Zusammensetzung der Gleichgewichtsphasen machen. Über welche Reaktionen und mit welcher Geschwindigkeit das System dem Gleichgewicht zustrebt, läßt sich daraus nicht ableiten. Dies entscheidet die Kinetik der einzelnen beteiligten Zwischenschritte, die damit auch die Geschwindigkeit, mit der Feststoff gebildet werden kann, also die Wachstumsrate des Kristalls, bestimmt.

Die Vorgänge, die bei der Deposition eine Rolle spielen, sind schematisch in Abb. 2.1 dargestellt. Durch einen Druckgradienten getrieben, werden die reaktiven Stoffe mit dem Trägergas in die heiße Depositionszone transportiert. Dort diffundieren sie, oder nach möglichen Gasphasenreaktionen ihre Zerlegungsprodukte, zur Oberfläche des Substrates, wo sie adsorbiert werden. Die adsorbierten Moleküle diffundieren auf der Oberfläche, und es kommt zu Oberflächenreaktionen der Moleküle untereinander, an deren Ende eine vollständige Zerlegung der Verbindungen steht, nach der die freigewordenen Gruppe-III- und Gruppe-V-Atome in den Kristall eingebaut werden können. Flüchtige Reaktionsprodukte wie zum Beispiel das Methan desorbieren wieder und

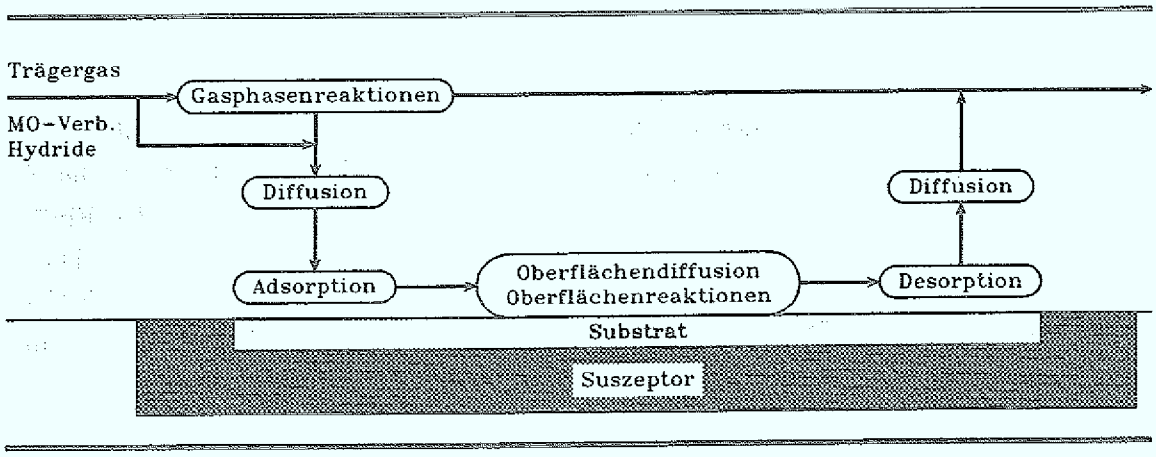


Abb. 2.1: Schematische Darstellung der einzelnen Prozeßschritte bei der MOVPE

werden mit dem Gasstrom abtransportiert. Alle diese einzelnen Teilschritte laufen mit einer ihnen eigenen Geschwindigkeit ab, wobei dem langsamsten von allen eine besondere Bedeutung zukommt, denn er bestimmt die Wachstumsrate.

Eine mathematische Behandlung des Gesamtprozesses erfordert die hydrodynamische Beschreibung der Strömung unter Berücksichtigung der chemischen Reaktionen und der Zustandsgleichung des Gases. Als wesentliche Parameter müssen dabei neben der Temperatur, dem Totaldruck und der Strömungsgeschwindigkeit auch die Geometrie des Reaktors und die Eigenschaften der Gase wie zum Beispiel Viskosität, Diffusionsverhalten und Stabilität der Bindungen berücksichtigt werden. Die notwendigen Informationen über die Zerlegung der Stoffe unter realen Prozeßbedingungen sind allerdings nur teilweise bekannt. Ein alles umfassendes Modell zur Beschreibung des Kristallwachstums bei der MOVPE existiert daher noch nicht.

Die Probleme der Zerlegung und des Massentransportes können jedoch getrennt voneinander behandelt werden, wie aus der experimentell beobachteten Abhängigkeit der Wachstumsrate von der Depositionstemperatur hervorgeht. Der Zusammenhang ist in Abb. 2.2 für die Abscheidung von GaAs aus TMGa und AsH_3 graphisch dargestellt und wird so prinzipiell bei allen Drücken, Reaktorgeometrien und Trägergasen gefunden. Deutlich sind zwei verschiedene Bereiche zu erkennen. Für niedrige Temperaturen (< 770 K) steigt die Wachstumsrate exponentiell mit der Temperatur an. Dies entspricht der Temperaturabhängigkeit einer Zerlegungsreaktion, für die eine Aktivierungsenergie notwendig ist. In diesem Bereich begrenzt also die Kinetik der chemischen Reaktionen die Wachstumsrate, weswegen man auch von kinetisch kontrolliertem Wachstum spricht. Wachstumsstudien in diesem Temperaturbereich können Aufschluß über die Art und Weise der Pyrolyse geben. Für die Zersetzung der Gase

spielen oberflächenkatalytische Prozesse die entscheidende Rolle, da die vollständige Zerlegung aller Moleküle erst nach ihrer Adsorption an der Oberfläche stattfindet. Dabei ist für die Entfernung der Kohlenwasserstoffe aus den metallorganischen Verbindungen atomarer Wasserstoff aus der Zerlegung des Arsins ganz entscheidend notwendig [21]. Wird dieser Wasserstoff im Überschuß angeboten, das heißt, findet die Deposition mit einem hohen V/III-Partialdruckverhältnis statt, so kann der Einbau von Kohlenstoff aus den organischen Resten auf 10^{14} cm^{-3} reduziert werden. Dieser Zusammenhang wird durch Experimente bestätigt, in denen Trimethylarsen (TMAs, keine As–H-Bindung!) anstelle von Arsin verwendet wurde. Da bei dessen Zerlegung kein atomarer Wasserstoff entsteht, konnte so in GaAs ein extrem hoher Kohlenstoffeinbau von über 10^{19} cm^{-3} erreicht werden [22].

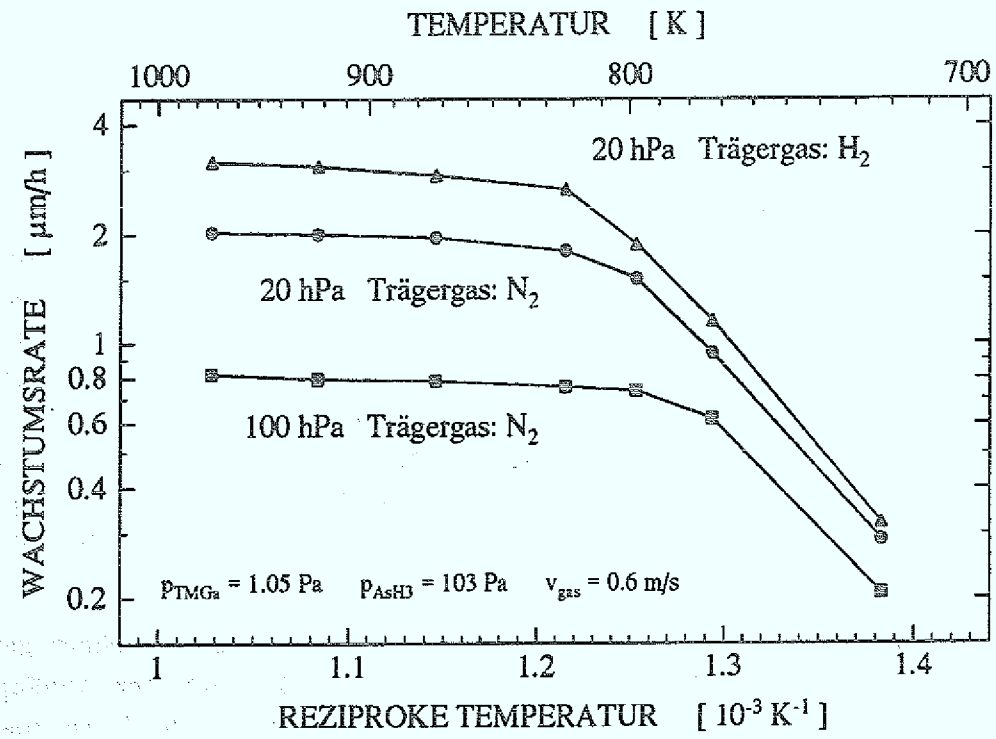


Abb. 2.2: Einfluß der Depositionstemperatur auf die Wachstumsrate von GaAs für verschiedene Trägergase und Reaktordrücke (nach Ref. [23])

Bei Temperaturen oberhalb etwa 820 K zeigt die Wachstumsrate praktisch keine Temperaturabhängigkeit mehr. In diesem Bereich wird auch das qualitativ hochwertigste Material abgeschieden, weshalb man bevorzugt in diesem Temperaturbereich arbeitet. Außerdem ist der Prozeß hier relativ unempfindlich gegenüber Inhomogenitäten in der Temperaturverteilung des Suszeptors. In diesem, dem sogenannten dif-

fusionskontrollierten Bereich, wird die Wachstumsrate durch den Massentransport in der Gasphase bestimmt. Der Transport folgt dabei den Gradienten im System. Parallel zum Suszeptor ist dies vor allem der Druckgradient, der für den Gasfluß verantwortlich ist und über die Länge des Reaktors als konstant angenommen werden kann. Senkrecht dazu entsteht ein Fluß nur durch Diffusion der Reaktanden entlang des Temperaturgradienten (geheizter Suszeptor, kalte Reaktordecke) sowie der Konzentrationsgradienten, die durch die Verarmung der Gasphase direkt über dem Substrat aufgrund des Einbaus der Elemente ins Kristallgitter und bei Zerlegungsreaktionen in der Gasphase als Folge des Temperaturgradienten entstehen. Ohne Berücksichtigung der chemischen Reaktionen kann das Strömungs- und das Temperaturprofil in einem Reaktor mit definierter Geometrie, abhängig vom Reaktordruck, der mittleren Strömungsgeschwindigkeit und der Suszeptortemperatur berechnet werden [24]. Dafür müssen die Kontinuitätsgleichung (Massenerhaltung), die Navier-Stokes-Gleichung (Impulserhaltung) und die Energiebilanzgleichung unter geeigneten Randbedingungen in drei Dimensionen gelöst werden. Diese Gleichungen stellen ein nichtlineares Randwertproblem mit fünf untereinander gekoppelten Differentialgleichungen zweiter Ordnung dar, die nicht analytisch, sondern nur numerisch gelöst werden können. Wesentliche Folgerungen lassen sich jedoch schon aus einem einfachen Modell dem sogenannten Grenzschichtmodell ableiten.

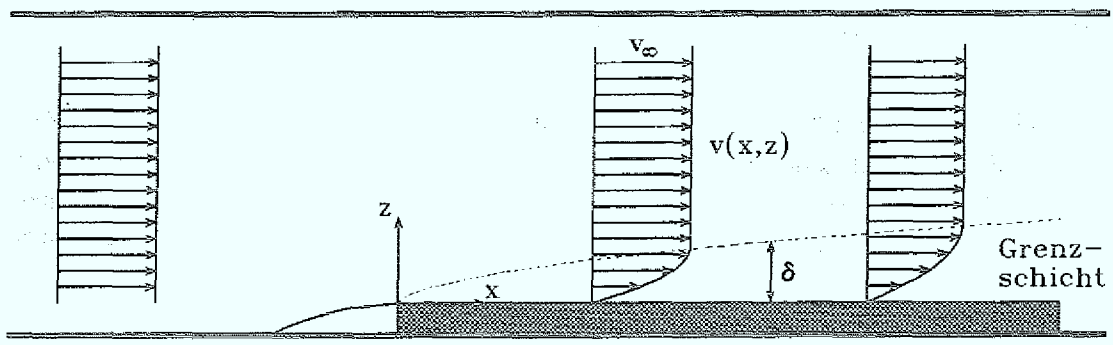


Abb. 2.3: Entwicklung der Geschwindigkeitsgrenzschicht in einer laminaren Strömung über einer ebenen Platte (nach Ref. [20])

In Abb. 2.3 ist die Geschwindigkeitsverteilung eines laminar strömenden Gases über einer ebenen Platte dargestellt. An der Oberfläche des symbolisch gezeichneten Suszeptors erfordert die Haftbedingung eine verschwindende Geschwindigkeit ($v = 0$ für $z = 0$). Je weiter man sich von der Oberfläche entfernt, desto mehr nähert sich die Gasgeschwindigkeit $v(x, z)$ dem Wert des ungestörten Gasflußes v_∞. Die Dicke der Grenzschicht an einer Stelle x kann man nun definieren als den Abstand des Punktes von der Oberfläche des Suszeptors, an dem die Gasgeschwindigkeit 99% von v_∞ beträgt.

Diese Dicke hängt wurzelförmig von der reziproken Geschwindigkeit ab ($\delta \sim \frac{1}{\sqrt{v_\infty}}$). Eine entsprechende Grenzschicht kann auch für die Konzentration der Ausgangsstoffe eingeführt werden. Die Höhe dieser Konzentrationsgrenzschicht stellt dann ein Maß für die Wegstrecke der Moleküle dar, die von der ungestörten Zone bis zur Oberfläche des Substrates diffundieren. Beim diffusionskontrollierten Wachstum bestimmt die dafür benötigte Zeit die Wachstumsrate des Kristalls. Dabei ist jedoch nur die Menge der pro Zeiteinheit auf die Oberfläche des Substrates gelangenden Gruppe-III-Spezies wichtig, da die Gruppe-V-Verbindung in hohem Überschuß angeboten wird (V/III-Verhältnis > 100) und die Wachstumsrate nicht beeinflußt. Ist das Wachstum, um beim Beispiel des GaAs zu bleiben, also durch die Diffusion von Ga-Verbindungen durch die Grenzschicht bestimmt, so läßt sich die Wachstumsrate r_g darstellen als [20]:

$$r_g = const. \cdot p_{\mathrm{TMGa}} \cdot \sqrt{\frac{v_g}{p_{tot}}} \tag{2.2}$$

Sie ist demnach direkt proportional zum Eingangspartialdruck an TMGa, sowie wurzelförmig von der mittleren Strömungsgeschwindigkeit und dem Kehrwert des Reaktordruckes abhängig, der über das Diffusionsverhalten hier Eingang findet.

2.2 Epitaxie von verspanntem $Ga_{1-x}In_xAs$

Der direkte Zusammenhang zwischen der Gasphasenzusammensetzung und der Wachstumsrate des Kristalls kann bei der Abscheidung von $Ga_{1-x}In_xAs$-Schichten zur Berechnung der für eine bestimmte Kristallzusammensetzung einzustellenden Partialdrücke ausgenutzt werden. Unter der Vorausetzung, daß es zwischen den In- und Ga-Verbindungen nicht zu Wechselwirkungen kommt, die die Wachstumsrate verändern, kann man für $r_{\mathrm{Ga_{1-x}In_xAs}}$ die Summe der Einzelraten ansetzen.

$$r_{\mathrm{Ga_{1-x}In_xAs}} = r_{\mathrm{GaAs}} + r_{\mathrm{InAs}} \tag{2.3}$$

Da sich die Ga- und In-Atome die Plätze des Gruppe-III-Untergitters teilen, entspricht der Anteil der In-Atome x_{In}, unter Vernachlässigung der etwas unterschiedlichen Gitterkonstanten von GaAs und InAs, dem InAs-Anteil an der Wachstumsrate des GaInAs. Somit gilt:

$$\begin{aligned} x_{\mathrm{In}} \cdot r_{\mathrm{Ga_{1-x}In_xAs}} &= r_{\mathrm{InAs}} \sim c_{\mathrm{TMIn}} \cdot p_{\mathrm{TMIn}} \\ (1 - x_{\mathrm{In}}) \cdot r_{\mathrm{Ga_{1-x}In_xAs}} &= r_{\mathrm{GaAs}} \sim c_{\mathrm{TMGa}} \cdot p_{\mathrm{TMGa}} \end{aligned} \tag{2.4}$$

Durch Division ergibt sich hieraus:

$$\frac{x_{\mathrm{In}}}{1-x_{\mathrm{In}}} = c \cdot \frac{p_{\mathrm{TMIn}}}{p_{\mathrm{TMGa}}} \tag{2.5}$$

Mit der Konstanten c werden Unterschiede zwischen dem Wachstum über Gallium bzw. Indium berücksichtigt, wie zum Beispiel die unterschiedliche Diffusion von TMIn und TMGa durch die Gasphase. Sie läßt sich aus der Messung der Zusammensetzung einer Schicht bestimmen, so daß damit dann die Mischung in der Gasphase für eine GaInAs-Schicht mit beliebiger anderer Komposition berechnet werden kann.

Bei der Abscheidung solcher Schichten ist allerdings zu berücksichtigen, daß nur bei einem InAs-Anteil von 53,3 % die Gitterkonstante des GaInAs mit der des InP-Substrates übereinstimmt. Die angestrebte Erhöhung des In-Gehaltes führt zu einer Vergrößerung der Gitterkonstanten. Eine $Ga_{1-x}In_xAs$-Schicht mit $x_{In} > 0,53$ steht daher unter einer kompressiven Spannung. Dadurch ist in dieser Schicht gewissermaßen mechanische Energie gespeichert. Diese Energie kann durch die Ausbildung von Versetzungen, die in der Ebene der Grenzfläche liegen (s. Abb. 2.4b), abgebaut werden. Da aber für die Bildung einer Versetzung Energie aufgewendet werden muß, bleibt eine nicht gitterangepaßte Schicht zunächst vollkommen elastisch verspannt, so daß ihre Gitterkonstante in paralleler Richtung zur Oberfläche mit der des Substrates übereinstimmt (s. Abb. 2.4a). Erst bei einer bestimmten Dicke, der sogenannten kritischen Schichtdicke, ist dann soviel Spannungsenergie in der Schicht gespeichert, wie zur Bildung einer Versetzung notwendig ist. Überschreitet die Dicke diesen kritischen Wert, so wird ein Teil der Spannung durch diese plastische Verformung abgebaut, während der Rest weiter elastisch aufgefangen wird (zum Thema Versetzungen bei der Epitaxie verspannter Schichten siehe Ref. [25]).

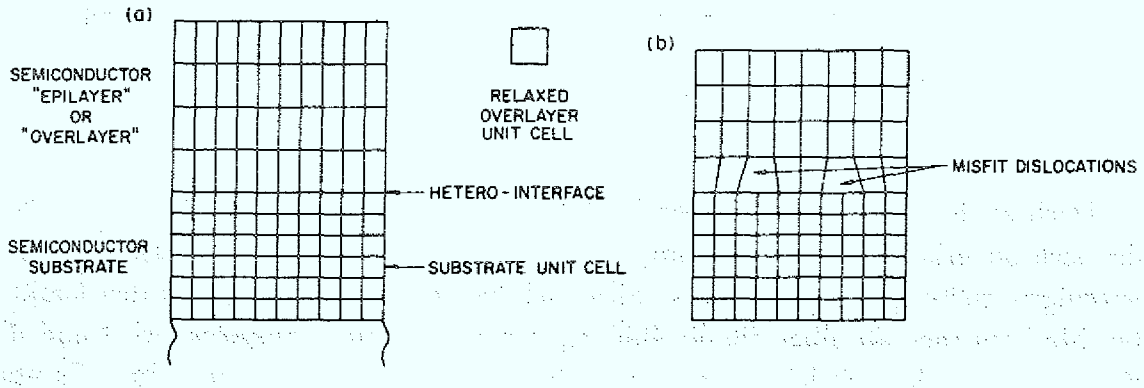


Abb. 2.4: Schematische Darstellung der Elementarzellen in einer Heterostruktur mit nicht gitterangepaßter Schicht für den Fall vollkommen elastischer Verspannung (a) bzw. als partiell relaxierte Schicht (b) (aus Ref. [25]).

Für die Berechnung der kritischen Schichtdicke verspannter Systeme sind verschiedene Modelle entwickelt worden. Diese basieren im wesentlichen auf den Arbeiten von Matthews und Blakeslee [26], die eine Bilanz der Kräfte aufstellten, beziehungsweise auf denen von People und Bean [27], die den kritischen Wert für die Dicke aus einer Energiebilanz berechneten. Diese theoretischen Modelle ergeben durchaus deutlich voneinander abweichende Ergebnisse, wie aus Abb. 2.5 zu ersehen ist. Nach Temkin et al. [28] ist für $Ga_{1-x}In_xAs$ auf InP die Beschreibung nach Matthews und Blakeslee zutreffend.

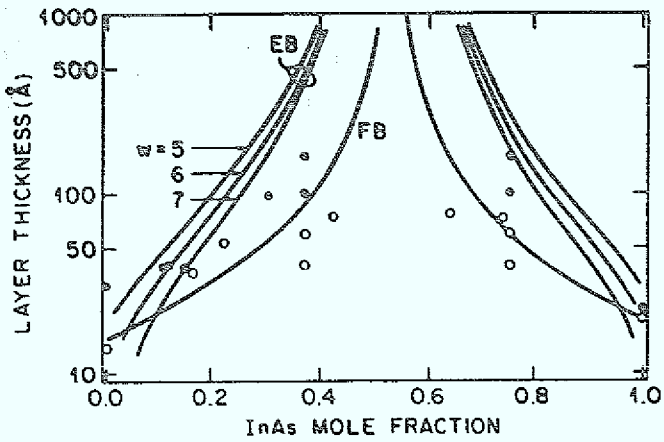


Abb. 2.5: Kritische Schichtdicke von $Ga_{1-x}In_xAs$ auf InP in Abhängigkeit des InAs-Anteils. Die Linien entsprechen Berechnungen nach den Modellen von Matthews und Blakeslee (FB, Force Balance) sowie People und Bean (EB, Energy Balance). w ist dabei ein Fit-Parameter, der mit der Breite einer einzelnen Versetzung in atomaren Abständen entlang (110) korreliert ist. Die experimentellen Ergebnisse stammen aus einer Untersuchung der Strom-Spannungs-Charakteristik von p-i-n-Dioden mit verspannten Übergittern im intrinsischen Bereich. Volle Punkte entsprechen Proben, in denen Relaxation festgestellt wurde, während störungsfreie durch Kreise dargestellt sind.

Doch auch experimentelle Daten bezüglich der kritischen Schichtdicke unterscheiden sich oft erheblich. Dies ist zum Teil in den verschiedenen Empfindlichkeiten der jeweiligen Meßverfahren begründet. Sicherlich hängen sie aber auch von den konkreten Mechanismen ab, über die die Bildung von Versetzungen ausgelöst wird und die ihrerseites von den speziellen experimentellen Gegebenheiten bestimmt sind. Es werden daher im Rahmen dieser Arbeit keine detaillierten Berechnungen durchgeführt, sondern nur die Möglichkeiten zur Erhöhung des In-Gehaltes in konkreten Strukturen durch entsprechende Experimente ausgelotet.

2.3 Aufbau der MOVPE-Anlage

Die zur Herstellung der Schichten benutzte Epitaxieanlage ist speziell für die Abscheidung bei reduziertem Reaktordruck konzipiert. Die Deposition bei Niederdruck hat gegenüber Normaldruck den Vorteil, daß bei gleichen Flüssen eine höhere Strömungsgeschwindigkeit der Gase erzielt wird. Das ermöglicht einen schnellen Austausch der Gasphase, der für die Abscheidung von Heterostrukturen mit scharfen Übergängen zwischen den einzelnen Materialien wichtig ist. Zusätzlich läßt sich eine bessere Homogenität in den deponierten Schichten erreichen. Die Hauptbestandteile der Niederdruck-MOVPE-Anlage sind das Gasmischsystem, der Reaktor, sowie das Pump- und Gasentsorgungssystem. Daneben bildet die Steuerelektronik zur Kontrolle der Prozeßführung eine eigene logische Einheit. Das gesamte hier verwendete System ist eine Anlage des Typs AIX 200 als Doppelreaktorsystem der Fa. AIXTRON.

Das Gasmischsystem

Mit dem Gasmischsystem wird der Fluß aller Gase kontrolliert, das heißt, wann welche Verbindung in welcher Menge dem Reaktor zugeführt wird. Da es sich hier um einen Flußreaktor handelt, muß durch alle Leitungen ständig Gas fließen. Je nach Bedarf kann dabei zwischen N_2, H_2 oder den Quellenmaterialien gewählt werden. Im Fall der Gruppe-III-Elemente sind das die metallorganischen (MO) Verbindungen Trimethylgallium (TMGa) und Trimethylindium (TMIn), in denen die organischen Reste ausschließlich Methylgruppen sind, so daß Austauschreaktionen durch verschiedene Alkylgruppen nicht auftreten können. Die Gruppe-V-Atome werden in Form von Hydriden zugeführt (AsH_3: Arsin; PH_3: Phosphin). Die zur Dotierung verwendeten Elemente Zink (*p*-Dotierung) sowie Schwefel und Silizium (*n*-Dotierung) liegen ebenfalls als MO-Verbindung bzw. Hydride vor (als Dimethylzink (DMZn), H_2S und SiH_4).

Alle MO-Verbindungen und Hydride werden in zwei getrennte Hauptleitungen eingespeist und erst im Kopf des Reaktors miteinander gemischt, um Vorreaktionen zwischen den Edukten auszuschließen. Parallel zu diesen beiden Hauptleitungen (Run-Leitungen), die direkt in den Reaktor münden, liegt eine weitere, die Vent-Leitung, über die die Gase am Reaktor vorbeigeleitet werden können (→ *Vent-Run-System*). Der Fluß eines Gases kann so zunächst am Reaktor vorbei stabilisiert werden, bevor das Gas in diesen eingeleitet wird. Wie der Reaktor wird auch diese Leitung abgepumpt, um überall für gleiche Druckverhältnisse zu sorgen und Druckstösse bei Schaltvorgängen zu vermeiden.

Besonders erwähnenswert ist bei dieser Anlage die konsequent doppelte Auslegung aller Gruppe-III- und Gruppe-V-Quellen, was zusätzliche Möglichkeiten für die Herstellung von Heterostrukturen mit unterschiedlichen Zusammensetzungen eröffnet.

Hydrid-Quellen

Die Hydride sind bei Raumtemperatur und unter Normaldruck allesamt gasförmig und daher direkt verwendbar. Arsin und Phosphin werden als Reinstgase (6N) benutzt, während die Dotierstoffe in Wasserstoff verdünnt sind (H_2S 10 %, SiH_4 1 % in H_2). Bei Arsin und Phosphin kann der notwendige Fluß mit einem einzigen Massenflußregler (Q_V, s. Abb. 2.6a) eingestellt werden. Die Zugabe von Wasserstoff dient lediglich der Erhöhung der Gasgeschwindigkeit vor allem bei kleinen Mengen der reaktiven Gase. Der Partialdruck einer Gruppe-V-Komponente im Reaktor entspricht daher direkt seinem Anteil am gesamten Gasfluß (Q_{tot}):

$$p_V = \frac{Q_V}{Q_{tot}} \cdot p_{tot} \tag{2.6}$$

Gegenüber den Gruppe-V-Verbindungen muß der Partialdruck eines Dotierstoffes über einen viel weiteren Bereich variiert werden können. Technisch notwendig sind Dotierungen zwischen 10^{16} und $10^{19}\,cm^{-3}$. Bei linearem Einbauverhalten des Dotierstoffes heißt das, daß auch der Partialdruck über mindestens 3 Größenordnungen variierbar sein muß. Diese Dynamik läßt sich mit einem einzelnen Regler nicht erreichen, weswe-

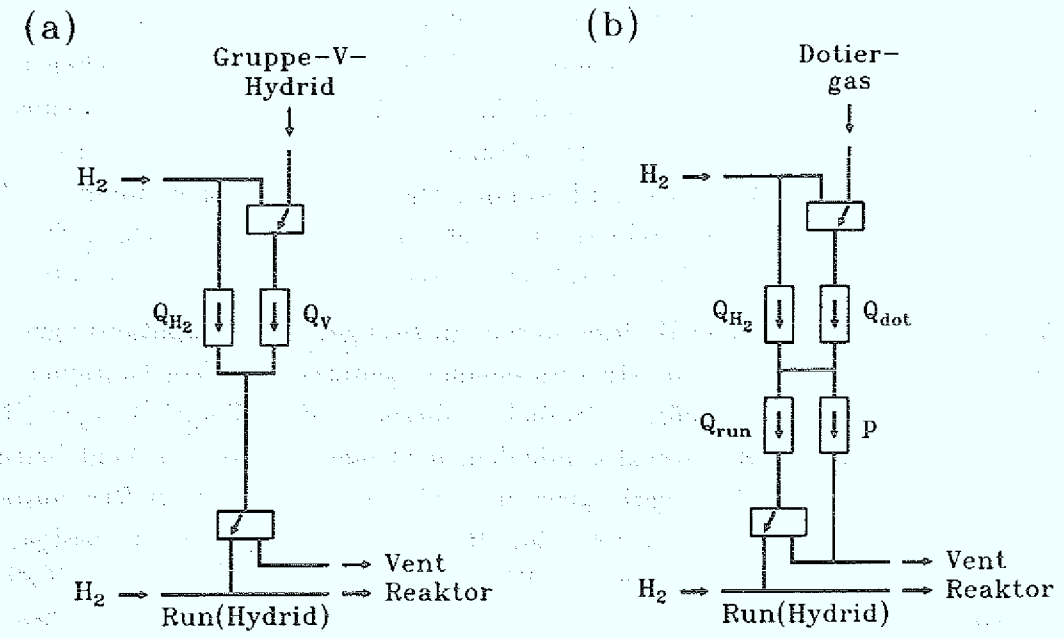


Abb. 2.6: Aufbau der Regelkreise für die Hydride AsH_3 und PH_3 (a) bzw. H_2S und SiH_4 (b). Mit Q sind die Massenflußregler bezeichnet, während p den Druckregler symbolisiert. Die Ventile sind nicht speziell bezeichnet.

gen die Dotierkreise als Verdünnungssystem mit vier Reglern ausgelegt sind (s. Abb. 2.6b). Eine gewisse Menge des Dotierstoffes (Q_{dot}) wird in definierter Weise mit Wasserstoff verdünnt (Q_{H_2}). Von diesem Gemisch wird nur ein Teil (Q_{run}) wirklich in den Reaktor geleitet. Der Rest wird über den Druckregler p in die Vent-Leitung abgegeben. Für ein Dotiergas mit der Ausgangskonzentration c berechnet sich somit der Partialdruck im Reaktor aus:

$$p_{dot} = c \cdot \frac{Q_{dot}}{Q_{dot} + Q_{H_2}} \cdot \frac{Q_{run}}{Q_{tot}} \cdot p_{tot} \tag{2.7}$$

MO-Quellen

Die metallorganischen Verbindungen sind unter normalen Bedingungen nicht gasförmig. TMGa und DMZn sind Flüssigkeiten, während TMIn sogar ein Feststoff ist. Sie werden daher in temperierten Bubblern aufbewahrt, durch die hindurch Wasserstoff geleitet wird (s. Abb. 2.7). Dieser sättigt sich mit dem Dampf des Metallorganikums und transportiert es so mit sich. Die entnommene Menge richtet sich dabei neben dem Fluß durch die Flasche (Q_1) nach der Konzentration der MO-Verbindung in der Gasphase der Flasche, die wiederum dem Verhältnis des Dampfdruckes p_D der Verbindung

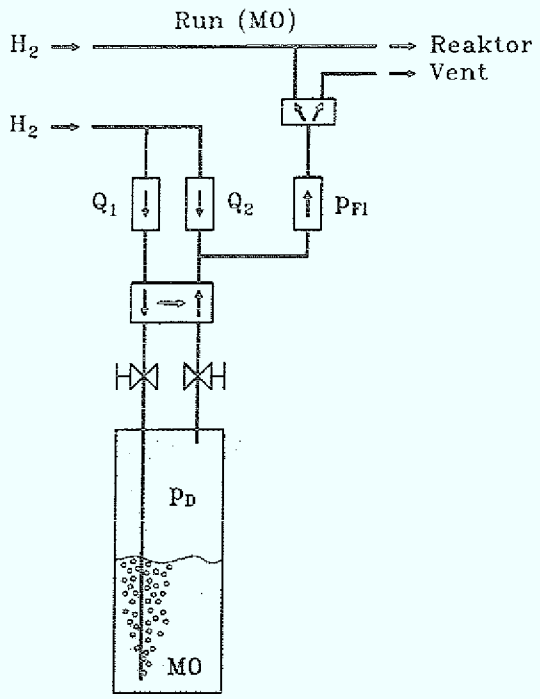


Abb. 2.7: Aufbau der Regelkreise für die metallorganischen Gruppe-III-Quellen

zum Flaschendruck p_{Fl} entspricht. Der Partialdruck einer Gruppe-III-Verbindung im Reaktor ergibt sich also zu:

$$p_{III} = \frac{Q_1}{Q_{tot}} \cdot \frac{p_D}{p_{Fl}} \cdot p_{tot} \tag{2.8}$$

Der Dampfdruck des Metallorganikums wird über die Temperatur des Bubblers, das heißt über die Temperatur des zur Temperierung notwendigen Wasserbades kontrolliert (Genauigkeit: ±0,1°C). Der Druck in der Flasche wird dagegen einfach mit dem Regler p_{Fl} eingestellt. Beide Größen wurden sozusagen als Arbeitspunkt für den Betrieb einer Quelle einmal festgelegt und später nicht weiter verändert. Die erforderlichen Mengen wurden dann ausschließlich über den Flußregler Q_1 kontrolliert.

Der Regelkreis für die metallorganische Dotierstoffquelle DMZn entspricht einer Kombination aus dem Aufbau einer MO-Quelle aus Abb. 2.7 mit dem Dotierkreis aus Abb. 2.6b). Der einzige Unterschied zum Hydriddotiersystem ist, daß der Regler Q_{dot} jetzt nur die Menge an reinem Wasserstoff bestimmt, die durch den Bubbler geleitet wird. Zur Berechnung des Partialdruckes muß daher in Gl. (2.8) die Ausgangskonzentration c des Dotiergases durch die aktuelle Konzentration an gasförmigem Metallorganikum in der Flasche p_D/p_{Fl} ersetzt werden.

Für den Betrieb der drei MO-Flaschen werden folgende Parameter verwendet:

MO-Quelle	T	p_D *	p_{Fl}
	°C	mbar	mbar
TMGa	-10,0	52,9	1000
TMIn	17,0	1,8	200
DMZn	-10,0	99,7	1000

(* Quelle: Morton International)

Der Reaktor

Das Herzstück der Anlage ist der horizontale Kaltwandreaktor. Es handelt sich hierbei, wie aus Abb. 2.8 ersichtlich, um einen zylinderförmigen Reaktor aus Quarzglas. Dieser nimmt bei Niederdruck die Druckkräfte auf. Innerhalb des Reaktors befindet sich ein zweites Quarzrohr, das sogenannte Liner-Rohr, mit einem rechteckigen Querschnitt von $3,2 \times 8,4$ cm^2, durch das die Prozeßgase fließen. Sie strömen dabei über den Suszeptor, der aus SiC-beschichtetem Graphit besteht und auf der Oberseite eine Vertiefung für das Substrat hat. Der Suszeptor wird von unten durch fünf IR-Streifenheizer mit einer Leistung von jeweils 1000 W beheizt. Seine Temperatur wird mit einem Thermoelement gemessen und kann über eine Regelung der Lampenleistung auf 0,1 °C genau eingestellt werden.

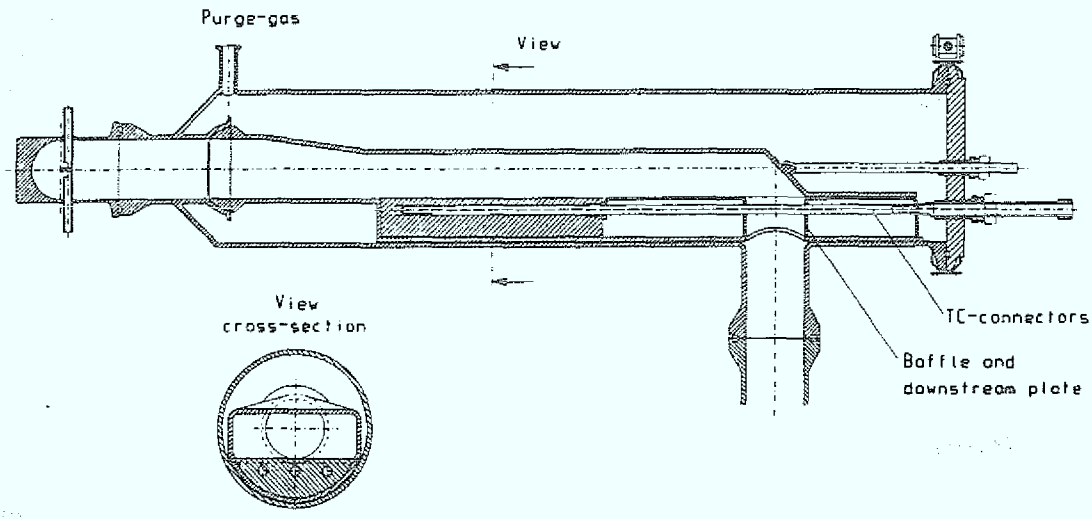


Abb. 2.8: Querschnitt des Reaktors in der LP-MOVPE-Anlage

Während des Versuches führt die Zerlegung der Prozeßgase nicht nur zur Deposition einer Schicht auf dem Substrat, sondern auch zu Ablagerungen auf allen angrenzenden Teilen, was deren regelmäßige Reinigung erforderlich macht. Beim Liner-Rohr ist das im Schnitt alle 5-6 Versuche notwendig, da sich sonst Partikel von seinen Innenwänden lösen und auf die Probe fallen können. Da es jedoch einfach in einem Kugelschliff im Reaktor steckt, kann es leicht zur Reinigung in Königswasser ausgebaut werden, ohne daß jedesmal der Reaktor demontiert werden müßte. Ein Suszeptor kann bis zu 100 Versuche lang benutzt werden. Eine Reinigung ist ebenfalls in Königswasser möglich, erfordert aber ein sehr sorgfältiges Spülen (!) und Auskochen in deionisiertem Wasser (ein bis zwei Wochen) und anschließendes Trocknen. Eine regelmäßige Reinigung des Reaktors selbst ist nicht erforderlich , da die Diffusion von Reaktionsprodukten in den Raum zwischen Liner-Rohr und Reaktor durch Spülen mit Wasserstoff verhindert wird. Gleichzeitig wird so auch das Liner-Rohr gekühlt.

Das Pump- und Gasentsorgungssystem

Der größte Teil der Reaktionsprodukte gelangt bis in das Auspuffsystem und lagert sich teilweise dort ab, was schon bald zur Bildung größerer Partikel führt. Um die Pumpe weniger zu belasten, ist daher zwischen Reaktor und Pumpe eine Partikelfalle installiert. In diesem Glaskörper wird der Gasstrom einige Male umgelenkt, so daß die Partikel dort zurückbleiben. Die Pumpe selbst ist eine Drehschieberpumpe, die mit Weißöl betrieben wird und zusätzliche Filterelemente zur Ölreinhaltung und -abscheidung (einschließlich Rückführung) hat. Die Saugleistung der Pumpe wird über ein vorgeschaltetes steuerbares Schmetterlingsventil kontrolliert und in Verbindung mit einem Baratron so der Druck im Reaktor geregelt.

Bevor das Abgas an die Umwelt abgegeben werden kann, müssen jedoch auch die flüchtigen Reste der reaktiven Gase aufgefangen werden, da alle Gase, besonders aber die Hydride, die auch noch in größeren Mengen anfallen (ca. 10l/Versuch), stark toxisch sind. Zu diesem Zweck wird der Gasstrom nach der Pumpe durch eine zweistufige Reinigungsanlage geleitet. Die erste Stufe enthält schwefelsaure Natrium-Bromat-Lösung, in der die Hydride und metallorganischen Verbindungen zurückbleiben. In der zweiten werden mittels Natronlauge saure Bestandteile neutralisiert und das durch die Redoxreaktion in der ersten Stufe freigesetzte Brom gebunden. Das ständig überwachte Abgas enthält hiernach keine meßbaren Mengen an Hydriden mehr (< 10 ppb).

Die Steuerung

Die Steuerung der Anlage während eines Versuches erfolgt über einen Computer mit einem 68000er Prozessor und dem multi-tasking-fähigen Betriebssystem OS/9. Ein zweiter baugleicher Rechner dient der Unterstützung von Rampen, das heißt der Möglichkeit zur gleitenden Veränderung eines Flusses oder eines Druckes. Im Computer-Betrieb hat der Rechner Zugriff auf alle Massenfluß- und Druckregler, sowie auf die Temperatursteuerung und fast alle Ventile. (Nur die Pneumatikventile direkt hinter den Hydridgasflaschen können aus Sicherheitsgründen nur manuell geöffnet werden. Im Alarmfall werden sie aber von der Sicherheitselektronik automatisch geschlossen.) Der gesamte Epitaxieprozeß kann daher über den Rechner ablaufen. Dem Steuerprogramm zugrunde liegt das Konzept, einen Prozeß in einzelne Schritte aufzuteilen, für die jeweils ihre Dauer und der gesamte Zustand der Anlage anzugeben sind. Im nächsten Schritt können dann alle Werte wieder geändert werden, was größtmögliche Flexibilität gewährleistet. Die Dauer eines Schrittes kann auf 0,1 s genau eingestellt werden, so daß auch dünnste Schichten realisiert werden können.

2.4 Prinzipieller Ablauf der Versuche

Die allgemeine Durchführung der Versuche besteht aus einer standardisierten Reihe einzelner Schritte, die von der Reinigung des Substratmaterials und dem Einbau in die Anlage mit nachfolgendem Druckanstiegstest, über die Aufheizphase und die eigentliche Epitaxie bis zum abschließenden Spülzyklus und dem Ausbau der Probe reichen.

Grundlage für die Abscheidung der Kristalle ist bei den meisten Versuchen semiisolierendes InP der Fa. Crismatec InPact (früher Metaux Speciaux). Von den 2" großen Wafern, die nominell exakt in (001)-Richtung orientiert sind (±0,2°), wird üblicherweise pro Versuch nur ein Viertel verwendet. Vor einer Beschichtung muß allerdings mindestens das Oberflächenoxid entfernt werden. Dazu wurden verschiedene Reinigungsverfahren ausprobiert. Materialabtragende Methoden, wie Ätzen in Schwefelsäure-haltigen Lösungen ($H_2SO_4 : H_2O_2 : H_2O$ in diversen Mischungsverhältnissen und bei unterschiedlichen Temperaturen) oder mittels Brom-Methanol, auch unter Einsatz organischer Lösungsmittel, führten jedoch nicht zu einer befriedigenden Oberflächenqualität der darauf abgeschiedenen Schichten. Erst mit der Verwendung von Flußsäure wurden hervorragend glatte und defektarme Oberflächen erreicht. Verdünnte Flußsäure (HF) entfernt nur das Oberflächenoxid, greift InP sonst aber nicht weiter an. Die für alle weiteren Versuche benutzte Standardreinigung für InP-Wafer sieht daher folgendermaßen aus:

1. 3 min Ätzen in 10 %-iger HF-Lösung
2. Gründliches Spülen in deionisiertem Wasser
3. Trockenblasen des Wafers mit reinem Stickstoff

Die Analyse einer so gereinigten InP-Oberfläche mit XPS (X-ray Photoemission Spectroscopy) zeigt nur noch vernachlässigbare Spuren von Sauerstoff und Kohlenstoff.

Der frisch gereinigte Wafer wird sofort in den Reaktor eingeschleust und die Anlage danach abgepumpt. Nach Abschalten aller Gaszuflüsse wird die Anlage eine halbe Stunde lang zur Prüfung der Dichtigkeit bei Niederdruck stehen gelassen. Beträgt der Druckanstieg weniger als 1 mbar (Auflösungsgrenze), so wird die Anlage als dicht angesehen, mit Wasserstoff geflutet und der computergesteuerte Prozeßablauf gestartet.

Zunächst wird der Druck im Reaktor auf den Epitaxiewert von 20 mbar heruntergefahren. Während der anschließenden Aufheizphase muß die Kristalloberfläche durch Zugabe von PH_3 stabilisiert werden, um die aus dem InP-Wafer abdampfenden Phosphoratome ersetzen zu können. Die Zeit des Aufheizens und der Temperaturstabilisierung (zusammen ca. 10 min) wird auch für einen 5minütigen Vorlauf der

TMIn-Quelle genutzt. Mit dem Umschalten des stabilisierten TMIn-Flusses von der Vent- in die Run-Leitung setzt das Wachstum einer InP-Schicht ein, die als Puffer zur Verbesserung der Oberfläche dient (typische Dicke etwa 0,4 μm). Während dieses Depositionsvorganges finden nebenher auch die Vorläufe für die Quellen statt, die für die sich anschließende, eigentlich interessierende Schichtstruktur zusätzlich noch benötigt werden.

Für die Deposition einer Schicht mit anderer Zusammensetzung muß die Gasphase im Reaktor ausgetauscht werden. Dazu werden die stabilisierten Flüsse der verschiedenen notwendigen Ausgangsstoffe nach bestimmten Schemata nur zwischen der Run- und der Vent-Leitung hin und her geschaltet. Die Art und Weise, wie dieser Wechsel vonstatten geht, bestimmt maßgeblich die Zusammensetzung des Kristalles an dieser Stelle und damit die Schärfe der Grenzfläche zwischen den Schichten. Bei der hier benutzten Strömungsgeschwindigkeit von 2,8 m/s beträgt die Verweildauer der Gase im Reaktor ungefähr 0,2 s. Ein Austausch der Gasphase ist daher theoretisch in Sekundenbruchteilen möglich. In der Praxis werden jedoch etwas längere Wachstumspausen zwischen verschiedenen Schichten gemacht. Auf der Kristalloberfläche diffundierenden Gruppe-III-Spezies soll so Zeit gegeben werden, einen festen Gitterplatz zu finden und in den Kristall eingebaut zu werden, um möglichst glatte Grenzflächen zu erhalten.

Für die wichtigsten Schaltsequenzen, nämlich die für die Wechsel der Gasphase von der Abscheidung von InP zum GaInAs bzw. umgekehrt, konnte auf Ergebnisse vorausgegangener Arbeiten zurückgegriffen werden [29, 30, 31, 32]. Die benutzten Sequenzen sind schematisch in Abb. 2.9 dargestellt. Das Wachstum einer Schicht wird durch Umschalten der Gruppe-III-Komponente(n) von der Run- in die Vent-Leitung gestoppt. Während der Wachstumspause werden die Gruppe-V-Verbindungen überlap-

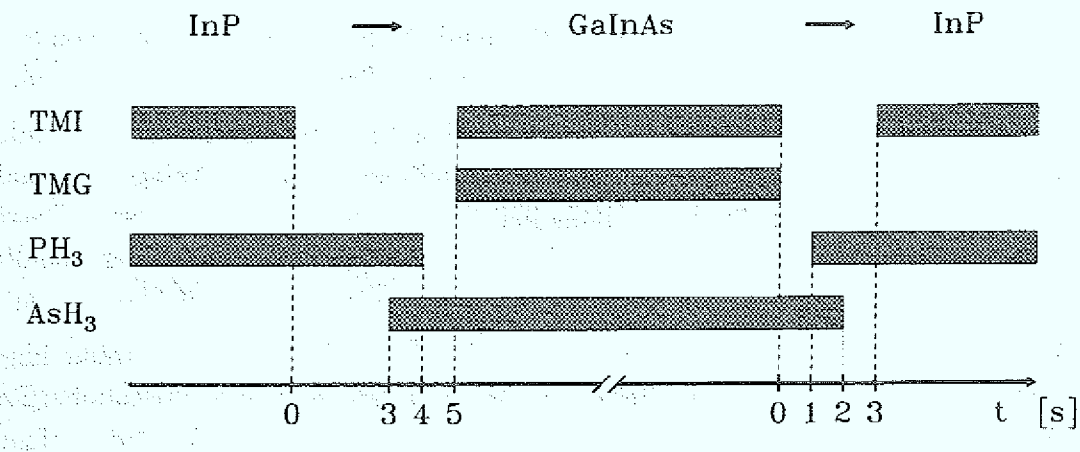


Abb. 2.9: Schaltsequenzen zum Austausch der Gasphase von der Deposition von InP zum GaInAs-Wachstum und umgekehrt.

pend gegeneinander ausgetauscht, so daß eine ständige Stabilisierung der Oberfläche gewährleistet ist. Nach einer Spülzeit von einer Sekunde wird das Wachstum der nächsten Schicht durch Zugabe der MO-Verbindungen begonnen.

Ein wesentlicher Punkt ist allerdings in diesem Diagramm der Klarheit halber nicht mit dargestellt. Denn bei *jedem* Schaltvorgang wird nicht einfach der Fluß einer reaktiven Verbindung von der einen in die andere Leitung umgeschaltet, sondern er wird vielmehr mit einem genauso großen Fluß reinen Wasserstoffs ausgetauscht. Dadurch bleibt der Gesamtfluß sowohl in der Run- wie auch in der Vent-Leitung ständig konstant, was Druckschwankungen während der Umschaltvorgänge vermindern hilft.

Die Dicke der einzelnen Schichten läßt sich innerhalb eines Versuches über die effektive Wachstumszeit kontrollieren. Nach diesem Verfahren können Heterostrukturen mit fast beliebigem Aufbau realisiert werden.

Zum Abschluß eines Versuches wird zunächst wieder das Wachstum des Kristalls durch das Abschalten der III-er Komponente beendet. Danach wird die Heizung ausgeschaltet und der Druck im Reaktor auf nahezu Normaldruck (960 mbar) erhöht. Solange die Probe noch heiß ist (über ca. 300 °C), muß weiterhin eine gewisse Menge der jeweiligen Gruppe-V-Komponente zugeführt werden, um die Oberfläche des Kristalls zu stabilisieren. Dazu ist allerdings nur noch ein geringer Fluß notwendig (gut $^1/_{10}$ des Flusses, der beim Wachstum notwendig ist). Ab ca. 150 °C wird der Reaktor für mindestens 10 min mit Stickstoff gespült, und unterhalb einer Temperatur von 80 °C kann die Probe dann ausgebaut werden.

Kapitel 3

Charakterisierungsmethoden

Die Entwicklung eines Depositionsprozesses mit dem Ziel, bauelementtaugliche Strukturen herzustellen, erfordert eine Charakterisierung der Proben unter verschiedensten Aspekten. So ist an Hand der Eigenschaften von einfachem Volumenmaterial, wie seiner Reinheit und Homogenität, zunächst die gesamte Prozeßführung zu optimieren. Mit zunehmender Komplexität der abzuscheidenden Schichten tritt dann jedoch der eigentliche Wachstumsprozeß in den Hintergrund, und es müssen vielmehr die charakteristischen Merkmale dieser speziellen Strukturen untersucht werden, um ihren Aufbau optimieren zu können.

Die entscheidenden Prozeßparameter bei der MOVPE sind die Temperatur, der Druck und die Strömungsgeschwindigkeit. Sie bestimmen die kristalline Qualität, die Reinheit und die Homogenität der abgeschiedenen Schichten, sowie zum Teil auch die Wachstumsrate. Diese richtet sich aber vor allem nach der angebotenen Menge an Metallorganika. Die Dicke der Filme wird daher vom Materialangebot und der Dauer des Wachstums bestimmt. Für die Prozeßführung muß Bulk-Material daher unter den Gesichtspunkten Schichtdicke und Zusammensetzung, einschließlich der lateralen und vertikalen Homogenität, sowie der Dichte der freien Ladungsträger und ihrer Beweglichkeit analysiert werden.

Bei komplexeren Strukturen wie modulationsdotierten Heterostrukturen und Übergittern ergeben sich durch die auftretenden Quantenphänomene und die zusätzlichen Grenzflächen ganz andere Fragestellungen. So sind hier die Transporteigenschaften in einem 2DEG zu untersuchen, die wiederum eng mit der Schärfe der Grenzflächen und der kristallinen Qualität korreliert sind. Letzterem wird vor allem bei der Einführung In-reicher GaInAs-Schichten eine besondere Bedeutung zukommen, denn die Abscheidung verspannter Schichten führt zu einer Deformation des Gitters. Die Fragen nach der Zusammensetzung solcher Schichten bzw. der Größe von Gitterkonstante und

Bandlücke und der Kristallqualität stellen sich hier ganz neu und sind wegen der Beschränkung in der Dicke der Schichten, die ohne Relaxation abgeschieden werden können, schwieriger zu beantworten.

Die Analysetechniken, mit denen die Untersuchung der aufgeworfenen Problemstellungen angegangen werden, lassen sich grob in drei Gruppen unterteilen.

1. Strukturanalyse

   Hierbei wird der Aufbau von Schichtpaketen und die Verteilung der Elemente in den einzelnen Schichten untersucht. Die Dicke einzelner Schichten kann durch selektives Ätzen und mechanisches Abtasten der Stufenhöhe gemessen werden. Ihre Zusammensetzung läßt sich im GaInAs/InP-System sehr empfindlich mit der Röntgenbeugung messen. Zur Bestimmung der Zusammensetzung in dünnen, besonders aber auch verspannten Schichten wurden Übergitter aus GaInAs und InP hergestellt und ihre Struktur ebenfalls mit der Röntgendiffraktometrie analysiert. Vergleichend werden für die Interpretation auch Aufnahmen aus der Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) und Ergebnisse von SNMS-Messungen (Sputtered Neutral Mass Spectrometry) herangezogen.

2. Transporteigenschaften

   Die elektrische Charakterisierung der Proben erfolgt überwiegend über Messungen des Hall-Effektes zur Ermittlung von Ladungsträgerdichte und Beweglichkeit. Standardverfahren zur Qualitätskontrolle ist dabei die van-der-Pauw-Methode, die an unstrukturierten Proben bei Raumtemperatur und 77K durchgeführt wird. Zur Untersuchung von zweidimensionalen Elektronengasen wird der Hall-Effekt darüber hinaus temperaturabhängig im Bereich von 4 bis 300 K gemessen. Daneben werden auch durch magnetfeldabhängige Transportmessungen der Quanten-Hall-Effekt bzw. die Shubnikov-de-Haas-Oszillationen (SdH-Oszillationen) zur Analyse eingesetzt.

3. Optische Eigenschaften

   Zur optischen Charakterisierung hochreiner Schichten und zur Bestimmung der Bandlücke von In-reichem GaInAs wird die Photolumineszenz-Spektroskopie benutzt. Dabei handelt es sich bei den verspannten Schichten um Quantentopfen-Strukturen, deren Aufbau und chemische Zusammensetzung vorher mit den oben beschriebenen Methoden ermittelt wurde.

3.1 Schichtdickenmessung durch selektives Ätzen

Die direkteste Methode zur Bestimmung der Wachstumsrate und der lateralen Homogenität der Schichtdicke ist die Methode des selektiven Ätzens an einfachen Heterostrukturen. Dabei wird die oberste, die zu messende Schicht (typische Dicke etwa 1 μm) stellenweise abgeätzt, ohne daß von der darunter liegenden ebenfalls etwas abgenommen wird. Die Dicke der Schicht läßt sich dann durch mechanisches Abtasten der Oberfläche messen.

Die Proben bestehen also aus einer einzelnen GaInAs-Schicht auf InP oder aus einer InP-Schicht, die auf eine dünne GaInAs-Schicht (als Ätzstopp) abgeschieden wird. Auf die Proben wird ein Streifenmuster aus Photolack aufgebracht. Dies läßt sich am schnellsten einfach mit einem sehr dünnen Pinsel von Hand oder, falls kleinere Strukturen erforderlich sind, auf photolithographischem Wege machen. Danach werden die Proben geätzt.

Ätzen von GaInAs selektiv gegen InP

GaInAs läßt sich mit einer Mischung aus $H_3PO_4 : H_2O_2 : H_2O$ im Verhältnis 1 : 1 : 8 mit einer Rate von etwa 500 nm/min ätzen. Dagegen beträgt die Ätzrate dieser Lösung für InP nur ca. 2,5 nm/min. Neben ihrer hervorragenden Selektivität ist diese Ätze zudem auch über längere Zeiten stabil und unempfindlicher gegen Temperatureinflüsse als zum Beispiel Ätzen auf der Basis von Schwefelsäure.

Ätzen von InP selektiv gegen GaInAs

Für diesen Fall kann Salzsäure in verschiedenen Verdünnungen benutzt werden, womit sich die Ätzrate variieren läßt. Eine Mischung aus 4 Teilen HCl (37 %-ig) und einem Teil Wasser ätzt InP mit einer Rate von etwa 500 nm/min, während es GaInAs auch nach 5 min noch nicht meßbar angreift. Diese Ätze ist also ebenfalls außerordentlich selektiv. Das Profil des Ätzkraters in InP wird jedoch bei Ätztiefen über 500 nm sehr rauh, was zum Beispiel bei einer Mesa-Ätzung zur Separation von Transistoren zu beachten ist. Beim selektiven Ätzen stoppt der Ätzvorgang aber auf dem GaInAs, so daß bei genügend langen Ätzzeiten wieder glatte Kraterböden entstehen.

Nach dem Entfernen des Photolackes in Aceton kann die Tiefe des Ätzkraters, das heißt die Dicke der Schicht, durch eine mechanische Abtastung der Oberfläche (Dektak Surface Profiler) ortsaufgelöst gemessen werden. Die Genauigkeit dieser Tiefenmessung beträgt ca. 10 nm.

3.2 Röntgendiffraktometrie

Die Bestimmung der Zusammensetzung von einkristallinen Schichten kann über einen direkten Nachweis der einzelnen Elemente oder bei bekannten Korrelationen auch über strukturelle oder optische Eigenschaften der Kristalle erfolgen. Beispielsweise kristallisieren fast alle III-V-Halbleiter in der Zinkblendestruktur, unterscheiden sich dabei aber in der Größe der Gitterkonstanten. So beträgt zwischen GaAs ($a_{GaAs} = 5,65325$ Å) und InAs ($a_{InAs} = 6,05903$ Å) dieser Unterschied mehr als 7 %. Einen $Ga_{1-x}In_xAs$-Kristall kann man sich nun als eine Mischung aus diesen binären Konstituenten vorstellen, bei der die Ga- und In-Atome statistisch auf den Plätzen des Gruppe-III-Untergitters verteilt sind. Die Gitterkonstante $a_{Ga_{1-x}In_xAs}$, die sich dabei einstellt, ergibt sich aus denen der binären Verbindungen gewichtet mit ihrem Anteil am GaInAs.

$$a_{Ga_{1-x}In_xAs} = x \cdot a_{InAs} + (1-x) \cdot a_{GaAs} \tag{3.1}$$

Aus dieser als Vegardsches Gesetz bezeichneten Beziehung läßt sich die Zusammensetzung, das heißt der In-Anteil x, berechnen, wenn die Größe der Gitterkonstante bekannt ist. Dieser Materialparameter kann mittels Röntgenbeugung bestimmt werden. Relative Änderungen in der Gitterkonstanten können dabei schon in einer Größenordnung von 10 ppm festgestellt werden. Das bedeutet, daß sich Änderungen im InAs-Anteil von weniger als 0,001 (also 0,1 % absolut) messen lassen. Vor allem aufgrund dieser hohen Empfindlichkeit in Bezug auf die Zusammensetzung der Schichten, aber auch, weil es sich dabei um eine zerstörungsfreie Meßmethode handelt, die vergleichsweise schnell durchgeführt werden kann, wird die Röntgendiffraktometrie in dieser Arbeit als Standardverfahren zur Strukturanalyse von GaInAs/InP-Heterostrukturen eingesetzt und hier etwas eingehender beschrieben.

3.2.1 Bestimmung der Zusammensetzung einfacher GaInAs-Schichten

Bei der Beugung von Röntgenstrahlen an den Netzebenen eines Kristalls interferieren die reflektierten Strahlen genau dann konstruktiv, wenn die Beugungsgeometrie die bekannte Bragg-Bedingung

$$2\, d_{hkl}\, sin\theta_B = n\, \lambda \qquad n \in \mathcal{N} \tag{3.2}$$

erfüllt. Hierin entspricht d_{hkl} dem Abstand der beugenden Netzebenen mit den Millerschen Indizes h, k und l, λ der Wellenlänge der Röntgenstrahlung und θ_B ihrem

Einfallswinkel bezüglich der *Netzebenen*. Dieser Glanzwinkel θ_B läßt sich durch Messung der reflektierten Intensität monochromatischer Röntgenstrahlung als Funktion des Einfallswinkels bestimmen. Bei bekanntem λ kann damit über die Bragg-Gleichung der Netzebenenabstand und damit letztendlich auch die Gitterkonstante berechnet werden.

Der Zusammenhang zwischen Netzebenenabstand und Gitterkonstante hängt allerdings von der genauen Form der Elementarzelle ab. Betrachtet man eine einzelne GaInAs-Schicht, so entspricht die Gitterkonstante ihrer kubischen Elementarzelle nur bei einem InAs-Anteil von 53,3 % genau der von InP ($a_{InP} = 5,8696$ Å). Bei einem höheren In-Gehalt ist die Gitterkonstante des GaInAs größer, ansonsten kleiner als die des InP. Solch ein Unterschied führt in einer Heterostruktur zu Spannungen zwischen Schicht und Substrat, wodurch die Elementarzelle der relativ dünnen GaInAs-Schicht tetragonal verformt wird, wie es Abb. 3.1 veranschaulicht.

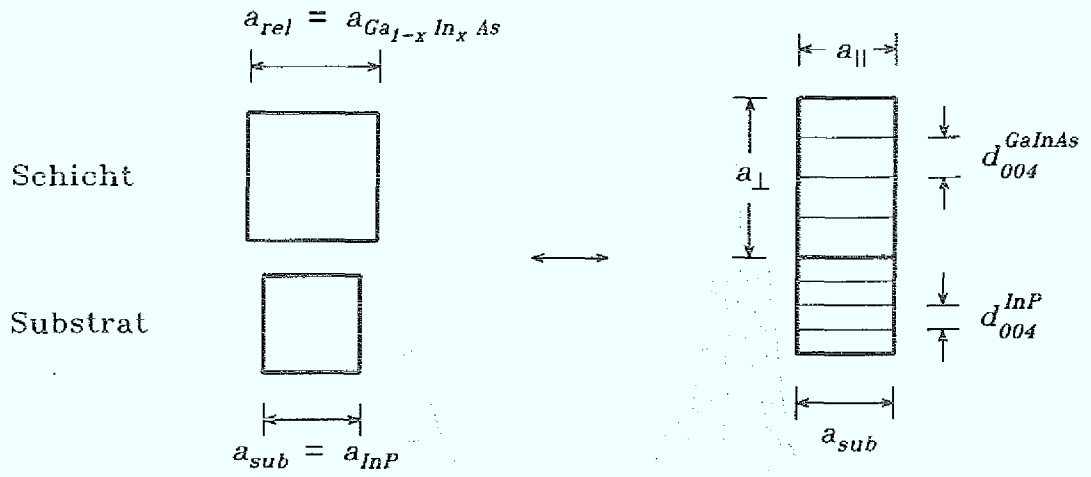


Abb. 3.1: Tetragonale Verformung der Elementarzelle von GaInAs, wenn es mit zu hohem In-Gehalt ($x_{In} > 0{,}533$), das heißt zu großer Gitterkonstante als dünne Schicht auf einem InP-Substrat abgeschieden wird.

