

# Eigenschaften von Kohlenstoffdotierten GaN-Pufferschichten für Anwendungen in Hochleistungsbauelementen

## **Dissertation**

zur Erlangung des akademischen Grades

**doctor rerum naturalium**

**(Dr.rer.nat.)**

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

von Dipl.-Phys. Andreas Josef Lesnik

geb. am 23.09.1983 in Wolfenbüttel

Gutachter: apl. Prof. Dr. Armin Dadgar

Prof. Dr.-Ing. Andrei Vescan

eingereicht am: 13.08.2024

verteidigt am: 17.01.2025



## Kurzfassung

Halbleiter mit großer Bandlücke wie die der Gruppe-III-Nitride (Galliumnitrid (GaN) und Aluminiumnitrid (AlN)) eignen sich aufgrund ihrer hohen Durchbruchfestigkeit hervorragend für die Verwendung von robusten und energieeffizienten Leistungsschaltern. Durch Polarisierungseffekte der Gruppe III-Nitride können Heterostrukturen erzeugt werden, die zur Bildung eines zweidimensionalen Elektronengases (2DEGs) an den Grenzflächen führen, was die Realisierung von lateralen Hochleistungs-Feldeffekttransistoren (FETs) ermöglicht.

Jedoch konnte das volle physikalische Potential von GaN-basierten Bauelementen bisher nicht erreicht werden. So weisen undotierte GaN-Schichten, die mittels metallorganischer chemischer Gasphasenabscheidung (MOCVD) gezüchtet werden, aufgrund von nativen Defekten und Verunreinigungen oft eine Restleitfähigkeit auf, die sich vor allem nachteilig auf die Durchbruchfeldstärke von GaN-basierten Bauelementen auswirkt. Daher ist es, um hohe Durchbruchfeldstärken und Spannungen zu erzielen essentiell, die Restleitfähigkeit so gering wie möglich zu halten, idealerweise nahe der intrinsischen Ladungsträgerkonzentration, um hochisolierende GaN-Pufferschichten zu erzeugen, was häufig durch eine Kompensationsdotierung mittels Kohlenstoffs realisiert wurde. Typischerweise erfordert eine Erhöhung der intrinsischen Kohlenstoffdotierung eine Änderung der miteinander gekoppelten Prozessparameter wie Temperatur, Druck und V/III-Verhältnis. Damit ist jedoch eine gleichzeitige Optimierung der Wachstumsparameter auf eine gewünschte Kohlenstoffkonzentration bei bestmöglicher Kristallqualität schwer umsetzbar.

In dieser Arbeit wird erstmals systematisch eine extrinsische C-Dotierung von GaN mittels eines Propan-Präkursors als Alternative zu den bisher bekannten Verfahren untersucht und erfolgreich belegt, dass diese Art der Kohlenstoffdotierung eine exzellente Isolationswirkung aufweist. Der dadurch erzielte zusätzliche Freiheitsgrad ermöglicht es die Wachstumsbedingungen auf eine hohe Kristallqualität hin zu optimieren und unabhängig davon den Kohlenstoffeinbau über die Flussrate des Präkursors zu steuern. Mit dieser neuen Methode, welche inzwischen auch von kommerziellen Halbleiterherstellern eingesetzt wird, wurde die C-Dotierung an drei verschiedenen Probenstrukturen hinsichtlich ihrer elektrischen, strukturellen und optischen Eigenschaften untersucht.

Unter optimalen Wachstumsbedingungen für GaN konnte eine Kohlenstoffkonzentration von  $1.2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  erreicht werden, ohne die Kristallqualität zu beeinträchtigen. Der Einbau von Kohlenstoff zeigt anhand von SIMS-Tiefenprofilen keine negativen Effekte wie Anström- oder Memoryeffekt und ermöglicht dadurch eine präzise Steuerung der C-Dotierung. Anhand von Si,C kodotierten GaN-Probenreihen konnte der Einbau von Kohlenstoff als elektrisch aktiver Akzeptor mit einer Effizienz von nahezu 100% gezeigt werden. Dadurch verbesserten sich die isolierenden Eigenschaften von GaN erheblich, und es wurden Durchbruchfeldstärken bis zu 2.03 MV/cm erreicht. Darüber hinaus zeigen die Ergebnisse, dass eine höhere Kohlenstoffkonzentration die Durchbruchfeldstärke weiter steigert und den Leckstrom um mehrere Größenordnungen reduziert.

Die umfassende Analyse in der Arbeit zeigt außerdem, dass die gelbe und blaue Lumineszenz in GaN durch den  $C_N$ -Akzeptordefekt verursacht wird. Die Ergebnisse erweitern das Verständnis der defektbezogenen Lumineszenz in GaN und liefern entscheidende Einblicke, die zur Optimierung von GaN-basierten Technologien beitragen.

## Abstract

Semiconductors with a large band gap such as Group III-nitrides (gallium nitride (GaN) and aluminum nitride (AlN)) are excellently suited for the use in robust and energy-efficient power switches due to their high breakdown strength. Polarization effects in Group III-nitride heterostructures can lead to the formation of a two-dimensional electron gas (2DEG) at the interfaces, enabling the realization of lateral high-power field-effect transistors (FETs).

However, the full physical potential of GaN-based devices has not yet been reached. Undoped GaN layers grown by using metal-organic chemical vapor deposition (MOCVD) often exhibit residual free carriers due to native defects and impurities, which have a particularly negative impact on the breakdown voltage of GaN-based devices. Therefore, it is crucial to keep the residual charge carrier concentration as low as possible, ideally close to the intrinsic carrier concentration, to obtain highly insulating GaN buffer layers. This can be achieved by compensation doping with carbon. Typically, increasing the intrinsic carbon doping concentration requires changes in process parameters such as temperature, pressure, and V/III ratio. However, changing growth conditions leads to different incorporation probabilities and lattice site preferences of carbon as well as to unknown formation energies of the remaining impurities and point defects. This makes a prediction of the insulating characteristics of such GaN layers difficult.

In this work an alternative to the less optimal methods of iron or intrinsic carbon doping, namely extrinsic C-doping using a propane precursor is systematically investigated for the first time. It is demonstrated that excellent electrical, structural, and optical properties of the highly insulating GaN buffer layers can be achieved, without altering the optimized growth parameters for high-quality GaN layers. Under optimal growth conditions for GaN, a carbon concentration of  $1.2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  was achieved without degrading the crystal quality. Carbon incorporation, as shown by SIMS depth profiles, exhibits no indication of a carbon memory effect. A linear relationship between propane flow and C-incorporation is demonstrated allowing the precise control of C-doping. A silicon and carbon co-doping technique was applied to determine the compensation efficiency of propane as a precursor. The incorporation of carbon as an electrically active acceptor in GaN shows an efficiency of nearly 100%. This has improved the insulating properties of GaN, achieving breakdown field strengths up to 2.03 MV/cm. The results further show an increasing breakdown strength with increasing carbon concentration and a reduction of the leakage current by several orders of magnitude.

The comprehensive analysis demonstrates that the yellow and blue luminescence bands in GaN are due to transitions involving the  $C_N$  acceptor defect. These findings improve the understanding of defect-related luminescence in GaN and have implications for the development of optoelectronic devices.



## Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung .....	9
1.1	Literaturverzeichnis .....	13
2	Materialeigenschaften der Gruppe III – Nitride.....	15
2.1	Kristallstruktur .....	15
2.2	Ternäre Gruppe III-Nitridverbindungen.....	19
2.3	Spontane und piezoelektrische Polarisation.....	19
2.4	Versetzungen .....	22
2.5	Literaturverzeichnis .....	25
3	Experimentelle Methoden .....	28
3.1	Metal-organic vapor phase epitaxy (MOVPE).....	28
3.2	Optische in-situ Messungen.....	30
3.3	Nomarski-Mikroskop.....	32
3.4	Atomkraftmikroskop (AFM).....	33
3.5	Field Emission Raster Electron Microscope (FE-REM).....	34
3.6	Scanning Transmission Electron Microscope (STEM) .....	35
3.7	Photolumineszenzspektroskopie (PL).....	36
3.8	Hochauflösende Röntgendiffraktometrie (HRXRD) .....	38
3.9	Röntgenreflektometrie (XRR).....	40
3.10	Sekundärionenmassenspektrometrie (SIMS) .....	42
3.11	Hall-Effekt .....	50
3.12	IU- Messungen .....	52
3.13	Literaturverzeichnis .....	67
4	MOVPE-Wachstum und Eigenschaften von GaN/ Heteroepitaktisches Wachstum .....	69
4.1	GaN-Wachstum auf Fremdsubstraten .....	69
4.2	Punktdefekte in GaN.....	72
4.3	Literaturverzeichnis .....	75
5	Kompensationsdotierung von GaN.....	77
5.1	Motivation .....	77
5.2	Extrinsische C-Dotierung mittels Propan .....	82
5.3	Strukturelle Charakterisierung.....	89
5.4	Elektrische Eigenschaften .....	95
5.5	Kompensationseffizienz .....	97

5.6	Semi-isolierende Eigenschaften .....	100
5.7	Leckstromverhalten und Spannungsfestigkeit an drei Probenstrukturen .....	102
5.8	Elektrische Charakterisierung der Probenstruktur 1 .....	103
5.9	Leitungsmechanismen von Probenstruktur 1 .....	110
5.10	Charakterisierung von Probenstruktur 2 .....	113
5.11	Charakterisierung von Probenstruktur 3 .....	116
5.12	Literaturverzeichnis .....	123
6	PL an GaN:C,Si.....	128
6.1	Literaturverzeichnis .....	139
7	Zusammenfassung .....	142
7.1	Literaturverzeichnis .....	145
8	Veröffentlichungen .....	146
9	Ehrenerklärung .....	148



# 1 Einleitung

Silizium (Si) ist seit nunmehr als 50 Jahren das Material der Wahl für die Herstellung von leistungselektronischen Bauelementen. Jedoch kommt Silizium inzwischen an seine physikalischen Grenzen, wodurch vermehrt Anwendungen entstehen, die mit diesem Halbleitermaterial nicht mehr praktikabel umsetzbar sind. So besitzt Silizium eine Spannungsfestigkeit von lediglich  $\sim 0.3$  MV/cm [1] wodurch die Bauteile entsprechend dimensioniert werden müssen, um höhere Durchbruchspannungen zu gewährleisten. Neben den dadurch steigenden Materialkosten führt eine Vergrößerung des Bauteils unweigerlich zu höheren Schalt- sowie Durchlassverlusten [2]. Die dadurch verursachte Erwärmung des Bauelementes verringert wiederum den Wirkungsgrad und muss durch einen erhöhten Kühlaufwand kompensiert werden. Daher besteht ein großes Interesse daran diese Verlustleistungen zu minimieren, da sie sich sowohl negativ auf die Lebensdauer des Bauelements auswirken als auch dessen Einsatzgebiet begrenzen.

Halbleiter mit großer Bandlücke wie Galliumnitrid (GaN), Aluminiumnitrid (AlN) oder Siliziumkarbid (SiC) eignen sich aufgrund ihrer hohen Durchbruchfestigkeit hervorragend für die Verwendung von robusten und energieeffizienten Leistungsschaltern, wie sie in zukunftsweisenden Technologien wie zum Beispiel der Elektromobilität oder im Umfeld der Energieversorgung von Datenzentren benötigt werden [3, 4].

Durch den Einsatz von Halbleitermaterialien wie GaN und der ternären Gruppe III-Nitride wie Al(Ga,In)N können die Limitierungen der Siliziumtechnologie überwunden werden.

Aufgrund von Polarisierungseffekten der Gruppe III-Nitride und der entsprechenden Band-Offsets kann es bei der Herstellung von AlInN/GaN sowie AlGaN/GaN Heterostrukturen zur Bildung eines zweidimensionalen Elektronengases (2DEGs) an den Grenzflächen kommen, was die Realisierung von Hochleistungs-Feldeffekttransistoren (FETs) ermöglicht [5, 6]. Durch die höhere Spannungsfestigkeit von GaN ( $\sim 3.3$  MV/cm) [3] im Vergleich zu Silizium, sowie durch die höhere

Elektronenmobilität und Ladungsträgerdichte des 2DEGs lässt sich eine Verringerung der Bauelementfläche erzielen, wodurch eine signifikante Reduzierung der Leistungsverluste sowie die damit verbundene Verringerung des Durchgangswiderstandes  $R_{ON}$  erzielt werden kann [2].

Jedoch konnte das volle Potential von GaN-Transistoren bislang nicht ausgeschöpft werden. So wurde der theoretisch ermittelte Wert für die Spannungsfestigkeit von GaN bislang nicht erreicht. Einer der Gründe hierfür ist das Fehlen von geeigneten und vor allem kostengünstigen GaN-Substraten wodurch weiterhin auf Fremdsubstrate wie Silizium, Saphir oder Siliziumkarbid ausgewichen werden muss. Dies führt im Allgemeinen zu einer hohen Anzahl an Versetzungen und damit verbunden zu parasitären Leckströmen sowie zu einer Verringerung der Spannungsfestigkeit [7]. Obwohl das epitaktische Wachstum von GaN auf Silizium [8] aufgrund von Melt-back-Etching [9, 10], Gitterfehlpassungen sowie unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten sehr anspruchsvoll ist, ist wiederum die Möglichkeit auf günstigen und großen Siliziumwafern GaN Schichten abscheiden zu können in Hinblick auf Wirtschaftlichkeit und Massenproduktion sehr attraktiv.

Die Durchbruchspannung von auf GaN auf Silizium basierenden Hochspannungstransistoren im OFF-State ist bislang im Wesentlichen durch die vertikale Schichtdicke und damit durch die Spannungsfestigkeit des GaN-Puffers zwischen dem Siliziumsubstrat und dem durch das 2DEG erzeugten Elektronenkanal limitiert. Obwohl die Gründe bislang nicht zweifelsfrei geklärt sind, zeigt undotiertes GaN, welches mittels MOVPE (engl. Metal-Organic Vapor Phase Epitaxy) hergestellt wird, häufig eine n-Typ Hintergrund-Dotierung, wodurch die notwendigen isolierenden Eigenschaften des GaN-Puffers nicht gegeben sind. Als mögliche Ursachen werden der ungewollte Einbau von Störstellen wie beispielsweise Sauerstoff [11, 12] oder Silizium [13] sowie die Bildung von intrinsischen Defekten wie Stickstoff-Vakanzen ( $V_N$ ) angeführt [14]. Um dennoch hochisolierende Pufferschichten zu erhalten, werden deshalb gezielt Haftstellen, vorzugsweise akzeptorartige Störstellen eingebaut [15, 16].

In dieser Arbeit, welche im Rahmen des BMBF Projekts ZuGaNG entstand, mit dem Schwerpunkt der Erforschung, Entwicklung sowie Optimierung von Hochleistungsbauelementen für den Bedarf von großen sowie kleinen Verbrauchern in den Märkten der Energiewirtschaft und des Energiemanagements, wurden für die Kompensationsdotierung Eisen und Kohlenstoff verwendet. Da jedoch für eine Prozessverträglichkeit von GaN in einer CMOS-Linie, aufgrund des Risikos einer Querkontamination, auf eine Eisendotierung des GaN-Puffers verzichtet werden soll, liegt das Hauptaugenmerk dieser Arbeit auf der Kohlenstoffdotierung.

Der herkömmliche Weg, um GaN mit Kohlenstoff zu dotieren beruht bei der MOVPE auf einer Modifikation der Wachstumsparameter (Druck, Temperatur und V/III Verhältnis), welches die Einbauwahrscheinlichkeit des, durch die üblicherweise verwendeten Gallium-Präkursoren wie Trimethylgallium (TMGa) oder Triethylgallium (TEGa), mitgeführten Kohlenstoffs beeinflusst [17–21]. Jedoch kann eine Änderung der Wachstumsparameter, die zwar einen hohen Kohlenstoffeinbau zur Folge haben, gleichzeitig zu einer starken Verschlechterung der Kristallqualität und dadurch zu unerwünschten elektrischen Eigenschaften führen. Um dennoch eine hohe Kristallqualität mit gut reproduzierbaren elektrischen Charakteristiken zu erzielen, wurde der Einsatz von Propan als Präkursor, welcher als unabhängige Kohlenstoffquelle agieren soll, untersucht. Der dadurch erzielte zusätzliche Freiheitsgrad ermöglicht es die Wachstumsbedingungen auf eine hohe Kristallqualität hin zu optimieren und unabhängig davon den Kohlenstoffeinbau über die Flussrate des Präkursors zu steuern [16]. Zusätzlich ergibt sich hierdurch die Möglichkeit die Einflüsse des Kohlenstoffs auf MOVPE gewachsene GaN Schichten besser zu verstehen und die daraus resultierenden physikalischen Phänomene systematisch zu analysieren. Dies war vor Beginn der Arbeit an GaN:C Schichten, welche mittels MOVPE hergestellt wurden, in diesem Umfang noch nicht möglich.

Der Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit ist die Herstellung sowie die strukturelle und elektrische Charakterisierung von C-dotierten GaN-Pufferschichten durch die Verwendung von Propan für den Einsatz in Hochspannungstransistoren für die Leistungselektronik.



## 1.1 Literaturverzeichnis

- [1] T. J. Flack, B. N. Pushpakaran, and S. B. Bayne, "GaN Technology for Power Electronic Applications: A Review," *J. Electron. Mater.* **45**, 2673 (2016), <https://doi.org/10.1007/s11664-016-4435-3>.
- [2] H. Amano, Y. Baines, E. Beam, M. Borga, P. Boulay, J. Brammertz, A. L. Brown, B. Cheng, T. Dang, A. Dekker, S. Fahlbusch, and S. Stoffels, "The 2018 GaN power electronics roadmap," *J. Phys. D: Appl. Phys.* **51**, 163001 (2018), <https://doi.org/10.1088/1361-6463/aaaf9d>.
- [3] B. J. Baliga, "Gallium nitride devices for power electronic applications," *Semicond. Sci. Technol.* **28**, 074011 (2013), <https://doi.org/10.1088/0268-1242/28/7/074011>.
- [4] B. J. Baliga, "Semiconductors for high-voltage, vertical channel field-effect transistors," *J. Appl. Phys.* **53**, 1759 (1982), <https://doi.org/10.1063/1.331646>.
- [5] S. Arulkumaran, T. Egawa, H. Ishikawa, and T. Jimbo, "Characterization of different-Al-content  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  heterostructures and high-electron-mobility transistors on sapphire," *J. Vac. Sci. Technol. B.* **21**, 888 (2003), <https://doi.org/10.1116/1.1556398>.
- [6] G. Zhao, H. Ishikawa, T. Egawa, T. Jimbo, and M. Umeno, "Electron mobility on AlGaIn/GaN heterostructure interface," *Phys. E.* **7**, 963 (2000), [https://doi.org/10.1016/S1386-9477\(00\)00097-7](https://doi.org/10.1016/S1386-9477(00)00097-7).
- [7] A. Dadgar, M. Poschenrieder, J. Bläsing, J. Christen and A. Krost "Improving GaN-on-silicon properties for GaN device epitaxy," *Phys. Status Solidi C* **8**, 1503 (2011), <https://doi.org/10.1002/pssc.201001137>
- [8] A. Dadgar, J. Bläsing, A. Diez, F. Bertram, J. Christen and A. Krost., "MOVPE growth of GaN on Si(111) substrates," *J. Cryst. Growth* **248**, 556 (2003), [https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(02\)01894-8](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(02)01894-8).
- [9] A. Dadgar, "Sixteen years GaN on Si," *Phys. Status Solidi B* **252**, 1063 (2015), <https://doi.org/10.1002/pssb.201451656>.
- [10] A. Krost and A. Dadgar, "GaN-based optoelectronics on silicon substrates," *Mater. Sci. Eng. B* **93**, 77 (2002), [https://doi.org/10.1016/S0921-5107\(02\)00043-0](https://doi.org/10.1016/S0921-5107(02)00043-0).
- [11] W. Seifert, R. Franzheld, E. Butter, H. Sobotta, and V. Riede, "On the origin of free carriers in high-conducting n-GaN," *Cryst. Res. Technol.* **18**, 383 (1983), <https://doi.org/10.1002/crat.2170180314>.
- [12] C. Wetzel, J. W. Ager III, W. Shan, E. E. Haller, M. D. McCluskey, N. M. Johnson, J. S. Speck and S. Nakamura "Pressure Induced Deep Gap State of Oxygen in GaN," *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3923 (1997), <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.78.3923>.
- [13] H. Wang and A.-B. Chen, "Calculation of shallow donor levels in GaN," *J. Appl. Phys.* **87**, 7859 (2000), <https://doi.org/10.1063/1.373467>.
- [14] G. Y. Zhang, Y. Z. Tong, Z. J. Yang, S. X. Jin, J. Li, and Z. Z. Gan, "Relationship of background carrier concentration and defects in GaN grown by metalorganic vapor phase epitaxy," *Appl. Phys. Lett.* **71**, 3376 (1997), <https://doi.org/10.1063/1.120341>.
- [15] A.-C. Liu, Y.-Y. Lai, H.-C. Chen, A.-P. Chiu, and H.-C. Kuo, "A Brief Overview of the Rapid Progress and Proposed Improvements in Gallium Nitride Epitaxy and Process for Third-Generation Semiconductors with Wide Bandgap," *Micromachines* **14**, 764 (2023), <https://doi.org/10.3390/mi14040764>.
- [16] A. Lesnik, M. P. Hoffmann, A. Fariza, J. Bläsing, H. Witte, P. Veit, F. Hörich, C. Berger, J. Hennig, A. Dadgar, and A. Strittmatter, "Properties of C-doped GaN," *Phys. Status Solidi B* **254**, 1600708 (2017), <https://doi.org/10.1002/pssb.201600708>.
- [17] S. Mita, R. Collazo, A. Rice, R. F. Dalmau, and Z. Sitar, "Influence of gallium supersaturation on the properties of GaN grown by metalorganic chemical vapor deposition," *J. Appl. Phys.* **104**, 013521 (2008), <https://doi.org/10.1063/1.2952027>.

- [18] J. Neugebauer and C. G. van de Walle, "Atomic geometry and electronic structure of native defects in GaN," *Phys. Rev. B* **50**, 8067 (1994), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.8067>.
- [19] D. Koleske, A. Wickenden, R. Henry, and M. Twigg, "Influence of MOVPE growth conditions on carbon and silicon concentrations in GaN," *J. Cryst. Growth* **242**, 55 (2002), [https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(02\)01348-9](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(02)01348-9).
- [20] C. G. van de Walle and J. Neugebauer, "First-principles calculations for defects and impurities: Applications to III-nitrides," *J. Appl. Phys.* **95**, 3851 (2004), <https://doi.org/10.1063/1.1682673>.
- [21] F. Kaess, S. Keller, Y. Yang, S. Heikman, S. Nakamura, U. K. Mishra and J. S. Speck, "Correlation between mobility collapse and carbon impurities in Si-doped GaN grown by low pressure metalorganic chemical vapor deposition," *J. Appl. Phys.* **120**, 105701 (2016), <https://doi.org/10.1063/1.4962017>.

# 2 Materialeigenschaften der Gruppe III – Nitride

## 2.1 Kristallstruktur

Die Gruppe III-Nitride GaN, AlN und InN kristallisieren bevorzugt in der hexagonalen Wurtzitstruktur (Raumgruppe  $P6_3mc$  [1]). Weitere mögliche Kristallstrukturen sind unter anderem die Zinkblendestruktur sowie bei sehr hohem Druck die NaCl-Struktur [2], jedoch ist unter Normalbedingungen lediglich die Wurtzitstruktur thermodynamisch stabil und daher technologisch relevant. Abbildung 2.1 zeigt die Wurtzitstruktur, wobei die grauen Sphären für die Ga, Al bzw. In Atome stehen und die blauen die Stickstoffatome repräsentieren.

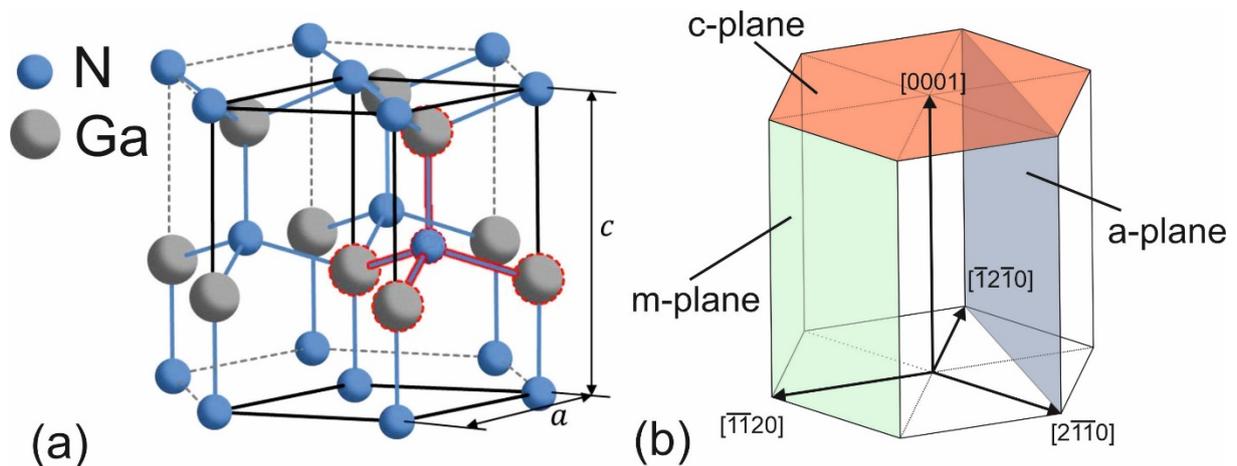


Abbildung 2.1: (a) Schematische Darstellung der Wurtzitstruktur mit den Gitterparametern  $c$  und  $a$ . (b) Verschiedene Kristallflächen der Wurtzitstruktur und deren Bezeichnung

Die Einheitszelle kann dabei durch zwei Gitterparameter  $a$  und  $c$  beschrieben werden (Abbildung 2.1a) welche für GaN, AlN und InN in Tabelle 2.1 zusammengefasst sind. Des Weiteren handelt es sich bei der Wurtzitstruktur um die hexagonal dichteste Kugelpackung (hcp) mit der Stapelfolge ABABA..., was sich durch die Betrachtung der übernächsten Nachbaratome senkrecht zur Hauptachse ( $c$ -Achse) ergibt. Für die Beschreibung der Gitterebenen des hexagonalen Wurtzitkristalls wird hierbei die Bravais-Nomenklatur (hkil) verwendet, wobei für  $i = -(h+k)$  aus der Millerschen-

Nomenklatur folgt [3]. In Abbildung 2.1b sind verschiedene Kristallflächen mit der dazugehörigen Indizierung nach der Bravais-Nomenklatur dargestellt.

Die binären Verbindungen GaN, AlN und InN besitzen unterschiedliche Bulk-Gitterkonstanten (Tabelle 2.1), wodurch es bei der Heteroepitaxie im Allgemeinen zu einer biaxialen Verzerrung kommt. Die epitaktisch gewachsene Schicht nimmt im ungestörten Fall die in-plane a-Gitterkonstante der darunterliegenden Schicht bzw. des Substrates an. Dieser Prozess wird als pseudomorphes Wachstum bezeichnet. Dabei wirkt auf die epitaktisch gewachsene Schicht aufgrund der Gitterfehlpassung eine Tangentialspannung  $\sigma_T$ , was zu einer Dehnung der hexagonalen Einheitszelle führt. Diese biaxiale Verzerrung ist in Abbildung 2.2 dargestellt. Die Verformung bzw. Verzerrung wird im Allgemeinen durch den Dehnungstensor  $\bar{\epsilon}$  beschrieben.

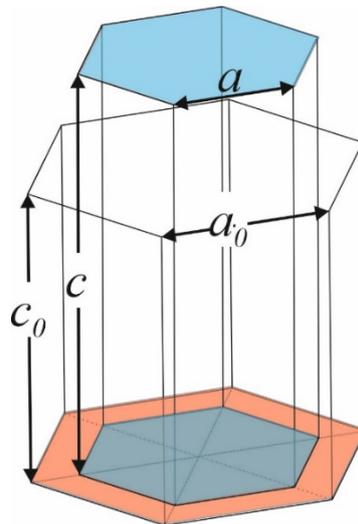


Abbildung 2.2: Darstellung der biaxialen Verzerrung einer GaN Einheitszelle mit den anfänglichen Gitterparametern  $a_0$  und  $c_0$  sowie die aus der Verzerrung resultierenden Gitterkonstanten  $a$  und  $c$  nach Ref. [4]

Die relative biaxiale Verzerrung der Schichtebene von binären Gruppe III-Nitriden bezogen auf GaN sind in Tabelle 2.1 aufgelistet ( $a_0$  ist die hierbei die anfängliche in-plane Gitterkonstante, siehe Abb. 2.2) und können bestimmt werden durch:

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{\parallel} = \frac{a_{\text{GaN}} - a_0}{a_0} \quad 2.1$$

Tabelle 2.1: Gitterkonstanten und relative biaxiale Verzerrung bezogen auf GaN für den vollverspannten Fall [5].

Material	$a_0$ [nm]	$c_0$ [nm]	$\varepsilon_{\parallel} = \frac{a_{\text{GaN}} - a_0}{a_0}$ [%]
GaN	0.3187	0.5184	0
AlN	0.3112	0.4982	+2.4
InN	0.3548	0.5760	-10.2

Der Zusammenhang zwischen dem Spannungstensor  $\bar{\sigma}$  und dem Dehnungstensor  $\bar{\varepsilon}$  wird durch das Hook'sche Gesetz beschrieben:

$$\bar{\sigma} = \bar{C} \cdot \bar{\varepsilon} \quad 2.2$$

Das Elastizitätsmodul  $\bar{C}$  ist dabei ein Tensor 4. Stufe, welcher durch Symmetrieüberlegungen auf 5 unabhängige Komponenten reduziert werden kann:

$$\bar{C} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \end{pmatrix} \quad 2.3$$

In Tabelle 2.2 sind die entsprechenden Werte für die jeweiligen Elastizitätskonstanten angegeben.

Tabelle 2.2: Elastizitätskonstanten von GaN, AlN und InN bei Raumtemperatur [6] [7]

Material	$C_{11}$ [GPa]	$C_{33}$ [GPa]	$C_{44}$ [GPa]	$C_{12}$ [GPa]	$C_{13}$ [GPa]
GaN	370	390	90	145	110
AlN	410	390	120	140	100
InN	223	224	48	115	92

Die resultierende Dehnung in Wachstumsrichtung, die aufgrund der biaxialen Verzerrung zustande kommt, kann nun durch die Elastizitätskonstanten  $C_{13}$  und  $C_{33}$  ausgedrückt werden:

$$\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{\perp} = -2 \frac{C_{13}}{C_{33}} \varepsilon_{xx} \quad 2.4$$

Die Energie, die aufgebracht werden muss, um den Kristall zu verzerren wird elastische Energie oder Verspannungsenergie genannt und steigt mit zunehmender Schichtdicke an. Im pseudomorphen Fall wird diese Energie im Kristall gespeichert. Überschreitet jedoch die Verspannungsenergie einen kritischen Wert, so werden Versetzungen gebildet, wodurch die Verspannungsenergie abgebaut wird und es dadurch zu einer teil- bis vollständigen Schichtrelaxation kommt (Abbildung 2.3). Pseudomorphes Wachstum von Materialien mit unterschiedlichen Gitterkonstanten kann daher lediglich bis zu einer kritischen Schichtdicke erfolgen.

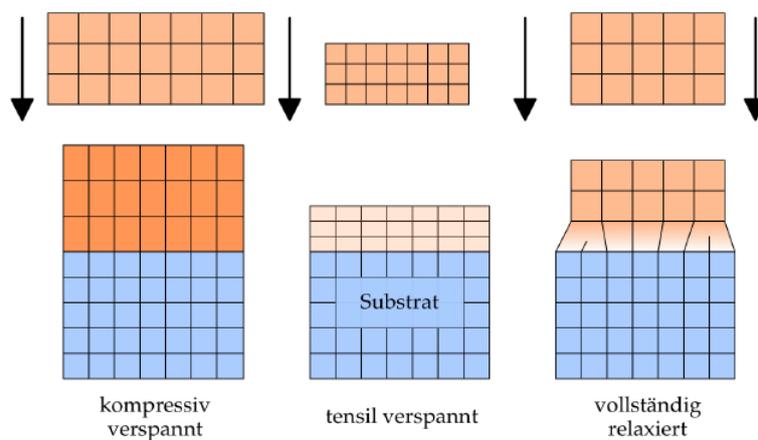


Abbildung 2.3: Mögliche Variationen beim heteroepitaktischen Wachstum. (links) pseudomorphe Epitaxieschicht unter biaxial kompressiver Verspannung, (mitte) unter biaxial tensiler Verspannung (rechts) vollständig relaxierte Schicht durch den Abbau der Verspannungsenergie durch Bildung von Versetzungen.

## 2.2 Ternäre Gruppe III-Nitridverbindungen

Aus binären Gruppe III-Nitriden lassen sich die ternären Mischkristalle  $Al_xGa_{1-x}N$ ,  $Al_xIn_{1-x}N$  und  $In_xGa_{1-x}N$  herstellen. Einige der sich dadurch ändernden Materialparameter, wie beispielsweise die a- und c-Gitterkonstante, können durch die Vegard'sche-Regel [8] berechnet werden. Es wird hierbei zwischen den entsprechenden Materialkonstanten der binären Komponenten als Funktion der Komposition linear interpoliert. Folgende Gleichung dient als Beispiel für die Berechnung der a-Gitterkonstante von AlInN in Abhängigkeit der Komposition.

$$a(Al_xIn_{1-x}N) = x \cdot a(AlN) + (1 - x) \cdot a(InN) \quad 2.5$$

Jedoch ist die Vegard'sche Regel nicht immer anwendbar, wie beispielsweise bei der Berechnung der Bandlücke  $E_G$  von ternären Materialien:

$$E_G^{ABN} = E_G^A x + E_G^B (1 - x) - bx(1 - x) \quad 2.6$$

Die Nichtlinearität wird in diesem Fall durch einen quadratischen Term ausgedrückt. Der hierfür verwendete Parameter b wird Bowing-Parameter genannt [9].

## 2.3 Spontane und piezoelektrische Polarisierung

Die Wurtzitstruktur aus den Materialien der Gruppe III-Nitride weist eine Mischform aus kovalenter und ionischer Bindung auf. Der stark ausgeprägte ionische Charakter der Bindung von Stickstoff zu Ga, Al und In führt jedoch dazu, dass sich das Verhältnis zwischen den beiden Gitterparametern c und a gegenüber dem idealen Wert der Wurtzitstruktur von  $c_0/a_0 = \sqrt{8/3}$  unterscheidet. Eine Abweichung von diesem Wert sowie die fehlende Inversionssymmetrie entlang der c-Achse führen zu einer makroskopischen Polarisierung entlang der [0001] Kristallrichtung [10, 11]. Da diese Polarisierung auch im ungestörten Kristall auftritt, wird sie als spontane Polarisierung  $P_S$  bezeichnet. In Tabelle 2.3 sind die Abweichungen der Gruppe III-Nitride vom idealen

$c_0/a_0$  Verhältnis sowie die Werte für  $P_S$  zusammengefasst. Da Wurtzitstrukturen, welche das ideale  $c_0/a_0$  Verhältnis aufweisen, keine spontane Polarisation zeigen, beeinflussen somit die Gitterparameter maßgeblich die Polarisation des Kristalls. Aufgrund dessen kann beispielsweise die durch eine biaxiale Verspannung hervorgerufene Dehnung des Körpers, wie sie beim pseudomorphen Wachstum auftritt, die Stärke der Polarisation verändern. Da diese zusätzliche Polarisation aufgrund einer Verzerrung des Kristalls hervorgerufen wird, wird sie als piezoelektrische Polarisation  $P_Z$  bezeichnet. Die Gesamtpolarisation setzt sich aus den Anteilen der spontanen sowie piezoelektrischen Polarisation zusammen, wobei  $P_S$  und  $P_Z$  jeweils parallel oder antiparallel sein können:

$$\vec{P}_{Gesamt} = \vec{P}_S + \vec{P}_Z \quad 2.7$$

Steht beispielsweise eine epitaktisch-gewachsene Schicht unter biaxialer Druckspannung, so verringert sich dadurch die in-plane Gitterkonstante und die c-Gitterkonstante wird entsprechend größer. Dies führt zu einem Anstieg des c/a-Verhältnisses gegenüber dem idealen Wert, was zu einer Reduzierung der Gesamtpolarisation des Kristalls führt, da die Vektoren  $\vec{P}_Z$  und  $\vec{P}_S$  in diesem Fall entgegengesetzt gerichtet sind. Wird der Kristall hingegen durch eine Zugspannung biaxial verzerrt, so führt dies zu einer Reduzierung des c/a-Verhältnisses, wodurch die Gesamtpolarisation steigt, da nun  $\vec{P}_Z$  und  $\vec{P}_S$  in die gleiche Richtung wirken. Während  $P_S$  eine Materialkonstante ist, wird  $P_Z$  durch die Verzerrung des Kristalls hervorgerufen, welche durch folgende Gleichung beschrieben werden kann [12]:

$$P_Z = 2 \frac{a - a_0}{a_0} \left( e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \quad 2.8$$

Die Koeffizienten  $e_{31}$  und  $e_{33}$  sind die entsprechenden piezoelektrischen Konstanten.

Tabelle 2.3: Gitterverhältnis, spontane Polarisation und piezoelektrische Konstanten [10]

Material	$c_0/a_0$	$P_s$ [C/m <sup>2</sup> ]	$e_{31}$ [C/m <sup>2</sup> ]	$e_{33}$ [C/m <sup>2</sup> ]
GaN	1.6259	-0.029	-0.49	0.73
AlN	1.6010	-0.081	-0.60	1.46
InN	1.6116	-0.032	-0.57	0.97

Eine direkte Auswirkung des Polarisierungseffekts ist die Ausbildung ortsfester Polarisationsladungen an einer Heterogrenzfläche, die durch freie Ladungsträger kompensiert werden. Diese Ladungsträgerakkumulation kann zu der Ausbildung eines 2DEGs führen, welches als hochleitfähiger Kanal in lateralen Transistoren ausgenutzt wird [13, 14]. Eine Akkumulation von Defektelektronen ist an entsprechenden Heterogrenzflächen ebenfalls möglich, wodurch ein zweidimensionales Löchergas (2DHG) entstehen kann. An InGaN/GaN Heterostrukturen konnte damit ein p-Typ Transistor erfolgreich realisiert werden [15]. Da die Kanalladung durch eine Polarisationsdiskontinuität an der Materialgrenzfläche gebildet wird, ist keine Dotierung bzw. Versorgungsschicht notwendig, wie es bei klassischen FET-Strukturen der Fall ist. Die Ausbildung eines 2DEGs führt zu einem Kanal mit einer sehr hohen Ladungsträgerdichte sowie -beweglichkeit. Die Ladungsträgerkonzentration des 2DEGs lässt sich durch die Wahl des Barrierenmaterials sowie dessen Komposition und Schichtdicke beeinflussen. Für die Realisierung von n-Typ FETs wurden in dieser Arbeit AlGaN/GaN sowie AlInN/GaN Heterostrukturen verwendet.

Bei AlGaN/GaN FETs wird die Elektronenakkumulation hauptsächlich durch die Verspannung der Barriere und der sich daraus ergebenden piezoelektrischen Polarisation verursacht. Mit steigendem Aluminium-Gehalt nimmt dabei die Verspannung zu und würde im Grenzfall AlN/GaN eine maximale 2DEG Ladungsträgerkonzentration von  $N_s = 6.8 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  ergeben [16]. Jedoch führen im Allgemeinen zu hohe Aluminiumkonzentration zur Schichtrelaxation sowie zu einer Verschlechterung der Schichtqualität. So konnten bereits AlGaN/GaN HEMTs auf SiC Substraten mit einer Aluminiumkonzentration von 40% eine maximale Drain-Source Stromdichte von  $\sim 1.5 \text{ A/mm}$  erzielen [17]. Die kritische Schichtdicke von AlN/GaN

beträgt  $\sim 7$  nm [18–21]. Daher liegt der Al-Gehalt einer AlGaN Barriere typischerweise um  $\sim 25\%$ , was einer Ladungsträgerkonzentration von  $N_s \approx 1 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  ergibt.

Verglichen mit AlGaN/GaN HEMTs zeigen AlInN/GaN Strukturen eine um bis zu zweifach höhere Elektronendichte im 2DEG [22]. Es konnten in AlInN/GaN Heterostrukturen 2DEGs mit einer Elektronendichte von bis zu  $3.5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  erzielt werden [23, 24]. Mit steigender AlInN Barrierendicke steigt auch die 2DEG Dichte. Bei ca. 15 nm setzt eine Sättigung ein [18, 25, 26]. Für AlInN/GaN FETs liegt die höchste zu erzielende 2DEG Ladungsträgerkonzentration ebenfalls im Grenzfall AlN/GaN. Bei einer Indiumkonzentration von 32% kompensieren sich die piezo- und spontane Polarisation gegenseitig, so dass keine Ladungsträger an der Grenzfläche akkumuliert werden. Im Gegensatz zu AlGaN bietet AlInN die Möglichkeit des gitterangepassten Wachstums auf GaN. Bei einer Indiumkonzentration von  $\sim 17\%$  kann daher die AlInN Barriere spannungsfrei auf GaN abgeschieden werden, wodurch der piezoelektrische Anteil an der Gesamtpolarisation verschwindet. Somit wird im gitterangepassten Fall die 2DEG Ladungsträgerkonzentration lediglich durch die spontane Polarisation verursacht, womit eine Ladungsträgerkonzentration von  $N_s = 2.7 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  erzielt werden kann [23].

## **2.4 Versetzungen**

Versetzungen sind eindimensionale Gitterfehler in einem Kristall, welche durch Versetzungslinien veranschaulicht und durch den Burgersvektor  $\vec{b}$  beschrieben werden. Es gibt zwei Grundtypen von durchstoßenden Versetzungen, die Stufen- sowie Schraubenversetzung. Unter Annahme des Mosaik-Modells [27–29] (Abbildung 2.4) bilden sich durch die Koaleszenz von zueinander verdrehten sowie verkippten Kristalliten versetzungsreiche Korngrenzen aus. Das Maß der Verkipfung (Tilt) sowie Verdrehung (Twist) korreliert mit der Dichte von Schrauben- bzw. Stufenversetzungen [30].

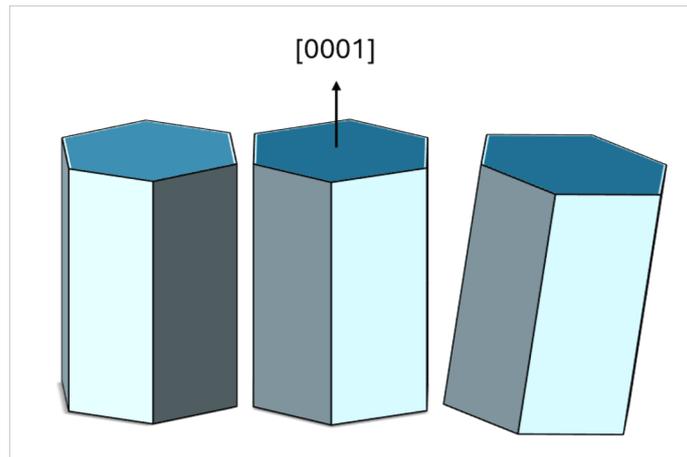


Abbildung 2.4: Schematische Darstellung einzelner hexagonaler Kristallite, die gegeneinander verkippt (tilt) und verdreht (twist) sind

Liniendefekte sind in diesem Materialsystem meistens durchstoßene Versetzungen (TD engl. threading dislocation) [31, 32], wobei ihre Dichte in GaN Epi-Schichten (MOVPE Wachstum auf Fremdsubstraten) in der Größenordnung von  $10^8 - 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  liegt [33]. Stufenversetzungen haben den Burgersvektor  $\vec{b} = \frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ , welcher senkrecht zur Versetzungslinie gerichtet ist. In Abbildung 2.5 ist eine Stufenversetzung gezeigt, die durch den Einschub einer zusätzlichen Halbebene von Atomen in einem ansonsten ungestörten Kristall anschaulich beschrieben werden kann. Das Ende dieser Halbebene bildet den Versetzungskern und damit den Ort der stärksten durch die Stufenversetzung induzierten Verzerrung des Gitters.

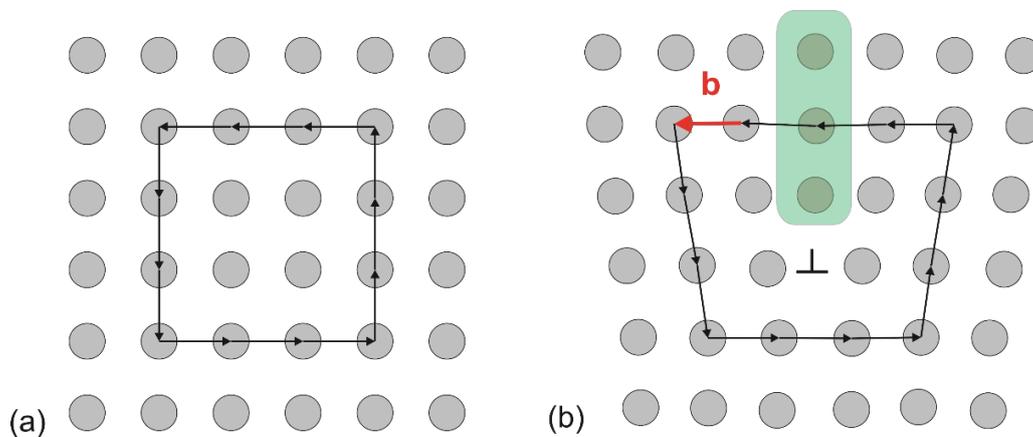
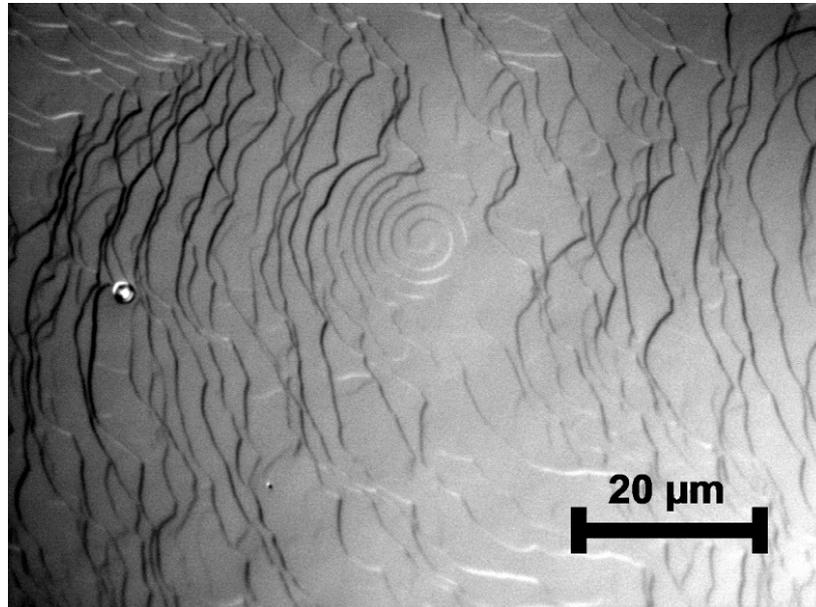


Abbildung 2.5: Schematische Darstellung einer Stufenversetzung. (a) Burgerskreis in einem perfekten Kristallgitter (b) Stufenversetzung mit Burgersvektor  $b$ , der durch einen geschlossenen Weg (Burgerskreis) dargestellt ist.

Schraubenversetzungen (c-TD) besitzen den Burgersvektor  $\vec{b} = \langle 0001 \rangle$ , wobei dieser parallel zur Versetzungslinie ist. In Abbildung 2.6 ist eine Schraubenversetzung an einer GaN (0001) Oberfläche dargestellt.



*Abbildung 2.6: Schraubenversetzung auf GaN (001) im Nomarskimikroskop (MD10142)*

Im Allgemeinen zeigen viele Versetzungen sowohl Stufen- als auch Schraubencharakter und werden dadurch als gemischte Durchstoßversetzungen bezeichnet. Versetzungen können sich gegenseitig auslöschen, wenn sich zwei zusammenlaufende Versetzungen mit entgegengesetzte Burgersvektoren und gleichem Betrag treffen. Verspannungsfelder im Kristall können zu einem Abknicken der Versetzungen führen, wodurch sich eine höhere Defektreduktion ergibt [34–38]. Für eine detailliertere Beschreibung von Versetzungen ist auf Ref. [39] verwiesen.

## 2.5 Literaturverzeichnis

- [1] D. Fuhrmann, *Limitierende Mechanismen für (Ga,Al,In)N-basierte LED-Strukturen im grünen und ultravioletten Spektralbereich*, Cuvillier Verlag, Göttingen, Germany (2008).
- [2] P. Perlin, C. Jauberthie-Carillon, J. P. Itie, M. A. San, I. Grzegory, and A. Polian, "Raman scattering and x-ray-absorption spectroscopy in gallium nitride under high pressure," *Phys. Rev. B* **45**, 83 (1992), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.45.83>.
- [3] *Moderne Röntgenbeugung: Röntgendiffraktometrie für Materialwissenschaftler, Physiker und Chemiker*, 1st ed., Teubner Lehrbuch Physik, Teubner, Wiesbaden (2005).
- [4] M. Schuster, P O Gervais, B Jobst, W Höslér, R Averbeck, H Riechert, A Iberl and R Stömmér, "Determination of the chemical composition of distorted InGaN/GaN heterostructures from x-ray diffraction data," *J. Phys. D* **32**, A56 (1999), <https://doi.org/10.1088/0022-3727/32/10A/312>
- [5] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, "Band parameters for nitrogen-containing semiconductors" *J. Appl. Phys.* **94**, 3675 (2003), <https://doi.org/10.1063/1.1600519>.
- [6] A. F. Wright, "Elastic properties of zinc-blende and wurtzite AlN, GaN, and InN," *J. Appl. Phys.* **82**, 2833 (1997), <https://doi.org/10.1063/1.366114>.
- [7] C. Deger, E. Born, H. Angerer, O. Ambacher, M. Stutzmann, J. Hornsteiner, E. Riha, and G. Fischerauer, "Sound velocity of Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N thin films obtained by surface acoustic-wave measurements," *Appl. Phys. Lett.* **72**, 2400 (1998), <https://doi.org/10.1063/1.121368>.
- [8] A. Zoroddu, F. Bernardini, P. Ruggerone, and V. Fiorentini, "First-principles prediction of structure, energetics, formation enthalpy, elastic constants, polarization, and piezoelectric constants of AlN, GaN, and InN," *Phys. Rev. B* **64**, 045208 (2001), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.64.045208>.
- [9] C. Wood, Ed., *Polarization effects in semiconductors: From ab initio theory to device application*, Springer, New York (2008).
- [10] F. Bernardini, V. Fiorentini, and D. Vanderbilt, "Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides," *Phys. Rev. B* **56**, R10024 (1997), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.56.R10024>.
- [11] O. Ambacher, "Growth and applications of Group III-nitrides," *J. Phys. D: Appl. Phys.* **31**, 2653 (1998), <https://doi.org/10.1088/0022-3727/31/20/001>.
- [12] O. Ambacher, J. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, W. J. Schaff, L. F. Eastman, R. Dimitrov, L. Wittmer, M. Stutzmann, W. Rieger, and J. Hilsenbeck, "Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N- and Ga-face AlGa<sub>x</sub>N/GaN heterostructures," *J. Appl. Phys.* **85**, 3222 (1999), <https://doi.org/10.1063/1.369664>.
- [13] B. Kuhn, *AlGa<sub>x</sub>N/GaN-Heterostrukturen: Epitaxie und elektrische Eigenschaften*, (2002), Universität Stuttgart, <https://doi.org/10.18419/OPUS-4668>.
- [14] P. M. Asbeck, E. T. Yu, S. S. Lau, G. J. Sullivan, J. van Hove, and J. Redwing, "Piezoelectric charge densities in AlGa<sub>x</sub>N/GaN HFETs," *Electron. Lett.* **33**, 1230 (1997), <https://doi.org/10.1049/EL:19970843>.
- [15] T. Zimmermann, M. Neuburger, M. Kunze, I. Daumiller, A. Denisenko, A. Dadgar, A. Krost, and E. Kohn., "P-Channel InGa<sub>x</sub>N-HFET Structure Based on Polarization Doping," *IEEE Electron Device Lett.* **25**, 450 (2004), <https://doi.org/10.1109/LED.2004.830285>.
- [16] R. Tülek, A. Ilgaz, S. Gökden, A. Teke, M. K. Öztürk, M. Kasap, S. Özçelik, E. Arslan, and E. Özbay, "Comparison of the transport properties of high quality AlGa<sub>x</sub>N/AlN/GaN and AlInN/AlN/GaN two-dimensional electron gas heterostructures," *J. Appl. Phys.* **105**, 013707 (2009), <https://doi.org/10.1063/1.2996281>.

- [17] M. Higashiwaki, T. Mimura, and T. Matsui, "High-Performance Short-Gate InAlN/GaN Heterostructure Field-Effect Transistors," *Jpn. J. Appl. Phys.* **45**, L843 (2006), <https://doi.org/10.1143/JJAP.45.L843>.
- [18] M. F. Romero, M. Feneberg, P. Moser, C. Berger, J. Bläsing, A. Dadgar, A. Krost, E. Sakalauskas, F. Calle, and R. Goldhahn, "Systematic Optical Characterization of Two-Dimensional Electron Gases in InAlN/GaN-Based Heterostructures with Different In Content," *Jpn. J. Appl. Phys.* **52**, 08JK02 (2013), <https://doi.org/10.7567/JJAP.52.08JK02>.
- [19] Y. Cao and D. Jena, "High-mobility window for two-dimensional electron gases at ultrathin AlN/GaN heterojunctions," *Appl. Phys. Lett.* **90**, 182112 (2007), <https://doi.org/10.1063/1.2736207>.
- [20] I. P. Smorchkova, L. Chen, T. Mates, L. Shen, S. Heikman, B. Moran, S. Keller, S. P. DenBaars, J. S. Speck, and U. K. Mishra, "AlN/GaN and (Al,Ga)N/AlN/GaN two-dimensional electron gas structures grown by plasma-assisted molecular-beam epitaxy," *J. Appl. Phys.* **90**, 5196 (2001), <https://doi.org/10.1063/1.1412273>.
- [21] T. Palacios, A. Chakraborty, S. Heikman, S. Keller, S. P. DenBaars, and U. K. Mishra, "AlGaIn/GaN high electron mobility transistors with InGaIn back-barriers," *IEEE Electron Device Lett.* **27**, 13 (2006), <https://doi.org/10.1109/LED.2005.860882>.
- [22] J. Kuzmik, "Power electronics on InAlN/(In)GaIn: Prospect for a record performance," *IEEE Electron Device Lett.* **22**, 510 (2001), <https://doi.org/10.1109/55.962646>.
- [23] A. Dadgar, F. Schulze, J. Bläsing, A. Diez, A. Krost, M. Neuburger, E. Kohn, I. Daumiller, and M. Kunze, "High-sheet-charge-carrier-density AlInN/GaN field-effect transistors on Si(111)," *Appl. Phys. Lett.* **85**, 5400 (2004), <https://doi.org/10.1063/1.1828580>.
- [24] M. Gonschorek, J.-F. Carlin, E. Feltin, M. A. Py, N. Grandjean, V. Darakchieva, B. Monemar, M. Lorenz, and G. Ramm, "Two-dimensional electron gas density in  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$  heterostructures ( $0.03 \leq x \leq 0.23$ )," *J. Appl. Phys.* **103**, 093714 (2008), <https://doi.org/10.1063/1.2917290>.
- [25] R. Butté, J-F Carlin, E Feltin, M Gonschorek, S Nicolay, G Christmann, D Simeonov, A Castiglia, J Dorsaz, H J Buehlmann, S Christopoulos, G Baldassarri Höger von Högersthal, A J D Grundy, M Mosca, C Piquier, M A Py, F Demangeot, J Frandon, P G Lagoudakis, J J Baumberg and N Grandjean, "Current status of AlInN layers lattice-matched to GaN for photonics and electronics," *J. Phys. D: Appl. Phys.* **40**, 6328 (2007), <https://doi.org/10.1088/0022-3727/40/20/S16>.
- [26] F. Medjdoub, J. F. Carlin, C. Gaquiere, N. Grandjean, and E. Kohn, "Status of the Emerging InAlN/GaN Power HEMT Technology," *TOEEJ* **2**, 1 (2008), <https://doi.org/10.2174/1874129000802010001>.
- [27] X. J. Ning, F. R. Chien, P. Pirouz, J. W. Yang, and M. A. Khan, "Growth defects in GaN films on sapphire: The probable origin of threading dislocations," *J. Mater. Res.* **11**, 580 (1996), <https://doi.org/10.1557/JMR.1996.0071>.
- [28] R. N. Kyutt and A. A. Dyshekov, "Effect of epilayer microstructure on shape of X-Ray diffraction peaks," *Tech. Phys. Lett.* **37**, 306 (2011), <https://doi.org/10.1134/S1063785011040110>.
- [29] B. Liu, X. Li, J. Zhu, and Z. Wang, "Microstructure and dislocation of epitaxial InN films revealed by high resolution x-ray diffraction," *J. Appl. Phys.* **103**, 023504 (2008), <https://doi.org/10.1063/1.2832753>.
- [30] T. Metzger, C. Kirchner, R. Höppler, M. Born, O. Ambacher, M. Stutzmann, R. Höpfl, and G. Dollinger, "Defect structure of epitaxial GaN films determined by transmission electron microscopy and triple-axis X-ray diffractometry," *Philos. Mag. A* **77**, 1013 (1998), <https://doi.org/10.1080/01418619808221225>.

- [31] S. K. Mathis, A. E. Romanov, L. F. Chen, G. E. Beltz, W. Pompe, and J. S. Speck, "Modeling of threading dislocation reduction in growing GaN layers," *J. Cryst. Growth* **231**, 371 (2001), [https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(01\)01468-3](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(01)01468-3).
- [32] X. H. Wu L. M. Brown, D. Kapolnek, S. Keller, B. Keller, S. P. DenBaars, and J. S. Speck., "Defect structure of metal-organic chemical vapor deposition-grown epitaxial (0001) GaN/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>," *J. Appl. Phys.* **80**, 3228 (1996), <https://doi.org/10.1063/1.363264>.
- [33] S. D. Lester, F. A. Ponce, M. G. Craford, and D. A. Steigerwald, "High dislocation densities in high efficiency GaN-based light-emitting diodes," *Appl. Phys. Lett.* **66**, 1249 (1995), <https://doi.org/10.1063/1.113252>.
- [34] J. P. Hirth, J. Lothe, and T. Mura, "Theory of Dislocations (2nd ed.)," *J. Appl. Mech.* **50**, 476 (1983), <https://doi.org/10.1115/1.3167075>.
- [35] A. E. Romanov, W. Pompe, G. Beltz, and J. S. Speck, "Modeling of Threading Dislocation Density Reduction in Heteroepitaxial Layers I. Geometry and Crystallography," *Phys. Status Solidi B* **198**, 599 (1996), <https://doi.org/10.1002/pssb.2221980205>.
- [36] M. Hawkridge, D. Cherns, and T. Myers, "Lateral migration of dislocations in oxygen-doped GaN grown by molecular beam epitaxy," *Appl. Phys. Lett.* **89**, 251915 (2006), <https://doi.org/10.1063/1.2420790>.
- [37] V. Narayanan, K. Lorenz, W. Kim, and S. Mahajan, "Origins of threading dislocations in GaN epitaxial layers grown on sapphire by metalorganic chemical vapor deposition," *Appl. Phys. Lett.* **78**, 1544 (2001), <https://doi.org/10.1063/1.1352699>.
- [38] M. A. Moram, C. S. Ghedia, D. V. S. Rao, J. S. Barnard, Y. Zhang, M. J. Kappers, and C. J. Humphreys, "On the origin of threading dislocations in GaN films," *J. Appl. Phys.* **106**, 073513 (2009), <https://doi.org/10.1063/1.3225920>.
- [39] D. Hull and D. J. Bacon, *Introduction to Dislocations*, 5th ed., Butterworth-Heinemann, Elsevier, Amsterdam, Heidelberg (2011).

# 3 Experimentelle Methoden

## 3.1 Metal-organic vapor phase epitaxy (MOVPE)

Die MOVPE ist eine Wachstumstechnik, die meist bei moderaten Drücken (20-200mbar) betrieben wird, im Gegensatz zu Techniken wie beispielsweise der Molecular Beam Epitaxy (MBE), welche Hochvakuumbedingungen benötigt. Die Elemente Ga, Al und In werden hierbei durch metallorganische Präkursoren bereitgestellt, überwiegend als deren Verbindungen mit tri-methyl (TM) oder tri-ethyl (TE) Gruppen, also TMGa, TEGa, TMAI und TMIIn. Diese befinden sich in temperierten Bubbler. Bei Prozessbeginn wird ein Trägergas (Wasserstoff oder Stickstoff) durch die entsprechenden Bubbler geleitet, was zu einer Anreicherung des Trägergases durch die Metallorganika führt. Im Anschluss wird das Gas in den Reaktor geleitet, wo es als laminarer Gasstrom über eine rotierende und geheizte Probe geführt wird. Daraufhin werden die Edukte thermisch aufgespalten und das epitaktische Kristallwachstum beginnt. Der typische MOVPE Wachstumsprozess ist in Abbildung 3.1 gezeigt.

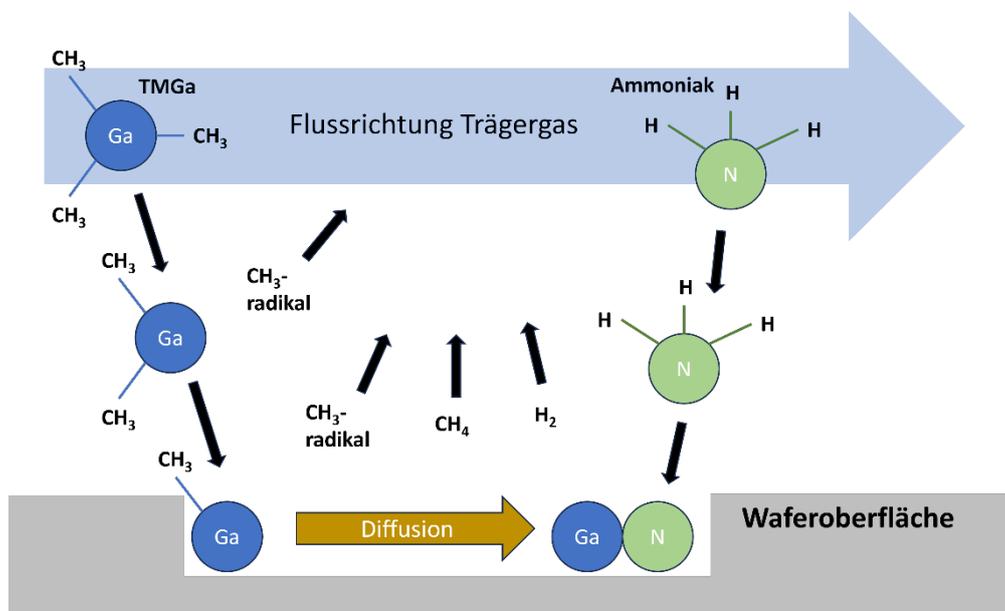
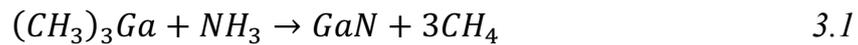


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der Reaktionsetappen in der MOVPE nach Ref. [1]

In der Nähe der geheizten Substratoberfläche findet die Pyrolyse der Ausgangsstoffe statt. Bei geeigneten Wachstumsparametern führen die Reaktanten zum Wachstum einer kristallinen Schicht auf dem Substrat nach Gleichung 3.1. Der für das Wachstum von Gruppe III-Nitriden nötige Stickstoff wird durch Ammoniak (NH<sub>3</sub>) bereitgestellt. Die vereinfachte Bruttoreaktionsgleichung kann wie folgt formuliert werden:



Neben dem Druck und der zur Verfügung gestellten Menge an Ausgangsstoffen gehört die Wachstumstemperatur zu den entscheidenden Prozessparametern (Abbildung 3.2). Da bei der MOVPE nicht die gesamte Reaktorkammer geheizt wird, ist die Oberflächen-Wachstums-Kinetik sehr stark von der Substrat- bzw. Wachstumstemperatur abhängig.

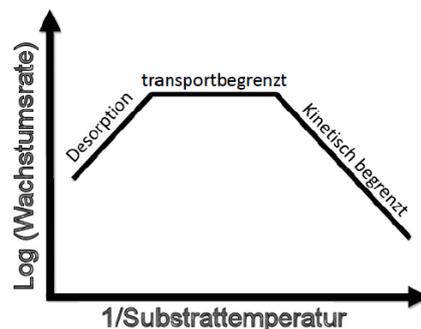


Abbildung 3.2: Wachstumsrate als Funktion der inversen Temperatur nach [2, 3]

Daher ist es wünschenswert die Wachstumstemperatur so einzustellen, dass der Wachstumsprozess lediglich durch die Diffusionsrate der Reaktanten auf der Substratoberfläche bestimmt ist. Dieses Wachstumsregime wird als transportbegrenzter Bereich bezeichnet und ist nur schwach von der Temperatur abhängig. Ist dagegen die Wachstumstemperatur zu niedrig eingestellt, so gelangt man in den kinetisch begrenzten Bereich, bei dem das Wachstum durch eine niedrige Zerlegungsrate der Ausgangsstoffe gehemmt wird. Wird die Temperatur jedoch zu hoch gewählt, treten gehäuft Vorreaktionen auf, was zu einer Zerlegung der Reaktanten führt, bevor diese überhaupt die Substratoberfläche erreichen

(Desorptionsbereich). Trotz der hohen Qualität der Präkursoren ist beim MOVPE Wachstum der Einbau von Verunreinigungen in den Kristall in Form von Störstellen, wie beispielsweise der von C, O oder H, jedoch unvermeidlich.

Die Proben, die in dieser Arbeit untersucht wurden, sind in einem Aixtron 200/4 RF-S MOVPE Reaktor hergestellt worden. Eine schematische Darstellung der Anlage ist in Abbildung 3.3 gezeigt. Die Anlage ist auf 2 Zoll Wafer ausgelegt und kann eine maximale Wachstumstemperatur von 1200°C erreichen.

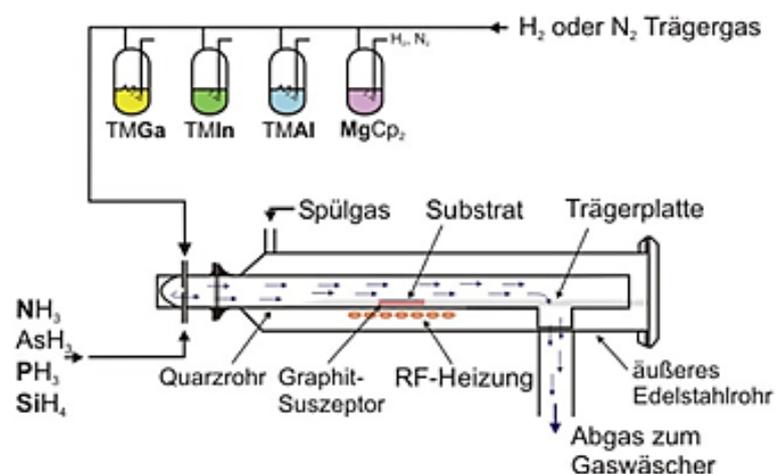


Abbildung 3.3: Schematische Darstellung des MOVPE-Reaktors (entnommen aus Betriebsanweisung MOVPE-Anlage, Prof. Dr. Alois Krost)

### 3.2 Optische in-situ Messungen

Der MOVPE-Reaktor verfügt darüber hinaus über ein in-situ Messgerät EpiCurve TT der Firma LayTec. Damit kann während des Schichtwachstums die Krümmung des Wafers, die Oberflächentemperatur sowie die Dicke der Epitaxieschicht und deren Wachstumsrate gemessen werden. Dies ermöglicht auch eine gute Vergleichbarkeit zwischen den einzelnen Versuchen sowie eine gute Kontrolle des Schichtwachstums zu erhalten und falls notwendig die Wachstumsbedingungen zu ändern. Das in-situ Reflektivitäts-Setup besteht aus drei Strahlen mit den Wellenlängen  $\lambda = 950\text{nm}$  (1.3eV), 633nm (1.96eV) und 405nm (3.06eV), welches über dem rotierenden Substrathalter platziert ist.

Die Schichtdickenmessung basiert auf Fabry-Perot Oszillationen. Dabei wird der Laserstrahl von der Oberfläche der Probe reflektiert, wodurch diese eine Phasenverschiebung zueinander aufweist. Je nach Dicke der Halbleiterschicht kommt es zur destruktiven oder konstruktiven Interferenz und dies zu einer Intensitätsmodulation in den Reflexionstransienten. Die Schichtdicke (Wachstumsrate) kann dann durch die Periode der Intensitätsoszillationen gewonnen werden. Zusätzliche Informationen wie die Materialqualität (Oberflächenrauigkeit) und die Komposition können anhand der Amplitude der Oszillationen abgeschätzt werden.

Die Dicke  $d_{Epi}$  der gewachsenen Schicht wird durch die Anzahl der Fabry-Perot Interferenzen berechnet, wobei die Periode einer Oszillation einer Schichtdicke von  $d_{Epi} = \lambda / (2 \cdot n_{GaN})$  entspricht. Hierbei ist  $n_{GaN}$  der Brechungsindex von GaN. Zusätzlich kann die Schichtqualität anhand konstanter Amplituden der Oszillationen kontrolliert werden [4].

Im verwendeten Setup wird die Wellenlänge 950 nm für die pyrometrische Temperaturmessung des Wafers verwendet („True Temperature“). Die reflektierte Laserintensität bei einer Wellenlänge von 405 nm wird zur Kontrolle der Grenzflächen-qualität sowie Rauigkeit benutzt.

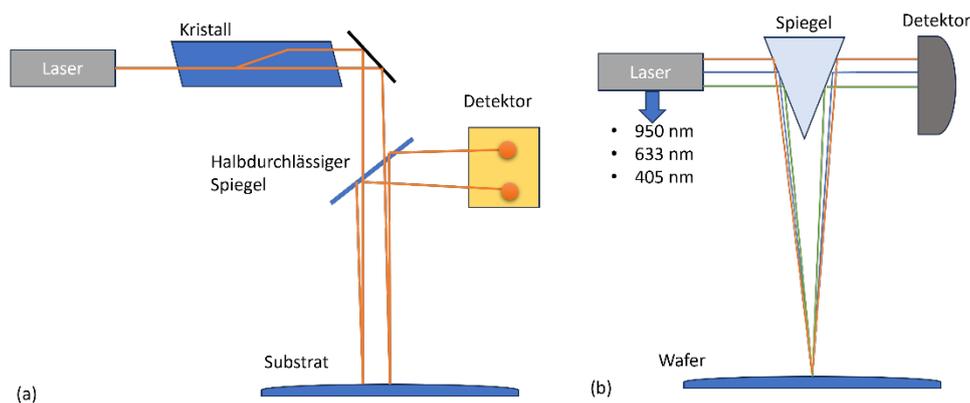


Abbildung 3.4: Schematische Darstellung des Strahlengangs des In-situ Messgeräts. (a) Messung der Waferkrümmung (b) Reflektivität bei 3 Wellenlängen (950nm, 633nm, 405nm)

Eine Änderung der Wafer-Krümmung während des Wachstums liefert Rückschlüsse über den Verspannungszustand des Substrates und der Epi-Schicht. Für die Aufnahme

der Waferkrümmung werden drei Laserstrahlen parallel auf den Wafer fokussiert, wobei diese ein rechtwinkliges Dreieck aufspannen, um die Aspherizität bestimmen zu können. Die reflektierten Strahlen werden dabei über eine CCD-Kamera registriert. Aus der Änderung des Strahlenabstands kann die Krümmung ermittelt werden.

### **3.3 Nomarski-Mikroskop**

Eine einfache und schnelle Charakterisierungsmethode der Oberflächenmorphologie von Halbleiterschichtstrukturen ist das Nomarski- bzw. Interferenzkontrastmikroskop. Es liefert erste Informationen über die Probenoberfläche sowie Morphologie und dessen Eignung für eine spätere Bauelementprozessierung. Die vertikale Auflösung ist hierbei kleiner als die Wellenlänge des eingestrahnten Lichtes, wodurch sich diese Methode gut eignet um Höhenkontraste, die durch Rauigkeiten oder Wachstumsstufen verursacht werden, zu beobachten. Die gute Höhengauflösung wird erreicht, indem das Beleuchtungsstrahlbündel mittels eines Nomarski-Prismas in zwei parallele Teilstrahlen aufgespaltet wird, welche senkrecht zueinander polarisiert sind. Die beiden Teilstrahlen treffen daraufhin parallel auf die Oberfläche auf, wobei der Versatz dieser beiden Strahlen kleiner als die Auflösungsgrenze des Mikroskopobjektivs sein sollte. Nach dem Auftreffen werden die beiden reflektierten Strahlbündel wieder zusammengefügt. Der Bildkontrast entsteht dabei durch die Interferenz der beiden Teilstrahlen, welcher durch die unterschiedlichen optischen Weglängen verursacht wird. Der Strahlengang ist in Abbildung 3.5 schematisch dargestellt. Für weiterführende Literatur ist auf Ref [5] verwiesen.

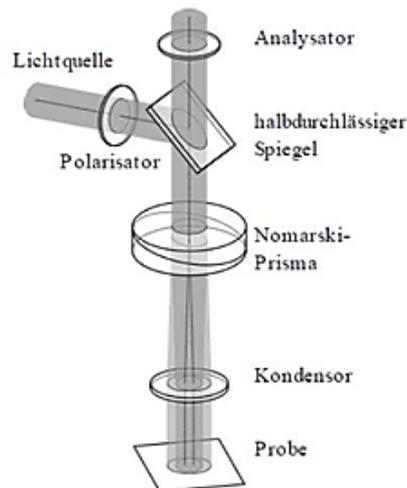


Abbildung 3.5: Schematische Darstellung des Strahlengangs eines Nomarski-Mikroskops [6]

Die Aufnahme der Bilder erfolgte mittels einer AxioCamMRC5 Kamera der Firma Zeiss.

### 3.4 Atomkraftmikroskop (AFM)

Eine Methode zur Oberflächencharakterisierung ist das Atomkraftmikroskop (AFM, engl. Atomic Force Microscope), welches durch Binnig, Quate, und Gerber von der Stanford University und IBM im Jahre 1986 [7] erfunden wurde. Mittels AFM kann eine Analyse der Oberflächenmorphologie im nm Maßstab durchgeführt werden. Dadurch können Informationen über Versetzungen, die Homogenität der untersuchten Oberfläche sowie die rms (engl. root mean square) Rauigkeit erhalten werden. Die Funktionsweise des AFMs ist in Abbildung 3.6 schematisch dargestellt. Eine idealerweise atomare Spitze, die an einem flexiblen Hebelarm (Cantilever), meist aus Silizium gefertigt, angebracht ist, rastert die Probenoberfläche zeilenweise ab. Ein Laserstrahl wird auf den Cantilever gerichtet und die Reflexion des Lasers wird auf einen Positionsdetektor gelenkt. Die Auslenkung des Cantilevers wird durch den Detektor gemessen und in ein Bild umgewandelt, das die Topographie der

Probenoberfläche darstellt. Für eine genauere Funktionsweise ist auf Ref. [8] verwiesen.

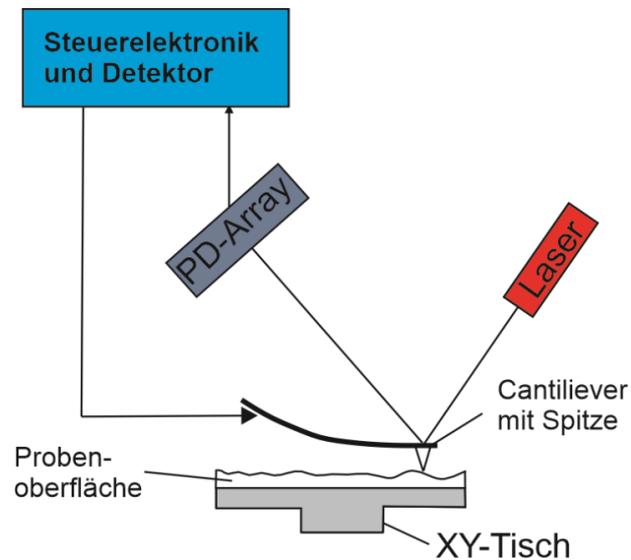


Abbildung 3.6: Schematische Darstellung des Funktionsprinzips eines Atomkraftmikroskops

Es wurde das Atomkraftmikroskop Dimension 3100 der Firma Digital Instruments Veeco Metrology Group für die Messungen verwendet.

### 3.5 Field Emission Raster Electron Microscope (FE-REM)

Beim FE-REM (engl. field emission raster electron microscope) wird die Probenoberfläche mittels eines fokussierten Elektronenstrahls abgerastert. Der Vorteil beim FE-REM gegenüber einem REM ist die deutlich kleinere Strahlbreite, jedoch auf Kosten eines stark reduzierten Strahlstroms. Bei den in dieser Arbeit gezeigten Bildern handelt es sich um SE-Aufnahmen. In diesem Modus werden nur die Sekundärelektronen detektiert. Die kinetische Energie der Elektronen ist hierbei geringer als die Energie der gestreuten Primärelektronen, wodurch lediglich oberflächennah erzeugte Elektronen die Probe verlassen können. Die in dieser Arbeit gezeigten FE-REM Bilder wurden mit einem Hitachi S4800 Rasterelektronenmikroskop durch Dr. Hempel erstellt.

### **3.6 Scanning Transmission Electron Microscope (STEM)**

Für eine weiterführende Untersuchung der Versetzungsdichte sowie -verteilung wurden Querschnitt STEM (engl. scanning transmission electron microscope) Bilder im Hellfeld (BF, engl. Bright Field) sowie im hochwinkligen Dunkelfeld (HAADF, engl. high annular angle dark field) Kontrast Modus erstellt. Im Unterschied zum konventionellen TEM bei dem ein Primärstrahl aus parallelen Elektronen benutzt wird, wird beim STEM ein konvergierender Strahl verwendet. Mit diesem Elektronenstrahl wird die Probe abgerastert. In BF-Modus wird nur der direkte Elektronenstrahl, der durch die Probe tritt, registriert und formt das Bild. Dadurch erscheinen Defekte, aufgrund der Streuung der Elektronenstrahls an diesen, dunkel in Bild. Im HAADF Detektor werden Elektronen detektiert, die in einem größeren Winkel um das Zentrum der optischen Achse gestreut werden. Hierdurch erscheinen Defekte heller und der Hintergrund dunkler. Mit der STEM-HAADF Abbildung lassen sich Variationen in der Komposition besser sichtbar machen, da der Streuwinkel des Elektronenstrahls von der Ordnungszahl abhängt [9].

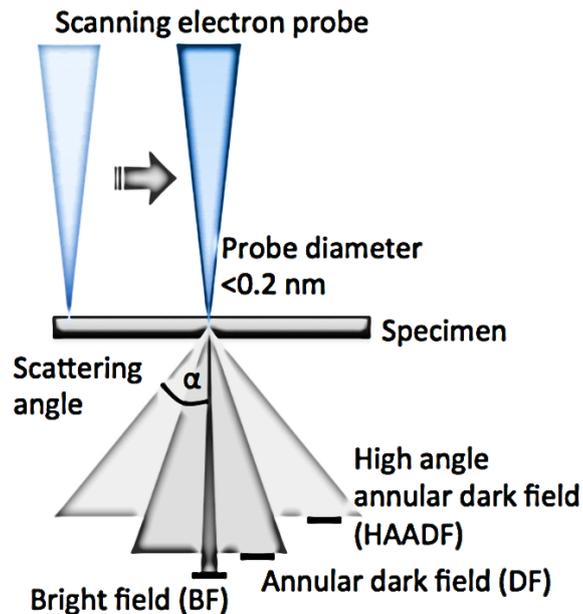


Abbildung 3.7: Schematische Darstellung der Anordnung der Probe und der Strahldetektion beim STEM [10]

Die Präparation erfolgte mittels Dünnschlifftechnik und Ar-Ionenätzung. Die Bilder wurden mittels eines STEM Tecnai F20(FEG) der Firma Fei erstellt. Durchgeführt wurden diese Messungen von Dr. Veit.

### 3.7 Photolumineszenzspektroskopie (PL)

Die Photolumineszenzspektroskopie wurde verwendet, um die extrinsischen Punktdefekte von GaN zu untersuchen. Diese Defekte beeinflussen sowohl die Kristallqualität als auch die elektrischen und optischen Eigenschaften. Bei der PL werden Proben mit Photonen bestrahlt, deren Energien mindestens der Bandlücke  $E_G$  des zu untersuchenden Halbleiters entsprechen ( $E_G \leq h\nu$ ). Bei der Absorption werden Elektron-Loch-Paare erzeugt. Elektronen werden aus dem Valenzband ins Leitungsband angeregt, wodurch Löcher im Valenzband entstehen. Aus diesem Nichtgleichgewichtszustand gelangt der Halbleiter durch Relaxations- sowie Rekombinationsprozesse wieder in seinen Gleichgewichtszustand. Zunächst erfolgt

eine Thermalisierung der Ladungsträger. Dabei gelangen die Elektronen und Löcher durch Streuung an Phononen in die Nähe der entsprechenden Bandkanten. Von dort aus beginnen die Rekombinationsprozesse. Das durch strahlende Rekombination emittierte Licht wird spektral aufgelöst detektiert. Neben der bandkantennahen Lumineszenz können strahlende Übergänge analysiert werden, die durch tiefe Störstellen verursacht werden. Dies ermöglicht eine detaillierte Untersuchung der Defekte und ihrer Auswirkungen auf die Materialeigenschaften (Abbildung 3.8).

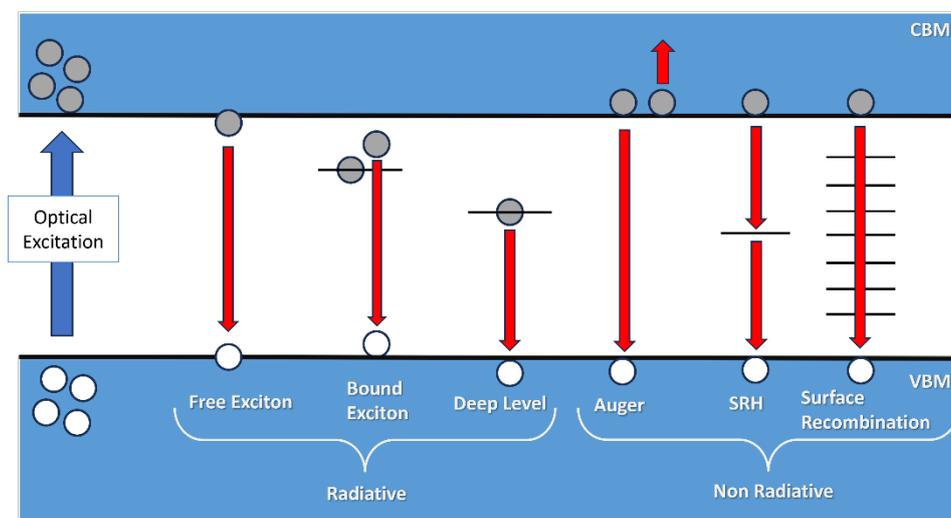


Abbildung 3.8: Schematische Darstellung von möglichen PL-Rekombinationsprozessen. Strahlende Rekombination: Freie Exzitonen (engl. Free Excitons, FX), gebundene Exzitonen (engl. Bound Excitons), tiefe Störstellen (engl. Deep Levels). Nicht-strahlende Rekombinationen: Auger, SRH-Rekombination (engl. Shockley-Read-Hall), Oberflächenrekombination (engl. Surface Recombination), VBM (engl. Valence Band Maximum), CBM (engl. Conduction Band Minimum, das angeregte Elektron fällt vom CBM zurück zum VBM)).

Die gemessenen optischen Übergänge sowie die Position und Form der Lumineszenzbanden geben dabei Hinweise auf die kristalline Qualität sowie die Häufigkeit und die Art des Defekts [11]. Zusätzlich konnte durch das Herabsenken der Probertemperatur auf bis zu 10 K eine detailliertere Störstellenanalyse durchgeführt werden. In dieser Arbeit wurden mittels PL GaN:C sowie GaN:C,Si Schichten untersucht. Insbesondere der Einfluss von Kohlenstoff auf die gelbe und blaue Lumineszenz (YL bzw. BL) in MOVPE gezüchtetem GaN konnte damit untersucht

werden. Die Anregung erfolgte bei 10 K zum einen mit einem HeCd Laser mit einer Wellenlänge von 325 nm. Zum anderen wurden leistungsabhängige PL Messungen bei Raumtemperatur (RT) mit einem wellenlängenvervierfachen YAG:Nd Laser mit einer Photonenenergie von 4.6597 eV (266 nm) durchgeführt. Die verschiedenen Leistungen wurden durch den Einschub von Neutraldichtefiltern realisiert. Die maximale Leistung betrug hierbei 100 kW/cm<sup>2</sup>. Die leistungsabhängigen PL-Messungen wurden durch Prof. Dr. Zahid Usman durchgeführt.