Diese verzerrte Elementarzelle muß nun durch zwei Gitterkonstanten, eine parallel ($a_{\parallel}$), die andere senkrecht ($a_{\perp}$) zur Substratoberfläche, beschrieben werden. Ist die Spannung jedoch nicht allzu groß, das heißt, beträgt bei einer Schichtdicke von ca. 1 μm der relative Unterschied der Gitterkonstanten von GaInAs und InP weniger als etwa 1000 ppm, so kann die Spannung durch eine rein elastische Verformung des Gitters aufgefangen werden (wie auch in Abb. 3.1 angenommen), und es stellt sich folgende Situation ein: Das dicke InP-Substrat (ungefähr 400 μm dick) gibt die Gitterkonstante in der Ebene vor. Das GaInAs paßt sich dem an, so daß $a_{\parallel} = a_{sub}$ gilt. Durch die biaxiale Spannung wird die Elementarzelle entsprechend den elastischen Eigenschaften des Materials in senkrechter Richtung gestreckt ($x_{In} > 0{,}533$) oder gestaucht ($x_{In} < 0{,}533$).

Solange $a_{\|} = a_{sub}$ gilt, muß zur Beschreibung der verzerrten Elementarzelle nur $a_{\perp}$ bestimmt werden. Dazu genügt eine Messung an einem Reflex, bei dem die Netzebenen parallel zur Oberfläche liegen (→ symmetrischer Reflex; bei einem (001)-orientierten Kristall zum Beispiel der (004)-Reflex mit seiner besonders hohen Reflektivität). Eine absolute Messung ist dabei jedoch nicht erforderlich, denn die Informationstiefe liegt bei der Röntgenbeugung in der Größenordnung einiger Mikrometer. Sie ist damit größer als die typische Dicke der GaInAs-Schichten. Neben dem Signal, das von der Schicht herrührt, erhält man daher bei unterschiedlichen Netzebenenabständen noch eines vom InP-Substrat mit seiner wohldefinierten Gitterkonstanten, wie das Beispiel eines Diffraktogramms in Abb. 3.2 zeigt.[1]

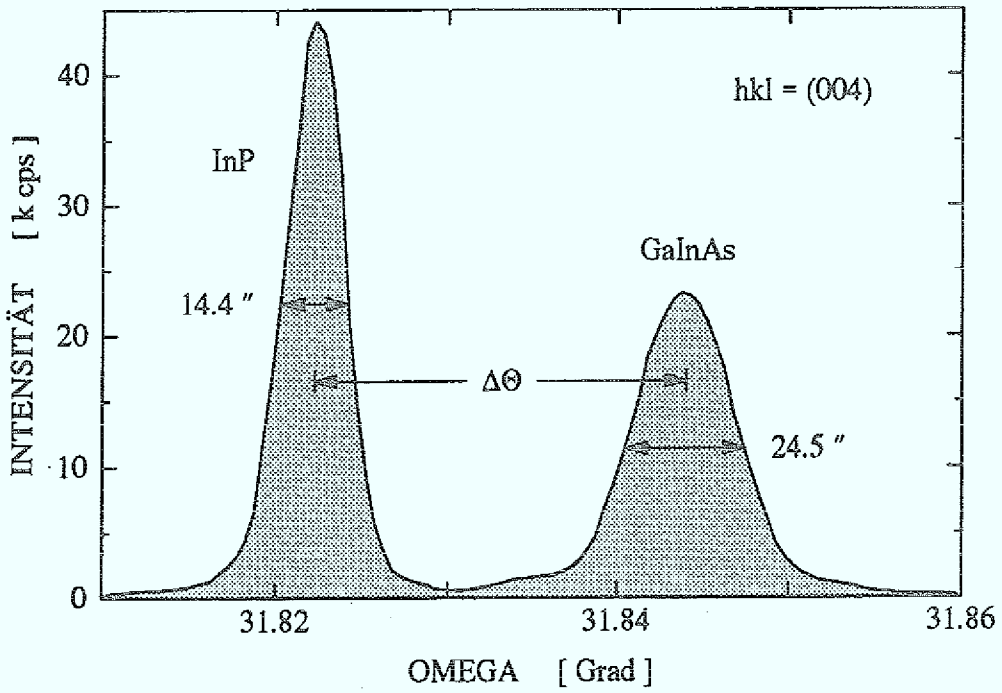


Abb. 3.2: Diffraktogramm einer einfachen GaInAs/InP-Heterostruktur

[1]Die Zuordnung der Peaks zu Schicht und Substrat ist im Materialsystem GaInAs/InP nicht immer ad hoc möglich. Anders als zum Beispiel beim AlGaAs/GaAs-System kann hier der Schicht-Peak im Vergleich zum Substrat-Peak sowohl bei kleineren wie auch bei größeren Winkeln liegen. Der Substrat-Peak zeichnet sich allerdings fast immer durch eine deutlich geringere Halbwertsbreite und meistens auch durch eine höhere Intensität aus. Letzteres ist aber von der Dicke der Schicht abhängig. Eine eindeutige Zuordnung läßt sich treffen, wenn zusätzlich zum (004)- auch der (006)-Reflex gemessen wird. Beträgt das Verhältnis der Intensität des Substrat-Peaks zum Schicht-Peak beim (004)-Reflex etwa 1 : 1, so liegt es beim (006)-Reflex aufgrund des unterschiedlichen Interferenzverhaltens bei ca. 1 : 0,01.

Das Substrat kann somit als interne Referenz benutzt werden, so daß nur die relative Abweichung der Gitterkonstanten der Schicht gegenüber der des Substrates gemessen zu werden braucht. Der Zusammenhang zwischen der Differenz der Glanzwinkel ($\Delta\theta = \omega_{GaInAs} - \omega_{InP}$, s. Abb. 3.2) und der Änderung der Gitterkonstanten in senkrechter Richtung ergibt sich aus der Differentiation der Bragg-Gleichung (Gl. (3.2)). Ersetzt man danach den Differentialquotienten durch den Differenzenquotienten, so erhält man:

$$\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\perp} = \frac{a_{\perp} - a_{sub}}{a_{sub}} = -\cot\,\theta_{sub} \cdot \Delta\theta \tag{3.3}$$

Hierin ist θ_{sub} der dem Netzebenenabstand des Substrates entsprechende Glanzwinkel. Die Abmessungen der verspannten Elementarzelle sind damit bestimmt.

Das Vegardsche Gesetz (Gl. (3.1)) ist jedoch nur auf kubische Elementarzellen ($a = a_{rel}$, s. Abb. 3.1) anwendbar. Aus den Gitterkonstanten $a_{\parallel}$ und $a_{\perp}$ der tetragonal verformten Elementarzelle kann aber über die lineare Elastizitätstheorie auf die Größe der kubischen Elementarzelle a_{rel} einer unverspannten Schicht gleicher Zusammensetzung zurückgerechnet werden (bzgl. Elastizitätstheorie siehe zum Beispiel Ref. [33]). Die Elementarzelle wird dabei wie ein isotroper Stab mit quadratischer Grundfläche behandelt, auf den in zwei Raumrichtungen (x-, y-Richtung) eine gleichgroße Spannung einwirkt. Die Längenänderung, die sich dadurch in der z-Richtung ergibt (hier entsprechend $a_{\perp} - a_{rel}$) ist über die Poissonsche Querkontraktionszahl ν ($\nu(Ga_{0,47}In_{0,53}As) = 0{,}333$) mit der Änderung der Parallelkomponente $a_{rel} - a_{\parallel}$ verknüpft. Für die relative Änderung der Gitterkonstante ergibt sich daraus folgender Zusammenhang:

$$\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{rel} = \frac{a_{rel} - a_{sub}}{a_{sub}} = \frac{1-\nu}{1+\nu} \cdot \left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\perp} \tag{3.4}$$

Die daraus berechnete Gitterkonstante der relaxierten GaInAs-Schicht kann nun in das Vegardsche Gesetz übernommen und damit der In-Gehalt ermittelt werden.

$$x_{In} = \frac{a_{rel} - a_{GaAs}}{a_{InAs} - a_{GaAs}} \tag{3.5}$$

Das hier beschriebene, einfachste Verfahren zur Bestimmung des In-Gehaltes mittels Röntgendiffraktometrie ist so nur bei einzelnen Schichten mit nicht zu großer Verspannung anwendbar. Für eine Standardcharakterisierung nahezu gitterangepaßter GaInAs-Schichten ist dies jedoch ausreichend. Bei stark verspannten Strukturen, bei denen $a_{\parallel} = a_{sub}$ nicht mehr vorausgesetzt werden kann, muß neben $a_{\perp}$ auch $a_{\parallel}$ explizit bestimmt werden. Dies ist durch zwei Messungen an asymmetrischen Reflexen (zum Beispiel an [115]- oder [224]-Ebenen) möglich, da sich in diesem Fall der gemessene

Netzebenenabstand in eine senkrechte und eine parallele Komponente zerlegen läßt. Die Auswertung ist ein wenig aufwendiger, folgt aber demselben Gedankengang wie oben skizziert und ist ausführlich von Goetz [34] beschrieben worden. Es werden daher hier nur die wesentlichen Merkmale aufgeführt.

Bei einem asymmetrischen Reflex liegen die Netzebenen nicht mehr parallel zur Oberfläche, sondern schließen mit dieser einen Winkel φ ein (s. Abb. 3.3). Für eine Reflexion an solchen Netzebenen muß daher der Röntgenstrahl unter einem Winkel ω auf die Probenoberfläche auftreffen, der um φ größer oder kleiner ist als der eigentliche Bragg-Winkel θ_B, die Beugung an einem asymmetrischen Reflex kann demnach also in zwei Geometrien, das heißt mit steil oder mit flach einfallendem Röntgenstrahl durchgeführt werden. Ist nun die Elementarzelle der Schicht tetragonal verzerrt, so verlaufen die Netzebenen in der Schicht und im Substrat nicht mehr parallel zueinander, wie der linke Teil der Abb. 3.3 verdeutlicht.

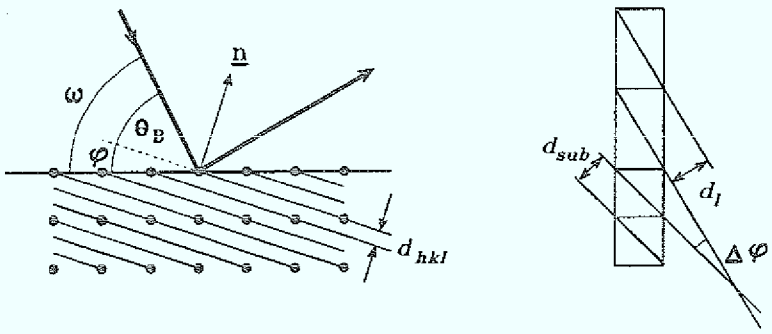


Abb. 3.3: Streugeometrie bei der Beugung an einem asymetrischen Reflex

Im Diffraktogramm setzt sich dadurch die Winkelseparation $\Delta\omega$ zwischen Schicht- und Substrat-Peak ($= \omega_{layer} - \omega_{sub}$) aus zwei Anteilen zusammen. Zum einen ergeben sich aus den unterschiedlichen Netzebenenabständen verschiedene Bragg-Winkel ($\rightarrow \Delta\theta = \theta_{layer} - \theta_{sub}$) und zum anderen haben die Netzebenen auch verschiedene Neigungen zur Oberfläche ($\rightarrow \Delta\varphi = \varphi_{layer} - \varphi_{sub}$). Je nach Streugeometrie ist $\Delta\omega$ gleich der Summe oder der Differenz von $\Delta\theta$ und $\Delta\varphi$. Unter Umkehrung des Strahlenganges können daher beide Anteile aus zwei Messungen an einer Netzebenenschar bestimmt werden. Bezeichnet man mit $\Delta\omega_+$ und $\Delta\omega_-$ die Winkelseparation der Peaks bei steil bzw. flach einfallendem Röntgenstrahl, so folgt für $\Delta\theta$ und $\Delta\varphi$:

$$\Delta\theta = \frac{1}{2}\ (\Delta\omega_+ + \Delta\omega_-) \tag{3.6}$$

$$\Delta\varphi = \frac{1}{2}\ (\Delta\omega_+ - \Delta\omega_-) \tag{3.7}$$

Aus diesen beiden Größen lassen sich die Gitterkonstanten in senkrechter und paralleler Richtung mit Hilfe folgender Gleichungen exakt bestimmen ([35, 36], Goetz verwendete eine linearisierte Fassung dieser Gleichungen):

$$\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\perp} = \frac{\sin\theta_{sub}}{\sin(\theta_{sub}+\Delta\theta)} \cdot \frac{\cos\varphi}{\cos(\varphi+\Delta\varphi)} - 1 \tag{3.8}$$

$$\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\parallel} = \frac{\sin\theta_{sub}}{\sin(\theta_{sub}+\Delta\theta)} \cdot \frac{\sin\varphi}{\sin(\varphi+\Delta\varphi)} - 1 \tag{3.9}$$

Damit kann dann die Änderung in der relaxierten Gitterkonstanten über

$$\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{rel} = \frac{1-\nu}{1+\nu}\left[\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\perp} - \left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\parallel}\right] + \left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\parallel} \tag{3.10}$$

berechnet werden, woraus sich die Zusammensetzung wieder durch das Vegardsche Gesetz ergibt.

3.2.2 Röntgenbeugung an Übergitterstrukturen

Ein größerer Teil dieser Arbeit wird sich mit der Charakterisierung von Quantentopfstrukturen beschäftigen. Zur Analyse der Struktur solcher Proben wird ebenfalls die Röntgendiffraktometrie eingesetzt werden. Um dabei aus den typisch nur 10 nm dicken GaInAs-Schichten hinreichend viel Signal zu erhalten, werden Vielfachstrukturen aus einander abwechselnden GaInAs- und InP-Schichten hergestellt. Durch die Deposition einer periodischen Schichtenfolge kann einem Kristallgitter eine zusätzliche Periodizität überlagert werden. Die Elementarzelle einer solchen übergeordneten Gitterstruktur in Wachstumsrichtung umfaßt dann eine Periode dieser Schichtenfolge. Im Diffraktogramm treten dadurch zusätzliche Reflexe auf, die als Bragg-Reflexe dieser Übergitter-Einheitszelle verstanden werden können. Die Beugung an einer solchen Heterostruktur wird von der Interferenz der an den verschiedenen Schichten gestreuten Röntgenstrahlen dominiert.

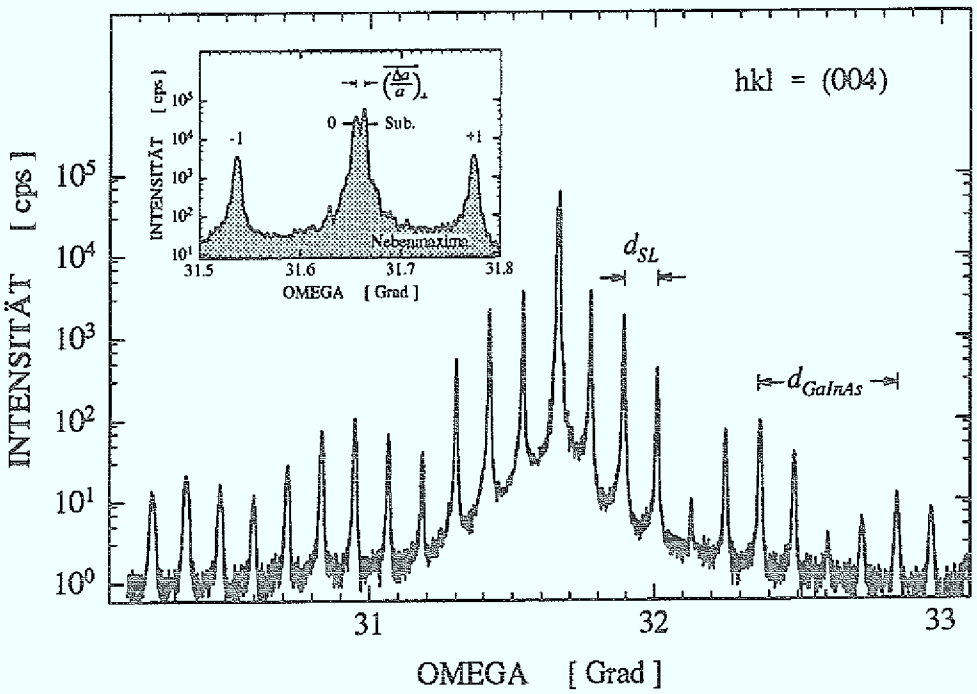


Abb. 3.4: Diffraktogramm eines $Ga_{0,47}In_{0,53}As$/InP-Übergitters gemessen am (004)-Reflex des InP

Ein Beispiel für ein solches Diffraktogramm zeigt die Messung am InP-(004)-Reflex eines GaInAs/InP-Übergitters in Abb. 3.4. Es handelt sich hierbei um eine Probe, bei der 20 Perioden aus 10 nm nahezu gitterangepaßtem GaInAs und 40 nm InP auf einem InP-Substrat deponiert wurden. Bei dieser Gesamtschichtdicke von 1 μm ist der stärkste Reflex dem Substrat zuzuordnen. Daneben gibt es eine Reihe zueinander äquidistanter Reflexe, die eine Modulation in ihrer Intensität zeigen. Der Abstand zweier benachbarter Satellitenreflexe hängt mit der Größe der Elementarzelle, also der Periodenlänge des Übergitters d_{SL} zusammen und kann in der Nähe des Substratreflexes gemäß der Bragg-Beziehung über

$$d_{SL} = \frac{\lambda \ \sin\theta_{sub}}{\Delta\omega \ \sin 2\theta_{sub}} \tag{3.11}$$

bestimmt werden. $\Delta\omega$ ist dabei der Winkelabstand zwischen den Satelliten. Die Einhüllende der Intensität der Satelliten-Peaks ist dagegen allein mit der Dicke der dünneren Schicht innerhalb der Periode korreliert. Aus dem Abstand der Maxima in der Einhüllenden kann daher nach obiger Formel die Dicke der GaInAs-Schicht abgeschätzt werden. Wie in der Ausschnittsvergrößerung in Abb. 3.4 zu sehen, treten zwischen den Satelliten noch Nebenmaxima auf. Ihre Anzahl ist durch die Anzahl

der Perioden im Übergitter (bei N Perioden $N-2$ Nebenmaxima) und ihr Abstand untereinander durch die Dicke des gesamten Übergitterpaketes bestimmt. Jede charakteristische Länge in einem Kristall ist also mit einer eigenen Serie von Peaks im Diffraktogramm verbunden. Die Korrelationen lassen sich folgendermaßen zusammenfassen:

Gitterkonstante	$\longleftrightarrow$	absolute Lage des Bragg-Reflexes
GaInAs-Schichtdicke	$\longleftrightarrow$	Einhüllende der Satelliten
Periodenlänge	$\longleftrightarrow$	Abstand zwischen den Satelliten
Dicke des Übergitters	$\longleftrightarrow$	Anzahl und Abstand der Nebenmaxima

Die chemische Zusammensetzung innerhalb einer Periode ergibt sich aus der Lage der Satelliten relativ zum Substratreflex. Dabei kommt einem Übergitterreflex eine besondere Bedeutung zu, denn seine Lage repräsentiert die *mittlere Fehlpassung* innerhalb einer Periode. Dieser Peak wird als Satellit 0ter Ordnung oder auch als Fundamentalreflex des Übergitters bezeichnet. Da in einem nicht relaxierten GaInAs/InP-Übergitter nur das GaInAs verspannt ist, ergibt sich seine Fehlpassung entsprechend dem Verhältnis der Schichtdicken aus der mittleren Fehlpassung des Übergitters:

$$\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\perp}(\mathrm{GaInAs}) = \frac{d_{SL}}{d_{GaInAs}} \cdot \overline{\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\perp}} \tag{3.12}$$

Die Sonderrolle des Fundamentalreflexes erklärt sich durch folgendes: Würde man alle Atome innerhalb des Übergitters gleichmäßig vermischen, so daß man nur noch eine einzige Schicht hätte, so würden alle Übergitterreflexe, bis eben auf den 0ter Ordnung, verschwinden. Die Lage dieses verbliebenen Reflexes hängt aber allein von der Zusammensetzung dieser Schicht ab.

Für die Bestimmung der Zusammensetzung des Übergitters ist also zunächst der Peak 0ter Ordnung herauszufinden. Dieser Satellit ist jedoch nicht unbedingt der stärkste Reflex des Übergitters und nur bei nahezu gitterangepaßten Schichten direkt neben dem Substrat gelegen. Nach einem Verfahren von R. Zaus [37] läßt sich der Peak 0ter Ordnung durch Messungen an verschiedenen Substratreflexen experimentell ermitteln. Der Grundgedanke des Verfahrens ist folgender: Die chemische Zusammensetzung bestimmt den Abstand des Satelliten 0ter Ordnung vom Substratreflex. Die Lage aller übrigen Satelliten ist durch die Periodizität im Übergitter relativ zur 0ten Ordnung festgelegt und nicht mehr durch die Zusammensetzung bestimmt. Berechnet man nun für alle Satelliten aus ihrem Abstand zum Substratreflex eine entsprechende "mittlere

Fehlpassung" (für den (004)-Reflex zum Beispiel nach Gl. (3.3)), so erhält man eine Reihe von Werten, die sich folgendermaßen ausdrücken läßt:

$$\overline{\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\perp}} = \overline{\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\perp}}^{0} + \frac{m}{l}\frac{a_{sub}}{d_{SL}} \tag{3.13}$$

m : Ordnung des Satelliten
$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$
l : z-Komponente des Reflexes (hkl)

Dabei bezeichnet $\overline{\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\perp}}^{0}$ die mittlere Fehlpassung, die sich aus der 0ten Ordnung ergibt. Diese Größe ist unabhängig davon, an welchen Netzebenen die Beugung stattfindet. Für eine Messung an einem anderen Substratreflex $(h'k'l')$ gilt daher dementsprechend:

$$\overline{\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\perp}} = \overline{\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\perp}}^{0} + \frac{m'}{l'}\frac{a_{sub}}{d_{SL}} \tag{3.14}$$

Sind l und l' teilerfremd, so sind nur $\overline{\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\perp}}^{0} + n\frac{a_{sub}}{d_{SL}}$ $(n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots)$ in beiden Reihen enthalten. Bis auf eine Mehrdeutigkeit der Größe $\frac{a_{sub}}{d_{SL}}$ ist der Satellit 0ter Ordnung damit bestimmt. In der Praxis ist diese Mehrdeutigkeit aber kein ernstes Problem, da beispielsweise für eine Periodenlänge von 50 nm $\frac{a_{sub}}{d_{SL}}$ ca. 12.000 ppm beträgt. Derartig große Fehler bei der Herstellung sind aber praktisch kaum möglich. Die nach dem beschriebenen Verfahren ermittelte mittlere Fehlpassung kann dann entsprechend den Dickenverhältnissen auf das GaInAs umgelegt und über das Vegardsche Gesetz der InAs-Anteil berechnet werden.

3.2.3 Experimentelles

Die Messungen selbst wurden an einem 5-Kristall-Diffraktometer der Fa. Philips durchgeführt, dessen Aufbau schematisch in Abb. 3.5 dargestellt ist. Als Strahlungsquelle dient eine Long-Fine-Focus-Röhre mit einer Kupferanode und einer maximalen Betriebsleistung von 2,2 kW. Aus der divergenten Strahlung des Bremsspektrums und den charakteristischen Linien des Kupfers wird durch vierfache Bragg-Reflexion an den [220]- oder den [440]-Ebenen von Germanium-Einkristallen die Cu-K_{α_1}-Linie mit einer sehr geringen spektralen Breite herausgefiltert ($\lambda = 1,540598$ Å, $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ im (440)-Setting: 2×10^{-5}). Gleichzeitig wird dadurch auch die Divergenz des Strahls in der Beugungsebene minimiert (Strahldivergenz: 0,0015°). Ein Auflösungsvermögen bis hinunter

zu 5" ist so erreichbar. Durch diese Art der Monochromatisierung können zudem an Proben aus unterschiedlichem Material verschiedene Reflexe über große Winkelbereiche bei nahezu gleichbleibendem Auflösungsvermögen gemessen werden, ohne daß der Monochromator gewechselt oder neu justiert werden müßte.

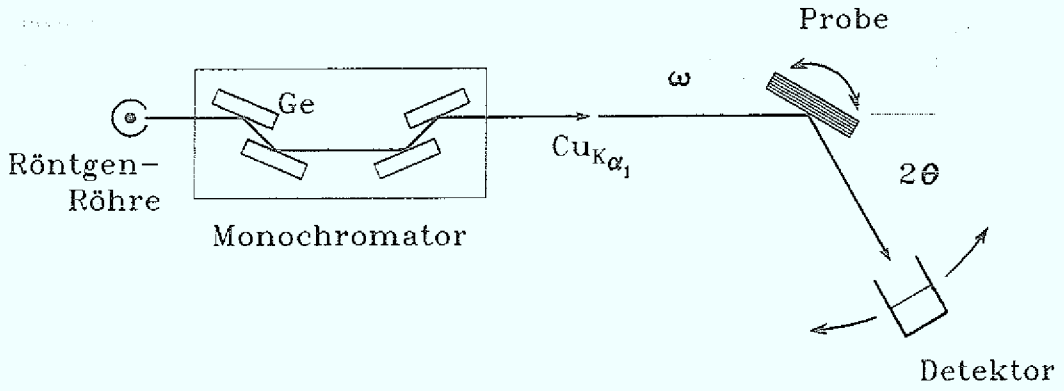


Abb. 3.5: Schematischer Aufbau des 5-Kristall-Röntgendiffraktometers

Hinter dem Monochromator trifft der Röntgenstrahl unter einem Winkel ω relativ zur *Probenoberfläche* auf den Kristall, der auf einem Goniometer montiert ist. Unabhängig davon, ob die Beugung nun an einem symmetrischen oder asymmetrischen Reflex erfolgt, ist der Detektor auf den doppelten Bragg-Winkel ($2\,\theta_B$) des Reflexes einzustellen. Zur Messung der reflektierten Intensität als Funktion des Einfallswinkels wird die Probe mit einer minimalen Schrittweite von 1" um die Achse, die durch den Auftreffpunkt der Röntgenstrahlen auf der Probenoberfläche geht, gedreht. Bei größeren Meßbereichen bzw. bei Benutzung einer Blende am Detektor zur Reduktion des Rauschpegels kann gleichzeitig der Detektor mit der doppelten Winkelgeschwindigkeit mitgefahren werden, so daß der reflektierte Strahl zumindest bei der Messung an symetrischen Reflexen nicht verschattet wird (Öffnungswinkel des Detektors: 5°).

Ein Problem bei der Auswertung von Diffraktogrammen ist, daß nur Intensitäten gemessen werden, die Phaseninformation aber verloren geht. Aus einem Diffraktogramm kann daher nicht auf die Struktur des Kristalls zurückgerechnet werden. Für eine Strukturanalyse müssen vielmehr die Messungen mit den Ergebnissen von Simulationsrechnungen verglichen werden. Dabei wird zunächst ein Strukturvorschlag gemacht und das zugehörige Diffraktogramm berechnet. Nach dem Vergleich mit der Messung ist der Strukturvorschlag dann gegebenenfalls zu korrigieren. Die Anpassung einer Simulation an eine Messung ist also ein iterativer Prozeß.

Zur Berechnung von Beugungsbildern steht ein Programm der Fa. Philips zur Verfügung (s. dazu auch [38]), das auf der dynamischen Theorie und der Lösung der Takagi-

Taupin-Gleichungen ([39, 40, 41]) beruht. Damit lassen sich auch die Intensitäten der Reflexe korrekt behandeln.

Eingabeparameter sind die Dicke einer Schicht und ihre chemische Zusammensetzung, aus der sich direkt die Gitterfehlpassung in senkrechter Richtung ergibt. Eine Änderung in der Parallelkomponente kann nicht berücksichtigt werden, so daß immer eine nichtrelaxierte Struktur vorausgesetzt ist. Gradienten in der Zusammensetzung können durch stückweise Unterteilung in einzelne Schichten mit konstanter Zusammensetzung simuliert werden. Anschließend wird die berechnete Kurve mit der Auflösungsfunktion des Monochromators gefaltet und die Intensität an die gemessene Intensität des Substratreflexes angepaßt.

3.3 Massenspektrometrie

Zur Klärung der Frage, wie die Zusammensetzung In-reicher und damit stark verspannter GaInAs-Schichten vom Angebot der verschiedenen Ausgangsstoffe in der Gasphase abhängt, werden neben den Röntgenanalysen zusätzlich noch massenspektrometrische Untersuchungen durchgeführt. Da diese Verfahren jedoch nicht zerstörungsfrei und im Vergleich zu den Röntgenmessungen relativ aufwendig sind, werden sie nicht zur Standardcharakterisierung eingesetzt, sondern nur an speziellen Proben durchgeführt.

Bei diesen Analyseverfahren werden unter UHV-Bedingungen (Ultra Hoch Vakuum) durch Ionenbeschuß Teilchen aus der Oberfläche einer Probe herausgeschlagen und in einem Massenspektrometer nach dem Verhältnis aus Masse zu Ladung analysiert. Die verschiedenen Elemente in einer Schicht können so direkt einzeln nachgewiesen werden. Durch den fortschreitenden Abtrag erhält man zudem auch ein Tiefenprofil ihrer Verteilung.

Beschießt man einen Festkörper mit energiereichen Ionen ($E > 100$eV), so kann eine Vielzahl von Prozessen ablaufen, wie sie in Abb. 3.6 zusammenfassend dargestellt sind. Primärionen (PI), die nicht direkt von der Oberfläche zurückgestreut werden, dringen in den Festkörper ein und verlieren dort ihre Energie über inelastische Stöße. Dabei kommt es zur Anregung der Atome, deren Umordnung im Kristall und zur Emission von Elektronen, Atomen oder Molekülen. Den Prozeß des Abtragens bezeichnet man als Zerstäubung oder auch als Sputtern. Bei den aus dem Kristallverband herausgelösten Teilchen kann es sich sowohl um geladene wie auch um neutrale Teilchen handeln.

In der Sekundärionen-Massenspektrometrie (SIMS) werden nur die direkt beim Sputtern entstandenen Ionen zur Analyse genutzt. Dieses Verfahren ist zwar sehr empfindlich, was den Nachweis von Elementen angeht (bis in den ppb-Bereich hinein),

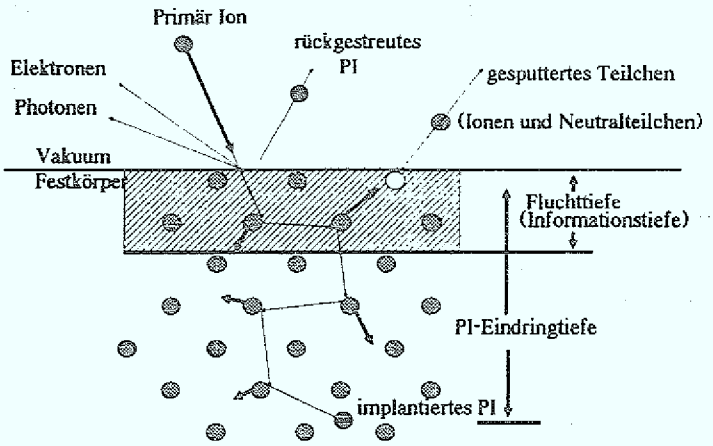


Abb. 3.6: Schematische Darstellung der Wechselwirkungsmöglichkeiten beim Beschuß eines Festkörpers mit hochenergetischen Primärionen (aus Ref. [42])

aber aufgrund von sogenannten Matrixeffekten ist meistens eine direkte quantitative Auswertung, insbesondere bei wechselnden Matrizes, nicht möglich. Die Wahrscheinlichkeit, daß ein Teilchen die Oberfläche als Ion verläßt, hängt stark von den spezifischen chemischen und elektronischen Verhältnissen an der Oberfläche ab. Diese Ionenausbeute kann um mehrere Größenordnungen variieren, je nachdem aus welcher Matrix das Teilchen herausgelöst werden muß. Weitere Hinderungsgründe für eine direkte Quantifizierbarkeit sind die dramatische Steigerung der Ionenausbeute beim Vorhandensein von reaktiven Elementen in der Zerstäubungszone, sowie eine hohe Selektivität bei der Bildung von Ionen für bestimmte Elemente oder Moleküle.

Der Abtrag von Neutralteilchen ist dagegen frei von solchen Matrixeffekten. Eine massenspektrometrische Analyse von Neutralteilchen (Secondary (oder auch Sputtered) Neutral Mass Spectrometry, SNMS) erfordert allerdings eine effektive Nachionisation. Diese Trennung von Teilchenablösung und Ionisation ist der wichtigste Unterschied zwischen SIMS und SNMS und zugleich die Voraussetzung für eine direkte quantitative Auswertung des Meßsignals.

Die grundlegende Meßgröße bei der SNMS ist der Strom $I(X^0)$ einer von der Probenoberfläche als Neutralteilchen abgelösten Teilchensorte X (siehe dazu Ref. [43]). Dieser läßt sich darstellen als

$$I(X^0) = I_p \, Y \, c_x \, \alpha_x^0 \, \eta_x^0 \, (1 - \alpha_x^+ - \alpha_x^-) \tag{3.15}$$

Hierin entspricht I_p dem Strom an Primärionen und Y der Zerstäubungsausbeute, das heißt der Zahl der pro eingeschossenem Ion ausgelösten Teilchen, an denen die Teilchen-

sorte X den Anteil c_x hat. Enthält der Teilchenstrom unter stationären Bedingungen eine vernachlässigbare Menge an Molekülen, so entspricht c_x der atomaren Konzentration der Spezies X in der Probe. Bei den zerstäubten Teilchen dieser Komponente handelt es sich mit einer Wahrscheinlichkeit α_x^+ bzw. α_x^- um positive oder negativ geladenen Ionen, so daß der Ausdruck in Klammern den Anteil der Neutralteilchen beschreibt. Die Sekundärionen machen jedoch meistens nicht einmal 1 % des Teilchenstromes aus ($\alpha_x^\pm \ll 1$), so daß α_x^+ und α_x^- daher in guter Näherung vernachlässigt werden können. Mit dem Faktor α_x^0 wird dagegen die Wahrscheinlichkeit berücksichtigt, mit der die Neutralteilchen nachionisiert werden, und η_x^0 stellt einen Geometrie- und Verstärkungsfaktor für deren Nachweis dar. Die Faktoren α_x^0 und η_x^0 kann man als Nachweiswahrscheinlichkeit bzw. als Sensitivitätsfaktor D_x zusammenfassen. Der gemessenen Strom der Teilchensorte X läßt sich also vereinfacht als

$$I(X^0) = I_p\, Y\, c_x\, D_x \tag{3.16}$$

ausdrücken. Neben den experimentell zugänglichen Größen Primärionenstrom und Zerstäubungsausbeute ist er damit nur von der Konzentration der Teilchensorte X in der Probe und ihrer Nachweiswahrscheinlichkeit abhängig.

Betrachtet man zwei Elemente i und j, so ergibt sich für das Verhältnis ihrer Konzentrationen

$$\frac{c_i}{c_j} = \frac{I(X_i^0)}{I(X_j^0)}\,\frac{D_j}{D_i} \tag{3.17}$$

Für die Bestimmung der Zusammensetzung von verschiedenen Proben innerhalb eines festen Materialsystems genügt es, die Sensitivitätsfaktoren als relative Größen zu kennen. Im konkreten Fall können aus einer Messung an einer GaInAs-Schicht mit bekannter Zusammensetzung (bestimmt mittels Röntgendiffraktometrie) auf einem InP-Substrat die Sensitivitätsfaktoren für den Nachweis von Gallium, Arsen und Phosphor in bezug auf Indium ermittelt werden. Damit lassen sich dann auch die absoluten Elementkonzentrationen in Proben mit beliebigen Ga/In-Verhältnissen bestimmen.

Derartige Messungen wurden an zwei Reihen von Proben mit unterschiedlicher Struktur und variierender Zusammensetzung in zwei verschiedenen Anlagen durchgeführt. Diese Apparaturen arbeiteten jedoch, was die Art und Weise des Sputterns und der Nachionisierung angeht, nach völlig unterschiedlichen Verfahren, die hier kurz beschrieben werden sollen.

Elektronengas SNMS

Bei der Elektronengas SNMS, hier eine Anlage vom Typ INA 3 der Fa. Leybold, dient ein Argon-Plasma gleichzeitig als Sputterquelle und als Nachionisierungsmedium. Das Plasma wird bei einem Ar-Druck von 3×10^{-3} Torr durch ein Hochfrequenzfeld (27,1 MHz, Leistung 150 - 250 W) aufrecht erhalten, dem ein statisches Magnetfeld von 20 G Stärke überlagert ist. Unter diesen Bedingungen kommt es zur sogenannten Elektron-Zyklotron-Wellenresonanz, bei der freie Elektronen Energie aufnehmen können. Ist ihre Energie hoch genug ($\geq$ 15 eV), so werden bei Stößen die Ar-Atome ionisiert.

Die so im Plasma erzeugten Ar^+-Ionen können als Primärionen zum Sputtern verwendet werden. Wird die Probe gegenüber der Entladung negativ vorgespannt, so werden die Ar^+-Ionen zur Probenoberfläche hin beschleunigt (s. Abb. 3.7). Dieser Beschuß der Probe mit den Ionen des Plasmas wird als *Direct Bombardment Mode* (DBM) bezeichnet. Bei geeigneter Spannung (üblicherweise 200 bis 2000 eV) und angepaßter Beschußgeometrie läßt sich eine homogene Abtragung der Probe erreichen.

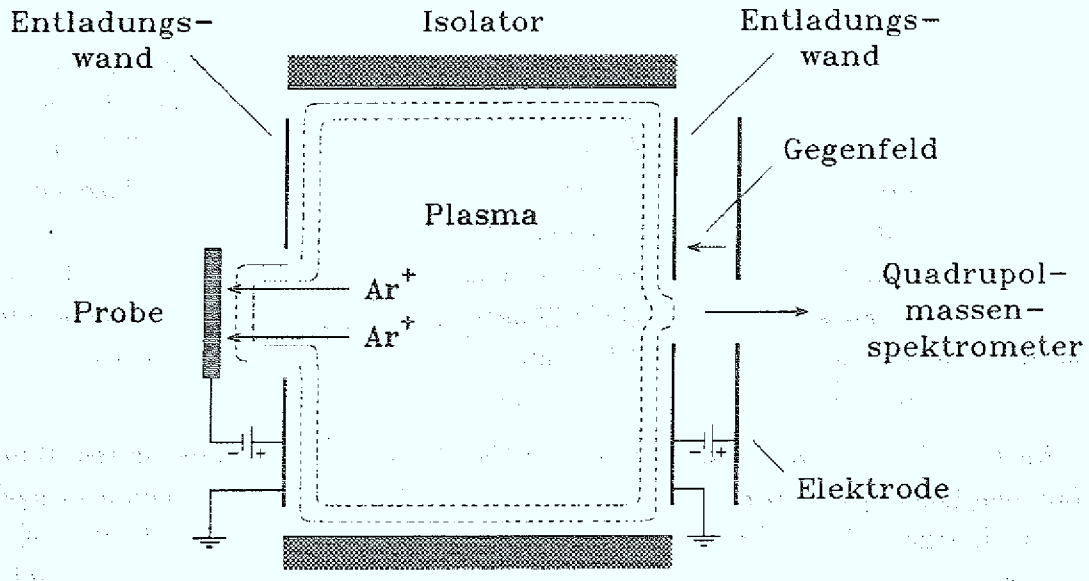


Abb. 3.7: Schematischer Aufbau der Plasmakammer bei der Elektronengas SNMS (nach Ref. [44])

Von den dabei entstehenden Sekundärteilchen können die positiv geladenen Ionen aufgrund der Potentialverhältnisse gar nicht erst ins Plasma eintreten, sondern werden zur Probenoberfläche zurückgeworfen. Neutralteilchen driften dagegen durch die Entladung, wo sie mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit durch einen Stoß eines heißen Elektrons nachträglich ionisiert werden. Um die so aus den abgesputterten Neutral-

teilchen erzeugten, positiv geladenen Ionen von ionisierten Argon- und Restgasatomen zu separieren, wird hinter der Plasmakammer mit einer gegenüber dem Plasma positiv gepolten Elektrode ein Gegenfeld erzeugt, das die thermischen Ionen des Restgases ($E_{kin} \leq 0,05$ eV) zurückhält, von den nachionisierten Sekundärteilchen aber aufgrund ihrer höheren kinetischen Energie (nicht thermalisiert, $E_{kin} \simeq 2 - 5$ eV) überwunden werden kann. Über eine Transferoptik, die die beim Sputtern ebenfalls entstandenen negativen Sekundärionen nicht passieren können, und einen Energiefilter gelangen die Teilchen zum Quadrupolmassenspektrometer, wo sie mit einem Sekundärelektronenvervielfacher registriert werden.

Elektronenstrahl SNMS

In der zweiten Anlage, einer SIMSLAB 3A der Fa. FISONS Instruments, wird wie bei konventioneller SIMS durch Beschuß der Probe mit Ionen aus einer separaten Ionenquelle gesputtert. Hierbei kann sowohl mit Argon wie auch mit Xenon im Energiebereich von 2 – 5 keV gesputtert werden. Die Ionen werden in einem Strahl gebündelt und damit die Probe zeilenweise abgerastert, so daß, anders als bei der Elektronengas SNMS, auch ortsaufgelöst gemessen werden kann. Der Ionenstrahl wird über eine Fläche von 2×2 mm^2 geführt, von der für die eigentliche Analyse aber nur das Signal aus dem Kernbereich (9 % der Gesamtfläche bzw. 30 % einer Zeile) registriert wird, um Randeffekte zu vermeiden. Die aus dem Kristall herausgeschlagenen Neutralteilchen werden diesmal nicht in einem Plasma, sondern in einem quer zu ihrer Flugbahn gerichteten Strahl von Elektronen nachionisiert (s. Abb. 3.8). Die dazu nötigen Elektronen werden durch eine Glühemission erzeugt. Bei Elektronenenergien von 30 – 100 eV lassen sich alle Elemente direkt ionisieren, was eine gleichmäßige Nachionisierungswahrscheinlichkeit gewährleistet.

Auch in diesem System werden die bei der Analyse der nachionisierten Teilchen störenden Ionen wie etwa durch das Sputtern entstandene Sekundärionen oder nachionisierte Restgasteilchen durch Potentiale an speziellen Blenden unterdrückt. An die Nachionisierungseinheit schließt sich wieder ein Energiefilter und ein Quadrupolmassenspektrometer an.

Die Tiefenauflösung, die in der Elektronenstrahl SNMS erreichbar ist, wird durch die Sputterquelle limitiert, denn hohe Beschußenergien führen zu verstärkter Umordnung der Atome im Kristall. Dies spielt innerhalb einer dickeren Schicht, das heißt unter stationären Bedingungen, noch keine Rolle, wird aber in der Nähe von Grenzflächen in Heterostrukturen entscheidend. In diesem Punkt ist die Elektronengas SNMS mit ihren niedrigen Beschußenergien im Vorteil, jedoch treten dort dann Probleme mit der lateralen Homogenität des Abtrags auf, was im Endeffekt das Auflösungsvermögen wieder

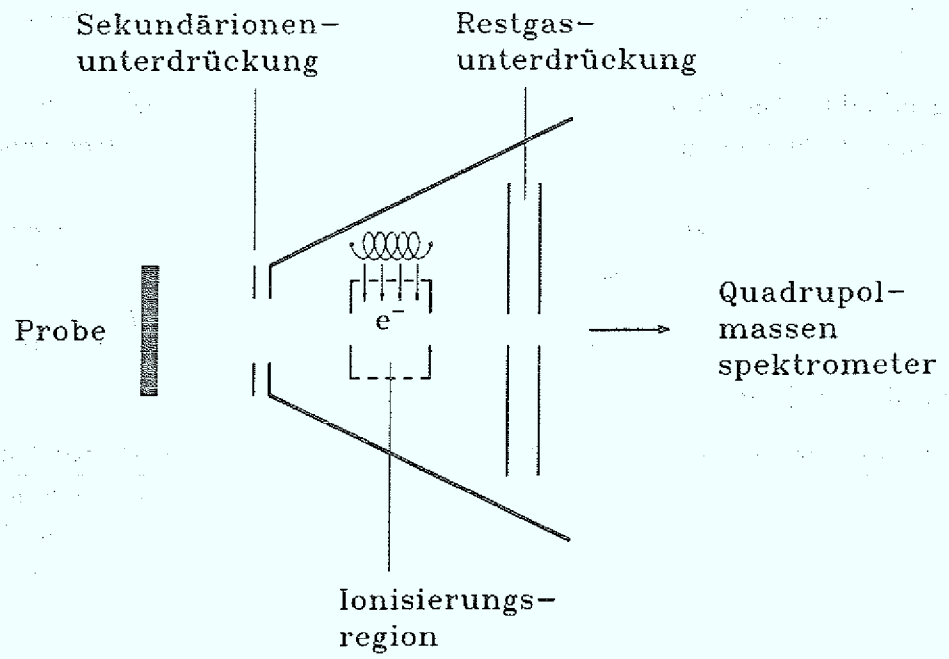


Abb. 3.8: Schematischer Aufbau der Nachionisierungseinheit bei der Elektronenstrahl SNMS

verschlechtert. Letzten Endes kann aber mit beiden Systemen ein Auflösungsvermögen von unter 10 nm erreicht werden.

3.4 Transmissionselektronenmikroskopie

Die letzte Analysetechnik, die zur Aufklärung der tatsächlichen Struktur der abgeschiedenen Schichtfolgen eingesetzt wird, ist die Transmissionselektronenmikroskopie (TEM). Da diese Methode über ein besonders hohes räumliches Auflösungsvermögen verfügt, das sogar bis hinunter in den atomaren Bereich gehen kann, läßt sich mit ihr der Aufbau von HEMT-Strukturen und Übergittern, bei denen die einzelnen Schichtdicken typischerweise in der Größenordnung von nur 10 nm liegen, untersuchen und dabei auch Aufschluß über die Schärfe der Grenzflächen gewinnen. Darüber hinaus können Kristalldefekte wie Versetzungen und kleinste Materialausscheidungen sichtbar gemacht werden. Dies ist vor allem für Strukturen mit verspannten Schichten von Interesse, da Störungen des Gitters in noch stärkerem Maße als Grenzflächenrauhigkeiten den Ladungsträgertransport in einem zweidimensionalen Gas behindern.

Wie der Name schon sagt, wird bei der Transmissionselektronenmikroskopie die Probe mit Elektronen durchstrahlt (zur Funktionsweise siehe z. B. Ref. [45]). Dabei

wird ein Teil der hochenergetischen Elektronen an den Atomen des Probenmaterials elastisch oder inelastisch gestreut, was eine Strukturanalyse durch Abbildung und Beugung erlaubt. Die Elektronen werden durch thermische Emission aus einer feinen Wolfram-Drahtspitze freigesetzt und beschleunigt. Mit einer elektromagnetischen Kondensorlinse werden sie zu einem feinen Strahl gebündelt und die Probe damit beleuchtet. Dahinter erzeugt die Objektivlinse ein erstes vergrößertes Bild der Probe, daß danach durch mehrere Linsen nachvergrößert wird. Der Strahl der Elektronen wird durch eine Reihe von Blenden im gesamten Strahlengang begrenzt, wobei der Objektivblende (hinter der Objektivlinse, s. Abb. 3.9) eine besondere Bedeutung zukommt, da mit ihr der Abbildungsmodus bestimmt wird.

Der Informationsgehalt einer TEM-Aufnahme ergibt sich durch Kontrastunterschiede zwischen verschiedenen Bereichen der Probe. Kontrast entsteht bei der Transmissionselektronenmikroskopie dadurch, daß Elektronen durch Streuung und Beugung an den Atomen des Festkörpers aus dem einfallenden Strahl herausgelenkt werden. Diese abgelenkten Elektronen werden durch die Objektivblende ausgeblendet, so daß die transmittierte Intensität abnimmt. Streukontrast entsteht, wenn sich die Massendichte, die mittlere Ordnungzahl der Elemente oder die Dicke der Probe ändert. Bei amorphen Proben ist der Streukontrast die einzige Kontrastart. In kristallinen Proben tritt zusätzlich der wesentlich bedeutsamere Beugungskontrast auf. Ursache für diese Kontrastart ist die Beugung der Elektronenwellen an den Netzebenen des Kristallgitters entsprechend der Bragg-Gleichung. In einer TEM-Aufnahme zeigen daher Schichten mit unterschiedlichen Netzebenenabständen oder verschiedenen Streufaktoren der Atome Kontrastunterschiede. Die Bragg-Winkel sind für Reflexe niedriger

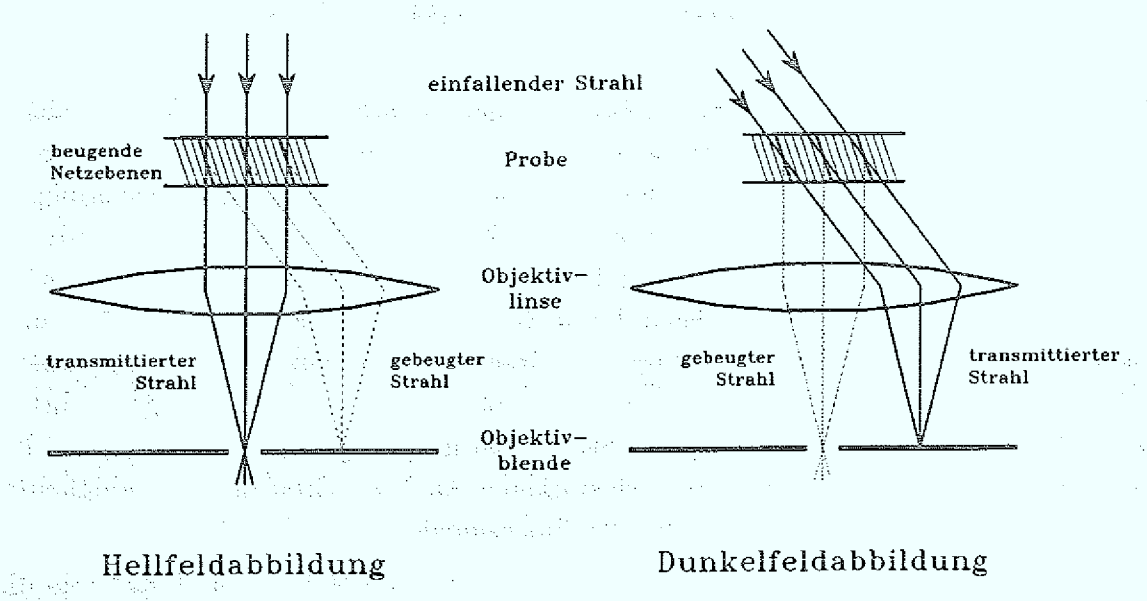


Abb. 3.9: Hellfeld- und Dunkelfeldabbildungsmodus bei der TEM

Ordnung aufgrund der extrem kurzen Wellenlänge der Elektronen sehr klein ($\leq 1°$). Änderungen der Ausrichtung der Netzebenen, wie sie zum Beispiel durch Verzerrungen der Elementarzellen in der Umgebung einer Versetzung entstehen, können daher ebenfalls sichtbar gemacht werden.

Für die Abbildung können sowohl der transmittierte, wie auch der gebeugte Elektronenstrahl benutzt werden. Man spricht dann von Hell- bzw. Dunkelfeldabbildung. Bei der Hellfeldabbildung (s. Abb. 3.9) werden die an den Netzebenen gebeugten Elektronen durch die Objektivblende ausgeblendet, so daß dunklere Stellen im Bild nur dort erscheinen, wo die Bragg-Bedingung für irgendeinen Reflex erfüllt ist. Für ein Dunkelfeldbild wird dagegen der einfallende Elektronenstrahl so gegenüber der Probe verkippt, daß nur das Strahlenbündel eines bestimmten Reflexes die Blende passieren kann. In diesem Modus lassen sich Kristallstörungen besser auflösen.

Das Auflösungsvermögen eines abbildenden Systems ist spätestens durch die Wellenlänge der verwendeten Strahlung begrenzt. Bei den hier gemachten Aufnahmen wurde für die abbildenden Elektronen eine Beschleunigungsspannung von 400 kV benutzt. Dies entspricht unter Berücksichtigung der relativistischen Massenzunahme der Elektronen einer de-Broglie-Wellenlänge von 0,0164 Å. Die mit einem Elektronenmikroskop, in diesem Fall einem JEOL 4000 FX, erreichbaren Auflösungen sind jedoch weit weniger durch die Wellenlänge als vielmehr durch die Linsenfehler und dabei vor allem durch die sphärische Abberation der Objektivlinse begrenzt. Unter den gewählten Betriebsbedingungen beträgt das Auflösungsvermögen 2,5 Å.

Aufgrund der starken Wechselwirkung von Elektronen mit Materie sind nur sehr dünne Schichten überhaupt durchstrahlbar. Abhängig von der Massendichte, der Elektronenenergie und den Abbildungsbedingungen bleibt die durchstrahlbare Probendicke auf den μm-Bereich begrenzt. Hochauflösende TEM-Aufnahmen erfordern sogar Schichtdicken von höchstens etwa 10 nm. Diese Anforderungen machen eine aufwendige und zeitraubende Präparation der Proben notwendig. Für Querschnittsaufnahmen läuft die Vorbereitung der Proben folgendermaßen ab: Zunächst werden Stücke einiger

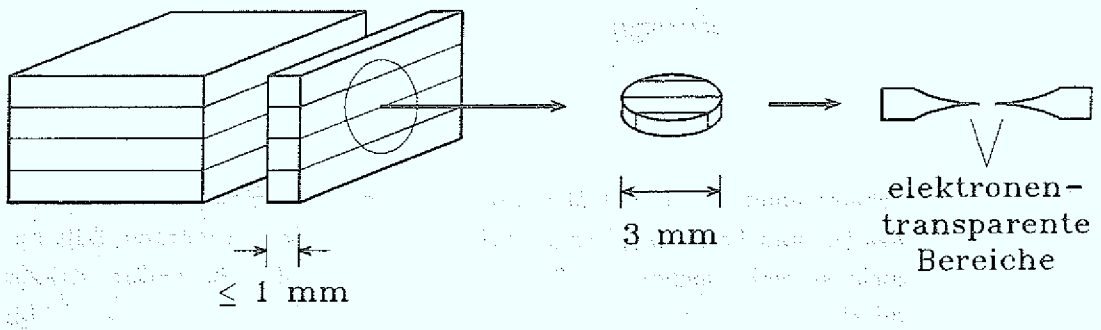


Abb. 3.10: Probenpräparation für Querschnittaufnahmen

Proben aufeinandergeklebt. Von diesem Stapel wird dann ein höchstens 1 mm dicker Streifen abgesägt und daraus ein Zylinder von 3 mm Durchmesser ausgebohrt (s. Abb. 3.10). Dieser Zylinder wird mechanisch poliert und zur Mitte hin konisch gedünnt, bis eine Stärke von etwa 30 μm erreicht ist. Danach wird die Probe durch Beschuß mit Argon-Ionen bis zur Perforation gedünnt. Da bei InP der Phosphor jedoch wesentlich leichter abgetragen wird, bleiben dabei In-Tröpfchen auf der Oberfläche zurück. Diese können durch die Zugabe von Iod während des Sputter-Vorganges vermieden werden. Von der so bearbeiteten Probe ist nur der Randbereich des Loches durchstrahlbar.

3.5 Hall-Effekt-Messungen

Die elektrische Charakterisierung der Schichten beschränkt sich für die Standardauswertungen auf die Messung des Hall-Effektes, aus dem die Dichte der freien Ladungsträger und ihre Beweglichkeit ermittelt werden kann. Anschaulich gesprochen beruht der Hall-Effekt auf der Ablenkung von bewegten Ladungsträgern in einem Magnetfeld. Durch eine äußere Spannung U wird ein Strom I durch eine Probe getrieben. Wird die Probe dabei von einem Magnetfeld durchsetzt, so werden die Ladungsträger senkrecht zum $\underline{E}$- und zum $\underline{B}$-Feld abgelenkt (siehe Abb. 3.11) und es baut sich quer zur Stromrichtung eine Spannung, die sogenannte Hall-Spannung, U_H auf. Aus der stromlosen Messung dieser Spannung und der elektrischen Leitfähigkeit der Probe kann dann die Ladungsträgerdichte und die Beweglichkeit berechnet werden.

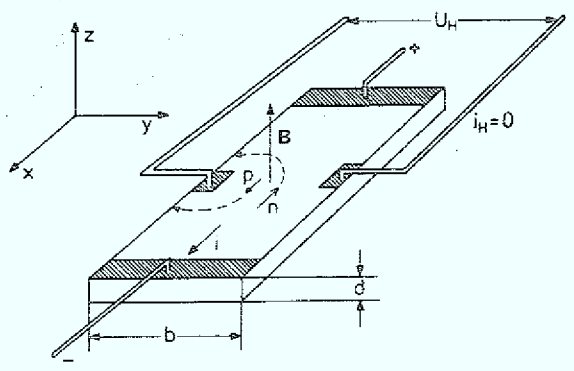


Abb. 3.11: Schema einer Hall-Effekt-Messung. Gestrichelt sind Bahnen von Elektronen (n) und Löchern (p) eingezeichnet, die durchlaufen würden, falls U_H nicht stromlos gemessen würde. Bei $I_H = 0$ werden die Ladungsträger durch die sich aufbauende Hall-Spannung auf ihrer geradlinigen Bahn gehalten.

Der in x-Richtung durch einen Querschnitt einer homogenen Probe fließende Strom I läßt sich darstellen als

$$I = q\,n\,b\,d\,v_x \quad , \tag{3.18}$$

wobei q die Ladung und n die Dichte der Ladungsträger ist. Unter dem Einfluß äußerer Felder wirkt auf die sich mit der Geschwindigkeit $\underline{v}$ bewegenden Ladungsträger die Lorentz-Kraft

$$\underline{F} = q\,(\,\underline{E} + \underline{v} \times \underline{B}\,), \tag{3.19}$$

die sie hier in y-Richtung ablenkt und dadurch zu einem elektrischen Feld auch in dieser Richtung führt. Im Gleichgewicht kompensiert dieses elektrische Hall-Feld gerade die magnetische Kraft auf die bewegten Ladungsträger, so daß $E_y = v_x\,B$ gilt. Mit Gl. (3.18) und der Beziehung $E_y = U_H/b$ ergibt sich daraus für die Hall-Spannung

$$U_H = \frac{B}{n\,q\,d}\,I \tag{3.20}$$

oder anders ausgedrückt für die Dichte der Ladungsträger

$$n = \frac{B}{q\,d} \cdot \frac{I}{U_H} \tag{3.21}$$

Mit der Kenntnis von n und dem Ohmschen Gesetz läßt sich die Beweglichkeit aus der Leitfähigkeit der Schicht nach Beziehung

$$\mu = \frac{\sigma}{q\,n} = \frac{1}{q\,n} \cdot \frac{l}{b\,d} \cdot \frac{I}{U} \tag{3.22}$$

berechnen, wobei l den Abstand der stromführenden Kontakt voneinander darstellt.

Wie man aus Gl. (3.22) erkennt, muß für die Bestimmung der Leitfähigkeit auf diesem Weg die genaue Geometrie der Probe bekannt sein. Nach van der Pauw [46] ist dies jedoch nicht erforderlich, wenn die Probe folgenden Bedingungen genügt:

- Die Kontakte liegen am Rand.
- Sie sind klein gegenüber den Abmessungen der Probe, so daß sie als punktförmig betrachtet werden können.
- Die Dicke der Schicht ist homogen.
- Die Oberfläche der Probe stellt ein einfachzusammenhängendes Gebiet dar.

Unter diesen Voraussetzungen konnte van der Pauw aus der Funktionentheorie herleiten, daß für den spezifischen Widerstand gilt:

$$\rho = \frac{\pi d}{\ln 2} \cdot \frac{R_{1234} + R_{2341}}{2} \cdot f_{korr}\left(\frac{R_{1234}}{R_{2341}}\right) = \frac{1}{\sigma} \tag{3.23}$$

Die Indizes der Widerstände R_{klmn} beziehen sich auf die Nummern der Kontakte (s. Abb. 3.12), und ihre Reihenfolge beschreibt die Art und Weise der Messung. Die ersten zwei aufgeführten Indizes geben an, über welche Kontakte der Strom eingeprägt wird, während die beiden anderen die Kontakte für die Spannungsmessung bezeichnen (z. B.: $R_{1234} = \frac{U_{34}}{I_{12}}$). Die Korrekturfunktion f_{korr} stellt eine schwach veränderliche Funktion des Verhältnisses der Widerstände R_{1234} und R_{2341} dar, so daß hierüber die Geometrie der Kontaktanordnung berücksichtigt wird. Bei gleichgroßen Widerständen (z. B. bei einer quadratischen Probe) nimmt sie den Wert 1 an. Für die Bestimmung des spezifischen Widerstandes bzw. der Leitfähigkeit sind jetzt also zwei Messungen mit zueinander um 90° gedrehter Konfiguration notwendig.

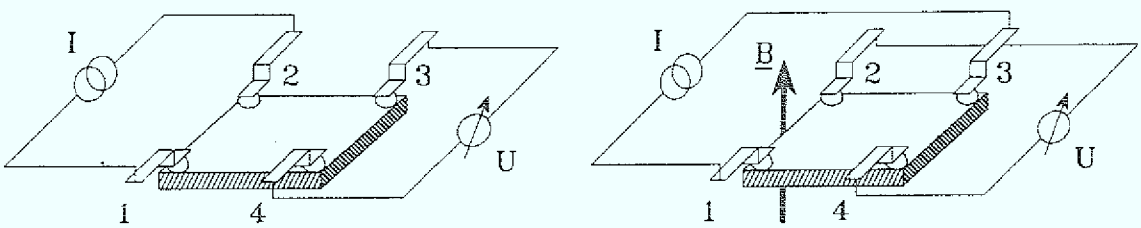


Abb. 3.12: Messung der Leitfähigkeit und des Hall-Effektes in der van-der-Pauw-Geometrie

Zur Bestimmung des Hall-Widerstandes $\frac{U_H}{I}$ ($= R_{1324}$) sind ebenfalls zwei Messungen nötig, da im allgemeinen die Kontakte zur Messung der Hall-Spannung nicht auf einer Äquipotentialfläche liegen (z. B. wenn die Probe nicht ganz exakt quadratisch ist). Der Beitrag des longitudinalen Widerstandes kann durch Umkehrung der Magnetfeldrichtung und anschließende Mittelwertbildung herausgerechnet werden. Die Ladungsträgerdichte bestimmt sich dann zu

$$n = \frac{B}{e\,d}\,\frac{2}{\Delta R_{1324}} \tag{3.24}$$

mit deren Hilfe sich die Hall-Beweglichkeit wieder aus $\mu_H = \frac{\sigma}{n\,e}$ gewinnen läßt.

Zu dieser Art der Behandlung des Hall-Effektes sind noch einige Punkte anzumerken. Wie eine Beschreibung des Ladungsträgertransportes mittels eines Relaxationszeitansatzes zeigt, sind die so bestimmte Beweglichkeit und Ladungsträgerdichte um den sogenannten Hall-Faktor $r_H = \frac{<\tau^2>}{<\tau>^2}$ zu korrigieren. τ stellt dabei die mittlere Zeit zwischen zwei Streuprozessen dar und $< \tau >$ deren Mittelung über die Energie. Dieser Hall-Faktor wird allerdings üblicherweise zu 1 angenommen, was letztendlich nichts anderes bedeutet, als daß die Drift- und die Hall-Geschwindigkeit der Ladungsträger gleich sind. Speziell für ein 2DEG ist r_H außerdem immer exakt 1, da hier nur die Elektronen an der Fermi-Kante am Transport beteiligt sind und daher nicht über die Energie gemittelt zu werden braucht. Desweiteren ist auch der Effekt der Verarmungsrandschicht an der Oberfläche nicht weiter berücksichtigt worden, was hinreichende Schichtdicken oder Dotierungen voraussetzt. Die klassische Herleitung ist außerdem nur für kleine Magnetfelder gültig (einige Zehntel Tesla; Zyklotronfrequenz $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$ ist klein gegen die Stoßfrequenz; $\omega_c \tau \ll 1$), da andernfalls die Quantisierung der Energiezustände zu berücksichtigen ist ($\rightarrow$ Quanten-Hall-Effekt).

Für die Standardcharakterisierung der abgeschiedenen Schichten werden quadratische Stücke (ca. $5 \times 5\,\mathrm{mm}^2$) aus den Proben herausgeschnitten und in den Ecken In-Kügelchen ($\phi \sim 0,5\,\mathrm{mm}$) bei 350 °C in einer N_2-Atmosphäre (5 % H_2-Anteil) einlegiert. Die Messungen werden in einer Hall-Apparatur der Fa. Keithley (Mod. 926B) bei Raumtemperatur (300 K) und in flüssigem Stickstoff (77 K) durchgeführt. Die computergesteuerte Anlage mißt zur exakteren Mittelwertbestimmung alle 24 möglichen R_{klmn} der van-der-Pauw-Anordnung. Das Magnetfeld hat dabei eine Stärke von 0,35 T.

Die Ausbildung von zweidimensionalen Elektronengasen und ihre Eigenschaften werden über die Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit und der Ladungsträgerdichte untersucht. Die entsprechenden Messungen erfolgen an einem Tieftemperaturmeßstand, der Hall-Messungen im Temperaturbereich von 4,2 bis 300 K gestattet. Dabei befinden sich die Proben in einem Dreikammer-^{4}He-Durchflußkryostaten. Einzelheiten über den Aufbau dieses Systems finden sich in Ref. [47]. Das Meßverfahren basiert hier ebenfalls auf der van-der-Pauw-Methode, wobei die Stärke des Magnetfeldes etwa 0,4 T beträgt.

Zur weiteren Untersuchung der Streumechanismen in 2DEGs werden zusätzlich magnetfeldabhängige Messungen durchgeführt. In starken Magnetfeldern führt die Quantisierung der Energiezustände zum Auftreten des Quanten-Hall-Effektes (QHE) und zu den Shubnikov-de-Haas-Oszillationen (SdH-Oszillationen) im Magnetowiderstand (mehr dazu in Abschn. 4.2). Erst die Beobachtung dieser Effekte ist die endgültige Bestätigung für die Existenz eines 2DEGs. Die Auswertung dieser Messungen liefert unter anderem Informationen über die Verteilung der Ladungsträger auf verschiedene

Subbänder. Für derartige Messungen sind allerdings neben starken Magnetfeldern sehr tiefe Temperaturen erforderlich. Mit dem hier benutzten ^{3}He/^{4}He-Mischkryostat (Oxford TLM 400) sind Temperaturen bis hinunter zu 30 mK erreichbar, während die maximale Stärke des Magnetfeldes bei 16 T liegt (detaillierte Informationen zum Aufbau der Anlage in Ref. [48]). Bei den Messungen wird diesmal nicht auf das van-der-Pauw-Verfahren zurückgegriffen, sondern die Proben werden auf photolithografischem Wege definiert strukturiert (Hall-Bar-Geometrie). Der Strukturierungsprozeß ist im einzelnen in Ref. [49] beschrieben.

3.6 Photolumineszenz-Spektroskopie

Mit Photolumineszenz (PL) bezeichnet man die emittierte Strahlung einer Probe, die durch die Absorption von eingestrahltem Licht zum Leuchten angeregt wird. Aus der spektralen Analyse der ausgesandten Strahlung kann eine Reihe von Informationen über das Material und seine Güte gewonnen werden. Bei direkten Halbleitern läßt sich deren Bandlücke bestimmen, und man erhält gleichzeitig auch Aufschluß über ihre Kristallinität sowie bei Heterostrukturen über die Schärfe der Grenzflächen. Zudem ist das Verfahren sehr empfindlich auf Verunreinigungen in den Schichten. Im Rahmen dieser Arbeit soll die Photolumineszenz-Spektroskopie außer zur Qualitätskontrolle einzelner hochreiner Schichten vor allem zur Bestimmung der Bandlücke E_g von In-reichen GaInAs-Schichten eingesetzt werden. Diese Materialgröße wird als Eingangsparameter für selbstkonsistente Bandverlaufsrechnungen benötigt, mit denen der Aufbau von HEMT-Strukturen optimiert werden soll. Dabei ist jedoch zu beachten, daß die in In-reichen Schichten aufgebaute Spannung auf die Größe der Bandlücke des Materials zurückwirkt [15]. E_g ist damit nicht mehr nur ein reiner Materialparameter, sondern zusätzlich noch strukturabhängig. Die Veränderung von E_g mit der Zusammensetzung der $Ga_{1-x}In_xAs$-Schichten wird daher an Quantentopfstrukturen untersucht, deren Aufbau vergleichbar mit den geplanten HEMT-Strukturen ist.

Bestrahlt man einen direkten Halbleiter mit Licht einer Energie größer als die der Bandlücke, so werden bei der Absorption Elektronen aus dem Valenzband über die Bandlücke hinweg ins Leitungsband angeregt, wodurch ein Nichtgleichgewichtszustand entsteht. Die so generierten freien Ladungsträger diffundieren im Festkörper und relaxieren, vornehmlich durch inelastische Streuung an Phononen, in die Zustände mit der niedrigsten erreichbaren Energie. Von dort aus rekombinieren die Elektronen mit den Löchern über strahlende und nichtstrahlende Prozesse. Das nach einer strahlenden Rekombination aus dem Halbleiter austretende Licht wird spektral analysiert.

Die Energie der emittierten Strahlung hängt von der energetischen Lage der Aus-

gangszustände der rekombinierenden Ladungsträger ab. Aufgrund der Coulomb-Anziehung zwischen einem Elektron und einem Loch kann solch ein Elektron-Loch-Paar einen gebundenen Zustand eingehen, also ein Exziton bilden. Dieses Quasiteilchen, das mit einem Wasserstoffatom vergleichbar ist, tritt sowohl als freies Exziton in einem Halbleiter auf, kann aber auch an eine Störstelle gebunden sein. Durch die Bindung an einen neutralen oder geladenen Donator oder Akzeptor wird die Energie des Exzitons um die Bindungsenergie abgesenkt, so daß im PL-Spektrum zusätzliche Linien bei niedrigeren Energien auftreten. Die an neutrale Störstellen gebundenen Exzitonen reagieren empfindlich auf lokale Spannungen im Kristall weswegen ihre Halbwertsbreite ein Maß für die Qualität einer Schicht ist. Eine Auswahl der wichtigsten bandkantennahen strahlenden Übergänge und ein dementsprechendes Lumineszenzspektrum, wie es bei binären Halbleitern wie GaAs oder InP beobachtet wird, sind in Abb. 3.13 schematisch dargestellt. Die Erläuterung der Bezeichnung der einzelnen Übergänge ist Tab. 3.1 zu entnehmen.

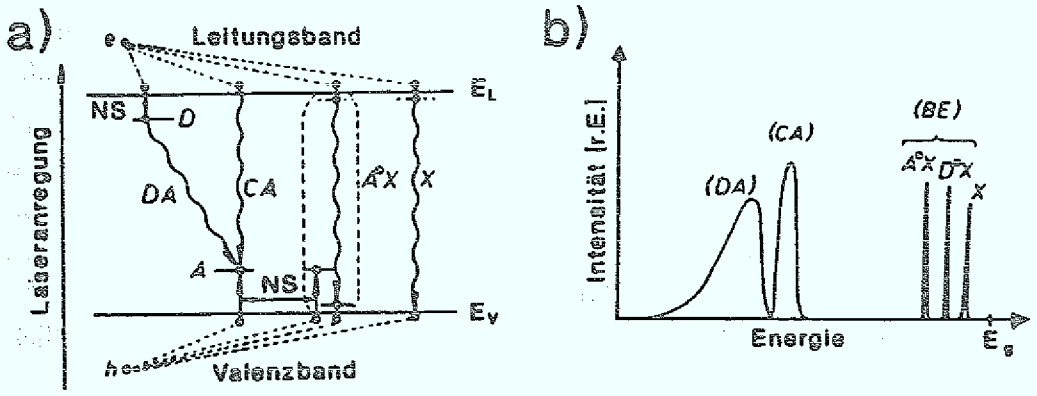


Abb. 3.13: Einige der wichtigsten Rekombinationspfade in einem direkten Halbleiter (a) und ein entsprechendes rein schematisches Lumineszenzspektrum (b) (aus Ref. [50]).

Wie Abb. 3.13 zeigt, gibt es neben den exzitonischen Übergängen noch weitere, die direkt über die Störstellenniveaus ablaufen ((C, A), (D, A)). Dabei ist der (C, A)-Übergang elementspezifisch, was die Identifizierung eines Akzeptors möglich macht. Die Intensität dieser Linien ist unter anderem von der Konzentration der Dotierungen abhängig.

Bei ternären Materialien wie $Ga_{1-x}In_xAs$ bestimmt ihre Zusammensetzung die energetische Lage des PL-Spektrums. Es werden dabei jedoch nicht so ausgeprägte exzitonische Strukturen wie bei den binären Halbleitern beobachtet, da die Linien aufgrund

Tabelle 3.1: Bezeichnungen der bandkantennahen Lumineszenzlinien

Bezeichnung	Beschreibung
X	freies Exziton
(D°, X)	an neutralen Donator gebundenes Exziton
(D^+, X)	an geladenen Donator gebundenes Exziton
(A°, X)	an neutralen Akzeptor gebundenes Exziton
(C, A)	Leitungsband-Akzeptor-Übergang
(D, A)	Donator-Akzeptor-Übergang

von Fluktuationen in der Zusammensetzung und den dadurch bedingten Änderungen in der Bandlücke deutlich verbreitert sind. Während die Linienbreite zum Beispiel des (D°, X)-Überganges von InP bei tiefen Temperaturen (2 K) in der Größenordnung von 0,1 meV liegt, wird bei $Ga_{0,47}In_{0,53}As$ anstelle der einzelnen freien und gebundenen Exzitonen nur eine Linie mit einer Halbwertsbreite von mehr als 2 meV gefunden.

In Heterostrukturen aus GaInAs und InP liegt die Kante des Leitungsbandes im GaInAs tiefer und die des Valenzbandes höher als im InP. Daher sammeln sich sowohl die optisch generierten freien Elektronen wie auch die Löcher im GaInAs. Mit einer Doppelheterostruktur wie in Abb. 3.14 dargestellt, können die Exzitonen wie in einem Topf eingesperrt werden. Der sich dabei ergebende große Überlapp der Wellenfunktionen führt zu einer hohen Oszillatorstärke, so daß man trotz geringer Schichtdicke eine hohe Lumineszenzintensität aus einem Quantentopf bekommt.

Ist die Breite L_z des Topfes von der Größenordnung der de-Broglie-Wellenlänge, so zeigen die möglichen Zustände in der z-Richtung ein diskretes Energiespektrum, wobei das unterste Niveau gegenüber der Bandkante verschoben ist. Wie groß diese Verschiebung im einzelnen ist, hängt von der Breite des Topfes (L_z), der Höhe des Bandsprunges (ΔE_c, ΔE_v) und den effektiven Massen der Ladungsträger ab. Die Entartung der Zustände der leichten (lh) und schweren (hh) Löcher wird somit in einem $Ga_{0,47}In_{0,53}As$-Quantentopf aufgehoben. Die Energie des PL-Signals setzt sich demnach aus der Bandlücke des Materials E_g, den Energien der Grundzustandsniveaus E_e^1 und E_{hh}^1 und der Exzitonenbindungsenergie E_X^B, deren Größe für gitterangepaßtes Material im allgemeinen zu 10 meV abgeschätzt wird [51], zusammen.

$$E_{PL} = E_g + E_e^1 + E_{hh}^1 - E_X^B \tag{3.25}$$

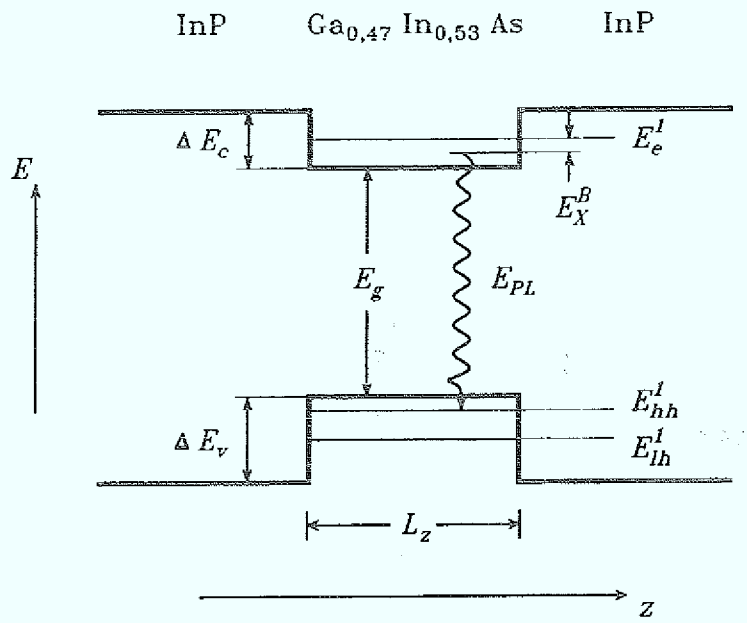


Abb. 3.14: Veranschaulichung der verschiedenen Beiträge zur Energie des PL-Signals einer Quantentopfstruktur

Der Beitrag, der sich insgesamt durch die Quantisierung der Zustände ergibt, läßt sich experimentell aus der Differenz der PL-Signale von $Ga_{0,47}In_{0,53}As$ Bulk-Material und einer Quantentopfstruktur mit gleicher Zusammensetzung der GaInAs-Schichten bestimmen. Nimmt man nun sozusagen in 0ter Näherung an, daß sich dieser Beitrag auch bei höheren In-Konzentrationen und auftretenden Spannungen nicht entscheidend ändert (für einen 10 nm breiten Topf beträgt die Verschiebung ohnehin erst ca. 40 meV), so kann aus der Verschiebung der PL-Linie bei Erhöhung des In-Gehaltes im Quantentopf auf die Größe der Bandlücke des $Ga_{1-x}In_xAs$ geschlossen werden. Sind die GaInAs-Schichten nicht relaxiert, so schließt dieser Wert auch die Auswirkungen der Spannungen auf die Bandlücke mit ein. Eine Abschätzung des Fehlers kann über die Berücksichtigung der Änderung der effektiven Massen sowie der Band-Offsets mit dem In-Gehalt und den damit verbundenen Änderungen von E_e^1 und E_{hh}^1 erfolgen.

Den Aufbau der Apparatur, mit der die PL-Messungen durchgeführt werden, zeigt die Skizze in Abb. 3.15. Zur Anregung wird das Licht eines ionenlasergepumpten Farbstoff-Lasers mit einer Energie von $E_{ex} = 1,84$ eV bzw. einer Wellenlänge von $\lambda_{ex} = 674$ nm verwendet. Für eine Signalverarbeitung in der Lock-In-Technik wird der Strahl periodisch durch einen Chopper (CH) unterbrochen. Die Probe selbst befindet sich in einem Helium-Badkryostaten in superfluidem Helium bei einer Temperatur von 2 K. Das von ihr ausgesendete Licht wird über zwei fokussierende Spiegel auf den

Eintrittsspalt eines 25cm-Einfachmonochromators mit vorgeschalteten Ordnungsfiltern fokussiert. Das Auflösungsvermögen dieser Anordnung liegt unterhalb der Linienbreite der Signale. Die Intensität des spektral zerlegten Lichts wird danach mit einem zur Rauschunterdrückung mit flüssigem Stickstoff gekühlten Ge- oder PbS-Detektor, je nach erforderlichem Energiebereich, gemessen.

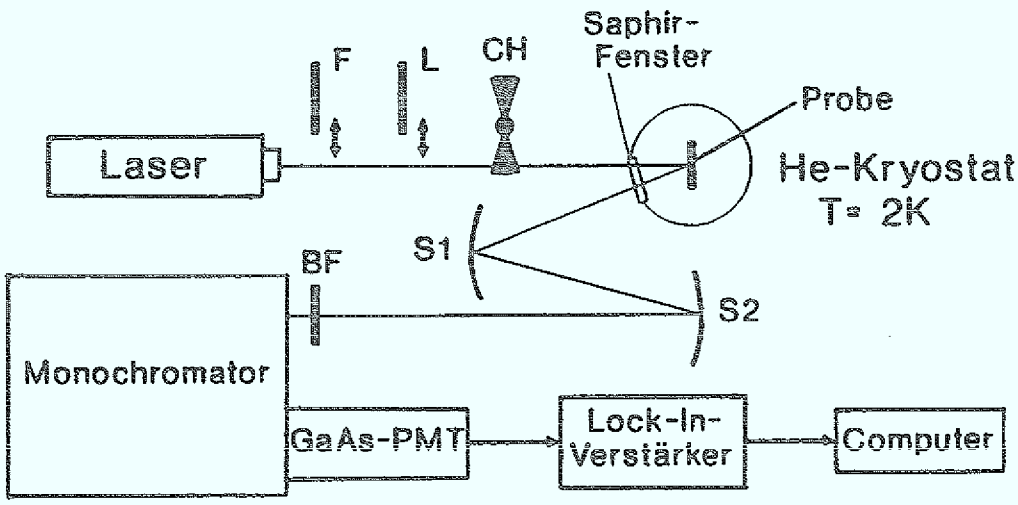


Abb. 3.15: Skizze des Aufbaus der PL-Apparatur (aus Ref. [50])

Kapitel 4

Ladungsträgertransport in einem 2DEG

Der experimentelle Nachweis der Existenz eines zweidimensionalen Elektronengases und seine Charakterisierung können über die Temperatur- und die Magnetfeldabhängigkeit des Ladungsträgertransportes erfolgen. Dazu ist jedoch zunächst eine Betrachtung der verschiedenen Streumechanismen in Verbindungshalbleitern und ihrer Bedeutung für die Beweglichkeit der Elektronen erforderlich. Der Einfluß eines starken äußeren Magnetfeldes auf die Leitfähigkeit eines 2DEG wird anschließend beschrieben.

4.1 Streumechanismen in III-V-Halbleitern

Bekanntermaßen können Elektronen, die sich in einem Kristall bewegen, durch Bloch-Wellenfunktionen beschrieben werden. Die Konstruktion der Bloch-Wellen ist allerdings eng an den periodischen Verlauf des Potentials im Kristallgitter gebunden. Jede Form der Abweichung von der strengen Periodizität stört daher die Bewegung der Elektronen. Veränderungen im Potentialverlauf entstehen sowohl als Folge temperaturbedingter Schwingungen des Gitters (Phononen) und damit einhergehender Dipolfelder, wie auch durch Änderungen oder Störungen des Gitteraufbaus (statistische Verteilung der Elemente in Mischkristallen wie $Ga_{1-x}In_xAs$, Grenzflächenrauhigkeiten in Heterostrukturen, Defekte oder Versetzungen) und natürlich durch elektrisch aktive Störstellen (Dotierungen bzw. Verunreinigungen), die über Coulomb-Kräfte mit den Elektronen wechselwirken. Diese verschiedenen Streumechanismen begrenzen die Beweglichkeit der Elektronen in unterschiedlicher Art und Weise, können aber als weitgehend unabhängig voneinander behandelt werden. Die tatsächliche Beweglichkeit μ_{tot}

der Elektronen im Festkörper läßt sich dann näherungsweise nach der Matthiesenschen Regel

$$\frac{1}{\mu_{tot}} = \sum_i \frac{1}{\mu_i} \tag{4.1}$$

aus den verschiedenen Beweglichkeiten μ_i, die die jeweiligen Streuprozesse alleine erlauben würden, ermitteln.

Eine Berechnung des Transportverhaltens ist über die Boltzmannsche Transportgleichung möglich, die für elastische Stöße über einen Relaxationszeitansatz gelöst werden kann (siehe dazu Ref. [47]). Die Relaxationszeit τ_m gibt an, wie schnell eine durch ein äußeres elektrisches Feld hervorgerufene Nichtgleichgewichtsverteilung in den Gleichgewichtszustand relaxiert, wenn das externe Feld abgeschaltet wird. Die Größe von τ_m hängt dabei von den Potentialen der Streumechanismen und der Energieverteilung der Elektronen ab. Zur Beschreibung des dreidimensionalen Transportes in einem nichtentarteten Halbleiter kann dafür die Boltzmann-Verteilung angesetzt werden. Bei der Berechnung von τ_m ist dann über die temperaturabhängige Energieverteilung zu mitteln.

Ein zweidimensionales Elektronengas kann dagegen wie ein entarteter Halbleiter behandelt werden. Zum Transport tragen jetzt nur noch Elektronen an der Fermi-Kante bei. τ_m braucht daher nur für $E = E_F$ ausgewertet zu werden. Diese veränderte Energieabhängigkeit bedingt auch ein anderes Temperaturverhalten gegenüber dem 3D-Fall. Zudem wird τ_m über den Fermi-Impuls $k_F = \sqrt{2\,\pi\,n_s}$ auch von der Schichtladungsträgerkonzentration n_s im 2DEG abhängig (n_s bestimmt die Anzahl der möglichen Anfangs- und Endzustände, die für Streuprozesse zur Verfügung stehen). Die Beweglichkeit berechnet sich dann aus τ_m als

$$\mu = \frac{e}{m^*}\,\tau_m \tag{4.2}$$

Gitterschwingungen

- Deformationspotential-Streuung

  Die durch Phononen bewirkte Deformation des Gitterpotentials wirkt als Streupotential, welches in harmonischer Näherung dem Gradienten der Auslenkung der Atomrümpfe proportional ist. Für kleine Phononenergien (nahezu elastische Streuung!), also akustische Phononen, führt das zu einer Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit gemäß:

$$\mu_{\mathrm{ac}}^{\mathrm{3D}} \sim \frac{1}{m^{*\,5/2}\;T^{3/2}} \qquad \mu_{\mathrm{ac}}^{\mathrm{2D}} \sim \frac{1}{m^{*2}\;T\;n_s^{1/2}} \tag{4.3}$$

- Piezoelektrische Streuung

  Da III-V-Halbleiter kein Inversionszentrum haben, führt die Ladungsverschiebung durch Phononen zur Ausbildung von Dipolfeldern. Im Fall der akustischen Phononen entstehen dadurch piezoelektrische Felder, die auf die Beweglichkeit der Elektronen folgenden Einfluß haben:

$$\mu_{\text{piezo}}^{\text{3D}} \sim \frac{1}{m^{*\,3/2}\ T^{1/2}} \qquad \mu_{\text{piezo}}^{\text{2D}} \sim \frac{n_s^{\ 1/2}}{m^{*2}\ T} \tag{4.4}$$

- Polar-optische Streuung

  In polaren Halbleitern sind auch die optischen Phononen mit einem Dipolmoment verknüpft. Da ihre Energie, bei GaAs beispielsweise 36 meV, aber vergleichbar mit der Energie der Elektronen bei Raumtemperatur ist, ist die Streuung an polar-optischen Phononen inelastisch und daher nicht mit einem Relaxationszeitansatz beschreibbar. Sie kann aber über eine numerische Lösung der Boltzmann-Transportgleichung berechnet werden.

Abweichungen im Gitteraufbau

- Legierungsstreuung

  In Mischkristallen wie $Ga_{1-x}In_xAs$ führt die statistische Verteilung der Elemente lokal zu Potentialfluktuationen. Die Höhe des Streupotentials kann als Differenz der Energielücken der verschiedenen binären Verbindungen angenommen werden. Die Bedeutung dieses Streumechanismuses hängt vom Grad der Unordnung im Kristall, das heißt von der Häufigkeit des Vorkommens der einzelnen Konstituenten ab. Dies wird durch einen Faktor $x(1-x)$ berücksichtigt.

$$\mu_{\text{alloy}}^{\text{3D}} \sim \frac{1}{x\,(1-x)\ m^{*\,5/2}\ T^{1/2}} \qquad \mu_{\text{alloy}}^{\text{2D}} \sim \frac{1}{x\,(1-x)\ m^{*2}\ n_s^{\ 1/2}} \tag{4.5}$$

  Festzuhalten ist hier vor allem, daß bei einem zweidimensionalen Verhalten der Elektronen, im Gegensatz zum 3D-Fall, *keine Temperaturabhängigkeit* der Beweglichkeit mehr existiert!

- Grenzflächenrauhigkeit

  In einem quasi zweidimensionalen Elektronengas findet der Ladungsträgertransport entlang einer Grenzfläche statt. Stufen in dieser Grenzfläche, durch Fluktuationen in der Schichtdicke, entsprechen aber ebenfalls einer Form der Abweichung

vom periodischen Gitterverlauf. Eine Rauhigkeit der Grenzfläche reduziert daher die Beweglichkeit von 2D-Elektronen. Bei einer hinreichend glatten Grenzfläche, zum Beispiel für eine mittlere Höhe der Stufen von ca. zwei Monolagen mit einer lateralen Ausdehnung von 10 Å, kann dieser Effekt jedoch vernachlässigt werden [52].

- Kristalldefekte

  Als zusätzliche Streuzentren wirken natürlich auch alle Formen von Baufehlern im Kristall. Im Zusammenhang mit In-reichen GaInAs-Schichten sind dabei vor allem Fehlpassungsversetzungen von Bedeutung, über die die mechanische Spannung in Kristallen mit nicht gitterangepaßten Schichten teilweise abgebaut wird. Derartige Versetzungen entstehen jedoch erst, wenn die Spannung einen kritischen Wert überschreitet, bzw., wenn eine gewisse kritische Schichtdicke erreicht ist. In nahezu gitterangepaßten Schichten spielt dieser Mechanismus daher noch keine Rolle.

Streuung an elektrisch aktiven Störstellen

Auch der Einbau von Fremdatomen in den Kristall führt zu einer Streuung der Elektronen. Die Fremdatome können dabei sowohl neutral, wie auch ionisiert vorliegen. Die Streuung an neutralen Störstellen ist jedoch im allgemeinen vernachlässigbar. Ionisierte Störstellen wechselwirken dagegen über die Coulomb-Kraft stark mit dem Elektronengas. Dieses schirmt allerdings das Potential einer geladenen Störstelle zum Teil ab (Thomas-Fermi-Abschirmung) und schränkt so den Einflußbereich ein. Die durch Streuung an ionisierten Störstellen begrenzte Beweglichkeit μ_{ii} verhält sich letztendlich wie:

$$\mu_{\mathrm{ii}}^{3\mathrm{D}} \sim \frac{T^{1/2}}{N_i \; m^{*\,1/2}} \qquad \mu_{\mathrm{ii}}^{2\mathrm{D}} \sim \frac{n_s^{\;3/2}}{N_i \; m^{*2}} \tag{4.6}$$

N_i : Dichte der ionisierten Störstellen

Wie schon bei der Legierungsstreuung tritt auch hier im 2D-Fall *keine Temperaturabhängigkeit* auf.

In einer modulationsdotierten Heterostruktur ist zwischen Störstellen durch die Restverunreinigungen der Materialien und den entfernten Störstellen der Modulationsdotierung zu unterscheiden. So enthalten alle Schichten ein gewisses Maß an zwar unerwünschten, aber auch unvermeidlichen Restverunreinigungen, deren Dichte und Verteilung nicht über den Aufbau der Proben variiert werden kann. Da sie sich also immer auch im 2D-Kanal selbst befinden, haben sie einen direkten Einfluß auf das

Elektronengas. Die Konzentration der Störstellen im Kanal ist im Vergleich zu der Ladungsträgerdichte im 2DEG jedoch gering.[1] Im Gegensatz dazu kann der Einfluß der Dotierstoffatome bei einer Modulationsdotierung über die Dicke der undotierten Zwischenschicht gesteuert werden. Je dicker diese Schicht ist, desto geringer ist die Streuung an den entfernten Störstellen. Die Beweglichkeit der 2D-Elektronen steigt also mit zunehmender Ladungsträgerdichte und dem Abstand zwischen Dotierung und 2D-Gas. Da aber bei größerer Dicke der Zwischenschicht weniger Elektronen in den Kanal überwechseln können, sind diese Effekte gegenläufig, so daß es demnach ein Optimum für die Dicke der Zwischenschicht gibt [53].

Um die effektive Bedeutung der verschiedenen Streumechanismen für die Beweglichkeit von 2D-Elektronen zu ermitteln, müssen über die Proportionalitäten hinaus die *absoluten* Größen der einzelnen Streubeiträge berechnet werden. Die Ergebnisse derartiger Berechnungen der Beweglichkeit als Funktion der Temperatur für ein 2DEG in $Ga_{0,47}In_{0,53}As$ zeigt Abb. 4.1a. Aus diesem Diagramm ist zu entnehmen, daß für hohe Temperaturen ($T > 100$ K) die Streuung an polaroptischen Phononen der ein-

[1] Bei einer Hintergrundkonzentration im $Ga_{0,47}In_{0,53}As$ von 2×10^{15} cm^{-3} (s. Abb. 5.4) befinden sich innerhalb einer Schicht von 20 nm Dicke (ungefähre Ausdehnung der Elektronenwellenfunktion senkrecht zur Grenzfläche) nur 4×10^9 elektrisch aktive Störstellen pro cm^2. Gegenüber den üblichen Schichtladungsträgerkonzentrationen von über 4×10^{11} cm^{-2} entspricht das höchstens einem Prozent.

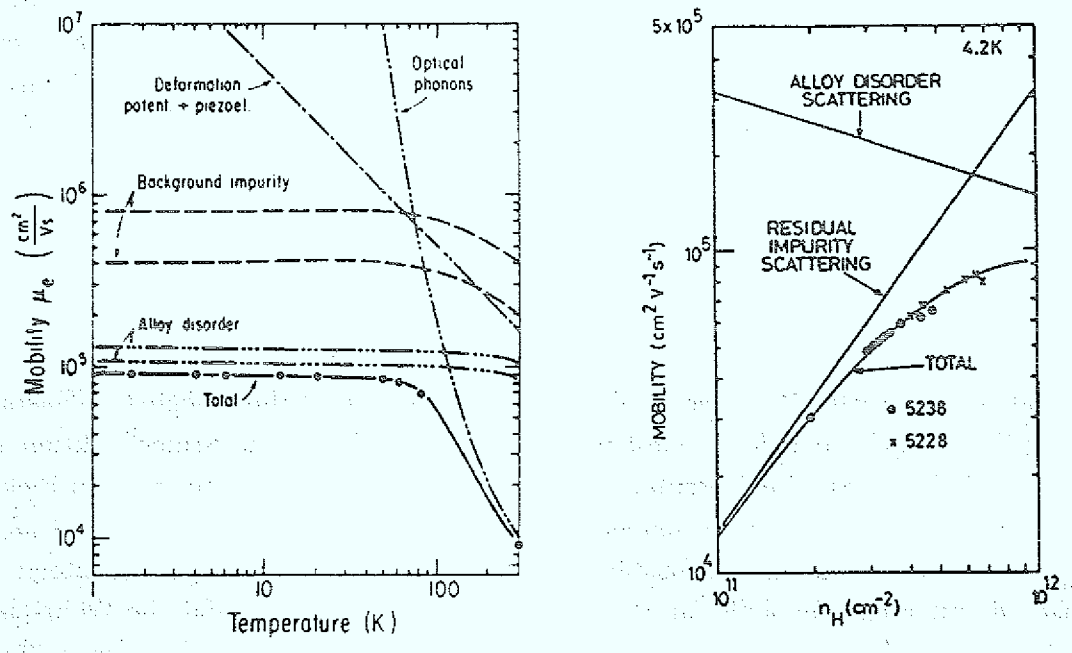


Abb. 4.1: Theoretisch berechneter Verlauf der Beweglichkeit von 2D-Elektronen als Funktion der Temperatur (a) und der Ladungsträgerdichte (b) (aus Ref. [54] bzw. [55]).

deutig dominierende Mechanismus ist. Akustische Phononen liefern dagegen über den gesamten Temperaturbereich keinen wesentlichen Beitrag. Mit fallender Temperatur werden die Phononen jedoch immer mehr ausgefroren, so daß die Beweglichkeit der Elektronen erheblich ansteigt. Unterhalb von etwa 100 K werden die Phononen von der Legierungsstreuung und der Streuung an ionisierten Störstellen als den dominierenden Streumechanismen abgelöst. Da beide nur im Fall eines *zwei*dimensionalen Transportes temperatur*unabhängig* verlaufen, ist die Beobachtung einer konstanten Beweglichkeit bei tiefen Temperaturen demnach eine Bestätigung für die Existenz eines 2DEG.

Ob bei tiefen Temperaturen die Legierungs- oder die Störstellenstreuung überwiegt, hängt von der Elektronendichte im Kanal ab, wie aus Abb. 4.1b hervorgeht (vgl. auch Gl. (4.5) und (4.6)). Bei niedrigen Dichten (um 1×10^{11} cm^{-2}) ist die Streuung an Störstellen der begrenzende Faktor, während für hohe Dichten (um 10^{12} cm^{-2} und darüber), die Legierungsstreuung eine immer stärkere Rolle spielt.

Intersubband-Streuung

Neben den bisher beschriebenen Streumechanismen existiert in niederdimensionalen Systemen noch ein weiterer Streukanal, der allerdings nichts mit der Periodizität des Gitters zu tun hat, sondern mit dem unstetigen Verlauf der Zustandsdichte verknüpft ist. In einem quasi zweidimensionalen Elektronengas, in dem die Zustände in einer Richtung (z) quantisiert sind, während sie in den beiden anderen (x-, y-Richtung) gegenüber dem 3D-Fall ungeändert bleiben, bilden die Energieeigenwerte Paraboloide, die entsprechend den Quantisierungsenergien gegeneinander verschoben sind (s. Abb. 4.2a).

$$E = \frac{\hbar^2 \, {k_x}^2}{2\, m^*} + \frac{\hbar^2 \, {k_y}^2}{2\, m^*} + E_i \tag{4.7}$$

Dabei haben alle Paraboloide die gleiche konstante Dichte möglicher Zustände ($D_i^{2\mathrm{D}}(E) = \frac{m^*}{\pi\, \hbar^2}$), so daß die Gesamtzustandsdichte $D(E)$ eine Stufenfunktion darstellt (s. Abb. 4.2b). Das bedeutet aber, daß, sobald bei einer hinreichenden Elektronendichte nicht nur das erste, sondern auch das zweite Subband besetzt wird ($E_F = \frac{\hbar^2\, \pi\, n_s}{m^*} > E_2$), die Anzahl der Zustände an der Fermi-Kante sprunghaft ansteigt. Es stehen damit mehr Zustände für Streuprozesse zur Verfügung, so daß die Wahrscheinlichkeit für die Streuung eines Elektrons durch einen der oben beschriebenen Mechanismen zunimmt und dadurch die Beweglichkeit insgesamt herabgesetzt wird. Dies wurde experimentell zum ersten Mal von Störmer et al. [56] in modulationsdotierten AlGaAs/GaAs-Heterostrukturen beobachtet.

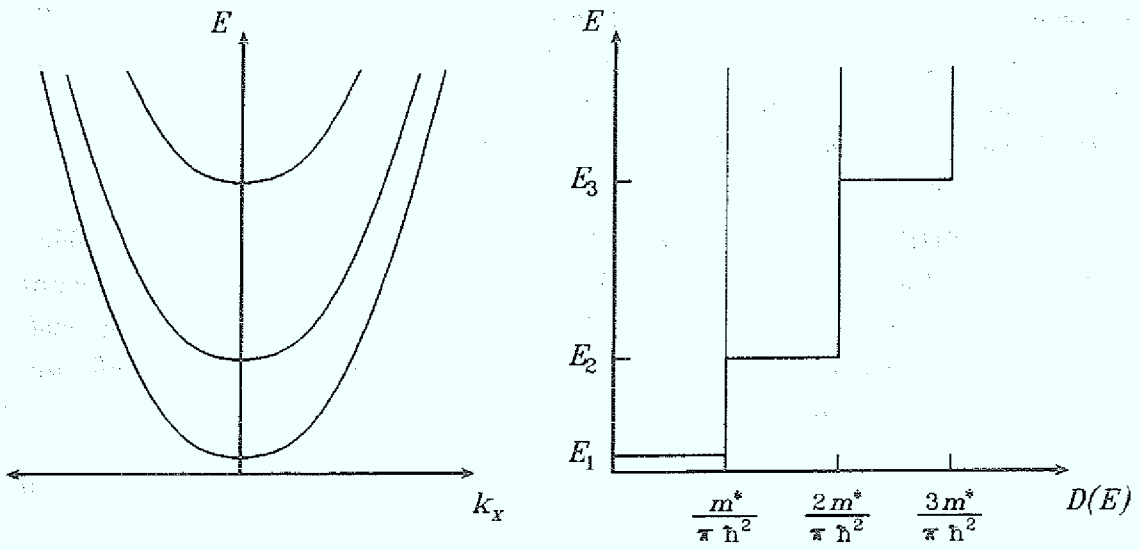


Abb. 4.2: Energieeigenwerte $E(k)$ und Zustandsdichte $D(E)$ in einem 2DEG

Als Fazit bleibt also festzuhalten, daß die Beweglichkeit von 2D-Elektronen in $Ga_{0,47}In_{0,53}As$ bei Raumtemperatur durch die Streuung an polar-optischen Phononen begrenzt wird, während bei Temperaturen unter 50 K die Legierungs- und die Störstellenstreuung die Beweglichkeit bestimmen. Diesen Mechanismen ist bei mehreren besetzten Subbändern, das heißt hinreichend hohen Dichten noch die Intersubband-Streuung überlagert.

4.2 Shubnikov-de-Haas-Oszillationen

Zur Bestimmung der Anzahl besetzter Subbänder in den 2D-Gasen müssen die Transporteigenschaften der Proben in Abhängigkeit von der Stärke des äußeren Magnetfeldes untersucht werden.

In einem Magnetfeld spaltet die Energieverteilung eines freien Elektronengases in den Richtungen senkrecht zu $\underline{B}$ in diskrete Eigenwerte auf, wodurch verschiedene Materialparameter, wie zum Beispiel die magnetische Suszeptibilität von Metallen oder die elektrische Leitfähigkeit, ein oszillierendes Verhalten gegenüber der Magnetfeldstärke zeigen (→ de-Haas-van-Alphén-Effekt, Shubnikov-de-Haas-Oszillationen). Speziell bei der Leitfähigkeit eines zweidimensionalen Elektronengases wird dabei die Periode der Oszillationen von der Ladungsträgerdichte bestimmt. Jedoch ist nicht so sehr die Gesamtladungsträgerdichte entscheidend, sondern vielmehr deren Verteilung auf die

einzelnen Subbänder. Jedes besetzte Subband führt nämlich zu einer eigenen Serie von Oszillationen mit einer der jeweiligen Elektronendichte entsprechenden Periode. Sind in einem 2DEG also mehrere Subbänder mit unterschiedlichen Dichten besetzt, so macht sich das in der Leitfähigkeit der Probe bei Variation der Magnetfeldstärke als Überlagerung von Oszillationen mit unterschiedlichen Perioden bemerkbar.

Wird ein 2DEG senkrecht zu seiner Ebene (x-y-Ebene) von einem Magnetfeld (z-Richtung) durchsetzt, so werden die Elektronen auf Zyklotron-Kreisbahnen gezwungen (gleiche effektive Massen in x- und y-Richtung vorausgesetzt) und ihre Bewegungsfreiheit wird somit weiter eingeschränkt. Die Größe der Bahn wie auch die Umlauffrequenz ω_c ($= \frac{e\,B}{m^*}$) richten sich dabei nach der Stärke des Magnetfeldes. In x- bzw. y-Richtung ist die Zyklotronbewegung der eines harmonischen Oszillators mit der Eigenfrequenz ω_c äquivalent. Die Energiezustände sind daher dementsprechend quantisiert. Da außerdem durch das Magnetfeld die Spin-Entartung aufgehoben wird, ergibt sich für die Einteilchenenergien von 2D-Elektronen in einem Magnetfeld:

$$E_{i,l,s} \;=\; E_i \;+\; (l - \frac{1}{2})\,\hbar\,\omega_c \;+\; s\,g\,\mu_B\,B \tag{4.8}$$

s : Spin-Quantenzahl, $\pm\frac{1}{2}$
g : Landé-Faktor
μ_B : Bohrsches Magneton, $\frac{e\,\hbar}{2\,m_e}$
l : Landau-Niveau
$l = 1, 2, ...$

Aus den Energieparabeln eines 2DEGs ohne Einfluß eines äußeren Magnetfeldes (Abb. 4.2) wird demnach ein vollständig diskretes Spektrum von Energieeigenwerten. Dadurch spaltet die Zustandsdichte jedes Subbandes im Idealfall in eine Reihe von δ-funktionsartigen Spitzen auf (s. Abb. 4.3; in realen Kristallen sind sie allerdings durch Streuprozesse und Defekte verbreitert). Man spricht auch von der Kondensation der Elektronen in sogenannten *Landau-Niveaus*. Unter Vernachlässigung der Spin-Aufspaltung, sie wird erst bei höheren Magnetfeldern beobachtet, haben alle Niveaus energetisch den gleichen Abstand $\hbar\,\omega_c$ voneinander. Da innerhalb eines Subbandes alle Elektronen aus einem Energiebereich der Größe $\hbar\,\omega_c$ in einem Landau-Niveau kondensieren, enthält jedes Niveau in jedem Subband

$$n_L = \hbar\,\omega_c \cdot D_i^{2D}(E) = \frac{e}{h}\,B \tag{4.9}$$

Elektronen pro Flächeneinheit. Sowohl die energetische Lage wie auch die Besetzungsdichte der Landau-Niveaus sind demnach vom Magnetfeld abhängig. Wird nun die Stärke des Magnetfeldes erhöht, so verschieben alle Niveaus zu höheren Energien.

Kreuzt dabei ein Landau-Niveau die Fermi-Energie (bzw. befindet es sich innerhalb der Aufweichungszone der Fermi-Kante), so nehmen die Elektronen in diesem Niveau am Transport teil, und die Probe zeigt elektrische Leitfähigkeit. Mit weiter steigender Magnetfeldstärke überschreitet das Landau-Niveau die Fermi-Energie und die Elektronen werden auf die unteren Niveaus umverteilt, deren Flächendichte an Zuständen ja mit B angewachsen ist. Hat das Landau-Niveau die Fermi-Kante passiert und liegt E_F zwischen zwei Niveaus, so sind für die Elektronen in den Landau-Niveaus unterhalb von E_F keine freien Zustände erreichbar, und die Leitfähigkeit verschwindet. Bei tiefen Temperaturen und in starken Magnetfeldern, in denen die Landau-Niveaus so weit voneinander separiert sind, daß nicht mehrere gleichzeitig in der Aufweichungszone liegen bzw. die verbreiterten Niveaus sich nicht überlappen, zeigt die Leitfähigkeit der Probe also periodisch Spitzen und verschwindet dazwischen. Berücksichtigt man den Tensorcharakter der Leitfähigkeit, so stellt sich heraus, daß sich dieses Verhalten auch im longitudinalen Widerstand R_{xx} (gemessen in Richtung des Stromflusses) widerspiegelt. Im Gegensatz zu den skalaren Größen verschwinden hier Leitfähigkeit (σ_{xx}) und Widerstand R_{xx} gleichzeitig.

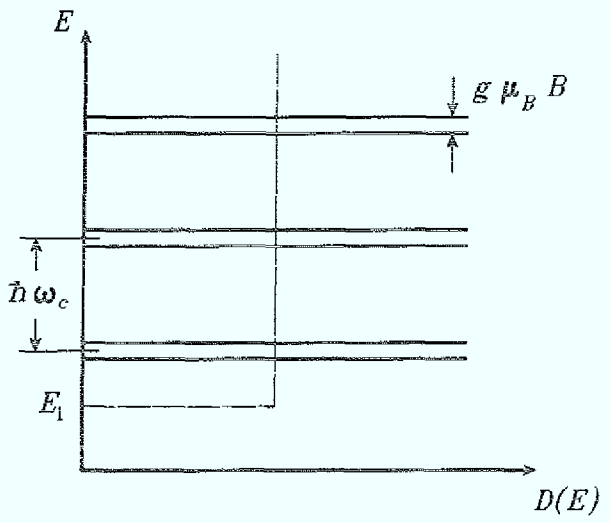


Abb. 4.3: Qualitative Darstellung der Aufspaltung der Zustandsdichte des ersten Subbandes eines 2DEGs (gestrichelt) in diskrete Landau-Niveaus durch ein äußeres Magnetfeld

Sind nun in einem 2DEG mehrere Subbänder besetzt, so ist die magnetfeldabhängige Aufspaltung der Energiezustände in allen die gleiche (s. Gl. (4.8)). Sie unterscheiden sich jedoch in der Anzahl der besetzten Landau-Niveaus, die in Subbändern höherer Ordnung geringer ist. Da aber bei einer Änderung von B die Energieverschiebung

eines Landau-Niveaus um so größer ist, je größer l ist, ergeben sich für verschiedene Subbänder auch verschiedene Perioden in den Oszillationen. Liegt die Fermi-Energie bei einer bestimmten Magnetfeldstärke B_1 gerade innerhalb eines Landau-Niveaus, oder genauer gesagt im l-ten Landau-Niveau des i-ten Subbandes, so gilt:

$$\left(l_i - \frac{1}{2}\right) \hbar\,\omega_c = \left(l_i - \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar\, e}{m^*} B_1 \stackrel{!}{=} \frac{\hbar^2}{2\,m^*} {k_F}^2 = \frac{\hbar^2}{2\,m^*}\, 2\,\pi\, n_{s_i} \tag{4.10}$$

Mit dem entsprechenden Ausdruck für die nächste Spitze ($B_1 \rightarrow B_2$, $l_i \rightarrow l_i - 1$) folgt daraus für die Periode einer Oszillationsserie:

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{1}{B_1} - \frac{1}{B_2} = \frac{2\,e}{h} \cdot \frac{1}{n_{s_i}} \tag{4.11}$$

Aus der Periodizität der Oszillationen kann also direkt die Ladungsträgerdichte im dazugehörigen Subband berechnet werden.

Kapitel 5

Wachstumsuntersuchungen an einfachen Schichten

5.1 Optimierung der Strömungsgeschwindigkeit

Das Wachstum von InP und $Ga_{0,47}In_{0,53}As$ aus TMIn, TMGa sowie AsH_3 und PH_3 mit H_2 als Trägergas ist in einer sehr ähnlichen Anlage bereits früher untersucht worden [29]. Da die Chemie in beiden Fällen dieselbe ist und nur der dort benutzte Reaktor etwas kleiner war, können von den drei wesentlichen Prozeßparametern Temperatur, Druck und Strömungsgeschwindigkeit die Depositionstemperatur (T = 640 °C), sowie der Totaldruck im Reaktor (p_{tot} = 20 mbar) übernommen werden. Die Strömungsgeschwindigkeit muß jedoch der veränderten Reaktorgeometrie angepaßt werden, um eine optimale laterale Homogenität der Abscheidung zu erreichen. Daß mit diesem Prozeß dann auch hochwertiges Material abgeschieden werden kann, wird im anschließenden Abschnitt gezeigt werden.

Die Strömungsgeschwindigkeit v_g wird über den Gesamtfluß Q_{tot} durch den Reaktor kontrolliert. Die beiden Größen sind entsprechend der Formel

$$v_g = \frac{Q_{tot} \cdot p_{atm}}{A \cdot p_{tot}} \tag{5.1}$$

miteinander verknüpft (p_{atm}: Atmosphärendruck, A: Querschnittsfläche des Liner-Rohres). Die Untersuchung zur Homogenität der Schichten wird direkt an GaInAs/InP-Einfach-Heterostrukturen vorgenommen, da so gleichzeitig die Homogenität der Schichtdicke und der Zusammensetzung kontrolliert werden kann.

Im oberen Teil der Abb. 5.1 ist die relative Veränderung der Schichtdicke in der Flußrichtung der Gase über die Länge eines Viertels eines 2"-Wafers (in dieser Arbeit die Standardgröße der Proben) hinweg dargestellt. Für eine Strömungsgeschwindigkeit von $v_g = 1,39\,\mathrm{m/s}$ ist eine starke Inhomogenität zu erkennen, die im mittleren Bereich einen nahezu linearen Abfall der Schichtdicke in Flußrichtung und an den Rändern Überhöhungen zeigt. Selbst wenn man an den Rändern einige Millimeter unberücksichtigt läßt, bleibt eine Abnahme der Schichtdicke von 8,5 % über eine Strecke von 15 mm.

Nach dem Grenzschichtmodell ist die Wachstumsrate von der Höhe der Konzentrationsgrenzschicht abhängig. Ihr Verlauf muß also abgeflacht werden, um eine bessere laterale Homogenität zu erhalten. Dies läßt sich durch eine Erhöhung der Strömungsgeschwindigkeit erreichen. Wie die experimentellen Daten zeigen, führt eine Verdoppelung von v_g tatsächlich zu einer leichten Verbesserung der Homogenität der Schichtdicke, aber der Abfall im mittleren Bereich beträgt immer noch 6,7 %. Da die Strömungsgeschwindigkeit nur wurzelförmig in die Höhe der Grenzschicht eingeht, ist nach diesem einfachen Modell bei einer Änderung von v_g um einen Faktor 2 auch keine wesentlich größere Änderung zu erwarten. Aufschlußreicher ist da schon eine Betrachtung der Zusammensetzung der Schichten, deren Verlauf für verschiedene v_g im unteren Teil von Abb. 5.1 dargestellt ist.

Wie der Kurvenverlauf für $v_g = 1,39\,\mathrm{m/s}$ zeigt, ist die Zusammensetzung im mittleren Bereich zwischen 5 und 15 mm nahezu konstant, während sowohl davor wie auch dahinter ein erhöhter Ga-Gehalt gemessen wird. Diese Beobachtung wird übrigens nicht nur in Flußrichtung gemacht, sondern gilt für alle Richtungen, das heißt, alle Ränder einer Probe zeigen eine Ga-Anreicherung. Mit höherem v_g verschieben sich jedoch die Gewichte, wie aus der Abbildung zu erkennen ist. Steigende Strömungsgeschwindigkeiten führen zu einer Ausdehnung des Ga-reichen Gebietes im vorderen Teil der Probe, während die Inhomogenität im hinteren Teil kleiner wird.

Dies alles läßt folgende Vermutung zu: Die vollständige Zerlegung von TMGa läuft, wie bereits in Abschnitt 2.1 angesprochen, über eine katalytische Reaktion mit einer Oberfläche ab. Diese findet offenbar bevorzugt auf dem Wafer und weniger auf dem Suszeptor statt. Nicht vollständig zerlegte Ga-Spezies können daher über die Suszeptoroberfläche zum Rand des Wafers hin diffundieren, um dort dann endgültig zerlegt zu werden. Durch eine höhere Gasgeschwindigkeit würde eine derartige Diffusion in Flußrichtung erleichtert und in entgegengesetzter Richtung gehemmt, was die experimentellen Beobachtungen erklären würde. Ein solcher Vorgang würde außerdem durch das höhere Materialangebot die Überhöhungen an den Rändern erklären.

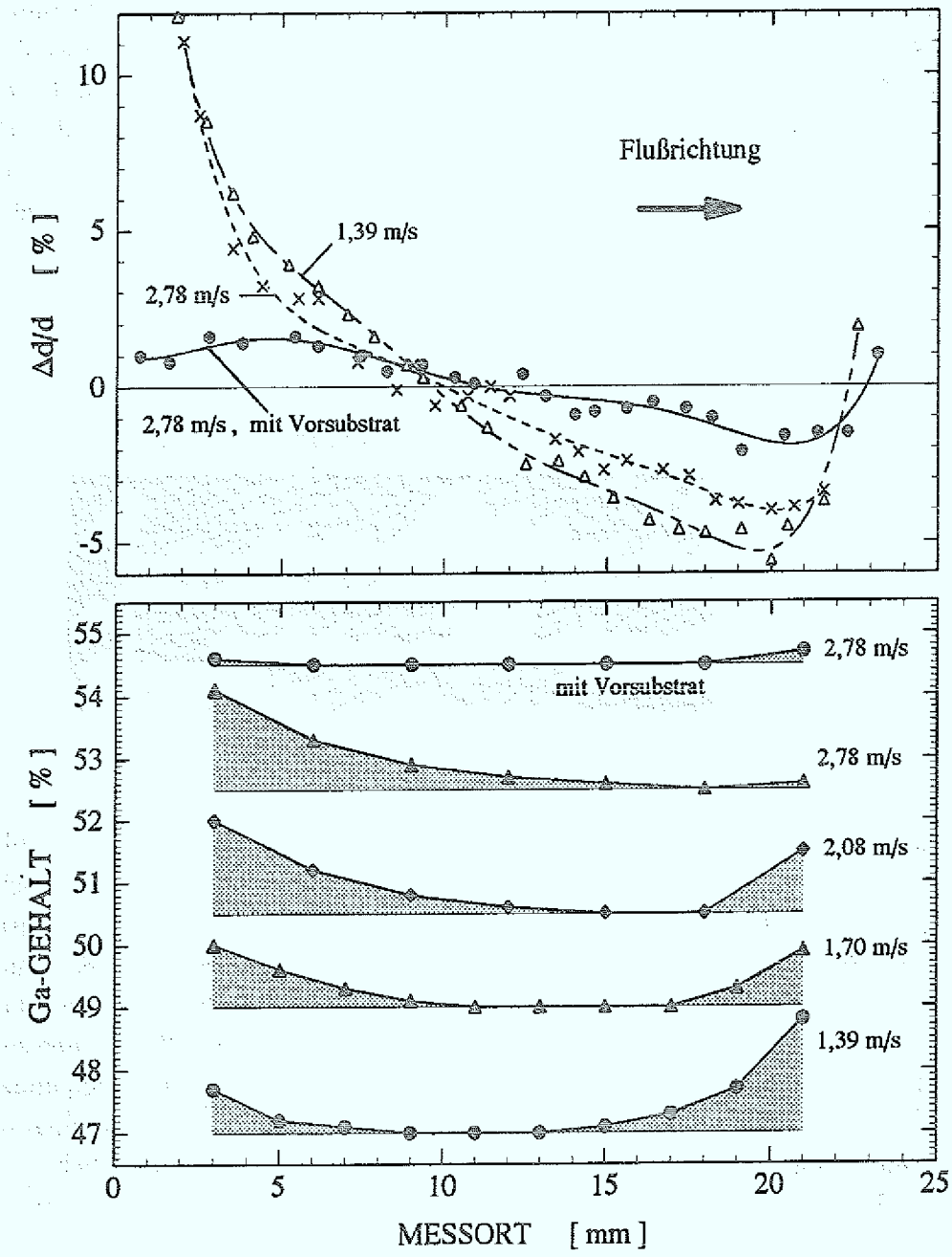


Abb. 5.1: Variation der Schichtdicke und der Zusammensetzung von GaInAs-Schichten in Flußrichtung für verschiedene Strömungsgeschwindigkeiten über ein Viertel eines 2"-Wafers. $\Delta d/d$ bezeichnet die lokale Abweichung von der mittleren Schichtdicke. Die Kurven der Zusammensetzungen für die verschiedenen Strömungsgeschwindigkeiten sind der Übersichtlichkeit halber gegeneinander verschoben. Die Schraffuren kennzeichnen die Ga-reichen Gebiete.

Daraus ergibt sich als Konsequenz für die Wahl der Strömungsgeschwindigkeit: Da eine Strömungsgeschwindigkeit von 2,78 m/s eine etwas bessere Homogenität in der Schichtdicke ergibt und eine Ga-Anreicherung nur im vorderen Bereich der Probe beobachtet wird, muß bei diesem Wert für v_g nur die Ga-Zerlegung vor der Probe gesteigert werden. Dies läßt sich am einfachsten dadurch erreichen, daß vor die eigentliche Probe ein weiteres Stück Substratmaterial gelegt wird (s. Abb. 5.2), das für eine gleichmäßigere Zerlegung sorgt und Inhomogenitäten abfängt. Wie aus Abb. 5.1 zu erkennen ist, wird durch diesen kleinen Trick die Zusammensetzung über die gesamte Probe hinweg nahezu konstant und sogar die Schichtdicke weicht nirgendwo um mehr als 1,5 % vom Mittelwert ab.

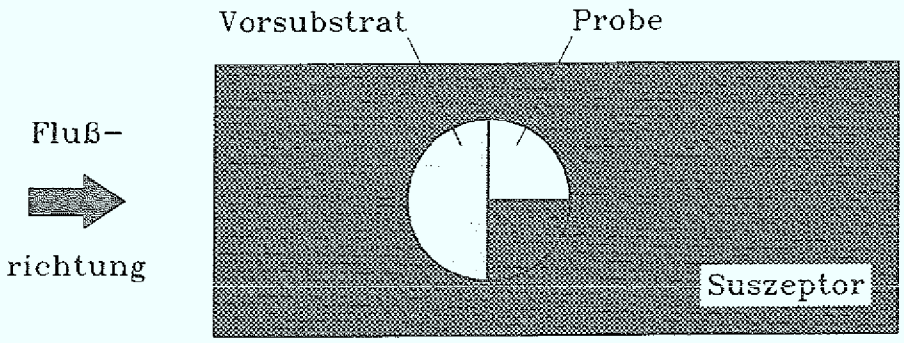


Abb. 5.2: Anordnung von Probe und Vorsubstrat auf dem Suszeptor

Da das Vorsubstrat über viele Versuche immer auf dem Suszeptor liegen bleiben kann, erfordert diese Methode nur geringfügigen Mehraufwand. Sie hat jedoch den Nachteil, daß sich so höchstens halbe Wafer beschichten lassen, was für eine industrielle Produktion natürlich nicht tragbar wäre. In diesem Fall wäre eine Verbesserung der Homogenität durch Rotation des Wafers (wie etwa von Woelk [57] oder auch Frijlink [58] gezeigt) günstiger. Da die hier beschichteten Proben aber im allgemeinen sowieso nur Viertel eines Wafers sind, ist die Verwendung eines Vorsubstrates der einfachste Weg zur Erreichung guter Homogenitäten. Für die drei wesentlichen Prozeßparameter werden daher die in Tab. 5.1 zusammengefaßten Werte benutzt. Zusätzlich sind hier auch noch die V/III-Verhältnisse für die Deposition von InP und GaInAs angegeben.

Tabelle 5.1: Optimierter Parametersatz für die Abscheidung von InP und GaInAs unter Verwendung eines Vorsubstrates

T	p_{tot}	v_g	V/III-Verhältnisse	
°C	hPa	m/s	InP	GaInAs
640	20	2,78	470	150

5.2 Materialqualität undotierter Schichten

Am Beispiel einzelner reiner InP- bzw. gitterangepaßter GaInAs-Schichten soll nun gezeigt werden, daß mit der in Abschnitt 2.4 beschriebenen Prozeßführung unter den oben angegebenen Parametern qualitativ hochwertige Schichten deponiert werden können.

So ist zunächst einmal die Oberfläche sowohl der InP- wie auch der GaInAs-Schichten grundsätzlich spiegelnd und glatt und zeigt bei 100facher Vergrößerung mit einem Lichtmikroskop im Dunkelfeld meist weniger als 100 Defekte pro cm^2.

InP

Die Reinheit der immer n-leitenden InP-Schichten wurde durch Messungen des Hall-Effektes bestimmt. An einer $2,4\,\mu m$ dicken Schicht wurden dabei folgende Werte für die Konzentration der Elektronen und ihre Beweglichkeit bei Raumtemperatur und 77 K gefunden:

$$n_{300} = 4,0 \times 10^{14}\,cm^{-3} \qquad \mu_{300} = 5.000\ cm^2/Vs$$
$$n_{77} = 3,5 \times 10^{14}\,cm^{-3} \qquad \mu_{77} = 112.000\ cm^2/Vs$$

Im Vergleich mit den Ergebnissen anderer Gruppen sind dies durchaus gute Werte, denn typische Beweglichkeiten für hochreines InP liegen bei Dichten der Hintergrunddotierung von einigen $10^{14}\,cm^{-3}$ für Raumtemperatur bei gut 5.000 cm^2/Vs und bei 77 K im Bereich von 70.000 bis 140.000 cm^2/Vs [59, 60]. Neben diesen experimentellen Daten existieren auch theoretische Untersuchungen zu den Transporteigenschaften von InP. So haben etwa Walukiewicz et al. [61] die Beweglichkeit von Elektronen in n-leitendem InP als Funktion der Dichte der freien Ladungsträger und des Kompensationsgrades (N_{A^-} / N_{D^+}) berechnet. Danach ist für eine Ladungsträgerkonzentration von $3,5 \times 10^{14}\,cm^{-3}$ höchstens, wenn also keinerlei Kompensation vorliegt, eine Beweglichkeit von 110.000 cm^2/Vs zu erreichen. Das hier abgeschiedene InP kann demnach keine wesentlichen Mengen an Akzeptoren enthalten.

Die hohe Reinheit des InP spiegelt sich auch im Photolumineszenz-Spektrum wider, das in Abb. 5.3 dargestellt ist. Durch Vergleich mit Daten aus der Literatur können den Peaks die entsprechenden Übergänge zugeordnet werden [62, 63]. So sind neben dem freien Exziton bei $1,4182\,eV$ vier weitere Peaks im Bereich von $1,4168$ bis $1,4179eV$ zu erkennen. Bei diesen handelt es sich um an neutrale Donatoren gebundene Exzitonen in angeregten Zuständen. Die Aufspaltung entsteht durch die verschiedenen Drehimpulszustände des Loches mit $j = 3/2$ am Γ-Punkt [62]. Der erste Peak dieser Serie hat dabei eine Halbwertsbreite von nur $0,19\,meV$, was für eine sehr gute kristalline Qualität spricht. Die Natur der breiten Struktur bei $1,4163\,eV$ ist nicht eindeutig

geklärt. Es könnte sich dabei um einen (D^+, X)- oder einen (D^0, h)-Übergang handeln. Auf jeden Fall wird unterhalb von 1,416 eV, das heißt im Energiebereich akzeptorgebundener Exzitonen, kein weiterer Peak mehr beobachtet. Ebenso werden auch keine nicht-exzitonischen Übergänge (wie (C, A) oder (D, A)) gefunden. Die Schichten enthalten demnach keine Akzeptor-Störstellen, insbesondere aber auch keinen als Akzeptor eingebauten Kohlenstoff. Bei dem hier abgeschiedenen InP kann man also tatsächlich von hochreinem Material mit sehr guter kristalliner Qualität sprechen.