### **3.8 Hochauflösende Röntgendiffraktometrie (HRXRD)**

Die hochauflösende Röntgendiffraktometrie (HRXRD, engl. high-resolution X-ray diffraction) ist eine zerstörungsfreie Methode, um kristallographische Eigenschaften von epitaktischen Schichten zu untersuchen. Dabei werden Röntgenstrahlen an den Gitteratomen (streng genommen an der Elektronenhülle bzw. der Elektronendichteverteilung) gebeugt. Durch die winkelabhängige Detektion der dadurch entstehenden Interferenzmuster können Informationen über die Kristallqualität, Schichtdicke, Verspannungszustand und die Komposition (von z.B. Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/GaN und Al<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>N/GaN Heterostrukturen) erhalten werden. Für eine exakte Beschreibung der Wechselwirkungen von Röntgenstrahlen in einem Kristall wird die dynamische Beugungstheorie verwendet. Die theoretischen Grundlagen hierfür sind in Ref [12, 13] zu finden. Eine einfache Veranschaulichung zur Bestimmung der Gitterebenen eines Kristalls mittels Röntgenstrahlen ist durch das Braggsche Gesetz gegeben [14]:

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad 3.2$$

Hierbei ist  $n$  die Beugungsordnung,  $d$  der Netzebenenabstand zwischen zwei Kristallebenen,  $\lambda$  die Wellenlänge des primären Röntgenstrahls und  $\theta$  dessen Einfallswinkel (siehe Abbildung 3.9).

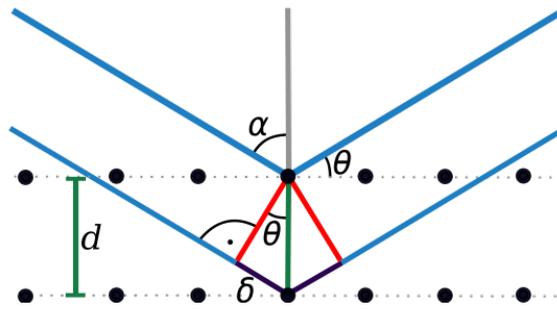


Abbildung 3.9: Darstellung der Beugungsgeometrie

Der symmetrische  $\theta/2\theta$  Scan am (0002) GaN Reflex liefert Informationen über den Netzebenenabstand, woraus die c-Gitterkonstante, der Verspannungszustand sowie bei einer ternären Schicht die Komposition bestimmt werden können. Der Strahlengang ist schematisch in Abbildung 3.10 gezeigt. Bei dünnen Schichtensystemen hoher Kristallqualität kann darüber hinaus anhand von Kiessig-Oszillationen [15] die Schichtdicke ermittelt werden.

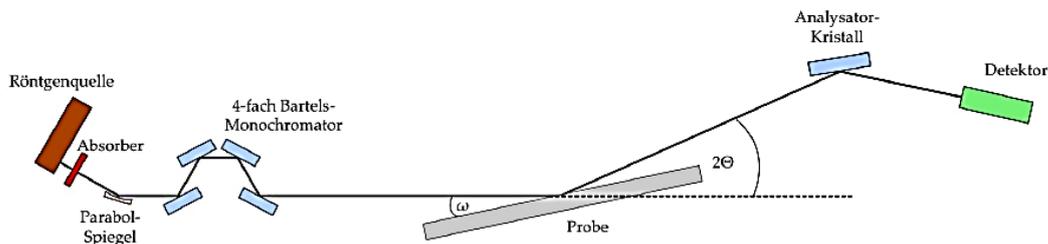


Abbildung 3.10: Darstellung des Strahlengangs für  $\theta/2\theta$  Messungen

Die in-plane Gitterkonstante kann durch einen symmetrischen  $\theta/2\theta$  Scan am  $(10\bar{1}0)$  GaN Reflex unter streifendem Einfall (GIID, engl. grazing incidence in plane X-ray diffraction) ermittelt werden. Die Messungen wurden an einem Diffraktometer Seifert XRD 3003 unter Verwendung von  $\text{Cu K}\alpha_1$  Strahlung durchgeführt.

Durch  $\omega$ -Scans am (0002) sowie  $(10\bar{1}0)$  GaN Reflex können Aussagen über die Kristallqualität getroffen werden. Ausgehend vom Mosaik-Modell liefert die Bestimmung der Halbwertsbreite (FWHM, engl. full width half maximum) des  $\omega$ -Scans am (0002) GaN Reflex (tilt) die Dichte an Schraubenversetzungen und am  $(10\bar{1}0)$  GaN Reflex (twist) die Stufenversetzungsdichte im Bereich von  $\sim 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . Die Umrechnung ergibt sich durch die Anwendung folgender Gleichungen [16]:

$$\rho_S = \frac{\alpha_{\text{tilt}}^2}{4.35 \cdot b_c^2} \quad 3.3$$

$$\rho_E = \frac{\alpha_{\text{twist}}^2}{4.35 \cdot b_a^2} \quad 3.4$$

Dabei sind  $\rho_S$  und  $\rho_E$  die Schrauben- bzw. Stufenversetzungsdichte,  $\alpha_{\text{tilt}}$  und  $\alpha_{\text{twist}}$  die Halbwertsbreiten der entsprechenden  $\omega$ -Scans und  $b_c$  sowie  $b_a$  die jeweiligen Burgersvektoren in GaN.

### 3.9 Röntgenreflektometrie (XRR)

Die Röntgenreflektometrie (XRR, X-ray Reflectivity) gehört zu den zerstörungsfreien Methoden, die es ermöglicht sehr dünne Schichten sowie Schichtsysteme zu charakterisieren. Der schematische Aufbau ist in Abbildung 3.11 gezeigt. Der Röntgenstrahl wird unter einem flachen Winkel auf die Probe gestrahlt, wobei der spekulär reflektierte Anteil in einem Raumwinkel von  $2\theta$  detektiert wird.

Da Röntgenwellen in Festkörpern eine Brechzahl  $n$  aufweisen, welche immer kleiner als eins ist, ist Luft/Vakuum das optisch dichtere Medium. So liegt beispielsweise der Winkel der Totalreflexion bei gitterangepasstem AlInN im Bereich von  $\omega_{\text{krit.}}^{\text{AlInN}} \approx 0.3^\circ$ , wodurch nahezu die gesamte Strahlung reflektiert wird, falls der Einfallswinkel unterhalb dieses kritischen Winkels ( $\omega < \omega_{\text{krit.}}$ ) liegt.

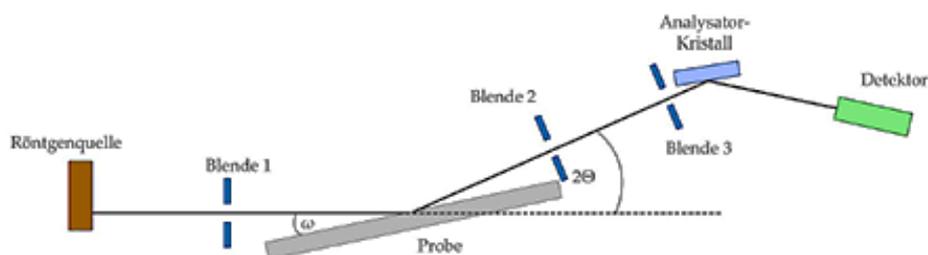


Abbildung 3.11: Schematische Darstellung des verwendeten XRR-Aufbaus

Im Falle eines Schichtsystems (Abbildung 3.12) dringt der Röntgenstrahl bei einem Einfallswinkel von  $\omega > \omega_{krit.}$  in die erste Schicht ein und kann, falls die Bedingung  $n_2 < n_3$  erfüllt ist, an der Grenzfläche zur zweiten Schicht reflektiert werden. Durch die mehrfache Reflexion innerhalb der Schicht entstehen Interferenzmuster [15].

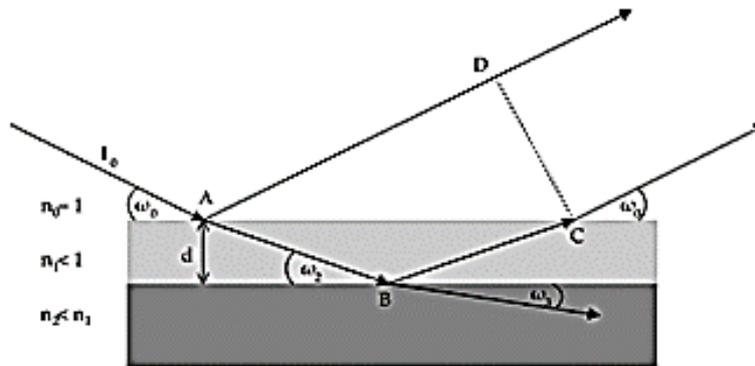


Abbildung 3.12: Verlauf des Strahlengangs bei Reflexion und Brechung an einer dünnen Schicht

Hierdurch lassen sich Informationen über Rauheit und Dichte, aber vor allem die Schichtdicke  $d_{Epi}$  erhalten, welche über folgende Gleichung näherungsweise, bestimmt werden kann:

$$d_{Epi} \approx \frac{\lambda}{2(\Theta_{n+1} - \Theta_n)} \quad 3.5$$

Hierbei ist  $\Theta_{n+1} - \Theta_n$  der Abstand zwischen zwei Modulationen. Im Allgemeinen wird jedoch der Parratt-Algorithmus [17] verwendet, um die spekuläre Reflexion eines Einschichtsystems sowie die einer mehrschichtigen Probenstruktur zu berechnen, um dann, durch den Vergleich mit der Messung Einflussgrößen wie die Schichtdicke zu bestimmen. Die Schichtdickenauflösung liegt bei  $\sim 0.2$  nm. Durch das charakteristische Abklingen des Kurvenverlaufs ist es darüber hinaus möglich die rms Rauigkeit einer Zwischenschicht zu ermitteln, jedoch kann hierbei nicht zwischen chemischer und physikalischer Rauheit unterschieden werden.

### **3.10 Sekundärionenmassenspektrometrie (SIMS)**

Zur Bestimmung von Dotierkonzentrationen sowie zur Quantifizierung von Dotierprofilen in Bezug auf Anströmverhalten und Verschleppungserscheinungen der Dotanden sind SIMS-Tiefenmessungen essenziell. Die hierdurch gewonnenen Informationen tragen wesentlich dazu bei die elektrischen sowie optischen Eigenschaften des Materials besser zu verstehen. Bei diesem Verfahren werden monoenergetische Primärionen auf eine Probenoberfläche fokussiert, wodurch eine definierte Fläche abgerastert und Probenmaterial abgetragen wird. Ein geringer Teil der hierbei herausgelösten Atome und Komplexe werden dadurch ionisiert. Diese Sekundärionen können dann mit Hilfe eines Massenseparators (z.B. Quadrupol-, Sektorfeldmassenanalysator) und im weiteren Verlauf durch einen geeigneten Detektor (z.B. einem Channeltron) als Stromimpuls registriert werden. Die Nachweisempfindlichkeit liegt im Allgemeinen im ppm Bereich. Für diese Arbeit stand eine Atomika 6500 Quadrupol SIMS zur Verfügung. Als Primärionenquelle konnten  $\text{Cs}^+$  sowie  $\text{O}_2^+$  Ionen verwendet werden.

Die Wahl der Primärionenquelle hängt im Wesentlichen von den Eigenschaften des zu detektierenden Elements sowie der Probenmatrix (z.B. GaN) ab. So treten beim Sputterprozess die Elemente Kohlenstoff und Silizium vorzugsweise als negative Sekundärionen auf. Durch die Verwendung von Cäsium als Primärionenquelle kann hierbei die Sekundärionenausbeute im Vergleich zu Sauerstoff erhöht werden.  $\text{Cs}^+$  führt zu einer Herabsetzung der Austrittsarbeit des Probenmaterials, wodurch sich die Nachweisempfindlichkeit von negativen Sekundärionen steigern lässt.

Für Elemente die vorwiegend als positive Sekundärionen austreten, wie beispielsweise Fe oder Mg ist  $\text{O}_2^+$  die geeignete Primärionenquelle. Jedoch lassen sich solche Elemente auch mit  $\text{Cs}^+$  durch die sog.  $\text{MCs}^+$  Methode [18] detektieren. Dabei steht M für das nachzuweisende Element im neutralen Ladungszustand, welches durch den Sputterprozess herausgelöst wird. Dieses kann sich mit einem zurück gesputterten Cs Ion verbinden, wodurch es als positives Sekundärion detektiert werden kann. Bei einem Quadrupolmassenseparator werden die Sekundärionen durch ihr Masse-zu-Ladungsverhältnis ( $m/e$ ) getrennt. Das kann jedoch dazu führen, dass verschiedene

Moleküle bzw. Komplexe mit gleicher Massenzahl ionisiert und ein nahezu gleiches Masse-zu-Ladungsverhältnis aufweisen, wie das eigentlich zu detektierende Element. Dieses Phänomen wird als Masseninterferenz bezeichnet, wodurch die Nachweisgrenze verringert wird oder es zu Fehlinterpretationen sowie zu einer falschen Konzentrationsbestimmung führen kann. Eine wichtige Kenngröße eines Massenseparators ist daher die Massenauflösung  $m/\Delta m$ . Ein Quadrupol besitzt eine Massenauflösung im Bereich von  $10^2$ - $10^3$  wohingegen der Wert bei einer Magnetfeldsims bei  $m/\Delta m \sim 10^4$  liegt [19]. Dadurch können beim Letztgenannten sogar ionisierte Teilchen trotz gleicher Massenzahl aufgrund unterschiedlicher Bindungsenergien getrennt werden.

Die Anforderungen an ein optimales SIMS-Tiefenprofil sind im Allgemeinen eine hohe Sensitivität bei gleichzeitig hoher Tiefenauflösung. Grundsätzlich sind beide Anforderungen zusammen nicht zu erfüllen, jedoch kann ein Optimum bzw. Kompromiss gefunden werden, je nach Zielsetzung bzw. Schwerpunkt der Messung. Ein SIMS-Tiefenprofil wird dadurch erzielt, dass ein fokussierter Primärionenstrahl durch ein rasterförmiges Sputtern einen Krater formt, welcher idealerweise steile Flanken sowie eine homogene Tiefe auf der gesamten Kraterfläche besitzt. Der Ionenstrahl wird durch Blenden sowie elektrostatische Linsen auf eine idealerweise kreisrunde Fläche mit einem Durchmesser  $d$  und einer homogenen Intensitätsverteilung konzentriert. Da dies in der Praxis nicht vollständig realisierbar ist, treten verschiedene Randeffekte auf, die in Abbildung 3.13 dargestellt sind.

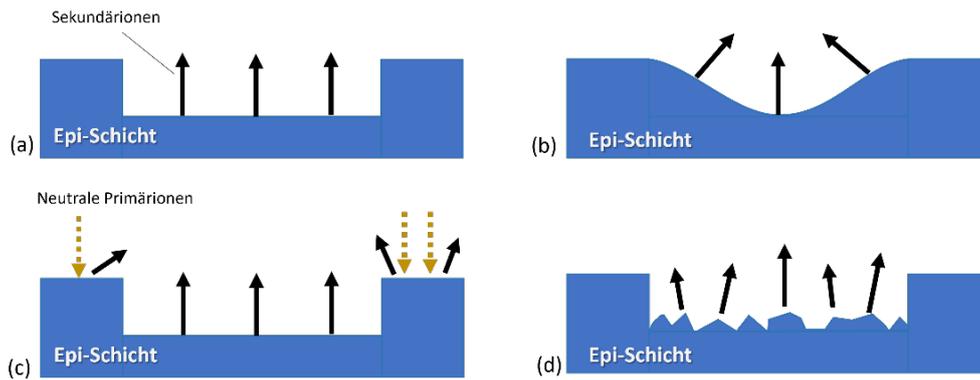


Abbildung 3.13: Verschiedene Kraterrandeffekte nach Ref. [20] (a) idealer Sputtergraben, (b) Primärstrahl nicht optimal justiert, (c) Verfälschung des Signals durch neutrale Primärionen, durch eine fehlerhafte Justierung des Strahlengangs, (d) Inhomogene Schichtstruktur

Infolgedessen können Sekundärionen aus dem Randbereich mitdetektiert werden, was sowohl das Detektionslimit als auch die Tiefenauflösung mindert. Randeffekte können jedoch reduziert werden je besser die Bedingung  $d \ll b$  erfüllt ist, wobei  $b$  die Breite des Kraters darstellt. Aus praktischen Gründen jedoch, lassen sich sowohl  $d$ , welcher durch den Strahldurchmesser direkt über der Krateroberfläche gegeben ist, als auch die Kraterbreite nicht beliebig variieren. Des Weiteren hat eine starke Verkleinerung des Strahldurchmessers, was durch entsprechende Blenden im Strahlengang umgesetzt wird, eine Reduzierung des Ionenstroms zur Folge. Nicht zuletzt nimmt durch eine Vergrößerung des Kraters der Einfluss von Probeninhomogenitäten (Abbildung 3.13) zu, wodurch sich die Tiefenauflösung ebenfalls verringert.

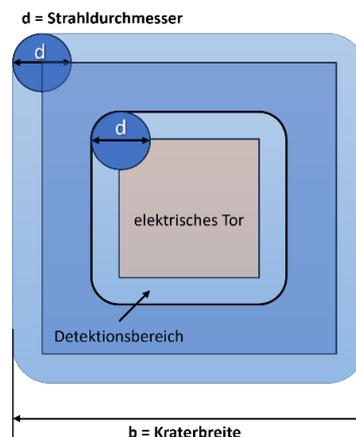


Abbildung 3.14: Strahldurchmesser und elektrisches Tor nach Ref. [20]

Um dennoch auf einfache Art die Kraterrandeffekte zu minimieren, kann der Detektionsbereich durch ein einstellbares elektrisches Tor (Electronic Gate) verändert werden, was in Abbildung 3.14 gezeigt ist. Dadurch werden nur die Sekundärionen registriert, die aus dem mittleren Bereich des Kraters stammen. Das Tor  $g$  kann beschrieben werden durch:

$$\frac{a}{A} = g^2 \quad 3.6$$

Dabei ist  $A$  die Gesamtfläche des Kraters und  $a$  die detektierte Fläche innerhalb von  $A$ . Zusätzlich ist ein stabiles Ultrahochvakuum notwendig, um die Streuung der Ionen an Gasmolekülen zu verhindern und um eine Belegung der Probenoberfläche durch Restgase zu minimieren, da diese zu einer Veränderung der Oberflächenzustände führen können, was sich auf die Sekundärionenausbeute auswirkt. Weil die Restgase zum großen Teil aus Kohlenwasserstoffen beliebiger Massenzahl bestehen, wird hierdurch auch die Nachweisempfindlichkeit verschlechtert. Um die Einflussfaktoren auf die Sensitivität und die Tiefenauflösung besser zu verstehen, erfolgt im Weiteren eine phänomenologische Herleitung:

Die Intensität des Primärionenstrahls  $I_P$  kann auf einfache Weise über eine Strommessung ermittelt werden. Dabei wird entweder ein Faradaycup verwendet oder die Messung erfolgt direkt am metallischen Probenhalter. Die Anzahl der Primärionen  $N_P$  kann damit über den gemessenen Strom beschrieben werden durch:

$$N_P = \frac{I_P}{e} \left[ \frac{\text{Primärionen}}{s} \right] \quad 3.7$$

Hierbei ist  $e$  die Elementarladung. Die Ausbeute der Sekundärteilchen durch den Sputterprozess, d.h. wie viele Atome pro Primärion entstehen, wird durch die Sputterausbeute  $Y$  beschrieben. Die Sputterausbeute ist von vielen Faktoren abhängig, beispielsweise durch die Oberflächenbindungsenergie, die Art des Primärstrahls, die Beschleunigungsspannung, den Einfallswinkel und das Matrixelement der Probe. Der Koeffizient  $\alpha$  gibt an wieviel Ionen pro gesputtertem Atom entstehen und beschreibt

damit die Ionisationswahrscheinlichkeit. Die Anzahl der Sekundärionen  $N_S$  kann hiermit beschrieben werden durch:

$$N_S = \alpha \cdot Y \cdot \frac{I_P}{e} \quad \left[ \frac{\text{Sekundärionen}}{s} \right] \quad 3.8$$

Ein Bruchteil der gesamten Sekundärionen beinhalten das gesuchte Element X, dessen Anzahl durch  $N_S(X)$  gegeben wird:

$$N_S(X) = \gamma(X) \cdot N_S \quad \left[ \frac{\text{Sekundärionen}(X)}{s} \right] \quad 3.9$$

Hierbei ist  $\gamma(X)$  der Wahrscheinlichkeitskoeffizient für das Element X. Für die Quantifizierung mittels SIMS wird ein linearer Zusammenhang zwischen der Konzentration des Elementes  $C(X)$  und der Anzahl an Sekundärionen des gleichen Elements  $N_S(X)$  angenommen. Dies bezogen auf die Matrixkonzentration  $C_{Matrix}$  sowie auf die Gesamtzahl der entstandenen Sekundärionen  $N_S$  folgt die Relation:

$$\frac{C(X)}{N_S(X)} = \frac{C_{Matrix}}{N_S} \quad 3.10$$

Daraus ergibt sich für die Elementkonzentration  $C(X)$  durch Gleichung 3.8:

$$C(X) = \frac{e \cdot C_{Matrix} \cdot N_S(X)}{\alpha \cdot Y \cdot I_P} \quad \left[ \frac{\text{Atome des Elements } X}{\text{cm}^3} \right] \quad 3.11$$

Unter Berücksichtigung der Sputterzeit eines Detektionskanals  $t_{kanal}$ , des Tors  $g$  sowie des gerätespezifischen Transmissionskoeffizienten  $\varepsilon(x)$  folgt für die Anzahl der detektierten Ionen  $Z$ :

$$Z = N_S(X) \cdot t_{kanal} \cdot g^2 \cdot \varepsilon(X) \quad [\text{Sekundärionen}] \quad 3.12$$

Unter der Annahme, dass kein Rauschen existiert, folgt für die Detektion eines Ions  $Z = 1$  aus Gleichung 3.12:

$$N_S(X)_{min} = \frac{1}{t_{Kanal} \cdot g^2 \cdot \varepsilon(X)} \quad 3.13$$

Damit folgt mit Gleichung 3.11 für die geringste nachweisbare Elementkonzentration:

$$C(X)_{min} = \frac{C_{Matrix} \cdot e}{\alpha \cdot Y \cdot I_P \cdot t_{Kanal} \cdot g^2 \cdot \varepsilon(X)} \quad \left[ \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3} \right] \quad 3.14$$

Daraus folgt, dass, um die Nachweisgrenze zu steigern, die Intensität des Primärionenstrahls erhöht und/oder die Messzeit sowie Detektionsfläche maximiert werden müssen. Inwieweit diese Parameter die Tiefenauflösung beeinflussen, wird im Folgenden gezeigt.

Die gesamten durch den Sputterprozess generierten Sekundärteilchen  $N_S^{Teilchen}$  können analog zu Gleichung 3.8 beschrieben werden, jedoch ohne den Ionisationskoeffizienten  $\alpha$ , da nun alle Sekundärteilchen betrachtet werden müssen:

$$N_S^{Teilchen} = Y \cdot \frac{I_P}{e} \quad \left[ \frac{\text{Sekundärteilchen}}{s} \right] \quad 3.15$$

Die zeitliche Volumenänderung  $\dot{V}$  des Kraters in Richtung  $z$  (senkrecht zu Oberfläche) bei konstanter Kraterfläche  $A$  erfolgt durch das Sputtern der gesamten Sekundärteilchen  $N_S^{Teilchen}$  und kann beschrieben werden durch:

$$\dot{V} = A \cdot \dot{z} = \frac{N_S^{Teilchen}}{c} \quad 3.16$$

Hierbei ist  $c$  die Teilchendichte der Probe und  $\dot{z}$  die Sputterrate. Mit Gleichung 3.15 und unter der Annahme, dass sich die Sputterrate während einer Messung nicht ändert, folgt:

$$z(t) = \frac{Y \cdot I_P \cdot t_{Kanal}}{A \cdot c \cdot e} \quad [cm] \quad 3.17$$

Bei der verwendeten SIMS-Anlage können bis zu 12 Kanäle sequenziell angesteuert werden. Die Messzeit kann dabei für jeden Kanal separat eingestellt werden. Die Zeit, die benötigt wird, um alle Kanäle einmal zu durchlaufen wird als  $t_{Zyklus}$  bezeichnet und kann beschrieben werden durch:

$$t_{\text{zyklus}} = \frac{Y \cdot I_P \cdot \sum_i t_{\text{kanal}}(i)}{A \cdot c \cdot e} \quad 3.18$$

Anhand der Gleichung 3.17 bzw. 3.18 ist zu erkennen, dass sich die Tiefenauflösung verbessert, wenn sich der zeitliche Energieeintrag pro Fläche verkleinert. Jedoch wirkt sich eine Reduzierung des Primärionenstrahles und eine geringerer Messzeit oder eine größere Fläche negativ auf die Sensitivität aus. Des Weiteren ist die maximale Tiefenauflösung von der Eindringtiefe der Primärionen bestimmt, welche durch die Masse des Primärions, die Beschleunigungsspannung sowie den Einfallswinkel auf die Probe abhängt. Bei senkrechtem Einfall von  $\text{Cs}^+$  auf GaN mit einer Energie von 15 keV beträgt die Eindringtiefe  $\sim 15$  nm. Somit sind kleinere Sputterraten, welche durch Gleichung 3.17 und 3.18 berechnet werden können, als gemittelte Sputterraten zu verstehen und erhöhen dadurch nicht die Tiefenauflösung. Durch eine Verringerung der Beschleunigungsspannung sowie durch eine Erhöhung des Einfallswinkels kann zwar die reale Tiefenauflösung verbessert werden, jedoch meist auf Kosten der Sensitivität. So führt eine geringere Beschleunigungsspannung zwar zu einer kleineren Eindringtiefe, jedoch führt dies in der Praxis zu einer geringeren Strahlintensität. TRIM (Transport of ions in matter) Simulationen [21] zeigen, dass eine Erhöhung des Einfallswinkels bei konstanter Beschleunigungsspannung zu einer signifikanten Reduzierung der Eindringtiefe führt. Jedoch ist sowohl die Sputterrate als auch der Ionisationskoeffizient  $\alpha$  ebenfalls Winkelabhängig. So steigt zwar die Sputterrate zu einem gewissen Grad an, jedoch sinkt hierbei die Sekundärionenausbeute. Falls zu wenige Sekundärionen gemessen werden und dadurch keine Dotierprofile zu erkennen sind, ist eine hohe Tiefenauflösung irrelevant. Aus diesem Grund muss bei jeder Probe und Zielsetzung der Messung ein Kompromiss zwischen Sensitivität und Tiefenauflösung innerhalb der möglichen Grenzen gefunden werden. Schwerpunkt der SIMS-Messungen für diese Arbeit ist die Charakterisierung von hochisolierenden GaN:C Proben. Die Messung von Kohlenstoff erfolgte mittels  $\text{Cs}^+$  als Primärionenstrahl. Jedoch lässt sich Kohlenstoff in GaN schwer ionisieren, wodurch es zu einer geringen Sekundärionenausbeute und zu einem Detektionslimit im Bereich von  $1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  kommt [22]. Darüber hinaus führt die Belegung der Probenoberfläche durch Restgase zu einem erhöhten Untergrund. Jedoch zeigen

Komplexe wie  $C_xN_x$  eine hohe Elektronenaffinität wodurch sie leichter zu ionisieren sind. Im Falle von CN ist die Elektronenaffinität 3.82 eV [23]. Es konnte gezeigt werden, dass durch die Messung von  $CN^-$  die Sensitivität um mehrere Größenordnungen im Vergleich zur direkten Messung von  $C^{12}$  verbessert werden konnte. In Ref [22] wurden die möglichen Bildungswege von CN durch den Sputterprozess untersucht. Drei mögliche Entstehungswege wurden hierbei in Betracht gezogen. Bei den Prozessen  $C^- + N \rightarrow CN^-$  sowie  $C + N^- \rightarrow CN^-$  werden die Atome herausgelöst und rekombinieren nach Verlassen der Probe zu  $CN^-$ . Da jedoch C wie auch N schwierig zu ionisieren sind wurde gefolgert, dass es als Komplex herausgelöst wird. Eine Variation des Drucks zeigte keinen signifikanten Einfluss auf die Sensitivität von  $CN^-$ , im Gegensatz zu einer direkten Messung von  $C^-$  Ionen, wodurch die Nachweisempfindlichkeit durch die Absorption von Restgasen verschlechtert wurde. Die Detektion von Komplexen, welche Stickstoff enthalten, kann ebenfalls auf Silizium angewendet werden, wodurch sich die Nachweisempfindlichkeit von  $Si_xN_x$  im Vergleich zur Detektion von  $Si^-$  erhöht [18, 20, 24]. Sämtliche Tiefenprofile wurden mittels Negativ-Ionen-Modus mit  $Cs^+$  als Primärion und einer Beschleunigungsspannung von 15 kV durchgeführt. Der Sputtergraben hatte überwiegend eine Fläche von  $250 \mu m \times 250 \mu m$ , wobei jedoch nur 10% als Detektionsfenster verwendet wurde. Der Strahldurchmesser betrug  $\sim 100$  nm. Die Messungen wurden bei einem Druck im Bereich von  $8 \cdot 10^{-10}$  bis  $2 \cdot 10^{-9}$  mbar durchgeführt. Für die Messungen von hochisolierenden GaN:C Schichten wurden die Proben auf einen extra angefertigten Probenhalter mit Indium befestigt und mit einer  $\sim 20$  nm Titanschicht bedampft, um Aufladungseffekte zu vermeiden. Die Nachweisempfindlichkeit lag bei C und Si bei  $\sim 1 \cdot 10^{17}$  und für Fe bei  $3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . Für die Quantifizierung der C, Si, und Fe-Dotierung wurde die Relative Sensitivity Factor (RSF) Methode verwendet. Dafür wurden zwei Kohlenstoff-Implantationsproben gemessen sowie Stufenproben mit vier unterschiedlichen Dotierhöhen. Durch lineare Regression wurde der entsprechende  $RSF(X)$  Faktor nachfolgender Gleichung ermittelt:

$$C(X) = RSF(X) \cdot \frac{I(X)}{I_{Matrix}} \quad 3.19$$

Dabei ist  $C(X)$  die Konzentration der Spezies  $X$ ,  $I(X)$  die Intensität der Spezies  $X$  und  $I_{Matrix}$  die Matrix.

### 3.11 Hall-Effekt

Für die Bestimmung des Schichtwiderstandes, Ladungsträgerkonzentration, Elektronenmobilität und des spezifischen Widerstands wurde ein RH 2010 Hall Measurement System der Firma PhysTech GmbH verwendet.

Dazu wurde zuerst anhand der vier-kontakt Methode nach van der Pauw [25] der spezifische Schichtwiderstand bestimmt. Durch Anlegen eines Magnetfeld  $B_z$  welches senkrecht zur Oberflächennormalen ausgerichtet ist, wird der Hall-Koeffizient  $R_H$  ermittelt und daraus die Ladungsträgerkonzentration sowie die Beweglichkeit [26].

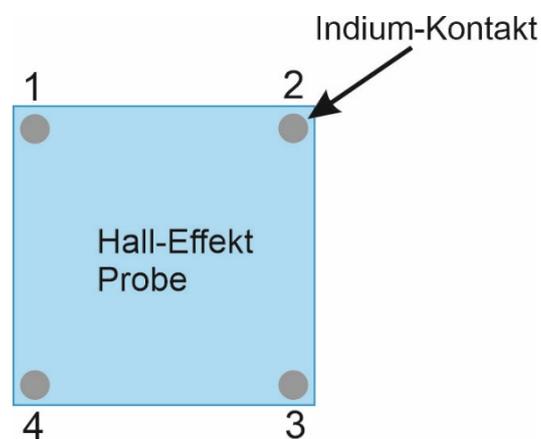


Abbildung 3.15: Probenstruktur ( $1\text{ cm} \cdot 1\text{ cm}$ ) für van der Pauw und Hall-Effekt Messung

Dabei sind folgende Voraussetzungen zu erfüllen: Die Kontakte müssen an den Probenkanten positioniert werden. Die Kontaktgröße sollte klein gegenüber der Probengröße sein, die Dicke der Probe sollte konstant sein und die Oberfläche sollte keine unterbrochenen Gebiete aufweisen. Für die Ohm'sche Kontaktierung wurden Indiumkügelchen jeweils an den Ecken eines ca.  $1\text{ cm} \cdot 1\text{ cm}$  großen Probenstücks platziert und im RTA (engl. Rapid-Thermal-Annealing) erhitzt.

Bei Hall-Effekt Messungen werden Ladungsträger  $I_x$  zwischen zwei gegenüberliegenden Kontakten durch ein Magnetfeld  $B_Z$  welches senkrecht zur Oberflächennormalen ausgerichtet ist, abgelenkt. Die gemessene Querspannung  $U_H$  wird beschrieben durch [26]:

$$U_H = R_H \cdot \frac{I_x \cdot B_Z}{d} \quad 3.20$$

Hierbei ist  $d$  die Schichtdicke und  $R_H$  der Hall-Koeffizient aus dem die Art der Ladungsträger sowie ihre Konzentration hervorgehen. Entsprechend der Ladungsträgersorte folgt für den Hall-Koeffizienten:

$$R_H = \frac{1}{n \cdot e^-} \quad 3.21$$

$$R_H = \frac{1}{p \cdot e^+} \quad 3.22$$

Mit dem spezifischen Widerstand  $\varrho$ , der üblicherweise mit der Methode nach van der Pauw ermittelt wird, folgt für die Beweglichkeit der Elektronen bzw. Defektelektronen:

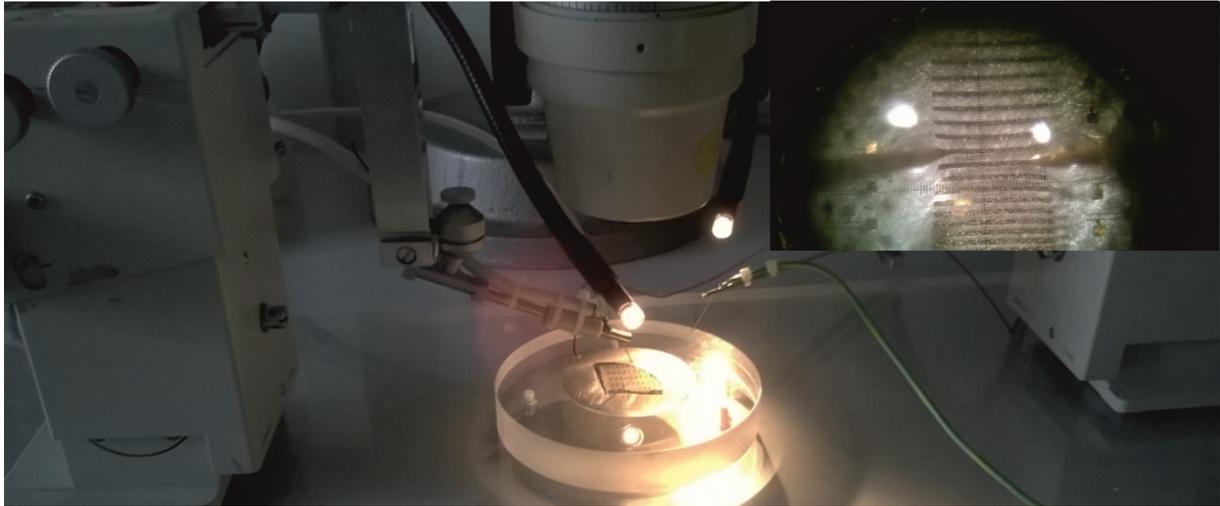
$$\mu_n = \frac{1}{e \cdot \sigma \cdot n} \quad 3.23$$

$$\mu_p = \frac{1}{e \cdot \sigma \cdot p} \quad 3.24$$

Aufgrund der apparativen Ausstattung konnte der spezifische Widerstand an semi-isolierenden und hochisolierenden Proben mit dieser Methode nicht bestimmt werden. Dies geschah anhand von IU-Messungen.

### **3.12 IU- Messungen**

Für die Bestimmung der Spannungsfestigkeit sowie des Leckstromverhaltens von Pufferschichten in Abhängigkeit ihrer Haftstellenkonzentration wurden IU-Kennlinien aufgenommen. Hierzu wurde ein geeigneter Messplatz für den Pufferdurchbruch aufgebaut (Abbildung 3.16). Die notwendige Hochspannung liefert das Keithley High Voltage Power Supply Series 2290-5. Der einstellbare Spannungsbereich liegt bei 30 V bis 5 kV bei einem maximalen Strom von 5 mA. Die Spannungsauflösung beträgt 1 V und einer Stromauflösungsgrenze von 1  $\mu$ A. Da diese Stromauflösung jedoch nicht ausreichte, um eine elektrische Charakterisierung der geringen Leckströme durchzuführen, wurde das Keithley High Voltage Power Supply Series 2290-5 durch eine Keithley 2611B Source Measure Unit (SMU) erweitert. Dadurch wurde eine Stromauflösung von 0.1 nA erzielt. Zur Absicherung der SMU vor Spannungsspitzen wurde das Protection Module Keithley Model 2290-PM-200 in den Aufbau integriert. Jedoch wurde damit der maximal einzustellende Strom auf 1 mA begrenzt. Die Kontaktierung der Proben erfolgte durch Messnadeln bestehend aus Wolfram mit einem Spitzen-Durchmesser von 5  $\mu$ m, die an dafür speziell angefertigten Highvoltage Probes der Firma Creative Device (USA) befestigt wurden.



*Abbildung 3.16: HV-Messplatz für die Messung des lateralen sowie vertikalen Spannungsfestigkeit*

Die Ansteuerung der Messgeräte erfolgt über einen Auswerterechner und ein hierfür angefertigtes LabVIEW Programm. Ein schematischer Aufbau des Messplatzes ist in Abbildung 3.17 dargestellt. Die Messung der Proben kann lateral sowie vertikal erfolgen. Um bei Durchbruchspannungsmessungen Überschläge durch die Luft zwischen den Messnadeln zu vermeiden, wurde das Isolieröl Shell Diala S3 ZX-I Dried verwendet. Es ist ein inhibiertes Isolieröl, hergestellt aus speziell raffinierten Grundölen, mit extrem niedrigem Schwefelgehalt und ohne Zugabe von Additiven.

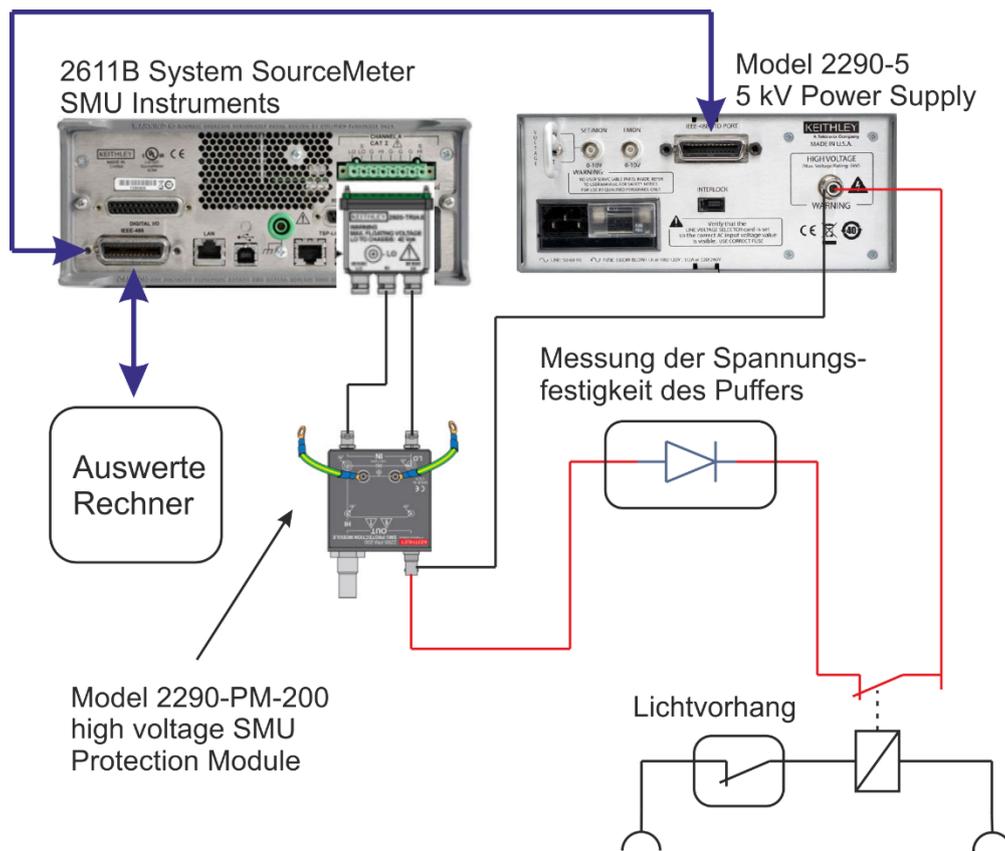


Abbildung 3.17: Schematischer Messaufbau des HV-Messplatzes

Es bietet eine sehr hohe Oxidationsstabilität und sehr gute dielektrische Eigenschaften. Dieses Öl hat den Vorteil gegenüber Fluorinert, welches von vielen anderen Arbeitsgruppen verwendet wird, dass keine Fluorwasserstoffe entstehen, wodurch gesundheitliche Risiken beim Betrieb des Messplatzes minimiert werden und damit die Notwendigkeit von weiteren Sicherheitsmaßnahmen, wie beispielsweise eines Abzugs, entfallen. Die Absicherung des Messplatzes während der Messung erfolgt durch ein Lichtgitter mit einer Auflösung von 35 mm (Handschutz) und einem Spannungsunterbrecher. Weiterhin wurden durch safety-interlocks und Spannungsfreigabe durch einen Schlüsselschalter die Sicherheit für den Anwender erhöht. Für Messungen im Niedervoltbereich sowie die Aufnahme von FET-Kennlinien wurde ein Keithley 4200-SCS Parameter Analyzer verwendet, welcher über eine Stromauflösung von 100 fA verfügt. Der einstellbare Spannungsbereich liegt hierbei bei  $\pm 200 V$ , wodurch die Analyse der Leitungstransporte auch bei negativer Polarität ermöglicht wurde.

Für die Optimierung von elektronischen Halbleiterbauelementen ist ein umfassendes Verständnis der elektronischen Eigenschaften, insbesondere der Leitungsmechanismen sowie Transporteigenschaften, essentiell. Daher werden im Folgenden die relevanten Grundlagen zusammengefasst, welche für die Interpretation der Messergebnisse, die durch die Aufnahme von IU-Kennlinien an verschiedenen Probenstrukturen sowie mit unterschiedlichen Stör- und Haftstellenkonzentrationen erfolgten, benötigt werden.

Das innerelektronische Verhalten wird über die Halbleitergrundgleichungen, basierend auf dem Drift-Diffusions-Model, beschrieben, welche durch ein nichtlineares partielles Differentialgleichungssystem (Poisson-, Transport- und Kontinuitätsgleichung) gegeben ist.

Die Poisson-Gleichung ist gegeben durch:

$$\Delta\phi = -\frac{q}{\epsilon_s\epsilon_0}(p - n + N_D^+ - N_A^- + \rho) \quad 3.25$$

Dabei bezeichnet  $\rho$  eine feste Raumladungsdichte,  $n$  und  $p$  sind freie Elektronen- und Defektelektronendichten,  $N_D^+$  die ionisierte Donatorkonzentration sowie  $N_A^-$  ionisierte Akzeptorkonzentration,  $\phi$  das elektrostatische Potential und  $\epsilon_s$  ist die Permittivität. Für einen nicht entarteten Halbleiter, dessen Dotierkonzentration kleiner als die effektive Zustandsdichte des Leitungsbandes  $N_C$  bzw. des Valenzbandes  $N_V$  ist, kann unter Verwendung der Boltzmann-Statistik die Elektronen- sowie Löcherkonzentration ausgedrückt werden durch:

$$n = N_C e^{\left(\frac{E_C - E_F}{kT}\right)} \quad 3.26$$

$$p = N_V e^{\left(\frac{E_F - E_V}{kT}\right)} \quad 3.27$$

Im Fall eines dotierten Halbleiters mit der Donator-  $N_D$  und Akzeptorkonzentration  $N_A$  kann dessen ionisierte Donator-  $N_D^+$  sowie Akzeptorkonzentration  $N_A^-$  beschrieben werden durch:

$$N_D^+ = \frac{N_D}{1 + g_D e^{\left(\frac{E_F - E_D}{kT}\right)}} \quad 3.28$$

$$N_A^+ = \frac{N_A}{1 + g_A e^{\left(\frac{E_A - E_F}{kT}\right)}} \quad 3.29$$

Dabei ist der Entartungsgrad  $g$  für Donatoren  $g_D = 2$  und der für Akzeptoren  $g_A = 4$ . Die Drift- und Diffusionsvorgänge werden durch folgende Transportgleichungen beschrieben:

$$\vec{J}_p = q \mu_p p \vec{E} - q D_p \nabla p \quad 3.30$$

$$\vec{J}_n = q \mu_n n \vec{E} + q D_n \nabla n \quad 3.31$$

Hierbei sind  $D_p$  und  $D_n$  die Diffusionskonstanten, welche sich für einen nichtentarteten Halbleiter über die Einstein-Nernst-Townsend-Beziehung approximieren lassen:

$$D_p = \left(\frac{k_B T}{q}\right) \mu_p \quad 3.32$$

$$D_n = \left(\frac{k_B T}{q}\right) \mu_n \quad 3.33$$

Die Gesamtstromdichte ist gegeben durch:

$$\vec{J} = \vec{J}_p + \vec{J}_n + \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad 3.34$$

wobei der letzte Term die Verschiebungsstromdichte darstellt. Zeitliche Änderungen des Löcher- und Elektronenstroms in einem Halbleiter können durch die Kontinuitätsgleichungen beschrieben werden:

$$-\frac{\partial n}{\partial t} = (R - G)_n - \frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J}_n \quad 3.35$$

$$-\frac{\partial p}{\partial t} = (R - G)_p - \frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J}_p \quad 3.36$$

Dabei bezeichnet G die Generations- und R die Rekombinationsrate. Wird ein beliebig dotierter Halbleiter aus seinem thermischen Gleichgewichtszustand gebracht, so erfolgen Prozesse, die dem Entgegenwirken. Erfolgt beispielsweise eine lokale Erhöhung der Ladungsträgerdichte, so dass  $pn = n_i^2$  nicht mehr erfüllt ist, werden durch verschiedene Rekombinationsprozesse die Überschussladungen abgebaut. Die thermische Rekombination durch Haftstellen bzw. Rekombinationszentren, welche sich in der Nähe der Bandlückenmitte befinden, kann durch das Shockley-Read-Hall Modell beschrieben werden:

$$R_{SRH} = \frac{p \cdot n - n_i^2}{\tau_p(n + n_i) + \tau_n(p + n_i)} \quad 3.37$$

Dabei sind  $\tau_p$  und  $\tau_n$  die Lebensdauern von Defektelektronen sowie Elektronen. Generationsprozesse sorgen für eine Erzeugung zusätzlicher Ladungsträger. Für diese Arbeit sind insbesondere die Avalanche-Generation sowie Fotogeneration von Bedeutung. Die Lawinenvervielfachung durch Stoßionisation erfolgt bei hohen

Feldstärken. Bei ausreichend starken elektrischen Feldern können die Ladungsträger genügend kinetische Energie aufnehmen um Valenzelektronen aus ihren Bindungen herauslösen. Es erfolgt dadurch ein lawinenartiger Anstieg an Ladungsträgern, welcher letztendlich zu einem elektrischen Durchbruch führt. Dabei ist der Durchbruch reversibel, falls die zulässige Gesamtverlustleistung des Bauelementes bzw. der Halbleiterschicht nicht überschritten wird. Da für eine Stoßionisation die freien Ladungsträger eine ausreichend große freie Weglänge benötigen, um genügend Energie aufnehmen zu können, hat der Lawinendurchbruch einen positiven Temperaturkoeffizienten. Dies ist dadurch zu erklären, dass die Ladungsträger durch eine Zunahme der Temperatur vermehrt am Kristallgitter gestreut werden, wodurch die freie Weglänge verkürzt wird. Die Generationsrate ist gegeben durch:

$$G_{Avalanche} = \alpha_p \cdot |J_p| + \alpha_n \cdot |J_n| \quad 3.38$$

dabei sind  $\alpha_n$  und  $\alpha_p$  die entsprechenden Ionisationskoeffizienten für Elektronen bzw. Defektelektronen, welche stark vom elektrischen Feld abhängen. Nach dem van-Overstreeten-de-Man Model [27] ist der Ionisationskoeffizient gegeben durch:

$$\alpha = \alpha_0 \cdot e^{-\frac{b}{E}} \quad 3.39$$

wobei E die elektrische Feldstärke ist und  $\alpha_0 = 2.9 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}$  sowie  $b = 3.4 \cdot 10^7 \frac{\text{V}}{\text{cm}}$  die entsprechenden Koeffizienten für GaN sind. Bei Halbleitern mit einer hohen Spannungsfestigkeit, welche dabei geringe Leckströme aufweisen, ist die Durchbruchspannung durch den Avalanche-Effekt begrenzt. Überschreitet jedoch die Gesamtverlustleistung einen kritischen Wert, erfolgt ein thermischer Durchschlag. So kann beispielsweise ein Strompfad entlang einer Versetzung zu einer starken lokalen Erwärmung führen, wodurch der Halbleiter letztendlich irreversibel zerstört wird.

### **Metall/Halbleiter Kontaktbildung:**

Werden zwei Materialien in Kontakt gebracht, stellt sich eine elektrische Potentialdifferenz ein, wodurch solange ein Übertritt von Elektronen erfolgt bis sich im thermischen Gleichgewichtszustand die Fermi-niveaus angeglichen haben. Die

dadurch auftretende Raumladungszone im Kontaktbereich führt zu einem elektrischen Feld, wodurch sich nach der Poisson-Gleichung eine Bandanpassung am Metall/Halbleiter Übergang ergibt. Die sich einstellende Bandverbiegung bestimmt die Art des Kontakts und hat damit einen erheblichen Einfluss auf die IU-Kennlinie [28]. Im einfachsten Fall kann der Potentialverlauf eines idealen n-Typ oder p-Typ Halbleiter/Metall Kontakts unter der Verwendung der Verarmungsnäherung (abrupter  $p^+$ -n- bzw.  $n^+$ -p-Übergang) berechnet werden.

Der hierdurch entstehende Raumladungszone ist durch die Breite  $W$  der Verarmungszone und die Diffusionsspannung  $V_D$  gekennzeichnet und ist gegeben durch:

$$V_D = \frac{q \cdot N_D \cdot W^2}{2 \cdot \epsilon \epsilon_0} \quad 3.40$$

Dabei gilt im thermischen Gleichgewicht die Neutralitätsbedingung, welche sich aus der Bedingung eines herkömmlichen p-n-Übergangs ableitet und sich aus der Flächenladungsgleichung beiderseits der Grenzfläche ergibt:

$$qN_A x_p = qN_D x_n \quad 3.41$$

wobei  $x_p$  und  $x_n$  die Breiten der jeweiligen Raumladungszonen eines p-n-Übergangs darstellen. Daher muss bei einem Metall-Halbleiter-Übergang eine entsprechende Gegenladung im Metall existieren, die sich auf einen grenznahen Bereich von einigen Angström beschränkt.

Je nach Austrittsarbeit des Metalls und Halbleiters können im Kontaktbereich sowohl Verarmungs- als auch Anreicherungsrandschichten entstehen. Ist die Konzentration von freien Ladungsträgern im Kontaktbereich kleiner als im homogenen Halbleiterinneren [28], so liegt ein gleichrichtender Kontakt vor. Bei Kontakten mit einer Anreicherungsrandschicht (bestehend aus freien Ladungsträgern) liegt im Allgemeinen ein nichtsperrender Kontakt vor, welcher typischerweise als Ohm'scher Kontakt bezeichnet wird. Über die resultierende Bandanpassung, welche von der

relativen Lage des Fermi-Niveaus in Bezug zum Vakuumpotential der beiden Materialien abhängt, kann jedoch in der Praxis keine sichere Aussage getroffen werden, da der Zusammenhang zwischen den Austrittsarbeiten nicht immer gegeben bzw. bekannt ist [28]. So wurde bei vielen Halbleitern beobachtet, dass sich die Barrierenhöhe nur wenig mit der Austrittsarbeit des Metalls ändert. In diesem Fall wird die Lage des Fermi-Niveaus im Kontaktbereich durch Oberflächenzustände bestimmt, welche unabhängig vom Kontaktmaterial sind. Diese geringe Veränderung der Barrierenhöhe trotz unterschiedlicher Kontaktmaterialien wird als Fermilevel-Pinning bezeichnet [29–31].

Ausgehend vom Schottky-Modell ist in Abbildung 3.18 exemplarisch ein Metall und n-Typ Halbleiter vor und nach der Kontaktierung dargestellt. Dabei ist das Metall durch die Austrittsarbeit  $\phi_M$  charakterisiert, wohingegen die Austrittsarbeit des Halbleiters  $\phi_S$  durch die Elektronenaffinität  $\chi_S$  und dessen Fermipotential  $V_N$  bestimmt ist:

$$\phi_S = \chi_S + V_N \quad 3.42$$

Die Elektronenaffinität bezeichnet den Abstand zwischen Vakuumenergie und der Leitungsbandunterkante  $E_C$ . Das Fermipotential  $V_N$  eines homogen dotierten Halbleiters ohne Randeinflüsse ist dabei durch die Lage seines Fermi-Niveaus zum Leitungsband bestimmt:

$$V_N = \frac{E_C - E_F}{q} \quad 3.43$$

Die sich ergebenden Potentialbarrieren für Elektronen  $\phi_{Bn}$  und Löcher  $\phi_{Bp}$  werden als Schottky-Barrieren bezeichnet:

$$\phi_{Bn} = \phi_M - \chi_S \quad 3.44$$

$$\phi_{Bp} = \frac{E_g}{q} - (\phi_M - \chi_S) = \frac{E_g}{q} - \phi_{Bn} \quad 3.45$$

Bei einem Metall/n-Typ Halbleiter Kontakt, für den die Bedingung  $\phi_m > \phi_s$  erfüllt ist, können somit leichter Elektronen vom Halbleiter ins Metall fließen. Dadurch entsteht eine Verarmungszone von Majoritätsladungsträgern (Elektronen) in der Kontaktregion. Der Ladungsträgertransport bei Schottky-Kontakten erfolgt im Allgemeinen durch thermische Emission über die Potentialbarriere und durch Diffusion durch die Raumladungszone.

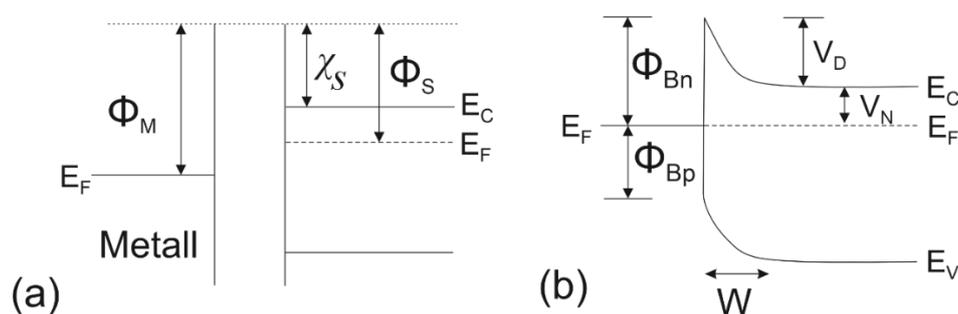


Abbildung 3.18: Bildteil (a) zeigt die Bandstruktur eines Metalls und n-Halbleiters vor der Kontaktierung und Bildteil (b) zeigt die resultierende Bandenanpassung nach dem Schottky-Modell unter der Annahme  $\phi_m > \phi_s$  bei der Kontaktierung

Elektronen, welche vom Metall in den Halbleiter gelangen wollen, müssen demnach die Schottky-Barriere  $\phi_{Bn}$  überqueren, während die Elektronen vom Halbleiter die Potentialbarriere  $V_N$  überwinden müssen. Durch Anlegen einer Spannung  $V_a$  (Abbildung 3.19) erfolgt je nach Polarität ein Absenken oder eine Erhöhung des Diffusionspotentials  $V_D$ . Bei Durchlassspannung ( $V_a > 0$ ) folgt eine Verringerung der Verarmungszone, wobei diese bei Anlegen einer Sperrspannung ( $V_a < 0$ ) vergrößert wird. Für  $V_D + V_a = V_N$  hingegen liegt der Flachbandfall vor.

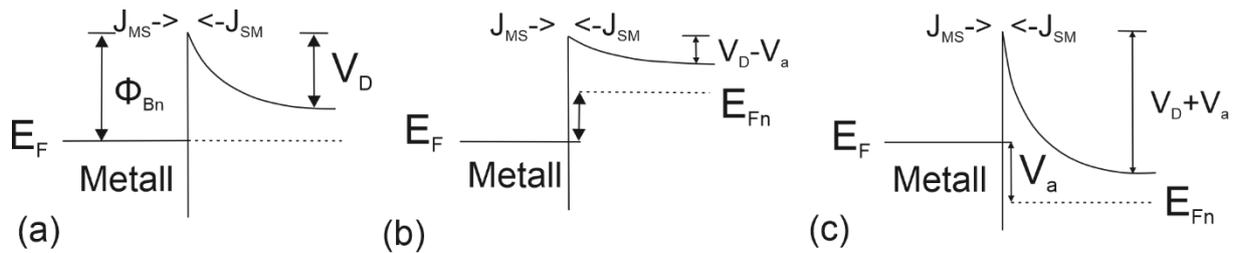


Abbildung 3.19: Stromfluss  $J$  über eine Schottky-Barriere. (a) zero bias (b) Durchlassspannung (c) Sperrspannung

Der Stromtransport durch einen Schottky-Kontakt erfolgt im Wesentlichen durch Majoritätsladungsträger. Der thermische Emissionsstrom ist durch zwei Teilströme gegeben. Der Stromfluss vom Metall in den Halbleiter kann hierbei beschrieben werden durch:

$$J_{m \rightarrow s} = -A^* T^2 e^{\left(-\frac{q\phi_{Bn}}{kT}\right)} \quad 3.46$$

wobei  $A^*$  die effektive Richardson Konstante darstellt für die gilt:

$$A^* = \frac{4\pi q m^* k^2}{h^3} \quad 3.47$$

Für den Stromfluss vom Halbleiter ins Metall folgt:

$$J_{s \rightarrow m} = -A^* T^2 e^{\left(-\frac{q\phi_{Bn}}{kT}\right)} e^{\left(\frac{qV}{kT}\right)} \quad 3.48$$

Die Summe der beiden Teilströme ergibt den Gesamtstrom:

$$J_{gesamt} = A^* T^2 e^{\left(-\frac{q\phi_{Bn}}{kT}\right)} \left[ e^{\left(\frac{qV}{kT}\right)} - 1 \right] \quad 3.49$$

Bei angelegter Durchlassspannung fließen somit Majoritätsträger aus dem Halbleiter ins Metall, wodurch der Stromfluss exponentiell mit der Spannung wächst. Der Elektronenfluss vom Metall in den Halbleiter bleibt hingegen konstant, da dieser von den Materialparametern des Kontakts bestimmt ist. Er ist jedoch gegenüber dem ersten Teilstrom bei Durchlassspannung zu vernachlässigen. Wird hingegen die Polarität der angelegten Spannung gewechselt, kann durch die Höhe der angelegten Sperrspannung der Trägerfluss vom Halbleiter zum Metall im Prinzip beliebig klein gemacht werden, so dass nur noch der Elektronenfluss vom Metall zum Halbleiter  $J_{m \rightarrow s}$  übrigbleibt, welcher dann als Sättigungsstrom  $J_0$  bezeichnet wird. Bei elektrischen Feldern treten weitere Effekte auf, so erfolgt aufgrund der Bildkraft eine Verringerung der Austrittsarbeit. Die Potentialbarriere  $\phi_{Bn}$  reduziert sich hierbei um  $\Delta\phi$ , wodurch die effektive Schottky-Barriere  $\phi_b$  definiert werden kann:

$$\phi_b = \phi_{Bn} - \sqrt{\frac{qE_m}{4\pi\epsilon_s}} = \phi_{Bn} - \Delta\phi \quad 3.50$$

Üblicherweise werden solche Effekte sowie weitere Mechanismen durch einen dimensionslosen Idealitätsfaktor beschrieben, welcher die Abweichungen von einer idealen Schottky-Diode ( $n=1$ ) angibt. Der Stromfluss ergibt sich damit zu:

$$J(V, \phi_b) = A^* T^2 e^{\left(-\frac{\phi_b}{kT}\right)} e^{\left(\frac{qV}{nkT}\right)} \left[ 1 - e^{\left(-\frac{qV}{kT}\right)} \right] \quad 3.51$$

In Abbildung 3.20 ist ein nicht-gleichrichtender Kontakt vor und nach Kontaktierung gezeigt bei dem die Austrittsarbeit des Metalls der Elektronenaffinität des Halbleiters entspricht. Damit ist bei dem dargestellten Metall/n-Typ Halbleiter Übergang die Bedingung für einen Ohm'schen Kontakt  $\phi_m < \phi_s$  erfüllt.

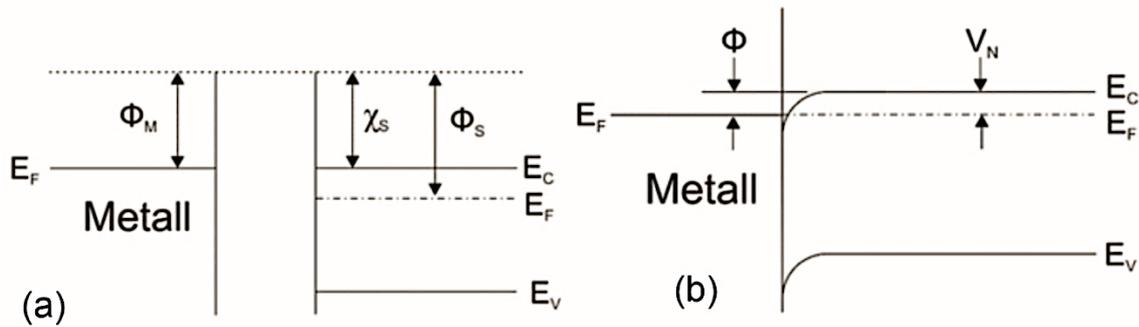


Abbildung 3.20: Bildteil (a) zeigt die Bandstruktur eines Metalls und n-Halbleiters vor der Kontaktierung und Bildteil (b) zeigt die resultierende Bandanpassung eines Ohm'schen-Kontakts

Es fließen nun bevorzugt Elektronen vom Metall in den Halbleiter, bis sich ein thermisches Gleichgewicht ausbildet, wodurch eine Bandanpassung hervorgeht, wie sie in Abbildung 3.20b gezeigt ist. Durch die Anreicherungsrandschicht bildet sich auch bei einem nicht-gleichrichtenden Kontakt eine Potentialbarriere aus, da die akkumulierten Elektronen ebenfalls eine Raumladungszone bilden. Der Elektronenübertritt ist hierbei nur von der Potentialbarriere, jedoch nicht von der äußeren Spannung abhängig, da diese durch eine Anreicherungsschicht von freien Elektronen entstanden ist, was sich als lineare Kennlinie äußert. Für den differentiellen Widerstand solch eines Kontaktes gilt folgender Ausdruck:

$$R_K = \left( \frac{dI}{dU} \right)_U^{-1} = \frac{U_T}{A^* T^2} e^{\left( \frac{q\Phi_{Bn}}{kT} \right)} \quad 3.52$$

Eine gute Ohm'sche Kontaktierung ist für viele Anwendungen essentiell, jedoch für Halbleiter, welche eine große Bandlücke aufweisen, sind Metalle mit den dafür nötigen Austrittsarbeiten oftmals nicht verfügbar. Des Weiteren führen Oberflächenladungszustände häufig zu einem Fermilevel-Pinning, was in Schottky-Barrieren geringer Höhe resultiert [31–33]. Barrierenhöhen von unter 0.3 eV weisen dennoch in der Regel eine lineare IU-Abhängigkeit auf [2]. In der Praxis werden daher solche Kontakte als Ohm'sche Kontakte bezeichnet, bei denen der

Spannungsabfall über dem Metall-Halbleiterübergang im Vergleich zum Spannungsabfall des Halbleiter-Volumenmaterials vernachlässigbar ist. Zusätzlich sollten diese Kontakte keine Minoritätsladungsträger injizieren. Eine der am häufigsten angewendeten Methode zur Realisierung von „Ohm’schen“ Kontakten trotz einer Schottky-Barriere, ist die Ausnutzung des Tunneleffekts. Durch eine Deltadotierung des Halbleiters im Kontaktbereich wird die Verarmungszone so weit verringert, dass die Ladungsträger vermehrt in der Lage sind durch die Schottky-Barriere hindurch zu tunneln.

Die Ohm’sche Leitung wird durch die Bewegung von freien Elektronen im Leitungsband sowie durch Defektelektronen im Valenzband verursacht. Es existiert für hinreichend kleine Spannungen (Driftgeschwindigkeit  $\ll$  thermische Geschwindigkeit) ein linearer Zusammenhang zwischen der Stromdichte  $J$  und dem elektrischen Feld  $\vec{E}$ :

$$J = q\mu n\vec{E} \quad 3.53$$

Hierbei ist  $n$  die Anzahl der Elektronen im Leitungsband und  $q$  die Elementarladung. Bei höheren Feldstärken macht sich die Feldabhängigkeit der Elektronenbeweglichkeit  $\mu(E)$  mit zunehmendem Maße bemerkbar, was in einer nichtlinearen  $I$ - $U$  Abhängigkeit resultiert.

Erfolgt eine Trägerinjektion durch „Ohm’sche“ Kontakte, so wächst die Anzahl der injizierten Ladungsträger solange proportional mit der Spannung  $V < V_{tr}$ , bis die Konzentration der injizierten Majoritätsträger die Gleichgewichtsträgerdichte des Halbleiterinneren  $n_0$  überschreitet. Dabei bezeichnet die Spannung  $V_{tr}$  die Übergangsspannung beim Abweichen vom Ohm’schen Gesetz. Im Bereich  $V > V_{tr}$  nimmt der Strom überproportional mit der Spannung zu. Die durch die injizierten Ladungsträger erzeugten Raumladungen führen zu einer Begrenzung des Stroms und verhindern somit eine beliebig ansteigende Trägerinjektion. Diese durch Raumladungen begrenzten Ströme werden in der Literatur als „Space-charge-limited currents“ (SCLC) bezeichnet. Beinhaltet der Halbleiter eine große Anzahl an Haftstellen, so wird ein Teil der injizierten Ladungsträger an diese gebunden.

Die „eingefangenen“ Majoritätsträger tragen somit nicht mehr zum Stromfluss bei, führen jedoch zu einer Erhöhung der Raumladungsdichte. Der IU-Kennlinienverlauf dieses Auffüllprozesses ist dabei von der Konzentration der Haftstellen, deren Beschaffenheit sowie energetischen Lage in der Bandlücke gegeben. Für die Stromdichte  $J_{SCLC}$  folgt:

$$J_{SCLC} = \frac{9}{8} \cdot \theta \varepsilon_s \varepsilon \mu \frac{V^2}{d^3} \quad 3.54$$

Dabei ist  $\theta$  das Verhältnis zwischen der freien und der gesamten Ladungsträgerdichte (freie und an Haftstellen gebundene Ladungsträger) und  $d$  die effektive Schichtdicke. Wenn alle Haftstellen besetzt sind erfolgt ein steiler Stromanstieg, wodurch die Stromdichte in das Child-Gesetz [34] übergeht:

$$J_{Child} = \frac{9}{8} \varepsilon_s \varepsilon \mu \frac{V^2}{d^3} \quad 3.55$$

Die Spannung, bei der der Übergang zwischen diesen beiden Raumladungszuständen eintritt, wird als  $V_{TFL}$  (TFL engl. Trap Filled Limit) bezeichnet:

$$V_{TFL} = \frac{q N_t d^2}{2 \varepsilon} \quad 3.56$$

Dabei ist  $N_t$  die Haftstellenkonzentration. Es ist anzumerken, dass für das Auftreten von Raumladungsströmen keine idealen Ohm'schen Kontakte notwendig sind, sondern lediglich Kontakte, die in der Lage sind, mehr Majoritätsträger als  $n_0$  in den Halbleiter zu injizieren.

### 3.13 Literaturverzeichnis

- [1] N. Kaluza, *MOVPE Growth and Characterization of Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/GaN Heterostructures for HEMT Application*, Dr. (FH), Techn. Hochsch. Aachen, Jülich (2003).
- [2] W. Richter, "Physics of metal organic chemical vapour deposition," in *Festkörperprobleme 26 (Advances in Solid State Physics)*, P. Grosse, Ed., Springer, Berlin, Heidelberg, pp. 335 (1986).
- [3] G. B. Stringfellow, *Organometallic Vapor-Phase Epitaxy: Theory and Practice, 2nd Ed*, Elsevier (1999).
- [4] Laytec, *LayTec Manual, EpiCurveTT – Reflectance measurements for real-time optical control of epitaxial growth*, Information Note LayTec (2009).
- [5] D. K. Schroder, *Semiconductor Material and Device Characterization*, Wiley (2005).
- [6] S. Fritze, "Wachstumsoptimierung und Charakterisierung von MOVPE-basierten GaN Pufferstrukturen auf Si(111) Substraten," (2014), <https://doi.org/10.25673/4122>.
- [7] G. Binnig, C. F. Quate, and C. Gerber, "Atomic force microscope," *Phys. Rev. Lett.* **56**, 930 (1986), <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.56.930>.
- [8] *Scanning Force Microscopy: With Applications to Electric, Magnetic, and Atomic Forces* (Oxford Series in Optical and Imaging Sciences 5), Oxford University Press, New York (1994).
- [9] C. B. Carter, D. B. Williams, and J. M. Thomas, Eds., *Transmission Electron Microscopy: Diffraction, Imaging, and Spectrometry*, Springer, Cham, Switzerland (2016).
- [10] T. Y. Chang, *Characterisation of Polar (0001) and Non-Polar (11-20) Ultraviolet Nitride Semiconductors*, Apollo – University of Cambridge Repository (2012).
- [11] M. A. Reshchikov and H. Morkoç, "Luminescence properties of defects in GaN," *J. Appl. Phys.* **97**, 061301 (2005), <https://doi.org/10.1063/1.1868059>
- [12] U. Pietsch, V. Holý, and T. Baumbach, *High-Resolution X-Ray Scattering*, Springer, New York (2004).
- [13] A. Authier, *Dynamical Theory of X-Ray Diffraction* (Oxford Science Publications 11), Oxford University Press, Oxford (2001).
- [14] W. H. Bragg, "The reflection of X-rays by crystals," *Proc. R. Soc. Lond. A* **88**, 428 (1913), <https://doi.org/10.1098/rspa.1913.0040>.
- [15] H. Kiessig, "Interferenz von Röntgenstrahlen an dünnen Schichten," *Ann. Phys.* **402**, 769 (1931), <https://doi.org/10.1002/andp.19314020702>.
- [16] T. Metzger, C. Kirchner, R. Höppler, M. Born, O. Ambacher, M. Stutzmann, R. Höpfl, and G. Dollinger, "Defect structure of epitaxial GaN films determined by transmission electron microscopy and triple-axis X-ray diffractometry," *Philos. Mag. A* **77**, 1013 (1998), <https://doi.org/10.1080/01418619808221225>.
- [17] L. G. Parratt, "Surface Studies of Solids by Total Reflection of X-Rays," *Phys. Rev.* **95**, 359 (1954), <https://doi.org/10.1103/PhysRev.95.359>.
- [18] K. Wittmaack, "Mechanism of MCs<sup>+</sup> formation in Cs based secondary ion mass spectrometry," *Surf. Sci.* **606**, L18 (2012), <https://doi.org/10.1016/j.susc.2011.10.021>.
- [19] P. Bieringer, *Stöchiometrieuntersuchungen von Schichtsystemen für die Nanoelektronik* (2000).
- [20] R. G. Wilson, F. A. Stevie, and C. W. Magee, *Secondary Ion Mass Spectrometry: A Practical Handbook for Depth Profiling and Bulk Impurity Analysis*, Wiley, New York (1989).
- [21] J. F. Ziegler and J. F. Ziegler, Eds., *The Stopping and Ranges of Ions in Matter*, Pergamon Press, New York (1980).
- [22] C. Takakuwa-Hongo and M. Tomita, "High-sensitivity SIMS analysis of carbon in GaN films by molecular ion detection," *Surf. Interface Anal.* **25**, 966 (1997), [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1096-9918\(199712\)25:13<966::AID-SIA324>3.0.CO;2-V](https://doi.org/10.1002/(SICI)1096-9918(199712)25:13<966::AID-SIA324>3.0.CO;2-V).

- [23] A. H. Johnstone, "CRC Handbook of Chemistry and Physics—69th Edition Editor in Chief R. C. Weast, CRC Press Inc., Boca Raton, Florida, 1988, pp. 2400, ISBN 0–8493–0369–5," *J. Chem. Technol. Biotechnol.* **50**, 294 (1991), <https://doi.org/10.1002/jctb.280500215>.
- [24] U. Weisbrod, R. Gutschke, J. Knoth, and H. Schwenke, "X-ray induced fluorescence spectrometry at grazing incidence for quantitative surface and layer analysis," *Fresenius J. Anal. Chem.* **341**, 83 (1991), <https://doi.org/10.1007/BF00322113>.
- [25] L. J. van der Pauw, "Messung des spezifischen Widerstands und des Hall-Koeffizienten an Scheibchen beliebiger Form," *Philips Tech. Rundsch.* **20**, 230 (1958).
- [26] E. H. Hall, "On a new action of the magnet on electric currents," *Am. J. Math.* **2**, 287 (1879).
- [27] D. Visalli, M. Marso, J. Schörmann, A. Vescan, H. Lüth, F. Schwierz, R. Aidam, and N. Klein, "Experimental and simulation study of breakdown voltage enhancement of AlGaIn/GaN heterostructures by Si substrate removal," *Appl. Phys. Lett.* **97**, 113501 (2010), <https://doi.org/10.1063/1.3488024>.
- [28] F. Stöckmann, "Über Strom-Spannungs-Kennlinien „Ohmscher“ Kontakte bei Halbleitern und Isolatoren," in *Halbleiterprobleme (Advances in Solid State Physics)*, F. Sauter, Ed., Springer, Berlin, Heidelberg, pp. 279 (1959).
- [29] J. Bardeen, "Surface States and Rectification at a Metal Semi-Conductor Contact," *Phys. Rev.* **71**, 717 (1947), <https://doi.org/10.1103/PhysRev.71.717>.
- [30] K. A. Rickert, M. Leszczynski, I. Grzegory, S. Krukowski, T. Suski, and B. W. Wessels, "X-ray photoemission determination of the Schottky barrier height of metal contacts to n-GaN and p-GaN," *J. Appl. Phys.* **92**, 6671 (2002), <https://doi.org/10.1063/1.1518129>.
- [31] H. Witte, G. Müller, G. Kästner, F. Bechstedt, J. Christen, H. Angerer, and O. Ambacher, "Fermi Level Pinning at GaN-interfaces: Correlation of electrical admittance and transient spectroscopy," *MRS Internet J. Nitride Semicond. Res.* **5**, 936 (2000), <https://doi.org/10.1557/S1092578300005299>.
- [32] S. M. Sze, D. J. Coleman, and A. Loya, "Current transport in metal-semiconductor-metal (MSM) structures," *Solid-State Electron.* **14**, 1209 (1971), [https://doi.org/10.1016/0038-1101\(71\)90109-2](https://doi.org/10.1016/0038-1101(71)90109-2).
- [33] X. Ni, J. Xie, Y. Fu, H. Morkoç, I. P. Steinke, Y. Liu, P. P. Ruden, K.-A. Son, and B. Yang, "Investigation of current-voltage characteristics of n-GaN/i-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/n-GaN structures" in *Gallium Nitride Materials and Devices II*, edited by H. Morkoç and C. W. Litton, Proc. SPIE **6473** (2007), p. 64730A-1-64730A-8., <https://doi.org/10.1117/12.706793>
- [34] F.-C. Chiu, "A Review on Conduction Mechanisms in Dielectric Films," *Adv. Mater. Sci. Eng.* **2014**, 578168 (2014), <https://doi.org/10.1155/2014/578168>.

# 4 MOVPE-Wachstum und Eigenschaften von GaN/ Heteroepitaktisches Wachstum

## 4.1 GaN-Wachstum auf Fremdsubstraten

Die Herstellung von AlGaN/GaN-Heterostrukturen benötigt ein einkristallines Substrat. Aus Sicht der erzielbaren Materialqualität bietet sich nur ein GaN-Substrat an, welches jedoch zurzeit vergleichsweise teuer und nur in Durchmessern bis 100 mm kommerziell erwerbbar ist. Eine kostengünstige Alternative stellt die Herstellung von FET-Strukturen auf Substraten aus Silizium dar. Dies hat den Vorteil der Verfügbarkeit von großen Wafer-Durchmessern. Trotz ihrer Potenziale birgt die GaN-on-Si-Epitaxie einige Herausforderungen, insbesondere hinsichtlich der unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten und Gitterparameter von GaN und Si, die zur Bildung von Defekten und Spannungen führen können.

Durch die unterschiedlichen Atomabstände an der Grenzfläche zwischen Substrat und der Epi-Schicht entstehen Anpassungsversetzungen in der Größenordnung von GaN/Si(111)  $\sim 2.8 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ , GaN/Sapphire  $\sim 1.8 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  und GaN/6H-SiC  $\sim 1.1 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , die sich während des Wachstums in c-Richtung ausbreiten können. Die Versetzungsdichte nimmt mit zunehmender Schichtdicke ab und liegt bei GaN-Schichten auf Saphir und Silizium im Bereich von  $10^8$ - $10^{10} \text{ cm}^{-2}$  [1].

Um die Defektdichte beim heteroepitaktischen Wachstums zu reduzieren, können verschiedene Methoden angewendet werden. So existiert zum einen das Prinzip des lateralen Überwachsens (engl. Epitaxial lateral overgrowth ELOG) [2] wobei die Versetzungslinien an Maskierungsschichten geblockt werden und die verbleibenden beim lateralen Überwachsen idealerweise Abknicken. Dadurch breiten sich die Versetzungslinien nicht mehr in c-Richtung aus, sondern vermehrt parallel zur Substratoberfläche, wodurch eine geringere Defektdichte im oberen Teil der Schichtstruktur erzielt wird. Des Weiteren verursachen Versetzungslinien

Spannungsfelder, welche eine Annäherung von Versetzungen begünstigt, was ebenfalls zu einer weiteren Defektreduzierung durch Versetzungsannihilation mit steigender GaN Schichtdicke führt [3].

Eine weitere Möglichkeit ist eine SiN In-situ nano Maske abzuschleifen, wodurch vor allem die Stufenversetzungsdichte verringert werden kann [4, 5].

Durch das Abschleifen der SiN nano Maske wird ein 3D Wachstum der darauffolgenden GaN Schicht initiiert, welches durch Versetzungsabknicken und Annihilation eine Reduktion zur Folge hat. Dabei bestimmt die Abschleifzeit den mittleren Abstand der auf der Maske wachsenden GaN Inseln. Mit wachsendem Abstand verbessert sich die Kristallqualität, beschränkt durch die dadurch hinausgezögerte Inselkoaleszenz, um wieder eine vollständig geschlossene 2D Schicht zu erzielen. Im Fall des Wachstums auf Silizium sind der Koaleszenzschichtdicke durch die notwendige Verspannungskompensation enge Grenzen gesetzt [6].

Das GaN-Wachstum auf Fremdsubstraten wie beispielsweise Silizium und Saphir führt aufgrund von unterschiedlichen Gitterkonstanten zu Verspannungen in den jeweiligen Schichten sowie zu Anpassungsversetzungen an den Grenzflächen. Anpassungsversetzungen sind wie Durchstoßversetzungen linienförmige Defekte, die in der Ebene liegen, jedoch können sie unter Umständen abknicken, wodurch daraus Durchstoßversetzungen entstehen. Aufgrund von Gitterfehlanspassungen bilden sich im ersten Prozessschritt viele Nukleationszentren [7], welche sich im Verlauf des anfänglichen 3D Wachstums zu individuellen und zu voneinander isolierten Inseln entwickeln. Ausgehend vom Mosaik-Modell [8, 9] werden diese Inseln als einzelne Kristallite aufgefasst, welche zueinander verschieden orientiert sind. Aus der Koaleszenz dieser nicht perfekt zueinander orientierten Mosaikblöcke entstehen an den Korngrenzen Durchstoßversetzungen. Die Dichte, Größenverteilung und Orientierung dieser Kristallite bestimmt im Wesentlichen die Anzahl der Durchstoßversetzungen [10], welche durch die verwendeten Wachstumsbedingungen sowie die Verspannung [10] gegeben sind. So führt eine Verringerung der Dichte der anfänglichen Nukleationsinseln zu größeren Mosaikblöcken, wodurch die Anzahl der Durchstoßversetzungen, die sich an den Korngrenzen bilden, reduziert wird. Jedoch

kann es bei der Koaleszenz der wenigen, aber nunmehr größeren Mosaikblöcke verstärkt zu einer Ausbildung von Versetzungsclustern an den defektreichen Korngrenzen kommen [11]. Im Gegensatz dazu führt eine hohe Dichte an Nukleationsinseln zu einem Anstieg von Durchstoßversetzungen aufgrund der größeren Anzahl an leicht fehlorientierten Kristalliten und deren Korngrenzen, jedoch sind diese gleichmäßiger verteilt [10]. Neben der Verspannung, welche durch die unterschiedlichen Gitterkonstanten beim epitaktischen Wachstum entsteht, wird auch eine thermisch induzierte Spannung beim Abkühlen der Probe von der Wachstumstemperatur auf Raumtemperatur hervorgerufen. Durch die unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten der jeweiligen Substrate zu GaN erfolgt je nach Material eine mehr oder weniger ausgeprägte Wafer-Krümmung. So ist der laterale thermische Ausdehnungskoeffizient von GaN größer als der des Si-Substrats, wodurch sich Silizium weniger stark beim Abkühlprozess zusammenzieht als die epitaktisch gewachsene GaN-Schicht. Dies führt zu einer tensilen Verspannung, woraus sich eine konkave Waferkrümmung ergibt. Um rissfreie GaN-Schichten von über  $\sim 1 \mu\text{m}$  [12] herstellen zu können sind spannungskompensierende Zwischenschichten notwendig. Eine Möglichkeit, welche auch in dieser Arbeit benutzt wurde, ist die Verwendung von LT-AlN Zwischenschichten [13].

Saphir-Substrate besitzen gegenüber Silizium eine höhere Materialsteifigkeit, was in einer geringeren Wafer-Krümmung resultiert. Durch die thermische Fehlanpassung von -34% des Saphir-Substrats zu GaN [1] erfolgt hierbei eine konvexe Waferkrümmung infolge der daraus resultierenden kompressiven Verspannung. Das GaN Wachstum auf Silizium beinhaltet folgende zusätzliche Prozessschritte. Aufgrund von Melt-back-Etching [14] ist das direkte Wachstum von GaN auf Silizium nicht möglich. Daher wird eine AlN-Keimschicht verwendet, um diese chemische Ätzreaktion zwischen Si und den Ga Atomen zu verhindern [15]. Vor der Abscheidung der AlN-Pufferschicht wird durch das Vorströmen von Al eine Nitridierung des Si-Substrates verhindert [16, 17]. Anschließend wird entweder eine Tieftemperatur (LT) oder Hochtemperatur (HT) AlN-Keimschicht verwendet. Durch Optimierung der Wachstumsparameter bzgl. der verwendeten Substrate wurde eine LT-AlN Keimschicht für Saphir-Substrate und eine HT-AlN Keimschicht auf Si(111)

benutzt. In beiden Fällen besteht anfangs die AlN-Keimschicht aus AlN Inseln, die von einer c-Richtung abweichenden Kristallorientierungen aufweisen können. Erst durch das Wachstum einer HT-AlN Schicht prägt sich eine c-Achsenorientierung aus.

## 4.2 Punktdefekte in GaN

Punktdefekte gehören zu den am häufigsten beobachteten Defekten in Halbleitern. Zu den nativen Punktdefekten gehören Vakanzen, Einbau auf Zwischengitterplätzen (Interstitials) und auf der falschen Gitterposition (Antisites). Darüber hinaus können intrinsische Punktdefekte über die Wachstumsbedingungen beeinflusst werden, wie beispielsweise beim MOVPE Wachstum der Einbau von Sauerstoff, Kohlenstoff, Silizium und Wasserstoff. Extrinsische Punktdefekte werden hingegen durch Dotierungen absichtlich eingebracht, um die Materialeigenschaften des Halbleiters zu steuern. Dabei beeinflusst das chemische Potenzial und das Fermi-niveau die Bildung von Punktdefekten in GaN. So kann durch Kontrolle des chemischen Potentials während des MOCVD-Wachstums die Defektdichte systematisch reduziert werden [18].

Die Bildungsenergie  $E^f$  eines Defekts oder einer Störstelle X in einem Ladungszustand  $q$  ist im Allgemeinen eine Funktion der Fermi-Energie und des chemischen Potentials [19]:

$$E^f(X^q) = E_{ref}(X^q) - \sum_i n_i \mu_i + q(E_F - E_V) \quad 4.1$$

Dabei ist  $n_i$  die Anzahl der Atome der Sorte  $i$  (Bulk-Atom oder Störstellen) und  $\mu_i$  entspricht den jeweiligen chemischen Potentials.  $E_{ref}(X^q)$  ist die Referenzenergie eines Bezugssystems.  $(E_F - E_V)$  ist die Energiedifferenz zwischen der Fermienergie und dem Valenzbandmaximums. Die chemischen Potentials hängen von den experimentellen Bedingungen (Wachstumsparameter) ab unter denen der Halbleiter gezüchtet wird. Die Abhängigkeit der Bildungsenergie einer geladenen Störstelle von der Fermienergie wird in der Literatur als Fermi-niveaus-Effekt bezeichnet [20–22]

und kann durch die Verwendung der Dichtefunktionaltheorie (DFT engl. density functional theory) berechnet werden.