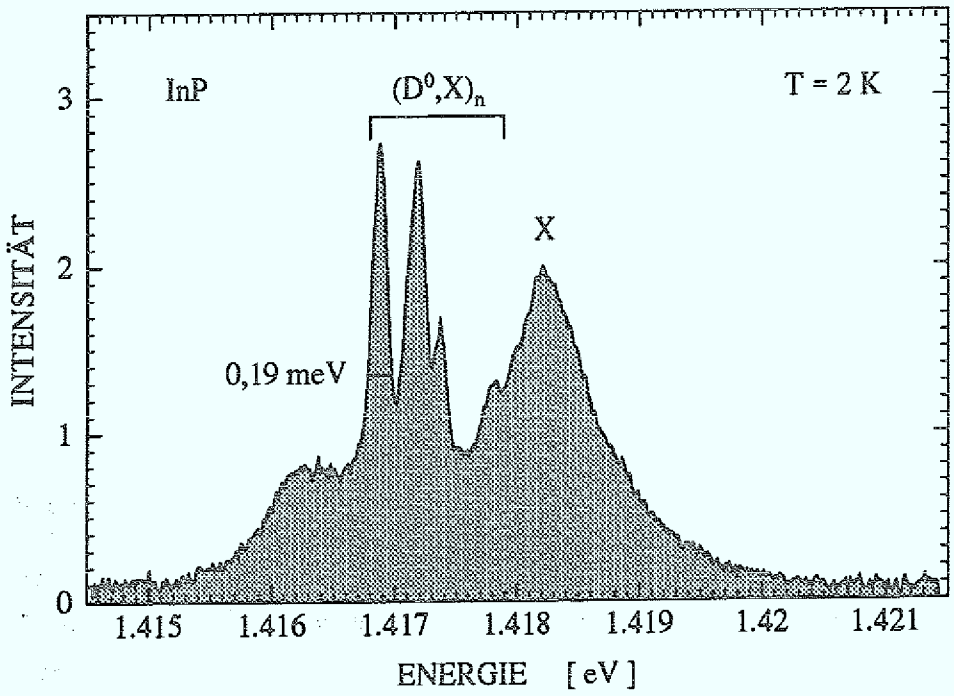


Abb. 5.3: Photolumineszenz-Spektrum von InP bei 2 K

$Ga_{0,47}In_{0,53}As$

Die Qualität des deponierten GaInAs wurde in regelmäßigen Abständen kontrolliert. Da TMIn bei Raumtemperatur als pulverförmiger Feststoff vorliegt, dessen Oberfläche mit fortschreitendem Verbrauch immer kleiner wird, ist die mit dem durchgeleiteten Trägergas entnommene Menge über längere Zeiträume gesehen nicht so stabil wie bei einer Flüssigkeit, etwa TMGa. Zur Feinabstimmung wurde daher die Zusammensetzung immer wieder nachgemessen, um den In-Anteil bei 53,1 % zu halten. Neben der Komposition wurden dabei auch stets die elektrischen Daten der üblicherweise 1 μm dicken Schichten überprüpft. Wie eine Auswahl der Ergebnisse in Abb. 5.4 zeigt, konnte über den hier dokumentierten Zeitraum von etwa 2 Jahren trotz der Verwendung von Ausgangsstoffen verschiedener Hersteller gleichbleibend reines Material abgeschieden werden. Die Hintergrundkonzentration freier Ladungsträger der nomi-

nell undotierten und nahezu gitterangepaßten Schichten ($x_{In} = 53,3\ \% \pm 1\ \%$) lag im allgemeinen unter 2×10^{15} cm^{-3}, so daß Raumtemperaturbeweglichkeiten von über 11.000 cm^2/Vs erreicht werden konnten. Besonders aber die Beweglichkeit bei 77 K lagen mit deutlich über 90.000 cm^2/Vs recht hoch.

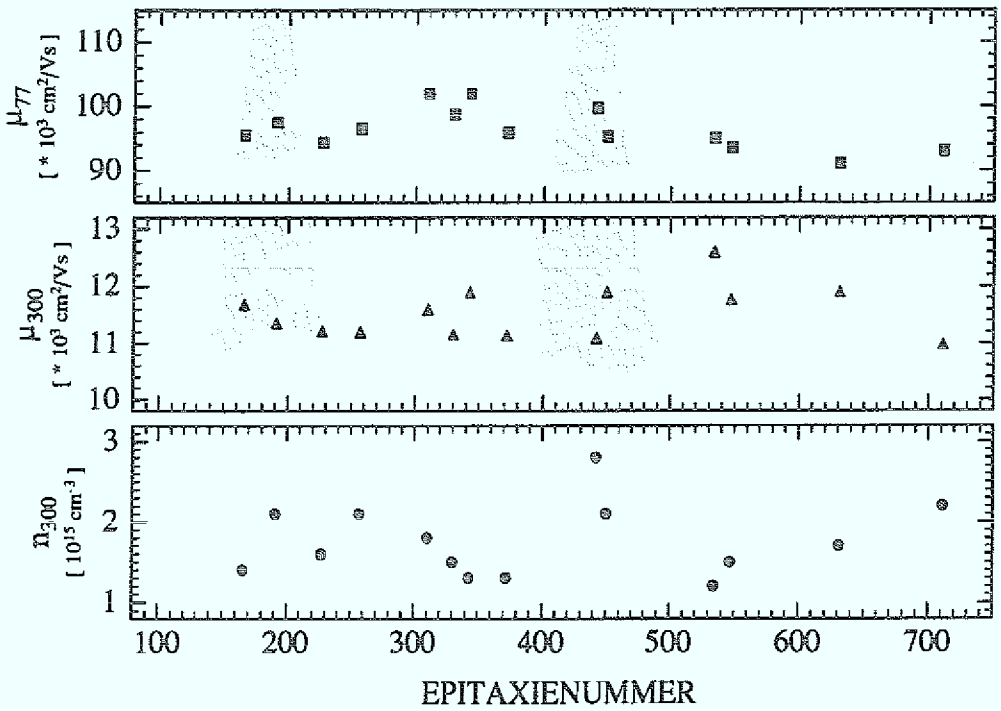


Abb. 5.4: Elektrische Daten einer Auswahl nominell undotierter GaInAs-Schichten. Aufgetragen ist die Hintergrundkonzentration an freien Ladungsträgern bei Raumtemperatur (n_{300}) sowie die Beweglichkeiten bei 300 und 77 K (μ_{300}, μ_{77}) gegen die laufende Nummer der Epitaxie.

Die Zusammensetzung zeigt neben der im vorigen Abschnitt diskutierten lateralen Homogenität auch eine sehr gute vertikale Homogenität, wie aus dem Röntgendiffraktogramm in Abb. 5.5 hervorgeht. Trotz der starken Abhängigkeit der Gitterkonstanten von der Zusammensetzung des GaInAs ist die Halbwertsbreite des GaInAs-Peaks vergleichbar mit der des InP-Substrates. Darüber hinaus entspricht der Wert von 21,8" für die knapp 1 μm dicke Schicht schon beinahe der für diese endliche Schichtdicke theoretisch erreichbaren unteren Grenze von 20". Schwankungen in der Zusammensetzung während der Epitaxie, die zu einer Verbreiterung des GaInAs-Peaks führen würden, treten demnach nicht auf. Aber auch zwischen verschiedenen Epitaxien liefert die Anlage stabile Ergebnisse, so daß Reproduzierbarkeit gewährleistet ist.

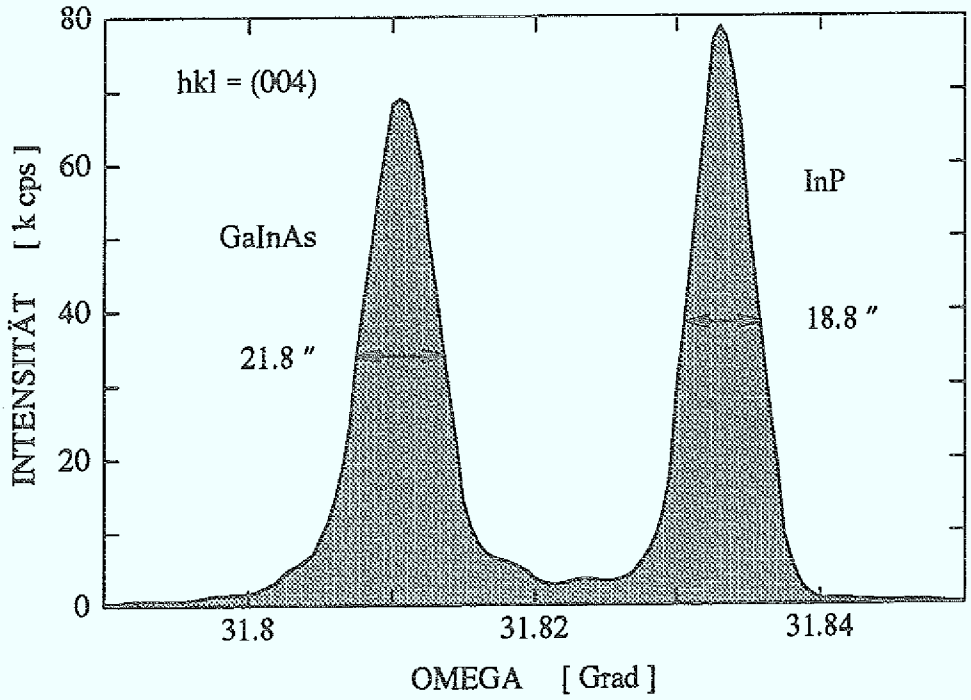


Abb. 5.5: Röntgendiffraktogramm einer 1 μm dicken GaInAs-Schicht

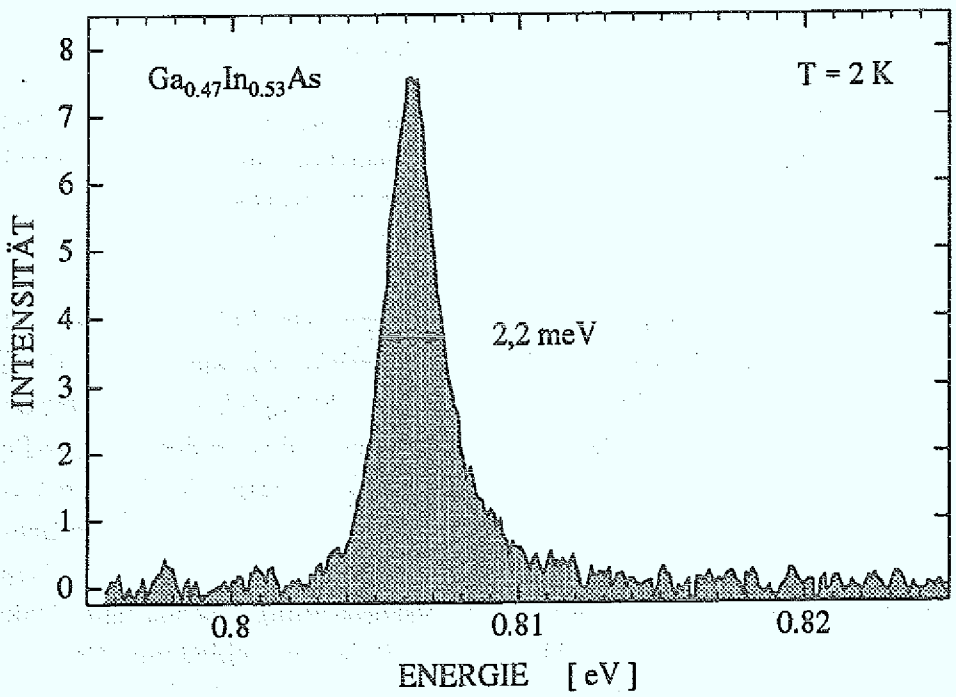


Abb. 5.6: Photolumineszenz-Spektrum von GaInAs bei 2 K

Die gute kristalline Qualität und die Reinheit des Materials bestätigt sich auch in den optischen Messungen. Abb. 5.6 zeigt das PL-Spektrum einer GaInAs-Schicht. Für einen ternären Halbleiter wie GaInAs stellt die Halbwertsbreite von 2,2 meV einen guten Wert dar, da anders als beim InP die mit einer statistischen Verteilung der beiden binären Konstituenten GaAs und InAs verbundenen Potentialfluktuationen zu einer Verbreiterung der exzitonischen Linien führen.

Alles in allem kann also festgehalten werden, daß es sich bei den hier abgeschiedenen Materialien sowohl beim InP, wie auch beim GaInAs um hochreines Material von sehr guter kristalliner Qualität mit hohen Elektronenbeweglichkeiten handelt.

5.3 Dotierung von InP und GaInAs

Als Ausgangsmaterial für die Herstellung von Bauelementen genügen hochreine Schichten alleine nicht. Unabdingbare Voraussetzung ist zusätzlich die exakte Kontrolle der elektrischen Eigenschaften der Materialien. Dies erfordert die Möglichkeit zur gezielten n- und p-Dotierung der abzuscheidenden Schichten. Bei der Auswahl geeigneter Dotierelemente sind allerdings eine Reihe von Anforderungen zu berücksichtigen. So muß zunächst einmal die zum Einsatz kommende Ausgangsverbindung einerseits stabil genug sein, um überhaupt eine effektive Dotierung zu ermöglichen, andererseits aber noch so stabil sein, daß nicht durch einen vorzeitigen Zerfall (→ Vorausfälle) die Dotierung der deponierten Schicht lateral inhomogen wird. Für die verschiedenen Anwendungszwecke muß die Höhe der Dotierung über einen weiten Bereich von ca. $10^{16} - 10^{19}\,\mathrm{cm}^{-3}$ variiert werden können, was eine entsprechende Löslichkeit voraussetzt. Dabei sollte zwischen dem Angebot des Quellenmaterials und der Menge der in den Kristall eingebauten Dotieratome ein linearer Zusammenhang bestehen, um eine exakte Kontrollierbarkeit zu gewährleisten. Die Umsetzung des Konzeptes der Modulationsdotierung erfordert außerdem scharf definierte Dotierungsprofile, die nur realisierbar sind, wenn die Elemente möglichst keine oder zumindest doch nur eine geringfügige Diffusion im Halbleiter zeigen. Darüber hinaus darf eine solche bewußte Verunreinigung, wie es das Einbringen eines Dotierstoffes darstellt, keine Langzeitwirkung auf den Depositionsprozeß haben (→ Memory-Effekt), damit im Anschluß an eine dotierte Schicht sofort auch wieder reines Material abgeschieden werden kann.

Die Eigenschaften verschiedener Dotierstoffe unterscheiden sich in diesen Punkten zum Teil erheblich. Im Rahmen dieser Arbeit sollen jedoch nicht die Merkmale verschiedener Dotierelemente in Bezug auf ihren Einbau während des Wachstums, ihr Diffusionsverhalten im Kristall oder ihre elektrische Aktivität untersucht werden, sondern es geht vielmehr nur darum, eine Arbeitsgrundlage für gezielte Dotierungen in Hetero-

strukturen zu schaffen. Eine umfassende Darstellung über alle Aspekte des Dotierens von III-V-Halbleitern findet sich in dem Buch *"Doping in III-V-Semiconductors"* von E. F. Schubert [64].

5.3.1 n-Dotierung

Auswahl des Dotierstoffes

Flache Donatoren bilden in III-V-Halbleitern sowohl das Gruppe-IV-Element Silizium, da es überwiegend auf Gruppe-III-Gitterplätzen eingebaut wird, wie auch die Elemente Schwefel, Selen und Tellur aus der sechsten Hauptgruppe des Periodensystems, die Plätze im Gruppe-V-Untergitter besetzen. Als ein Kriterium für die Auswahl des Dotierstoffes kann der Dampfdruck der Elemente herangezogen werden. Da sich während des Depositionsprozesses die Stoffe nicht nur auf dem Kristall, sondern auch auf den umgebenden Wänden niederschlagen können, ist hier ein möglichst niedriger Dampfdruck günstig, da dann ein Wiederabdampfen sehr unwahrscheinlich ist und somit kein Memory-Effekt auftritt. Der Dampfdruck des Siliziums beträgt bei der Wachstumstemperatur von 640 °C etwa 10^{-5} mbar. In der Reihe der Gruppe-VI-Elemente steigt er vom Tellur mit 13 mbar mit fallendem Atomgewicht über Selen (533 mbar) zum Schwefel an, der einen besonders hohen Dampfdruck von 13 bar bei 640 °C besitzt.

Die Verwendung von Silizium hat entsprechend dem niedrigen Dampfdruck keine Memory-Effekte zur Folge. Außerdem diffundiert es nur langsam in den Kristallen und die Neigung zur Segregation während des Wachstums ist gering. Ein Nachteil des Siliziums ist allerdings, daß es als Gruppe-IV-Element amphoter ist. Dadurch kommt es zumindest bei hohen Konzentrationen zu einer Autokompensation. Dennoch ist Silizium, insbesondere bei der MBE von GaAs und AlGaAs, ein vielfach eingesetzter n-Dotierer mit dem sich typischerweise Konzentrationen von bis zu ca. 5×10^{18} cm^{-3} erreichen lassen. Bei der Gasphasenepitaxie wird Silizium häufig als Silan (SiH_4) angeboten. Diese Verbindung ist thermisch aber sehr stabil, so daß der Einbau von Si-Atomen in den Kristall durch die Pyrolyse des Silans bestimmt wird. Die Höhe der Dotierung ist daher stark von der Depositionstemperatur abhängig [65].

Die Elemente Selen und Tellur können zwar beide als n-Dotierstoffe eingesetzt werden, doch sowohl bei der Verwendung von H_2Se wie auch von Diethyltellur wurden Memory-Effekte beobachtet [66, 67]. Hervorgerufen wird dies wahrscheinlich durch die Adsorption der Ausgangsverbindungen an den Edelstahloberflächen der Gasleitungen, sowie von Zerlegungsprodukten an den Quarzwänden des Reaktors.

Gegenüber den anderen Elementen hat Schwefel einen derart hohen Dampfdruck, daß eine Abscheidung auf den Wänden nicht zu erwarten ist. Von Memory-Effekten beim Einsatz von H_2S in der MOVPE wurde auch bisher nicht berichtet. Allerdings ist wie beim Silan die Konzentration des Schwefels im Kristall von der Wachstumstemperatur abhängig [68]. In diesem Fall ist die Ursache dafür aber nicht die Stabilität der Ausgangsverbindung, sondern aufgrund seines hohen Dampfdruckes dampft der Schwefel von der heißen Kristalloberfläche ab. Für die hier angestrebte Anwendung ist aber vor allem wichtig, daß mit Schwefel in InP sehr scharfe Dotierungsprofile erzeugt werden können. So konnten Wenchao et al. [69] mittels Magnetotransportmessungen an InP-Schichten, in die jeweils eine nur 5 bzw. 10 nm dicke, aber hoch mit Schwefel dotierte Schicht ($n > 10^{18}$ cm^{-3}) eingebettet war, die Existenz eines zweidimensionalen Elektronengases nachweisen. Der Potentialverlauf in der Probe mit der dünneren dotierten Schicht entsprach dabei sogar dem einer δ-artigen Dotierung. Daher kann bei der Dotierung von InP mit Schwefel die Verschmierung eines Dotierungsprofils weitestgehend ausgeschlossen werden. Aufgrund dieser positiven Erfahrungen wird im folgenden Schwefel in der Verbindung H_2S als Dotierstoff für n-Dotierungen verwendet.

Experimentelle Ergebnisse

Zur Bestimmung des Verhältnisses zwischen dem Angebot an Dotierstoff in der Gasphase und der Ladungsträgerkonzentration im Festkörper werden $1,2$ μm dicke, gleichmäßig dotierte InP- und GaInAs-Schichten abgeschieden und mittels Hall-Effekt-Messungen analysiert. In Abb. 5.7 ist die bei Raumtemperatur gemessene Elektronenkonzentration als Funktion des H_2S-Angebotes aufgetragen. InP kann demnach von 10^{16} bis 2×10^{19} cm^{-3} dotiert werden, wo sich dann langsam eine Sättigung andeutet. Doch auch unterhalb des Sättigungsbereiches ($n \leq 8 \times 10^{18}$ cm^{-3}) steigt die Elektronenkonzentration leicht sublinear mit dem Dotierstoffangebot, wie aus der Steigung der Ausgleichsgeraden zu entnehmen ist. Ähnliches wurde auch für die Dotierung von InP mit Si gefunden [70]. Die Abweichung des Meßpunktes bei $p_{H_2S} = 8 \times 10^{-4}$ Pa von dieser Geraden ist auf die Verarmungsrandschichten an der Oberfläche und am Übergang zum Substrat zurückzuführen. Eine Abschätzung ihrer Ausdehnung gemäß

$$d_{depl} = \sqrt{\frac{2\,\epsilon_0\,\epsilon_r\,\phi_B}{n\,e}} \tag{5.2}$$

ϵ_r : Dielektrizitätskonstante, $\epsilon_r(\mathrm{InP}) = 12{,}56$
ϕ_B : Barrierenhöhe, $\phi_B(\mathrm{InP}) = 0,67$ V
(Mid-Gap-Pinning angenommen)

liefert für die gemessene Ladungsträgerdichte von $1,1 \times 10^{16}$ cm^{-3} einen Wert von immerhin $0,3\,\mu$m. Das heißt, daß die den Strom tragende Schicht wesentlich dünner ist als die bei der Hall-Messung angegebene Dicke des abgeschiedenen dotierten InP. Eine Korrektur der Elektronenkonzentration auf die effektive Schichtdicke ergibt einen Wert von $1,8 \times 10^{16}$ cm^{-3}, der sehr gut mit dem Wert der Ausgleichsgeraden an dieser Stelle von $1,9 \times 10^{16}$ cm^{-3} übereinstimmt. In dem für Modulationsdotierungen interessanten Bereich um 1×10^{18} cm^{-3} kann der Einfluß der Verarmungsrandschicht vernachlässigt werden, da ihre Dicke hier nur noch ca. 30 nm beträgt.

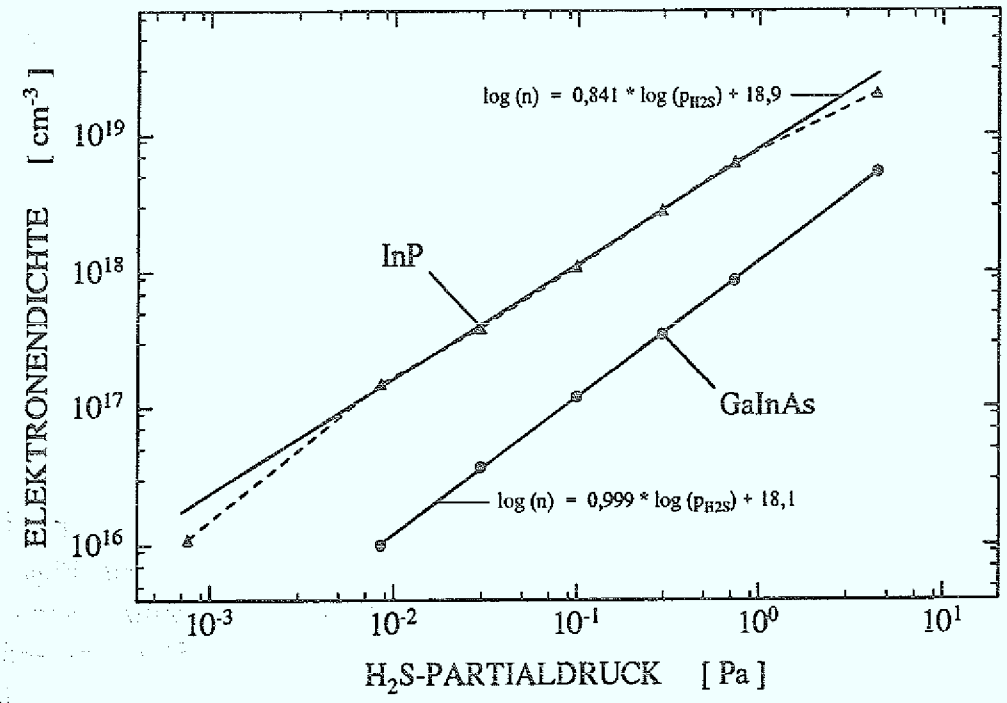


Abb. 5.7: Elektronenkonzentration in InP und GaInAs bei Raumtemperatur als Funktion des H_2S-Angebotes

In GaInAs ist die Elektronenkonzentration eine exakt lineare Funktion des H_2S-Angebotes, wie die Steigung der Ausgleichgeraden in Abb. 5.7 belegt. Der nutzbare Dotierungsbereich erstreckt sich von 1×10^{16} bis 5×10^{18} cm^{-3}, wobei sich allerdings noch keine Sättigung andeutet. Höhere H_2S-Partialdrücke zur Steigerung der Dotierung können jedoch mit der bestehenden Konfiguration der Anlage nicht eingestellt werden. Dies ist für die praktische Arbeit aber auch nicht unbedingt erforderlich, da n-Dotierungen im GaInAs bis zu einigen 10^{18} cm^{-3}, zum Beispiel für niederohmige Kontaktschichten, durchaus ausreichend sind.

5.3.2 p-Dotierung

Auswahl des Dotierstoffes

Zur p-Dotierung von III-V-Halbleitern kommen vor allem die Elemente der zweiten Haupt- und Nebengruppe des Periodensystems, darunter insbesondere Beryllium und Magnesium, sowie Zink und Cadmium, in Frage.[1] Diese Elemente werden auf den Plätzen des Gruppe-III-Untergitters eingebaut und bilden allesamt flache Akzeptoren. Der Dampfdruck dieser Elemente bei der Wachstumstemperatur von 640 °C nimmt vom Beryllium (ca. 10^{-10} mbar) über Magnesium (2 mbar) und Zink (30 mbar) zum Cadmium (200 mbar) hin zu (Dampfdrücke aus Ref. [73]).

Beryllium ist aufgrund seines extrem niedrigen Dampfdruckes und wegen seiner geringen Diffusion als Dotierstoff sehr geeignet und wird in MBE-Systemen auch häufig verwendet. Ein entscheidender Nachteil ist jedoch, daß Beryllium und seine Verbindungen in außergewöhnlich hohem Maße toxisch sind. In einem Gasphasenprozeß sollte daher auf seine Verwendung verzichtet werden.

Gegenüber Beryllium sind metallorganische Magnesium-Verbindungen in Bezug auf ihre Giftigkeit wesentlich unkritischer. Mit dem Ausgangsstoff Biscyclopentadienyl-Magnesium (Cp_2Mg, $(C_5H_5)_2Mg$) als Mg-Quelle konnten außerdem in GaAs und AlGaAs Löcherkonzentrationen von über 10^{19} cm^{-3} erreicht werden [74, 75]. Auch in $Ga_{0,47}In_{0,53}As$ liessen sich damit ähnlich hohe Dotierungen erzeugen [29]. Die Untersuchungen zeigten jedoch, daß bei der Depositionstemperatur von 640 °C das Einbauverhalten des Magnesiums extrem überlinear ist. Dies macht eine exakte Kontrolle der Löcherkonzentration in GaInAs nahezu unmöglich. Desweiteren waren mit Magnesium dotierte InP-Schichten lediglich hochkompensiert; eine p-Leitung konnte nicht erreicht werden. Magnesium scheidet demnach als p-Dotierstoff bei der MOVPE von GaInAs und InP ebenfalls aus.

Demgegenüber haben sich Zink und Cadmium als geeignetere Dotierstoffe herausgestellt [30, 70]. Doch auch ihre Verwendung ist nicht frei von Schwierigkeiten. So wurde beispielsweise bei der Dotierung von InP beobachtet, daß häufig die Mehrheit der eingebrachten Dotierstoffatome gar nicht elektrisch aktiv ist [76, 77] und damit die Konzentration der Löcher wesentlich geringer ist als die Dichte der im Kristall be-

[1] Für die p-Dotierung speziell von GaAs ist neben diesen Elementen auch Kohlenstoff ein sehr attraktiver p-Dotierer. Mit Kohlenstoff können extrem hohe p-Dotierungen von 10^{20} cm^{-3} und mehr erzielt werden [71, 22, 72]. Dabei ist gleichzeitig die Diffusionskonstante extrem klein, was sehr scharfe Dotierstoffprofile ermöglicht. Die Eigenschaften des Kohlenstoffs als Dotierelement in III-V-Halbleitern sind jedoch leider sehr stark von der Zusammensetzung des Kristalls abhängig. So führt sein Einbau in $Ga_{0,47}In_{0,53}As$ lediglich zu stark kompensierten Schichten, während er in InAs sogar als Donator wirkt. Da außerdem auch InP kaum mit Kohlenstoff p-dotiert werden kann, ist er im Rahmen dieser Arbeit als p-Dotierstoff nicht weiter von Interesse.

findlichen Fremdatome. Erst durch einen nachträglichen Temperprozeß läßt sich eine vollständige Aktivierung erreichen.[2] Erschwerend kommt hinzu, daß Zink bei hohen Konzentrationen ($\geq 10^{18}$ cm^{-3}) in InP stark zu diffundieren beginnt [79]. Demgegenüber lassen sich in $Ga_{0,47}In_{0,53}As$ auch bei Dotierungen von 5×10^{18} cm^{-3} noch scharf definierte Dotierungsprofile realisieren [30]. Das Verhalten von Cadmium ist in diesen Punkten ähnlich. Aufgrund des niedrigeren Dampfdruckes wurde daher Zink als Element zur p-Dotierung gewählt.

Als Zink-Quelle wird üblicherweise eine der metallorganischen Verbindungen Dimethyl- oder Diethyl-Zink (DMZn bzw. DEZn) verwendet. Beide Verbindungen können bei Temperaturen oberhalb von 500°C als vollständig zerlegt angenommen werden [80]. In dieser Arbeit wird dem DMZn der Vorzug gegeben, da es entsprechend dem niedrigeren Molekulargewicht einen höheren Dampfdruck als DEZn besitzt (DMZn: $p_D(-10\,°C) = 99,7$ mbar; DEZn: $p_D(-10\,°C) = 2,5$ mbar; $p_D(17\,°C) = 13,7$ mbar). Bei gleichem Fluß an H_2 durch die Flasche kann so eine größere Menge an Metallorganikum entnommen werden. Außerdem enthalten damit alle MO-Verbindungen ausschließlich Methylgruppen als organische Bestandteile. Ein Alkylaustausch zwischen MO-Verbindungen mit verschiedenen organischen Resten ist dadurch unmöglich.

Experimentelle Ergebnisse

Genauso wie bei der Untersuchung der n-Dotierung werden auch hier wieder $1,2\,\mu$m dicke, gleichmäßig dotierte Schichten hergestellt und die Löcherdichte mittels Hall-Effekt-Messungen bestimmt. Für $Ga_{0,47}In_{0,53}As$ ergibt sich dabei ein nahezu linearer Zusammenhang zwischen der Ladungsträgerkonzentration und dem Angebot an DMZn. Wie Abb. 5.8 zeigt, kann ein Dotierungsbereich von Mitte 10^{16} bis knapp 2×10^{19} cm^{-3} abgedeckt werden, wobei die Dotierung hier allmählich eine Sättigung erreicht.

In InP sieht das Dotierungsverhalten jedoch grundsätzlich anders aus. Der Anstieg der Löcherkonzentration verläuft hier nicht linear mit dem DMZn-Partialdruck, sondern zeigt eine wurzelförmige Abhängigkeit (Steigung der Ausgleichsgeraden $\simeq 0,5$). Ähnliche Unterschiede bei der p-Dotierung von InP und GaInAs fand auch E. Woelk bei der Verwendung von Cadmium als Dotierstoff [70], nur daß die Rollen in diesem Fall

[2] Die Deaktivierung wird der Bildung von Metall–H-Komplexen zugeschrieben, die eine elektrisch neutrale Störstelle bilden. Wichtig für den Deaktivierungsprozeß sind die Bedingungen, unter denen die Probe abgekühlt wird. Das Abkühlen unter AsH_3 führt zum Beispiel zu einer stärkeren Deaktivierung als etwa eine PH_3-Umgebung. Der atomare Wasserstoff aus der Zerlegung der Hydride ist offenbar maßgeblich für die Deaktivierung verantwortlich. Durch einen Temperschritt in einer reinen H_2- oder N_2-Atmosphäre (Vermeidung von atomarem Wasserstoff) läßt sich jedoch der Wasserstoff wieder aus dem Kristall austreiben, wodurch die Dotieratome nachträglich aktiviert werden können [76, 77, 78].

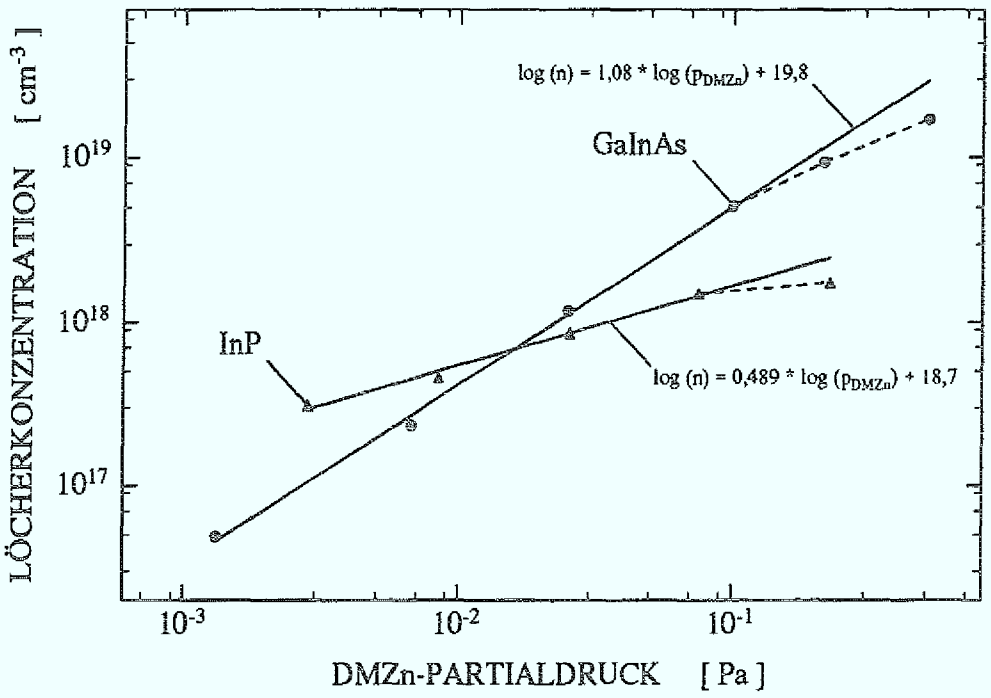


Abb. 5.8: Löcherkonzentration in InP und GaInAs bei Raumtemperatur als Funktion des DMZn-Partialdruckes

vertauscht waren. So wurde für Cd ein linearer Zusammenhang der Löcherkonzentration zum DMCd-Partialdruck beim InP beobachtet, während die Abhängigkeit beim GaInAs wurzelförmig war. Diesen Befunden ist als weiterer Punkt noch hinzuzufügen, daß in Ref. [30], obwohl dort auch mit Zn als Dotierstoff gearbeitet wurde, sowohl für InP wie auch für GaInAs ein nahezu linearer Zusammenhang festgestellt wurde. Im Unterschied zu dem hier benutzten Di*methyl*zink wurde dort allerdings Di*ethyl*zink (DEZn) als Ausgangsverbindung eingesetzt. Widersprüchliche Ergebnisse sind auch von der Zink-Dotierung von GaAs bekannt. Bei der Verwendung von DMZn wurde sowohl eine unterlineare [80] wie auch eine lineare Abhängigkeit [81] beobachtet. Untersuchungen zum Einbau von Zink aus DEZn reichen sogar von einem unterlinearen bis zu einem überlinearen Verhalten [82, 83, 80]. Offenbar spielen bei der Abscheidung von *p*-dotierten Schichten chemische Reaktionen zwischen den Reaktanden eine entscheidende Rolle.

Die komplexen Prozesse, die bei der *p*-Dotierung auftreten, werden an dieser Stelle jedoch nicht weiter verfolgt, da *p*-dotierte Schichten in dieser Arbeit nur für einige wenige Experimente im Zusammenhang mit Schottky-Kontakten auf GaInAs benötigt werden. Solange die Deposition der entsprechenden Schichten aber unter den gleichen Bedingungen abläuft, können die Konzentration der Löcher über die Kalibrierkurve in Abb. 5.8 bestimmt werden.

Mit den Experimenten zur Dotierung ist die Analyse von einfachen Schichten abgeschlossen und von der Seite der Materialherstellung damit die Grundlage für die Abscheidung komplexerer Heterostrukturen geschaffen.

Kapitel 6

2DEGs in $Ga_{0,47}In_{0,53}As$/InP-Heterostrukturen

Nachdem die verschiedenen Materialien nun kontrolliert abgeschieden werden können, besteht der nächste Schritt in Richtung HEMT in der Deposition von Schichtstrukturen mit einem 2DEG. Grundvoraussetzung für die Ausbildung eines quasi zweidimensionalen Elektronengases in einer HEMT-Struktur ist ein scharf definierter Heteroübergang, der die notwendige Diskontinuität im Leitungsband gewährleistet.

Der direkteste Weg, Informationen über die Schärfe einer Grenzfläche zu erhalten, sind TEM-Aufnahmen des Probenquerschnittes. Abb. 6.1 zeigt eine solche Aufnahme eines InP–GaInAs-Heteroüberganges. Es handelt sich hierbei um eine Probe, bei der auf eine 350 nm dicke InP-Pufferschicht 160 nm gitterangepaßtes GaInAs abgeschieden wurden. Die Grenze zwischen den beiden Materialien zeichnet sich als scharfe Linie ab, die keinerlei Stufen erkennen läßt. Im Rahmen des Auflösungsvermögens dieser Aufnahme von wenigen Monolagen (eine Monolage entspricht bei Verbindungshalbleitern der halben Gitterkonstante, also etwa 0,3 nm) ist demnach der Übergang vom InP zum GaInAs abrupt und verläuft ohne größere Grenzflächenrauhigkeit. Es ist daher zu erwarten, daß sich in diesen Heterostrukturen ein 2DEG bildet.

6.1 Auswahl einer Probenstruktur für hohe Elektronenbeweglichkeiten

Der Nachweis der tatsächlichen Existenz eines zweidimensionalen Elektronengases in den hier hergestellten Schichten soll mit temperatur- und magnetfeldabhängigen Transportmessungen an ersten modulationsdotierten Heterostrukturen erbracht werden. Da-

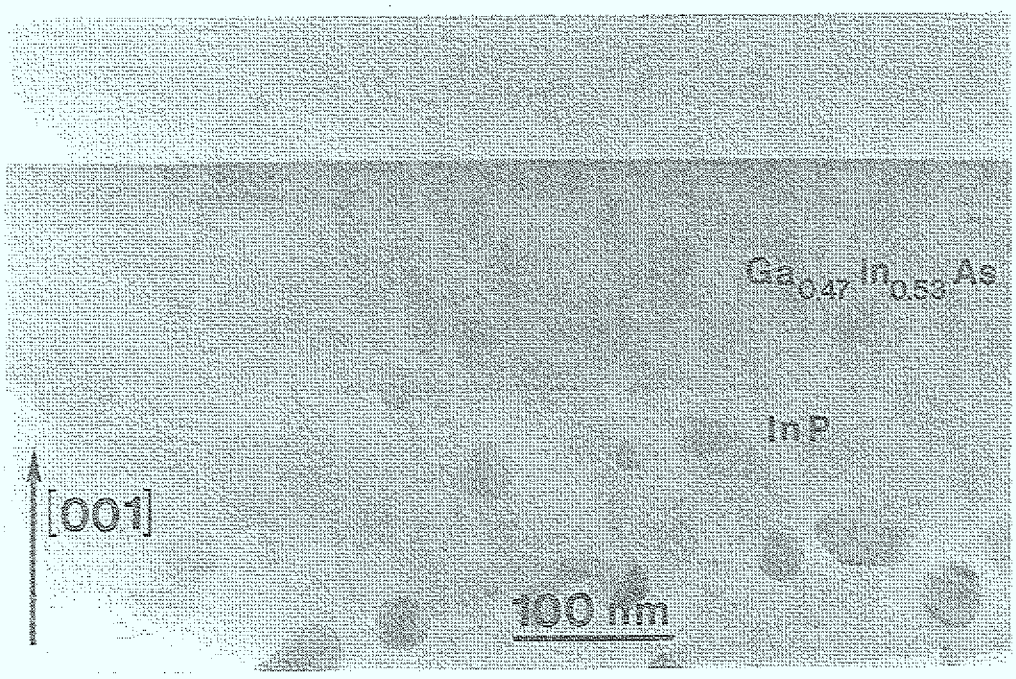


Abb. 6.1: TEM-Querschnittsaufnahme eines InP–GaInAs-Heteroüberganges. Die Grenzfläche ist scharf definiert und zeigt keinerlei Stufen. Die "Flecken" sind überschüssige In-Tropfen, die nach dem Dünnen zurückgeblieben sind, da hier noch nicht mit Iod-Unterstützung gesputtert wurde.

bei liefern insbesondere die Messungen bei tiefen Temperaturen auch Aufschluß über die Qualität des Materials. Im Temperaturbereich unter 50K tritt die Phononstreuung, der bei Raumtemperatur dominierende Streumechanismus, in den Hintergrund, und die Beweglichkeit der 2D-Elektronen im GaInAs sollte dann nur noch durch Störstellen- und Legierungsstreuung begrenzt sein. Bei einer ungenügenden kristallinen Ordnung in der Nähe der Grenzfläche könnten allerdings auch Streuung an Kristalldefekten oder aufgrund einer Rauhigkeit der Grenzfläche noch einen wesentlichen Beitrag liefern. Zur Charakterisierung der Heterostrukturen ist es daher zunächst das Ziel, Proben mit möglichst hohen Beweglichkeiten herzustellen. Die Optimierung der Leitfähigkeit des 2DEGs, wie sie für HEMT-Anwendungen erforderlich ist, wird erst später erfolgen (siehe dazu Kap. 10).

Hohe Beweglichkeiten in einem 2DEG lassen sich nur erreichen, wenn die beeinflußbaren Streufaktoren durch einen geeigneten Aufbau der Schichten soweit wie möglich reduziert werden. So ist zum Beispiel die Grenzflächenrauhigkeit für die verschiedenen Materialübergänge meist unterschiedlich. Im allgemeinen ergeben sich bei der Deposition von GaInAs auf InP glattere Grenzflächen als im umgekehrten Fall, was auch

hier beobachtet wurde. Ausgangspunkt soll daher die sogenannte *invertierte HEMT-Struktur* sein (s. Abb. 6.2), bei der die Modulationsdotierung zwischen Kanal und Substrat und nicht wie bei der normalen Geometrie an der der Oberfläche zugewandten Seite liegt. Dadurch wird außerdem auch die mögliche Ausbildung eines weiteren 2DEGs an einer zweiten Grenzfläche vermieden.

d_{GaInAs}	$Ga_{0,47}In_{0,53}As$	Kanal	
20 nm	InP	Spacer	
10 nm	InP(S)	Dotierung	$n = 4{,}2 * 10^{17}\ cm^{-3}$
300 nm	InP	Puffer	
	InP	Substrat	s. i.

Abb. 6.2: Aufbau der Proben zur Untersuchung des 2DEGs in modulationsdotierten $Ga_{0,47}In_{0,53}As$/InP-Heterostrukturen (invertierte HEMT-Struktur)

Abgesehen von dieser grundsätzlichen Entscheidung über die Lage spielt der genaue Aufbau der Modulationsdotierung die wichtigste Rolle für die Eigenschaften eines zweidimensionalen Elektronengases. Über die Konzentration und die Verteilung des Dotierstoffes kann dabei nicht nur die Dichte der Elektronen im 2DEG kontrolliert, sondern über die Dicke der undotierten Zwischenschicht auch die Streuung an den entfernten ionisierten Störstellen und damit die Beweglichkeit der 2D-Elektronen beeinflußt werden. Zur Erreichung hoher Beweglichkeiten sollten die Dicke des Spacers und die Höhe der Dotierung so gewählt werden, daß das erste Subband des 2DEGs im GaInAs nahezu gefüllt ist, während das zweite unbesetzt bleiben sollte. Damit würde einerseits die mit zunehmender Ladungsträgerdichte im Kanal bessere Abschirmung des 2DEGs gegenüber Störstellen ausgenutzt und gleichzeitig die Intersubband-Streuung, die ja nur bei mehr als einem besetzten Subband auftreten kann, vermieden. Darüber hinaus sollten die Dotierstoffatome möglichst weit vom Kanal entfernt sein, um ihren Einfluß auf das 2DEG gering zu halten.

Die Auswirkungen der Dotierstoffverteilung auf die Beweglichkeit von 2D-Elektronen in invertierten $Ga_{0,47}In_{0,53}As/InP$-HEMT-Strukturen sind bereits von Grützmacher et al. [53] untersucht worden. Für die Beweglichkeit bei tiefen Temperaturen stellt danach eine Zwischenschichtdicke von 20 nm den optimalen Kompromiß zwischen einem hinreichenden Elektronenübertrag und der Separation der Dotierstoffatome von den 2D-Elektronen dar. Mit 189.000 cm^2/Vs (4 K) wurde dabei die höchste Beweglichkeit für eine Dotierung von 4×10^{17} cm^{-3} in einer 10 nm dicken InP-Schicht gemessen. Die Probenstruktur für die ersten 2D-Gas-Experimente hat daher den in Abb. 6.2 skizzierten Aufbau.

Die Dicke der GaInAs-Schicht d_{GaInAs} wird zunächst wie bei der Untersuchung von Bulk-Material zu $1,2$ μm gewählt. Die Beweglichkeiten, die in Abhängigkeit von der Temperatur an dieser Probe gemessen werden, sind in Abb. 6.3 aufgetragen. Es ist eindeutig der für 2D-Transport charakteristische Verlauf mit einer konstanten Beweglichkeit bei tiefen Temperaturen zu erkennen (vgl. Abb. 4.1, S. 67). Wie erwartet bildet sich also in den hier abgeschiedenen Strukturen ein zweidimensionales Elektronengas aus. Dabei erreichen die Elektronen bei einer Dichte von $n_s = 6,6 \times 10^{11}$ cm^{-2} eine außerordentlich hohe Beweglichkeit von 180.000 cm^2/Vs ($T = 5$ K).

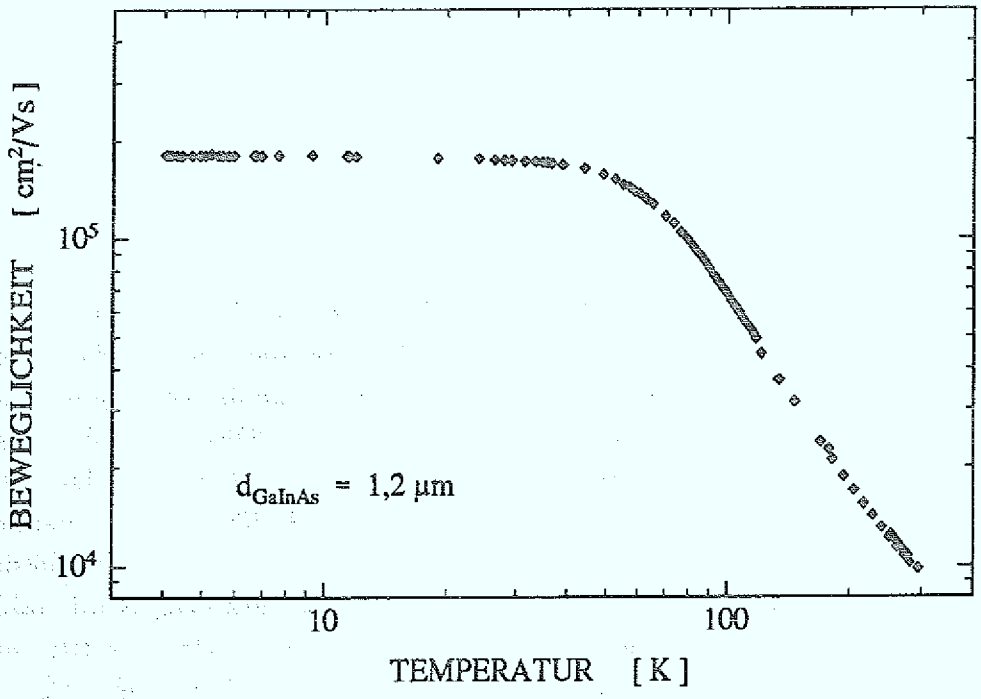


Abb. 6.3: Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit in einer modulationsdotierten $Ga_{0,47}In_{0,53}As/InP$-Heterostruktur mit dem in Abb. 6.2 dargestellten Aufbau und einer GaInAs-Schichtdicke von $1,2$ μm. Eindeutig ist der für 2D-Transport charakteristische Verlauf zu erkennen.

Es fällt allerdings auf, daß die gemessene Schichtladungsträgerkonzentration im 2DEG deutlich höher liegt als die auf die Fläche bezogene Anzahl an Dotierstoffatomen der Modulationsdotierung ($n_s = n \cdot d = 4,2 \times 10^{11}$ cm^{-2}). Der Unterschied ist auf die Hintergrundkonzentration an Elektronen im GaInAs zurückzuführen. Sie beträgt im allgemeinen 2×10^{15} cm^{-3} (s. Abb. 5.4, S. 79), was bei der hier abgeschiedenen Schichtdicke von $1,2$ μm genau dem fehlenden Betrag in der Flächenladungsträgerdichte von $2,4 \times 10^{11}$ cm^{-2} entspricht. An einer nominell undotierten Heterostruktur, das heißt ohne Modulationsdotierung im InP, wurde auch eben diese Schichtkonzentration an Elektronen gemessen, was den Beitrag der Hintergrundkonzentration zur Elektronendichte im 2DEG bestätigt.

Mit den hier hergestellten modulationsdotierten Heterostrukturen lassen sich demnach tatsächlich zweidimensionale Elektronengase realisieren, die bereits bei der Verwendung von gitterangepaßtem GaInAs eine sehr hohe Elektronenbeweglichkeit aufweisen. Die Beweglichkeit liegt dabei sogar deutlich über den Werten vergleichbarer Strukturen aus Ref. [53].

6.2 Variation der $Ga_{0,47}In_{0,53}As$-Schichtdicke

Da im Hinblick auf HEMT-Anwendungen und verspannte Schichten möglichst dünne Deckschichten vorteilhaft sind, soll nun, ausgehend von der Struktur in Abb. 6.2, die Dicke des GaInAs reduziert werden, um die Schichtdicke zu bestimmen, bei der noch immer hohe Beweglichkeiten erreicht werden können. Hintergrund für diesen Ansatz ist unter anderem, daß sich die Steilheit von Transistoren erhöht, wenn der Abstand zwischen Gate und 2DEG verringert wird. Um außerdem verspannte Schichten mit möglichst hohem In-Gehalt ohne eine Relaxation der Filme abscheiden zu können, sollte die Schicht ebenfalls nur so dick wie unbedingt notwendig sein. Ein weiterer, allerdings etwas abseits gelegener Aspekt, wäre die Kopplung zweier Supraleiter über das 2DEG, ohne den Halbleiter strukturieren zu müssen.[1]

In einer Versuchsreihe wird daher die Dicke des $Ga_{0,47}In_{0,53}As$ schrittweise von $1,2$ bis auf $0,05$ μm verringert. Die an den Proben bei 5 K gemessenen Beweglichkeiten und Ladungsträgerdichten sind in Abb. 6.4 gegen die jeweilige Schichtdicke aufgetragen. Zwischen $1,2$ und $0,3$ μm bleibt die Beweglichkeit zunächst nahezu konstant bei

[1] In Kurzkanal-FETs, in denen die Source- und Drain-Metallisierung aus einem Supraleiter besteht, kann der Kanal im Halbleiter durch den Proximity-Effekt ebenfalls supraleitend werden. Ein solcher Supraleitungsstrom läßt sich dann über einen Gate-Kontakt kontrollieren, so daß man einen vollständig supraleitenden FET erhält. Auch für einen solchen Einsatz wäre GaInAs mit einem 2DEG ein sehr geeignetes Material [84, 85].

180.000 cm^2/Vs. Eine weitere Verringerung der Schichtdicke führt dann jedoch erst zu einem sprunghaften Anstieg und unterhalb von $0,15\,\mu m$ zu einem deutlichen Rückgang der Beweglichkeit. Im Gegensatz dazu zeigt die Ladungsträgerdichte einen monotonen Verlauf. Bis hinab zu etwa $0,4\,\mu m$ nimmt sie nur geringfügig mit der Schichtdicke ab, danach jedoch fällt sie immer rapider.

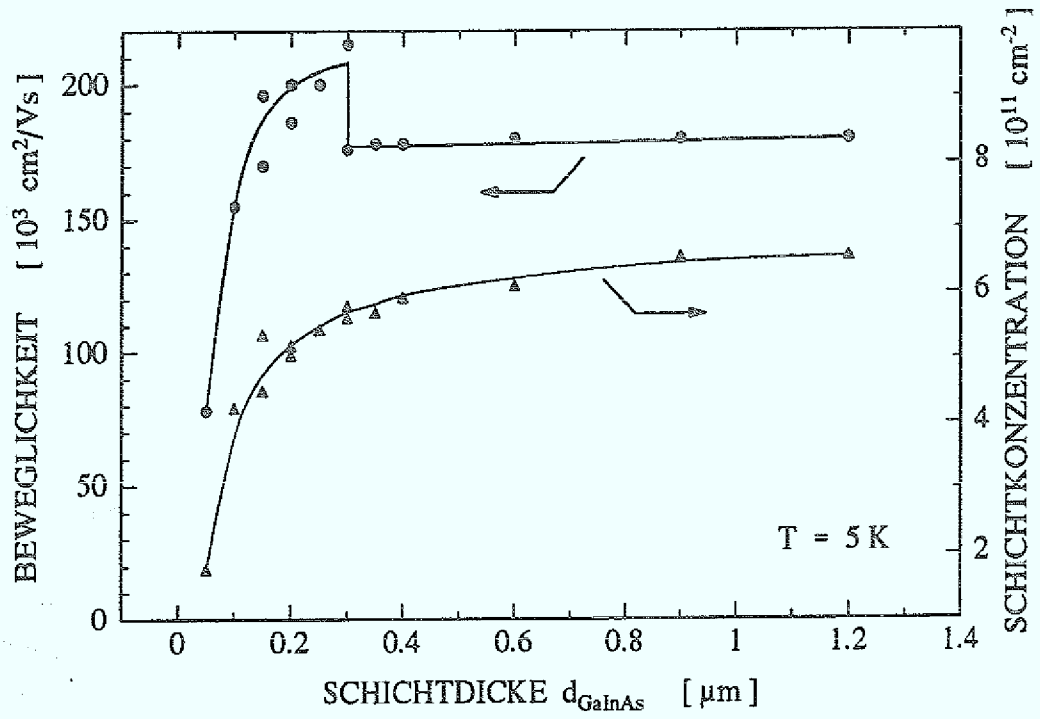


Abb. 6.4: Einfluß der Dicke der $Ga_{0,47}In_{0,53}As$-Deckschicht auf die Beweglichkeit und die Dichte der 2D-Elektronen

Der Verlauf von n_s erklärt sich durch die Verarmungsrandschicht an der Oberfläche des GaInAs. Nach Gl. (5.2) beträgt ihre Ausdehnung bei einer Ladungsträgerkonzentration von 2×10^{15} cm^{-3} und einer Barrierenhöhe von 0,2 eV ($= \phi_B(Ga_{0,47}In_{0,53}As)$) $0,38\,\mu m$. Ist die GaInAs-Schicht also dünner als $0,4\,\mu m$, so reicht die Verarmungsrandschicht bis zum 2D-Kanal, und Elektronen, die sonst zum 2DEG beitragen würden, werden nun in Oberflächenzuständen gebunden. Bei dickeren Schichten hingegen tragen die Elektronen aus der Hintergrunddotierung des GaInAs, die sich im Bereich der Bandverbiegung am Heteroübergang aufhalten, zum 2D-Gas bei. Da dieser Bereich jedoch begrenzt ist, tritt bei großen Schichtdicken eine Sättigung ein.

Die Veränderungen in der Beweglichkeit werden verständlicher, wenn man sie nicht als Funktion der Schichtdicke, sondern der Elektronendichte betrachtet, wie es in Abb. 6.5 in doppeltlogarithmischer Auftragung dargestellt ist. Mit der Dichte steigt zunächst

auch die Beweglichkeit, bis sie bei einem Wert von $5,6 \times 10^{11}$ cm^{-2} abrupt abfällt, um dann auf einem knapp 20 % niedrigeren Niveau nahezu konstant zu bleiben. In den einzelnen Bereichen verhält sich μ wie $n_s^{1,1}$ bzw. wie $n_s^{0,1}$. Nach Gl. (4.5) und (4.6) wären für eine Begrenzung der Beweglichkeit allein aufgrund der Störstellen- oder der Legierungsstreuung Abhängigkeiten von der Flächenladungsdichte entsprechend $n_s^{1,5}$ bzw. $n_s^{-0,5}$ zu erwarten. Die gefundenen Abhängigkeiten sprechen demnach für einen Mischeinfluß der beiden Streumechanismen. Darüber hinaus ist aus dem Versatz der Bereiche gegeneinander zu schließen, daß ab einer Dichte von $5,6 \times 10^{11}$ cm^{-2} die Beweglichkeit zusätzlich durch die Intersubband-Streuung herabgesetzt wird.

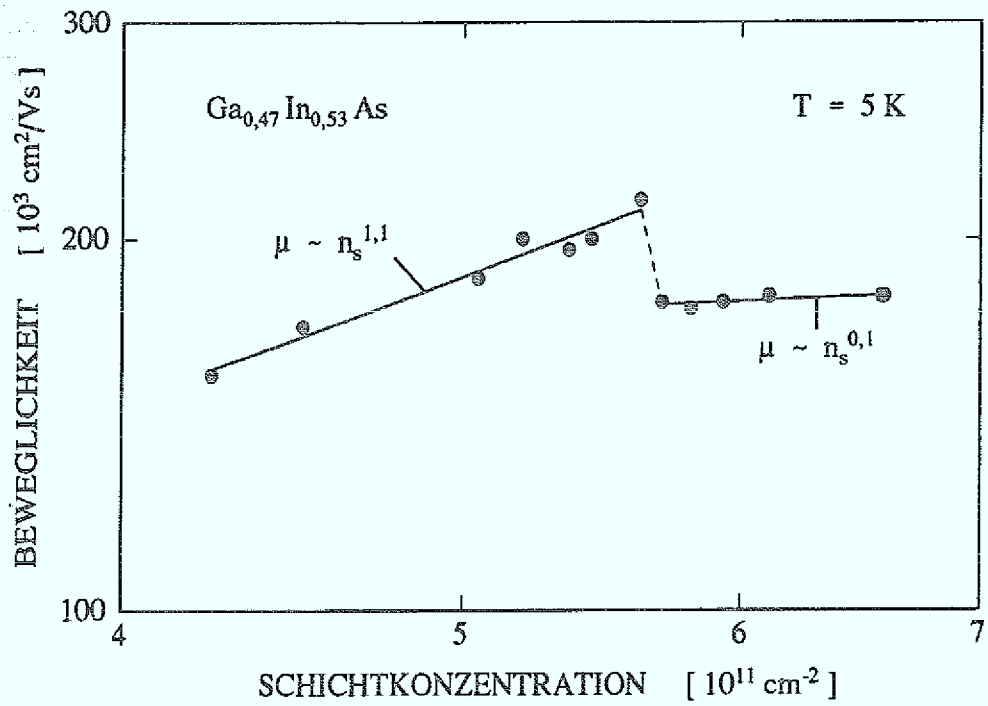


Abb. 6.5: Tieftemperaturbeweglichkeit in Abhängigkeit von der Ladungsträgerdichte in doppeltlogarithmischer Auftragung.

Im Unterschied zu dem hier beobachteten Verlauf fanden Störmer et al. [56] bei ihrer Untersuchung der Intersubband-Streuung allerdings nach dem Einbruch wieder einen Anstieg in der Beweglichkeit und zwar mit der gleichen Abhängigkeit von der Ladungsträgerdichte wie vorher. Da dort jedoch AlGaAs/GaAs-Heterostrukturen vermessen wurden, in denen in jedem Fall die Streuung an ionisierten Störstellen der entscheidende Mechanismus ist, ist ohne einen weiteren Streueffekt auch keine Änderung in der Abhängigkeit der Beweglichkeit von der Flächenladungsdichte zu erwarten. (Die Legierungsstreuung tritt nur im Bereich der AlGaAs-Barrieren auf, und ihr Ein-

fluß macht sich erst bei sehr hohen Beweglichkeiten bemerkbar ($\mu > 10^6\,\mathrm{cm}^2/\mathrm{Vs}$ [54]). Diese waren jedoch hier nicht gegeben.) Die Beobachtung unterschiedlicher Steigungen spricht demnach, wie auch die Steigungen selbst, für einen Mischeinfluß verschiedener Streumechanismen. In einem zweiten Subband hat die Wellenfunktion der Elektronen eine größere Ausdehnung in z-Richtung, "sieht" daher also auch einen größeren Legierungsbereich, was den stärkeren Einfluß der Legierungsstreuung erklärt.

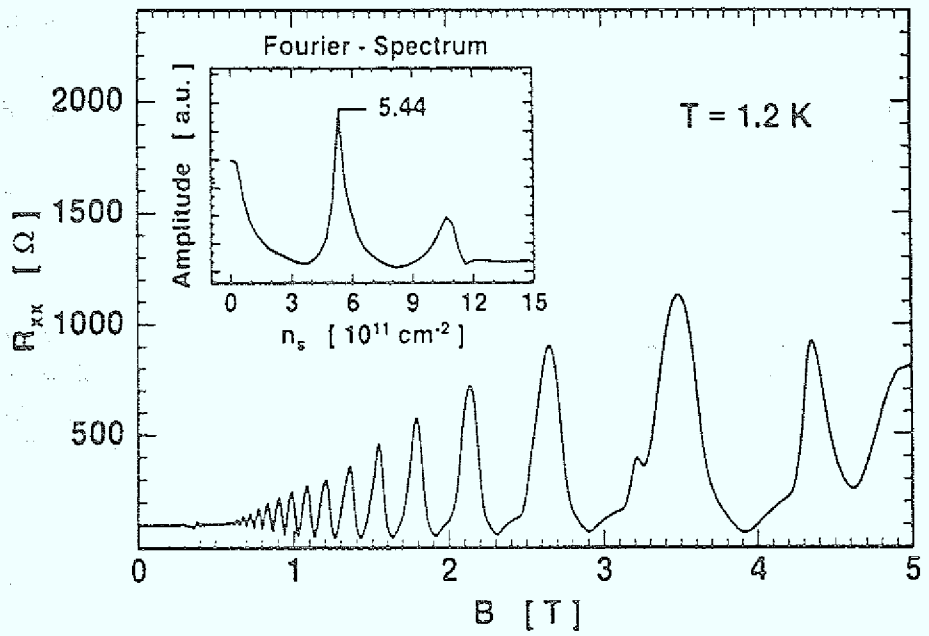
Abschließend kann also gesagt werden, daß zur Erreichung hoher Beweglichkeiten in dünnen GaInAs-Schichten bei der gewählten Struktur eine Schichtdicke von 150nm und eine Flächendichte von $5,5 \times 10^{11}\,\mathrm{cm}^{-2}$ ideal sind. Bei dünneren Schichten müßte zur Steigerung von μ die Ladungsträgerdichte im Kanal erhöht werden. Das wäre jedoch bei dieser Struktur nur durch eine Erhöhung der Dotierkonzentration bei gleichzeitiger Verringerung der Spacer-Dicke zu erreichen, da die Anzahl der aus der Modulationsdotierung in den Kanal übertragbaren Elektronen bei fester Dicke der Zwischenschicht durch den Leitungsband-Offset begrenzt ist. Eine höhere Dotierungskonzentration allein würde nur dazu führen, daß das Leitungsband im Bereich der Dotierung unter das Fermi-Niveau sinkt, wodurch die zusätzlich eingebrachten Elektronen im InP verbleiben und nicht zum 2DEG im GaInAs beitragen würden. Mit Hilfe eines dünneren Spacers ließe sich zwar die Konzentration der Elektronen im 2DEG noch erhöhen, andererseits würde dadurch auch der Einfluß der ionisierten Störstellen zunehmen und so die Beweglichkeit herabgesetzt [53].