Die Position des Fermi-niveaus wird durch die Dotierung des Halbleiters beeinflusst. Die Änderung der Bildungsenergie von geladenen Störstellen wird wiederum durch die Dotierkonzentration gesteuert. Die Beziehung zwischen der Bildungsenergie  $E^f$  einer geladenen Störstelle und dessen Konzentration  $X^q$  besitzt den funktionalen Zusammenhang:

$$[X^q] = N_i \cdot e^{\frac{-E^f(X^q)}{k_B T}} \quad 4.2$$

Diese Gleichung ist für den thermischen Gleichgewichtszustand definiert. Hierbei ist  $k_B$  die Boltzmann Konstante und  $T$  die Temperatur des Kristalls.  $N_i$  ist das Produkt aus der Anzahl der möglichen Gitterplätze sowie Konfigurationen, in denen der Defekt eingebaut werden kann. In Abbildung 4.1 sind die Bildungsenergien von verschiedenen Defekten als Funktion der Fermienergie für „N-reiche“ und „Ga-reiche“ Wachstumsbedingungen dargestellt. Es wird im Allgemeinen davon ausgegangen, dass „Ga-reiche“ Wachstumsbedingungen den Bedingungen entsprechen, wie sie typischerweise beim MBE-Wachstum vorzufinden sind und „N-reiche“ Wachstumsprozesse mit denen der MOVPE korrespondieren. Die Steigungen der Bildungsenergien der jeweiligen Defekte charakterisieren den Ladungszustand. Eine Änderung in der Steigung zeigt dabei einen Übergang von einem Ladungszustand zum anderen an [23].



### 4.3 Literaturverzeichnis

- [1] A. Dadgar, J. Bläsing, A. Diez, F. Bertram, J. Christen, and A. Krost, "Metalorganic chemical vapor phase epitaxy of gallium-nitride on silicon," *Phys. Status Solidi C* **6**, 1583 (2003), <https://doi.org/10.1002/pssc.200303122>.
- [2] E. Feltin, J.-F. Carlin, M. Gonschorek, R. Butté, N. Grandjean, J. Dorsaz, and M. Illegems., "Epitaxial Lateral Overgrowth of GaN on Silicon (111)," *Phys. Status Solidi A* **188**, 733 (2001), [https://doi.org/10.1002/1521-396X\(200112\)188:2<733::AID-PSSA733>3.0.CO;2-F](https://doi.org/10.1002/1521-396X(200112)188:2<733::AID-PSSA733>3.0.CO;2-F).
- [3] J. Jasinski and Z. Liliental-Weber, "Extended defects and polarity of hydride vapor phase epitaxy GaN," *J. Electron. Mater.* **31**, 429 (2002), <https://doi.org/10.1007/s11664-002-0096-5>.
- [4] A. Dadgar, J. Bläsing, A. Diez, F. Bertram, J. Christen, and A. Krost, "Strains and Stresses in GaN Heteroepitaxy – Sources and Control," in *Adv. Solid State Phys.* **44**, B. Kramer, Ed., Springer, Berlin, Heidelberg, pp. 313 (2004), [https://doi.org/10.1007/978-3-540-44434-7\\_30](https://doi.org/10.1007/978-3-540-44434-7_30).
- [5] A. Dadgar, M. Poschenrieder, J. Bläsing, J. Christen, and A. Krost, "Improving GaN-on-silicon properties for GaN device epitaxy," *Phys. Status Solidi C* **8**, 1503 (2011), <https://doi.org/10.1002/pssc.201001137>.
- [6] M. Wośko, T. Szymański, B. Paszkiewicz, P. Pokryszka, and R. Paszkiewicz, "MOVPE growth conditions optimization for AlGaIn/GaN/Si heterostructures with SiN and LT-AlN interlayers designed for HEMT applications," *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.* **30**, 4111 (2019), <https://doi.org/10.1007/s10854-019-00702-9>.
- [7] R. Liu, F. A. Ponce, A. Dadgar, and A. Krost, "Atomic arrangement at the AlN/Si (111) interface," *Appl. Phys. Lett.* **83**, 860 (2003), <https://doi.org/10.1063/1.1597749>.
- [8] R. N. Kyutt and A. A. Dyshekov, "Effect of epilayer microstructure on shape of X-Ray diffraction peaks," *Tech. Phys. Lett.* **37**, 306 (2011), <https://doi.org/10.1134/S1063785011040110>.
- [9] B. Liu, X. Li, J. Zhu, and Z. Wang, "Microstructure and dislocation of epitaxial InN films revealed by high resolution x-ray diffraction," *J. Appl. Phys.* **103**, 023504 (2008), <https://doi.org/10.1063/1.2832753>.
- [10] T. Böttcher, R. Averbeck, H. Riechert, and K. H. Ploog., "The role of high-temperature island coalescence in the development of stresses in GaN films," *Appl. Phys. Lett.* **78**, 1976 (2001), <https://doi.org/10.1063/1.1359780>.
- [11] D. Rafaja, Ed., *Functional Structure Design of New High-Performance Materials via Atomic Design and Defect Engineering (ADDE)*, SAXONIA Standortentwicklungs- und -verwaltungsgesellschaft mbH, Freiberg (2016).
- [12] A. Dadgar, J. Bläsing, A. Diez, A. Alam, M. Heuken, and A. Krost, "Metalorganic Chemical Vapor Phase Epitaxy of Crack-Free GaN on Si (111) Exceeding 1  $\mu\text{m}$  in Thickness," *Jpn. J. Appl. Phys.* **39**, L1183 (2000), <https://doi.org/10.1143/JJAP.39.L1183>.
- [13] G. Cong, Y. Lu, W. Peng, X. Liu, X. Wang, and Z. Wang, "Design of the low-temperature AlN interlayer for GaN grown on Si (111) substrate," *J. Cryst. Growth* **276**, 381 (2005), <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2004.11.419>.
- [14] H. Ishikawa, K. Yamamoto, T. Egawa, T. Soga, T. Jimbo, and M. Umeno, "Thermal stability of GaN on (1 1 1) Si substrate," *J. Cryst. Growth* **189–190**, 178 (1998), [https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(98\)00223-1](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(98)00223-1).
- [15] A. Dadgar, "Sixteen years GaN on Si," *Phys. Status Solidi B* **252**, 1063 (2015), <https://doi.org/10.1002/pssb.201451656>.
- [16] A. Dadgar, J. Bläsing, A. Diez, F. Bertram, J. Christen, and A. Krost, "MOVPE growth of GaN on Si(111) substrates," *J. Cryst. Growth* **248**, 556 (2003), [https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(02\)01894-8](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(02)01894-8).

- [17] J. Cao, Z. Liu, S. Liu, H. Wang, L. Liu, Y. Hao, and X. Zhang, "The influence of the Al pre-deposition on the properties of AlN buffer layer and GaN layer grown on Si (1 1 1) substrate," *J. Cryst. Growth* **312**, 2044 (2010), <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2010.03.032>.
- [18] P. Reddy, G. Koblmüller, S. Rajan, and U. K. Mishra., "Point defect reduction in MOCVD (Al)GaN by chemical potential control and a comprehensive model of C incorporation in GaN," *J. Appl. Phys.* **122**, 245702 (2017), <https://doi.org/10.1063/1.5002682>.
- [19] C. G. van de Walle and J. Neugebauer, "First-principles calculations for defects and impurities: Applications to III-nitrides," *J. Appl. Phys.* **95**, 3851 (2004), <https://doi.org/10.1063/1.1682673>.
- [20] J. K. Kung and W. G. Spitzer, "Determination of Fermi-level effect on Si-site distribution in GaAs:Si," *J. Appl. Phys.* **45**, 2254 (1974), <https://doi.org/10.1063/1.1663572>.
- [21] S. Yu, U. M. Gösele, and T. Y. Tan, "A model of Si diffusion in GaAs based on the effect of the Fermi level," *J. Appl. Phys.* **66**, 2952 (1989), <https://doi.org/10.1063/1.344176>.
- [22] J. Xie, S.Mita, A. Rice, J. Tweedie, L. Hussey, R. Collazo, and Z.Sitar, " Strain in Si doped GaN and the Fermi level effect," *Appl. Phys. Lett.* **98**, 202101 (2011), <https://doi.org/10.1063/1.3589978>.
- [23] J. Neugebauer and C. G. van de Walle, "Atomic geometry and electronic structure of native defects in GaN," *Phys. Rev. B* **50**, 8067–8070 (1994), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.8067>.

# 5 Kompensationsdotierung von GaN

## 5.1 Motivation

Undotierte GaN Schichten, welche mittels der MOVPE hergestellt werden, weisen aufgrund von Eigendefekten und Verunreinigungen typischerweise eine n-Typ Leitung auf [1–4]. Es wird vermutet, dass diese ungewollte n-Dotierung durch den wachstumsinduzierten Einbau von Störstellen, wie z.B. Sauerstoff [1] oder Silizium [2] sowie durch intrinsische Defekte, wie beispielsweise Stickstoffvakanz  $V_N$  verursacht wird [3, 5].

Um dennoch eine intrinsische Ladungsträgerkonzentration zu erreichen, können akzeptorartige Haftstellen eingebaut werden, welche die überschüssigen freien Ladungsträger „einfangen“. Dafür eignen sich besonders Störstellen, welche idealerweise Energieniveaus in der Nähe der Bandlückenmitte besitzen, da solche Haftstellen nicht aktiv zum Leitungstransport beitragen. Der gezielte Einbau von tiefen Störstellen wird als Kompensationsdotierung bezeichnet und ermöglicht damit im Idealfall auf den intrinsischen Wert zu gelangen (wenn sich dadurch das Fermi-niveau in der Nähe der Bandlückenmitte befindet), was zu semi-isolierenden Eigenschaften führt. Übersteigt dabei die Haftstellenkonzentration die Hintergrunddotierung, so führt dies zu einem sog. Pinning des Fermi-niveaus an der energetischen Lage der Haftstelle in der Bandlücke des Halbleiters [6]. Das Pinning ist umso stärker, je mehr Haftstellen eingebaut werden. Im Allgemeinen ist die maximale Dotierkonzentration mittels MOVPE durch das Angebot des Dotanden in der Gasphase bestimmt [7]. Jedoch ist die höchste Dotierkonzentration nicht immer gleichzusetzen mit der elektrisch aktiven Konzentration. So kann der erhöhte Einbau von Störstellen zu Cluster- oder Komplexbildung sowie einem vermehrten Einbau von anderen Punktdefekten zu einer elektrischen Passivierung führen [8–10]. Des Weiteren kann eine zu hohe Konzentration zu einer Degradation des Kristalls führen und sich so nachteilig auf die Leitungsmechanismen auswirken [11, 12]. Denkbare Dotanden für GaN sind beispielsweise Mg, Fe oder C. Magnesium ist aufgrund der Passivierung durch

Wasserstoff während des Wachstums elektrisch inaktiv [13], wodurch ein zusätzlicher Prozessschritt notwendig ist, um Mg von H zu befreien und damit elektrisch zu aktivieren. Die Aktivierung kann beispielsweise durch Tempern im RTA erfolgen. Ein weiterer Nachteil von Mg ist seine energetische Lage innerhalb der Bandlücke, wodurch eine p-Leitung entstehen kann, falls die zu kompensierende Hintergrunddotierung überschritten wird. Des Weiteren zeigt das Dotieren mit Mg mittels MOVPE einen ausgeprägten Memoryeffekt [14], wodurch exakte Dotierprofile schwer zu realisieren sind. Daher ist Mg für eine Kompensationsdotierung eher ungeeignet. Eisen in GaN ist ein Akzeptor mit einem Energieniveau von ca. 0.6 eV unterhalb des Leitungsbands. Dies führt bei Raumtemperatur zu einer Elektronenkonzentration von  $\sim 3 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-3}$ . Die intrinsische Ladungsträgerkonzentration von GaN liegt bei  $\sim 10^{-9} \text{ cm}^{-3}$  [15]. Da Eisen jedoch aufgrund einer möglichen Querkontamination bei der CMOS-Fertigung ersetzt werden soll, liegt der Schwerpunkt der Arbeit auf der Kohlenstoffdotierung. Jedoch werden die Vor- und Nachteile beider Dotanden in Bezug auf dessen Eignung als Kompensator und zur Realisierung von hochisolierenden Pufferschichten untersucht und miteinander verglichen. Aus der Literatur [16] ist bekannt, dass die Dotierung mit Fe aufgrund des Memoryeffektes zu einer starken Verschleppung während des Wachstums führt. Dadurch kann Eisen ungewollt bis in die aktive Schicht einer Transistorstruktur reichen, wodurch das 2DEG durch ionisierte Streuzentren nachteilig beeinflusst werden kann, was sich in einer geringeren Elektronenbeweglichkeit und -dichte zeigen würde [16]. Zusätzlich wird über eine schwache elektrische Aktivierung berichtet [17]. Kohlenstoff kann aufgrund seines amphoterer Charakters in GaN [9, 10] sowohl auf den Gallium-Gitterplatz  $C_{\text{Ga}}$  als auch auf dem Stickstoffplatz  $C_{\text{N}}$  (Abbildung 5.1) eingebaut werden.

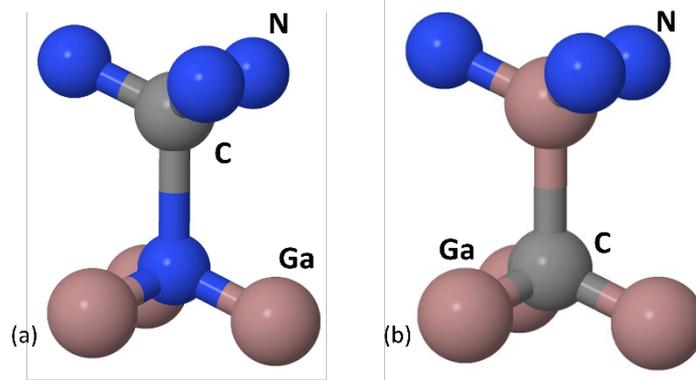


Abbildung 5.1: GaN Wurtzitstruktur mit (a)  $C_{Ga}$  und (b)  $C_N$

Aber auch der Einbau von Kohlenstoff auf einen Zwischengitterplatz ist denkbar, jedoch ist dies aufgrund der dafür notwendigen hohen Bildungsenergie unwahrscheinlich [9]. Das anfängliche Forschungsinteresse an Kohlenstoff in GaN wurde durch den Wunsch getrieben einen zu Mg alternativen p-Typ Dotanden zu finden, wodurch bereits Anfang der 1960er Jahre viele theoretische sowie experimentelle Arbeiten zu Kohlenstoff angefertigt wurden [4]. Da Kohlenstoff ein Element der IV- Hauptgruppe ist, konnte angenommen werden, dass sich  $C_N$  als Akzeptor und  $C_{Ga}$  als Donator verhält. So folgerte beispielsweise Fischer et al. [18] durch PL Messungen an GaN, dass  $C_N$  als flacher Akzeptor mit einer Bindungsenergie von 230 meV (über dem Valenzbandmaximum) eingebaut wird. Jedoch blieb der Versuch eine p-Typ Leitung mittels GaN:C herzustellen ohne Erfolg. Weitere experimentelle sowie theoretische Arbeiten folgten [4, 18–25], wobei das Ausbleiben der p-Typ Leitung dadurch erklärt wurde, dass nach Erreichen von semi-isolierenden Eigenschaften ein vermehrter Einbau des Donators  $C_{Ga}$  stattfindet, der die p-Leitung kompensiert [22, 25]. Lediglich im kubischen GaN konnte bisher eine geringe p-Typ Leitung im Bereich von  $3 - 6 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  nachgewiesen werden [21, 26–28]. Berechnungen von Lyons et al. [10], welche mittels HSE (hybrid functionals) durchgeführt wurden, zeigen, dass  $C_N$  kein flacher, sondern ein tiefer Akzeptor mit einer Ionisationsenergie von  $\sim 0.90 \text{ eV}$  über dem Valenzbandmaximum ist. Kohlenstoff auf dem Gallium-Gitterplatz  $C_{Ga}$  hingegen besitzt ein Energieniveau bei  $\sim 0.20 \text{ eV}$  unterhalb des Leitungsbandmaximums und wirkt als flacher Donator [9]. Die Fehlinterpretationen der ersten Arbeiten zur C-Dotierung lagen zum einen an den

damaligen vereinfachten „First-Principle“ Berechnungen [29] und zum anderen an dem amphoteren Charakter von Kohlenstoff, welcher stark von dem verwendeten Herstellungsprozess, den Wachstumsbedingungen sowie der eingesetzten Dotierquelle abhängt [30].

Der herkömmliche Weg mittels MOVPE die Kohlenstoffkonzentration in GaN Schichten zu steuern erfolgte zu Beginn dieser Arbeit fast ausschließlich durch eine Änderung der Wachstumsbedingungen (Temperatur, Druck und V/III-Verhältnis). Die Kohlenstoffquellen für den intrinsischen C-Einbau ist hierbei der üblicherweise verwendete Gallium-Präkursor Trimethylgallium (TMGa). Durch eine geeignete Wahl der Wachstumsparameter können damit C-Konzentrationen im Bereich von  $\sim 1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  [31] bis  $\sim 1 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  [32] erreicht werden. Wachstumsparameter, die für einen hohen C-Einbau notwendig sind, führen jedoch oft zu einer Verschlechterung der Kristallqualität [33]. Zusätzlich kann dadurch der Gitterplatz, auf dem sich Kohlenstoff vorzugsweise einbauen soll, variieren, wodurch sich die elektrischen Eigenschaften signifikant verändern können. Zudem werden die Bildungsenergien aller anderen möglichen Verunreinigungen und Komplexe mit beeinflusst, was sich sowohl auf die elektrischen als auch strukturellen Eigenschaften der GaN Schichten auswirkt [30]. Dies resultiert in unerwarteten bzw. unbekanntem elektrischen Eigenschaften. Um die C-Konzentration unabhängig von den Wachstumsbedingungen zu steuern, können Gas-Präkursoren mit verschiedenen Kohlenwasserstoffen verwendet werden. Es existiert eine Vielzahl an möglichen Hydrocarbon-Verbindungen, welche als Gas-Präkursoren im MOVPE Prozess in Frage kommen, wie beispielsweise Methan ( $\text{CH}_4$ ), Ethylen ( $\text{C}_2\text{H}_4$ ), Acetylen ( $\text{C}_2\text{H}_2$ ), Iso-Butan ( $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ ), Trimethylamin ( $\text{N}(\text{CH}_3)_3$ ) und Propan ( $\text{C}_3\text{H}_8$ ) [34]. Nach theoretischen sowie experimentellen Arbeiten konnte gezeigt werden, dass Propan zu den Verbindungen mit der höchsten Einbaueffizienz [35, 36] gehört. Des Weiteren ist Propan weit verbreitet und damit günstig in der Anschaffung, wodurch es auch wirtschaftlich betrachtet eine gute Wahl darstellt. Aus diesem Grund wurde die C-Dotierung in dieser Arbeit mit Propan durchgeführt. Hierfür wurde das Propan direkt in die Reaktorkammer geleitet, was eine von den Wachstumsparametern unabhängige Möglichkeit bietet die Kohlenstoffkonzentration zu steuern. Durch den damit

gewonnenen Freiheitsgrad kann weiterhin auf bestmögliche GaN Qualität optimiert sowie unabhängig davon die C-Konzentration für eine ausreichende bzw. gewünschte Kompensation eingestellt werden. Zusätzlich ergibt sich hierdurch die Möglichkeit die Einflüsse des Kohlenstoffes auf MOVPE gewachsene GaN Schichten besser zu verstehen und die daraus resultierenden physikalischen Phänomene systematisch zu analysieren. Dies war vor Beginn der Arbeit an GaN:C Schichten, welche mittels MOVPE hergestellt wurden, in diesem Umfang noch nicht möglich.

## 5.2 Extrinsische C-Dotierung mittels Propan

Für die extrinsische Kohlenstoffdotierung mittels Propan wurden für diese Arbeit zwei Gasquellen verwendet. Die erste Quelle besteht aus einem Propan/Wasserstoff Gasgemisch (10% 5N C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> in 6N H<sub>2</sub>) und wird im Folgendem als Propanquelle Nr. 1 bezeichnet. Damit konnte eine C-Konzentration von bis zu  $5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  bei einem Quellenfluss von 6 mmol/min erreicht werden. Für höhere Kohlenstoffkonzentrationen wurde im Verlauf der Arbeit eine 3N5 100% Propanquelle verwendet, die durch einen in-line Filter ergänzt wurde, um die benötigte Reinheit des Propans zu gewährleisten. Damit konnte bei den üblicherweise verwendeten GaN Wachstumsbedingungen eine Kohlenstoffkonzentration von  $1.2\text{-}1.8 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  erzielt werden. Diese wird im Weiteren Propanquelle Nr. 2 genannt. Der funktionelle Zusammenhang zwischen dem Präkursorfluss und dem C-Einbau wurde anhand einer hierfür hergestellten Stufenstruktur, wie sie in Abbildung 5.2a dargestellt ist, untersucht. Jede Stufe entspricht hierbei einem anderen eingestellten Propanfluss. Insgesamt besteht die Struktur aus sechs Einstellungen der Flussrate, die jeweils zu unterschiedlichen Dotierhöhen geführt hat. Die Struktur beginnt (in Wachstumsrichtung) mit einem undotierten Bereich, gefolgt vom maximalen einzustellenden Propanfluss (Propanquelle Nr. 1) und anschließend einer stetigen Verringerung der Flussrate je Stufe. Die Probe schließt zur Probenoberfläche hin mit einem undotierten Bereich ab. Die SIMS-Messung in Abbildung 5.2b zeigt hierbei eine lineare Abhängigkeit zum eingestellten Propanfluss, was einer genauen Steuerung der Dotierkonzentration durch die Flussrate des Präkursors entspricht. Anhand der steilen Flanken an den jeweiligen Stufen sowie an den Grenzschichten zu den undotierten Bereichen kann ein nennenswerter Anström- sowie Memoryeffekt ausgeschlossen werden.

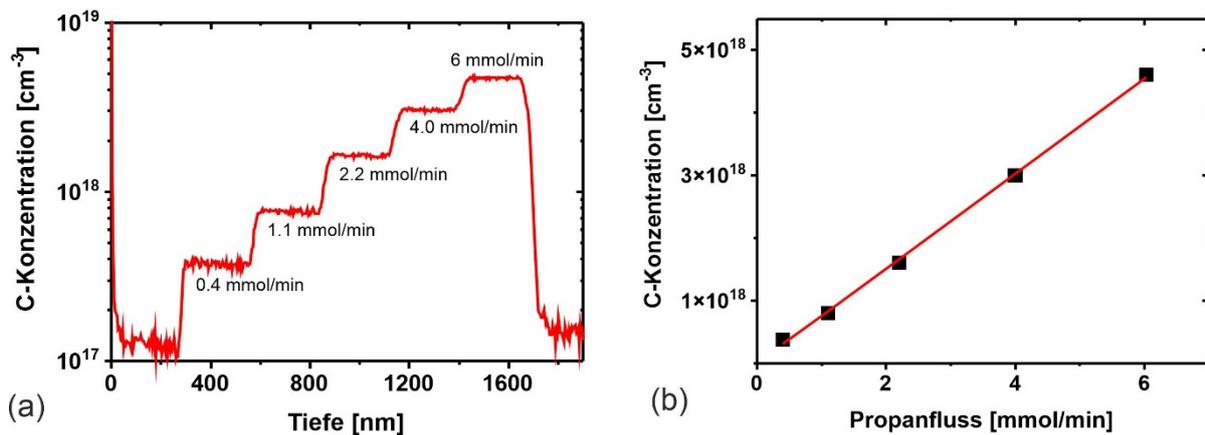


Abbildung 5.2: (a) SIMS-Messung zur Bestimmung der Kohlenstoffkonzentration bei variiertem Propanfluss. (b) Der Kohlenstoffeinbau zeigt eine lineare Abhängigkeit vom Propanfluss.

Für eine genauere Analyse des Memoryeffekts bei der Kohlenstoffdotierung wurde eine GaN Probe hergestellt, bei der eine Stufe mit der höchsten C-Konzentration durch die Verwendung der Propanquelle Nr. 2 dotiert wurde (Abbildung 5.3).

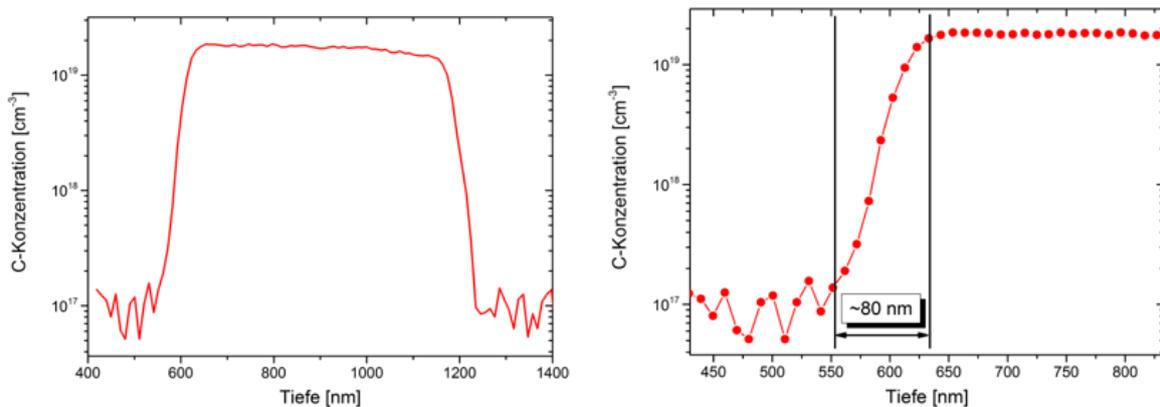


Abbildung 5.3: (MD10169) SIMS-Tiefenprofil zur Bestimmung des Memoryeffektes. Die Stufe wurde mit der Propanquelle Nr. 2 dotiert. (links) Es ist kein wesentlicher Anström- sowie Memoryeffekt zu beobachten. (rechts) Innerhalb von  $\sim 80 \text{ nm}$  sinkt die C-Konzentration von  $1.8 \cdot 10^{19} \text{cm}^{-3}$  auf unter  $1 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3}$ .

Dabei ist zu erkennen, dass die C-Konzentration innerhalb von  $\sim 80 \text{ nm}$  von  $1.8 \cdot 10^{19} \text{cm}^{-3}$  auf unter  $1 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3}$  abfällt. In Abbildung 5.4 ist zum Vergleich ein SIMS-Tiefenprofil einer Fe-dotierten Probe dargestellt, die unter gleichen Wachstumsbedingungen hergestellt wurde. Im Gegensatz zu C-dotierten Schichten

weist diese Fe-Dotierung einen stark ausgeprägten Memoryeffekt sowie ein deutlich höheres Anströmverhalten auf. Die Verschleppung beträgt bei dieser GaN:Fe Probe ungefähr  $\sim 500$  nm, um von einer Fe-Konzentration von  $\sim 4 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  auf unter  $\sim 3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  nach Abschalten der Dotierquelle zu sinken.

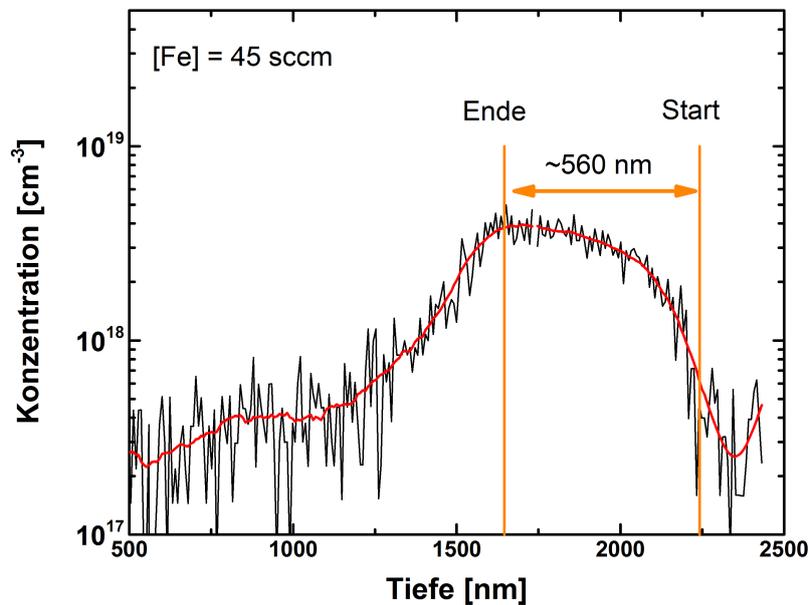


Abbildung 5.4: SIMS Tiefenprofil zur Bestimmung des Memoryeffektes von einer GaN:Fe Probe. Die Fe-Verschleppung reicht nach Ausschalten der Dotierquelle bis zu 500 nm in die Schicht hinein

Den Einfluss des V/III-Verhältnisses auf den C-Einbau wurde an einer Probe untersucht, welche aus drei Bereichen besteht (Abbildung 5.5). Für jeden Abschnitt wurde ein anderes V/III Verhältnis gewählt und innerhalb eines Bereiches wurde jeweils bei der Hälfte der Wachstumszeit ein konstanter Propanfluss dazu geschaltet. Das V/III Verhältnis wurde von 450 bis 1830 variiert. Der Ga-Fluss wurde dabei konstant gelassen; die Änderung des V/III Verhältnisses erfolgte über den Ammoniak-Fluss. In Abbildung 5.5 ist das SIMS-Tiefenprofil von dieser V/III Stufenprobe dargestellt und auch hierbei sind sehr steile Anströmflanken bei den unterschiedlichen V/III Prozessbedingungen zu beobachten. Über die Verschleppung bzw. den Memoryeffekt können bei dieser Struktur nur bedingt Aussagen getroffen werden, da mit dem jeweiligen Abschalten des Propanflusses gleichzeitig auch eine Änderung des V/III Verhältnisses erfolgte. An den undotierten Bereichen der Probe ist zu erkennen,

dass im untersuchten V/III Verhältnis von 450-1830 die Kohlenstoffhintergrunddotierung immer unter der SIMS-Nachweisgrenze von  $\sim 1 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  geblieben ist. Somit kann der Einfluss von Kohlenstoff in den hergestellten undotierten GaN Schichten im Wesentlichen vernachlässigt werden. Es zeigt sich darüber hinaus, dass Propan den Reaktor nicht „verdreht bzw. kontaminiert“ und daher keine aufwendigen Reaktorreinigungsprozeduren unternommen werden müssen, wie beispielsweise bei einem vorrangigen Schichtwachstum mit Magnesium.

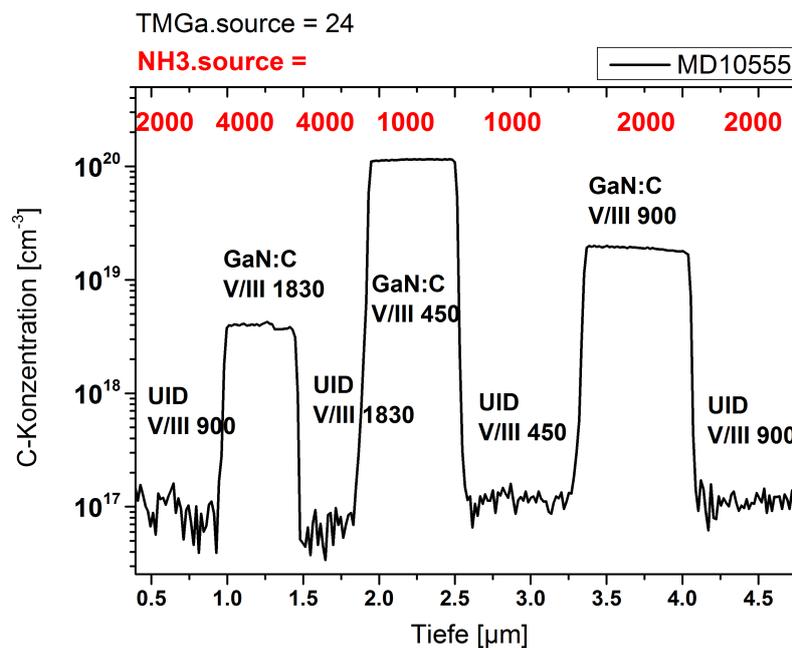


Abbildung 5.5: SIMS-Tiefenprofil zeigt den Einfluss von verschiedenen V/III Verhältnissen auf den extrinsischen Kohlenstoffeinbau durch die Verwendung von Propan

Die Auswertung der C-Konzentrationen bei den unterschiedlichen V/III-Verhältnissen ergibt, dass der Kohlenstoffeinbau bei höheren V/III-Verhältnissen geringer ist als bei „Ga-reicheren“ Prozessbedingungen. Dieses C-Einbauverhalten ist mit den Arbeiten aus der Literatur, die vom Kohlenstoffeinbau mittels MOVPE bei verschiedenen V/III Verhältnissen handeln, konsistent [34]. So kann der erhöhte C-Einbau bei einer Reduzierung des Ammoniaks (NH<sub>3</sub>) dadurch erklärt werden, dass hierdurch weniger Wasserstoff für eine Methan-Konversion zur Verfügung steht und damit der C-Einbau begünstigt wird [34]. Aber auch nach den Berechnungen der Bildungsenergien für den

Einbau von Kohlenstoff als  $C_N$ , wie in Abbildung 5.6a dargestellt, steigt die Einbauwahrscheinlichkeit bei „Ga-reicheren“ Wachstumsbedingungen und sinkt bei höheren V/III Verhältnissen. In Abbildung 5.6b sind die entsprechenden C-Konzentrationen, welche aus der SIMS-Messung der V/III Stufenprobe entnommen wurden, als Funktion des V/III-Verhältnisses aufgetragen. Sie zeigt den gleichen Trend des C-Einbaus wie es für  $C_N$  aus den Bildungsenergien zu erwarten wäre [10]. Die Bildungsenergie ist für den Einbau von Kohlenstoff als  $C_{Ga}$  unter „N-reicheren“ Prozessbedingungen geringer als bei „Ga-reicheren“ und würde demzufolge einen entgegengesetzten C-Einbau zeigen. Somit kann dies als erster Hinweis dafür betrachtet werden, dass sich Kohlenstoff mittels Propans vermehrt als  $C_N$  einbaut und damit nach Ref. [10] als tiefer Akzeptor.

Um den Einfluss der Temperatur auf den C-Einbau zu untersuchen wurde eine Probe mit konstantem Propanfluss gezüchtet bei der die Wachstumstemperatur von 996 bis 1106°C (Temperatur vom Suszeptor) variiert wurde.

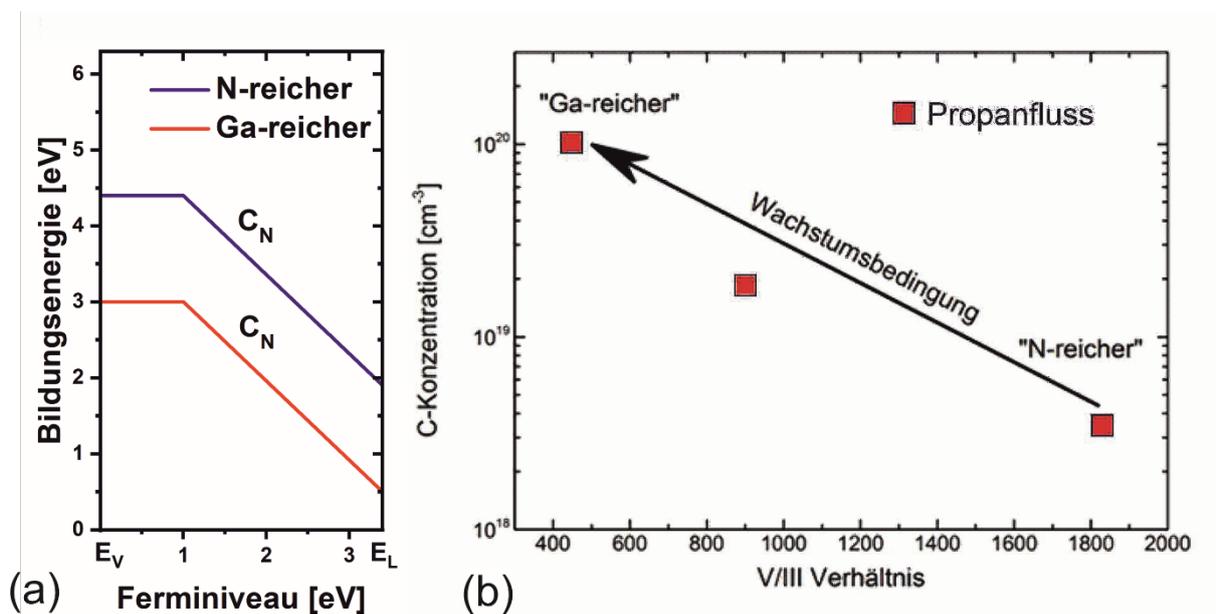


Abbildung 5.6: (a) Bildungsenergie für den Einbau bei „Ga-reicheren“ sowie „N-reicheren“ Wachstumsbedingungen nach [10], (b) C-Konzentration als Funktion des V/III Verhältnisses entnommen aus dem SIMS-Tiefenprofile von Probe MD10555

Hierbei ist zu erkennen (Abbildung 5.7), dass der extrinsische C-Einbau stark von der Wachstumstemperatur abhängt. So verringert sich die C-Konzentration bei höheren Wachstumstemperaturen deutlich, während es bei niedrigeren Temperaturen zu einem stärkeren C-Einbau kommt. Der temperaturabhängige intrinsische Einbau von Kohlenstoff in undotierten GaN Schichten ist in der Literatur bekannt [37–40] und kann durch das Model von Parish et al. [39] erklärt werden. Ein Effekt, wodurch die Kohlenstoffkonzentration mit höheren Wachstumstemperaturen abnimmt, ist die erhöhte Pyrolyse von Ammoniak. Steigende Temperaturen führen zu einer besseren Zersetzung von Ammoniak und dies führt zu einer erhöhten Verfügbarkeit von Wasserstoff an der Oberfläche. Dieser Wasserstoff kann mit Methylgruppen (CH<sub>3</sub>) aus dem Trimethylgallium, reagieren und Methan (CH<sub>4</sub>) bilden, das dann verdampft und somit die Kohlenstoffkonzentration reduziert.

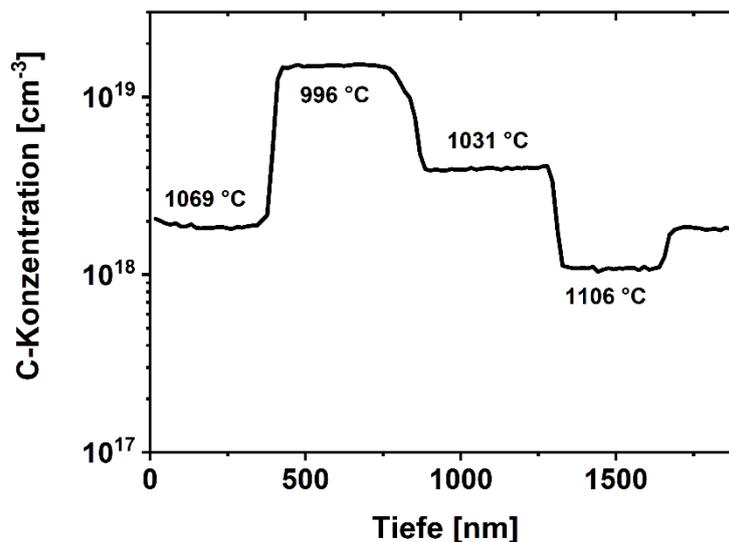
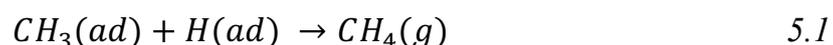


Abbildung 5.7: SIMS-Tiefenprofil einer Probe, bei der die Wachstumstemperatur variiert wurde, der Propanfluss wurde dabei konstant gelassen

Die Reaktionsgleichung kann beschrieben werden durch [39, 40]:



Das hierdurch entstehende CH<sub>4</sub> erhöht nicht den C-Einbau, da es im Wesentlichen nichtreaktiv ist. Bei einem weiteren Temperaturanstieg nimmt die Verfügbarkeit von Wasserstoff zu, bis durch die Pyrolyse von NH<sub>3</sub> oder dem Prozessgas H<sub>2</sub> eine

Sättigung erreicht wird. Des Weiteren verringert sich bei höheren Temperaturen die Bildung von Stickstoff-Vakanzen, da dadurch mehr Stickstoff zur Verfügung steht und wodurch eine Substitution von Stickstoff durch Kohlenstoff unwahrscheinlicher wird. Ebenfalls können höhere Temperaturen eine effizientere Entfernung von Methylgruppen von der Oberfläche begünstigen, wodurch der Kohlenstoffeinbau weiter verringert wird. Daraus folgt, dass der geringste C-Einbau durch höhere Wachstumstemperaturen zu erzielen ist.

In Ref. [34] wurden auf Basis von verschiedenen Hydrocarbon-Präkursoren „Chemical Kinetic Simulationen“ (CFD) durchgeführt. Für Propan ergab sich hieraus folgende Reaktionsgleichung:



Dabei wird  $C_2H_5$  im weiteren Verlauf zu  $C_2H_4$  und  $C_2H_2$  umgewandelt, welches die höchste Kohlenstoffeinbaueffizienz zeigt und begründet damit den starken C-Einbau durch die Verwendung von Propan.

### 5.3 Strukturelle Charakterisierung

Die strukturelle Charakterisierung erfolgte an C-dotierten GaN Proben, deren Aufbau in Abbildung 5.8 dargestellt ist. Im Folgenden werden sie als Probenserie 1 bezeichnet.

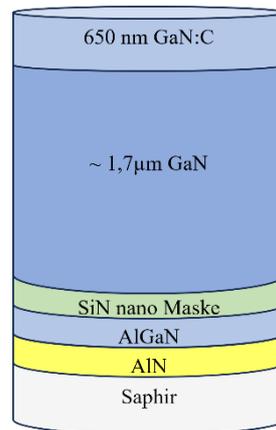


Abbildung 5.8: Schichtstruktur für die Untersuchung der extrinsischen Kohlenstoffdotierung von GaN. Der grüne Bereich stellt die SiN in-situ nano Maske dar.

Die Probenserie 1 wurde auf  $0.25^\circ$  in m-Richtung fehlorientierten (0001) Saphir-Substraten gezüchtet. Die Nukleations- sowie Pufferschicht besteht aus AlN/AlGaN, gefolgt von einer SiN in-situ nano Maske [41]. Die darauffolgende  $\sim 1.7 \mu\text{m}$  dicke voll koaleszierte GaN Schicht wurde durch 650 nm GaN:C zur Oberfläche hin abgeschlossen. Das GaN-Wachstum erfolgte bei einem V/III-Verhältnis von  $\sim 930$ , einer Wachstumstemperatur (Temperatur des Suszeptors) von  $1070^\circ\text{C}$  und einem Druck von 200 mbar. Der Ammoniakfluss betrug 89 mmol/min und der TMGa-Fluss  $96 \mu\text{mol}/\text{min}$ . Als Prozessgas wurde  $\text{H}_2$  verwendet.