Die Beweglichkeit wird in diesen Strukturen bei tiefen Temperaturen allerdings sowohl durch die Streuung an ionisierten Störstellen wie auch durch die Legierungsstreuung bestimmt.

6.3 Shubnikov-de-Haas-Oszillationen

Zur Klärung der Ursache des Einbruchs in der Beweglichkeit werden die Transporteigenschaften zusätzlich in Abhängigkeit von der Stärke des äußeren Magnetfeldes untersucht, mit dem Ziel, die Anzahl der besetzten Subbänder in den 2D-Gasen zu bestimmen.

Für die magnetfeldabhängigen Messungen werden zwei Proben ausgewählt, von denen die erste eine Elektronendichte von weniger als $5,6 \times 10^{11}\,\mathrm{cm}^{-2}$ hat, also unterhalb des Wertes liegt, bei der der Sprung in der Beweglichkeit stattfindet, während die andere aus dem Bereich höherer Ladungsträgerdichten genommen wird. Der Verlauf des longitudinalen Magnetowiderstandes R_{xx} der ersten Probe mit einer Elektronendichte von $5,2 \times 10^{11}\,\mathrm{cm}^{-2}$ ($d_{GaInAs} = 200\,\mathrm{nm}$) ist in Abb. 6.6a dargestellt. Es ist eine Serie von Oszillationen zu erkennen, deren Amplitude bis 4 T gleichmäßig zunimmt. Zwi-



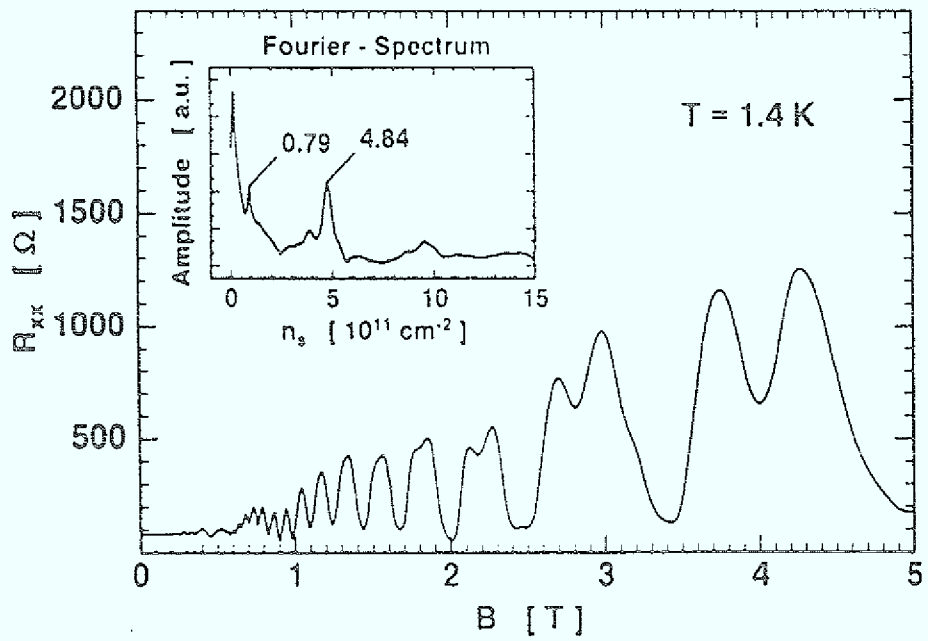


Abb. 6.6: Magnetowiderstandsmessungen an Proben mit Elektronendichten von $5,4$ bzw. $5,6 \times 10^{11}$ cm^{-2}. Während bei der ersten Probe in den SdH-Oszillationen nur eine Periode auftritt und damit nur ein Subband besetzt ist, wird bei der zweiten eine Modulation der Amplitude beobachtet, die durch die Besetzung des zweiten Subbandes hervorgerufen wird.

schen den Peaks sinkt der Widerstand allerdings nicht ganz bis auf Null ab. Das liegt daran, daß die Temperatur mit 1,2 K noch nicht tief genug ist und sich die verbreiterten Landau-Niveaus noch überlappen. Eine Fourier-Analyse dieser Oszillationen (s. Einschub) liefert eine Frequenz in $\frac{1}{B}$, die einer Flächenladungsträgerdichte von $5,4 \times 10^{11}$ cm^{-2} entspricht, was mit dem Ergebnis der Hall-Messung recht gut übereinstimmt. Der Peak bei knapp 11×10^{11} cm^{-2} gehört zu der zweiten Harmonischen dieser Oszillation. Da keine weitere Periode existiert, ist hier nur das erste Subband besetzt.

Im Unterschied dazu zeigt die Messung an der Probe mit der höheren Ladungsträgerkonzentration (Hall: $5,7 \times 10^{11}$ cm^{-2}, $d_{GaInAs} = 350$ nm) in Abb. 6.6b eine deutliche Modulation in der Höhe der Peaks. Oberhalb von 2 T ist außerdem eine Aufspaltung der Peaks durch die unterschiedlichen Spin-Einstellung im Magnetfeld erkennbar. Eine Fourier-Analyse offenbart die Besetzung zweier Subbänder. Neben dem ersten mit einer Elektronendichte von $4,8 \times 10^{11}$ cm^{-2} ist noch ein zweites und zwar mit einer Dichte von $0,8 \times 10^{11}$ cm^{-2} besetzt. Die Summe dieser Werte deckt sich mit dem Ergebnis der Hall-Messung, in der ja der Beitrag aller freien Ladungsträger gleichzeitig gemessen wird.

Die Beobachtung von einmal einem und einmal zwei besetzten Subbändern bestätigt also, daß die abrupte Abnahme der Beweglichkeit bei steigender Elektronendichte in Abb. 6.5 ihre Ursache im Einsetzen der Intersubband-Streuung hat. Zudem ist das Auftreten der SdH-Oszillationen auch der endgültige Beweis für die Existenz eines 2DEGs.

Kapitel 7

Schottky-Kontakte auf n-GaInAs und erste Transistorteststruktur

Die Herstellung von HEMTs auf der Basis der bisherigen 2DEG-Struktur erfordert die Präparation von Gate-Kontakten auf n-leitendem GaInAs. Die Höhe der Schottky-Barriere ϕ_B zwischen Metallen wie Gold, Aluminium, Titan oder Niob und n-GaInAs beträgt allerdings nur etwa $0,2$ eV [86, 87, 88]. Dies ist für eine effektive Steuerung der Leitfähigkeit des 2D-Kanals aber zu gering. Daher muß die Barriere durch eine geeignete Zwischenschicht zwischen dem Gate-Metall und dem n-GaInAs erhöht werden. Eine gängige Methode dafür ist die Erzeugung einer Bandverbiegung durch eine Raumladung in einer dünnen, vollständig verarmten p-dotierten GaInAs-Schicht an der Oberfläche [89, 90, 91]. Eine andere Möglichkeit besteht in der Deposition eines Materials mit größerer Bandlücke wie zum Beispiel gitterangepaßtem InP [92] oder AlInAs [93] oder verspanntem GaAs [94] bzw. GaInP [95, 96]. Beide Verfahren sollen hier an speziellen Diodenstrukturen getestet werden.

Die Grundstruktur für die Untersuchungen hat den in Abb. 7.1 gezeigten Aufbau. Auf ein n-leitendes Substrat werden zunächst ein n-dotierter InP-Puffer und 300 nm ebenfalls n-dotiertes $Ga_{0,47}In_{0,53}As$ abgeschieden. Durch die Dotierung des GaInAs soll eine Gleichrichtung an diesem Heteroübergang vermieden werden. Auf diesen Unterbau werden dann 2 μm nominell undotiertes GaInAs und zum Schluß die Schicht zur Erhöhung der Barriere aufgebracht. Die jeweilige Zusammensetzung dieser Schicht wird in den folgenden Abschnitten im einzelnen erläutert. Der Metallkontakt besteht aus Titan, das in einem Elektronenstrahlverdampfer aufgedampft wird.[1] Die einzelnen Dioden werden mittels Lift-Off-Technik in fünf verschiedenen Größen hergestellt (Quadrate mit 10, 25, 50, 100 und 250 μm Kantenlänge).

[1] Anstelle des Titans wurden in Vergleichsversuchen auch Platin bzw. Aluminium verwendet, wobei jedoch keine Unterschiede in den Barrierenhöhen festgestellt wurden.

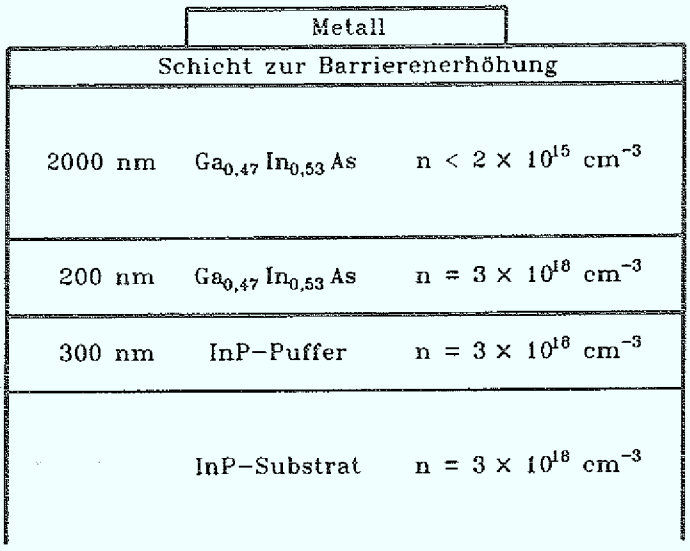


Abb. 7.1: Grundstruktur der Schottky-Dioden auf n-$Ga_{0,47}In_{0,53}As$

Die Charakterisierung der Schottky-Dioden erfolgt über Strom-Spannungs-Messungen. Der Stromtransport über die Barriere hinweg kann als thermische Emission betrachtet werden. Für die Stromdichte J führt das zu folgender Gleichung (s. [97]):

$$J = J_s \left(\exp\left(\frac{e\,(U - I R_s)}{n\,k\,T} \right) - 1 \right) \tag{7.1}$$

R_s : Serienwiderstand
n : Idealitätsfaktor

wobei sich die Sättigungsstromdichte J_s aus

$$J_s = A^* T^2 \exp\left(-\frac{\phi_B}{k\,T} \right) \tag{7.2}$$

A^* : effektive Richardson-Konstante
$A^*(n\text{-GaInAs}) = 5,04 \frac{\text{A}}{\text{cm}^2\text{K}^2}$ [88]

ergibt. Diese Beschreibung ist anwendbar solange der Idealitätsfaktor n nahe bei 1 liegt, das heißt andere Transportmechanismen wie etwa der Tunneleffekt vernachlässigt werden können. Die Werte für n, den Serienwiderstand R_s und die Barrierenhöhe ϕ_B werden aus einem numerischen Fit der gemessenen I-U-Kennlinien bestimmt.

7.1 Erhöhung der Schottky-Barriere durch p-dotiertes GaInAs

Die Modifikation der Schottky-Barriere durch eine Bandverbiegung aufgrund einer Raumladung in einer dünnen Oberflächenschicht ist bereits bei verschiedenen Halbleitermaterialien wie etwa Si, GaAs, InP, aber auch GaInAs erfolgreich angewendet worden. So läßt sich zum Beispiel bei n-GaAs (unmodifizierte Barrierenhöhe $\phi_B^0 = 0,8\,\mathrm{eV}$) die Höhe der Barriere durch eine zusätzliche n- oder p-Dotierung zwischen $0,49$ und $1,24$ eV variieren [98]. Im Fall von n-GaInAs ist hier jedoch nur eine Erhöhung der Barriere durch eine entsprechende p-Dotierung gefragt.

Der Bandverlauf eines Metall–n-Halbleiterkontaktes mit einer p-dotierten Zwischenschicht ist in Abb. 7.2 dargestellt. Geht man vereinfachend von einer vollständigen Verarmung der Schicht durch die Besetzung von Oberflächenzuständen aus, so läßt sich die gewonnene Erhöhung der Barriere $\Delta\phi_B$ als

$$\Delta\phi_B = \frac{e}{2\,\epsilon_0\,\epsilon_r}\,N_A\,d^2 \tag{7.3}$$

N_A : Akzeptorkonzentration
d : Dicke der dotierten Schicht

ausdrücken [97], wenn die Akzeptorkonzentration N_A sehr viel größer als die Ladungsträgerdichte N_D im n-Halbleiter ist und außerdem $N_A\,d \gg N_D\,(w-d)$ gilt, wobei w die Weite der Verarmungszone bezeichnet. Nach dieser Vorstellung wäre allerdings bereits

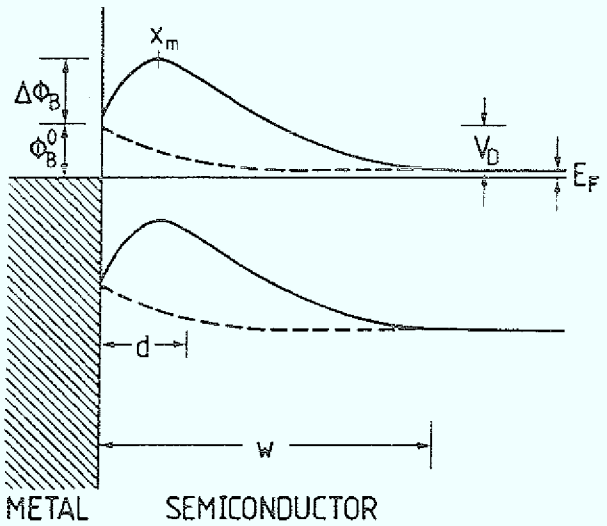


Abb. 7.2: Bandverlauf eines Metall–n-Halbleiter–Kontaktes mit einer p-dotierten Zwischenschicht

mit einer nur 30nm dicken p-dotierten GaInAs-Schicht mit einer Akzeptorkonzentration von 1×10^{18} cm^{-3} eine Erhöhung von 0,6 eV zu erreichen, womit die Barrierenhöhe insgesamt ($\phi_B = \phi_B^0 + \Delta\phi = 0,8$eV) die Größe der Bandlücke von 0,75eV überschreiten würde. Solch extrem hohe Barrierenhöhen sind jedoch experimentell nicht beobachtet worden. Das Zahlenbeispiel gibt aber eine Abschätzung für die Größenordnungen, in denen die Parameter d und N_A zu wählen sind.

Variation der Schichtdicke und der Akzeptorkonzentration

Mit zwei Versuchsreihen soll nun einerseits der Gültigkeitsbereich des Verarmungsmodells und andererseits die maximal erreichbare Barrierenhöhe ermittelt werden. Dazu wird zunächst bei einer festen Akzeptorkonzentration von $1,5 \times 10^{18}$ cm^{-3} die Dicke der p-dotierten Schicht variiert. Die Weite der Verarmungsrandschicht beträgt in GaInAs mit dieser Konzentration an Akzeptoren ca. 25nm ($\phi_B(p\text{-GaInAs}) = 0,55$eV). In der Probenserie wird daher die Dicke der Deckschicht schrittweise von 8 nm bis auf 80 nm, das heißt deutlich über den Gültigkeitsbereich des Verarmungsmodells hinaus, vergrößert. Da die dickeren p-dotierten Schichten nicht mehr vollständig verarmt sind, handelt es sich bei diesen Strukturen genau genommen nicht mehr um barrierenerhöhte Schottky-Dioden im eigentlichen Sinne, sondern hier wird vielmehr langsam der Übergang zu einer pn-Diode vollzogen.

Abb. 7.3 zeigt einige typische Strom-Spannungs-Kennlinien der hergestellten Dioden. Charakteristische Daten aller Dioden sind darüber hinaus in Tabelle 7.1 zusammengefaßt. Die darin angegebenen Werte sind jeweils Mittelwerte aus Messungen an Dioden gleicher Struktur aber unterschiedlicher Größe der Kontaktflächen.

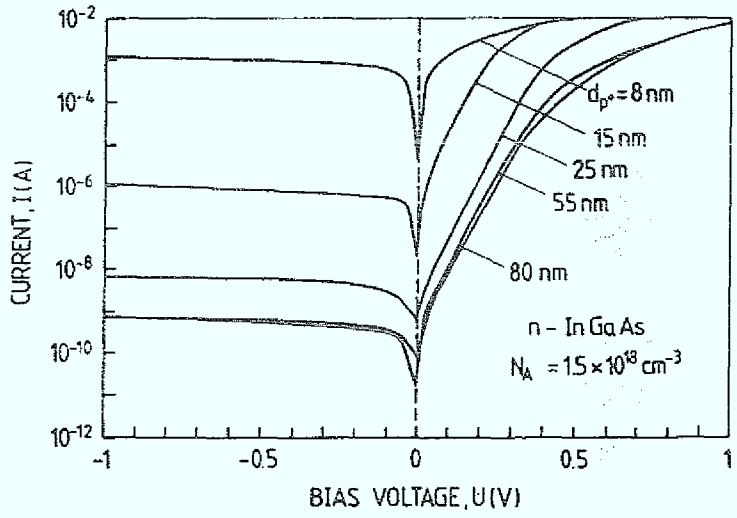


Abb. 7.3: I-U-Kennlinien von Schottky-Dioden auf n-GaInAs mit p-dotierten GaInAs-Deckschichten unterschiedlicher Dicke

Tabelle 7.1: Charakteristische Parameter von Schottky-Dioden mit p-dotierten GaInAs-Deckschichten

d	N_A	$J_R\,(1\,\mathrm{V})$	n	ϕ_B
nm	$10^{18}\,\mathrm{cm}^{-3}$	$10^{-3}\,\mathrm{A/cm}^2$	—	eV
8	1,5	1000	—	0,26
15	1,5	3,0	1,08	0,47
20	1,5	0,8	1,12	0,56
25	1,5	0,5	1,08	0,59
30	1,5	0,2	1,14	0,60
35	1,5	0,1	1,16	0,61
55	1,5	0,03	1,20	0,63
80	1,5	0,03	1,26	0,63
30	4,0	0,03	1,17	0,63
30	8,0	0,0058	1,12	0,66
60	8,0	0,0045	1,15	0,68

Im Einklang mit Gl. (7.3) zeigt die Diode mit der 8 nm dicken p^+-Schicht erst eine geringfügig erhöhte Barriere von 0,26 eV und noch einen hohen Leckstrom. Mit zunehmender Dicke geht die Sperrstromdichte J_R aber um mehrere Größenordnungen zurück und beträgt bei 55 bzw. 80 nm nur noch $3 \times 10^{-5}\,\mathrm{A/cm}^2$ ($J_R\,(1\,\mathrm{V})$). Daraus ergibt sich eine Barrierenhöhe von 0,63 eV. Damit weisen diese Proben höhere Barrieren auf, als sie bisher auf n-GaInAs erreicht wurden. In Durchlaßrichtung zeigt die logarithmische Darstellung des Stromes über vier Größenordnungen einen linearen Anstieg mit der Spannung. Die Idealitätsfaktoren liegen mit höchstens 1,26 für alle Dioden nahe bei 1.

In Abb. 7.4 sind die gemessenen Barrierenhöhen gegen die Dicken der p^+-Schichten aufgetragen. Wie daraus ersichtlich, tritt, anders als nach dem Verarmungsmodell zu erwarten, ab etwa 20 nm eine Sättigung in ϕ_B ein. Die Barriere läßt sich demnach kaum noch durch eine Vergrößerung der Dicke der Oberflächenschicht erhöhen.

In einer zweiten Versuchsreihe wird daher bei einer festen Dicke von 30 nm, also im Beginn des Sättigungsbereiches, die Akzeptorkonzentration bis auf $8 \times 10^{18}\,\mathrm{cm}^{-3}$ vergrößert (s. Abb. 7.5, Daten s. Tab. 7.1). Bei einem Idealitätsfaktor von 1,12 läßt sich so ein extrem niedriger Sperrstrom von $J_R\,(1\,\mathrm{V}) = 5,8 \times 10^{-6}\,\mathrm{A/cm}^2$ und eine effektive Höhe der Schottky-Barriere von 0,66 eV erreichen.

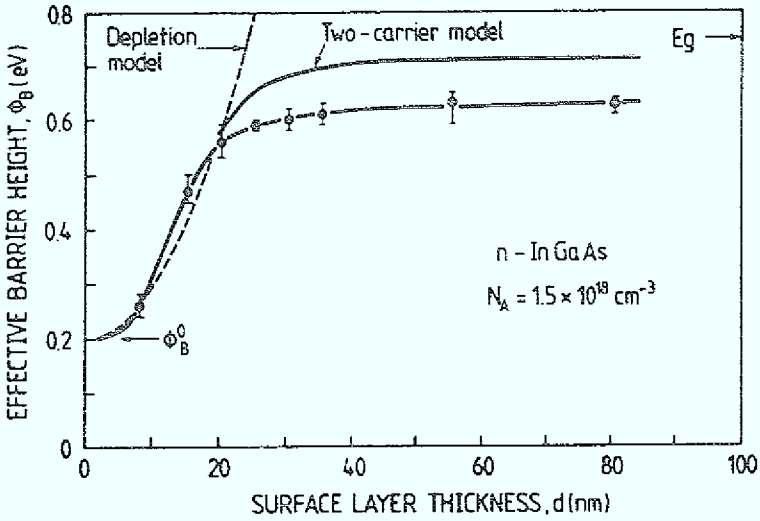


Abb. 7.4: Effektive Höhe der Schottky-Barriere auf n-GaInAs als Funktion der Dicke einer p-dotierten Deckschicht

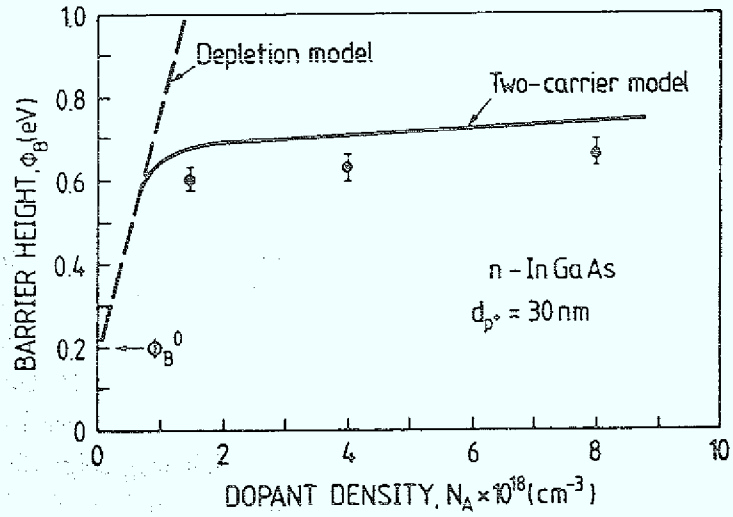


Abb. 7.5: Einfluß der Akzeptorkonzentration auf die Barrierenhöhe

Vergleich mit thoretischen Modellen

Zum Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen sind in den Abb. 7.4 und 7.5 die nach dem Verarmungsmodell jeweils zu erwartenden Verläufe von ϕ_B als gestrichelte Linien eingezeichnet. Die quadratische Zunahme der Barrierenhöhe mit der Dicke der p^+-Schicht ist für kleine d näherungsweise erfüllt. Die Sättigung oberhalb von 20 nm und ebenso die bei hohen Akzeptorkonzentrationen sind mit diesem Ansatz nicht erklärbar. Dagegen entsprechen die beobachteten Verläufe den Berechnungen von Schwartz und Gualtieri [99], die die Poisson-Gleichung unter Berücksichtigung von

Elektronen und Löchern für derartige Diodenstrukturen numerisch gelöst haben (two-carrier model, durchgezogene Linien in den Abb. 7.4 und 7.5). Nach ihren Ergebnissen kann nur für dünne Schichten und niedrige p-Dotierungen die Barrierenerhöhung über Gl. (7.3) berechnet werden. Ab einer gewissen Barrierenhöhe $\phi_B^* = C\,E_g$ weicht die tatsächliche Höhe dann vom Verarmungsmodell ab, und es kommt zu einer Sättigung in der Nähe der Bandlücke ($\phi_B \simeq E_g$). C ist dabei eine Materialkonstante, die für n-GaInAs bei etwa $0,8$ liegt. Aus dem experimentell beobachteten Verlauf in Abb. 7.4 und den Daten in Tabelle 7.1 ergibt sich in guter Übereinstimmung für C ein Wert von $0,75$. Aufgrund dieses Sättigungsverhaltens kann also die mit $0,68\,\mathrm{eV}$ höchste auf n-GaInAs gemessene Barriere (gemessen an einer Probe mit 60nm p-dotiertem GaInAs und einer Akzeptorkonzentration von $8 \times 10^{18}\,\mathrm{cm}^{-3}$) weder durch eine größere Schichtdicke noch durch eine höhere Dotierung noch wesentlich weiter gesteigert werden.

7.2 Barrierenerhöhung durch Deckschichten anderer Zusammensetzung

Obwohl mit der Methode der Barrierenerhöhung durch hoch p-dotierte Schichten sehr hohe Barrieren zu erreichen sind, hat dieses Verfahren vom technologischen Standpunkt aus gesehen jedoch den Nachteil, daß die Verwendung von Akzeptorstoffen wie Zink bei der Epitaxie von III-V-Halbleitern über Memory-Effekte im Reaktor die nachfolgende Deposition reiner, unkompensierter Schichten beeinträchtigen kann. Eine Alternative zur p-Dotierung ist die epitaktische Abscheidung einer Deckschicht aus einem anderen Halbleitermaterial, das von sich aus eine größere Barriere als n-GaInAs hat. Neben InP ($\phi_B = 0,48 - 0,55\,\mathrm{eV}$, [100]) kommt dazu als gitterangepaßtes Material auch $Al_{0,48}In_{0,52}As$ ($\phi_B = 0,56 - 0,72\,\mathrm{eV}$, [101]) in Frage. Wegen der Oxidation Al-haltiger Verbindungen an Luft und tiefer Störstellen an der Grenzfläche zwischen AlInAs- und GaInAs-Schichten [13] soll dieses Material hier jedoch nicht weiter berücksichtigt werden. GaAs bietet mit $0,8\,\mathrm{eV}$ ebenfalls eine sehr hohe Barriere, weist aber gleichzeitig auch eine erhebliche Gitterfehlpassung von $3,7\%$ gegenüber InP auf, so daß nur Schichten von wenigen Nanometern Dicke störungsfrei abgeschieden werden können. Mit $Ga_xIn_{1-x}P$ läßt sich dagegen sowohl die Bandlücke im Vergleich zu InP vergrößern wie auch die Fehlpassung über die Zusammensetzung kontrollieren. Entscheidend ist dabei vor allem die Frage, wie dick eine Deckschicht sein muß, um eine effektive Barriere zu bilden. Da in einem HEMT der Abstand zwischen Gate-Kontakt und 2D-Kanal klein gehalten werden sollte, sollte diese Schicht nur so dick wie nötig sein.

Für extrem dünne Deckschichten (einige Nanometer) wird der Stromfluß nicht mehr allein durch thermische Emission von Elektronen über die Barriere hinweg, sondern maßgeblich auch durch den Tunneleffekt bestimmt. Unter diesen Bedingungen ist

zu erwarten, daß die effektive Erhöhung der Barriere proportional zur Dicke d dieser Schichten ist (s. Ref. [102], Deckschichten aus isolierendem Material):

$$\phi_B = \phi_B^0 + D\,d \tag{7.4}$$

D ist dabei eine Materialkonstante, die von der effektiven Elektronenmasse im Halbleiter abhängt und für n-GaInAs etwa 1×10^6 V/cm beträgt. Bei dicken Schichten ist dagegen zu erwarten, daß die Barrierenhöhe den Wert annimmt, der auch direkt an dem entsprechenden Material gemessen wird.

Barrierenerhöhung durch InP

Nach Gl. (7.4) ist für eine Erhöhung der Barriere von n-GaInAs bis auf den Wert von InP eine Schicht mit mindestens 3 nm Dicke erforderlich. Aufgrund der Überlagerung von thermischer Emission und Tunneleffekt wird sich die volle Barrierenhöhe jedoch erst bei dickeren Schichten ausbilden. Auf der Basis der Struktur in Abb. 7.1 werden daher drei Dioden mit InP-Schichten von 8, 30 und 60 nm Dicke hergestellt. Ihre Kenndaten sind in Tab. 7.2 aufgeführt. Mit der 8 nm dicken InP-Schicht ergibt sich eine effektive Barrierenhöhe von 0,42 eV. Damit liegt dieser Wert erwartungsgemäß deutlich unter dem, der bei ausschließlichem Tunneltransport möglich wäre (vgl. Abb. 7.6 gestrichelte Linie). Durch eine Vergößerung der Schichtdicke läßt sich allerdings die Barrierenhöhe noch steigern, bis sie bei 60 nm dickem InP 0,55 eV beträgt. Dieser Wert entspricht den Ergebnissen, die von einfachem n-InP her bekannt sind ($\phi_B = 0,48 - 0,55$ eV, [100]). Von noch dickeren InP-Schichten ist daher keine weitere Steigerung von ϕ_B mehr zu erwarten.

Tabelle 7.2: Kenndaten von Schottky-Dioden mit InP- bzw. $Ga_{0,12}In_{0,88}P$-Zwischenschichten

Material	d	J_R (1 V)	n	ϕ_B
—	nm	10^{-3} A/cm^2	—	eV
InP	8	80	1,04	0,42
InP	30	8	1,12	0,49
InP	60	1	1,22	0,55
GaInP	8	90	1,08	0,40
GaInP *	60	3	1,26	0,51

* Mehrschichtstruktur aus 3 nm GaInP und 3 nm InP (10 Perioden)

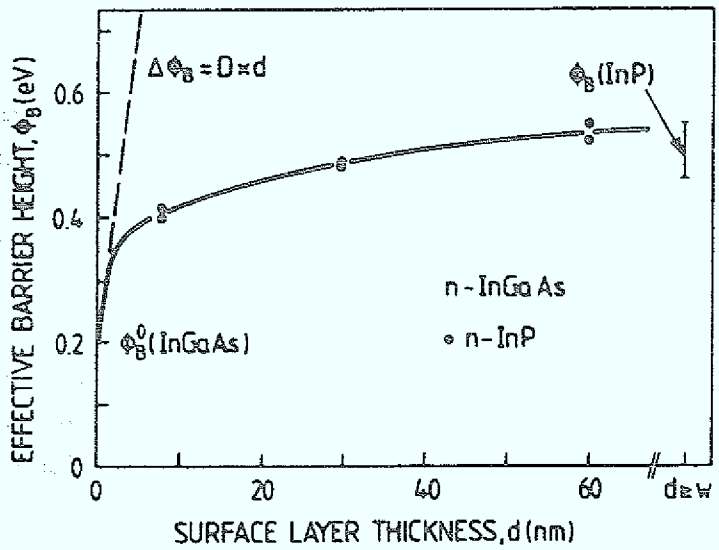


Abb. 7.6: Höhe der Schottky-Barriere auf n-GaInAs als Funktion der Dicke einer n-InP-Deckschicht

Barrierenerhöhung durch GaInP

Um aber möglichst eine noch stärkere Anhebung der Barrierenhöhe zu erreichen, soll anstelle von InP mit $Ga_xIn_{1-x}P$ ein Material mit größerer Bandlücke für die Deckschicht verwendet werden. Die Ga-Konzentration und die Schichtdicke sind dabei so zu wählen, daß die kritische Dicke nicht überschritten wird. Bei einem GaP-Anteil von 12 % (kritische Dicke etwa 12 nm), durch den die Bandlücke gegenüber purem InP um etwa 90 meV vergrößert wird, wird daher nur eine 8 nm dicke GaInP-Schicht auf das n-GaInAs aufgebracht. Die aus dieser Probe hergestellten Dioden weisen bei einem Idealitätsfaktor von 1,08 eine Barrierenhöhe von 0,40 eV auf (s. Tab. 7.2). Um trotz der Beschränkung in der Schichtdicke des GaInP eine noch größere Dicke nutzen zu können, wird in einem weiteren Versuch als Deckschicht eine insgesamt 60 nm dicke Mehrschichtstruktur aus 10 Perioden mit abwechselnd 3 nm $Ga_{0,12}In_{0,88}P$ und 3 nm InP abgeschieden. ϕ_B läßt sich dadurch immerhin auf 0,51 eV steigern. Bei beiden Proben werden damit aber eher etwas kleinere Barrierenhöhen als bei den Dioden mit purem InP gleicher Dicke gemessen. Daß entgegen einer erwarteten Verbesserung also eine, wenn auch nur geringe, Verschlechterung der Sperrwirkung festzustellen ist, könnte eventuell auf durch die Verspannung hervorgerufene Kristallstörungen zurückzuführen sein. Einen derartigen Schluß unterstützen auch Experimente, in denen GaAs, das eine noch stärkere Fehlpassung aufweist, zur Erhöhung der Barriere auf GaInAs eingesetzt wurde.

Deckschichten aus GaAs

GaAs, das ungefähr die gleiche Bandlücke wie $Ga_{0,12}In_{0,88}P$ hat, ist als Material zur Barrierenerhöhung besonders interessant, da die Schottky-Barriere auf einfachem n-leitenden GaAs 0,8 eV beträgt. Aufgrund der hohen Fehlpassung zum InP liegt die kritische Schichtdicke für die Abscheidung von GaAs auf InP jedoch bei nur wenigen Nanometern (s. Abb. 2.5, S. 22). Es werden daher Diodenstrukturen mit GaAs-Deckschichten von 2 – 300 nm Dicke hergestellt, das heißt sowohl mit verspannten wie auch mit weitestgehend relaxierten GaAs-Schichten.

In Abb. 7.7 sind die an diesen Dioden gemessenen Sperrstromdichten gegen die Dicke des GaAs aufgetragen. Bei den Proben mit 2 bzw. 4 nm dickem GaAs, also mit einer Dicke in der Nähe des kritischen Wertes, liegen die Sperrstromdichten um 1 A/cm^2. Bei einer Vergrößerung der Schichtdicke nimmt J_R sprunghaft um einen Faktor 100 zu. Damit liegt der Wert um ca. 3 Größenordnungen über dem, der bei einer InP-Deckschicht mit vergleichbarer Dicke gemessen wurde und das, obwohl GaAs an sich die höhere Barriere hat. Mit zunehmender Dicke fällt dann allerdings J_R um über 5 Größenordnungen bis auf 5×10^{-4} A/cm^2 bei 300nm. Dieser drastische Rückgang wurde ähnlich auch von anderen Gruppen beobachtet, wie Abb. 7.7 zeigt.

Da die sprunghafte Zunahme in J_R zwischen 4 und 10 nm mit dem Überschreiten der kritischen Schichtdicke einhergeht, ist anzunehmen, daß mit den Versetzungen entstandene Defekte zu dem hohen Leckstrom führen. Mit zunehmender Dicke wächst

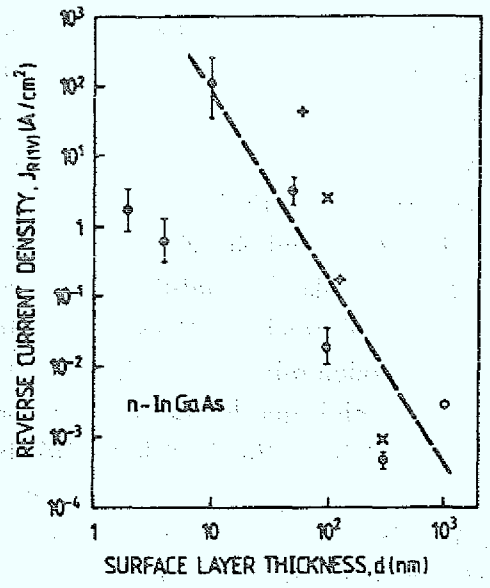


Abb. 7.7: Sperrstromdichte von n-GaInAs-Schottky-Dioden mit GaAs-Deckschichten verschiedener Dicke (•: eigene Daten, +: Ref. [94], ×: Ref. [103], ○: Ref. [104]).

das GaAs als relaxierte Schicht auf, und die Anzahl der Defekte geht zurück. Das zeigt sich auch in Rasterelektronenmikroskopaufnahmen, in denen die Proben mit den dünneren GaAs-Schichten eine deutliche Rauhigkeit der Oberfläche erkennen lassen, während die dickeren Schichten im wesentlichen glatt sind. Offenbar können dadurch für extrem dicke Schichten wieder niedrige Leckstromdichten erreicht werden. Doch die Notwendigkeit zur Abscheidung einiger Hundert Nanometer dicker Schichten ist für die Anwendung in einer HEMT-Struktur äußerst nachteilig. Üblicherweise beträgt dort der Abstand zwischen Gate und Kanal weniger als 100 nm. In diesem Schichtdickenbereich zeigen jedoch die Dioden mit InP-Barrieren um Größenordnungen niedrigere Leckströme als die Proben mit GaAs-Barrieren. Unter Berücksichtigung der vorgesehenen Anwendung ist GaAs demnach keine Alternative zu InP, um die Barriere von n-$Ga_{0,47}In_{0,53}As$ zu erhöhen.

Zusammenfassung

Insgesamt können die Möglichkeiten zur Erhöhung der Schottky-Barriere von n-$Ga_{0,47}In_{0,53}As$ durch Deckschichten aus InP, GaInP oder GaAs folgendermaßen zusammengefaßt werden: Mit wachsender InP-Schichtdicke nimmt die Barrierenhöhe zunächst zu. Bei 60 nm wird dabei ein Wert von 0,55 eV erreicht, das heißt eine Barrierenhöhe, wie sie auch direkt an n-InP gemessen wird. $Ga_{0,12}In_{0,88}P$ bringt demgegenüber keinen Vorteil, zumal auch die einsetzbare Schichtdicke aufgrund der Fehlpassung begrenzt ist. GaAs hat sich hingegen als gänzlich ungeeignete Alternative herausgestellt.

7.3 Transistorteststruktur

Mit der Möglichkeit zur Erhöhung der Schottky-Barriere von n-GaInAs durch p-dotierte GaInAs- oder reine InP-Deckschichten sind nun alle materialseitigen Voraussetzungen gegeben, um einen Al-freien HEMT herstellen zu können. Dies soll auf der Grundlage der bisherigen Erfahrungen mit einer ersten Teststruktur demonstriert werden. Ausgangspunkt ist daher wieder die 2DEG-Struktur aus Abb. 6.2 (S. 91). Die Dicke der $Ga_{0,47}In_{0,53}As$-Schicht wird zu 160 nm gewählt, da hierbei noch sehr hohe Beweglichkeiten der 2D-Elektronen gemessen werden konnten. Zur Barrierenerhöhung werden darauf noch 60 nm InP aufgebracht. Die mit dieser Deckschicht erreichte Barrierenhöhe von 0,55 eV entspricht in etwa derselben Höhe, die mit einer *vollständig verarmten* p-GaInAs-Schicht zu erreichen ist ($\phi_B = C \cdot E_g = 0,75 \cdot 0,75\,\text{eV} = 0,56\,\text{eV}$). Gegenüber p-dotiertem GaInAs hat eine reine InP-Schicht jedoch den Vorteil, daß eventuelle Memory-Effekte des Zinks vermieden werden. Darüber hinaus lassen sich mit

einer InP-Schicht über dem GaInAs-Kanal auch noch komplexere Heterostrukturen realisieren.

Zur Fertigung des Transistors wird die Probe auf photolithographischem Wege strukturiert, eine Mesa-Struktur geätzt und die Metallkontakte aufgedampft. Der Abstand zwischen Source und Drain beträgt dabei ca. 5 μm, während das dazwischenliegende Gate eine Länge von 1,2 und eine Weite von 100 μm hat.

Abb. 7.8 zeigt die I-U-Kennlinien dieses Transistors, die den für einen HEMT typischen Verlauf haben. Auffällig ist die extrem hohe Spannungsfestigkeit, die eine Drain-Source-Spannung von bis zu 11 V gestattet. Dagegen ist in veröffentlichten Kennlinien von AlInAs/GaInAs-HEMTs U_{DS} meist kleiner als 3 V.

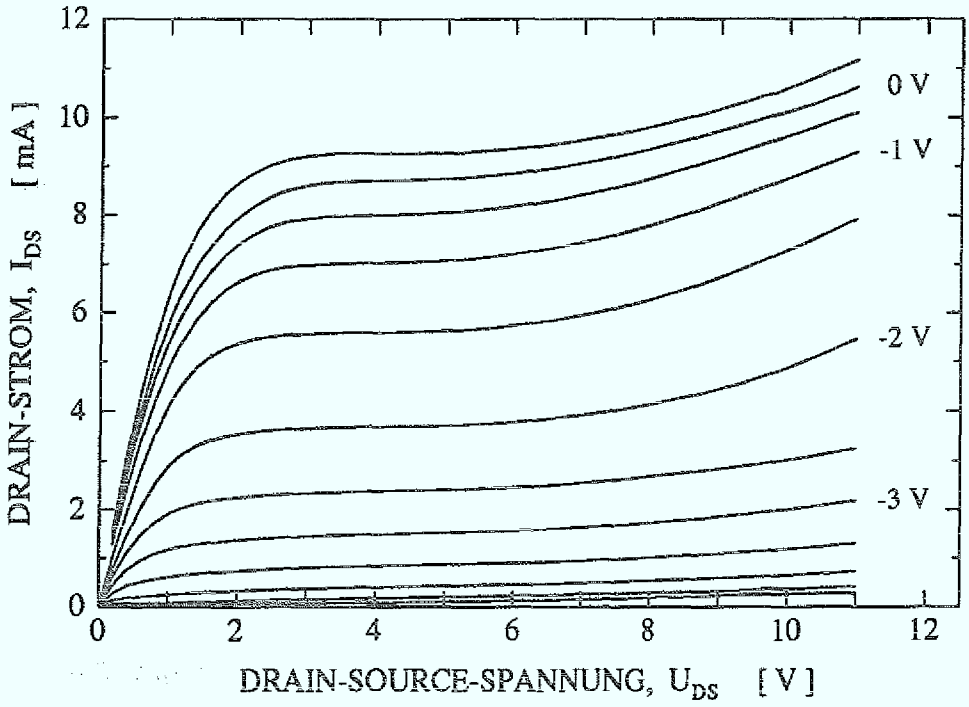


Abb. 7.8: I-U-Kennlinien der Transistorteststruktur. Parameter ist die Gate-Spannung U_{GS}, die in Schritten von 0,5 V verändert wurde.

Der Kanal kann durch eine Erniedrigung der Gate-Spannung nahezu vollständig abgeschnürt werden. Die Steilheit, also die Änderung des Drain-Stromes mit der Gate-Spannung, beträgt dabei maximal 60mS/mm. Zur Einordnung dieses Wertes sei gesagt, daß mit AlInAs/GaInAs-HEMTs bereits Steilheiten von einigen Hundert bis Tausend mS/mm erreicht werden konnten. Dabei ist allerdings zu berücksichtigen, daß bei diesen Transistoren die Gate-Längen meist deutlich im Sub-μ-Bereich lagen. Außerdem ist der hier verwendete Aufbau der Schicht aus der Struktur zur Charakterisierung der

Materialqualität hervorgegangen und daher noch in keiner Weise auf die Anforderungen für HEMT-Anwendungen hin optimiert. Vergleicht man die elektrischen Daten dieser Probe mit denen typischer HEMT-Strukturen, so zeigt sich, daß zwar die Beweglichkeit der 2D-Elektronen mit 10.000cm^2/Vs einen vergleichbar hohen Wert erreicht, die Dichte der Ladunsträger mit $5 \times 10^{11}\,\mathrm{cm}^{-2}$ jedoch deutlich zu niedrig liegt. Für die Herstellung hochwertiger HEMTs sind dagegen Elektronendichten von wenigstens $5 \times 10^{11}\ \mathrm{cm}^{-2}$ erforderlich. Bei den besten bisher hergestellten HEMTs auf AlInAs/GaInAs-Basis, mit denen bei Gate-Längen von nur 50 nm und mit einem verspannten $Ga_{0,20}In_{0,80}As$-Kanal Steilheiten von 1750 mS/mm erzielt wurden [10], betrug die Elektronendichte sogar über $3 \times 10^{12}\ \mathrm{cm}^{-2}$ und das bei einer Beweglichkeit von mehr als 12.000 cm^2/Vs.

Dieser erste Versuch zeigt aber immerhin, daß sich im Materialsystem GaInAs/InP Transistoren mit einem 2DEG als stromführender Schicht auch ohne die Verwendung von Al-haltigen Verbindungen realisieren lassen. Die hohe Spannungsfestigkeit dieser Transistoren läßt sie dabei auch für Leistungsanwendungen interessant erscheinen. Vor einer weitergehenden Bewertung der Möglichkeiten dieser Materialkombination ist jedoch unbedingt der Aufbau der Proben zu optimieren. Als entscheidendes Kriterium gilt es dabei, die Leitfähigkeit im 2D-Kanal zu maximieren, das heißt vor allem die Elektronendichte zu erhöhen.

Kapitel 8

Strukturelle und optische Eigenschaften von $Ga_{1-x}In_xAs$/InP-Quantentopfstrukturen

Bisher wurde in allen Heterostrukturen ausschließlich gitterangepaßtes GaInAs verwendet. Im folgenden wird es jedoch das Ziel sein, unter Beibehaltung der kristallinen Qualität der Schichten, die In-Konzentration so weit wie möglich über die üblichen 53 % hinaus zu erhöhen, um so den Leitungsband-Offset und damit die maximal erreichbare Ladungsträgerdichte im 2DEG, sowie die Beweglichkeit der Elektronen zu vergrößern. Bevor aber derartige Schichten in HEMTs zum Einsatz kommen, werden zunächst einige Eigenschaften dieser Materialien untersucht. In diesem und dem anschließenden Kapitel wird es daher hauptsächlich um die Charakterisierung verspannter $Ga_{1-x}In_xAs$/InP-Quantentopfstrukturen gehen, wie sie ähnlich später auch für die HEMT-Strukturen vorgesehen sind. Am Anfang steht natürlich die Bestimmung der Zusammensetzung der $Ga_{1-x}In_xAs$-Quantentöpfe. Darüber hinaus ist die Größe der Bandlücke von verspanntem $Ga_{1-x}In_xAs$ zu ermitteln, da sie als Eingangsparameter für selbstkonsistente Bandverlaufsrechnungen zur Optimierung des Aufbaus der HEMTs gebraucht wird. Im Anschluß daran werden die Auswirkungen eines Inreichen Kanals in der 2DEG-Struktur auf die Beweglichkeit der Elektronen analysiert.

8.1 Abscheidung von $Ga_{1-x}In_xAs$

An Hand einfacher $Ga_{1-x}In_xAs$-Schichten soll zunächst der Zusammenhang zwischen der Zusammensetzung der Gasphase und der des Festkörpers geklärt werden. Bei bekannter Abhängigkeit können dann in späteren Epitaxien gezielt gewünschte Konzentrationen der Elemente in den Kristallen über die Partialdrücke der Metallorganika eingestellt werden.

Nach den Ausführungen in Abschnitt 2.2 sollte das In/Ga-Verhältnis im Festkörper proportional zum Verhältnis der Partialdrücke der Metallorganika sein (Gl.(2.5)):

$$\frac{x_{\mathrm{In}}}{x_{\mathrm{Ga}}} = \frac{x_{\mathrm{In}}}{1 - x_{\mathrm{In}}} = c \cdot \frac{p_{\mathrm{TMIn}}}{p_{\mathrm{TMGa}}} \tag{8.1}$$

Die Proportionalitätskonstante c läßt sich aus den Daten einer einzelnen Probe ermitteln, wofür sich eine gitterangepaßte Schicht anbietet, deren Zusammensetzung mittels Röntgendiffraktometrie sehr genau bestimmt werden kann. Für c ergibt sich so ein Wert von $0,706$. Es muß demnach mehr TMIn als TMGa angeboten werden, um gleiche Konzentrationen an Indium und Gallium im Festkörper zu bekommen. Dies ist durchaus verständlich, da das Wachstum im diffusionskontrollierten Bereich stattfindet und TMIn als das größere Molekül eine kleinere Diffusionskonstante hat. Bei gleichem Angebot in der ungestörten Gasphase gelangt daher weniger TMIn über die Diffusionsgrenzschicht zur Substratoberfläche. Mit dieser Konstanten kann nun aus der obigen Beziehung berechnet werden, welche In-Konzentration im $Ga_{1-x}In_xAs$ bei einem bestimmten Partialdruckverhältnis zu erwarten ist.

Zur experimentellen Überprüfung wird eine Reihe von Proben mit 200 nm dicken $Ga_{1-x}In_xAs$-Schichten hergestellt. Von gitterangepaßtem Material ausgehend wird dabei jeweils nur das Angebot an TMIn erhöht. Die damit verbundene Zunahme in der Wachstumsrate wird durch eine entsprechende Verkürzung der Wachstumszeit ausgeglichen.

Um bei der Bestimmung der Zusammensetzung dieser Schichten nicht von speziellen Eigenschaften der Kristalle wie der Gitterstruktur oder der Bandlücke, die durch die Spannung verändert werden, abhängig zu sein, wird als Analyseverfahren die Massenspektrometrie zerstäubter Neutralteilchen (SNMS, s. Abschn. 3.3) eingesetzt, mit der die einzelnen Elemente direkt nachgewiesen werden. Zur Kalibrierung der relativen Empfindlichkeitsfaktoren wird die gitterangepaßte Probe benutzt, deren exakte Zusammensetzung vorher durch eine Röntgen-Messung ermittelt wurde. Das Tiefenprofil dieser Schicht zeigt Abb. 8.1a. Wie zu erkennen, ist die Zusammensetzung in der Tiefe konstant und der Übergang zum InP-Puffer scharf definiert. Im Gegensatz dazu erscheint bei der verspannten Schicht mit einem InAs-Anteil von 76 % in Abb. 8.1b der Übergang wesentlich verschmierter. Bei diesem hohen In-Gehalt ist jedoch die Oberfläche der Probe bereits deutlich getrübt, und im Lichtmikroskop zeigt sie eine sehr hohe Defektdichte. Die Oberfläche ist also schon vor dem Sputtern sehr rauh, was natürlich die Tiefenauflösung bei der Messung verschlechtert. Über die Schärfe der Grenzfläche bei der verspannten Schicht läßt sich daher nichts Definitives aussagen. Auf jeden Fall existiert aber innerhalb der GaInAs-Schicht ein Bereich mit konstanten Verhältnissen, so daß eine zuverlässige Auswertung der Konzentrationen vorgenommen werden kann (angegebener Fehler: 1 % absolut).

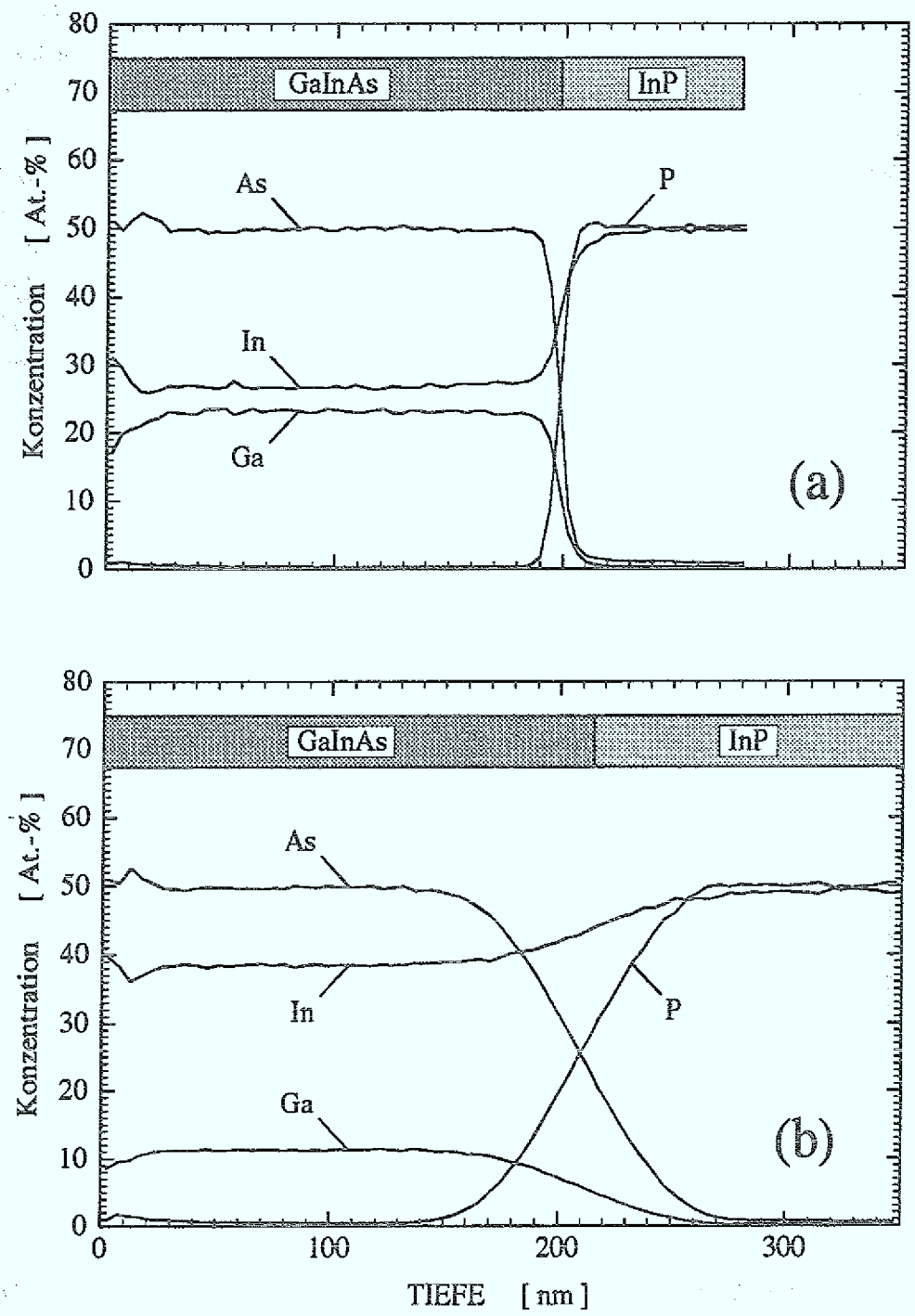


Abb. 8.1: SNMS-Messungen an GaInAs-Schichten mit unterschiedlichen Kompositionen (InAs-Anteil: 53 (a) bzw. 76 % (b))

Zur Absicherung der Meßergebnisse sind die Proben zusätzlich mittels der Elektronenstrahlmikroanalyse (EMA) und einige andere noch mit der Rutherford-Rückstreumethode (RBS, **R**utherford **B**ackscattering **S**pectrometry) untersucht worden. Bei den EMA-Messungen wurde neben dem gitterangepaßten GaInAs noch eine 200 nm dicke GaAs-Schicht auf InP als zweite Referenzprobe benutzt, wodurch auch hier eine Genauigkeit von ± 1 % bei der Bestimmung der Zusammensetzung der $Ga_{1-x}In_xAs$-Schichten erreicht wurde. Die RBS-Messungen wurden dagegen ohne eine Referenzprobe durchgeführt, so daß es sich hierbei um reine Absolutangaben handelt, deren Fehler allerdings bei etwa 5 % liegt. Alle Meßergebnisse sind in Abb. 8.2 gegenüber den nach den Partialdrücken zu erwartenden InAs-Anteilen aufgetragen. Die Gerade in diesem Diagramm entspricht dabei der Linie gleicher Werte. Im Rahmen der Meßgenauigkeiten stimmen demnach die Meßergebnisse vollkomen mit den Erwartungen überein. Damit kann also das im Prozeß einzustellende Partialdruckverhältnis für eine gewünschte In-Konzentration im Kristall aus Gl. (8.1) ermittelt werden.

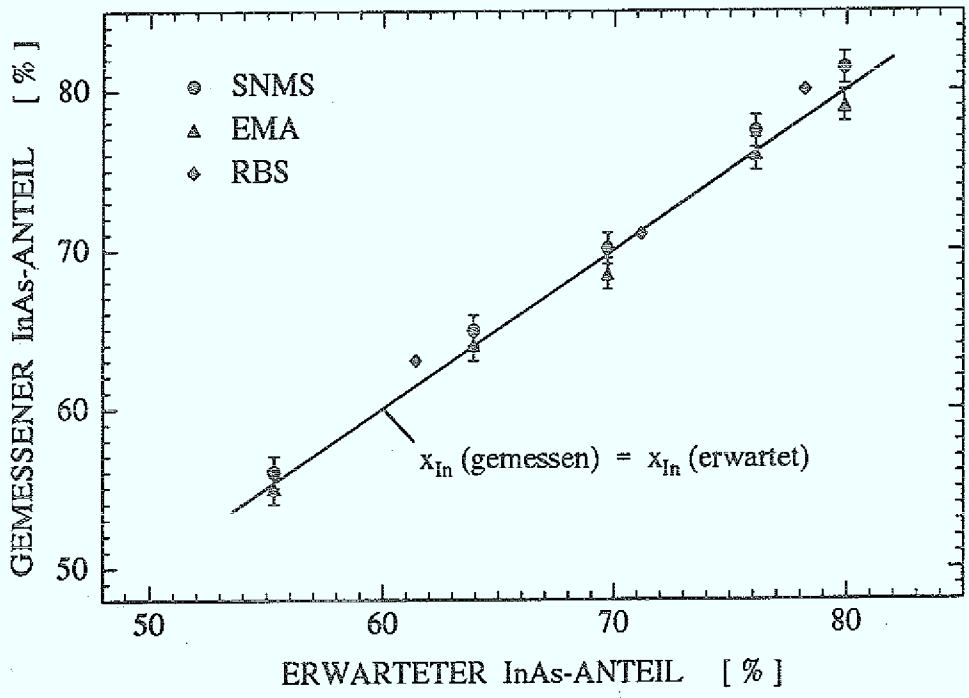


Abb. 8.2: Im Festkörper gemessener InAs-Anteil gegenüber dem nach dem Partialdruckverhältnis zu erwartenden.

8.2 Röntgenbeugung an einem $Ga_{0,47}In_{0,53}As/InP$-Übergitter

Anders als bei den oben untersuchten, noch relativ dicken Schichten, werden in Quantentopfstrukturen nur etwa 10 nm dicke GaInAs-Schichten verwendet. Die Bestimmung der Zusammensetzung solch dünner GaInAs-Schichten bzw. die Strukturanalyse entsprechender GaInAs/InP-Quantentopfstrukturen geht aber an die Grenze des Auflösungsvermögens von Analysemethoden. So liegt beispielsweise die Tiefenauflösung der SNMS bei etwa 10 nm. Bei der RBS wird die Ermittlung der In- bzw. der Ga-Konzentration dagegen durch eine Überlagerung der verschiedenen Meßsignale erheblich erschwert, da zum einen In sowohl im InP wie auch im GaInAs enthalten ist und zum anderen Ga und As in etwa die gleiche Masse haben. Daher wird hier die Röntgendiffraktometrie eingesetzt, bei der allein aus der Verformung der Elementarzelle der verspannten Schichten auf deren Zusammensetzung geschlossen wird. Um bei der geringen Schichtdicke des GaInAs noch genügend Signal zu erhalten, werden Übergitterstrukturen hergestellt, in denen sich also GaInAs- und InP-Schichten mit konstanten Dicken periodisch abwechseln.

Bevor jedoch verspannte Strukturen analysiert werden, soll als Einstieg zuerst einmal die Beugung von Röntgenstrahlen durch ein Übergitter mit nahezu gitterangepaßtem GaInAs untersucht werden. Dazu wird eine Probe mit 10 Perioden aus 10 nm $Ga_{0,47}In_{0,53}As$ und 40 nm InP hergestellt (s. Abb. 8.3). Dieser Aufbau stellt einen Kompromiß zwischen verschiedenen Randbedingungen dar. Zum einen entsprechen die 10 nm für die GaInAs-Schichten der Dicke, die auch für den Quantentopf

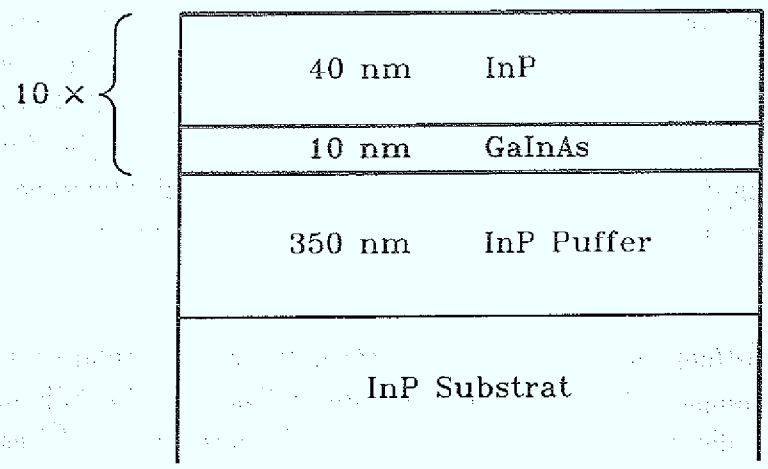


Abb. 8.3: Aufbau der GaInAs/InP-Übergitterstrukturen

in der HEMT-Struktur vorgesehen ist, so daß die Meßergebnisse direkt übertragen werden können. Zum anderen ist die Lage des Peaks 0ter Ordnung des Übergitters, der ja die Zusammensetzung der gesamten Struktur widerspiegelt, durch die *mittlere* Fehlpassung innerhalb einer Periode bestimmt. Zur Berechnung der Fehlpassung im GaInAs ist dieser Mittelwert mit dem Verhältnis aus Periodenlänge des Übergitters $d_{SL} = d_{InP} + d_{GaInAs}$ und Schichtdicke des GaInAs d_{GaInAs} zu multiplizieren. (Voraussetzung: keine Verspannung im InP(!), keine Relaxation). Um dabei den absoluten Fehler klein zu halten, sollte die Dicke des InP nicht wesentlich größer als die des GaInAs sein. Andererseits ist auch die Einhüllende der Satelliten-Peaks, aus deren Periode die Dicke der GaInAs-Schichten ermittelt werden kann, mit dem Schichtdickenverhältnis korreliert. Bei einem hohen Verhältnis ist der Verlauf der Einhüllenden deutlicher zu erkennen. Aufgrund dieser gegenläufigen Tendenzen erscheint ein Verhältnis von $d_{SL} : d_{GaInAs} = 5 : 1$ als geeigneter Kompromiß. Um darüber hinaus später bei verspannten GaInAs-Schichten die Spannung insgesamt nicht zu groß werden zu lassen, werden nur 10 Perioden abgeschieden.