*Tabelle 5.3: Probenserie 1 wurde extrinsisch mit unterschiedlichen Kohlenstoffkonzentrationen durch die Verwendung von zwei Propanquellen dotiert.*

<b>Probenserie 1</b>	<b>C [cm<sup>-3</sup>]</b>	<b>Propanquelle</b>
<b>MD9859</b>	undotiert	-
<b>MD9856</b>	$8 \cdot 10^{17}$	1
<b>MD9891</b>	$1.6 \cdot 10^{18}$	1
<b>MD9857</b>	$2.9 \cdot 10^{18}$	1
<b>MD9854</b>	$4.6 \cdot 10^{18}$	1
<b>MD10146</b>	$5.5 \cdot 10^{18}$	2
<b>MD10150</b>	$6.7 \cdot 10^{18}$	2
<b>MD10152</b>	$1.1 \cdot 10^{19}$	2
<b>MD10142</b>	$1.2 \cdot 10^{19}$	2

Die Kristallqualität wurde durch Messung des Tilt- bzw. Twists mittels HRXRD und GIID-Messungen am (0002) und (10 $\bar{1}$ 0) GaN Reflex bestimmt. In Abbildung 5.9 sind die entsprechenden Halbwertsbreiten als Funktion der Kohlenstoffkonzentration aufgetragen. Als Referenzpunkt dient hierbei eine undotierte Probe. Die Messungen ergeben innerhalb einer Probenserie keine signifikante Verschlechterung der Kristallqualität. Die besseren Halbwertsbreiten, die bei höheren C-Konzentrationen zu erkennen sind, resultieren aus einer optimierten SiN in-situ nano Maske der Probenserie 1.

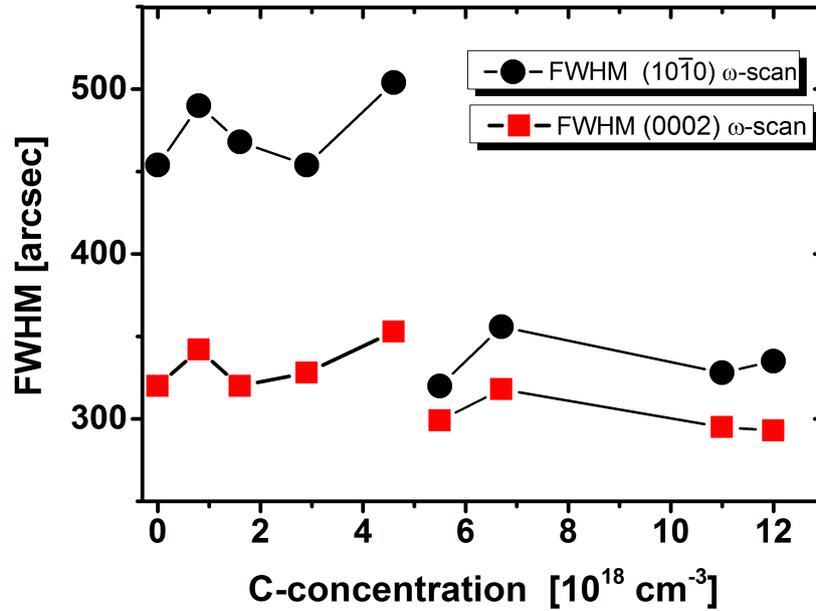


Abbildung 5.9: Tilt und Twist Werte ermittelt aus  $\omega$ -Scans am (0002) sowie ( $10\bar{1}0$ ) GaN Reflex von C-dotierten Proben der Serie 1

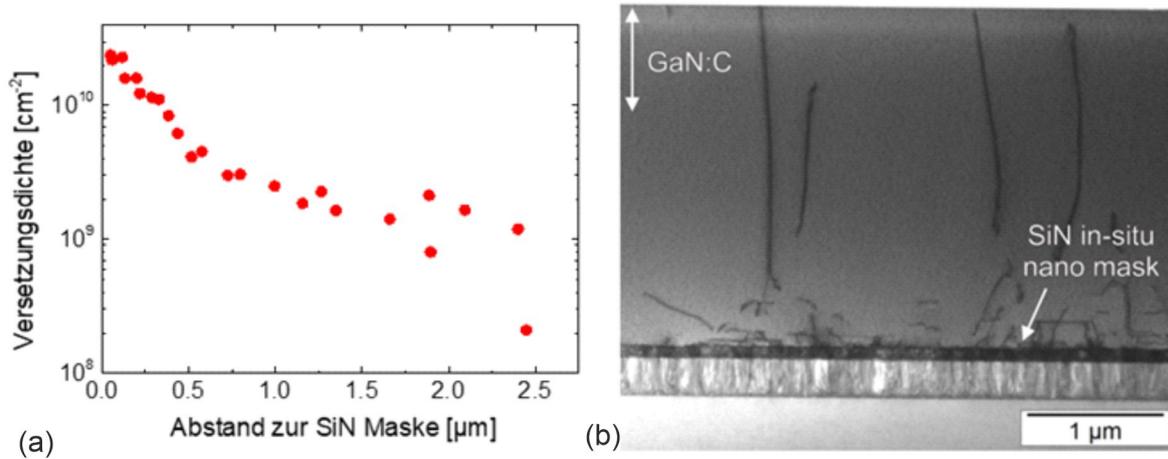


Abbildung 5.10: (a) Abnahme der Versetzungsdichte nach der SiN in-situ nano Maske, (b) STEM-Aufnahme der Probe MD9854 mit einer C-Dotierung von  $4.6 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

Den Einfluss der C-Dotierung auf die Versetzungen wurde an Probe MD9854 mit einer Kohlenstoffkonzentration von  $4.6 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  näher untersucht. Hierfür wurden STEM-Aufnahmen durchgeführt die in Abbildung 5.10b dargestellt sind. Die starke

Reduzierung der Versetzungsdichte in den ersten nm nach der AlN/AlGaN Pufferschicht erfolgt durch die SiN in-situ nano Maske [42]. Vor allem jedoch zeigen die Messungen, dass durch die C-Dotierung die Versetzungsdichte nicht steigt und es zu keiner Änderung der Versetzungsdistribution kommt. So tritt kein Abknicken von Versetzungen auf, wie dies oftmals bei Si-dotierten GaN Schichten beobachtet wird [43]. Daraus lässt sich schließen, dass eine C-Dotierung an sich nicht zwangsläufig zu einer Degradation der Kristallqualität führt. Daher sind die unterschiedlichen Beobachtungen und Aussagen aus der Literatur bezüglich höherer C-Konzentrationen sowie deren Auswirkungen auf die Kristallqualität [44] auf die Änderung der Wachstumsparameter zur Steigerung des C-Einbaus zurückzuführen [31, 45].

Die Untersuchung der Morphologie erfolgte mittels AFM und Nomarski-Mikroskop. Die AFM-Messungen ( $5\ \mu\text{m} \times 5\ \mu\text{m}$ ) und die daraus ermittelten rms Rauigkeiten der Probenreihe 1 sind in Abbildung 5.11 dargestellt. Es zeigt sich dabei eine leichte Erhöhung der rms Rauigkeit mit steigender Dotierhöhe von 0.202 nm bei der undotierten Probe bis auf 0.585 nm bei  $[C] = 4.6 \cdot 10^{18}\ \text{cm}^{-3}$ ; eine wesentliche Verschlechterung der Morphologie ist hierbei jedoch nicht zu erkennen.

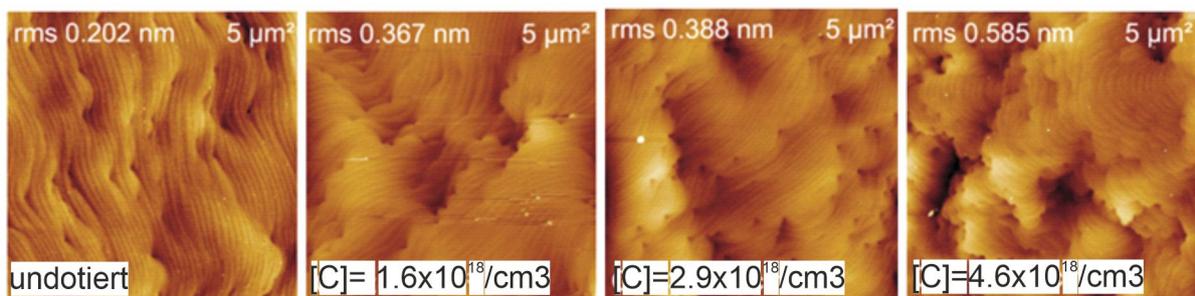


Abbildung 5.11: AFM-Messungen der rms Rauigkeit in Abhängigkeit der Kohlenstoffkonzentration von Probenreihe 1

Bei Probenreihe 1 trat jedoch ab einer Dotierkonzentration von  $[C] \sim 7 \cdot 10^{18}\ \text{cm}^{-3}$  eine Veränderung der Morphologie auf. In Abbildung 5.12 sind Nomarskimikroskop-Aufnahmen der Oberflächen von GaN:C Schichten im Dotierbereich von  $5.5 \cdot 10^{18}$  bis  $1.2 \cdot 10^{19}\ \text{cm}^{-3}$  dargestellt. So beginnen ab einer gewissen C-Konzentration die Plateaus breiter zu werden und die Wachstumsstufen folgen einer Vorzugsrichtung, die durch

das Saphir-Substrat vorgegeben wird. Diese Oberflächenmorphologie ist aus der Literatur bekannt und wird als Step-Bunching bezeichnet [46].

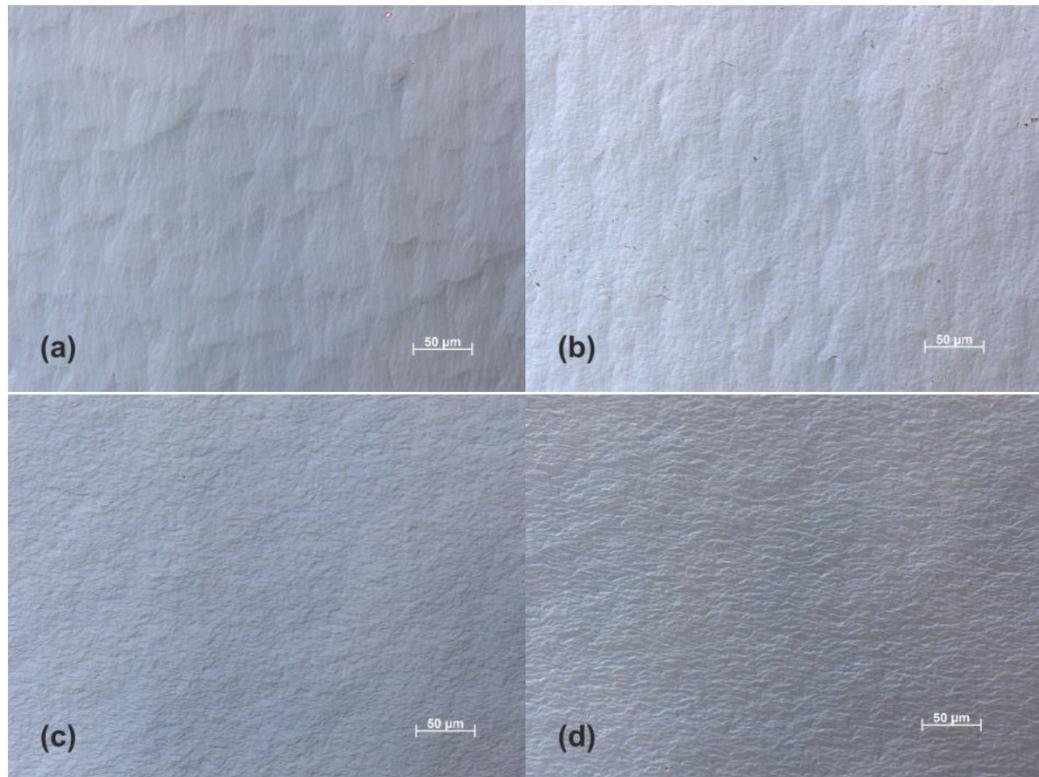
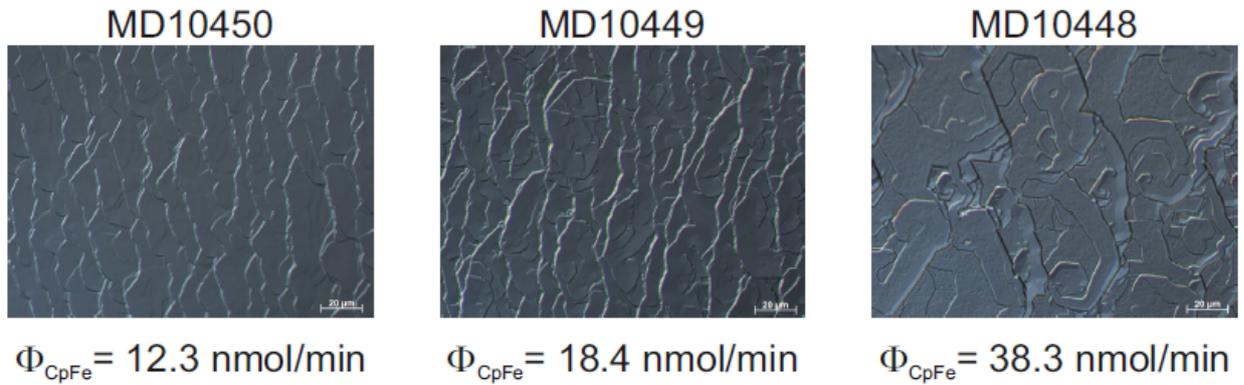


Abbildung 5.12: Nomarskimikroskop-Bilder von GaN:C Proben der Probenserie 1: (a) (MD10146)  $[C] = 5.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , (b) (MD10150)  $[C] = 6.7 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , (c) (MD10152)  $[C] = 1.1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , (d) (MD10142)  $[C] = 1.2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

Da jedoch glatte Grenzflächen für gute elektrische Eigenschaften eines FETs notwendig sind, wurden Versuche unternommen, um dieses Step-Bunching zu verhindern. Eine Möglichkeit besteht darin solch eine Oberfläche mit undotiertem GaN zu überwachsen, was nach  $\sim 200 \text{ nm}$  wieder zu glatten Oberflächen mit einer rms Rauigkeit von  $0.27 \text{ nm}$  führt. Im Vergleich dazu zeigt schon eine geringe Erhöhung des Fe-Präkursorflusses über  $10.3 \text{ nmol/min}$  (was einer Fe-Konzentration von  $>5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  entspricht) eine starke Degradation der Oberfläche (Abbildung 5.13). Dadurch ist die maximale Fe-Dotierkonzentration bei den üblicherweise verwendeten Wachstumsbedingungen auf  $[\text{Fe}] \sim 4 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  limitiert. Es konnte damit die in Ref

[15] erzielte Fe-Konzentration von  $1.7 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  nicht erreicht werden ohne dabei eine massive Oberflächendegradation hervorzurufen.



*Abbildung 5.13: Einfluss des Fe-Präkursorflusses auf die Morphologie von GaN:Fe im Normarskimikroskop*

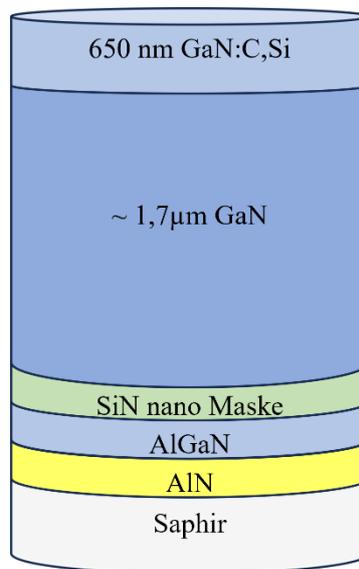
## 5.4 Elektrische Eigenschaften

Obwohl viele Studien gezeigt haben, dass mit Kohlenstoff eine Kompensationsdotierung von n-Typ GaN erzielt werden kann, sind die Resultate aus elektrischen Messungen je nach Literaturquelle sehr unterschiedlich. So untersuchten beispielsweise Zhang et al. [47] GaN:C Proben welche mittels HVPE hergestellt wurden. Als Kohlenstoffquelle wurde  $C_3H_8$  verwendet, wodurch eine Kohlenstoffkonzentration von  $\sim 5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  erzielt werden konnte. Trotz der hohen C-Dotierung wurde dennoch eine Elektronenkonzentration von  $N_s = 4 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  gemessen, was zu der Annahme führte, dass zusätzliche donatorartige Defekte durch die C-Dotierung eingebaut werden, welche die elektrischen Eigenschaften bestimmen. Armitage et al. [48] untersuchte MBE Proben die mittels  $CCl_4$  und  $CS_2$  dotiert wurden. Für die Bestimmung der Kompensationswirkung des Kohlenstoffs wurden diese Proben zusätzlich mit Silizium kodotiert. Die Elektronenkonzentration betrug  $N_s = 1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  und das bei einer Si-Konzentration von  $\sim 5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  und einer C-Konzentration von  $\sim 1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . In diesem Fall wurde vermutet, dass lediglich eine kleine Menge der eingebauten Kohlenstoffatome als elektrisch aktive Akzeptoren eingebaut werden und dass dies sogar bei  $n^{++}$ -Material geschieht. Darüber hinaus wurde eine Reduzierung des Widerstands in semi-isolierendem GaN:C Schichten ab einer C-Konzentration von über  $1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  beobachtet bzw. festgestellt, was als vermehrter Einbau von Kohlenstoff als  $C_{Ga}$  oder als elektrisch inaktiver Komplex gedeutet wurde. Im Gegensatz dazu fand Green et al. [24] bei der Untersuchung des Einflusses von  $CBr_4$  als C-Dotierquelle, welches mittels RF-Plasma im MBE Wachstumsprozess aufgespalten wurde, einen Kompensationsfaktor von nahezu eins bei einer Si, C kodotierten Probenserie. Tang et al. [49] erhielt an C-dotierten MBE GaN Schichten, welche eine Kohlenstoffkonzentration im mittleren  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  Bereich aufwies, erheblich höhere isolierende Eigenschaften als bei undotierten Proben mit vergleichbaren Versetzungsdichten. Hierbei wurde als Kohlenstoffquelle Methan verwendet, was für den Dotierprozess durch eine Ionenkanone aufgespalten wurde. Da in diesem Fall die Versetzungsdichte als mögliche Ursache ausgeschlossen werden konnte, wurde der erhöhte Widerstand durch das „grain-boundary-controlled-

transport“ Modell (GBCT) beschrieben [49]. Das Model geht davon aus, dass Kohlenstoff-Haftstellen sich vorzugsweise an wachstumsinduzierten Korngrenzen anreichern, was zu höheren Potentialbarrieren führt. Diese Beispiele aus dem Bereich des HVPE und MBE Wachstums (Ga-reicher als bei der MOVPE) von GaN:C Schichten zeigen, dass sowohl die Herstellungsmethode als auch die verwendete Kohlenstoffquelle einen signifikanten Einfluss auf die elektrischen Eigenschaften von C-dotiertem GaN haben. Jedoch existieren zum MOVPE Wachstum von C-dotiertem GaN viele Studien zum Einfluss auf die Spannungsfestigkeit mit teils sehr unterschiedlichen Resultaten [33, 39, 50]. Der Großteil dieser Arbeiten bezieht sich bei ihren Untersuchungen des C-Einbaus auf den Einfluss der Wachstumsparameter [50]. So führt beispielsweise ein höherer Druck während des Wachstums zu einem Ansteigen der Korngröße, was zwar zu einer Reduzierung der Versetzungsdichte führt, jedoch reduziert dies gleichzeitig auch den Einbau des Kohlenstoffs. Dies wiederum resultiert (unter Annahme des C-Einbaus als tiefer Akzeptor) in einer Abnahme des Widerstandes. Der Kohlenstoffeinbau ist auch von der Temperatur abhängig. So führt eine niedrigere Wachstumstemperatur zwar zu einem höheren C-Einbau jedoch auch zu einer schlechteren Kristallqualität und damit einem nachteiligen Leckstromverhalten [33]. Obwohl einige Gruppen zeigen konnten, dass eine hohe C-Konzentration von bis zu  $\sim 1 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  bei Änderung des V/III-Verhältnisses und Druckes zu einer guten Kristallqualität und gleichzeitig zu guten Spannungsfestigkeiten führen kann [32], existiert keine eindeutige Aussage über eine optimale C-Konzentration für das Erreichen eines maximalen Widerstandes von GaN:C Schichten [50]. Daher werden in diesem Abschnitt die elektrischen Eigenschaften von C-dotierten GaN Schichten untersucht, welche unter konstanten Wachstumsbedingungen hergestellt wurden und bei denen lediglich der Präkursorfluss für die nötige C-Konzentration variiert wurde.

## 5.5 Kompensationseffizienz

Um die Kompensationseffizienz des durch das Propan eingebauten Kohlenstoffs zu ermitteln, wurde eine Si,C kodotierte Probenserie hergestellt. Diese Serie (welche im Folgenden Probenserie 2 genannt wird) besteht aus vier Proben, bei denen der Silan-Fluss jeweils konstant gehalten wurde, um eine identische Si-Dotierung zu erzielen; Der Propanfluss wurde hingegen bei jeder Probe geändert. Der Probenaufbau dieser Serie ist in Abbildung 5.14 gezeigt.



*Abbildung 5.14: Schichtstruktur der Si,C kodotierten Probenserie 2. Der grüne Bereich stellt die SiN in-situ Nanomaske dar*

Die freie Ladungsträgerkonzentration jeder Probe wurde mittels Hall-Effekt bei Raumtemperatur ermittelt. Die entsprechenden Si und C Konzentrationen wurden durch SIMS-Messungen bestimmt. In Tabelle 5.1 sind die entsprechenden Messwerte der Probenserie 2 aufgelistet.

Tabelle 5.1: Probenserie 2 für die Bestimmung der Kompensationseffizienz. Die Siliziumkonzentration wurde konstant gehalten, während die Kohlenstoffkonzentration variiert wurde.

Probenserie 2	$n_{Hall}$ [ $cm^{-3}$ ]	Si [ $cm^{-3}$ ]	C [ $cm^{-3}$ ]
MD9834	$5.5 \cdot 10^{18}$	$5.9 \cdot 10^{18}$	$5 \cdot 10^{17}$
MD9845	$3.9 \cdot 10^{18}$	$5.9 \cdot 10^{18}$	$2.0 \cdot 10^{18}$
MD9847	$2.1 \cdot 10^{18}$	$6.0 \cdot 10^{18}$	$4.3 \cdot 10^{18}$
MD9849	$4 \cdot 10^{17}$	$6.0 \cdot 10^{18}$	$5.3 \cdot 10^{18}$

Die freie Elektronenkonzentration dieser Serie ist in Abbildung 5.15a als Funktion des Propanflusses dargestellt. Dabei ist ein linearer Abfall der freien Ladungsträgerkonzentration mit Zunahme des Propanflusses zu erkennen.

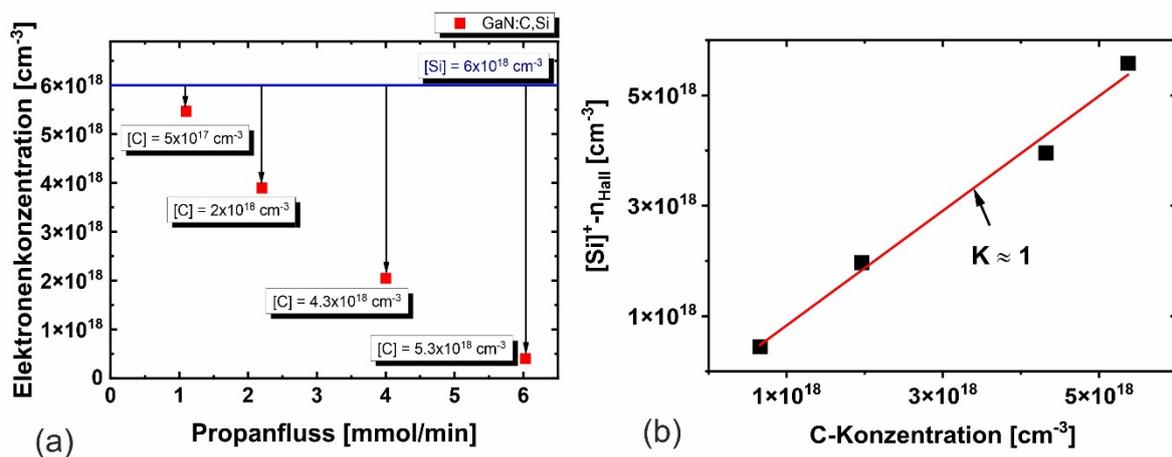


Abbildung 5.15: Bestimmung der Kompensationseffizienz der GaN:C,Si kodierten Probenserie 2, (a) Elektronenkonzentration als Funktion des Propanflusses, (b) Kompensationseffizienz von Kohlenstoff als Akzeptor in n-Typ GaN.

Unter Annahme, dass die n-Typ Dotierung durch Silizium die n-Typ Hintergrunddotierung um Größenordnungen übersteigt sowie unter der weiteren Annahme, dass bei Raumtemperatur alle Siliziumatome ionisiert sind, gilt für die Ladungsträgerneutralität die Gleichung:

$$n_{Hall} + [C]^- \approx [Si]^+ \quad 5.3$$

Dabei ist  $n_{Hall}$  die freie Ladungsträgerkonzentration (gemessen bei Raumtemperatur) und  $[Si]^+$  die ionisierte Silizium Störstellenkonzentration, die mit ihrer Atomkonzentration identisch ist. Wird weiter angenommen, dass Kohlenstoff in n-Typ GaN entweder als elektrisch aktiver Akzeptor  $[C]^-$  oder als elektrisch neutrale Störstelle  $[C]^0$  eingebaut wird, so entspricht die gesamte Kohlenstoffkonzentration dem folgenden Ausdruck:

$$[C] = [C]^- + [C]^0 \quad 5.4$$

Mit Gleichung 5.4 kann hieraus die Einbaueffizienz von Kohlenstoff als elektrisch aktiver Akzeptor bestimmt, werden:

$$K = \frac{[Si]^+ - n_{Hall}}{[C]} = \frac{[C]^-}{[C]} \quad 5.5$$

In Abbildung 5.15b ist die Auswertung der Probenserie 2 nach Gleichung 5.5 dargestellt und zeigt mit einer Steigung K von nahezu eins einen vollständigen Einbau von Kohlenstoff als elektrisch aktiver Akzeptor, was nach Ref. [10] einem Einbau von Kohlenstoff als  $C_N$  entspricht. Die Auswertung von eigenen Fe-dotierten Proben ergibt, unter den gleichen Annahmen wie beim Kohlenstoff, eine Einbaueffizienz als elektrisch aktiver Akzeptor von ~60%. In Ref. [17] wurde hingegen eine maximale Kompensationseffizienz von 34% ermittelt. Es könnte eventuell die Löslichkeitsgrenze überschritten worden sein, wodurch verstärkt elektrisch neutrale Störstellen oder Komplexe eingebaut wurden.

## 5.6 Semi-isolierende Eigenschaften

Um den Übergang von n-Typ zu semi-isolierendem Material genauer zu untersuchen, wurde die Probenserie 3 hergestellt, bei der die C-Konzentration konstant bei  $[C] = 6 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  gehalten und lediglich die Si-Konzentration im Bereich von  $4 \cdot 10^{17} - 3.1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  variiert wurde.

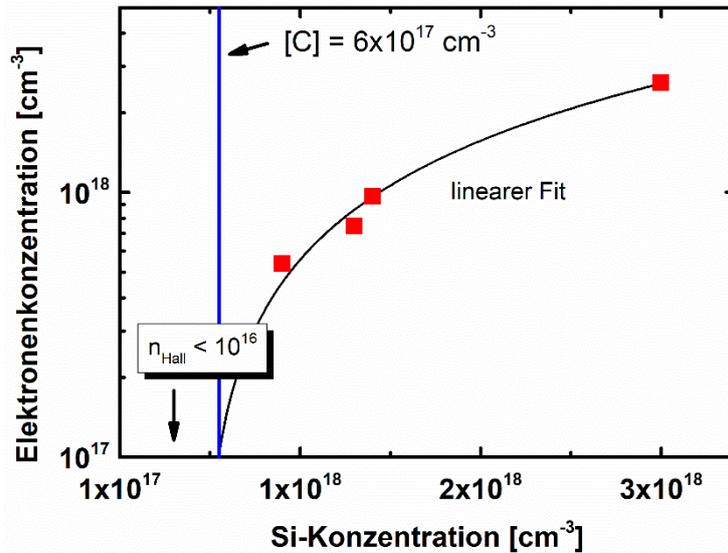


Abbildung 5.16: Elektronenkonzentration in Abhängigkeit der Si-Konzentration in GaN:C,Si kodotierten Proben. Die Proben, welche eine Si-Dotierung aufweisen die höher ist als die Kohlenstoffkonzentration zeigen n-Typ Leitfähigkeit auf, währende Hall-Effekt Messungen an Proben mit einer niedrigeren Si-Dotierung als die der Kohlenstoffkonzentration semi-isolierende Eigenschaften zeigen.

In Abbildung 5.16 ist die mittels Hall-Effekt gemessene Elektronenkonzentration als Funktion der Si-Konzentration aufgetragen. Die blaue vertikale Linie markiert hierbei die C-Konzentration, mit der die Proben kodotiert wurden. Diejenigen Proben die eine Dotierkonzentration von  $[C] < [Si]$  aufweisen, zeigen eine n-Typ-Leitung, wohingegen bei einer höheren Kohlenstoffkonzentration als die der Si-Dotierung keine Hall-Effekt-Messungen mehr durchgeführt werden konnten. Semi-isolierende Eigenschaften können damit bei  $[Si] < [C]$  erzielt werden bzw. wenn die C-Dotierung, die n-Typ Hintergrunddotierung übersteigt.

*Tabelle 5.6: Die Elektronenkonzentration  $n_{\text{Hall}}$  wurde bei Raumtemperatur mittels Hall-Effekt bestimmt und die Silizium- sowie Kohlenstoffkonzentration der kodotierten Proben mittels SIMS gemessen. Bei der Probenserie 3 wurde die C-Dotierung durch einen festgelegten Propanfluss konstant gehalten, während die Siliziumkonzentration variiert wurde.*

<b>Probenserie 3</b>	<b><math>n_{\text{Hall}}</math> [cm<sup>-3</sup>]</b>	<b>Si [cm<sup>-3</sup>]</b>	<b>C [cm<sup>-3</sup>]</b>
<b>MD9851</b>	$2.6 \cdot 10^{18}$	$3.1 \cdot 10^{18}$	$6 \cdot 10^{17}$
<b>MD9833</b>	$9.7 \cdot 10^{17}$	$1.5 \cdot 10^{18}$	$6 \cdot 10^{17}$
<b>MD9842</b>	$7.5 \cdot 10^{17}$	$1.4 \cdot 10^{18}$	$7 \cdot 10^{17}$
<b>MD9843</b>	$5.4 \cdot 10^{17}$	$1.0 \cdot 10^{18}$	$7 \cdot 10^{17}$
<b>MD9836</b>	-	$4 \cdot 10^{17}$	$6 \cdot 10^{17}$

## 5.7 Leckstromverhalten und Spannungsfestigkeit an drei Probenstrukturen

Der Einfluss der Kohlenstoffdotierung durch die Verwendung von Propan auf das Leckstromverhalten und die Spannungsfestigkeit wurden an drei unterschiedlichen Probenstrukturen untersucht (Abbildung 5.17). Probenstruktur 1 ist hierbei identisch zu der, die verwendet wurde, um die Kompensationseffizienz zu untersuchen, jedoch wurde in diesem Fall auf die Si-Kodotierung verzichtet. Bei der Probenstruktur 2 wurde auf die SiN in-situ nano Maske verzichtet und es folgte eine GaN:C Dotierung direkt nach der AlGaN/AlN Pufferschicht. Die Dicke der C-dotierten GaN-Schicht beträgt  $\sim 3 \mu\text{m}$ . Diese wurden ebenfalls auf einem Saphir-Substrat gezüchtet, um dadurch Aussagen über die laterale Spannungsfestigkeit treffen zu können. Die elektrische Charakterisierung erfolgte jeweils durch eine laterale Zweipunktmessung an einer TLM-Struktur. Hierfür wurden metallische Kontakte, welche typischerweise als Ohm'sche Kontakte (Ti/Al/Ni/Au) auf n-Typ GaN verwendet werden, benutzt. AlGaN/GaN FET-Strukturen auf n-Typ Si(111) werden als Probenstrukturen 3 bezeichnet. Bei diesen FET-Strukturen wurden unterschiedliche Bereiche des GaN-Puffers mit unterschiedlichen C-Konzentrationen dotiert und zwischen den Ohm'schen Kontakten wurde das 2DEG durch Mesaätzen entfernt. Es erfolgten an der Probenstruktur 1 und 3 sowohl laterale als auch vertikale Messungen.

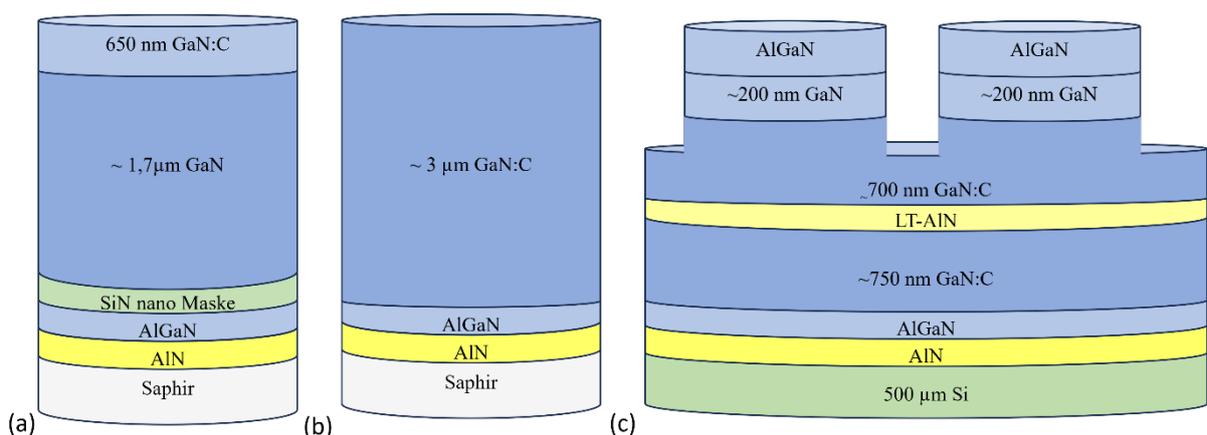


Abbildung 5.17: Verwendete Probenstrukturen für die elektrische Charakterisierung  
(a) Probenstruktur 1, (b) Probenstruktur 2 und (c) Probenstruktur 3

## 5.8 Elektrische Charakterisierung der Probenstruktur 1

Es wurden IU-Kennlinien der Probenstruktur 1 im C-Konzentrationsbereich von undotiert bis  $1.2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  mit einem Keithley 4200 Halbleitertester aufgezeichnet. Dabei zeigen Zwei-Punkt-Messungen zwischen den Kontakten bei unterschiedlichen Kontaktabständen interessanterweise, dass die IU-Kennlinien im Wesentlichen unabhängig vom lateralen Abstand sind (Abbildung 5.18b). Dies deutet auf einen parasitären Strompfad hin (Abbildung 5.18a), wodurch die Kennlinien ihre laterale Abhängigkeit verlieren. Da die Messungen unter Zuhilfenahme von Isolieröl durchgeführt wurden, kann ein signifikanter Strompfad über Oberflächenzustände ausgeschlossen werden.

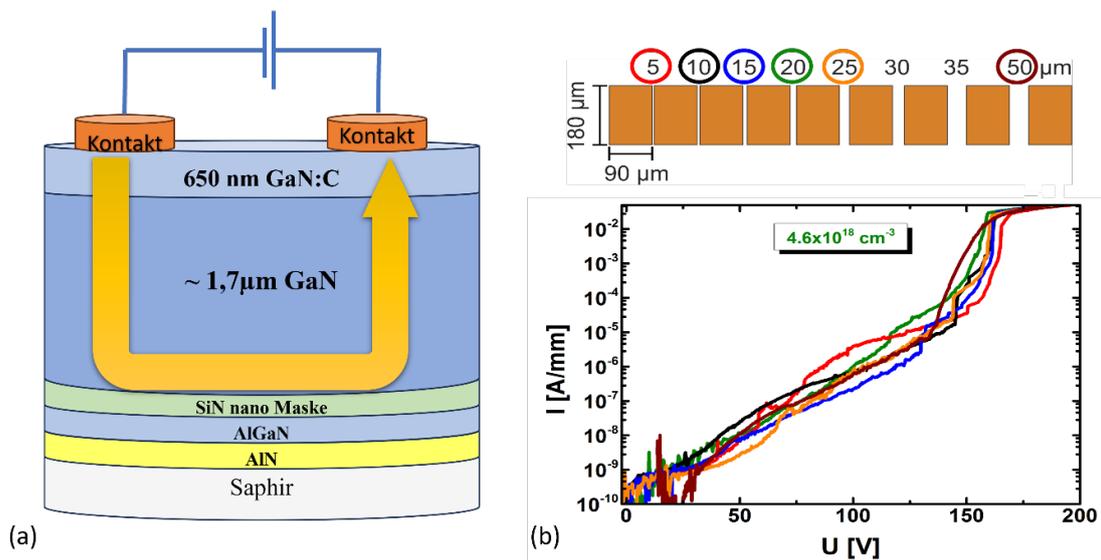


Abbildung 5.18: Laterale Kontaktgeometrie der Probenstruktur 1. (a) Möglicher Leckstrompfad unterhalb der 650 nm C-dotierten GaN Schicht und entlang des n-Typ Bereichs oberhalb der SiN in-situ nano Maske (b) IU-Kennlinien aufgenommen bei verschiedenen Kontaktabständen und zeigen keine laterale Abhängigkeit des Leckstroms

Da jedoch die C-Dotierung einen wesentlichen Einfluss auf den Kennlinienverlauf hat (Abbildung 5.20a), aber keine laterale Abhängigkeit besitzt, bleibt lediglich der undotierte Bereich des GaN-Puffers als mögliche Ursache dieses Verhaltens übrig.

Untersuchungen an a-planaren GaN-Schichten haben gezeigt, dass SiN in-situ nano-Masken während der Koaleszenz aufgrund einer Si-Verschleppung einen n-Typ-Kanal ausbilden [51]. Um den Einfluss der SiN in-situ nano Maske näher zu untersuchen,

wurde ein SIMS-Tiefenprofil des Unterbaus aufgenommen. Im SIMS-Tiefenprofil (Abbildung 5.19) ist zu erkennen, dass die SiN in-situ nano Maske während der Koaleszenz tatsächlich zu einer Si-Verschleppung führt, wodurch ein n-Typ leitender Bereich entsteht. Die Si-Dotierung hat ihren höchsten Wert bei  $\sim 1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  welche nach  $\sim 700 \text{ nm}$  auf unter  $2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  absinkt und kann die Ursache der fehlenden lateralen Abstandsabhängigkeit in den IU-Kennlinien erklären.

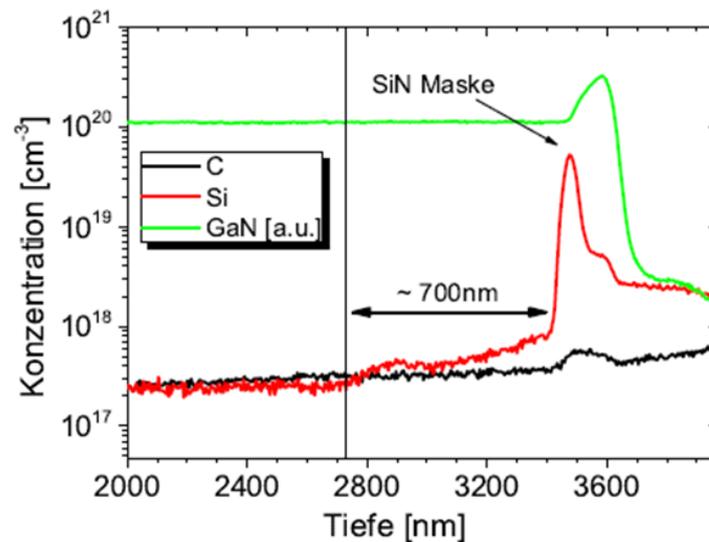


Abbildung 5.19: SIMS-Tiefenprofil von Kohlenstoff und Silizium im GaN-Puffer einer Probe mit einer SiN in-situ nano Maske. Es zeigt eine Verschleppung von Silizium in den GaN-Puffer, wodurch ein leitender Bereich entstehen kann.

Die Messung der IU-Kennlinien in Abbildung 5.20a erfolgte zwischen zwei Kontakten ( $180 \mu\text{m} \times 90 \mu\text{m}$ ) in einer Entfernung von  $20 \mu\text{m}$ . Es konnte eine deutliche Verringerung des Leckstroms in Abhängigkeit von der C-Dotierung festgestellt werden. Bereits eine C-Konzentration von  $8 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  zeigt im Vergleich zur undotierten Referenzprobe eine Reduzierung des Leckstroms um etwa drei Größenordnungen.

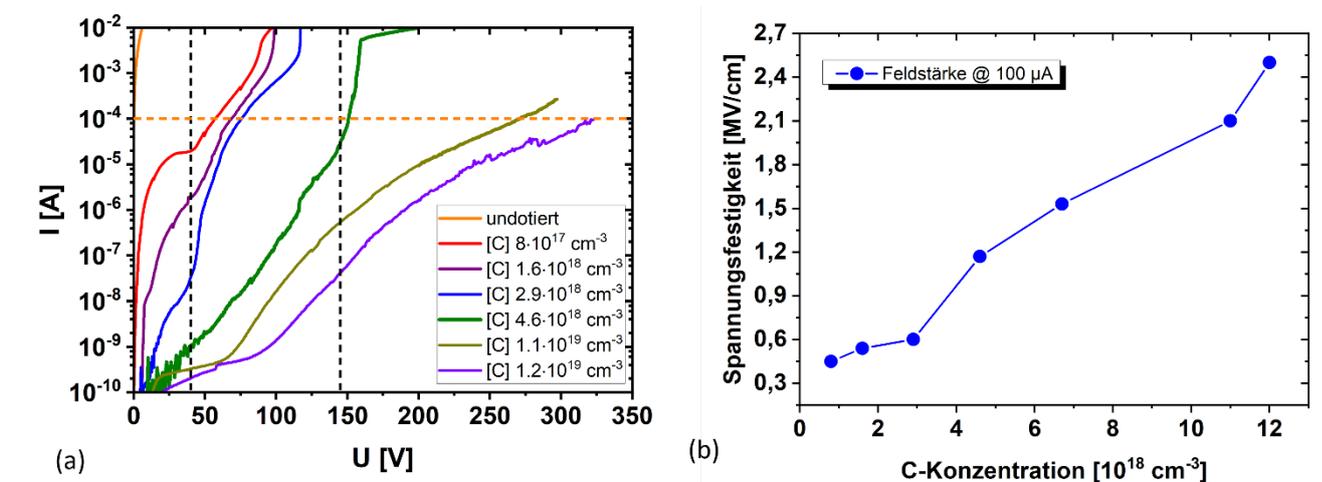


Abbildung 5.20: (a) Leckstromverhalten der Probenserie 1 in Abhängigkeit der Kohlenstoffkonzentration bei einem Kontaktabstand von  $20 \mu\text{m}$  (b) Durchbruchfeldstärke als Funktion der Kohlenstoffkonzentration der Probenserie 1, ausgehend von der doppelten GaN:C Schichtdicke. Die Durchbruchfeldstärke wurde ermittelt bei einer Stromdichte von  $1.0 \text{ mA/mm}$

Während die undotierte Probe lediglich eine  $J \sim V$  Abhängigkeit aufweist, zeigen die kohlenstoffdotierten Proben IU-Charakteristika, die auf raumladungsbegrenzte Stromleitungsprozesse (SCLC) hindeuten. Dabei sind in den IU-Kennlinien (Abbildung 5.20a) zwei auffällige Änderungen im Kurvenverlauf sogenannte „Kinks“ zu erkennen: der erste liegt bei  $\sim 40 \text{ V}$  und ein zweiter bei  $\sim 145 \text{ V}$ . Weiterhin ist festzustellen, dass selbst bei einer C-Konzentration von  $1.2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  eine weitere Reduzierung der Leckströme erfolgt, ohne dass eine Sättigung oder gar Verschlechterung der isolierenden Eigenschaften auftritt. Ausgehend von der doppelten Schichtdicke kann hieraus eine Spannungsfestigkeit bei einem Leckstrom von  $1 \text{ mA/mm}$  als Funktion der Kohlenstoffdotierung angegeben werden, welche in Abbildung 5.20b dargestellt ist und einen linearen Anstieg mit der C-Dotierung zeigt. Dies stimmt mit den numerischen Simulationen aus Ref. [52] überein, dass höhere Konzentrationen von  $C_N$  zu höheren Durchbruchfeldstärken führen und zu einer Spannungsfestigkeit von  $2.5 \text{ MV/cm}$  bei einer C-Dotierung von  $1.2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . Für ein genaueres Verständnis der Leitungsmechanismen wurden IU-Kennlinien ebenso im negativen Spannungsbereich bis  $-200 \text{ V}$  aufgenommen.

In Abbildung 5.21 sind IU-Kennlinien im Messbereich von -200 V bis +200 V an Proben mit einer C-Konzentrationen von  $8 \cdot 10^{17}$  bis  $4.6 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  dargestellt und zeigen sowohl für positive als auch negative Spannungen einen nahezu identischen Kurvenverlauf. Bei der IU-Kennlinie der Probe mit  $4.6 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  ist eine Änderung im letzten Abschnitt des Kurvenverlaufs zu erkennen, was einer IU-Abhängigkeit von  $I \sim U^2$  entspricht und damit auf einen Leitungsmechanismus hinweist, der durch raumladungsbegrenzte Ströme resultiert.

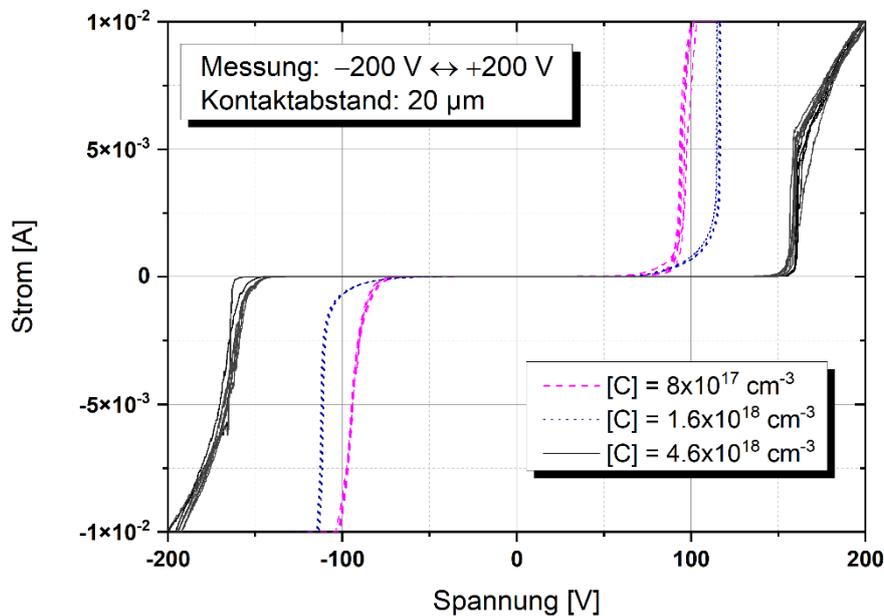


Abbildung 5.21: IU-Kennlinien aufgenommen im Bereich von +200 V bis -200 V sowie von -200 V bis +200 V

In Abbildung 5.22 ist der gesamte Kennlinienverlauf von zwei hoch C-dotierten Proben halblogarithmisch dargestellt und zeigt einen asymmetrischen Kurvenverlauf, um die Spannung 0 V. Dabei ist eine Verschiebung des Kennlinienminimums zu beobachten, welche von der Höhe der C-Dotierung abhängt. Diese Verschiebung zeigt sich jedoch nur, falls die Messung bei einer hohen Spannung beginnt. Der Bereich bzw. Quadrant, in dem der Strom seine Flussrichtung ändert, ist von der Polarität der Anfangsspannung abhängig. Je nach Dotierungsgrad existiert eine Grenzspannung ab der die entsprechenden IU-Kennlinien unabhängig ihrer anfänglichen Spannung wieder zusammenlaufen. Bei eisendotierten Proben konnte keine Verschiebung des

Kennlinienminimums beobachtet werden. Ausgehend von der Probenstruktur und dessen laterale Messanordnung kann dieser Effekt auf die entsprechenden unterschiedlichen Elektronen- sowie Locheinfangkoeffizienten von  $C_N$ -Defekten zurückgeführt werden, die an vielen der hier gezeigten Proben ermittelt wurden [53].

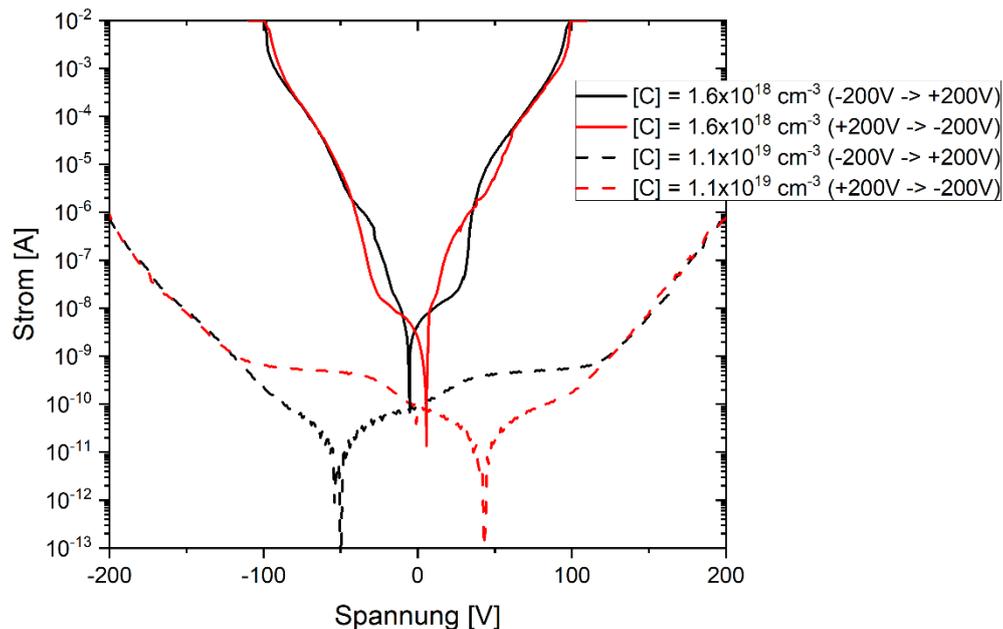


Abbildung 5.22: IU-Kennlinien in halblogarithmischer Darstellung im Messbereich von -200 V bis +200 V.

Werden IU-Kennlinien in einem kleinen Spannungsbereich um den Nullpunkt aufgenommen, so zeigt eine undotierte Probe eine lineare  $I \sim U$  Abhängigkeit auf, während bei höheren C-Dotierungen die Kennlinien um den Spannungsnulppunkt zwar einen symmetrischen, jedoch leicht nichtlinearen Verlauf aufweist.

Symmetrische nicht Ohm'sche Kennlinienverläufe deuten auf gleiche Schottky-Barrierenhöhen an den entsprechenden Kontakten hin [54–56].

Grundsätzlich können auch Ohm'sche Kontakte zu nicht Ohm'schen Kennlinien führen [57] und sogar gleichrichtend werden. Ebenso können unter gewissen Bedingungen auch Schottky-Kontakte eine lineare Strom-Spannungscharakteristik aufweisen [54].

### Vertikale Messungen an der Probenstruktur 1:

Da die Probenstruktur 1 eine SiN in-situ nano Maske enthält, konnte der hierdurch entstandene n-Typ Bereich (Abbildung 5.23b) ausgenutzt und mit Silberleitlack kontaktiert werden, wodurch eine vertikale Messung erfolgen konnte.

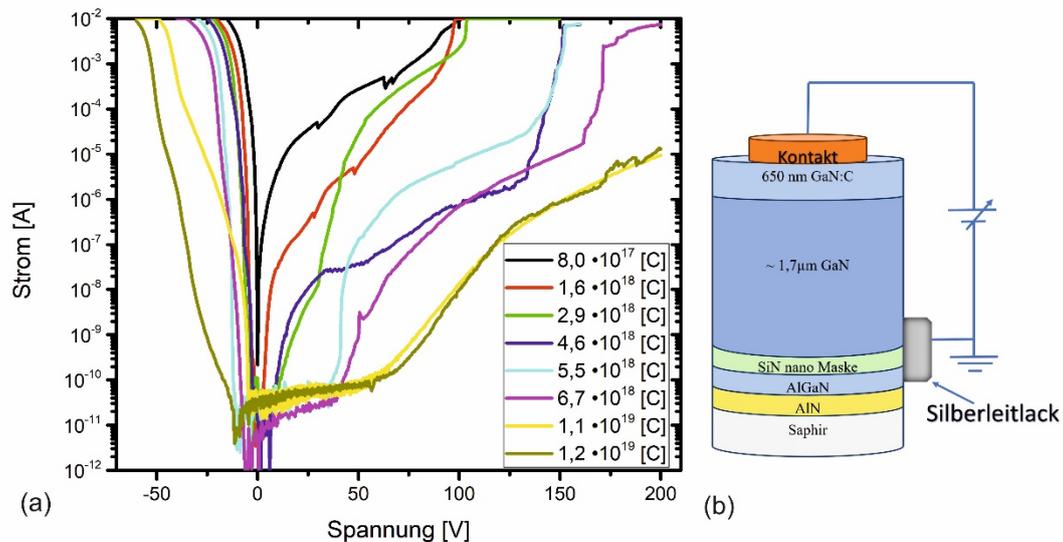


Abbildung 5.23: (a) IU-Kennlinien der Probenserie 1 (b) Kontaktierung der Probenstruktur 1 mit Silberleitlack seitlich im n-Typ Bereich der durch die SiN in-situ nano Maske entstanden ist.

Die so durchgeführten Messungen sind in Abbildung 5.23a dargestellt und zeigen ein für Schottky-Kontakte typisches Sperrverhalten. Unter der Annahme, dass die Kontaktierung am n-Typ Bereich zu einem Ohm'schen Kontakt geführt hat und es sich auf der Oberfläche um Schottky-Kontakte handelt, kann der Serienwiderstand aus der Durchlass IU-Charakteristik nach Ref. [58] ermittelt werden. Die Ergebnisse sind als Funktion der Kohlenstoffkonzentration in Abbildung 5.24 dargestellt.

Der Serienwiderstand aufgetragen über der C-Dotierung zeigt hierbei eine exponentielle Abhängigkeit.

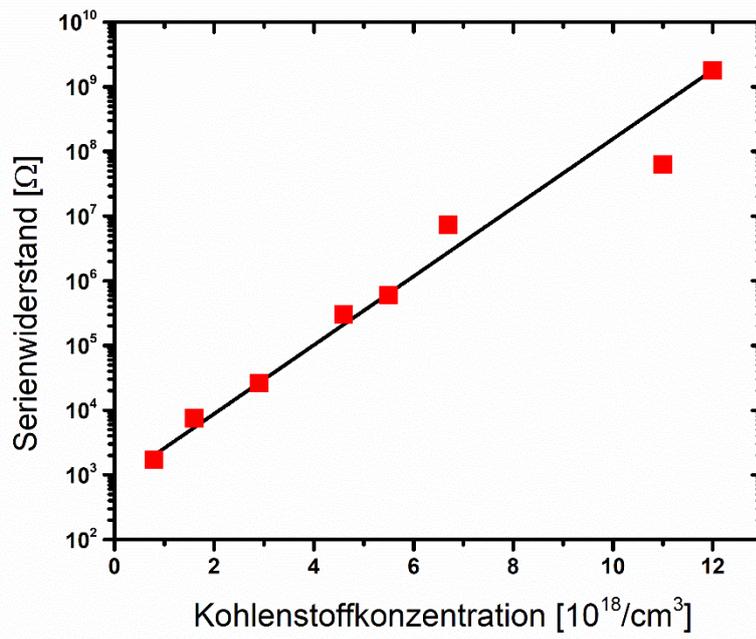


Abbildung 5.24: Serienwiderstand der Probenserie 1 berechnet nach Ref [58]

## 5.9 Leitungsmechanismen von Probenstruktur 1

Bei der Kontaktierung von C-dotiertem GaN entsteht ein „Ohm’scher Kontakt“, welcher durch eine Anreicherungsschicht aus raumfesten Elektronen besteht und dessen Breite sowohl von der Kompensationsdotierung als auch von der Höhe der n-Typ Hintergrunddotierung charakterisiert ist. Unter der Voraussetzung, dass im Wesentlichen Majoritätsträger zum Leitungstransport beitragen, ist der Strom für kleine Spannungen durch den Diffusionsstrom und für höhere Spannungen durch den raumladungsbegrenzten Strom bestimmt.

Bei Anlegen einer positiven Spannung an der Kathode senkt sich das Potential ab. Jedoch bleibt zunächst noch ein Potentialmaximum vor der Anode erhalten, bei der die Feldstärke gleich Null entspricht.

Im Fall von kleinen Spannungen gilt das Ohm’sche Gesetz, jedoch nicht aufgrund von intrinsischen Ladungsträgern, sondern wegen der thermischen Emission von Ladungsträgern über die effektive Potentialbarriere. Mit steigender Spannung werden immer mehr Haftstellen befüllt und damit breitet sich die Anreicherungsschicht mit raumfesten Ladungsträgern immer weiter in den Halbleiter aus. Wenn alle Haftstellen befüllt sind, d.h. wenn sich die Anreicherungsschichten mit raumfesten Ladungsträgern von Elektrode und Anode treffen, ist die Spannung der Störstellenerschöpfung erreicht.

$$V_{TFL} = \frac{qN_t d^2}{2\varepsilon} \quad 5.6$$

bzw. die Durchgriffsspannung [54]:

$$V_{FB} = \frac{qN_D}{2\varepsilon} L^2 \quad 5.7$$

Dadurch füllen die injizierten Elektronen die Traps vollständig, und der Strom steigt stark an. Danach erfolgt ein Absenken des übriggebliebenen eingebauten Potentials („Build-in“ Potential) an der Anode, wodurch die Stromdichte gegeben ist durch

$J \propto \left(\frac{V}{L}\right)^m$ . Bei noch höheren Spannungen erfolgt stets der Durchbruch. Die Abhängigkeit der IU-Kennlinien, sowie die Art der Spannungsdurchbruchs (Avalanche, reversible oder zerstörend) ist durch das Verhältnis vom der Höhe der Kompensationsdotierung zu den freien Ladungsträgern im Leitungsband bestimmt [52, 59, 60].

Die Breite der Anreicherungsschicht ist stark von der Hintergrunddotierung und der Haftstellenkonzentration abhängig und kann bereits ohne angelegte Spannung zu einer Überlappung der beiden Anreicherungsschichten kommen, wodurch extrinsisch die Bedingung für einen raumladungsbegrenzten Strom gegeben ist [52]. Dies hat zur Folge, dass das Potentialmaximum vor beiden Kontakten bereits bei kleinen Spannungen abgebaut wird, wodurch der Strom rapide ansteigt, bis alle Haftstellen besetzt sind.

Sobald die Kohlenstoffdotierung, die n-Typ Hintergrunddotierung übersteigt, sinkt das Fermi-niveau ab, was zu einer Bandverbiegung führt [61]. Die sich nun ausbildende Anreicherungsschicht mit raumfesten Ladungsträgern am Kontakt führt zu einer starken Reduzierung des Leckstroms, welche bereits bei einer C-Dotierung von  $8 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  zu beobachten ist, da die injizierten Ladungsträger die Haftstellen befüllen. Je höher die C-Dotierung, desto größer ist das zu überwindende Potential am Kontakt, was zu einer weiteren Reduzierung des Leckstroms führt. Jedoch ist die Ausdehnung der Anreicherungsschicht stark von der Dotierkonzentrationen abhängig, speziell unterhalb von  $\sim 4 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Die Spannung von  $\sim 40 \text{ V}$  entspricht somit der Durchgriffsspannung bei der die Anreicherungsschicht die undotierte GaN-Schicht erreicht, wodurch der rapide Anstieg des Leckstroms oberhalb dieser Spannung begründet ist (Abbildung 5.20a). Damit entspricht der Kink in der IU-Kennlinie von der Probe MD9854 mit einer C-Dotierung von  $4.6 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  bei der Spannung von  $\sim 145 \text{ V}$  ebenfalls der Durchgriffsspannung.

Ist hingegen die C-Dotierung weitaus höher ( $> 4.6 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ), dann ist ebenfalls das Abschirmpotential ausreichend stark, so dass erst bei weitaus höheren Spannungen die Anreicherungsschicht die Raumladungszonen im Grenzbereich zwischen GaN:C und dem undotierten Bereich erreicht.

Oberflächenpotentialmessungen (Scanning Surface Potential, SSPM), welche von Fariza et al. [62] an der Probenserie 1 durchgeführt wurden, zeigten, dass die Kohlenstoffdotierung den lokalen Ladungszustand von Durchstoßversetzungen verändert. So ändert sich der Ladungszustand zwischen versetzungsfreien zu versetzungsreichen Bereichen von überwiegend neutral zu einem negativen Ladungszustand bei C-dotierten Proben. Dabei führte eine C-Konzentration von über  $4.6 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  zu einer Sättigung des SSPM-Signals. Das könnte bei der Probenstruktur 1 und der Dicke der C-Dotierten GaN-Schicht, die  $C_N$ -Konzentration sein, die notwendig ist, um alle freien Ladungsträger zu kompensieren. Eine weitere Erhöhung führt vermutlich zu einer stärkeren Raumladung an der Grenzfläche zwischen GaN:C und dem undotierten Bereich. Raumladungen, können sich aufgrund des Maxwell-Wagner-Effekts [52] bilden und wirken als zusätzliche Barriere für den Ladungstransport, was die Leckströme reduzieren kann.

Es konnte somit gezeigt werden, dass bei der Probenserie 1 lediglich die Höhe der C-Dotierung sowie die vertikale Schichtdicke der C-dotierten GaN einen Einfluss auf die IU-Kennlinien (Abbildung 5.20b) haben. Dies ergibt bei einer C-Konzentration von  $1.2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  eine vertikale Spannungsfestigkeit von  $\sim 2.5 \text{ MV/cm}$ .

## 5.10 Charakterisierung von Probenstruktur 2

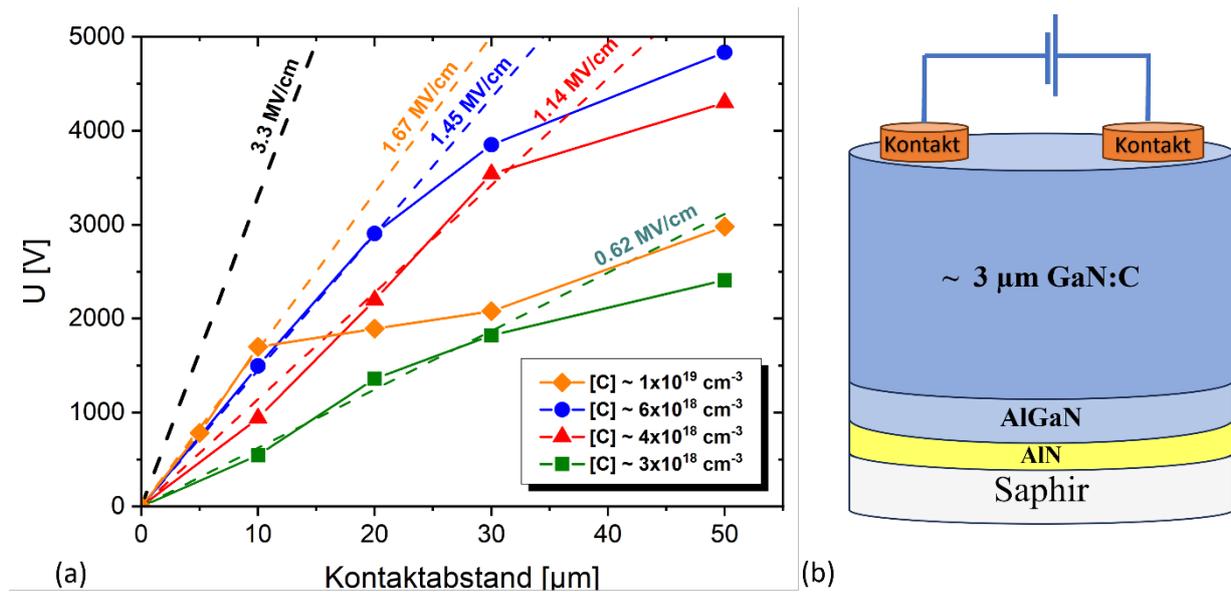


Abbildung 5.25: (a) Laterale Durchbruchspannung in Abhängigkeit des Kontaktabstands im Vergleich zum theoretisch erwarteten Wert von 3.3 MV/cm (b) Schichtstruktur für die Bestimmung der lateralen Spannungsfestigkeit bei unterschiedlicher Kohlenstoffdotierung.

Durch die Prozessierung von TLM-Strukturen konnte die Durchbruchspannung in Relation zum Abstand zweier Elektroden gemessen werden. Die Resultate der Probenserie 1 haben gezeigt, dass eine Kohlenstoffkonzentration von  $\sim 3 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  notwendig ist, um gute isolierende Eigenschaften zu erzielen. Daher wurden die Proben (Tabelle 5.10) der Probenstruktur 2 im C-Konzentrationsbereich von  $3 \cdot 10^{18}$  bis  $1.1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  dotiert.

Tabelle 5.10: Proben der Probenstruktur 2 mit einer Kohlenstoffkonzentration von  $3 \cdot 10^{18}$  bis  $1.1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  für die Untersuchung der Spannungsfestigkeit

Probenname	C [ $\text{cm}^{-3}$ ]
MD10171	$3 \cdot 10^{18}$
MD10143	$4 \cdot 10^{18}$
MD10147	$6 \cdot 10^{18}$
MD10676	$1.1 \cdot 10^{19}$

Anhand der Steigung (Abbildung 5.25a) konnte eine **laterale Spannungsfestigkeit** von **62 V/ $\mu\text{m}$**  bei einer C-Dotierung von  **$3 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$**  bis **167 V/ $\mu\text{m}$**  bei einer Kohlenstoffkonzentration von  **$1.1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$**  ermittelt werden. Wie in Abbildung 5.25a zu sehen ist, erfolgt bei größeren Kontaktabständen bzw. bei höheren Spannungen ein Abknicken der Kennlinie. Diese Änderung vom linearen Verhalten kann mehrere Ursachen haben. So deutet ein abruptes Abknicken der IU-Kennlinie darauf hin, dass ein leitfähiger Kanal zu einer Sättigung der Durchbruchfestigkeit führt, welches dem ähnelt, was bei Si-Substraten auftritt [63]. Dadurch geht die laterale Abhängigkeit verloren, da der Überschlag über diesen Kanal erfolgt. In Ref. [64] wurden GaN:Fe Schichten, welche auf GaN Substraten gezüchtet wurden, untersucht und haben ebenfalls ein Abknicken beobachtet. Die Autoren [64] vermuteten, dass parasitäre Leckströme zwischen dem GaN Substrat und dem GaN:Fe Puffer sowie donorartige Störstellen dafür verantwortlich sind. Durch die Ausbildung von Versetzungen können sich weitere Leitungswege bilden, wodurch sich die effektive Schichtdicke verringert. Anhand von Mesa-Ätzen konnten diese parasitären Leckströme signifikant vermindert und damit die Spannungsfestigkeit gesteigert werden.

Da bei der **Probenstruktur 1** eine Spannungsfähigkeit von  **$\sim 250 \text{ V}/\mu\text{m}$**  bei einer C-Konzentration von  **$1.2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$**  ermittelt werden konnte, die nach Ref. [52] durch hohe negative Raumladungsdichten an der GaN:C/GaN Grenzfläche verursacht werden und dadurch die Elektronenleitung blockiert und somit zur Erhöhung der Durchbruchspannung beiträgt.

Anders als bei Cao et al. [52] sind uns die verschiedenen Einfang- sowie Freisetzungskoeffizienten von  $C_N$  bekannt und auch darüber hinaus (was durch Ref. [65] belegt wurde) werden nur  $C_N$ -Defekte durch die Verwendung von Propan in unsere GaN-Schicht eingebaut. Dies könnte in der Tat zur Bildung von starken negativen Raumladungen an der GaN/GaN:C in Abhängigkeit der C-Dotierung führen, wodurch die Leckströme und die Durchbruchsspannung signifikant beeinflusst werden.

Bei der **Probenstruktur 2** liegt der Grund in diesem Fall bei der sich bildenden Raumladungszone an den Kontakten (keine undotierte oder n-Typ Schicht für die Lade-/Entladungsprozesse, die die Raumladung beeinflussen existiert), wodurch bei Anlegen hoher Spannungen die Leistung lokal auch bei geringen Leckströmen umgesetzt wird und zu einem thermisch bedingten Spannungsdurchbruch führt. Dies führt zu einer Zerstörung der Kontakte.

Die unterschiedlichen Ergebnisse der Spannungsfestigkeit von GaN bei nahezu gleichen C-Konzentrationen deutet darauf hin, dass die Probenstruktur sowie die Position der GaN:C innerhalb der Probe wesentlich zur Kontrolle der Leckströme sowie der Durchbruchspannung beitragen.

### 5.11 Charakterisierung von Probenstruktur 3

Die Untersuchung des Leckstromverhaltens und der Spannungsfestigkeit von AlGaIn/GaN FETs auf n-Typ Si(111)-Substraten wurde an Probenstruktur 3 durchgeführt. Es wurden sowohl laterale Messungen zwischen zwei Ohm'schen Kontakten in einem Abstand von  $\sim 20 \mu\text{m}$  durchgeführt, als auch vertikale Spannungsmessungen zwischen einem Ohm'schen Kontakt und dem n-Typ Si(111) Substrat. Es wurde dabei durch Mesaätzen das 2DEG zwischen den Kontakten auf der Oberfläche entfernt, wobei die Ätztiefe  $\sim 500 \text{ nm}$  beträgt. Laterale Messungen erfolgten am HV-Messplatz, das Si-Substrat war dabei potentialfrei. Vertikale Messungen erfolgten ebenfalls am HV-Messplatz, wobei das Si-Substrat hierbei geerdet war. Die Kontaktgeometrie nach der Prozessierung ist in Abbildung 5.26 dargestellt.

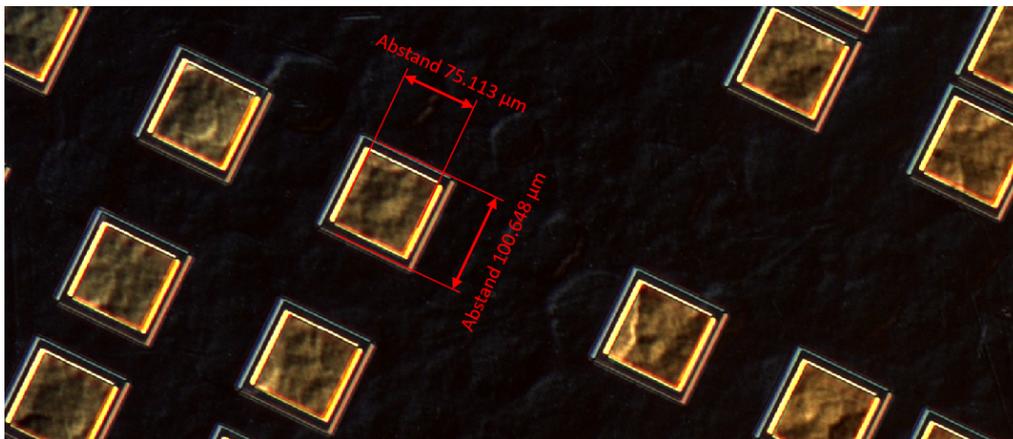


Abbildung 5.26: Mesa-Struktur der Probenstruktur 3 von AlGaIn/GaN-on-Si

Die Proben der Probenstruktur 3 bestehen aus fünf AlGaIn/GaN FET Strukturen auf einem  $500 \mu\text{m}$  n-Typ Si(111)-Substrat bei denen unterschiedliche Bereiche des GaN-Puffers mit zwei verschiedenen C-Konzentrationen dotiert wurden (Abbildung 5.27).

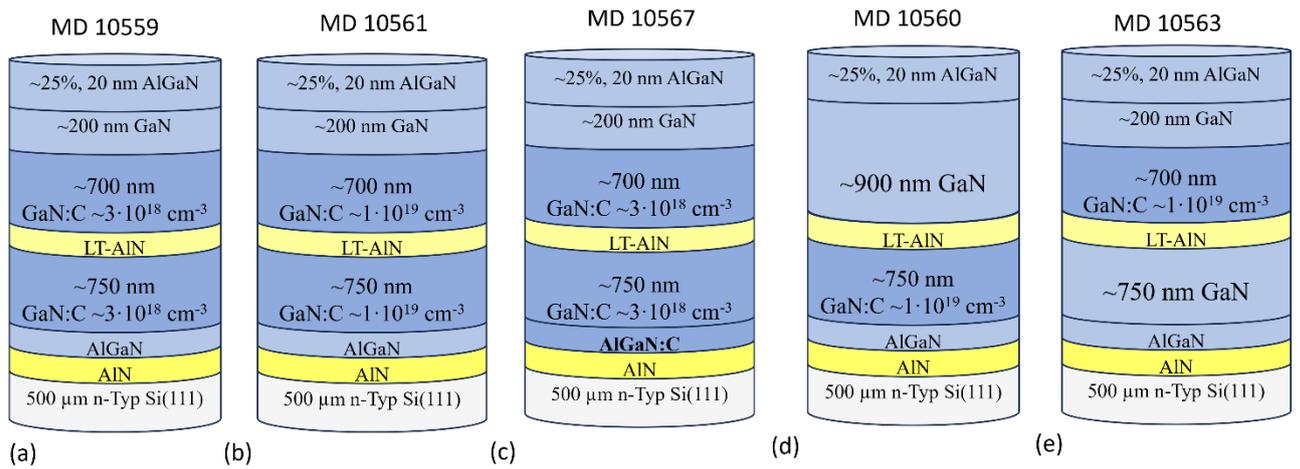


Abbildung 5.27: Die Proben der Probenstruktur 3 bestehen aus AlGaN/GaN FETs Strukturen auf n-Typ Si(111)-Substrat. Dabei wurden verschiedene Bereiche des GaN-Puffers durch die Verwendung von Propan mit C-dotiert. Die elektrische Charakterisierung erfolgte lateral sowie vertikal, um den Einfluss der C-Dotierung auf den Pufferbereich zu untersuchen.

Dabei wurden die Schichten sowohl unterhalb als auch oberhalb der LT-AlN Zwischenschicht gewählt und mit einer Kohlenstoffkonzentration von nominell  $\sim 3 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  und  $\sim 1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  dotiert. Bei Probe MD10567 erfolgte zusätzlich eine C-Dotierung des AlGaN-Puffers mit dem gleichen Propanfluss wie das C-dotierte GaN in dieser Probe. Aufgrund von nicht vorhandenen SIMS AlGaN Standards konnte leider keine Kohlenstoffkonzentration des C-dotierten AlGaN Puffers bestimmt werden. Die gesamte Epi-Schichtstruktur inklusive der AlN/AlGaN Pufferschicht hatte dabei eine Gesamtdicke von  **$\sim 2.1 \mu\text{m}$** .

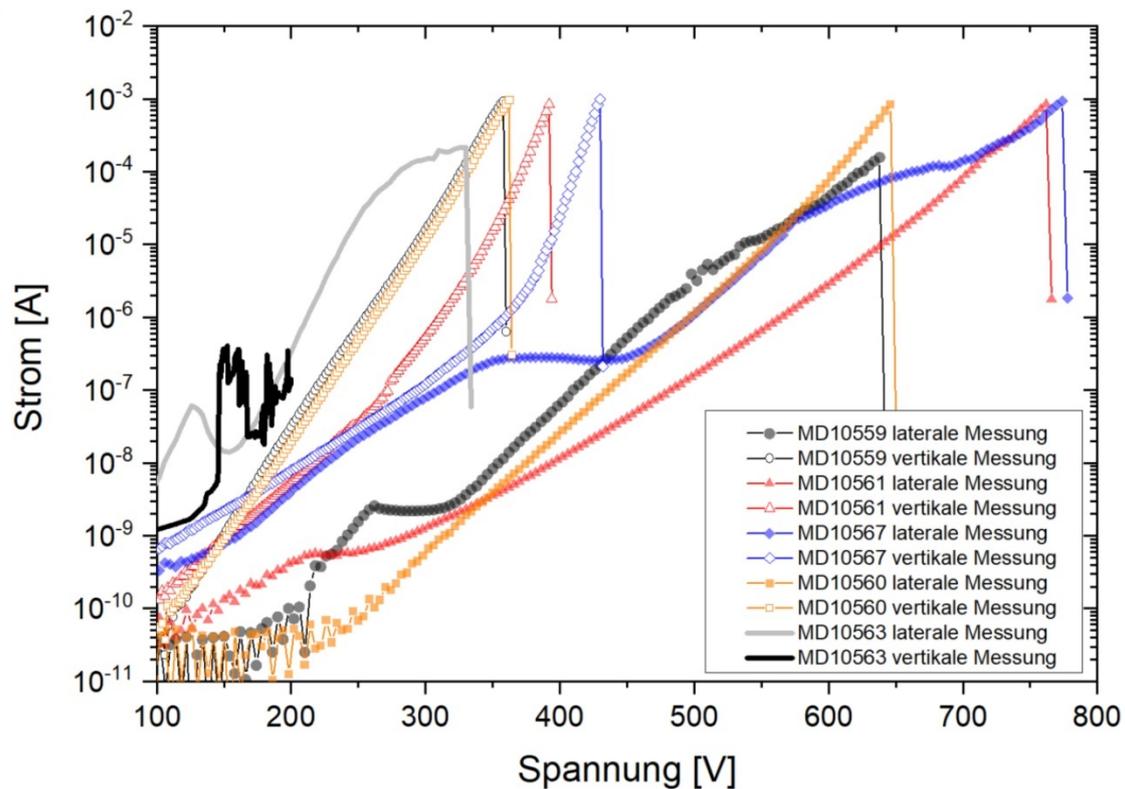


Abbildung 5.28: Laterale und vertikale IU-Messungen an Proben der Probenstruktur 3. Die Messungen wurden bis zum entsprechenden Spannungsdurchbruch aufgenommen.

Die lateralen sowie vertikalen IU-Kennlinien der AlGaN/GaN FET Strukturen, welche am HV-Messplatz aufgenommen wurden, sind in Abbildung 5.28 dargestellt. Die ermittelten Spannungsfestigkeiten beziehen sich bei den vertikalen Messungen auf die Gesamtdicke der Schichtstruktur, wohingegen bei den lateralen Messungen die doppelte Schichtdicke zur Berechnung verwendet wurde. Als Spannungswert wurde jeweils der höchste ermittelte Messwert benutzt (Tabelle 5.11).

Aus den IU-Kennlinien dieser Probenserie ist zu erkennen, dass nicht nur die Höhe der Kohlenstoffkonzentration und die Dicke der C-dotierten Schicht entscheidend für hohe Spannungsfestigkeiten sind, sondern vor allem der Bereich innerhalb des Puffers, in dem die C-Dotierung erfolgt, stellt damit einen wichtigen Einflussfaktor für die Isoliereigenschaften von GaN-on-Si Epi-Schichten dar [52].

So zeigt Probe MD10561 im Vergleich zur Probe MD10559 sowohl eine Verbesserung der vertikalen als auch der lateralen Spannungsfestigkeit aufgrund der höheren Kohlenstoffkonzentration in den selben Bereichen der Schichtstruktur.

*Tabelle 5.11: Spannungsfestigkeit sowie Durchbruchspannung der Proben mit der Probenstruktur 3, die aus den lateralen sowie vertikale IU-Kennlinien ermittelt wurden. Die Gesamtdicke der Epi-Schicht beträgt 2.1µm*

Probenname	Vertikale BV [V]	Vertikal [V/µm]	Laterale BV [V]	Lateral [V/µm]
MD10563	198	94	326	77
MD10560	362	172	646	154
MD10567	428	203	774	184
MD10559	360	171	638	151
MD10561	392	187	762	182

Probe MD10567 zeigt, dass eine Kohlenstoffdotierung des AlGaIn Puffers zu einer starken Verbesserung der vertikalen Durchbruchfestigkeit gegenüber der Probe MD10559 führt und sogar eine höhere Spannungsfestigkeit zeigt als Probe MD10561, die eine weitaus höhere C-Dotierung des GaN Puffers aufweist.

Für die **vertikale Spannungsfestigkeit** ergibt sich damit ein Wert von **2.03 MV/cm**. Somit führt eine zusätzliche Kohlenstoffdotierung des ~350 nm dicken AlGaIn Puffers im Vergleich zu einer Probe mit ansonsten gleicher Probendotierung eine verbesserte Durchbruchfestigkeit von 0.3 MV/cm.

Die höchste **laterale Spannungsfestigkeit** der Probenserie liegt bei **1.84 MV/cm** und gehört ebenfalls zur Probe MD10567, jedoch zeigt die IU-Kennlinie einen weitaus höheren Leckstrom im Bereich < 400V.

Bei den Proben MD10560 und MD10563 wurde jeweils nur ein GaN-Bereich vor bzw. nach der LT-AlN Zwischenschicht mit einer C-Dotierung von nominell  $\sim 1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  versehen. Interessanterweise ergeben sich hieraus sehr unterschiedliche IU-Kennlinien. So führt eine C-Dotierung oberhalb der LT-AlN Zwischenschicht bei der vertikalen Messung zu einem elektrischen Durchschlag bereits bei einer Spannung von 198 V sowie bei 326 V bei der lateralen Messung.

Aus den Messergebnissen lässt sich folgern, dass die Höhe der C-Konzentration zwar ein wichtiger Parameter für die Spannungsfestigkeit darstellt, jedoch zeigt sich, dass der dotierte Bereich des Puffers wesentlich entscheidender zum Erreichen hoher Durchbruchspannungen ist. Ein Ausbleiben der C-Dotierung unterhalb der LT-AlN Schicht resultiert in einer massiven Verschlechterung der Durchbruchspannung.

Der größte Unterschied in der Spannungsfestigkeit zeigt sich jedoch bei der Probe MD10563, die unterhalb der LT-AlN Schicht keine C-Dotierung hat. Eine mögliche Ursache könne die Bildung eines leitfähigen Kanals an der Grenzfläche zwischen LT-AlN/GaN und damit zu einer ungewollten lateralen Stromausbreitung führen.

Das von Besendörfer et al. [66] vorgeschlagene Modell könnte bei den Ergebnisse aus der Probenserie 5 eine Rolle spielen. Dies bedeutet konkret, dass Bereiche des Puffers in denen eine laterale Stromausbreitung erfolgen kann, wichtiger zu kompensieren sind, um damit einen vorzeitigen elektrischen Durchbruch zu verhindern. Damit sorgt eine C-Dotierung unterhalb der LT-AlN Zwischenschicht dafür, dass die laterale Stromausbreitung stark reduziert wird, was zu höheren Spannungsfestigkeiten führt. Im Gegensatz dazu hat lediglich eine GaN:C Dotierung oberhalb der LT-AlN Zwischenschicht nicht diesen Effekt.

Ein weiterer Ansatz liefert die Arbeit von Cao et al. [52], was die Auswirkungen von Kohlenstoffdotierungen im GaN-Puffer in GaN-on-Si Epi-Schichten auf den vertikalen Leckstrom sowie Spannungsfestigkeit untersucht. Es zeigt sich, dass die Raumladungsverteilung und -intensität in verschiedenen Positionen der C-dotierten GaN-Bereich maßgeblich die Leckstrom- und Durchbruchmechanismen beeinflussen. Dabei trägt der  $C_N$ -Defekt im besonderen Maße durch Lade-/Entladeprozess zur Bildung von Raumladungen bei und beeinflussen wiederum den Leckstrom und die Durchbruchspannung. Eine höhere Konzentration von  $C_N$ -Störstellen führt zu höheren negativen Raumladungen, die die Elektronenleitung blockiert und damit die Durchbruchspannung erhöht. Die Bildung von Plateau-Regionen, die in den Strom-Spannungskennlinien zu beobachten sind wird im Wesentlichen durch die Konzentration von  $C_N$  und damit Verbunden zur Bildung von Raumladungen durch

Lade und Entlade Prozesse [52]. Das Auftreten von einem negativen Widerstand in IU-Kennlinien (MD10563) ist auf ein komplexes Zusammenspiel von Ladungsträgerinjektion, Rekombinationsprozesse und Raumladungseffekte zurückzuführen [61].

Die Plateau-Regionen die deutlich in den IU-Kennlinien (Abbildung 5.28) der lateralen Messungen von Probe MD10567 und MD10559 zu erkennen sind kommen zu stand, dass  $C_N$  Störstellen Elektronen „einfängt“, was zu einem Stromabfall in der Kennlinie führt. Eine Erhöhung der C-Konzentration erhöht die Durchbruchspannung jedoch führt dies zu einer starken negativen Raumladung an n-Typ GaN Grenzflächen [52] und blockiert die Elektroneninjektion, wodurch die Leistung lokal bei hohen Spannungen zu einem thermischen bedingten Durchbruch führen kann. Daher ist eine gezielte C-Dotierung und Kontrolle der Kohlenstoffkonzentration an verschiedenen Positionen im GaN-Puffer wichtig, um die Leckströme zu reduzieren und die Durchbruchspannung zu erhöhen. Um die ermittelten Werte von auf GaN-on-Si Epi-Schichten mit den Ergebnissen anderer Gruppen zu vergleichen, wurde die auf die Dicke normierte Durchbruchspannung mit nachfolgender Gleichung berechnet [32]:

$$\frac{V_{@1mA/mm}}{2 \times D_{Puffer}} \quad 5.8$$

Dabei wurde ebenfalls die Spannung als Durchbruchspannung definiert, welche bei einem Strom von  $1mA \text{ mm}^{-1}$  erreicht wurde.  $D_{Puffer}$  entspricht der Gesamtdicke der Schichtstruktur. Durch den großen Abstand zwischen den Ohm'schen-Kontakten im Vergleich zur Pufferdicke ist der Einfluss des Kontaktabstands zu vernachlässigen [67]. Damit ergibt sich für die beste Probe eine normierte Durchbruchspannung von **184  $V\mu\text{m}^{-1}$**  bei einer Gesamtdicke der Schichtstruktur von **2.1  $\mu\text{m}$** . In Abbildung 5.29 ist dieser erzielte Wert im Vergleich zu anderen Gruppen dargestellt.