Das Diffraktogramm dieser Probe, gemessen am (004)-Reflex des InP, ist in Abb. 8.4 dargestellt. Neben dem Substrat-Peak und dem in dieser Darstellung nur als Schulter erkennbaren Peak 0ter Ordnung des Übergitters sind über einen Winkelbereich von 6° mehr als 40 Satelliten-Peaks zu erkennen. Ihre hohe Intensität und geringe Halbwertsbreite (36" für die ersten Ordnungen), die nach Simulationen bei dieser Struktur nicht kleiner sein kann, sprechen für eine gute kristalline Qualität und ebene Grenzflächen. Die Übergitterperiode wird zu 47,3nm und die Dicke der GaInAs-Schicht zu 9,5 nm bestimmt. Dies entspricht bis auf zwei Monolagen dem nach den Herstellungsparametern erwarteten Wert. Für den InAs-Anteil ergibt sich aus dem Abstand des Peaks 0ter Ordnung vom Substratreflex bei einer relativen Abweichung der mittleren Gitterkonstante von 180 ppm unter Berücksichtigung des Dickenverhältnisses ein Wert von 54,6 %. Diese Konzentration liegt unerwartet hoch, da an einer unter gleichen Bedingungen hergestellten Kontrollprobe mit einer 1 μm dicken GaInAs-Schicht ein Gehalt von 52,8 % ($\frac{\Delta a}{a} = -327\ ppm$) gemessen wurde und die Zusammensetzung zumindest solch dicker Schichten bis auf 0,1 % genau reproduzierbar ist. Die mittlere Gitterkonstante des Übergitters ist also im Vergleich zum Vorversuch zu größeren Werten hin verschoben.

Zur Überprüfung der Auswertung wurde daher eine Simulation mit den aus der Messung gewonnenen Daten durchgeführt, deren Ergebnis ebenfalls in Abb. 8.4 dargestellt ist. In dieser Simulation treten die Satellitenreflexe des Übergitters bei denselben Winkeln auf wie in dem gemessenen Diffraktogramm. Auch die Position der Minima der Einhüllenden der Satelliten zeigt, soweit erkennbar, keine signifikanten

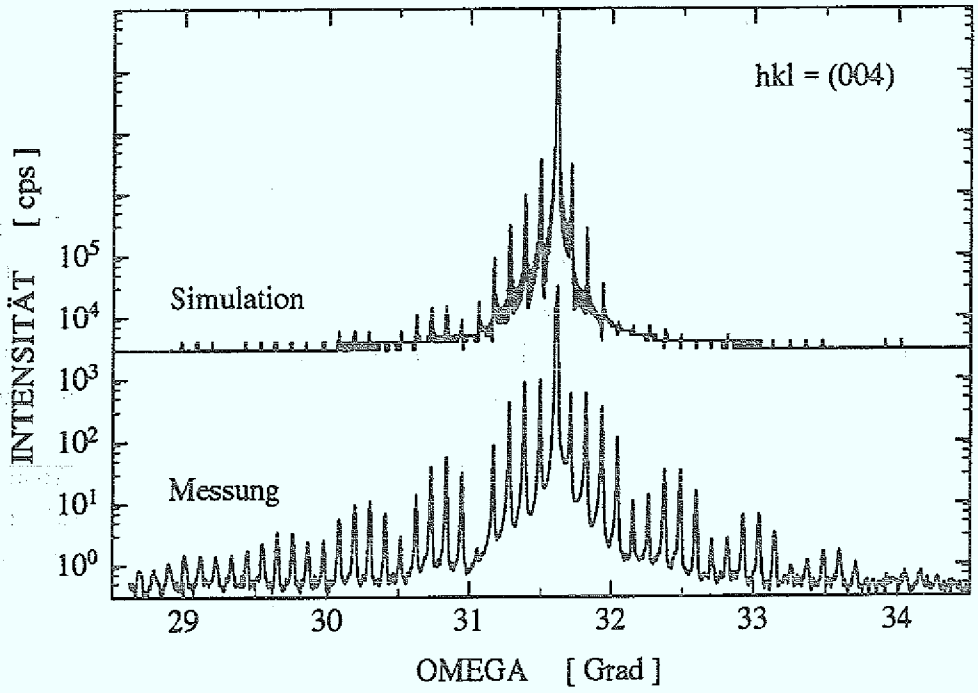


Abb. 8.4: Diffraktogramm eines $Ga_{0,47}In_{0,53}As/InP$-Übergitters. Für die Darstellung ist die Kurve zur Reduktion des Rauschens über eine Fourier-Filterung geglättet worden. In der Simulation dieses Diffraktogramms, die der Übersichtlichkeit halber gegenüber der Messung um vier Größenordnungen verschoben ist, wurde nur von abwechselnden GaInAs- und InP-Schichten ausgegangen. Die berechnete Intensität wurde auf die gemessene Intensität des Substratreflexes hin korrigiert.

Abweichungen. Die Schichtdicken sind folglich korrekt. Aber obwohl in der Simulation die Intensität an die gemessene Intensität des Substrat-Peaks angepaßt ist, sind die Intensitäten der Satelliten-Peaks erheblich zu niedrig. Einige Satelliten-Peaks zeigen in der Messung bis zu zwei Größenordungen *mehr* Intensität, als nach der Simulation zu erwarten wäre. Abweichungen in der Periodizität wie *Inhomogenitäten in der Schichtdicke* oder *Grenzflächenrauhigkeiten* würden aber zu breiteren Peaks mit *niedrigeren* Intensitäten führen. Der Aufbau dieser Quantentopfstruktur muß sich daher grundlegend von der in dieser Simulation angenommenen Vorstellung abwechselnder InP- und GaInAs-Schichten unterscheiden.

8.3 Änderung der Gitterkonstante an den Grenzflächen

Die Ursache für diese großen Intensitätsunterschiede wird deutlich, wenn man sich einen perfekt abrupten Heteroübergang einmal genauer anschaut (Abb. 8.5). Bei der Deposition von InP werden abwechselnd einzelne Atomlagen von In- und P-Atomen abgeschieden. An der Grenzfläche wird das Wachstum unterbrochen und die Oberfläche mit PH_3 stabilisiert. Die oberste Schicht besteht daher aus einer Atomlage Phosphor. Das Wachstum einer GaInAs-Schicht beginnt nun mit einer Atomlage statistisch verteilter Ga- und In-Atome, gefolgt von einer Schicht As-Atome. Die Atome der GaIn-Lage haben demnach Bindungen zu den darunterliegenden P-Atomen und den darüberliegenden As-Atomen. Spricht man also einfach von einem InP–GaInAs-Übergang, so impliziert das automatisch eine Zusammenfassung der GaIn- mit der As-Atomlage zu einer Monolage GaInAs. Ist das Ga/In-Verhältnis 47:53, handelt es sich also um gitterangepaßtes GaInAs, so tritt in der gesamten Struktur keine Änderung in der Gitterkonstanten auf. Genauso gut könnte man aber auch die GaIn-Atome mit den P-Atomen in der Lage darunter zusammenfassen, wie im rechten Teil der

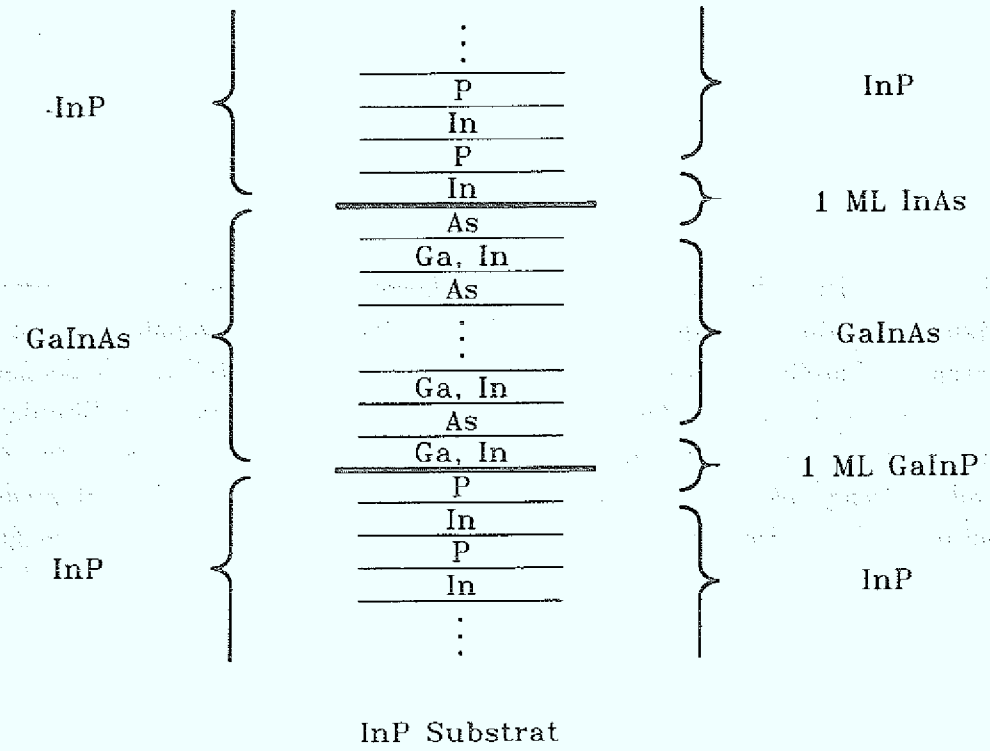


Abb. 8.5: Betrachtung der Heteroübergänge auf einer atomaren Skala

Abb. 8.5 veranschaulicht. Die Konsequenz daraus wäre eine Monolage hochverspanntes $Ga_{0,47}In_{0,53}P$ ($\frac{\Delta a}{a} = -35.000$ ppm) zwischen dem InP und dem gitterangepaßten GaInAs.

Es ist daher davon auszugehen, daß es durch die unterschiedlichen Bindungslängen zwischen den Atomen zu einer Diskontinuität der Gitterkonstanten an der Grenzfläche kommt. Diese Vorstellung über eine intrinsische Verspannung an den Grenzflächen zwischen Kristallen mit unterschiedlichen Gruppe-III- und Gruppe-V-Elementen wurde auch bereits von Vandenberg et al. bei der Interpretation von Diffraktogrammen von GaInAs/InP-Übergittern entwickelt [105, 106]. In einer neuen Simulation des Übergitters wird diese Verspannung dadurch berücksichtigt, daß eine Monolage mittlerer Zusammensetzung, das heißt $Ga_{0,454}In_{0,546}As_{0,5}P_{0,5}$, an der Grenzfläche eingeschoben wird. Die verschiedenen Gruppe-V-Atomlagen werden quasi jeweils zur Hälfte der GaIn-Schicht zugerechnet.

An den oberen Grenzflächen ergibt sich prinzipiell dasselbe Problem, nur daß Arsen und Phosphor hier eine reine In-Atomlage einschließen. An dieser Stelle ist daher eine $InAs_{0,5}P_{0,5}$-Monolage einzuführen. Innerhalb eines Übergitters mitteln sich so

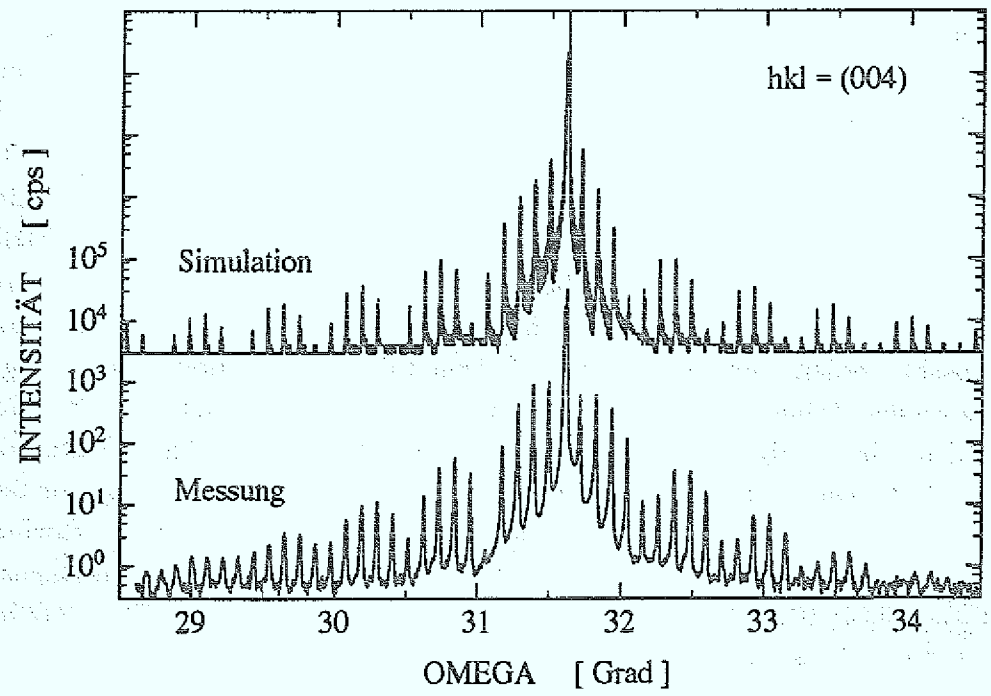


Abb. 8.6: Simulation des GaInAs/InP-Übergitters unter Berücksichtigung von intrinsischen Verspannungen an den Grenzflächen, die als Folge der unterschiedlichen Bindungslängen entstehen.

auch die halben Atomlagen heraus und keine bleibt unberücksichtigt. Da die Fehlpassung des $InAs_{0,5}P_{0,5}$ ($\frac{\Delta a}{a} = 16.000$ ppm) vom Betrag her nahezu genauso groß wie die des $Ga_{0,454}In_{0,546}As_{0,5}P_{0,5}$ ($\frac{\Delta a}{a} = -15.500$ ppm) ist, aber das andere Vorzeichen trägt, ändern beide Schichten zusammen praktisch nichts an der mittleren Verspannung im Übergitter. Ihr Einfluß auf die Intensität der Satelliten-Peaks ist dagegen erheblich, wie Abb. 8.6 zeigt. Im Vergleich zur ersten Simulation sind die Intensitäten der hohen Ordnungen wesentlich höher und erreichen annähernd die gemessenen Werte.

Daß diese im Vergleich zum gesamten streuenden Volumen geringfügige Änderung einen so deutlichen Effekt nach sich zieht, erklärt sich daraus, daß sich durch die Änderung der Bindungslängen an den Grenzflächen die Position aller Atome in den GaInAs-Schichten gegenüber denen in den InP-Schichten verschieben. Für die gestreuten Röntgenstrahlen bedeutet das eine Phasenverschiebung, die das gesamte Interferenzbild verändert.

8.4 Variation der Zusammensetzung auf dem Gruppe-III-Untergitter

Die Annahme hochverspannter Zwischenschichten verringert die anfänglichen Unterschiede zwischen der Simulation und der Messung des Übergitters zwar schon deutlich, doch können auch damit immer noch nicht alle Differenzen erklärt werden. Insbesondere die Satelliten niedriger Ordnung zeigen noch deutlich weniger Intensität als in der Messung. Es stellt sich daher die Frage, ob eventuell Gradienten in der Zusammensetzung der Schichten existieren. So wurde beispielsweise bei der MBE von GaInAs eine Segregation von In beobachtet [107, 108]. Bei der MOVPE kommt erschwerend hinzu, daß zum Wechsel der Materialzusammensetzung die ganze Gasphase ausgetauscht werden muß. Aufgrund der Trägheit des Systems braucht es eine gewisse Zeit, bis wieder stabile Verhältnisse herrschen. Bei ununterbrochenem Wachstum sind daher mehr oder weniger fließende Übergänge zwischen verschiedenen Materialien zu erwarten [109]. Die tatsächliche Breite solcher Übergänge hängt allerdings von den speziellen experimentellen Gegebenheiten wie zum Beispiel der Strömungsgeschwindigkeit oder den Partialdrücken der Gase ab. Außerdem wird mit den hier beim Depositionsprozeß gemachten Wachstumspausen, zumindest was die Gruppe-III-Elemente betrifft, diesem Effekt entgegengearbeitet.

Um nun die Verteilung der verschiedenen Elemente in den Schichten mittels Röntgendiffraktometrie zu untersuchen, sind jedoch GaInAs/InP-Strukturen nicht besonders gut geeignet, da bei ihnen sowohl die Elemente auf dem Gruppe-III- wie auch auf dem Gruppe-V-Untergitter ausgetauscht werden. Die Beschränkung auf Variationen

nur innerhalb eines Untergitters reduziert den Parameterraum und erleichtert die Analyse. Im Ga-In-As-P-System bedeutet es aber gleichzeitig auch, daß nur verspannte Strukturen möglich sind.

Während der Fluß der Gruppe-III-Verbindungen in den Reaktor für Wachstumspausen zum Wechsel der Gasphase ohne größere Probleme unterbrochen werden kann, sollte der Partialdruck der Gruppe-V-Verbindungen zur Stabilisierung der heißen Kristalloberfläche ständig aufrechterhalten werden. Die Zusammensetzung des Gruppe-III-Untergitters läßt sich daher einfacher gezielt verändern als die der Gruppe-V-Komponente. Es werden daher zunächst Übergitter mit wechselnden Gruppe-III-Anteilen hergestellt.

Die erste Probe besteht dabei ausschließlich aus GaInAs, allerdings mit zwei unterschiedlichen In-Konzentrationen innerhalb einer Periode. Vergleichbar mit dem GaInAs/InP-Übergitter wechseln hier 10 nm verspanntes $Ga_{0,431}In_{0,569}As$ mit 40 nm exakt gitterangepaßtem $Ga_{0,467}In_{0,533}As$ ab. Beide Materialien werden mit einer eigenen TMGa-TMIn-Quellenkombination hergestellt, so daß während der gesamten Epitaxie alle Flüsse, die Wachstumsrate und das V/III-Verhältnis konstant gehalten werden können. Zum Wechsel der Gasphase werden jeweils Wachstumspausen von 3 s Dauer gemacht, die damit deutlich länger sind als für den Austausch der Gasphase eigentlich nötig wäre. Bei einer Strömungsgeschwindigkeit von 2,8 m/s und einer Reaktorlänge von etwa 0,5 m sollten bereits 0,2 s nach ihrem Abschalten die Metallorganika aus dem Reaktor gespült sein. Gasphaseneffekte sollten die Verteilung der Elemente im Festkörper also nicht mehr beeinflussen.

In Abb. 8.7 ist dem Diffraktogramm dieser Probe eine Simulation (Simulation I) basierend auf der angestrebten Probenstruktur gegenübergestellt. Wie zu sehen, weichen beide nur geringfügig voneinander ab. Am augenfälligsten ist noch die leichte Verschiebung der Lage der Satelliten-Peaks, die am Beispiel des Peaks -5ter Ordnung deutlich gemacht ist und die aus einer Abweichung in der Periodenlänge des Übergitters resultiert. Die Anpassung der Simulation an die Messung ergibt, daß die verspannte GaInAs-Schicht etwa 1 nm dünner ist und 0,3 % mehr Indium enthält als geplant. Für die gitterangepaßte Schicht ist nur die Dicke um 1,4 nm nach unten zu korrigieren. Die Simulation mit den korrigierten Parametern (Simulation II) ist nahezu deckungsgleich mit der Messung. Es müssen demnach keine zusätzlichen Annahmen über die Verteilung der Elemente in den Schichten gemacht werden, um das Diffraktogramm erklären zu können. Da die beobachtete Differenz in der Periodenlänge zum Beispiel durch einen Fehler bei der Bestimmung der Wachstumsrate, auf keinen Fall aber durch eine geänderte In-Verteilung innerhalb einer Periode zu erklären ist, gibt es keine Anzeichen für eine Abweichung der In-Verteilung von einem Rechteckprofil.

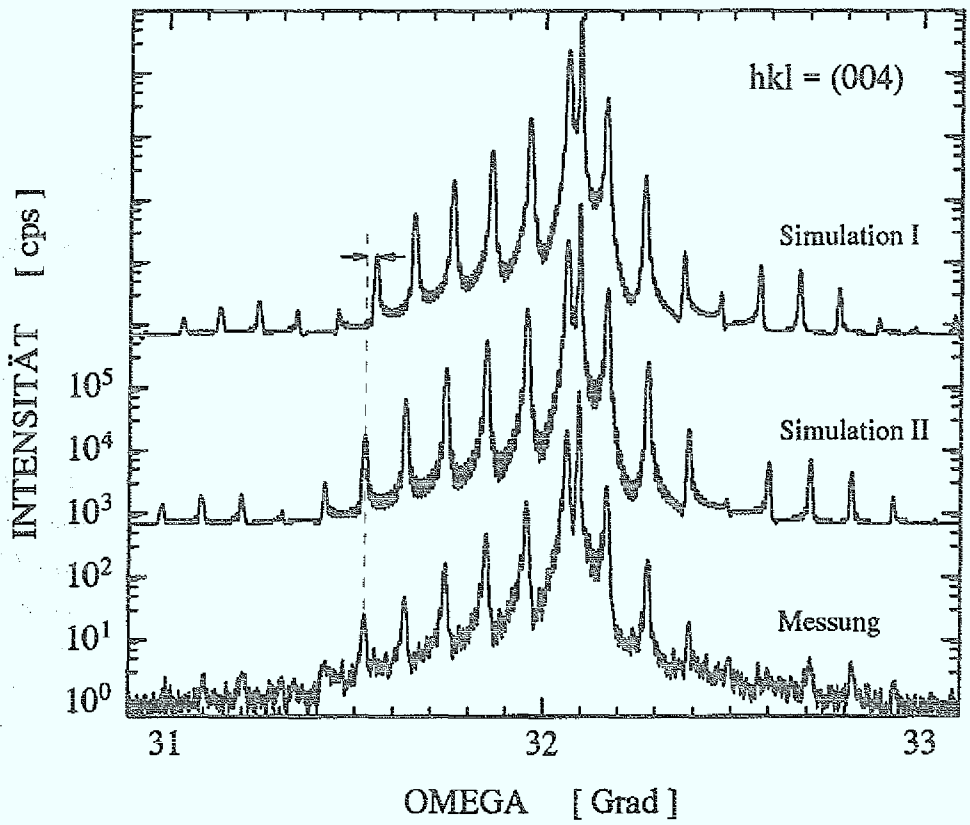


Abb. 8.7: Diffraktogramm eines $Ga_{0,431}In_{0,569}As/Ga_{0,467}In_{0,533}As$-Übergitter. In Simulation I wurde die erwartete Probenstruktur angesetzt, während bei Simulation II der Aufbau an die Messung angepaßt ist. Im wesentlichen brauchten dabei nur die Schichtdicken korrigiert zu werden.

Prinzipiell dasselbe ergibt sich auch für die Verteilung von Ga in InP. Dazu wurde ein Übergitter mit 20 Perioden hergestellt, in dem 3 nm dicke GaInP-Schichten mit einem GaP-Anteil von 12 % in 30 nm InP eingebettet wurden. Die Wachstumsparameter für das GaInP wurden dabei aus einem GaInAs-Versuch hochgerechnet, da ja die Gruppe-V-Elemente bei hinreichendem Überschußangebot die Wachstumsrate in erster Näherung nicht beeinflussen. Die Messung ist zusammen mit einer daran angepaßten Simulation (Simulation I) in Abb. 8.8 dargestellt. In dieser Simulation wurde von 2,9 nm dicken und 12,2 % Gallium enthaltenden GaInP-Schichten ausgegangen, was in hervorragender Übereinstimmung zu den Herstellungsparametern steht. Der Intensitätsverlauf der Messung läßt sich mit dieser Simulation insgesamt recht gut beschreiben. Jedoch sind die Satelliten-Peaks in der Messung gegenüber der Simulation verbreitert (FWHM: 44" gegenüber 28") und von niedrigerer Intensität. Dies ist mit größter Wahrscheinlichkeit auf eine beginnende Relaxation des Übergitters zurückzuführen. Diese Annahme wird dadurch unterstützt, daß ein Übergitter mit 5 nm

dicken GaInP-Schichten gleichen Ga-Gehalts noch wesentlich breitere Satelliten-Peaks zeigte (FWHM: 162"). Da eine Relaxation im verwendeten Simulationsprogramm nicht berücksichtigt werden kann, stellt Simulation I unter diesen Umständen die bestmögliche Annäherung an die Messung dar.

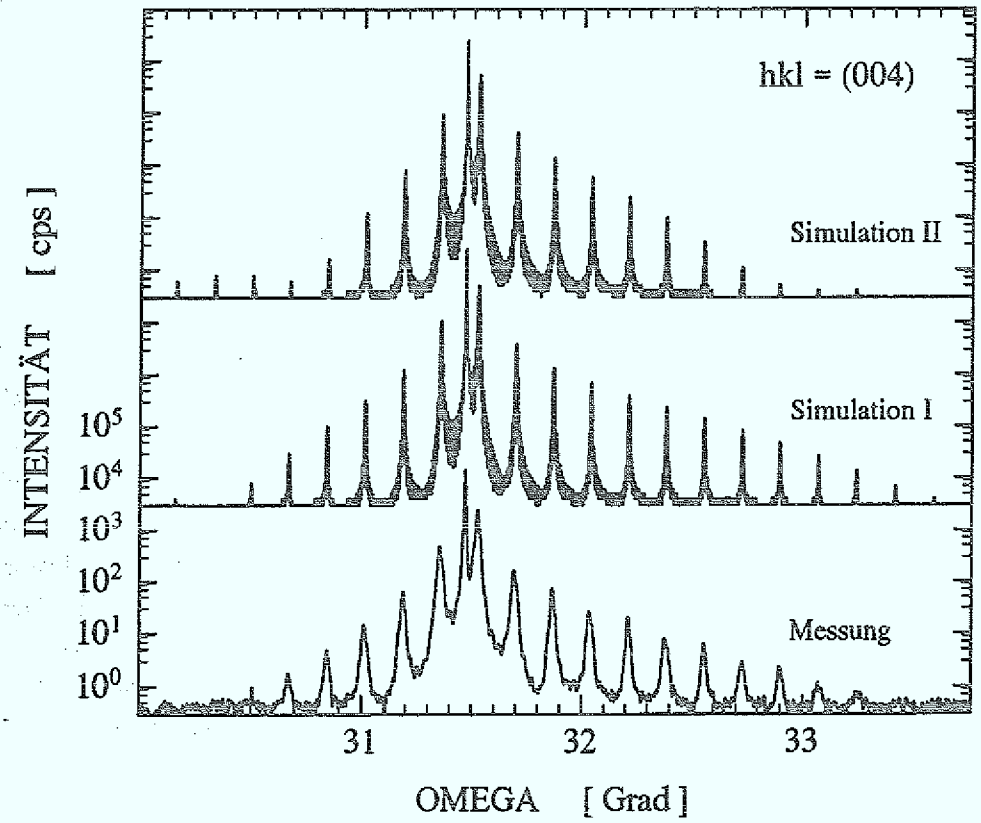


Abb. 8.8: Beugungsbild eines $Ga_{0,12}In_{0,88}P$/InP-Übergitters. Simulation I ist an die Messung angepaßt. Um die Auswirkungen einer Abweichung im Probenaufbau zu demonstrieren, ist in Simulation II zusätzlich zur Schicht mit konstantem Ga-Gehalt eine Ga-Verschleppung mit einem linearer Abfall über 2,9 nm angenommen worden. Die Gesamtmenge an Gallium in einer Periode wurde dabei jedoch nicht verändert.

Zum Vergleich zeigt das Beispiel in Simulation II die Auswirkungen eines Gradienten in der Ga-Verteilung. In dieser Simulation ist willkürlich angenommen worden, daß zusätzlich zu einer GaInP-Schicht mit konstantem Ga-Gehalt das Gallium über eine genauso dicke Schicht, also ebenfalls 2,9 nm, ins anschließende InP verschleppt wird. Die Gesamtmenge des Galliums wurde dabei gleich gehalten, so daß die Lage des Peaks 0ter Ordnung weiterhin mit der Messung übereinstimmt (→ Ga-Verteilung: 2,9 nm $Ga_{0,08}In_{0,92}P$ + 2,9 nm $Ga_xIn_{1-x}P$ mit linearem Abfall des Ga-Anteils bis auf

Null). Unter diesen Voraussetzungen wird die Einhüllende der Satelliten-Peaks deutlich schmaler und weicht doch sichtbar vom gemessenen Verlauf ab. Erhebliche Gradienten in der Ga-Verteilung können daher ausgeschlossen werden.

Variationen in der Zusammensetzung des Gruppe-III-Untergitters zeigen also offenbar keine signifikanten Abweichungen von den erwarteten Verteilungen. Demnach müssen die Differenzen, die bei der Simulation des Diffraktogramms des GaInAs/InP-Übergitters auftreten, in der Verwendung von zwei verschiedenen Gruppe-V-Komponenten zu suchen sein.

8.5 Verschleppung der Gruppe-V-Elemente

Da im Vergleich zu den Gruppe-III-Elementen die Ver-Komponenten einen hohen Dampfdruck haben, woraus sich ja auch die Notwendigkeit für eine ständige Stabilisierung der Kristalloberfläche durch ein entsprechendes Gruppe-V-Angebot ergibt, ist die Bildung von Mischkristallen bei einem Wechsel der Gruppe-V-Komponenten eher zu erwarten. So wurden bei PL-Untersuchungen an GaInAs/InP-Quantentopfstrukturen mit extrem schmalen GaInAs-Quantentöpfen (einige Monolagen) Verschiebungen des PL-Signales bei Veränderung der Umschaltsequenzen beobachtet [110, 111]. Diese Verschiebungen wurden damit begründet, daß in der Wachstumspause beim Wechsel von InP zu GaInAs aus der Kristalloberfläche abdampfender Phosphor während der AsH_3-Stabilisierung durch Arsen ersetzt wird und sich so eine Monolage $InAs_yP_{1-y}$ an der unteren Grenzfläche des Quantentopfes bildet.

Um nun die Vorgänge zu untersuchen, die bei einem Wechsel der Gruppe-V-Komponente ablaufen, wird daher ein anderer Ansatz als bei den Gruppe-III-Elementen gewählt. Das Wachstum einer Schicht, entweder InP oder GaInAs, wird periodisch unterbrochen, um innerhalb der Wachstumspausen kurzfristig die jeweils andere Gruppe-V-Verbindung in den Reaktor einzuleiten. Auf diese Weise lassen sich die Wechsel der Hydride bei der Epitaxie von Heterostrukturen nachempfinden, ohne daß gezielt ein zweites Material deponiert wird. Konkret bedeutet das für InP, das einer AsH_3-Atmosphäre ausgesetzt werden soll, folgenden Versuchsablauf (vgl. Abb. 8.9): Nach der Deposition von 30 nm InP wird das Wachstum durch Abschalten des TMIn-Flusses gestoppt. Teilweise überlappend mit PH_3 wird für 2 s AsH_3 in den Reaktor eingeleitet. Bis hierher entspricht die Schaltsequenz dem Wechsel vom InP- zum GaInAs-Wachstum, das normalerweise an dieser Stelle beginnen würde (vgl. Abb. 2.9, S. 30). Jetzt wird aber wieder auf PH_3 zurückgeschaltet und der Reaktor für eine Zeit Δt damit gespült. Anschließend wird das Wachstum von InP wieder aufgenommen. Dieser Ablauf wiederholt sich 20 mal.

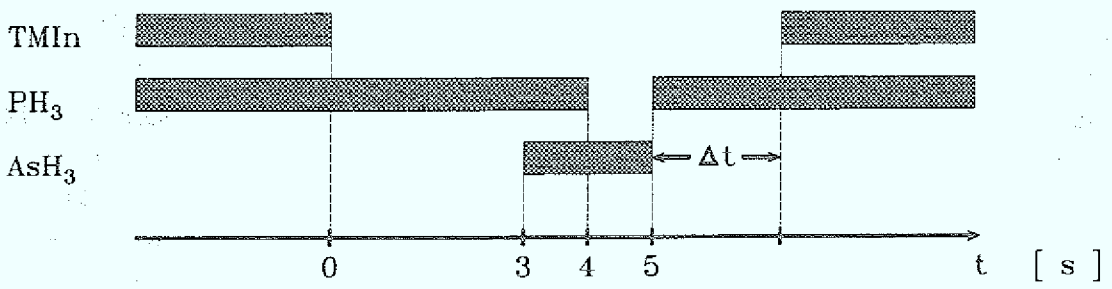


Abb. 8.9: Schaltsequenz zum Spülen des Reaktors mit AsH_3 während Wachstumspausen bei der Deposition von InP

Bei diesem Umschaltvorgang gibt es also keinen Überlapp zwischen TMIn und AsH_3, so daß auch keine gezielte Deposition von InAs erfolgt. Außerdem wurde für das nachträgliche Spülen sicherheitshalber eine Zeitspanne von $\Delta t = 0,5\,\mathrm{s}$ eingeräumt, um das AsH_3 möglichst vollständig wieder durch PH_3 zu ersetzen und damit auch ein unbeabsichtigtes Wachstum von InAsP zu vermeiden. Nominell besteht die Schicht also eigentlich nur aus 600 nm reinem InP.

Tatsächlich zeigt die Röntgen-Messung in Abb. 8.10 aber eine Reihe von Satelliten-Peaks, die von einer Übergitterstruktur herrühren müssen. Der Abstand des Peaks

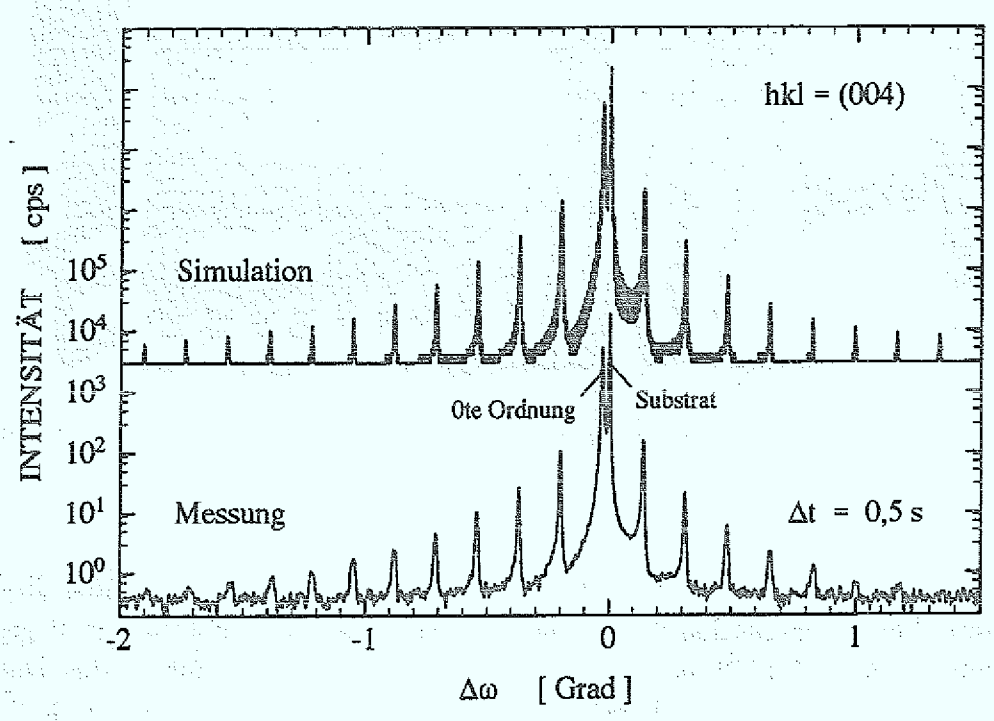


Abb. 8.10: Übergitterreflexe bei einer nominell reinen InP-Probe. Durch periodisches Spülen des Reaktors mit AsH_3 während Wachstumsunterbrechungen entsteht im InP eine Übergitterstruktur.

0ter Ordnung vom Substratreflex ist dabei so groß, daß in einer Periode des Übergitters mehr Arsen enthalten sein muß, als eine Monolage pures InAs liefern könnte. Das AsH_3 reagiert demnach nicht einfach nur während der Spülphase mit der obersten Monolage des Kristalls, sondern es verteilt sich über einen gewissen Bereich im InP. Die beste Übereinstimmung bei der Simulation dieses Diffraktogramms ergibt eine Struktur mit einer Monolage $InAs_yP_{1-y}$ mit $y = 0,55$ und einem anschließenden linearen Abfall der As-Konzentration über 18 Monolagen oder 5,3 nm von $y = 0,087$ bis auf 0.

Eine Bestätigung liefert die TEM-Querschnittsaufnahme in Abb. 8.11, in der die periodische Struktur deutlich zu erkennen ist. Für die Dicke der dünnen Schichten wird ein Wert von ca. 3 nm ermittelt, was das Ergebnis der Röntgenanalyse unterstützt.

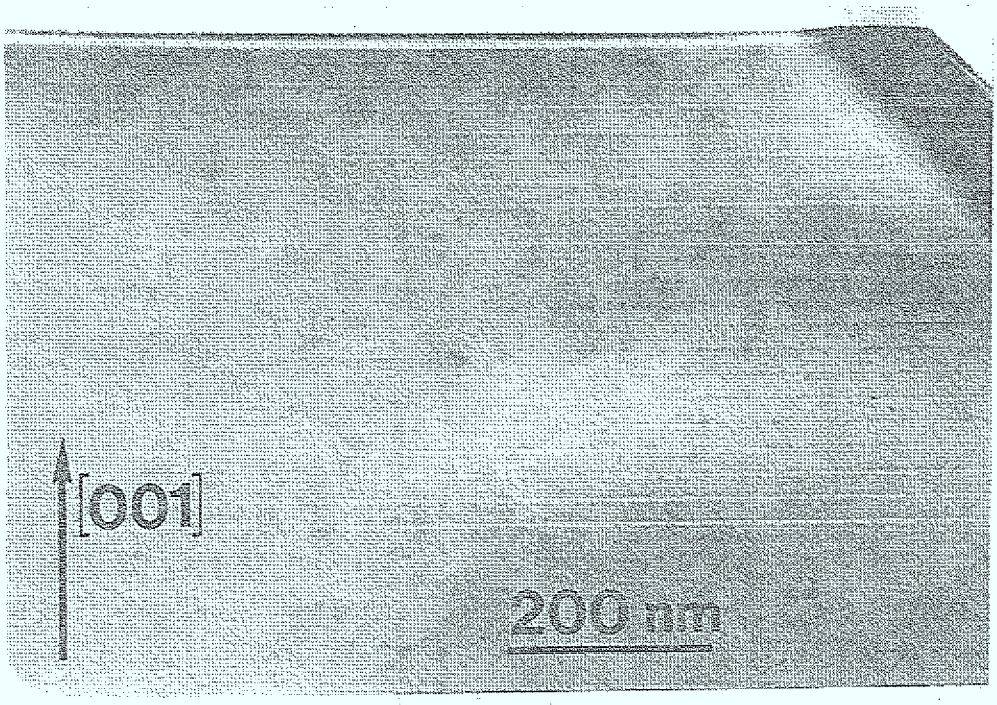


Abb. 8.11: TEM-Querschnittsaufnahme der InP-Probe. Die periodische Struktur durch die Arsen-Verschleppung ist deutlich zu erkennen.

Die Ursache für die hohe Konzentration in der ersten Monolage könnte die bereits erwähnte Austauschreaktion in der obersten Atomlage des Kristalls von P gegen As während der AsH_3-Stabilisierung sein. Für die Verschleppung muß es aber einen weiteren Grund geben. Wird AsH_3 in den Reaktor eingeleitet, so zerlegt es sich nicht nur über dem Kristall, sondern auch über dem Suszeptor. Es ist daher anzunehmen, daß auf der Suszeptoroberfläche oder an dem umgebenden Liner-Rohr adsorbierte Zerlegungsprodukte nach dem Abschalten des Arsins wieder desorbieren. Dadurch würde

auch nach dem Abschalten noch für einen gewissen Zeitraum Arsen in die Gasphase gelangen und könnte in das wachsende InP eingebaut werden.

Diese Vermutung wird durch eine Beobachtung gestützt, die bei der Analyse einfacher GaInAs/InP-Heterostrukturen gemacht wurde. Nach der Deposition von InP wurden zwei Versuche durchgeführt, in denen beidesmal 1 μm GaInAs auf einen InP-Puffer abgeschieden wurde. Die Röntgenmessung an der zweiten Probe zeigte Oszillationen, deren Periode der Dicke des Puffers entsprach. Diese Oszillationen wurden bei der ersten Probe nicht beobachtet. Dieser Umstand läßt sich erklären, wenn man davon ausgeht, daß zu Beginn des InP-Wachstums der zweiten Probe As-Reste vom vorangegangenen Versuch zu einer Kontamination des InP führen. Bei Sputter-Auger-Messungen wurde ein entsprechender Peak im As-Signal am Übergang vom InP-Puffer zum Substrat auch tatsächlich beobachtet.

Nach dem bisher Gesagten muß die Menge des verschleppten Arsens davon abhängen, wieviel Zeit zwischen dem Abschalten des AsH_3-Flusses und dem Beginn des InP-Wachstums vergeht, wie groß also die Spülzeit Δt ist. Bei einer Wachstumsrate des InP von etwa einer Monolage pro Sekunde und einer anfänglichen Verschleppung von 18 Monolagen sollte eine Verlängerung von Δt um einige Sekunden einen sichtbaren Effekt zeigen. In zwei weiteren Versuchen wurde daher Δt auf 5 bzw. 10 s verlängert. Die

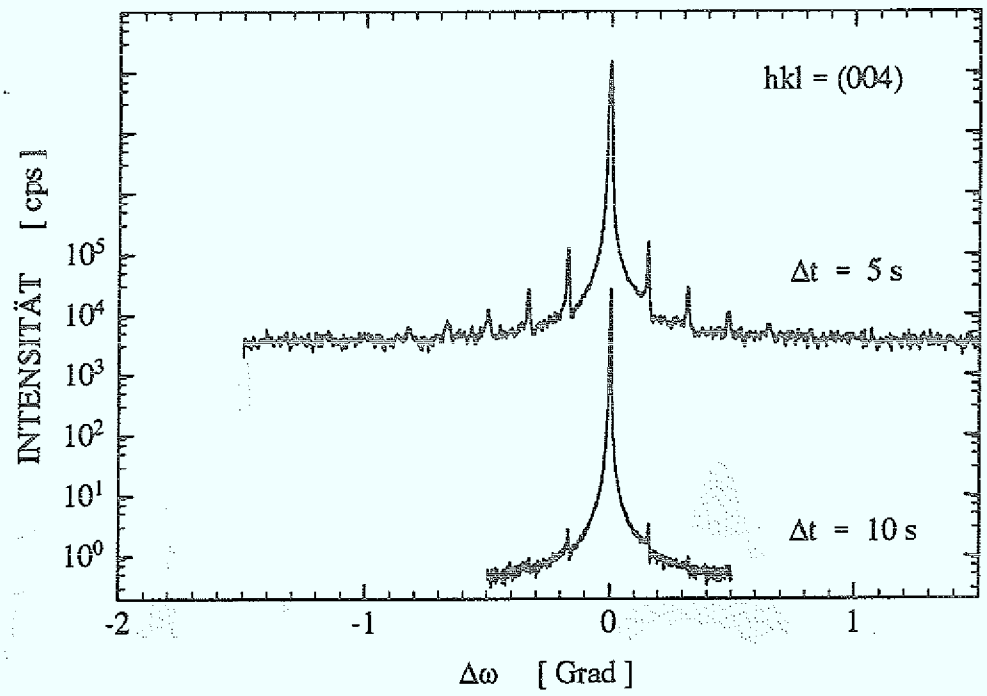


Abb. 8.12: Verringerung der As-Verschleppung durch eine Verlängerung der PH_3-Spülzeit

entsprechenden Diffraktogramme sind in Abb. 8.12 dargestellt. Wie erwartet, nimmt die Anzahl der Satelliten ab, bis bei $\Delta t = 10$s so gut wie keine mehr beobachtet werden. Damit wird also nicht nur die Verschleppung kleiner, sondern es verschwindet auch die Monolage mit dem sehr hohen As-Anteil. Das bedeutet, daß sich entweder diese Monolage nach Abschalten des Arsins wieder zersetzt, obwohl As-haltige Verbindungen im allgemeinen als recht stabil gelten, oder aber diese Monolage ist nur die erste Stufe der Verschleppung und einfach durch eine hohe As-Konzentration über dem Wafer zu Beginn des InP-Wachstums entstanden (zum Beispiel durch auf der Wafer-Oberfläche adsorbiertes AsH_3).

Da As in InP die Bandlücke verringert, ist der Effekt der Verschleppung auch in der Photolumineszenz zu beobachten, wie Abb. 8.13 zeigt. Während das Spektrum der Probe mit der langen Spülzeit nur wenige meV unterhalb der Bandlücke von InP liegt ($E_g = 1,42$ eV), sind die beiden anderen durch den höheren As-Anteil erheblich zu niedrigeren Energien hin verschoben. Bei $\Delta t = 0,5$ s beträgt die Änderung beinahe 100 meV. Verschiebungen in vergleichbaren Größenordnungen wurden bei ähnlichen Experimenten auch von Hergeth et al. [112] festgestellt. Derartig große Veränderungen im Bandabstand des Barrierenmaterials dürften sich besonders in Strukturen mit mehreren Quantentöpfen bemerkbar machen, wenn die einzelnen Quantentöpfe nur durch dünne Barrieren voneinander getrennt sind und es so zu einer Kopplung kommt.

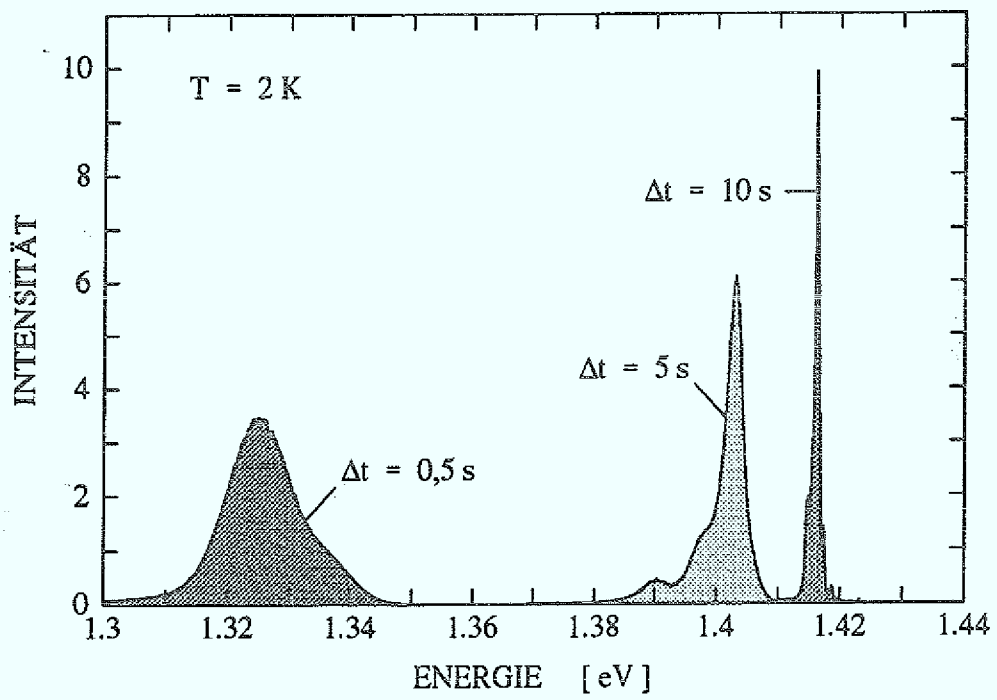


Abb. 8.13: PL-Spektren der InP-Proben mit As-Kontamination

Analog zur As-Verschleppung im InP wird die Untersuchung einer P-Verschleppung im GaInAs angegangen. Mit einem der Abb. 8.9 entsprechenden Umschaltzyklus wird das Wachstum von GaInAs regelmäßig unterbrochen und für 2 s PH_3 durch den Reaktor gespült. Nach einer Pause von $\Delta t = 0,5$ s wird erneut GaInAs abgeschieden. Auch in dieser Probe entsteht dadurch ein Übergitter, wie Abb. 8.14 zeigt. Eine Simulation ergibt eine P-Verteilung, die über 8 Monolagen von 14 % bis auf 0 abfällt. Eine einzelne Monolage mit besonders hoher Konzentration existiert hier offenbar nicht. Unter den gegebenen Epitaxiebedingungen ist demnach das Ausmaß der P-Verschleppung in GaInAs zwar nicht so groß wie der Effekt von Arsen beim InP, aber mittels Röntgendiffraktometrie durchaus nachweisbar. In diesem Punkt hat die Röntgenbeugung auch einen Vorteil gegenüber der Photolumineszenz, in der sich eine derartige P-Kontamination des GaInAs nicht zu erkennen gibt, da durch den P-Einbau die Bandlücke vergrößert wird.

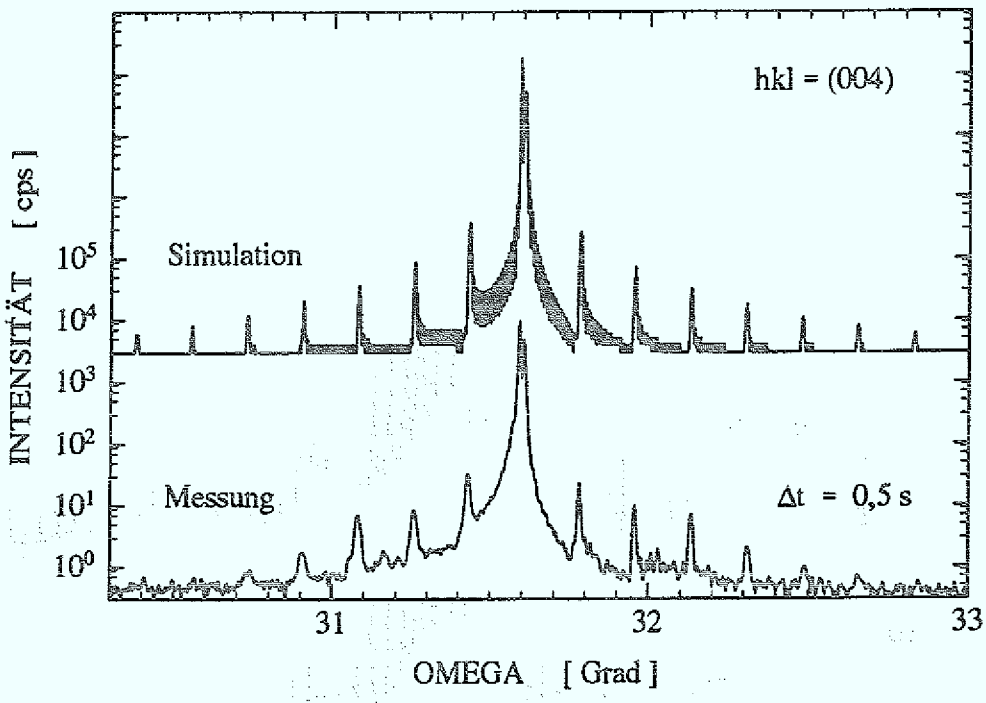


Abb. 8.14: Diffraktogramm einer nominell reinen GaInAs-Schicht. Durch Spülen des Reaktors mit PH_3 während regelmäßiger Wachstumspausen entsteht auch hier eine Übergitterstruktur.

Nach den bisherigen Ergebnissen sind für die Röntgenanalyse von GaInAs/InP-Übergitterstrukturen drei wesentliche Punkte festzuhalten:

1. Die unterschiedlichen Bindungslängen zwischen den Atomen führen an den Grenzflächen zu einer lokalen Änderung der Gitterkonstanten.

2. Eine signifikante Verschmierung in der Verteilung der Gruppe-III-Elemente wird nicht beobachtet.

3. Beim Wechsel der Gruppe-V-Komponente kommt es sowohl zu einer Verschleppung des Arsens ins InP wie auch des Phosphors ins GaInAs.

Unter Berücksichtigung aller drei Punkte wird das GaInAs/InP-Übergitter noch einmal simuliert. Für die Verschleppungen werden dabei die oben aufgeführten Parameter benutzt. Auch die eine Monolage mit hohem As-Gehalt im InP wird als Verschleppung behandelt, das heißt der *oberen* Grenzfläche zugeordnet. Die In-Konzentration im GaInAs ist so angepaßt, daß die Lage des Peaks 0ter Ordnung wieder der gemessenen Position entspricht. Diese Simulation (Abb. 8.15) zeigt die beste erreichte

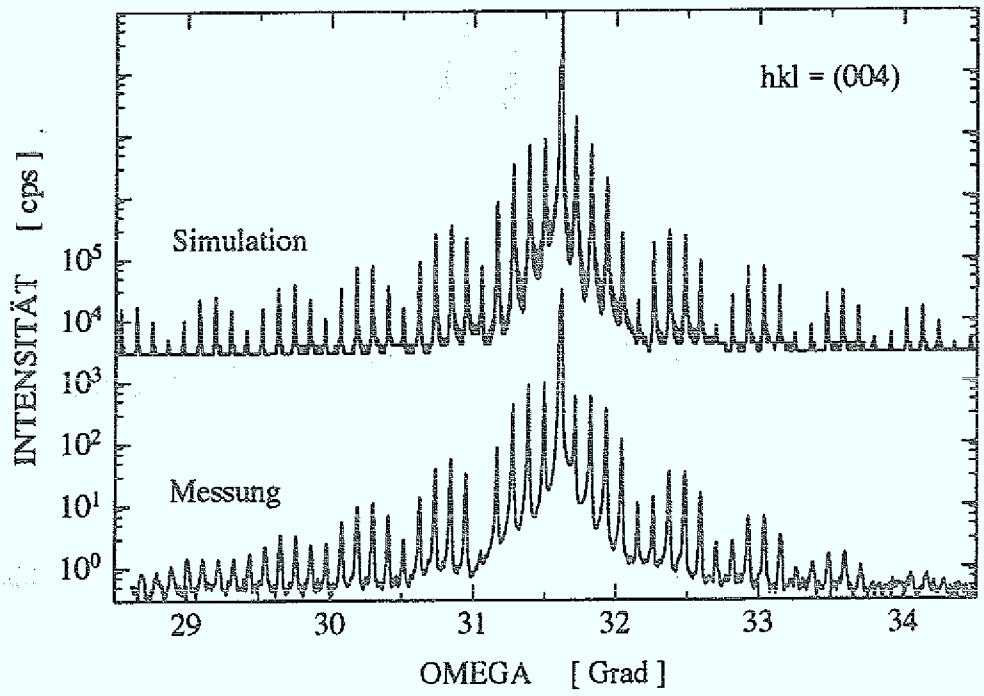


Abb. 8.15: Simulation des GaInAs/InP-Übergitters unter Berücksichtigung der geänderten Bindungslängen an den Grenzflächen und der Verschleppungen der Gruppe-V-Elemente

Übereinstimmung mit der Messung. Insbesondere führt die Annahme einer Monolage InAsP mit hohem As-Gehalt an der *unteren* Grenzfläche zusammen mit der aufgrund der Bindungslängen geänderten Gitterkonstanten zu einer deutlich *schlechteren* Übereinstimmung. Dies spricht gegen eine hinreichend schnelle Austauschreaktion an der Oberfläche der InP-Schichten. Es ist jedoch trotz umfangreicher Variation der Verteilung der Elemente nicht gelungen, eine wirklich deckungsgleiche Simulation zu erreichen. Dafür ist der Parameterraum variabler Größen zu groß (zum Beispiel: Gesamtkonzentration der verschiedenen Elemente, Ausdehnung und genauer Verlauf der Verschleppung).

Aus der Anpassung des In-Gehaltes in der Simulation ergibt sich ein In-Anteil im GaInAs von $y = 0,537$. Dieser Wert liegt um $0,01$ niedriger als das Ergebnis der ersten Auswertung und damit näher am Resultat des Vorversuches von $0,527$. Da sich durch die Verschleppungen der Gruppe-V-Elemente die Spannung innerhalb einer Periode anders verteilt als zunächst angenommen, ist die Zuordnung der Fehlpassung allein zum GaInAs mit einer prinzipiellen Unsicherheit behaftet. Die mittlere Gitterkonstante hängt jetzt nämlich nicht mehr nur vom Ga/In-Verhältnis ab, sondern auch von den Partialdrücken der Gruppe-V-Verbindungen, wie drei weitere Versuche mit unterschiedlichen V/III-Verhältnissen zeigen. Nach Messungen an 1 μm dicken GaInAs-Schichten beeinflußt eine Veränderung des AsH_3-Partialdruckes das Ga/In-Verhältnis nicht. In Übergittern variiert jedoch die mittlere Verspannung mit dem AsH_3-Angebot (s. Abb. 8.16). Bei dem üblichen V/III-Verhältnis für die Deposition von GaInAs von 150 ist die mittlere Fehlpassung größer als erwartet. Durch eine Verringerung des AsH_3-Partialdruckes nimmt dieser Unterschied ab, und bei einem Verhältnis von 30 wird sogar eine kleinere Gitterkonstante als erwartet, festgestellt. Da aufgrund des verringerten Partialdruckes insgesamt weniger AsH_3 durch den Reaktor geleitet wird, steht auch weniger Arsen für die Verschleppung zur Verfügung. Darüber hinaus ist der Einbau der verschiedenen Gruppe-V-Elemente ein Konkurrenzprozeß, wodurch bei geringerem Arsenangebot der Phosphoreinbau und damit seine Verschleppung ins GaInAs erleichtert wird. Die Gitterkonstante wird so zu kleineren Werten hin verschoben.

Bei der Herstellung verspannter Übergitter zur Bestimmung ihrer Zusammensetzung ist daher darauf zu achten, daß die einzelnen Proben mit gleichbleibenden Gruppe-V-Partialdrücken abgeschieden werden. Auch die Wachstumszeiten sollten konstant gehalten werden, um die Gesamtmenge der eingeleiteten Hydride nicht zu verändern. Bei einem V/III-Verhältnis von 150 und unter der Annahme, daß sich die Verschleppungen in den verspannten Schichten nicht ändern, ist die gemessene In-Konzentration dann um mindestens $0,01$ nach unten zu korrigieren.

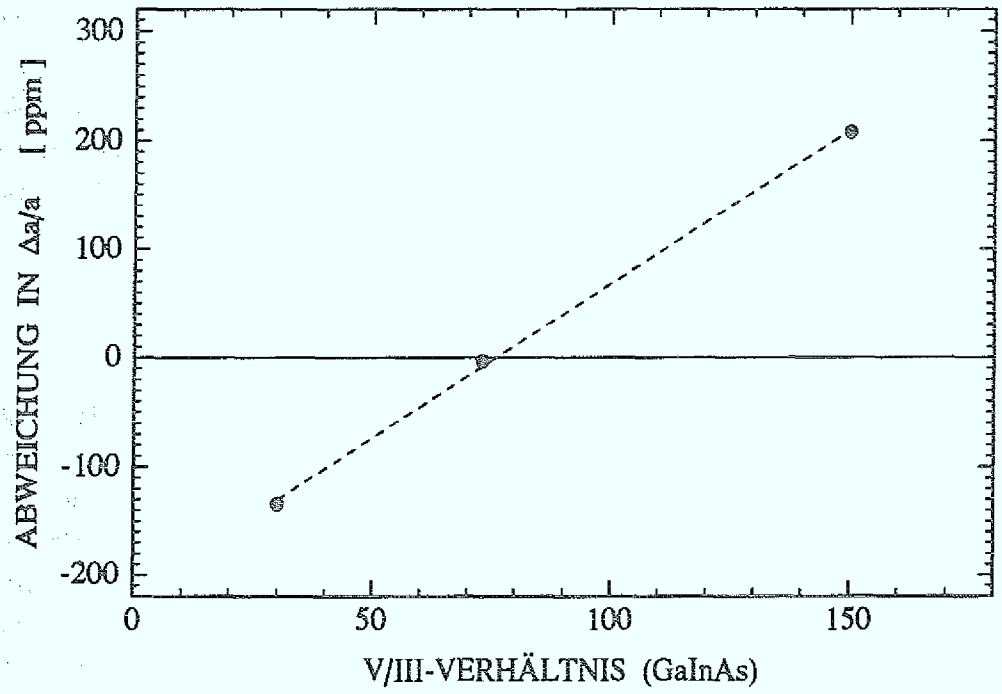


Abb. 8.16: Abweichung der mittleren Fehlpassung des Übergitters vom Erwartungswert. Durch Reduzierung des AsH_3-Partialdruckes bzw. des V/III-Verhältnisses bei der Deposition von GaInAs verringert sich die mittlere Fehlpassung ohne eine Änderung im Ga/In-Verhältnis.

8.6 Bestimmung der Indium-Konzentration in verspannten Quantentöpfen

Der Aufbau der verspannten Übergitter ist derselbe wie bei der gitterangepaßten Probe in Abb. 8.3 (s. S. 117). Bei der Deposition der verspannten Schichten wird jedoch, anders als bei den ersten In-reichen Proben, nicht allein der TMIn-Fluß erhöht, sondern gleichzeitig auch der TMGa-Fluß um einen entsprechenden Betrag zurückgenommen, so daß trotz erhöhten InAs-Anteils die Wachstumsrate des $Ga_{1-x}In_xAs$ konstant bleibt.

Die Diffraktogramme ((004)-Reflex) einiger Proben sind in Abb. 8.17 dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, wie sich die Reflexe des Übergitters mit zunehmendem In-Gehalt, das heißt wachsender Gitterkonstante, zu kleineren Winkeln hin verschieben. Durch die Verspannung ist der Intensitätsverlauf jetzt nicht mehr symmetrisch zum Substratreflex. Damit einher geht eine Aufweitung der Peaks und eine Abnahme der Intensität, besonders der hohen Ordnungen. Tendenziell nehmen auch die Abstände der Satelliten-Peaks voneinander geringfügig mit der Indiumkonzentration ab, was eine

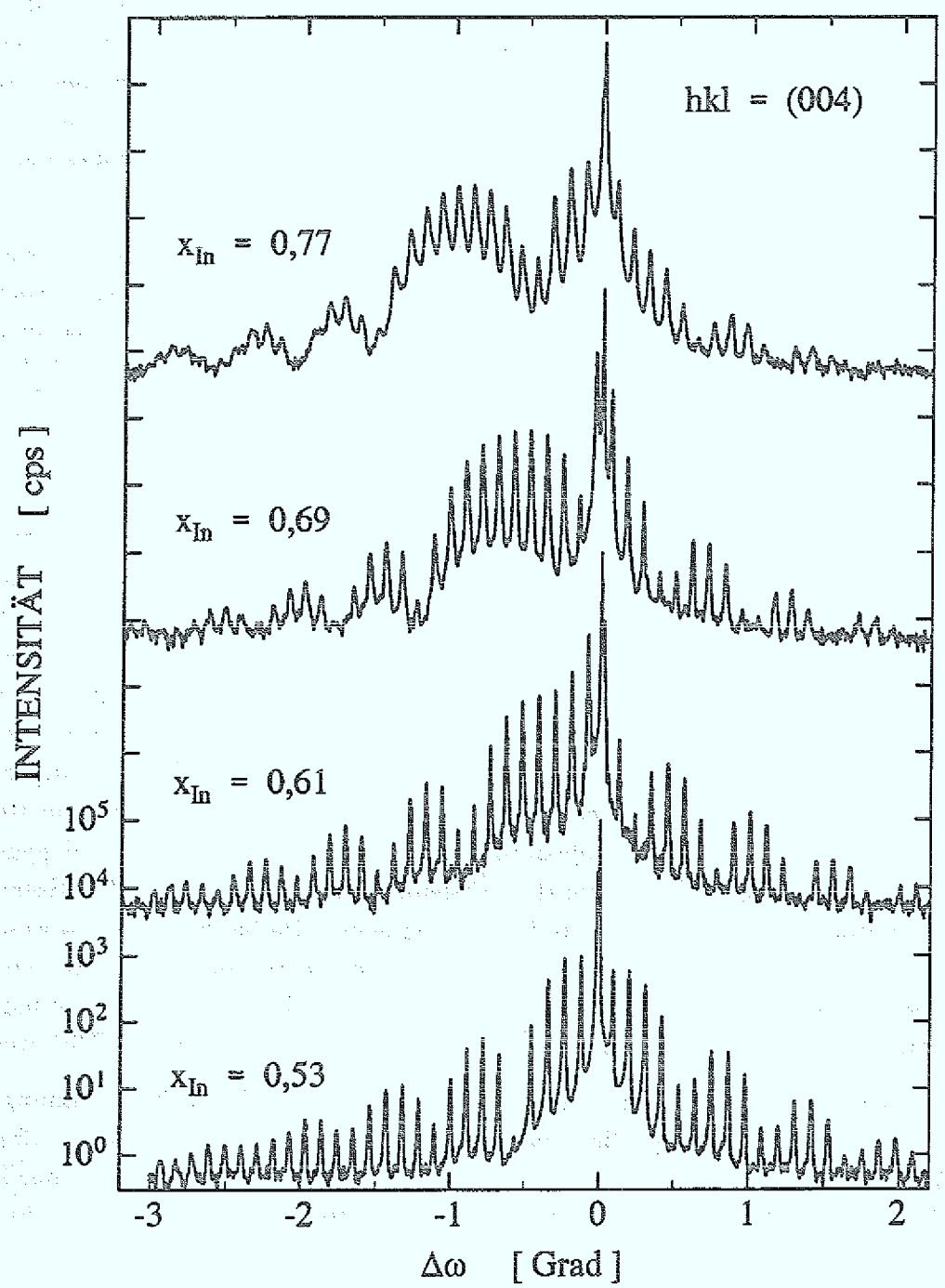


Abb. 8.17: Diffraktogramme einiger verspannter Übergitter. Die Kurven sind zur Rauschreduzierung geglättet und der Übersichtlichkeit halber jeweils um vier Größenordnungen gegeneinander verschoben.

Zunahme der Periodenlänge d_{SL} bedeutet. Zwischen 53 und 77 % InAs-Anteil wächst d_{SL} um 0,3 nm an. Dieser Betrag entspricht genau der zu erwartenden Ausdehnung der tetragonal verspannten Elementarzelle senkrecht zur Oberfläche. Bei einem In-Gehalt von 77 % liegt $\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_\perp$ bereits bei 33.700 ppm, so daß also die Höhe der elastisch verspannten Elementarzelle um ca. 3 % größer ist als die von InP, was das beobachtete Anwachsen der Schichtdicke erklärt. Unter Berücksichtigung dieses Effekts folgt, daß immer eine konstante Anzahl von Monolagen deponiert wurde.

Um nun die Zusammensetzung ermitteln zu können, muß zunächst herausgefunden werden, welcher Satellit der Peak 0ter Ordnung des Übergitters ist. Nach den Ausführungen in Abschnitt 3.2 ist dazu mindestens eine weitere Messung an einem Reflex mit teilerfremdem Index l erforderlich. Es werden daher zwei zusätzliche Messungen am (115)-Reflex vorgenommen, so daß neben der Änderung in der senkrechten Komponente der Gitterkonstante auch die in paralleler Richtung bestimmt werden kann. Dadurch lassen sich dann auch Aussagen zur Relaxation machen.

Anders als bei der Vermessung eines symmetrischen Reflexes ändern sich bei einem asymmetrischen Reflex Einfallswinkel und Ausfallswinkel des Röntgenstrahls nicht im Verhältnis 1:1. Für die Analyse eines Übergitters, müßten daher Probe und Detektor eigentlich in einem anderen als dem bisher benutzten Verhältnis von 1:2 verfahren werden, um den reflektierten Strahl im Detektor zu halten. Da dies jedoch mit der Anlage nicht möglich ist, wird der nutzbare Meßbereich durch die Größe des Detektorfensters begrenzt. Es wird daher auf jegliche Blende verzichtet und mit völlig offenem Detektor gearbeitet, wodurch allerdings der Rauschpegel ansteigt. Ein Beispiel für eine Messung am (115)-Reflex mit flach zur Probenoberfläche einfallendem Röntgenstrahl zeigt Abb. 8.18 für das gitterangepaßte Übergitter. Gegenüber der Messung am (004)-Reflex liegt der Rauschpegel um knapp eine Größenordnung höher. Dadurch lassen sich wesentlich weniger Satelliten-Peaks beobachten. Für die Bestimmung des Peaks 0ter Ordnung ist diese Messung aber ohne weiteres ausreichend. Das Verfahren zur Bestimmung des Satelliten 0ter Ordnung soll nun an drei Proben exemplarisch durchgeführt werden.

Zunächst wird jeder Peak so behandelt, als sei er der Peak 0ter Ordnung. Aus dem Abstand vom Substratreflex lassen sich dann mit den Gl. (3.3) bzw. (3.8) und (3.9) entsprechende Werte für die "mittlere Fehlpassung" berechnen. Aber nur für den wirklichen Peak 0ter Ordnung ergeben sich dabei aus der Messung am (004)-Reflex und denen am (115)-Reflex die gleichen Werte für $\overline{\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_\perp}$.[1]

[1] Aufgrund der Mehrdeutigkeit dieses Verfahrens ergeben sich Übereinstimmungen zwar auch bei den Peaks, deren "Fehlpassung" um ein ganzzahliges Vielfaches von $\frac{a_{InP}}{d_{SL}}$ größer oder kleiner ist, allerdings sind mittlere Fehlpassungen in der Größenordnung von über 12.000 ppm ($= \frac{0{,}58696\,\mathrm{nm}}{47{,}3\,\mathrm{nm}}$) für ein nominell gitterangepaßtes Übergitter völlig unrealistisch.

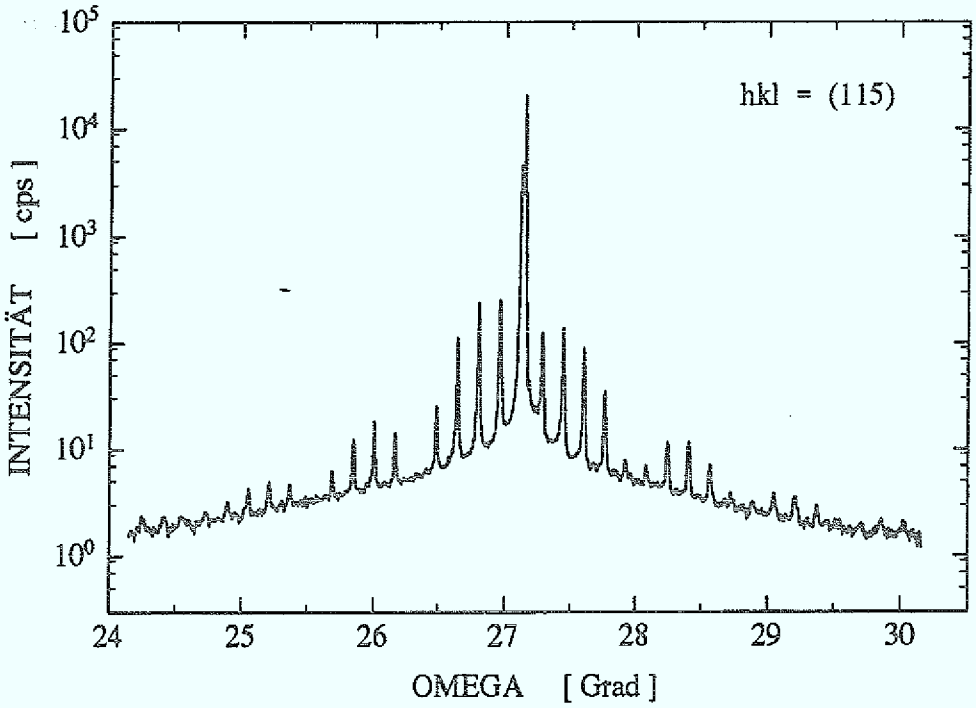


Abb. 8.18: Beispiel für eine Messung an einem asymmetrischen Reflex. Dargestellt ist hier die Messung am InP-(115)-Reflex des gitterangepaßten Übergitters mit flach zur Probenoberfläche einfallendem Röntgenstrahl.

Für die gitterangepaßte Probe werden für die Satelliten-Peaks in der Nähe des Substrat-Peaks im einzelnen folgende Daten ermittelt (in der Reihenfolge aufsteigender Winkel):

(004)	(115)		Ordnung
$\overline{\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_\perp}$	$\overline{\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_\perp}$	$\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_\parallel$	—
12810	10470	-10	-4
9691	7960	-60	-3
6633	5450	-50	-2
3515	2950	-10	-1
358	**396**	10	**0**
—	—	—	Substrat
-2627	-2010	30	1
-5746	-4490	40	2
-8848	-6940	30	3

Geht man von einem Fehler bei der Bestimmung der Peak-Lagen von $0,001°$ aus, was beim (004)-Reflex einem Fehler in $\overline{\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_\perp}$ von 28 ppm entspricht, so stimmen also wie zu erwarten nur die Werte für den ersten Satelliten neben dem Substrat-Peak auf der Seite kleinerer Winkel überein.

Die Auswertung der Messungen an den verspannten Übergittern ergibt für die Proben mit nominellem In-Anteil von $0,65$ bzw. $0,77$ folgende Ergebnisse:

$x_{In} = 0,65$:

(004)	(115)		Ordnung
$\overline{\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_\perp}$	$\overline{\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_\perp}$	$\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_\parallel$	—
12674	10980	-40	-3
9576	8460	-60	-2
6484	5950	-40	-1
3391	**3430**	-10	**0**
236	960	-10	1
—	—	—	Substrat

$x_{In} = 0,77$:

(004)	(115)		Ordnung
$\overline{\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_\perp}$	$\overline{\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_\perp}$	$\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_\parallel$	—
12737	11700	20	-2
9666	9190	0	-1
6592	**6620**	-70	**0**
3495	4250	20	1
446	1730	-20	2
—	—	—	Substrat

Bei $x_{In} = 0,65$ ist demnach der zweite und bei $0,77$ erst der dritte Peak links neben dem Substrat der Peak 0ter Ordnung. Wie aus Abb. 8.19 hervorgeht, verschiebt der Fundamentalreflex also gleichmäßig mit dem nominellen In-Gehalt. Man sieht aber auch, daß dieser Peak nicht unbedingt der stärkste Reflex des Übergitters sein muß.

In den drei Tabellen sind neben $\overline{\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_\perp}$ auch die Änderungen in der Parallelkomponente der Gitterkonstanten aufgeführt. Bei einem Fehler in $\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_\parallel$ von ca. 70 ppm

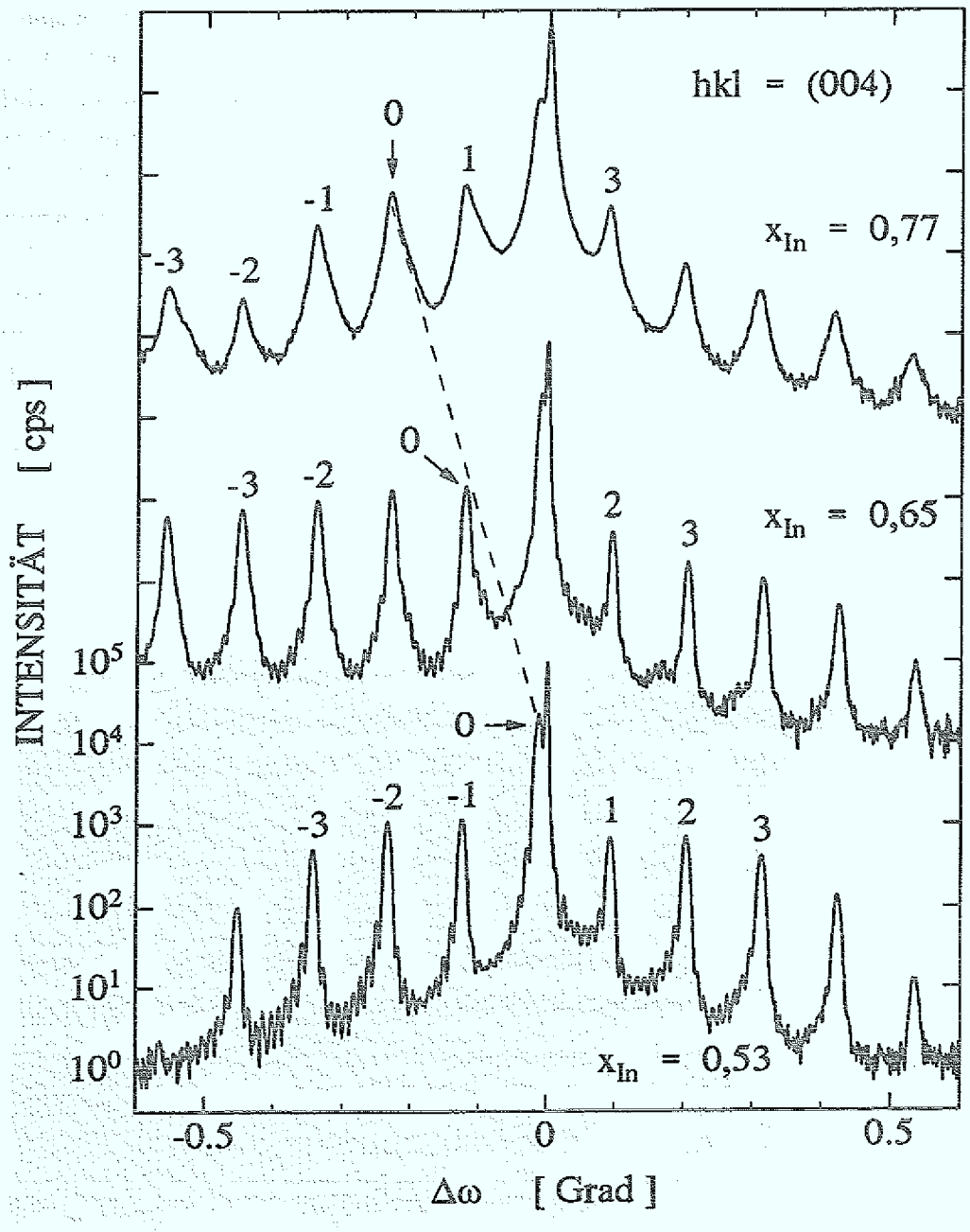


Abb. 8.19: Verschiebung des Fundamentalreflexes in den verspannten Übergittern. Die Winkelskala ist auf die jeweilige Position des Substrat-Peaks bezogen.

sind die Werte jedoch nicht signifikant von Null verschieden. Die Lagen der Peaks zeigen demnach also selbst bei einem In-Anteil von 0,77 noch keinen Einfluß einer Relaxation, obwohl ihre Breite schon deutlich zugenommen hat (Halbwertsbreite der 0ten Ordnungen: 35" ($x_{In} = 0,53$) bzw. 60" ($x_{In} = 0,77$)).

TEM-Aufnahmen lassen jedoch bei $x_{In} = 0,77$ bereits ein deutlich ausgeprägtes Versetzungsnetzwerk erkennen, das in Ansätzen auch schon bei 73 % InAs-Anteil zu beobachten ist. Außerdem treten laterale Schwankungen in der Dicke der GaInAs-Schichten in einer Größenordnung von ±1 Monolage auf. Diese Fluktuationen betreffen vor allem die oberen Grenzflächen, also die Übergänge von GaInAs zu InP, während die unteren Grenzflächen nahezu glatt sind. Bei der Probe mit einem InAs-Anteil von 77 % nehmen diese Schwankungen ein besonders krasses Ausmaß an, wie Abb. 8.20 zeigt. Ab der siebten GaInAs-Schicht kommte es stellenweise anscheinend zu einer Art 3D-Wachstum, bei dem das GaInAs keine geschlossene Schicht, sondern vereinzelte Inseln bildet. Die Oberfläche wird durch das InP jedoch immer wieder geglättet, so daß der nächste Übergang zum GaInAs wieder scharf definiert ist und die Periodizität im Übergitter erhalten bleibt. In den folgenden GaInAs-Schichten entstehen allerdings immer wieder an denselben Stellen derartige Inseln. Die Ursache für dieses Wachstumsverhalten ist nicht bekannt.

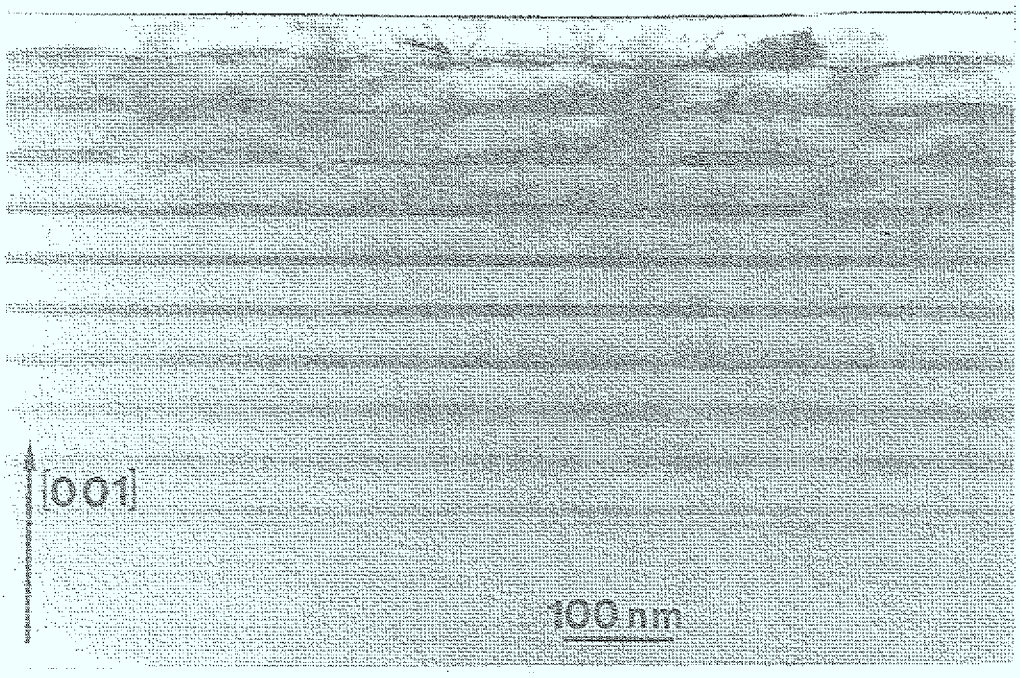


Abb. 8.20: TEM-Querschnittsaufnahme des $Ga_{0,23}In_{0,77}As/InP$-Übergitters. Ab der siebten GaInAs-Schicht ist stellenweise eine Art Inselwachstum zu beobachten.

In den Übergittern mit hohen In-Konzentrationen wird also durchaus ein Teil der Spannung durch Versetzungen abgebaut. Über die vom Röntgenstrahl beleuchtete Fläche von etwa $1 \times 2\ mm^2$ hinweg gesehen, ist ihre Dichte aber offenbar noch nicht

so groß, als daß sich daraus eine wesentliche Änderung in $a_{\|}$ ergäbe. Die Verbreiterung der Satelliten-Peaks ist daher vor allem auf die Fluktuationen in der Schichtdicke zurückzuführen.

Da bei der Bestimmung der Zusammensetzung $\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\|}$ vernachlässigt werden kann, ergibt sich die Größe der relaxierten Gitterkonstante aus der Beziehung

$$\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{rel}(\mathrm{Ga_{1-x}In_xAs}) = \frac{1-\nu(x)}{1+\nu(x)} \cdot \frac{d_{SL}}{d_{GaInAs}} \cdot \overline{\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\perp}} \tag{8.2}$$

$\nu(x)$ wird dabei linear zwischen den Werten von GaAs und InAs interpoliert ($\nu(x) = 0,311 + 0,041x$). Da das InP stets unter gleichen Bedingungen abgeschieden wurde, wird seine Dicke als konstant angenommen und die gemessenen Änderungen in der Periode des Übergitters dem GaInAs zugeordnet. Aus der Größe der relaxierten Gitterkonstanten kann dann über das Vegardsche Gesetz die In-Konzentration berechnet werden. Anschließend wird von diesem Wert ein Prozentpunkt abgezogen, womit der Beitrag der Verschleppungen der Gruppe-V-Elemente zur mittleren Fehlpassung berücksichtigt wird.

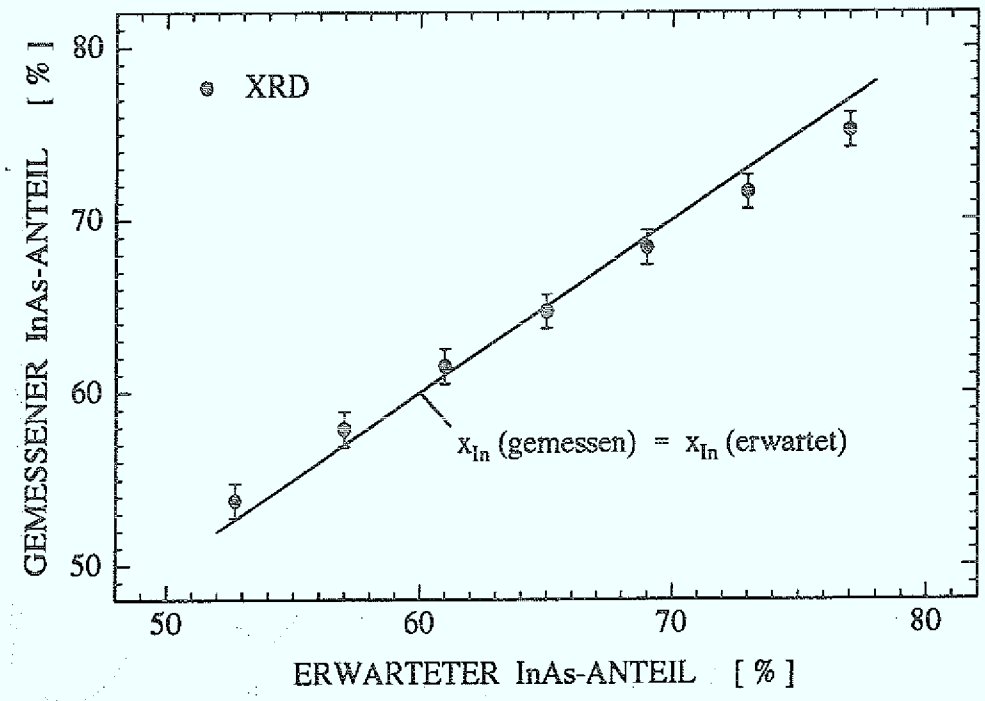


Abb. 8.21: Zusammensetzung der GaInAs-Quantentöpfe wie sie sich aus der Röntgenanalyse ergibt. Die gemessenen Daten sind gegen die aus den Partialdrücken der MO-Verbindungen berechneten InAs-Anteile aufgetragen.

Die Ergebnisse sind in Abb. 8.21 gegen die nach den Herstellungsparametern erwarteten Konzentrationen aufgetragen. Geht man davon aus, daß aufgrund der verschiedenen Komplikationen der Fehler im In-Gehalt bei sicherlich mindestens ±1 % liegt, so stimmt im Rahmen dessen, das Ga/In-Verhältnis im Quantentopf gut mit den Erwartungen überein. Es deutet sich aber eine Tendenz an, daß die Steigerung im In-Gehalt nicht ganz so groß wie angenommen ausfällt.

Zur Überprüfung der Ergebnisse der Röntgenanalyse werden die Schichten zusätzlich mittels SNMS untersucht. Die Empfindlichkeitsfaktoren für den Nachweis der einzelnen Elemente werden dabei wieder an Hand von InP und an einer gitterangepaßten, 1 μm dicken GaInAs-Schicht ermittelt, deren Zusammensetzung durch Röntgenbeugung bestimmt wurde. Die Profile der Übergitterstrukturen werden dann mit diesen Empfindlichkeitsfaktoren und der Isotopenverteilung korrigiert und punktweise die Summe der Signale auf 100 % normiert.

Als ein typisches Beispiel ist in Abb. 8.22 die Messung an dem verspannten Übergitter mit 73 % InAs-Anteil dargestellt. Während bei der ersten GaInAs-Schicht die Dynamik im Ga- und im As-Signal noch etwa bei einem Faktor 100 liegt, nimmt sie mit fortschreitender Sputter-Tiefe zusehends ab. Dieser Dynamikverlust ist einer Reduzierung des Tiefenauflösungsvermögens bedingt durch eine Aufrauhung der Probenoberfläche zuzuschreiben. Aber auch in der ersten GaInAs-Schicht zeigt das

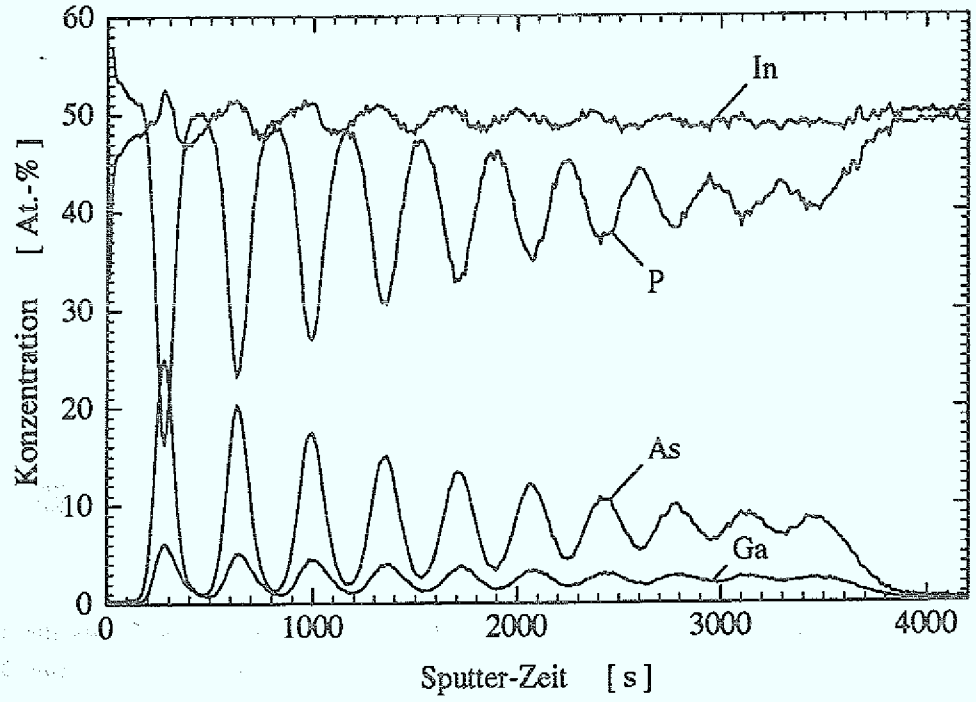


Abb. 8.22: SNMS-Profil des $Ga_{0,27}In_{0,73}As/InP$-Übergitters

Profil kein Plateau. Da nach den Röntgenergebnissen zumindest beim Gallium von einer kastenförmigen Verteilung ausgegangen werden kann, ist die Tiefenauflösung offensichtlich nicht ausreichend, um stabile Verhältnisse innerhalb der 10 nm dünnen GaInAs-Schicht zu bekommen. Der Anstieg und der Abfall der Signale überlagern sich also. Dadurch bedingt liegt auch der Spitzenwert des Ga-Signals nur halb so hoch wie erwartet. Zur Bestimmung der Zusammensetzung des GaInAs werden daher die Intensitäten der Ga- und As-Signale über das gesamte Schichtpaket hinweg integriert und zueinander ins Verhältnis gesetzt. Unter der Voraussetzung abrupter Übergänge läßt sich dann der Ga-Anteil berechnen, da das As im GaInAs ja einen festen Anteil von 50 Atomprozenten hat.

Umgelegt auf die In-Konzentration ergeben sich für die verschiedenen Proben die in Abb. 8.23 dargestellten Werte. Im Rahmen eines Fehlers von ±2 % stimmen die gemessenen Konzentrationen im wesentlichen mit den Erwartungen überein. Aber genau wie bei der Röntgenanalyse deutet sich auch hier die Tendenz an, daß die Steigerung im In-Gehalt der Quantentöpfe nicht so verläuft wie bei den dicken GaInAs-Schichten. Da die Abweichungen jedoch nicht allzu gravierend erscheinen, wird dieser Punkt nicht weiter verfolgt. Unter Berücksichtigung aller Ergebnisse kann also auch in GaInAs/InP-Quantentopf-Strukturen das Ga/In-Verhältnis weitestgehend direkt aus den Partialdrücken der Metallorganika berechnet werden.

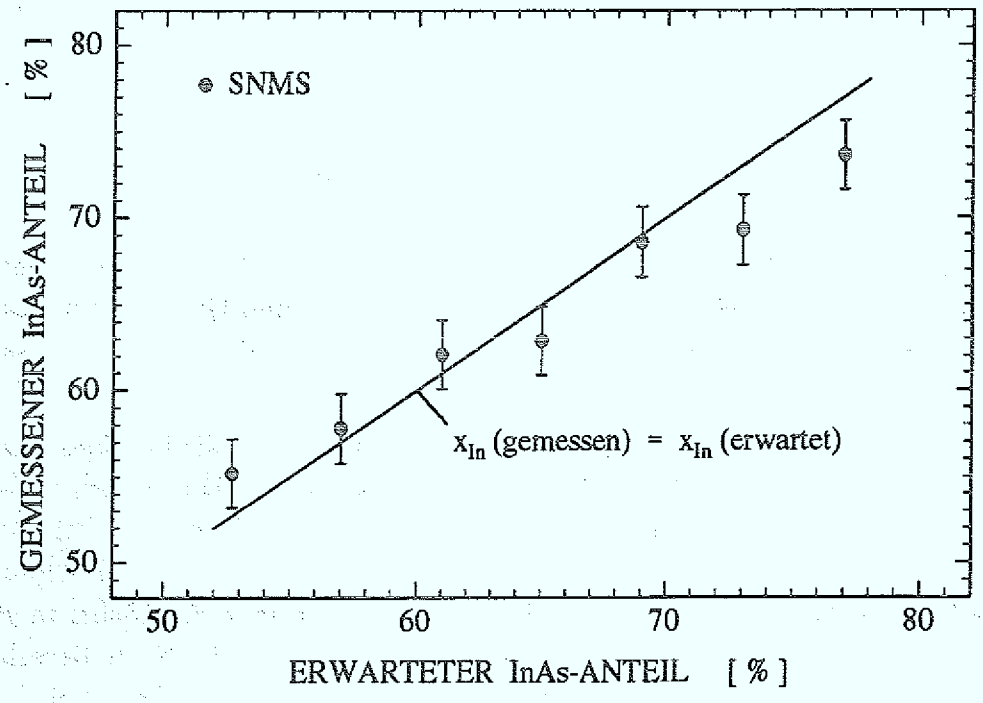


Abb. 8.23: Ergebnisse der SNMS-Analysen in Bezug auf die In-Konzentration in den GaInAs-Schichten der Übergitter

8.7 Bestimmung der Bandlücke von verspanntem $Ga_{1-x}In_xAs$

Zur Bestimmung der Bandlücke E_g des verspannten $Ga_{1-x}In_xAs$ werden PL-Messungen an den Übergitter- bzw. Quantentopfstrukturen durchgeführt. Um dabei die Verschiebung der Übergangsenergien aufgrund der Quantisierung der Energieniveaus berücksichtigen zu können, wird zum Vergleich auch die Lumineszenz einer dicken GaInAs-Schicht mit gleicher Zusammensetzung wie bei der gitterangepaßten Quantentopfstruktur gemessen.

Die PL-Signale (2 K) der Quantentopfstrukturen sind im unteren Teil der Abb. 8.24 dargestellt, wobei ihre Intensitäten auf 1 normiert sind. Ihre energetische Lage verschiebt sich linear mit zunehmendem InAs-Anteil zu niedrigeren Energien, wie die obere Graphik verdeutlicht. Für die gitterangepaßte Probe wird dabei eine Energie gemessen ($E_{QT}(x_{In} = 0,53) = 843$ meV), die um 37 meV höher liegt, als die des entsprechenden Bulk-Materials ($E_{Bulk}(x_{In} = 0,53) = 806$ meV). Geht man von einem 9,4 nm breiten GaInAs-Quantentopf und einem Leitungsband-Offset von 40 % der gesamten Bandlückendifferenz [113] zwischen InP und GaInAs aus, so ist für die Elektronen ($m^* = 0,041\, m_e$) eine Verschiebung des Grundzustandniveaus von 37 meV (E_e^1) und bei den Löchern ($m^* = 0,465\, m_e$) eine von 7 meV (E_{hh}^1) zu erwarten. Berücksichtigt man zudem die Bindungsenergie der Exzitonen (E_X^B) von 2 meV im Bulk-Material [8] und ca. 10 meV im Quantentopf [51], so wäre für die Lumineszenz der Quantentopfprobe folgende Energie zu erwarten:

$$E_{QT} = E_{Bulk} + E_X^B(Bulk) + E_e^1 + E_{hh}^1 - E_X^B(QT) = 842\,\text{meV}$$

Die gemessene Energie entspricht also genau dem für diese Struktur zu erwartenden Wert, so daß die Energiedifferenz zwischen Bulk-Material und Quantentopf ausschließlich durch den Quantisierungseffekt und nicht durch eine Änderung in der Zusammensetzung des Quantentopfes hervorgerufen wird.

Bei den Quantentopfstrukturen mit erhöhtem In-Gehalt ist die Lumineszenzenergie jedoch nicht mehr nur durch die Zusammensetzung und die Quantisierung, sondern auch noch durch die Verspannung im System bestimmt. Bereits in dicken Schichten wird durch eine Spannung die Entartung zwischen Leicht-Loch- und Schwer-Loch-Zuständen aufgehoben. Gleichzeitig weisen dabei die Zustände der Löcher in verschiedenen Raumrichtungen einen unterschiedlichen Charakter auf. Nach Berechnungen von Wang und Stringfellow [15] zeigt in $Ga_{1-x}In_xAs$ mit einem InAs-Anteil von mehr als 53 % das energetisch höchste Löcherniveau, quantenmechanisch beschrieben durch $|J, m_j\rangle = |\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$, parallel zur Oberfläche leichtlochartigen und senkrecht dazu schwer-

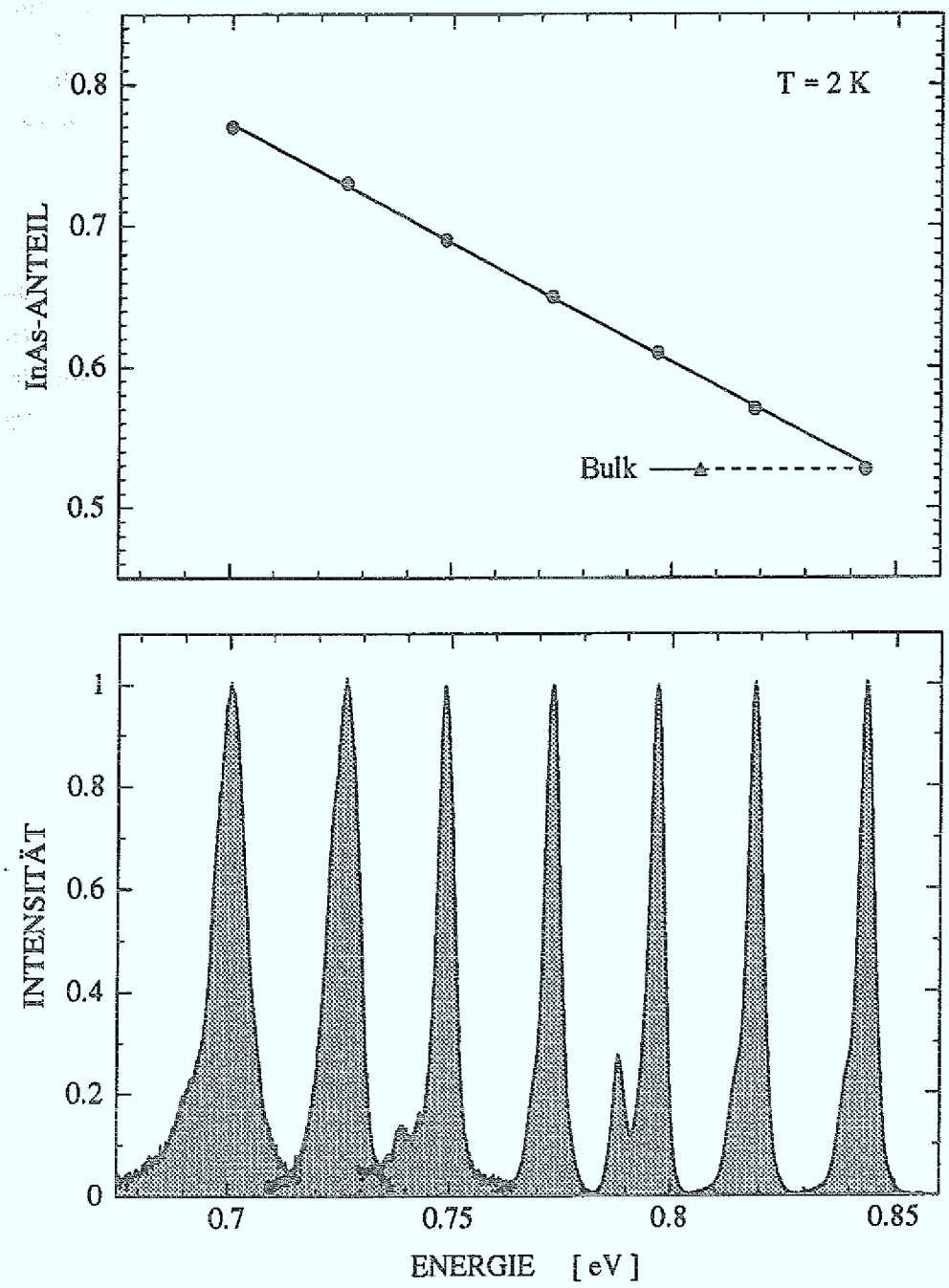


Abb. 8.24: Abhängigkeit der Lumineszenzenergie von der Zusammensetzung der $Ga_{1-x}In_xAs$-Quantentöpfe. Die Intensität der PL-Spektren ist auf 1 normiert.

lochartigen Charakter. Das tiefer liegende $|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\rangle$-Band hat dagegen in senkrechter Richtung eine relativ geringe Masse. Da die Größe des Quantisierungseffektes umgekehrt proportional zur effektiven Masse ist, ändert sich die energetische Reihenfolge der Bänder auch in Quantentopfstrukturen nicht.[2] Die Übergänge in den verspannten Quantentöpfen sind daher wie im gitterangepaßten Fall Rekombinationen der Art e_1–hh_1.

Nimmt man nun vereinfachend an, daß der Quantisierungseffekt für alle hier untersuchten Proben in etwa gleich ist, so läßt sich die Bandlücke des verspannten Materials aus dem jeweiligen PL-Signal und der Quantisierung bei gitterangepaßtem GaInAs berechnen. Fehler ergeben sich dabei vor allem aufgrund der Änderungen der effektiven Massen. Für Quantentöpfe dieser Breite macht dieser Effekt allerdings erst einige meV aus.

Aus einer linearen Regression der Meßergebnisse ergibt sich dann für die Abhängigkeit zwischen der Bandlücke von verspanntem $Ga_{1-x}In_xAs$ und seiner Zusammensetzung folgende Beziehung:

$$E_g(\mathrm{Ga_{1-x}In_xAs})\ /\ eV \;=\; -0,592\ x_{In} \;+\; 1,120 \tag{8.3}$$

Damit ist also neben der Zusammensetzung der hier benutzten Quantentöpfe auch die Bandlücke des verspannten Materials bestimmt.

[2] Für In-Konzentrationen unter 53 % liegen die Bänder in umgekehrter Reihenfolge. In diesem Fall kann es bei dünnen Töpfen zu einer Vertauschung der Bänder in Abhängigkeit von L_z kommen.

Kapitel 9

Elektronentransport in Heterostrukturen mit In-reichem Kanal

Die Transporteigenschaften von $Ga_{1-x}In_xAs$ sollen, wie schon beim gitterangepaßten Material, an Hand von 2DEG-Strukturen untersucht werden. Bei der Herstellung entsprechender Strukturen ist jedoch zu berücksichtigen, daß hohe Beweglichkeiten defektarme und damit insbesondere nichtrelaxierte Schichten voraussetzen. In Bezug auf die mit gitterangepaßtem GaInAs optimierte Struktur aus Kap. 6 heißt das, daß bei einer GaInAs-Schichtdicke von 150 nm nach Abb. 2.5 (S. 22) der InAs-Anteil nur um wenige Prozent erhöht werden kann, was wenig Gewinn verspricht. Da sich jedoch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit von 2D-Elektronen nur wenige 10 nm ins GaInAs hinein erstreckt, muß nicht unbedingt die gesamte Deckschicht verspannt werden. Das Maximum der Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist sogar weniger als 10 nm von der Grenzfläche entfernt, wie selbstkonsistente Berechnungen der Elektronenverteilung zeigen. Um nun möglichst hohe In-Konzentrationen benutzen zu können, wird daher die bisherige 2D-Gas-Struktur dahingehend abgewandelt, daß zwischen dem InP und dem gitterangepaßten GaInAs ein spezieller Kanal aus $Ga_{1-x}In_xAs$ mit 10 nm Dicke eingeschoben und nur in diesem die In-Konzentration variiert wird. Die Struktur hat somit den Abb. 9.1 dargestellten Aufbau.

Um bei der Herstellung dieser Doppel-Heterostrukturen kurze Wachstumspausen realisieren zu können, werden für die GaInAs-Schichten jeweils eigene TMIn-Quellen mit von vorn herein unterschiedlichen Flüssen verwendet. Dadurch muß zur Änderung des TMIn-Angebotes keine neuer Fluß eingestellt und seine Stabilisierung abgewartet werden, sondern zum Wechsel der Gasphasenzusammensetzung brauchen nur Ventile geschaltet zu werden.

150 nm	$Ga_{0,47}In_{0,53}As$		
10 nm	$Ga_{1-x}In_xAs$	Kanal	
20 nm	InP	Spacer	
10 nm	InP(S)	Dotierung	$n = 4,2 * 10^{17}\ cm^{-3}$
300 nm	InP	Puffer	
	InP	Substrat	s. i.

Abb. 9.1: Aufbau der Proben für ein 2DEG in einem verspannten Kanal

9.1 Transporteigenschaften der 2DEGs

Die Untersuchung der elektrischen Eigenschaften dieser Strukturen stützt sich wieder auf temperaturabhängige Hall-Effekt-Messungen. Für einige Proben sind die Beweglichkeiten in Abb. 9.2 dargestellt. Alle Kurven zeigen den für 2D-Transport typischen Verlauf. Dabei nimmt die Beweglichkeit deutlich mit dem In-Gehalt zu. Für einen InAs-Anteil von 76 % wird sogar ein Wert von 450.000 cm^2/Vs bei tiefen Temperaturen gemessen, was gegenüber dem gitterangepaßten Fall einer Steigerung um nahezu einen Faktor 2,5 entspricht. Eine derart hohe Beweglichkeit wurde in diesem Materialsystem erst einmal von Maurel et al. [114] festgestellt, konnte aber nicht reproduziert werden. Zur Untermauerung der Ergebnisse werden daher im Anschluß an die Versuchsreihe die Experimente bei $x_{In} = 0,53$ und $0,76$ wiederholt. Daß die Abweichungen dabei nur 5 % betragen (siehe dazu auch Abb. 9.5), demonstriert die hervorragende Reproduzierbarkeit des gesamten Herstellungsprozesses.

Neben der Zunahme der Beweglichkeit ist auch ein Anstieg der Ladungsträgerdichte im 2D-Gas zu beobachten, wie aus Abb. 9.3 hervorgeht. Wenn die Werte auch etwas streuen, ist die Tendenz doch klar zu erkennen. Diese Zunahme läßt sich dadurch erklären, daß mit steigendem In-Gehalt die Bandlücke des $Ga_{1-x}In_xAs$ kleiner wird und so ein tieferer Potentialtopf entsteht, in dem die Elektronen effektiver gesammelt

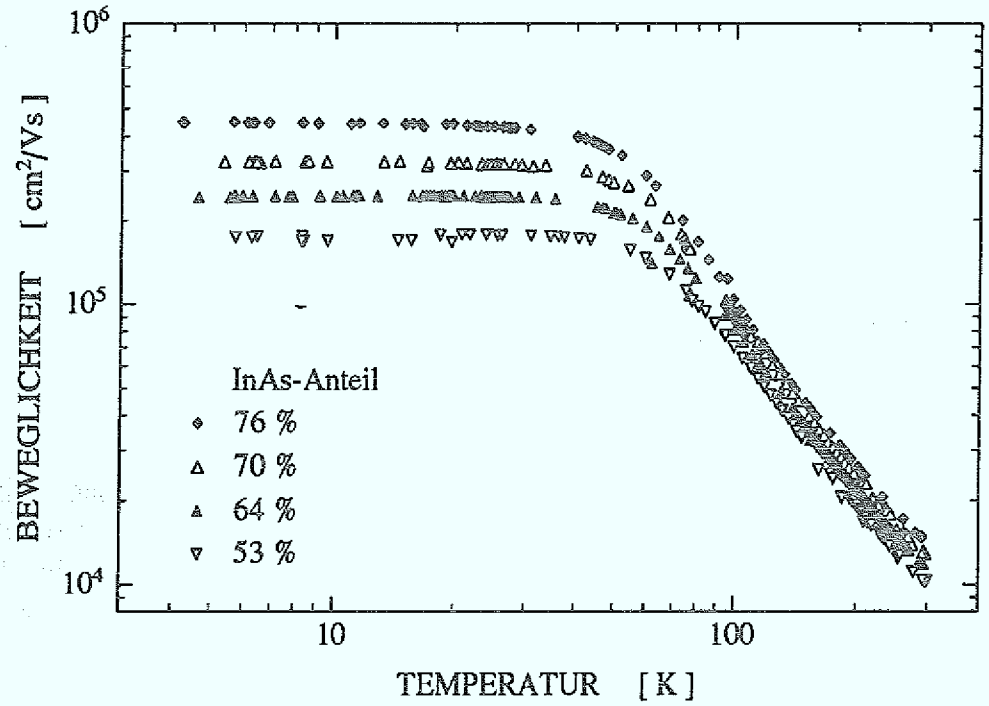


Abb. 9.2: Beweglichkeit als Funktion der Temperatur bei verschiedenen In-Konzentrationen im 2D-Kanal

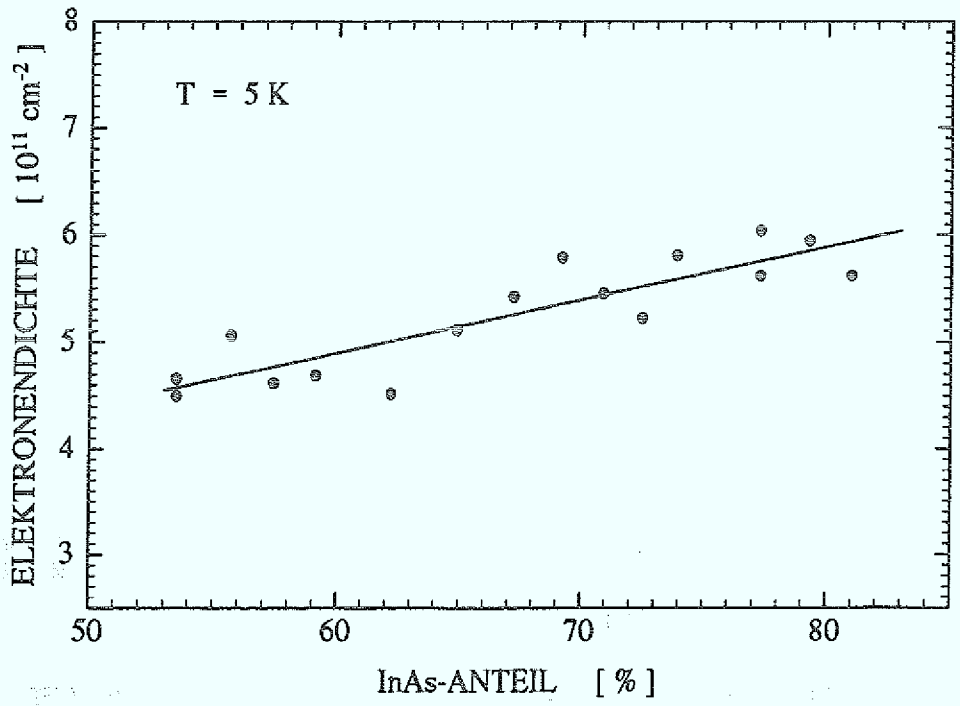


Abb. 9.3: Zunahme der Elektronendichte im Kanal bei Erhöhung des InAs-Anteils

werden. Doch obwohl die Elektronendichte anwächst und gleichzeitig auch noch die Zustandsdichte eines Subbandes durch die abnehmende effektive Masse sinkt, ist in allen Proben nur ein Subband besetzt, wie SdH-Messungen ergeben. Dies ist auf die mit der Tiefe des verspannten Potentialtopfes zunehmende Separation der Subbänder voneinander zurückzuführen.

9.2 Abhängigkeit der Beweglichkeit von der Ladungsträgerdichte

Bereits beim gitterangepaßten Material wurde die Beweglichkeit durch eine Mischung aus Störstellen- und Legierungsstreuung bestimmt, was sich in einer geänderten Abhängigkeit der Beweglichkeit von der Elektronendichte äußerte. Bevor auf den Einfluß der Zusammensetzung des GaInAs auf die Beweglichkeit eingegangen wird, soll daher zunächst die Bedeutung der sich ändernden Ladungsträgerdichte untersucht werden.

Dazu wurde bei einem InAs-Anteil von 76 % die Konzentration der Dotierung im InP zwischen $3,9 \times 10^{16}\,\mathrm{cm}^{-3}$ und $2 \times 10^{18}\,\mathrm{cm}^{-3}$ variiert. Die an diesen Proben gemesse-

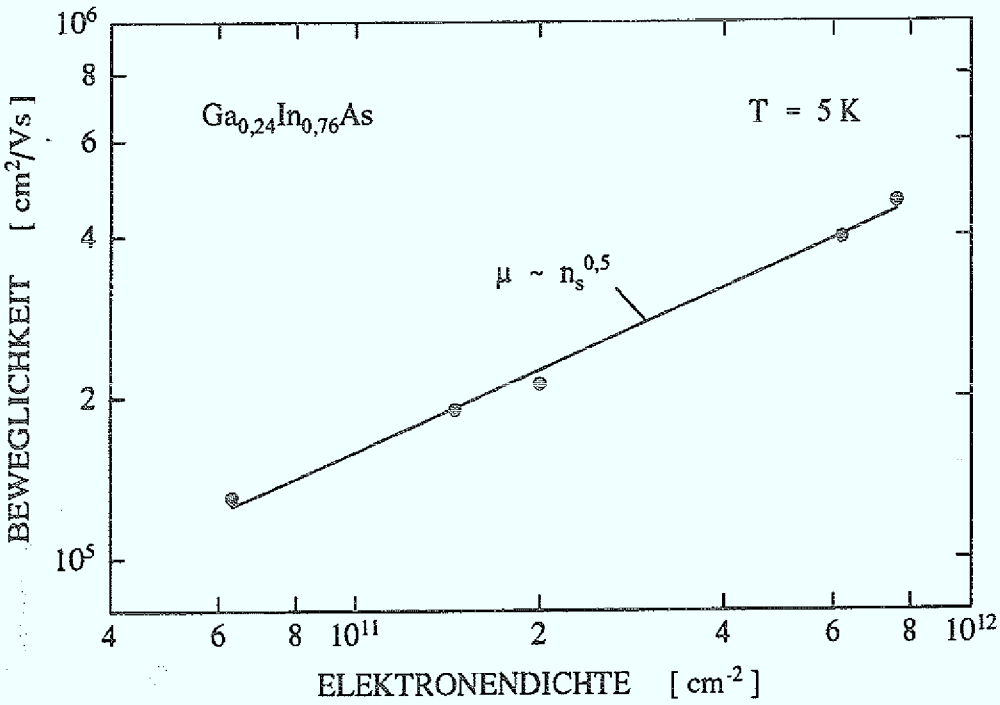


Abb. 9.4: Abhängigkeit der Beweglichkeit von der Elektronendichte im verspannten Kanal. Bei einem festem InAs-Anteil von 76 % wurde die Höhe der Dotierung gezielt variiert.

nen Beweglichkeiten sind in Abb. 9.4 gegen die Elektronendichte im Kanal aufgetragen. Demnach nimmt die Beweglichkeit proportional zu $n_s^{0,5}$ zu, was erneut den Mischeinfluß von Störstellen- und Legierungsstreuung bestätigt.

9.3 Einfluß des In-Gehaltes

Die Veränderung der Beweglichkeit mit dem In-Gehalt ist in Abb. 9.5 dargestellt. Wie zu sehen, nimmt μ am Anfang nur allmählich, später aber immer stärker zu, bis bei einer Konzentration oberhalb von 76 % ein abrupter Abbruch erfolgt. Die Ursache für diesen drastischen Rückgang wird im nächsten Abschnitt untersucht werden. Zuvor soll erst einmal der ansteigende Bereich näher betrachtet werden.

Für eine Beschreibung des Anstiegs in der Beweglichkeit muß der Einfluß der Störstellen- und der Legierungsstreuung gemeinsam berücksichtigt werden. Faßt man

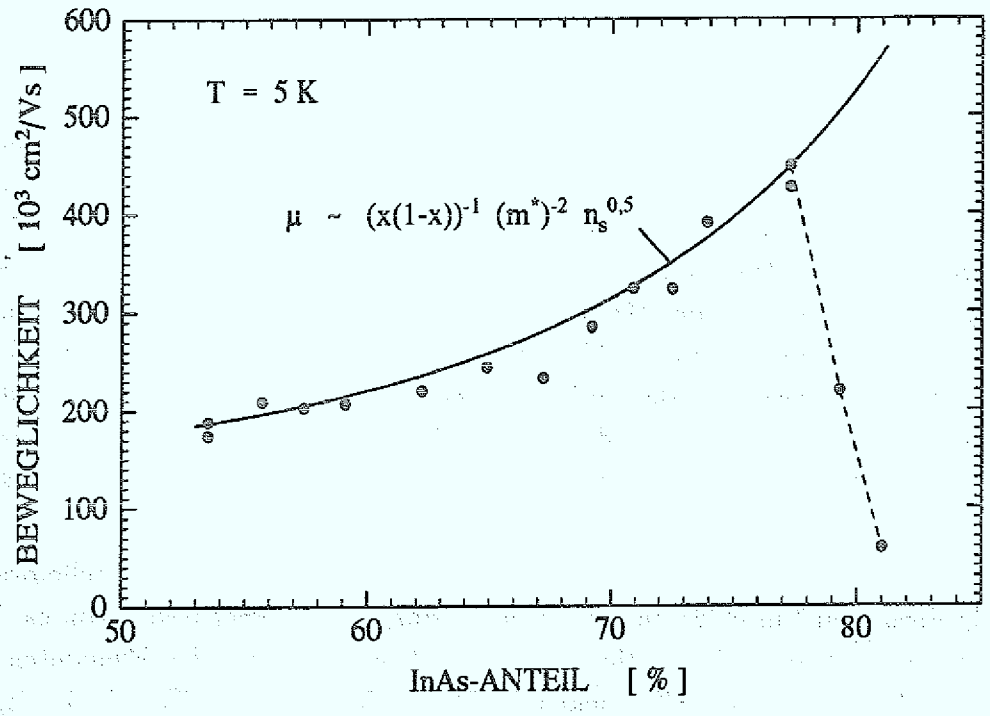


Abb. 9.5: Einfluß des InAs-Anteils im verspannten Kanal auf die Beweglichkeit der 2D-Elektronen. Die Zunahme der Beweglichkeit läßt sich durch eine kombinierte Form der Störstellen- und Legierungsstreuung beschreiben. Der Ausdruck enthält keinen Fit-Parameter. Die abrupte Abnahme oberhalb von 76 % ist auf die Ausbildung von Versetzungsnetzwerken zurückzuführen.

beide Streubeiträge in einer Formel zusammen und setzt für die Abhängigkeit gegenüber der Ladungsträgerdichte die beobachtete Proportionalität zu ${n_s}^{0,5}$ an (unter der Annahme, daß diese Abhängigkeit für alle In-Konzentrationen gültig ist), so ergibt sich für das Verhalten der Beweglichkeit $\mu(x_{In})$ relativ zum gitterangepaßten Fall:

$$\mu(x_{In}) = \mu(0,53) \cdot \frac{0,53 \cdot 0,47}{x\,(1-x)} \cdot \left(\frac{m^*(0,53)}{m^*(x_{In})}\right)^2 \cdot \left(\frac{n_s(x_{In})}{n_s(0,53)}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad (9.1)$$

Diese Beziehung, die keinen Fit-Parameter enthält, beschreibt den experimentell gefundenen Verlauf der Zunahme der Beweglichkeit sehr gut, wie aus Abb. 9.5 ersichtlich ist. Dabei wurden für die effektiven Massen die Angaben aus Ref. [115] linear interpoliert und für die Ladungsträgerdichte die Werte der Ausgleichsgeraden aus Abb. 9.3 benutzt. Offenbar sind also auch in den verspannten Schichten die Störstellen- und die Legierungsstreuung die entscheidenden Streumechanismen. Dies bedeutet aber vor allem, daß mit der ständig steigenden Spannung *keine langsam zunehmende Degradierung* der Schichten einher geht.

9.4 Strukturelle Eigenschaften der Proben

Um der Ursache für den abrupten Abfall der Beweglichkeit bei In-Konzentrationen über 76 % auf den Grund zu gehen, werden die strukturellen Eigenschaften einiger dieser Proben mittels TEM untersucht. Am interessantesten ist dabei natürlich zunächst die wahre Struktur der Probe mit der höchsten Beweglichkeit, das heißt mit $x_{In} = 0,76$, da sie offenbar die Grenze des Machbaren darstellt. Eine Querschnittsaufnahme dieser Probe zeigt das obere Photo in Abb. 9.6. Aufgrund des Materialkontrastes ist der verspannte Kanal zwischen dem InP und dem gitterangepaßten GaInAs deutlich zu erkennen. Seine Dicke entspricht dem nominellen Wert von 10 nm. Beide Grenzflächen sind glatt und scharf definiert. Soweit hier erkennbar, stellt die Probe also eine perfekte Heterostruktur dar.

Bei Aufsichtsaufnahmen der Probenoberfläche findet man jedoch stellenweise Defekte in Form von Einschlüssen oder Ausscheidungen mit einer Größe von ca. 250 nm (Abb. 9.6 unten). Nach EMA-Messungen bestehen sie nur aus den Elementen Ga, In, As und P. Es handelt sich also nicht um irgendwelche Fremdstoffe. Bei der gitterangepaßten Probe werden dagegen Defekte dieser Art gar nicht gefunden und auch die Probe mit einem InAs-Anteil von 70 % zeigt nur vergleichsweise wenige. Die Ursache für das Auftreten dieser Defekte, deren Dichte offenbar mit dem In-Gehalt zunimmt, ist zwar nicht geklärt, wodurch aber auch immer sie hervorgerufen werden, in den am stärksten verspannten Proben scheinen sie die Ausgangspunkte für Versetzungen zu sein.

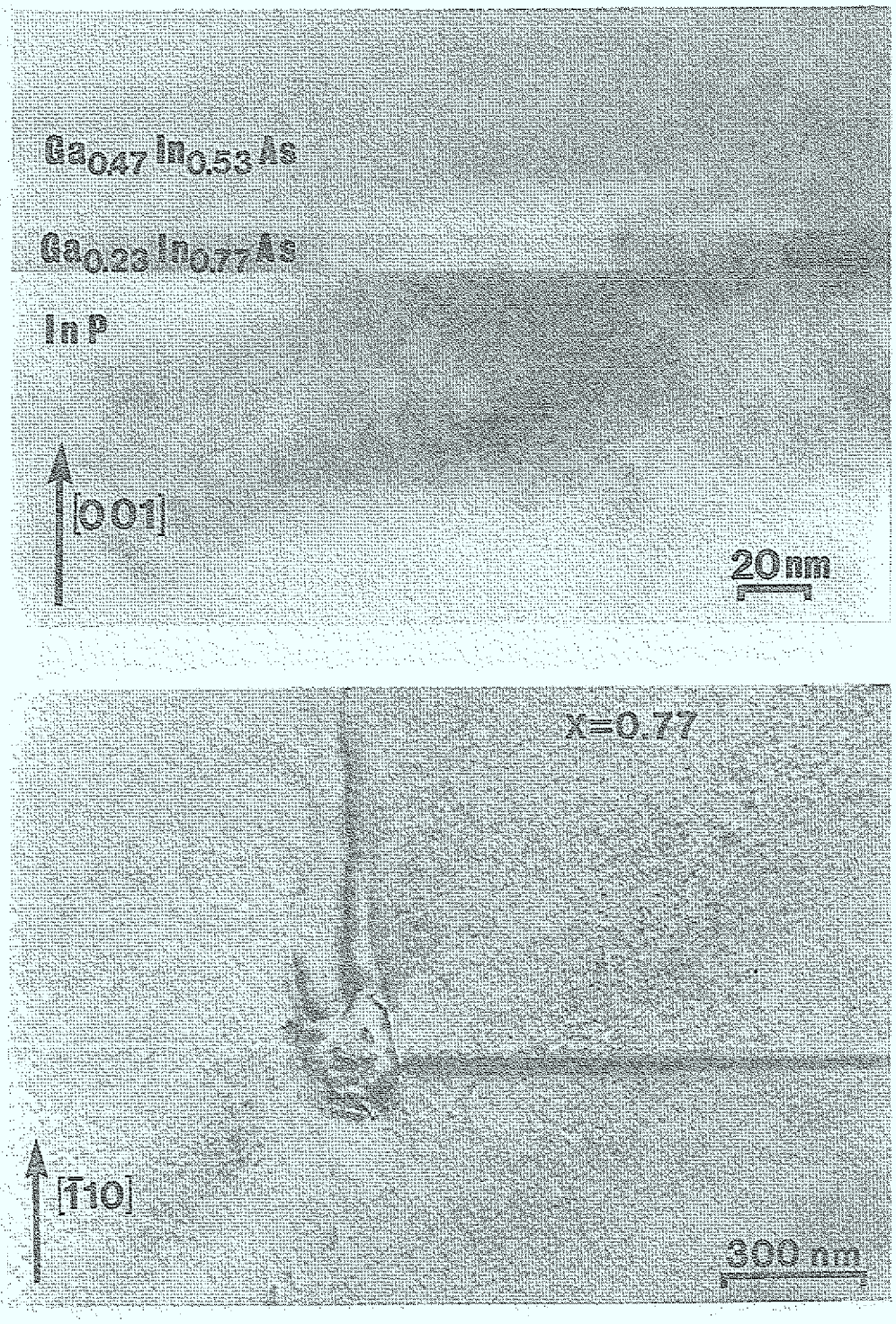


Abb. 9.6: TEM-Aufnahmen der 2DEG-Struktur mit 76 % InAs-Anteil im verspannten Kanal im Querschnitt (oben) und in Aufsicht auf die Probenoberfläche (unten)

Wie in Abb. 9.6 am Beispiel der Probe mit $x_{In} = 0,76$ zu sehen ist, verlaufen diese Versetzungen in $\langle 101 \rangle$-Richtungen. Das entspricht dem in fcc-Gittern üblichen Gleiten von Versetzungen auf einer $\{111\}$-Ebene, woraus 60°-Versetzungen mit einem Burgers-Vektor von $\underline{b} = \frac{1}{2}\langle 101 \rangle$ resultieren. Bis zu In-Konzentrationen von 70 % werden derartige Versetzungslinien allerdings nicht beobachtet und auch bei 76 % handelt es sich nur um vereinzelte. Die Situation ändert sich jedoch bei noch höheren In-Konzentrationen. Bei 78 % und besonders bei 80 % sind ganze Versetzungsnetzwerke zu sehen, wie Abb. 9.7 deutlich macht. Auch hier beginnen die Versetzungen meistens wieder in Defekten und liegen im allgemeinen in $\langle 110 \rangle$-Richtungen. Ihre mittlere Dichte beträgt $1,5 \times 10^4\ \mathrm{cm}^{-1}$.

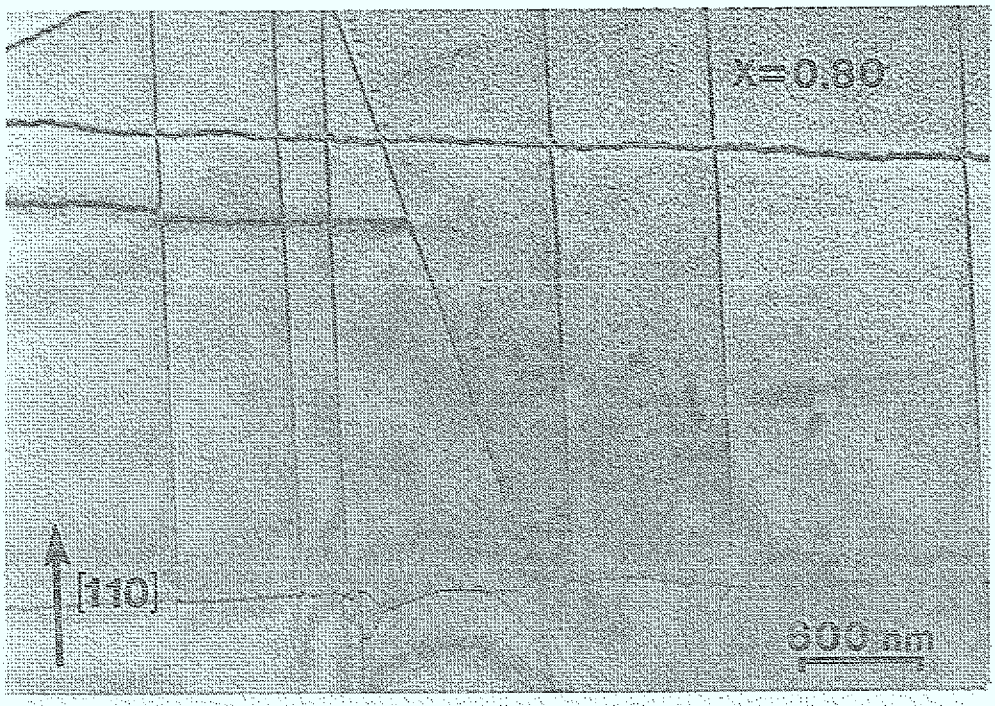


Abb. 9.7: TEM-Aufsichtsaufnahme der Probe mit $x_{In} = 0,80$

Die Beobachtungen zusammenfassend läßt sich also sagen, daß bei In-Konzentrationen unterhalb 76 % keine nennenswerten Kristallstörungen beobachtet werden. Bei 76 %, das heißt im Maximum der Beweglichkeitskurve, beginnen sich einzelne Versetzungen auszubilden, die an Einschlüssen ansetzen, aber das 2DEG offenbar nicht nachhaltig stören. Oberhalb von 76 % finden sich dann ausgeprägte Versetzungsnetzwerke, die die Relaxation der Schichten anzeigen. Die Abnahme der Beweglichkeit geht somit eindeutig mit der Entstehung von Versetzungsnetzwerken einher. Solange es demnach nicht zu solchen Netzwerken kommt, lassen sich in verspannten Schichten hohe Beweglichkeiten erreichen. In diesem Zusammenhang müßte vielleicht der Ursprung der

Einschlüsse und ihre Rolle bei der Bildung von Versetzungen noch näher geklärt werden. Ließen sie sich vermeiden, wären eventuell noch höhere In-Konzentrationen ohne eine Relaxation der Schichten erreichbar.

Das Fazit, das aus den Ergebnissen dieses Kapitels zu ziehen ist, stellt sich damit wie folgt dar: Durch Erhöhung des In-Gehaltes in einem 10 nm breiten Kanal kann die Tieftemperaturbeweglichkeit von 2D-Elektronen um bis zu einem Faktor 2,5 gegenüber dem gitterangepaßten Fall gesteigert werden. Die dabei für einen InAs-Anteil von 76 % bei 5 K gemessene Beweglichkeit von 450.000 cm^2/Vs stellt den unseres Wissens nach höchsten Wert dar, der bisher in diesem Materialsystem reproduzierbar erreicht werden konnte. Die Zunahme der Beweglichkeit mit dem In-Gehalt läßt sich durch eine Kombination von Störstellen- und Legierungsstreuung vollständig beschreiben, was eine langsame Degradierung der Schichten mit wachsender Spannung ausschließt. Die Abnahme erfolgt statt dessen abrupt, sobald sich ein Versetzungsnetzwerk ausbildet.

Kapitel 10

Optimierung der Leitfähigkeit des 2DEG für HEMT-Anwendungen

Unter Ausnutzung der hervorragenden elektrischen Eigenschaften des In-reichen GaInAs soll nun abschließend die Leitfähigkeit im 2D-Kanal maximiert werden, um damit die Eignung dieses Materialsystems zur Herstellung von HEMTs zu demonstrieren.

In der ersten Transistorteststruktur mit gitterangepaßtem GaInAs (s. Abschnitt 7.3) lag die Beweglichkeit der Elektronen zwar immerhin bei 10.000 cm^2/Vs, aber ihre Dichte betrug nur $0,56 \times 10^{12}\,cm^{-2}$, was einem Produkt von $\mu \cdot n_s = 5,6 \times 10^{15}\,V^{-1}s^{-1}$ entspricht. Demgegenüber werden in den bisher auf InP-Basis hergestellten HEMT-Strukturen mit Kanälen aus In-reichem $Ga_{1-x}In_xAs$ und AlInAs-Barrieren typischerweise Elektronendichten von $2,5 - 3,5 \times 10^{12}\,cm^{-2}$ bei Beweglichkeiten von 11.000 – 13.000 cm^2/Vs erreicht [10, 116, 117, 118, 119]. Mit diesen Strukturen wird demnach ein Produkt von bis zu $46 \times 10^{15}\,V^{-1}s^{-1}$ erzielt, das damit um einen Faktor 8 höher liegt als bei der hier hergestellten Probe. Um nun das Produkt aus μ und n_s zu verbessern, muß der Aufbau der HEMT-Struktur dahingehend verändert werden, daß man vor allem höhere Ladungsträgerdichten im Kanal erhält.

In einer modulationsdotierten Struktur kann die Anzahl der Elektronen im Kanal durch die Konzentration und die Verteilung des Dotierstoffes variiert werden. Die effektiv nutzbare Höhe der Dotierung ist dabei allerdings nach oben begrenzt, denn um alle freien Elektronen im Kanal zu sammeln, darf die Leitungsbandkante im dotierten Bereich nicht unter das Fermi-Niveau sinken. Die mit *einer* Modulationsdotierung maximal erreichbare Elektronendichte wird demnach maßgeblich durch den Leitungsband-Offset am Heteroübergang bestimmt. Für die HEMTs soll daher hier eine Struktur benutzt werden, in der Elektronen nicht nur aus *einer*, sondern aus *zwei* Modulationsdotierungen in den Quantentopf eingespeist werden, um so eine möglichst

30 nm	InP	Barriere
d_n	InP(S)	n_{sur}
d_{sp}	InP	Spacer
d_{ch}	$Ga_{1-x}In_xAs$	Kanal
d_{sp}	InP	Spacer
d_n	InP(S)	n_{sub}
380 nm	InP	Puffer
	InP	Substrat

Abb. 10.1: Prinzipieller Aufbau der HEMT-Strukturen

hohe Elektronendichte erreichen zu können. Dazu wird der GaInAs-Kanal, anders als bei der 2DEG-Struktur, ganz in InP eingebettet und dieses sowohl unter als auch über dem Kanal modulationsdotiert. Diesen Aufbau veranschaulicht Abb. 10.1. Zur Barrierenerhöhung wird auf die obere Dotierung noch eine 30 nm dicke undotierte InP-Deckschicht aufgebracht, was nach den Ergebnissen in Abschnitt 7.2 hinreichend sein sollte und den Abstand zwischen Gate und 2D-Kanal klein hält. Im Gegensatz zu diesem Aufbau wird in AlInAs/GaInAs-HEMTs üblicherweise die normale Geometrie verwendet. Die Elektronen werden dabei nur aus einer Modulationsdotierung, die sich oberhalb des GaInAs befindet, geliefert. Aufgrund des mehr als doppelt so hohen ΔE_c lassen sich damit aber dennoch höhere Elektronendichten als im GaInAs/InP-System erzielen. Außerdem befindet sich so das 2DEG an der Grenzfläche vom GaInAs zum AlInAs, die im allgemeinen glatter ist als der umgekehrte Heteroübergang.

10.1 Vorgehensweise bei der Optimierung

Der Gedankengang zur Optimierung der Leitfähigkeit der HEMT-Struktur sieht folgendermaßen aus:

Ausgangspunkt ist eine Struktur mit einem Quantentopf aus gitterangepaßtem GaInAs. Für die Verteilung des Dotierstoffes, das heißt für die Schichtdicken d_{sp} und d_n, werden zunächst Werte gewählt, wie sie in HEMT-Strukturen üblich und aus der Literatur bekannt sind. Für diesen Aufbau werden dann die Dotierstoffkonzentrationen

n_{sur} und n_{sub} mit Hilfe von selbstkonsistenten Bandverlaufsrechnungen so optimiert, daß die Elektronendichte im Kanal maximal wird und gleichzeitig keine freien Elektronen in den dotierten Bereichen verbleiben, um eine parallele Leitfähigkeit im InP zu vermeiden. Die Leitfähigkeit des 2D-Kanals wird anschließend durch eine Messung von μ und n_s experimentell bestimmt, da die Rechnungen "nur" Informationen über die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Ladungsträger liefern, aber keine Aussage über ihre Beweglichkeit erlauben.

Zur Vergrößerung des Leitungsband-Offsets ΔE_c und um die Beweglichkeit der Elektronen in dieser Struktur zu optimieren, wird in der ersten Versuchsreihe die In-Konzentration im GaInAs sukzessive erhöht. Da sich bereits beim gitterangepaßten Quantentopf alle Elektronen im Kanal befinden, wird n_s dabei konstant bleiben, so daß sich die Leitfähigkeit direkt der Beweglichkeit entsprechend verändert. Der In-Gehalt wird soweit gesteigert, bis die Schicht zu relaxieren beginnt. Bei diesem In-Gehalt wird dann die Kanalbreite verringert, um unterhalb der kritischen Schichtdicke zu bleiben.

Für diese Heterostruktur mit dem höchsten nutzbaren ΔE_c und der kleinsten effektiven Elektronenmasse im Kanal ist anschließend die Dotierstoffverteilung zu optimieren. Dazu wird als erstes die Dicke des Spacers d_{sp} variiert, denn es lassen sich um so höhere Elektronendichten im Kanal erreichen, je näher die Dotierungen an den Kanal herangebracht werden. Dabei werden die Dotierungen jedesmal so eingestellt, daß sich die für die jeweilige Struktur maximale Elektronendichte im Kanal ergibt. Da mit dünner werdendem Spacer aber auch der Einfluß der ionisierten Störstellen auf die Beweglichkeit der Elektronen zunimmt, wird zur Bewertung der Proben das Produkt aus n_s und μ herangezogen. Abschließend bleibt dann nur noch die Dicke der dotierten Schichten entsprechend zu optimieren. Eine Verringerung ihrer Breite führt zu einer Verschiebung der Energieniveaus in diesen Potentialtöpfen zu höheren Energien hin. Dadurch können höhere Dotierstoffkonzentrationen benutzt werden, ohne daß die Energieniveaus unter das Fermi-Niveau rutschen und damit Elektronen in den Dotierungen verbleiben. Insgesamt lassen sich so effektiv mehr Elektronen in den Kanal übertragen.

Selbstkonsistente Bandverlaufsrechnungen

Die Verteilung der Elektronen in den Heterostrukturen und der dementsprechende Bandverlauf werden als selbstkonsistente Lösung der Poisson- und der Schrödinger-Gleichung in Hartree-Näherung numerisch berechnet (Programm von A. Leuther [120]). Die Eigenschaften des Festkörpermaterials werden dabei durch die dielektrische Konstante ϵ und die Bandstruktur $E(\underline{k})$ berücksichtigt. Da es sich bei dem 2DEG um ein Vielteilchensystem handelt, wird es nicht durch die Wellenfunktionen einzelner Elektronen (wegen der großen Anzahl gekoppelter Differentialgleichungen numerisch

nicht handhabbar), sondern thermodynamisch über eine Besetzungszahldarstellung der Zustände in den einzelnen Subbändern beschrieben. Die Besetzung erfolgt entsprechend der Fermi-Verteilung, wobei eine Nichtparabolizität des Leitungsbandes berücksichtigt wird. Die Lage der Fermi-Energie im Inneren des Festkörpers bestimmt sich aus der Forderung nach Ladungsneutralität. An der Oberfläche ist dagegen der Abstand des Fermi-Niveaus von der Leitungsbandkante als Materialeigenschaft vorzugeben und fließt als Randbedingung in die Lösung der Poisson-Gleichung ein.

In Heterostrukturen werden zur Berechnung der Elektronenverteilung die Besetzungszahlen für jedes Material getrennt berechnet (verschiedene ϵ und $E(\underline{k})$!) und dann mit den Aufenthaltswahrscheinlichkeiten gewichtet. Für den Potentialverlauf muß zusätzlich die Höhe des Leitungsband-Offsets an den Grenzflächen bekannt sein.

Das Programm benötigt also als Eingangsparameter den Aufbau der Struktur, das heißt Schichtdicken und Dotierstoffverteilung, die elektrischen Eigenschaften der Materialien (ϵ und $E(\underline{k})$), sowie die Höhe des Leitungsband-Offsets an den Grenzflächen und den Abstand des Fermi-Niveaus von der Leitungsbandkante an der Oberfläche. Eine Rechnung läuft dann folgendermaßen ab: Zunächst wird für eine weitestgehend willkürliche Elektronenverteilung die Poisson-Gleichung gelöst. Mit dem sich daraus ergebenden Potentialverlauf werden über die Einteilchen-Schrödinger-Gleichung die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten und die Energieeigenwerte und daran anschließend die Besetzungszahlen der einzelnen Subbänder berechnet. Aus dem Produkt der Besetzungszahlen und der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten ergibt sich dann eine neue Elektronenverteilung, für die in einem weiteren Schleifendurchlauf wieder die Poisson-Gleichung gelöst wird. Dieser Ablauf wiederholt sich solange, bis sich die Ergebnisse zweier aufeinanderfolgender Rechnungen nicht mehr verändern.

Für die Berechnung der Elektronenverteilung in der $Ga_{0,47}In_{0,53}As$/InP-HEMT-Struktur werden folgende Materialparameter benutzt (s. Ref. [8]):

InP:		$Ga_{0,47}In_{0,53}As$:	
$\epsilon(0)$	= 12,56	$\epsilon(0)$	= 13,8
m^*	= 0,0765 m_e	m^*	= 0,041 m_e
E_g (300 K)	= 1,344 eV	E_g (300 K)	= 0,75 eV
$E_c - E_F$	= 0,67 eV [a]	ΔE_c	= 0,23 eV [b]

[a] Mid-Gap-Pinning an der Oberfläche angenommen

[b] s. [51], [113]

10.2 Optimierung des Kanals

Bei der Auslegung der Ausgangsstruktur kann auf die Erfahrungen aus den Untersuchungen der zweidimensionalen Elektronengase zurückgegriffen werden. Mit einer Kanalbreite von 10 nm und ebenfalls 10 nm dicken dotierten Bereichen wurden sehr hohe Beweglichkeiten erzielt, so daß diese Werte zunächst beibehalten werden. Die Dicke der undotierten Zwischenschichten wird als Kompromiß zwischen dem Ziel möglichst hoher Elektronendichten einerseits und der Streuung an den ionisierten Störstellen andererseits zu 5 nm gewählt. Für einen Kanal aus gitterangepaßtem GaInAs ergeben die Bandverlaufsrechnungen, daß die bei diesem Aufbau maximale Elektronendichte im Kanal von $1,8 \times 10^{12}\,\mathrm{cm}^{-2}$, mit Dotierstoffkonzentrationen von $n_{sur} = 2,2 \times 10^{18}\,\mathrm{cm}^{-3}$ und $n_{sub} = 1,2 \times 10^{18}\,\mathrm{cm}^{-3}$ erreicht wird. Aus der oberen Dotierung n_{sur} werden dabei allerdings nicht nur Elektronen in den Kanal eingspeist, sondern auch die Oberflächenzustände besetzt.

Variation der Zusammensetzung des Kanals

Die an der entsprechenden Probe bei 5 K gemessene Ladungsträgerdichte von $1,8 \times 10^{12}\,\mathrm{cm}^{-2}$ stimmt exakt mit dem berechneten Wert überein. Die Beweglichkeit beträgt dabei 99.000 $\mathrm{cm}^2/\mathrm{Vs}$, während sie für Raumtemperatur bei 9.100 $\mathrm{cm}^2/\mathrm{Vs}$ liegt. Durch eine Erhöhung des In-Gehaltes lassen sich die Beweglichkeiten bis auf 219.500 $\mathrm{cm}^2/\mathrm{Vs}$ bzw. 13.300 $\mathrm{cm}^2/\mathrm{Vs}$ bei $x_{In} = 0,75$ steigern, wie Abb. 10.2 zeigt. Gleichzeitig wird für alle verspannten Proben eine gleichbleibende Elektronendichte von $2,1 \times 10^{12}\,\mathrm{cm}^{-2}$ gemessen, die damit geringfügig größer ist, als die der gitterangepaßten Schicht. Da bei tiefen Temperaturen aufgrund ihrer hohen Beweglichkeit nur die Elektronen im Kanal zur Leitfähigkeit beitragen, befinden sich offenbar mehr freie Elektronen in den abgeschiedenen Schichten als sich im gitterangepaßten Quantentopf aufhalten können. Da durch den höheren Leitungsband-Offset der In-reichen Proben die Elektronen effektiver im Kanal gesammelt werden, bestätigt dieser Unterschied, daß bei der Probe mit $x_{In} = 0,53$ mit Hilfe der Bandverlaufsberechnungen wirklich die maximale Ladungsträgerdichte erreicht wurde.

Die Zunahme der Tieftemperaturbeweglichkeit entspricht, abgesehen von dem Ausreißer bei 60 %, bis zu einem InAs-Anteil von 75 % wieder dem Verlauf nach Gl. (9.1) (s. S. 152). Bei 80 % ist dagegen bereits eine erhebliche Abnahme in der Tieftemperaturbeweglichkeit zu verzeichnen, obwohl die Raumtemperaturbeweglichkeit mit 13.200 $\mathrm{cm}^2/\mathrm{Vs}$ noch im Maximum liegt. Für einen Kanal mit einem In-Gehalt von 80 % ist demnach mit einer Dicke von 10 nm der kritische Wert so gerade überschritten.

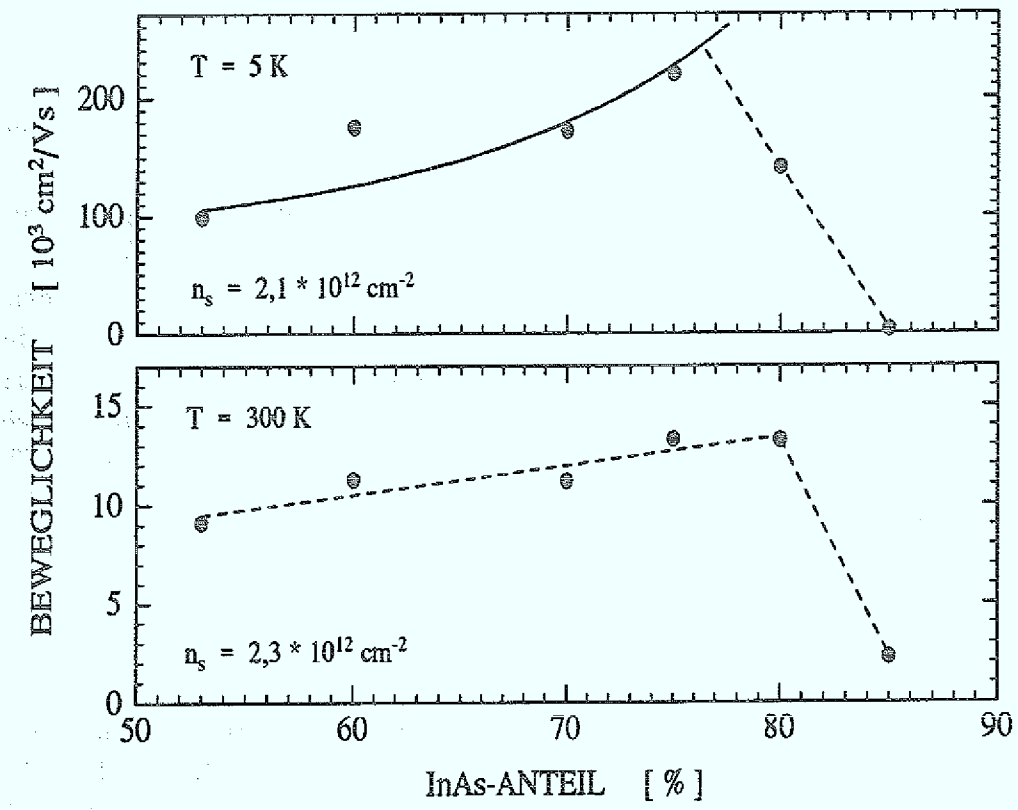


Abb. 10.2: Einfluß der Zusammensetzung des GaInAs-Kanals auf die Beweglichkeit der Elektronen in HEMT-Strukturen. Die durchgezogene Linie im oberen Teil der Abbildung entspricht dem Verlauf nach Gl. (9.1) für eine konstante Ladungsträgerdichte von $2,1 \times 10^{12}\,cm^{-2}$

Optimierung der Quantentopfdicke

In einer zweiten Versuchsreihe wird daher bei ansonsten gleichem Aufbau der Proben die Dicke des Kanals in Schritten von 1 nm verringert. Da sich dabei keine wesentlichen Veränderungen in den Raumtemperaturbeweglichkeiten zeigen, sind in Tabelle 10.1 nur die elektrischen Daten dieser Proben bei 5 K aufgeführt. Durch die Reduzierung der Kanaldicke nimmt die Tieftemperaturbeweglichkeit zunächst zu und erreicht bei 8 nm ein Maximum von 210.500 cm^2/Vs, was in etwa dem Wert der Probe mit 75 % Indium und 10 nm dickem Kanal gleichkommt. Die kritische Schichtdicke für $Ga_{0,20}In_{0,80}As$ dürfte daher bei knapp 8 nm liegen. Jedoch läßt eine weitergehende Verringerung auf 7 nm die Beweglichkeit wieder abnehmen. Dies könnte durch eine zunehmende Streuung der Elektronen an Grenzflächenrauhigkeiten oder durch ein stärkeres Eindringen der Wellenfunktion in die InP-Barrieren hervorgerufen werden. Im Hinblick auf eine Maximierung des Leitungsband-Offsets und unter Berücksichtigung der

Stabilität der Schichten erscheint daher eine GaInAs-Schicht mit einem InAs-Anteil von 80 % und einer Dicke von 8 nm als äußerste Grenze für einen verspannten Kanal in einer $Ga_{1-x}In_xAs$/InP-HEMT-Struktur.

Tabelle 10.1: Einfluß der Dicke des $Ga_{0,20}In_{0,80}As$-Kanals auf die elektrischen Daten der HEMT-Strukturen bei 5 K

d_{ch}	n_s (5 K)	μ (5 K)
nm	10^{12} cm^{-2}	cm^2/Vs
10	2,1	141.400
9	1,9	180.700
8	2,0	**210.500**
7	2,1	160.900

10.3 Optimierung der Dotierstoffverteilung

Um die höchstmögliche Leitfähigkeit in diesem Kanal zu erreichen, muß nun noch die Dotierstoffverteilung optimiert werden. Die dazu notwendigen Bandverlaufsrechnungen erfordern die Angabe der Materialparameter des verspannten $Ga_{0,20}In_{0,80}As$, die jedoch experimentell nur bedingt bekannt sind. Aus den PL-Untersuchungen an den verspannten Übergitterstrukturen in Abschnitt 8.7 (S. 144) läßt sich nach Gl. (8.3) ein Wert von 0,646 eV für die Bandlücke von verspanntem $Ga_{0,20}In_{0,80}As$ bei 2 K extrapolieren. Die Höhe des Leitungsband-Offsets ΔE_c zum InP ist dagegen nicht bekannt. Nach den theoretischen Arbeiten von Wang und Stringfellow [15] sollte aber der Anteil der Leitungsbanddiskontinuität an der Differenz der Bandlücken ($\Delta E_g = E_g(\mathrm{InP}) - E_g(Ga_{1-x}In_xAs)$) für $x \geq 0,53$ nahezu unabhängig von der Zusammensetzung sein. Es wird daher angenommen, daß wie beim gitterangepaßten auch beim In-reichen GaInAs gilt: $\frac{\Delta E_c}{\Delta E_g} \simeq 0,4$ [113]. Zusammen mit der Bandlücke des InP von 1,42 eV bei 2 K ergibt sich so ein Leitungsband-Offset von 310 meV in der verspannten Struktur. Für die effektive Masse der Elektronen im Quantentopf in der Richtung senkrecht zur Probenoberfläche wird nach Foulon ein Wert von $0,037\,m_e$ angesetzt [115].

Variation der Spacer-Dicke

Mit diesen Parametern werden nun zuerst für unterschiedliche Spacer-Dicken d_{sp} die maximalen Dotierungen ermittelt und entsprechende Proben hergestellt. Die berech-

neten und die gemessenen Elektronendichten sind in Tabelle 10.2 einander gegenübergestellt. Die Ergebnisse der Messungen bei 5 K stimmen recht gut mit den Werten der Rechnungen überein. Bei Raumtemperatur werden allerdings immer ein wenig höhere Dichten als bei 5 K festgestellt. Das spricht dafür, daß gewisse Prozentsätze der freien Elektronen sich in den dotierten Bereichen aufhalten und bei Raumtemperatur zur Leitfähigkeit beitragen. Dagegen ist bei tiefen Temperaturen ihre Beweglichkeit mit nur einigen Tausend cm^2/Vs (s. Ref. [69]) im Vergleich zu der der Elektronen im Kanal so gering, daß ihr Anteil an der Leitfähigkeit praktisch keine Rolle spielt und nur die Dichte der Elektronen im Kanal gemessen wird. Die größte Differenz zwischen den Dichten bei 5 und 300 K von $0,6 \times 10^{12}$ cm^{-2} wird bei der Probe beobachtet, bei der als einziger die bei 5 K gemessene Dichte geringfügig höher liegt als der berechnete Wert. Das läßt den Schluß zu, daß die Ergebnisse der Berechnungen tatsächlich den jeweils maximal erreichbaren Elektronendichten im Kanal entsprechen und der verwendete Satz der Materialparameter des verspannten GaInAs trotz der verschiedenen Unsicherheiten zu sinnvollen Ergebnissen führt.

Tabelle 10.2: Berechnete und gemessene Elektronendichten für verschiedene Spacer-Dicken d_{sp}

d_{sp}	n_{sur}	n_{sub}	$n_{s,calc}$	n_s (5 K)	n_s (300 K)
nm	10^{18} cm^{-3}	10^{18} cm^{-3}	10^{12} cm^{-2}	10^{12} cm^{-2}	10^{12} cm^{-2}
20	1,8	0,5	1,0	0,9	1,2
10	2,2	0,8	1,6	1,7	2,3
7,5	2,4	1,0	2,0	2,0	2,2
5	2,7	1,2	2,4	2,1	2,2
3	3,0	1,5	2,9	2,6	3,0

Die Beweglichkeiten der Elektronen in diesen Proben sind Tabelle 10.3 zu entnehmen. Der zu kleineren Spacer-Dicken hin zunehmende Einfluß der ionisierten Störstellen äußert sich in einer stetigen Abnahme der Tieftemperaturbeweglichkeit. Bei Raumtemperatur hingegen ist zunächst weniger die Störstellen- als vielmehr die Phononstreuung der dominierende Streumechanismus. Dadurch kann hier die höchste Beweglichkeit mit 14.200 cm^2/Vs bei einer Spacer-Dicke von nur noch 5 nm erreicht werden. Die höchste Leitfähigkeit bzw. das höchste Produkt aus n_s und μ für 300 K wird allerdings für $d_{sp} = 3$ nm beobachtet. Der Rückgang der Beweglichkeit wird offensichtlich durch die höhere Ladungsträgerdichte mehr als ausgeglichen.

Tabelle 10.3: Einfluß der Spacer-Dicke auf die Beweglichkeit der Elektronen

d_{sp}	μ (5 K)	μ (300 K)	$\mu \cdot n_s$ (300 K)
nm	cm^2/Vs	cm^2/Vs	$10^{15}\ V^{-1}s^{-1}$
20	340.000	12.000	14,4
10	330.000	12.000	27,6
7,5	318.900	14.100	31,1
5	226.300	**14.200**	31,2
3	98.400	12.200	**36,5**

Variation der Dicke der Dotierungen

Da für $d_{sp} = 5$ nm die höchste Beweglichkeit erreicht wurde, soll nun bei dieser Spacer-Dicke versucht werden, durch eine Verringerung der Breite der Dotierung d_n und gleichzeitige Erhöhung der Schwefelkonzentrationen die Ladungsträgerdichte bzw. die Leitfähigkeit noch einmal zu erhöhen. Wie Tabelle 10.4 zeigt, kann durch eine Verringerung von d_n von 10 nm auf 3 nm die Elektronendichte von $2,4$ auf $3,1 \times 10^{12}\,cm^{-2}$ gesteigert werden.[1] Die gemessenen Dichten stehen dabei in hervorragender Übereinstimmung mit den berechneten Ergebnissen. Gleichzeitig fällt aber die Beweglichkeit von 14.100 auf 11.600 cm^2/Vs, da die ionisierten Störstellen im Mittel nun näher am 2DEG sitzen. Besonders die Dotierstoffatome, deren Elektronen in Oberflächenzuständen gebunden sind und daher überhaupt keinen Beitrag zur Leitfähigkeit liefern, haben hier einen negativen Einfluß. Das mit $37,2 \times 10^{15}\ V^{-1}s^{-1}$ höchste Produkt aller HEMT-Strukturen wird dadurch für $d_n = 5$ nm gemessen.

Tabelle 10.4: Variation der Breite der Dotierung d_n

d_n	n_{sur}	n_{sub}	$n_{s,calc}$	n_s (300 K)	μ (300 K)	$\mu \cdot n_s$
nm	$10^{18}\ cm^{-3}$	$10^{18}\ cm^{-3}$	$10^{12}\ cm^{-2}$	$10^{12}\ cm^{-2}$	cm^2/Vs	$10^{15}\ V^{-1}s^{-1}$
10	2,7	1,2	2,4	2,4	14.100	33,8
5	5,4	2,8	2,8	2,8	13.300	**37,2**
3	9,0	5,3	3,0	3,1	11.600	36,0

[1] Die Dicke der InP-Deckschicht wird dabei um einen entsprechenden Betrag vergrößert, so daß sich über dem GaInAs-Kanal immer insgesamt 45 nm InP befinden.

Abschließend wird zum Vergleich noch eine Probe mit maximaler Ladungsträgerdichte hergestellt. Dazu wird sowohl für d_{sp} wie auch für d_n ein Wert von 3 nm benutzt ($\rightarrow n_{sur} = 1,1 \times 10^{19}$ cm^{-3}, $n_{sub} = 6,3 \times 10^{18}$ cm^{-3}). Die Elektronendichte wächst dadurch zwar auf $4,3 \times 10^{12}$ cm^{-2} an, da aber die Beweglichkeit nur bei 6.200 cm^2/Vs liegt, ist das Produkt mit $26,5 \times 10^{15}$ V^{-1}s^{-1} doch deutlich kleiner als bei der obigen Probe. Die maximale Leitfähigkeit ergibt sich damit für folgenden Aufbau der HEMT-Struktur: $x_{In} = 0,80$; $d_{ch} = 8$ nm; $d_{sp} = 5$ nm; $d_n = 5$ nm; $n_{sur} = 5,4 \times 10^{18}$ cm^{-3}; $n_{sub} = 2,8 \times 10^{18}$ cm^{-3}.

Durch die Optimierung des Kanals und der Dotierstoffverteilung ist es also gelungen das Produkt aus n_s und μ von $5,6 \times 10^{15}$V^{-1}s^{-1} bei der ersten Transistorteststruktur bis auf $37,2 \times 10^{15}$ V^{-1}s^{-1}, das heißt um einen Faktor 6,6 zu steigern. Es ist damit mit den besten bisher veröffentlichten Daten von AlInAs/GaInAs-HEMTs vergleichbar. Eine konkrete Gegenüberstellung zweier Proben mit gleicher Zusammensetzung des Kanals ($x_{In} = 0,80$) und gleicher gemessener Ladungsträgerdichte ($n_s = 2,4 \times 10^{12}$ cm^{-2}) zeigt, daß gegenüber der mit MBE gewachsenen AlInAs/GaInAs-HEMT-Struktur aus Ref. [116], in der eine Beweglichkeit von 12.500 cm^2/Vs bei 300 K erzielt wurde, hier mit 14.100 cm^2/Vs sogar ein um 13% höherer Wert erreicht werden konnte. Bei 77 K ist die Beweglichkeit mit 107.000 cm^2/Vs gegenüber 68.300 cm^2/Vs sogar um 57% größer. Dieser doch sehr deutliche Unterschied ist wahrscheinlich darauf zurückzuführen, daß in der Struktur von Chough et al. der verspannte Kanal auf GaInAs aufgewachsen wurde. Die Wellenfunktionen der Elektronen, besonders die der höheren Subbänder reichen dadurch stärker in einen Bereich hinein, in dem die effektive Masse größer ist als im Topf und in dem zusätzlich auch noch, anders als in den InP-Barrieren, Legierungsstreuung auftritt. Der hier verwendete Aufbau der Proben hat also durchaus einige Vorteile gegenüber den AlInAs/GaInAs-HEMTs in der normalen Geometrie. Alles in allem zeigen die Ergebnisse, daß sich im Materialsystem GaInAs/InP mit einer optimierten Schichtenfolge Leitfähigkeiten erzielen lassen, wie sie bisher nur von AlInAs/GaInAs-Heterostrukturen bekannt waren.

10.4 Transistoreigenschaften und weitere Entwicklungsmöglichkeiten

Aus den Proben der ersten Versuchsreihe dieses Kapitels, in der die In-Konzentration im Kanal erhöht wurde, konnten bereits Transistoren hergestellt werden. Bei einer Gate-Länge von 1 μm zeigte der HEMT mit gitterangepaßtem Kanal eine Steilheit von 125 mS/mm. Durch die Erhöhung des In-Gehaltes stieg dieser Wert über 200 mS/mm bei $x_{In} = 0,70$ bis auf 300 mS/mm bei $x_{In} = 0,80$, womit auch die Transistorparameter

langsam an den Bereich der AlInAs/GaInAs-HEMTs heranreichen. Da aus der Probe mit dem optimalen Aufbau noch kein Transistor gefertigt wurde, sind durchaus noch weitere Steigerungen zu erwarten.

Bei näherer Betrachtung der Steilheiten fällt allerdings auf, daß sie stärker anwachsen als das Produkt aus μ und n_s ($20,9 \times 10^{15}$ $V^{-1}s^{-1}$ für $x_{In} = 0,53$ gegenüber $30,5 \times 10^{15}$ $V^{-1}s^{-1}$ bei $x_{In} = 0,80$). Ursache dafür könnte sein, daß durch das Aufdampfen des Metalls für den Gate-Kontakt die Ladungsträgerverteilung in der darunterliegenden Heterostruktur geändert wird, da die Schottky-Barriere zwischen dem Metall und dem InP kleiner ist als die $0,67$eV, die hier für die frei Oberfläche angenommen wurden. Ein Teil der Elektronen würde sich dadurch in den Dotierung aufhalten. Dieser Anteil sollte mit wachsendem Leitungsband-Offset abnehmen und damit zu vergleichsweise höheren Leitfähigkeiten bei den In-reichen Proben führen. Dieser Punkt wäre für eine Weiterentwicklung der HEMTs noch zu klären. Eine Erhöhung der Barriere des InP durch eine dünne p-dotierte InP-Schicht könnte sich dabei als hilfreich erweisen.

Nachdem die Leitfähigkeit des Kanals wohl nicht mehr wesentlich verbessert werden kann, muß eine weitergehende Optimierung des Bauelementes natürlich vor allem auf eine Reduzierung der Gate-Länge, aber auch auf ein Verringerung parasitärer Effekte abzielen. So läßt sich beispielsweise der Kontaktwiderstand von Source- und Drain-Anschlüssen durch eine hoch n-dotierte GaInAs-Deckschicht, die auf die InP-Schicht abgeschieden wird und für das Gate weggeätzt werden muß, verringern.

Daneben sollten, aufbauend auf den Ergebnissen dieser Arbeit, auch die Eigenschaften von p-Kanal-Transistoren, für die das $Ga_{1-x}In_xAs$/InP-System ja besonders geeignet ist, untersucht werden, um später durch eine Kombination beider Typen in speziellen, noch zu entwickelnden Strukturen eine CMOS-artige Architektur realisieren zu können.

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurden $Ga_{1-x}In_xAs$/InP-Heterostrukturen nach dem Verfahren der metallorganischen Gasphasenepitaxie hergestellt, ihre strukturellen, elektrischen und optischen Eigenschaften untersucht und im Hinblick auf HEMT-Anwendungen optimiert.

Für die Herstellung der Schichten mit einer bestehenden Niederdruck-MOVPE-Anlage wurde dazu zunächst ein Prozeß etabliert, mit dem hochreine InP- und $Ga_{0,47}In_{0,53}As$-Schichten von sehr guter Kristallinität abgeschieden werden konnten. Mittels Schwefel bzw. Zink war außerdem ihre gezielte n- und p-Dotierung möglich.

Durch die Kombination der Materialien in einer modulationsdotierten Heterostruktur (invertierte HEMT-Struktur) konnte in gitterangepaßtem GaInAs ein 2DEG erzeugt werden, in dem die Elektronen bei einer Dichte von $5,6 \times 10^{11}$ cm^{-2} mit 215.000 cm^2/Vs bei 5 K eine sehr hohe Tieftemperaturbeweglichkeit aufwiesen.

Für die bei diesem Aufbau zur Herstellung von Gate-Kontakten notwendige Erhöhung der Schottky-Barriere des GaInAs wurden zwei verschiedene Ansätze erfolgreich angewendet. Durch eine Bandverbiegung mittels einer dünnen p-dotierten GaInAs-Deckschicht konnte die effektive Höhe der Barriere zum undotierten GaInAs von $0,2$ auf $0,68$ eV gesteigert werden. Dies stellt den bisher höchsten gemessenen Wert einer Schottky-Barriere auf n-leitendem GaInAs dar. Daneben wurden auch undotierte Deckschichten aus anderen Materialien mit größeren Bandlücken zur Barrierenerhöhung eingesetzt. Mit einer 60 nm dicken InP-Deckschicht ließ sich dabei eine Barrierenhöhe von immerhin $0,55$ eV erreichen, was der Höhe entspricht, die auch direkt auf n-leitendem InP gemessen wird.

An Hand einer ersten Transistorteststruktur, in der die 2DEG-Struktur mit einer InP-Deckschicht zur Barrierenerhöhung versehen wurde, konnte anschließend gezeigt werden, daß dieses Materialsystem zur Herstellung von Transistoren geeignet ist. Es zeichnet sich dabei durch eine besonders hohe Spannungsfestigkeit aus.

Zur Steigerung der Leitfähigkeit im 2D-Kanal wurde das gitterangepaßte Materialsystem um In-reiches, verspanntes $Ga_{1-x}In_xAs$ erweitert, von dem zunächst einige Materialeigenschaften untersucht wurden.

Für die Strukturanalyse von $Ga_{1-x}In_xAs/InP$-Quantentopfstrukturen hat sich die Röntgenbeugung an Übergitterstrukturen als leistungsfähige Methode erwiesen. Mit ihrer Hilfe konnte gezeigt werden, daß es beim Wechsel der Materialien zu einer Verschleppung der Gruppe-V-Elemente kommt. Bei den Gruppe-III-Elementen wurde dagegen ein solches Verhalten nicht beobachtet. Unter der Annahme, daß das Ausmaß der Verschleppungen weder vom In-Gehalt noch von der Fehlpassung abhängt, konnte die Zusammensetzung In-reicher GaInAs-Quantentöpfe durch Messungen an zwei verschiedenen Reflexen bestimmt werden. Demnach ist das Ga/In-Verhältnis in Quantentopfstrukturen weitgehend dem Verhältnis der eingestellten Partialdrücke proportional.

Die Größe der Bandlücke von verspanntem $Ga_{1-x}In_xAs$ in Abhängigkeit von der Zusammensetzung wurde durch PL-Messungen an diesen Quantentopfstrukturen bestimmt. Sie verschiebt sich linear mit wachsendem In-Gehalt zu kleineren Werten hin.

Durch die Einführung eines In-reichen Kanals in die 2DEG-Struktur gelang es, die Beweglichkeit der Elektronen bis auf 450.000 cm^2/Vs (5 K) bei $x_{In} = 0,76$ zu steigern und damit den höchsten Wert zu erreichen, der bisher in diesem Materialsystem reproduzierbar erzielt wurde. Der Verlauf in der Zunahme der Beweglichkeit konnte durch eine Kombination aus Störstellen- und Legierungsstreuung beschrieben werden. Noch höhere In-Konzentrationen führten allerdings zu einem abrupten Rückgang der Beweglichkeit, was auf die Ausbildung von Versetzungsnetzwerken zurückgeführt werden konnte.

Abschließend wurde der Aufbau einer zweiseitig modulationsdotierten $Ga_{1-x}In_xAs$-InP-Quantentopfstruktur in Bezug auf die Leitfähigkeit des 2DEG mit Hilfe von selbstkonsistenten Bandverlaufsrechnungen optimiert. Mit einer Dichte von $2,8 \times 10^{12}\,cm^{-2}$ und einer Raumtemperaturbeweglichkeit der Elektronen von $13.300\,cm^2/Vs$ konnte dabei eine Leitfähigkeit erzielt werden, die mit der der besten AlInAs/GaInAs-HEMTs durchaus vergleichbar ist. Auch die Steilheiten der ersten Transistoren, die mit diesem Material hergestellt wurden, reichen bereits an den Bereich der AlInAs/GaInAs-HEMTs heran. Mit dem System $Ga_{1-x}In_xAs/InP$ steht also eine Materialkombination zur Verfügung, mit der erstmals HEMTs ohne Al-haltige Verbindungen gefertigt werden können.

Literaturverzeichnis

[1] A. Schlachetzki, Phys. Bl. **44** (1988) 91

[2] L. D. Nguyen, L. E. Larson, U. K. Mishra, Proc. IEEE **80** (1992) 494

[3] S. J. Pearton, N. J. Shah, in: *High-Speed Semiconductor Devices*, ed. S. M. Sze, (John Wiley & Sons, New York, 1990)

[4] D. Delagebeaudeuf, N. T. Linh, IEEE Trans. Electron Devices **ED-29** (1982) 955

[5] M. C. Foisy, P. J. Tasker, B. Hughes, L. F. Eastman, IEEE Trans. Electron Dev. **ED-35** (1988) 871

[6] H. Ibach, H. Lüth, *Festkörperphysik*, 3. Auflage, (Springer-Verlag, Berlin, 1990)

[7] S. Tiwari, D. J. Frank, Appl. Phys. Lett. **60** (1991) 630

[8] O. Madelung, in: *Landolt-Börnstein*, ed. O. Madelung, Bd. 22a, (Springer-Verlag, Berlin, 1987)

[9] P. K. Bhattacharya, in: *Properties of Lattice-Matched and Strained Indium Gallium Arsenide*, ed. P. Bhattacharya, EMIS Datareviews Series No. 8, (INSPEC, London, 1993), S. 117

[10] L. D. Nguyen, A. S. Brown, M. A. Thompson, L. M. Jelloian, IEEE Trans. Electron Devices **39** (1992) 2007

[11] W.-P. Hong, S. Dhar, P. K. Bhattacharya, A. Chin, J. Electron. Mater. **16** (1987) 271

[12] J. B. Kuang, P. J. Tasker, G. W. Wang, Y. K. Chen, L. F. Eastman, O. A. Aina, H. Hier, A. Fathimulla, IEEE Electron Dev. Lett. **9** (1988) 630

[13] W. P. Hong, J. E. Oh, P. K. Bhattacharya, T. E. Tiwald, IEEE Trans. Electron Dev. **ED-35** (1988) 1585

[14] K. Zekentes, G. Halkias, A. Dimoulas, A. Tabata, T. Benyattou, G. Guillot, J. R. Morante, F. Peiro, A. Cornet, A. Georgakillas, A. Christou, Mater. Sci. Eng. **B20** (1993) 21

[15] T. Y. Wang, G. B. Stringfellow, J. Appl. Phys. **67** (1990) 344

[16] A. Mesquida Küsters, A. Kohl, V. Sommer, R. Müller, K. Heime, IEEE Trans. Electron Dev. **40** (1993) 2164

[17] A. Mesquida Küsters, A. Kohl, K. Heime, Th. Schäpers, D. Uhlisch, B. Lengeler, H. Lüth, J. Appl. Phys. **75** (1994) 3507

[18] H. M. Manasevit, W. I. Simpson, J. Electrochem. Soc. **12** (1968) 156

[19] H. M. Manasevit, Appl. Phys. Lett. **116** (1969) 1725

[20] G. B. Stringfellow, *Organometallic Vapor-Phase Epitaxy: Theory and Practice*, (Academic Press, Boston, 1989)

[21] R. Lückerath, Dissertation, RWTH Aachen, 1990

[22] T. F. Kuech, M. A. Tischler, P.-J. Wang, G. Scilla, R.Potemski, F. Cardone, Appl. Phys. Lett. **53** (1988) 1317

[23] H. Hardtdegen, M. Hollfelder, R. Meyer, R. Carius, H. Münder, S. Frohnhoff, D. Szynka, H. Lüth, J. Crystal Growth **124** (1992) 420

[24] D. Grundmann, Dissertation, RWTH Aachen, 1989

[25] E. A. Fitzgerald, Mat. Sci. Rep. **7** (1991) 87

[26] J. W. Matthews, A. E. Blakeslee, J. Crystal Growth **27** (1974) 118

[27] R. People, J. C. Bean, Appl. Phys. Lett. **47** (1985) 322

[28] H. Temkin, D. G. Gershoni, S. N. G. Chu, J. M. Vandenberg, R. A. Hamm, M. B. Panish, Appl. Phys. Lett. **55** (1989) 1668

[29] D. Grützmacher, Diplomarbeit, RWTH Aachen, 1987

[30] R. Meyer, Diplomarbeit, RWTH Aachen, 1989

[31] J. Hergeth, Diplomarbeit, RWTH Aachen, 1990

[32] D. Grützmacher, Dissertation, RWTH Aachen, 1991

[33] H.-D. Dietze, *Grundkurs in Theoretischer Physik I*, (Bertelsmann Universitätsverlag, 1973)

[34] K.-H. Goetz, Dissertation, RWTH Aachen, 1984

[35] M. A. G. Halliwell, M. H. Lyons, S. T. Davey, M. Hockley, C. G. Tuppen, C. J. Gibbings, Semicond. Sci. Technol. **4** (1989) 10

[36] A. T. Macrander, G. P. Schwartz, G. J. Gualtieri, J. Appl. Phys. **64** (1988) 6733

[37] R. Zaus, Dissertation, Ludwig-Maximilians-Universität München, 1992

[38] P. F. Fewster, Philips J. Res. **41** (1986) 268

[39] S. Takagi, Acta Cryst. **15** (1962) 1311

[40] S. Takagi, J. Phys. Soc. Japan **26** (1969) 1239

[41] D. Taupin, Bull. Soc. Fr. Mineral. Cristallogr. **87** (1964) 469

[42] U. Breuer, Dissertation, RWTH Aachen, 1991

[43] H. Oechsner, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research **B33** (1988) 918

[44] R. Jede, H. Peters, G. Dünnebier, U. Kaiser, S. Meier, O. Ganschow, Technisches Messen (1986) 407

[45] W. Jäger, in: *17. IFF-Ferienkurs: Dünne Schichten und Schichtsysteme*, (KFA Jülich, 1986), S. 275

[46] L. J. van der Pauw, Philips Res. Repts. **13** (1958) 1

[47] Th. Klocke, Diplomarbeit, RWTH Aachen, Forschungszentrum Jülich (ISI), 1993

[48] Th. Schäpers, Dissertation, RWTH Aachen, Forschungszentrum Jülich (ISI), 1993

[49] J. Appenzeller, Diplomarbeit, RWTH Aachen, Forschungszentrum Jülich (ISI), 1991

[50] M. Kubon, Diplomarbeit, RWTH Aachen, Forschungszentrum Jülich (ISI), 1991

[51] M. Zachau, P. Helgesen, F. Koch, D. Grützmacher, R.Meyer, P. Balk, Semicond. Sci. Technol. **3** (1988) 1029

[52] Y. Takeda, A. Sasaki, Jpn. J. Appl. Phys. **24** (1985) 1307

[53] D. Grützmacher, R. Meyer, P. Balk, C. Berg, T. Schäpers, H. Lüth, M. Zachau, F. Koch, J. Appl. Phys. **66** (1989) 697

[54] W. Walukiewicz, H. E. Ruda, J. Lagowski, H. C. Gatos, Phys. Rev. B **30** (1984) 4571

[55] M. J. Kane, D. A. Anderson, L. L. Taylor, S. J. Bass, J. Appl. Phys. **60** (1986) 657

[56] H. L. Störmer, A. C. Gossard, W. Wiegmann, Solid State Comm. **41** (1982) 707

[57] E. Woelk, H. Beneking, J. Crystal Growth **87** (1988) 201

[58] P.J. Frijlink, J. Crystal Growth **93** (1988) 207

[59] C. H. Chen, M. Kitamura, R. M. Cohen, G. B. Stringfellow, Appl. Phys. Lett. **49** (1986) 963

[60] D. Lancefield, in: *Properties of INDIUM PHOSPHIDE*, EMIS Datareviews Series No. 6, (INSPEC, 1991), S. 68

[61] W. Walukiewicz, J. Lagowski, L. Jastrzebski, P. Rava, M. Lichtensteiger, C. H. Gatos, J. Appl. Phys. **51** (1980) 2659

[62] L.D. Zhu, K. T. Chan, D. K. Wagner, J. M. Ballantyne, J. Appl. Phys. **57** (1985) 5486

[63] D. J. Nicholas, in: *Properties of INDIUM PHOSPHIDE*, EMIS Datareviews Series No. 6, (INSPEC, 1991), S. 198

[64] E. F. Schubert, *Doping in III/V-Semiconductors*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1993)

[65] C. C. Hsu, J. S. Yuan, R. M. Cohen, G. B. Stringfellow, J. Crystal Growth **74** (1986) 535

[66] C. R. Lewis, M. J. Ludowise, W. T. Dietze, J. Electron. Mater. **13** (1984) 447

[67] Y. M. Houng, T. S. Low, J. Crystal Growth **77** (1986) 272

[68] R. J. Field, S. K. Ghandhi, J. Crystal Growth **74** (1986) 551

[69] Wenchao Cheng, A. Zrenner, Qui-Yi Ye, F. Koch, D. Grützmacher, P. Balk, Semicond. Sci. Technol. **4** (1989) 16

[70] E. Woelk, Dissertation, RWTH Aachen, 1989

[71] N. Pütz, H. Heinecke, M. Heyen, P. Balk, M. Weyers, H. Lüth, J. Crystal Growth **74** (1986) 292

[72] Hilde Hardtdegen, M. Hollfelder, Chr. Ungermanns, K. Wirtz, R. Carius, D. Guggi, H. Lüth, in: *Gallium Arsenide and Related Compounds 1993*, Inst. Phys. Conf. Ser. 136, (Inst. Phys., Bristol, 1994), S. 625

[73] *Handbook of Chemistry and Physics*, (CRC Press, Boca Raton, 1979)

[74] C. R. Lewis, W. T. Dietze, M. J. Ludowise, J. Electron. Mater. **12** (1983) 507

[75] A. Kozen, S. Najima, J. Tenmyo, H. Asahi, J. Appl. Phys. **59** (1986) 1156

[76] S. Cole, J. S. Evans, M. J. Harlow, A. W. Nelson, S. Wong, J. Crystal Growth **93** (1988) 607

[77] M. Glade, D. Grützmacher, R. Meyer, E. G. Woelk, P. Balk, Appl. Phys. Lett. **54** (1989) 2411

[78] J. K. W. Wisser, Dissertation, RWTH Aachen, 1993

[79] M. Glade, J. Hergeth, D. Grützmacher, K. Masseli, P. Balk, J. Crystal Growth **108** (1991) 449

[80] R. W. Glew, J. Crystal Growth **68** (1984) 44

[81] S. J. Bass, P. E. Oliver, in: *Gallium Arsenide and Related Compounds 1976*, Inst. Phys. Conf. Ser. 33b, (Inst. Phys., London, 1976), S. 1

[82] V. Aebi, C. B. Cooper, R. L. Moon, R. R. Saxena, J. Crystal Growth **55** (1981) 517

[83] G. Keil, M. LeMetayer, A. Cuquel, D. LePollotec, Rev. Phys. Appl. **17** (1982) 405

[84] A. W. Kleinsasser, T. N. Jackson, D. McInturff, F. Rammo, G. D. Pettit, J. M. Woodall, Appl. Phys. Lett. **55** (1989) 1909

[85] Z. Ivanov, T. Claeson, IEEE Trans. Magn. **MAG-23** (1987) 711

[86] K. Kajiyama, Y. Mizushita, S. Sakata, Appl. Phys. Lett. **23** (1973) 458

[87] H. Tamura, A. Yoshida, S. Muto, S. Hasuo, Jpn. J. Appl. Phys. **26** (1987) L7

[88] U. Kunze, W. Kowalsky, J. Appl. Phys. **63** (1988) 1597

[89] C. Y. Chen, A. Y. Cho, K. Y. Cheng, P. A. Garbinski, Appl. Phys. Lett. **40** (1982) 401

[90] J. H. Kim, S. S. Li, L. Figueroa, Electron. Lett. **24** (1988) 687

[91] J. H. Kim, S. S. Li, L. Figueroa, T. F. Carruthers, R. S. Wagner, J. Appl. Phys. **64** (1988) 6536

[92] D. Kuhl, F. Hieronymi, E. M. Böttcher, T. Wolf, A. Krost, D. Bimberg, Electron. Lett. **26** (1990) 2107

[93] W. P. Hong, G. K. Chang, R. Bhat, IEEE Trans. Electron Devices **ED-36** (1989) 659

[94] C. Y. Chen, S. N. G. Chu, A. Y. Cho, Appl. Phys. Lett. **46** (1985) 1145

[95] A. Hosseini Terani, D. Decoster, J. P. Vilcot, M. Razeghi, J. Appl. Phys. **64** (1988) 2215

[96] P. Kordoš, J. Novák, O. Kayser, K. Heime, Phys. Status Solidi (A) **127** (1991) K25

[97] S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, (Wiley, New York, 1981)

[98] S. J. Eglash, N. Newman, S. Pan, D. Mo, K. Shenai, W. E. Spicer, F. A. Ponce, D. M. Collins, J. Appl. Phys. **61** (1987) 5159

[99] G. P. Schwartz, G. J. Gualtieri, J. Electrochem. Soc. **133** (1986) 1266

[100] C. Gaonach, S. Casette, M. A. Di Forte-Poisson, C. Brylinski, M. Champagne, A. Tardella, Semicond. Sci. Technol. **5** (1990) 322

[101] L. P. Sadwick, C. W. Kim, K. L. Tan, D. C. Streit, IEEE Electron Device Lett. **EDL-12** (1991) 626

[102] D. V. Morgan, J. Frey, Phys. Stat. Sol. (A) **51** (1979) K29

[103] J. Selders, unpublished

[104] U. K. Chakrabarti, W. S. Hobson, V. Swaminathan, S. J. Pearton, S. Nakahara, M. Lamont Schnoes, P. M. Thomas, Proc. SPIE **1144** (1989) 69

[105] J. M. Vandenberg, M. B. Panish, R. A. Hamm, H. Temkin, Appl. Phys. Lett. **56** (1990) 910

[106] J. M. Vandenberg, A. T. Macrander, R. A. Hamm, M. B. Panish, Phys. Rev. B **44** (1991) 3991

[107] J. M. Moison, C. Guille, F. Houzay, F. Barthe, M. van Rompay, Phys. Rev. B **40** (1989) 6149

[108] O. Brandt, L. Tapfer, R. Cingolani, M. Hohenstein, K. Ploog, F. Phillip, Phys. Rev. B **41** (1990) 12599

[109] M. H. Lyons, J. Crystal Growth **96** (1989) 339

[110] D. Grützmacher, J. Hergeth, F. Reinhardt, K. Wolter, P. Balk, J. Electron. Mater. **19** (1990) 471

[111] J. Böhrer, A. Krost, D. Bimberg, Appl. Phys. Lett. **60** (1992) 2258

[112] J. Hergeth, D. Grützmacher, F. Reinhardt, P. Balk, J. Crystal Growth **107** (1991) 537

[113] J. D. Lambkin, in: *Properties of INDIUM PHOSPHIDE*, EMIS Datareviews Series No. 6, (INSPEC, 1990), S. 318

[114] Ph. Maurel, M. Defour, C. Grattepain, F. Omnes, O. Acher, G. Timms, M. Razeghi, Chemotronics **4** (1989) 40

[115] Y. Foulon, C. Priester, G. Allan, M. Lannoo, in: *Proc. 20th Intern. Conf. on the Physics of Semiconductors*, Thessaloniki, Greece (1990) 977

[116] K. B. Chough, T. Y. Chang, M. D. Feuer, B. Lalevic, Electron. Lett. **28** (1992) 329

[117] K. B. Chough, W.-P. Hong, C. Caneau, J. I. Song, Electron. Lett. **28** (1992) 2016

[118] R. Bhat, M. A. Koza, K. Kash, S. J. Allen, W. P. Hong, S. A. Schwarz, G. K. Chang, P. Lin, J. Crystal Growth **108** (1991) 441

[119] W.-P. Hong, G.-K. Chang, R. Bhat, W. Chan, B. van der Gaag, P. Lin, J. H. Abeles, Electron. Lett. **25** (1989) 580

[120] A. Leuther, Diplomarbeit, RWTH Aachen, Forschungszentrum Jülich (ISI), 1992

Danksagungen

Zum Schluß möchte ich mich noch bei all jenen bedanken, die durch ihre Unterstützung und Kooperation zu dieser Arbeit beigetragen haben. Ich danke

Herrn Prof. Dr. H. Lüth für die Ermöglichung und die stete Förderung dieser Arbeit,

Herrn Prof. Dr. K. Heime für die Übernahme des Korreferats,

Frau Dr. H. Hardtdegen für die vielen wertvollen Diskussionen und die hervorragende Teamarbeit,

den Herren M. Hollfelder und Chr. Ungermanns, die im Rahmen ihrer Diplomarbeiten einen Großteil der Wachstumsexperimente durchführten,

Herrn K. Wirtz für die technische Unterstützung beim Betrieb der MOVPE-Anlage,

Herrn Prof. Dr. B. Lengeler für die Unterstützung bei der Interpretation der Röntgenergebnisse,

den Herren Prof. P. Kordoš und Dr. M. Marso für die intensive und erfolgreiche Zusammenarbeit auf den Gebieten der Schottky-Kontakte und der Transistoren,

Frau H. Løken-Larsen und den Herren J. Appenzeller, G. Engels, Th. Klocke, Dr. Th. Schäpers und D. Ulisch für eine Unzahl von temperaturabhängigen Hall-Messungen und ihre Beiträge zum Verständnis des zweidimensionalen Transportes,

Frau Chr. Dieker, deren umfangreiche TEM-Untersuchungen der verspannten Quantentopfstrukturen eine große Hilfe bei den Strukturanalysen waren,

den Herren Dr. U. Breuer (Zentralinstitut für chemische Analysen der KFA Jülich), R. Mitdank (Institut für Ionen- und Elektronenphysik der Humbold Universität in Berlin), sowie K. Schmitt für ihre Analysen der Zusammensetzung der $Ga_{1-x}In_xAs$-Schichten mittels SNMS, EMA bzw. RBS,

Herrn Dr. R. Carius, der die PL-Messungen durchführte,

Herrn A. Leuther, dessen Programm zur selbstkonsistenten Berechnung des Bandverlaufes die konsequente Optimierung der HEMT-Struktur erst ermöglichte,

sowie allen hier nicht namentlich erwähnten Mitarbeitern des Instituts für Schicht- und Ionentechnik für ihre Zusammenarbeit und die angenehme Arbeitsatmosphäre.

FORSCHUNGSZENTRUM JÜLICH GmbH

KFA

Jül-2985
Oktober 1994
ISSN 0944-2952