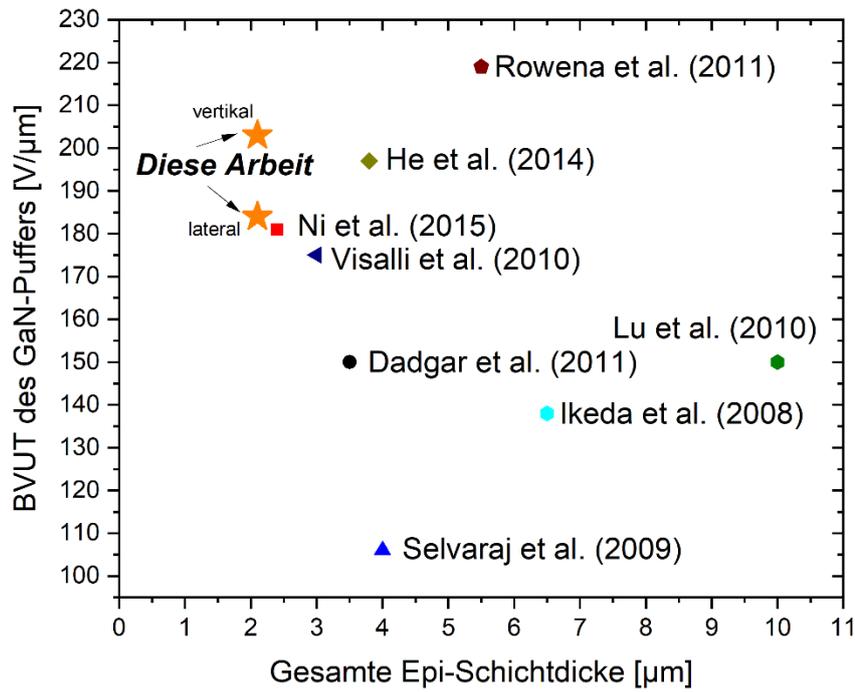


Abbildung 5.29: Der in dieser Arbeit erzielte BVUT-Wert im Vergleich zur Literatur von GaN-on-Si bei denen ebenfalls die Durchbruchspannung bei einem Strom von  $1 \text{ mAmm}^{-1}$  entnommen wurden [32, 63, 68–73].

## 5.12 Literaturverzeichnis

- [1] T. K. Zywiets, J. Neugebauer, and M. Scheffler, "The adsorption of oxygen at GaN surfaces," *Appl. Phys. Lett.* **74**, 1695 (1999), <https://doi.org/10.1063/1.123658>.
- [2] H. Wang and A.-B. Chen, "Calculation of shallow donor levels in GaN," *J. Appl. Phys.* **87**, 7859 (2000), <https://doi.org/10.1063/1.373467>.
- [3] G. Y. Zhang, Y. Z. Tong, Z. J. Yang, S. X. Jin, J. Li, and Z. Z. Gan, "Relationship of background carrier concentration and defects in GaN grown by metalorganic vapor phase epitaxy," *Appl. Phys. Lett.* **71**, 3376 (1997), <https://doi.org/10.1063/1.120341>.
- [4] M. A. Reshchikov and H. Morkoç, "Luminescence properties of defects in GaN," *J. Appl. Phys.* **97**, 061301 (2005), <https://doi.org/10.1063/1.1868059>.
- [5] C. Fang, S. Wang, B. Liu, J. Lin, and D. Zhang, "Persistent photoconductivity in n-type undoped high-resistivity GaN," in *Proc. 8th Int. Conf. Solid-State Integr. Circ. Technol.*, Shanghai, China, pp. 902 (2006), <https://doi.org/10.1109/ICSICT.2006.306566>.
- [6] H. Witte, A. Kruse, J. Christen, and R. Müller, "Fermi Level Pinning at GaN-interfaces: Correlation of electrical admittance and transient spectroscopy," *MRS Internet J. Nitride Semicond. Res.* **5**, 936 (2000), <https://doi.org/10.1557/S1092578300005299>.
- [7] A. Dadgar, *MOCVD-Wachstum und elektrische Eigenschaften von Eisen und Platinmetallen im Indiumphosphid: Ruthenium, ein thermisch stabiler Kompensator im Indiumphosphid*, Mensch-und-Buch-Verlag, Berlin (1999).
- [8] P. Kozodoy, J. Ibbetson, H. Marchand, E. Haus, U. Mishra, and S. P. DenBaars, "Heavy doping effects in Mg-doped GaN," *J. Appl. Phys.* **87**, 1832 (2000), <https://doi.org/10.1063/1.372098>.
- [9] A. F. Wright, "Substitutional and interstitial carbon in wurtzite GaN," *J. Appl. Phys.* **92**, 2575 (2002), <https://doi.org/10.1063/1.1498879>.
- [10] J. L. Lyons, A. Janotti, and C. G. van de Walle, "Carbon impurities and the yellow luminescence in GaN," *Appl. Phys. Lett.* **97**, 152108 (2010), <https://doi.org/10.1063/1.3492841>.
- [11] W. Z. Wang, T. Chen, M. Zhang, Y. Lin, and J. Zhou, "Effect of Carbon Doping and Crystalline Quality on the Vertical Breakdown Characteristics of GaN Layers Grown on 200-mm Silicon Substrates," *J. Electron. Mater.* **44**, 3272 (2015), <https://doi.org/10.1007/s11664-015-3832-3>.
- [12] D. Koleske, A. Wickenden, R. Henry, and M. Twigg, "Influence of MOVPE growth conditions on carbon and silicon concentrations in GaN," *J. Cryst. Growth* **242**, 55 (2002), [https://doi.org/10.1016/s0022-0248\(02\)01348-9](https://doi.org/10.1016/s0022-0248(02)01348-9).
- [13] H. Amano, M. Kito, K. Hiramatsu, and I. Akasaki, "P-Type Conduction in Mg-Doped GaN Treated with Low-Energy Electron Beam Irradiation (LEEBI)," *Jpn. J. Appl. Phys.* **28**, L2112 (1989), <https://doi.org/10.1143/jjap.28.l2112>.
- [14] T. Narita, K. Tomita, Y. Tokuda, T. Kogiso, M. Horita, and T. Kachi, "The origin of carbon-related carrier compensation in p-type GaN layers grown by MOVPE," *J. Appl. Phys.* **124**, 215701 (2018), <https://doi.org/10.1063/1.5057373>.
- [15] S. Heikman, S. Keller, S. P. DenBaars, and U. K. Mishra, "Growth of Fe doped semi-insulating GaN by metalorganic chemical vapor deposition," *Appl. Phys. Lett.* **81**, 439 (2002), <https://doi.org/10.1063/1.1490396>.
- [16] M. Rudziński, T. Sochacki, P. Leszczyński, and I. Grzegory, "Growth of Fe doped semi-insulating GaN on sapphire and 4H-SiC by MOCVD," *Phys. Status Solidi C* **3**, 2231 (2006), <https://doi.org/10.1002/pssc.200565379>.
- [17] S. Heikman, S. Keller, T. Mates, S. P. DenBaars, and U. K. Mishra, "Growth and characteristics of Fe-doped GaN," *J. Cryst. Growth* **248**, 513 (2003), [https://doi.org/10.1016/s0022-0248\(02\)01926-7](https://doi.org/10.1016/s0022-0248(02)01926-7).

- [18] S. Fischer, C. Wetzel, E. E. Haller, and B. K. Meyer, "On p-type doping in GaN—acceptor binding energies," *Appl. Phys. Lett.* **67**, 1298 (1995), <https://doi.org/10.1063/1.114403>.
- [19] J. Neugebauer and C. G. van de Walle, "Gallium vacancies and the yellow luminescence in GaN," *Appl. Phys. Lett.* **69**, 503 (1996), <https://doi.org/10.1063/1.117767>.
- [20] P. Boguslawski and J. Bernholc, "Doping properties of C, Si, and Ge impurities in GaN and AlN," *Phys. Rev. B* **56**, 9496 (1997), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.56.9496>.
- [21] D. J. As and U. Köhler, "Carbon – an alternative acceptor for cubic GaN," *J. Phys.: Condens. Matter* **13**, 8923 (2001), <https://doi.org/10.1088/0953-8984/13/40/306>.
- [22] C. H. Seager, A. F. Wright, J. Yu, and W. Götz, "Role of carbon in GaN," *J. Appl. Phys.* **92**, 6553 (2002), <https://doi.org/10.1063/1.1518794>.
- [23] A. Armstrong, A. R. Arehart, D. Green, U. K. Mishra, J. S. Speck, and S. A. Ringel, "Impact of deep levels on the electrical conductivity and luminescence of gallium nitride codoped with carbon and silicon," *J. Appl. Phys.* **98**, 053704 (2005), <https://doi.org/10.1063/1.2005379>.
- [24] D. S. Green, U. K. Mishra, and J. S. Speck, "Carbon doping of GaN with CBr<sub>4</sub> in radio-frequency plasma-assisted molecular beam epitaxy," *J. Appl. Phys.* **95**, 8456 (2004), <https://doi.org/10.1063/1.1755431>.
- [25] A. Armstrong, C. Poblentz, D. S. Green, U. K. Mishra, J. S. Speck, and S. A. Ringel, "Impact of substrate temperature on the incorporation of carbon-related defects and mechanism for semi-insulating behavior in GaN grown by molecular beam epitaxy," *Appl. Phys. Lett.* **88**, 082114 (2006), <https://doi.org/10.1063/1.2179375>.
- [26] C. R. Abernathy, J. D. MacKenzie, S. J. Pearton, and W. S. Hobson, "CCl<sub>4</sub> doping of GaN grown by metalorganic molecular beam epitaxy," *Appl. Phys. Lett.* **66**, 1969 (1995), <https://doi.org/10.1063/1.113293>.
- [27] W. Geerts, J. D. MacKenzie, C. R. Abernathy, S. J. Pearton, and T. Schmiedel, "Electrical transport in p-GaN, n-InN and n-InGaN," *Solid-State Electron.* **39**, 1289 (1996), [https://doi.org/10.1016/0038-1101\(96\)00047-0](https://doi.org/10.1016/0038-1101(96)00047-0).
- [28] U. Köhler, M. Lübbers, J. Mimkes, and D. J. As, "Properties of carbon as an acceptor in cubic GaN," *Physica B* **308–310**, 126 (2001), [https://doi.org/10.1016/s0921-4526\(01\)00713-x](https://doi.org/10.1016/s0921-4526(01)00713-x).
- [29] J. L. Lyons and C. G. van de Walle, "Computationally predicted energies and properties of defects in GaN," *npj Comput. Mater.* **3**, 1 (2017), <https://doi.org/10.1038/s41524-017-0014-2>.
- [30] A. Lesnik, M. P. Hoffmann, A. Fariza, J. Bläsing, H. Witte, P. Veit, F. Hörich, C. Berger, J. Hennig, A. Dadgar, and A. Strittmatter, "Properties of C-doped GaN," *Phys. Status Solidi B* **254**, 1600708 (2017), <https://doi.org/10.1002/pssb.201600708>.
- [31] S. Mita, R. Collazo, A. Rice, R. F. Dalmau, and Z. Sitar, "Influence of gallium supersaturation on the properties of GaN grown by metalorganic chemical vapor deposition," *J. Appl. Phys.* **104**, 013521 (2008), <https://doi.org/10.1063/1.2952027>.
- [32] Y. Ni, Y. Zhang, H. Wang, T. Zhang, and D. Wang, "Influence of the carbon-doping location on the material and electrical properties of a AlGaIn/GaN heterostructure on Si substrate," *Semicond. Sci. Technol.* **30**, 105037 (2015), <https://doi.org/10.1088/0268-1242/30/10/105037>.
- [33] M. R. Ramdani, M. Chmielowska, Y. Cordier, S. Chenot, and F. Semond, "Effect of carbon doping on crystal quality, electrical isolation and electron trapping in GaN based structures grown silicon substrates," *Solid-State Electron.* **75**, 86 (2012), <https://doi.org/10.1016/j.sse.2012.04.034>.
- [34] X. Li, Ö. Danielsson, H. Pedersen, E. Janzén, and U. Forsberg, "Precursors for carbon doping of GaN in chemical vapor deposition," *J. Vac. Sci. Technol. B* **33**, 021208 (2015), <https://doi.org/10.1116/1.4914316>.

- [35] O. B. Gadzhiev, P. G. Sennikov, A. I. Petrov, D. Gogova, and D. Siche, "Correction to Gas-Phase Reactions Regarding GaN Crystal Growth in a Carbon-Based Transport System: A Quantum Chemical Study," *Cryst. Growth Des.* **13**, 5507 (2013), <https://doi.org/10.1021/cg401688x>.
- [36] O. B. Gadzhiev, D. Siche, P. G. Sennikov, and A. I. Petrov, "The role of NH<sub>3</sub> and hydrocarbon mixtures in GaN pseudo-halide CVD: a quantum chemical study," *J. Mol. Model.* **20**, 2473 (2014), <https://doi.org/10.1007/s00894-014-2473-4>.
- [37] C. Huang, S. Mitha, J. W. Erickson, R. Clark-Phelps, J. Sheng, and Y. Gao, "Complete Characterization of Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/GaN Devices by Sims," *MRS Proc.* **468**, 281 (1997), <https://doi.org/10.1557/proc-468-281>.
- [38] P. de Mierry, O. Ambacher, H. Kratzer, and M. Stutzmann, "Yellow Luminescence and Hydrocarbon Contamination in MOVPE-Grown GaN," *Phys. Status Solidi A* **158**, 587 (1996), <https://doi.org/10.1002/pssa.2211580228>.
- [39] G. Parish, S. Keller, S. P. DenBaars, and U. K. Mishra, "SIMS investigations into the effect of growth conditions on residual impurity and silicon incorporation in GaN and Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N," *J. Electron. Mater.* **29**, 15 (2000), <https://doi.org/10.1007/s11664-000-0087-3>.
- [40] T. F. Kuech, M. A. Tischler, R. Potemski, F. Cardone, and G. Scilla, "Doping and dopant behavior in (Al,Ga)As grown by metalorganic vapor phase epitaxy," *J. Cryst. Growth* **98**, 174 (1989), [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(89\)90197-8](https://doi.org/10.1016/0022-0248(89)90197-8).
- [41] S. Tanaka, M. Takeuchi, and Y. Aoyagi, "Anti-Surfactant in III-Nitride Epitaxy–Quantum Dot Formation and Dislocation Termination–," *Jpn. J. Appl. Phys.* **39**, L831 (2000).
- [42] M. Wośko, T. Szymański, B. Paszkiewicz, P. Pokryszka, and R. Paszkiewicz, "MOVPE growth conditions optimization for AlGaIn/GaN/Si heterostructures with SiN and LT-AlN interlayers designed for HEMT applications," *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.* **30**, 4111 (2019), <https://doi.org/10.1007/s10854-019-00702-9>.
- [43] A. Dadgar, J. Bläsing, A. Diez, F. Bertram, J. Christen, and A. Krost, "MOVPE growth of GaN on Si – Substrates and strain," *Thin Solid Films* **515**, 4356 (2007), <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2006.07.100>.
- [44] A. Y. Polyakov, M. Shin, J. A. Freitas, M. Skowronski, D. W. Greve, and R. G. Wilson, "On the origin of electrically active defects in AlGaIn alloys grown by organometallic vapor phase epitaxy," *J. Appl. Phys.* **80**, 6349 (1996), <https://doi.org/10.1063/1.363653>.
- [45] F. Kaess, S. Wernicke, J. Würfl, and G. Tränkle, "Correlation between mobility collapse and carbon impurities in Si-doped GaN grown by low pressure metalorganic chemical vapor deposition," *J. Appl. Phys.* **120**, 105701 (2016), <https://doi.org/10.1063/1.4962017>.
- [46] H. Popova, F. Krzyżewski, M. A. Załuska-Kotur, and V. Tonchev, "Quantifying the Effect of Step–Step Exclusion on Dynamically Unstable Vicinal Surfaces: Step Bunching without Macrostep Formation," *Cryst. Growth Des.* **20**, 7246 (2020), <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.0c00927>.
- [47] R. Zhang and T. F. Kuech, "Photoluminescence of carbon in situ doped GaN grown by halide vapor phase epitaxy," *Appl. Phys. Lett.* **72**, 1611 (1998), <https://doi.org/10.1063/1.121144>.
- [48] R. Armitage, Q. Yang, H. Feick, and E. R. Weber, "Evaluation of CCl<sub>4</sub> and CS<sub>2</sub> as carbon doping sources in MBE growth of GaN," *J. Cryst. Growth* **263**, 132 (2004), <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2003.11.091>.
- [49] H. Tang, J. B. Webb, J. A. Bardwell, S. Raymond, J. Salzman, and C. Uzan-Saguy, "Properties of carbon-doped GaN," *Appl. Phys. Lett.* **78**, 757 (2001), <https://doi.org/10.1063/1.1345816>.
- [50] G. Piao, X. Li, Y. Liu, Y. Xie, and B. Xu, "Study of carbon concentration in GaN grown by metalorganic chemical vapor deposition," *J. Cryst. Growth* **456**, 137 (2016), <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2016.08.030>.
- [51] M. Wieneke, H. Witte, K. Lange, M. Feneberg, A. Dadgar, J. Bläsing, R. Goldhahn, and A. Krost, "Ge as a surfactant in metal-organic vapor phase epitaxy growth of a-plane GaN exceeding

- carrier concentrations of  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ," *Appl. Phys. Lett.* **103**, 012103 (2013), <https://doi.org/10.1063/1.4812666>.
- [52] W. Cao, J. Zhu, X. Li, and B. Zhang., "Numerical simulation analysis of carbon defects in the buffer on vertical leakage and breakdown of GaN on silicon epitaxial layers," *Sci. Rep.* (2023), <https://doi.org/10.1038/s41598-023-41678-1>.
- [53] M. A. Reshchikov, M. Vorobiov, D. O. Demchenko, Ü. Özgür, H. Morkoç, A. Lesnik, M. P. Hoffmann, F. Hörich, A. Dadgar, and A. Strittmatter, "Two charge states of the CN acceptor in GaN: Evidence from photoluminescence," *Phys. Rev. B* **98**, 125207 (2018), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.125207>.
- [54] S. M. Sze, D. J. Coleman, and A. Loya, "Current transport in metal-semiconductor-metal (MSM) structures," *Solid-State Electron.* **14**, 1209 (1971), [https://doi.org/10.1016/0038-1101\(71\)90109-2](https://doi.org/10.1016/0038-1101(71)90109-2).
- [55] Z. Zhang, K. Yao, Y. Liu, C. Jin, X. Liang, Q. Chen, and L.-M. Peng., "Quantitative Analysis of Current–Voltage Characteristics of Semiconducting Nanowires: Decoupling of Contact Effects," *Adv. Funct. Mater.* **17**, 2478 (2007), <https://doi.org/10.1002/adfm.200600475>.
- [56] A. J. Chiquito, C. A. Amorim, O. M. Berengue, L. S. Araujo, E. P. Bernardo, and E. R. Leite, "Back-to-back Schottky diodes: the generalization of the diode theory in analysis and extraction of electrical parameters of nanodevices," *J. Phys.: Condens. Matter*, <https://doi.org/10.1088/0953-8984/24/22/225303>.
- [57] F. Stöckmann, "Über Strom-Spannungs-Kennlinien „Ohmscher“ Kontakte bei Halbleitern und Isolatoren," in *Halbleiterprobleme (Adv. Solid State Phys.)*, F. Sauter, Ed., Springer, Berlin, Heidelberg, pp. 279 (1959).
- [58] S. K. Cheung and N. W. Cheung, "Extraction of Schottky diode parameters from forward current-voltage characteristics," *Appl. Phys. Lett.* **49**, 85 (1986), <https://doi.org/10.1063/1.97359>.
- [59] T. Tanaka, N. Ito, M. Akutsu, K. Chikamatsu, S. Takado, and K. Nakahara., "Extraction of net acceptor type trap density in semi-insulating GaN layers grown on Si substrate by DC I-V measurement," *Phys. Status Solidi A* **214**, 1600925 (2017), <https://doi.org/10.1002/pssa.201600925>.
- [60] A. Dadgar, R. Borgmann, J. Bläsing, and A. Strittmatter, "High resistive buffer layers by Fermi level engineering," *J. Appl. Phys.* **134**, 025701 (2023), <https://doi.org/10.1063/5.0160242>.
- [61] M. A. Lampert, "Volume-controlled current injection in insulators," *Rep. Prog. Phys.* **27**, 329 (1964), <https://doi.org/10.1088/0034-4885/27/1/307>.
- [62] A. Fariza, A. Lesnik, J. Bläsing, M. P. Hoffmann, F. Hörich, P. Veit, H. Witte, A. Dadgar, and A. Strittmatter., "On reduction of current leakage in GaN by carbon-doping," *Appl. Phys. Lett.* **109**, 212102 (2016), <https://doi.org/10.1063/1.4968823>.
- [63] A. Dadgar, J. Bläsing, A. Diez, F. Bertram, J. Christen, and A. Krost, "Improving GaN-on-silicon properties for GaN device epitaxy," *Phys. Status Solidi C* **8**, 1503 (2011), <https://doi.org/10.1002/pssc.201000878>.
- [64] J. H. Ng, J. T. Asubar, H. Tokuda, and M. Kuzuhara, "AlGaIn/GaN HEMTs on free-standing GaN substrates with breakdown voltage of 5 kV and effective lateral critical field of 1 MV/cm," in *CS ManTech Conf.* p. 215 (2016).
- [65] Y. Xu, X. Yang, P. Zhang, X. Cao, Y. Chen, S. Guo, S. Wu, J. Zhang, Y. Feng, F. Xu, X. Wang, W. Ge, and B. Shen, "Influence of intrinsic or extrinsic doping on lattice locations of carbon in semi-insulating GaN," *Appl. Phys. Express* **12**, 061002 (2019), <https://doi.org/10.7567/1882-0786/ab1c19>.
- [66] S. Besendörfer, E. Meissner, A. Lesnik, J. Friedrich, A. Dadgar, and T. Erlbacher, "Methodology for the investigation of threading dislocations as a source of vertical leakage in AlGaIn/GaN-HEMT

- heterostructures for power devices," *J. Appl. Phys.* **125**, 095704 (2019), <https://doi.org/10.1063/1.5065442>.
- [67] D. Visalli, M. Van Hove, P. Srivastava, and G. Borghs., "(Invited) GaN-on-Si For High-Voltage Applications," *ECS Trans.* **41**, 101 (2011), <https://doi.org/10.1149/1.3631489>.
- [68] N. Ikeda, S. Kaya, J. Li, Y. Sato, S. Kato, and S. Yoshida, "High power AlGaIn/GaN HFET with a high breakdown voltage of over 1.8 kV on 4 inch Si substrates and the suppression of current collapse," in *Proc. 20th Int. Symp. Power Semicond. Devices ICs*, Orlando, FL, pp. 287 (2008), <https://doi.org/10.1109/ISPSD.2008.4538955>.
- [69] B. Lu and T. Palacios, "High Breakdown (>1500 V) AlGaIn/GaN HEMTs by Substrate-Transfer Technology," *IEEE Electron Device Lett.* **31**, 951 (2010), <https://doi.org/10.1109/LED.2010.2052587>.
- [70] I. B. Rowena, S. L. Selvaraj, and T. Egawa, "Buffer Thickness Contribution to Suppress Vertical Leakage Current With High Breakdown Field (2.3 MV/cm) for GaN on Si," *IEEE Electron Device Lett.* **32**, 1534 (2011), <https://doi.org/10.1109/LED.2011.2166052>.
- [71] J. Selvaraj, S. L. Selvaraj, and T. Egawa, "Effect of GaN Buffer Layer Growth Pressure on the Device Characteristics of AlGaIn/GaN High-Electron-Mobility Transistors on Si," *Jpn. J. Appl. Phys.* **48**, 121002 (2009), <https://doi.org/10.1143/JJAP.48.121002>.
- [72] D. Visalli, M. Van Hove, P. Srivastava, J. Derluyn, J. Das, M. Leys, S. Degroote, K. Cheng, M. Germain, and G. Borghs "Experimental and simulation study of breakdown voltage enhancement of AlGaIn/GaN heterostructures by Si substrate removal," *Appl. Phys. Lett.* **97**, 113501 (2010), <https://doi.org/10.1063/1.3488024>.
- [73] N. Wu, Z. Xing, S. Li, L. Luo, F. Zeng, and G. Li, "GaN-based power high-electron-mobility transistors on Si substrates: from materials to devices," *Semicond. Sci. Technol.* **38**, 063002 (2023), <https://doi.org/10.1088/1361-6641/acca9d>.

## 6 PL an GaN:C,Si

Photolumineszenzspektroskopie in Halbleitern wie Galliumnitrid ist von entscheidender Bedeutung für die Entwicklung und Optimierung moderner optoelektronischer Bauelemente. GaN ist aufgrund seiner großen Bandlücke und hohen thermischen Stabilität ein vielversprechendes Material für Anwendungen in Hochleistungs-Leuchtdioden (LEDs), Laser-Dioden und Hochfrequenz-Bauelementen [1, 2]. Die Effizienz und Lebensdauer dieser Bauelemente werden jedoch stark durch defektbezogene Rekombinationsprozesse beeinflusst [3].

Für die vorliegende Arbeit sind dabei vor allem die mikroskopischen Mechanismen von C-dotiertem GaN, welche die Leitfähigkeit der Pufferschicht bestimmen, von großem Interesse, da diese einen signifikanten Einfluss auf die finalen Bauelementeigenschaften haben. Ausgehend von einigen experimentellen sowie theoretischen Arbeiten wurde anfangs gefolgert, dass  $C_N$  ein flacher Akzeptor sei [4–6] und folglich das Auftreten von semi-isolierenden Eigenschaften aus einer Selbstkompensation resultiert. Es wurde angenommen, dass im Fall einer Selbstkompensation gleich viele  $C_N$ -Akzeptoren wie  $C_{Ga}$ -Donatoren eingebaut werden [7, 8].

Kohlenstoff wird ebenfalls mit der häufig beobachteten gelben Lumineszenz in Verbindung gebracht, welche ein Intensitätsmaximum bei 2.2-2.3 eV [9–11] aufweist sowie einer blauen Lumineszenz bei 2.8-3.0 eV [7, 12–17]. Dabei werden die mikroskopischen Ursachen (Komplexbildung, beteiligte Störstellen) weiterhin kontrovers diskutiert und so sind in der Literatur verschiedene, teils widersprüchliche Modelle zu finden, welche die gelbe und blaue Lumineszenz in GaN:C zu erklären versuchen. So z.B. wurde in den 1980er von Ogino und Aoki et al. [10] vorgeschlagen, dass die gelbe Lumineszenz das Resultat eines strahlenden Übergangs von einem flachen Donator bei 25 meV zu einem tiefen Akzeptor bei 860 meV sei. Hierbei wurde angenommen, dass der tiefe Akzeptor ein Komplex aus einer Galliumvakanz ( $V_{Ga}$ ) und  $C_N$  ist. Solch eine Konstellation scheidet jedoch als Erklärung aus, da beide ( $V_{Ga}$

128

und  $C_N$ ) als Akzeptoren agieren und die Bildungsenergie dieses Komplexes sehr hoch ist [5]. Mit der Entwicklung der Dichte-Funktional-Theorie (DFT) wurde durch die Berechnung der Bildungsenergien der relevanten Defekte in GaN anfangs vermutet, dass Galliumvakanz  $V_{Ga}$  als isolierter Defekt oder als Komplex in Verbindung mit Sauerstoff auf Stickstoffplatz  $O_N$  oder mit Kohlenstoff  $C_{Ga}$  für die gelbe Lumineszenz verantwortlich sind [5, 10, 18]. Diese theoretischen Ergebnisse wurden anfangs sogar durch einige experimentelle Untersuchungen gestützt. So zeigten Messungen mit der Positronenannihilationsspektroskopie („Positron annihilation spectroscopy“, PAS) eine vermeintliche Korrelation zwischen der gelben Lumineszenzintensität und der Konzentration der  $V_{Ga}$  [17, 19, 20]. Es wurde jedoch nie direkt behauptet oder gar bewiesen, dass  $V_{Ga}$  die einzig mögliche Quelle der gelben Lumineszenz in GaN sei. So erschienen im weiteren Verlauf verschiedene Studien, die zeigten, dass die  $V_{Ga}$  nicht die entscheidende Quelle der gelben Lumineszenz in GaN ist. Insbesondere in semi-isolierendem Material [17, 20, 21] ist die Bildungsenergie der  $V_{Ga}$  so hoch, dass die Konzentration dieses Defektes vernachlässigbar sei, trotz des Auftretens der gelben Lumineszenz in semi-isolierendem GaN.

In den darauffolgenden Jahren entstanden zahlreiche Publikationen die zwar immer wieder eine Korrelationen zwischen der gelben und blauen Lumineszenz und der C-Konzentration in GaN zeigen konnten [7, 21–24], jedoch blieb bis dato eine eindeutige Erklärung aus.

Die weitere Entwicklung von entsprechenden numerischen Methoden (wie bspw. der Heyd-Scuseria-Ernzerhof (HSE) Hybrid Dichte-Funktional Theorie), führten zu neuen Erkenntnissen über die möglichen Ursachen bzw. der zugrunde liegenden Mechanismen der gelben und blauen Lumineszenz in GaN [25–27].

Aus diesen Studien folgte unter anderem, dass die PL-Bande vom  $V_{Ga}-O_N$  Komplex im infraroten mit einem Intensitätsmaximum bei 1.42 eV Spektrum liegt. Ebenfalls ist eine Beteiligung des  $V_{Ga}-C_{Ga}$  Komplexes an der gelben und blauen Lumineszenz unwahrscheinlich, da dieser eine Bildungsenergie von  $\sim 9.2$  eV in n-Typ GaN aufweisen soll [27–29]. Der Donator-Akzeptor Komplex  $C_N-C_{Ga}$  soll ebenfalls eine

sehr hohen Bildungsenergie (5.32 eV für n-typ GaN) besitzen und daher ist seine Bildung unwahrscheinlich [30].

Im weiteren Verlauf haben sich durch die Anwendung der HSE Hybrid Dichte-Funktional Theorie zwei Modelle herauskristallisiert. Die Berechnungen durch Lyons et al. ergaben, dass Kohlenstoff, wenn er als  $C_N$ -Defekt eingebaut wird, einen tiefen Akzeptor bildet und die gelbe sowie blaue Lumineszenz verursacht (Abbildung 6.1).

Im Gegensatz dazu wurde von Reshchikov et al. und Demchenko et al. die Auffassung vertreten, dass ein tiefer Donator-Komplex  $C_N-O_N$  hauptsächlich für die gelbe Lumineszenz verantwortlich ist. Der Grund für diese Annahme waren Berechnungen, aus denen für den  $C_N-O_N$  Defekt-Komplex eine geringere Bildungsenergie resultierten als für den isolierten  $C_N$  Defekt [25–27, 29].

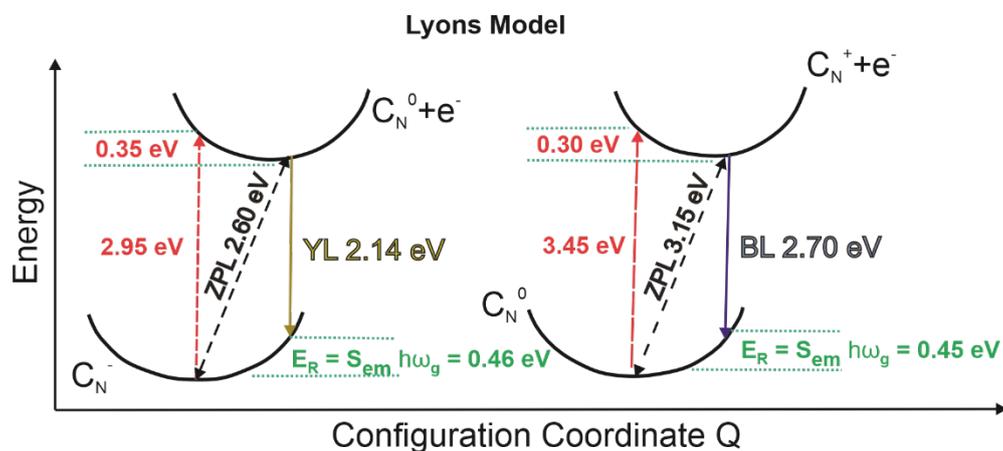


Abbildung 6.1: Konfigurationskoordinaten-Diagramm zur Darstellung der Übergänge zwischen den verschiedenen Ladungszuständen des  $C_N$ -Defekts in GaN nach dem Model von Lyons aus DFT-Berechnungen mittels „HSE hybrid functional“ nach Ref. [26]

In Abbildung 6.1 ist das Model nach Lyons et al. [29] für den  $C_N$ -Defekt dargestellt. Daraus folgt, dass  $C_N$  in GaN ein tiefer Akzeptor mit einem (-/0) Übergang bei 0.90 eV über dem Valenzbandmaximum ist. Dies ergibt ein gelbes Lumineszenzband mit einem PL-Intensitätsmaximum bei 2.14 eV und einer Null-Phononen-Linie („Zero-Phonon-Linie“, ZPL) von 2.6 eV. Ferner wird erwartet, dass  $C_N$  einen (0/+) Übergang

bei 0.35 – 0.48 eV über dem VBM (engl. Valence Band Maximum, das höchste Energieniveau, das von Elektronen im Valenzband besetzt sein kann) [9, 26] besitzt. In diesem Fall würde eine Steigerung der Anregungsintensität zu einer Sättigung der gelben Lumineszenz führen und so zu einem Anstieg der blauen Lumineszenz durch den (0/+) Übergang. Dies würde einer blauen Lumineszenzbande mit einem PL-Intensitätsmaximum von 2.70 eV [26] und einer Null-Phononen-Linie von 3.15 eV entsprechen. Nach Ref. [30] ist der  $C_N-O_N$  Komplex ein tiefer Donator bei 0.75 eV über dem Valenzbandmaximum und einem (+/2+) Übergangsniveau bei 0.14 eV über dem Valenzbandmaximum. Sowohl für „Ga-reiche“ als auch „N-reiche“ Wachstumsbedingungen soll die Bildungsenergie kleiner sein als die vom  $C_N$ -Defekt.

In Abbildung 6.2 ist das Modell von Demchenko-Reshchikov dargestellt. In n-typ GaN ist der Grundzustand des  $C_N-O_N$  Komplexes neutral. Eine optische Anregung führt zu einem Elektron-Loch-Paar wobei der neutrale  $C_N-O_N$  Komplex das Loch einfängt und sich sein Ladungszustand zu  $(C_N-O_N)^+$  ändert. Die benötigte Anregungsenergie für diesen Übergang wurde zu 3.30 eV berechnet [30] und stimmt mit experimentell bestimmten Werten im Bereich von 3.19 - 3.32 eV [10, 31] überein.

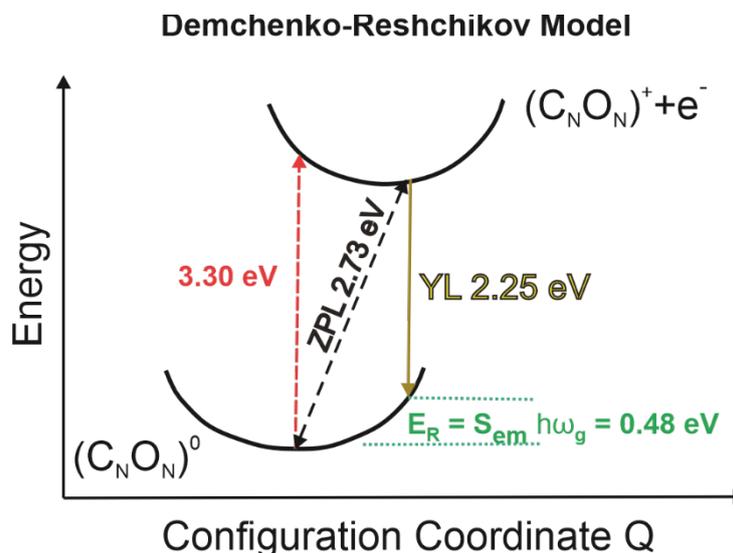


Abbildung 6.2: Modell nach Demchenko-Reshchikov für die Beschreibung der optischen Übergänge der gelben Lumineszenz durch einen  $C_N-O_N$  Komplex nach [30, 32] im Konfigurationskoordinaten-Diagramm.

Das Intensitätsmaximum der gelben Lumineszenz liegt in diesem Fall bei 2.25 eV, mit einer Franck-Codon-Verschiebung von 0.48 eV und führt zu einer Null-Phononenlinie von 2.7 eV. Die Stokes Verschiebung wurde auf 1.05 eV bestimmt. Laut diesem Modell besitzt der  $C_N-O_N$  Komplex lediglich einen Übergang, der zur gelben Lumineszenz führen kann. Ein weiterer Übergang bei (+/+2) soll, falls dieser existiert, zur grünen Lumineszenzen beitragen, welche bei  $\sim 2.4$  eV liegt und nicht zur blauen Lumineszenz bei  $\sim 2.7$  eV [32]. Ferner wird vermutet, dass der (+/+2) Übergang sehr nahe am Valenzbandmaximum liegt und in diesem Fall wäre es sehr unwahrscheinlich die grüne Lumineszenz zu beobachten, sogar bei einer Sättigung des gelben Lumineszenzbands, wie es bei hohen Anregungsdichten passieren kann. In Abbildung 6.3 sind PL-Messungen der Probenserie 1a bei 10 K dargestellt, die mit einer geringen Anregungsdichte mittels eines HeCd Laser ( $\lambda = 325$  nm) aufgenommen wurden. Die undotierte Probe dient hierbei als Referenz und hat eine C-Dotierung unterhalb der Nachweisempfindlichkeit der SIMS-Messung von  $[C] = \sim 1 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ .

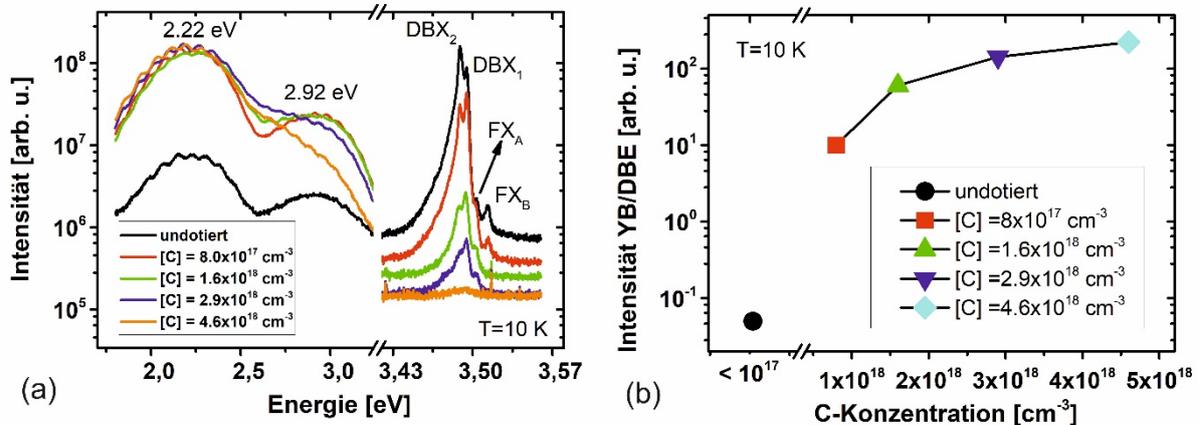


Abbildung 6.3: (a) PL-Messungen bei 10 K von GaN:C aus Probenserie 1. (b) Die relative Intensität des gelben Lumineszenzbands zum donor-gebundenen Exziton.

Die PL-Spektren, die bei 10 K aufgenommen wurden, enthalten jeweils ein intensives jedoch breites gelbes Lumineszenzband mit einem Maximum bei  $\sim 2.22$  eV sowie einer sehr viel schwächeren blauen Lumineszenz mit einem Intensitätsmaximum bei  $\sim 2.92$  eV. Neben der Bandkantenemission (NBE engl. „near band-edge emission“) sind bei allen untersuchten Proben die gelbe sowie die blaue Lumineszenz

mit einem Intensitätsmaximum bei  $\sim 2.2$  eV (YL) sowie  $\sim 2.9$  eV (BL) zu erkennen. Dabei sinkt die PL-Intensität der bandkantennahen Lumineszenz mit steigender C-Konzentration, was einem Anstieg von nicht-strahlenden Rekombinationsprozessen zugeschrieben werden kann. Jedoch waren die blaue sowie die gelbe Lumineszenz sowohl in der undotierten als auch in den C-dotierten Proben als breite PL-Banden vorzufinden.

Im Vergleich zur blauen und gelben Lumineszenz ist die bandkannennahe Lumineszenz für die undotierte Referenzprobe der dominante Rekombinationsweg. Mit steigender C-Konzentration steigt die Intensität der gelben Lumineszenz, was in Abbildung 6.3b dargestellt ist. Es ist ebenfalls ein schwacher Anstieg der blauen Lumineszenzintensität mit steigender C-Dotierung zu beobachten. Der Trend des Verhältnisses der Lumineszenzintensität der gelben zur donatorgebundenen Exzitonenemission, welches mit steigender C-Konzentration zunimmt, passt zu den Resultaten, die an MBE GaN:C Proben erzielt wurden [14].

Durch weiterführende PL-Messungen der bandkantennahen Lumineszenz bei 10 K (Abbildung 6.3a) konnten zwei donatorgebundene exzitonische Übergänge,  $D^0X_1$  bei 3.495 eV und  $D^0X_2$  bei 3.489 eV, beobachtet werden, welche das Spektrum dominieren. Des Weiteren konnten zwei freie exzitonische Übergänge ( $FX_A$  bei 3.502 eV und  $FX_B$  bei 3.513 eV) identifiziert werden. Diese exzitonischen Übergänge sind aus der Literatur bekannt [33] und wurden bereits in GaN:Mg beobachtet. Monemar et al. [34] konnten durch PL-Messungen an relaxiertem GaN für die freien A- und B- exzitonischen Übergänge die Werte 3.478 und 3.484 eV ermitteln. Dabei ist die Energiedifferenz von 24 meV für das  $FX_A$  der kompressiven Verspannung der Schicht geschuldet, wodurch eine Blauverschiebung der exzitonischen Linien im PL Spektrum resultiert [35]. Mit steigender Kohlenstoffkonzentration reduziert sich die PL-Intensität der beiden Donator gebundenen Exzitonen  $DBX_1$  and  $DBX_2$  erheblich, was mit einer Reduzierung der freien Elektronenkonzentration durch die Kompensation von nicht absichtlich eingebauten flachen Donatoren wie z.B.  $Si_{Ga}$  oder  $O_N$  durch die zunehmende C-Akzeptorkonzentration  $C_N$  gut zusammenpasst [36].

Der Vergleich der PL-Messungen an ausgewählten Proben der Serie 1 bei 10 K und bei Raumtemperatur zeigt, dass die Position des gelben Lumineszenzmaximums bis zur Raumtemperatur stabil ist, was auf eine starke Elektronen-Phononen Kopplung hindeutet [10, 24, 37].

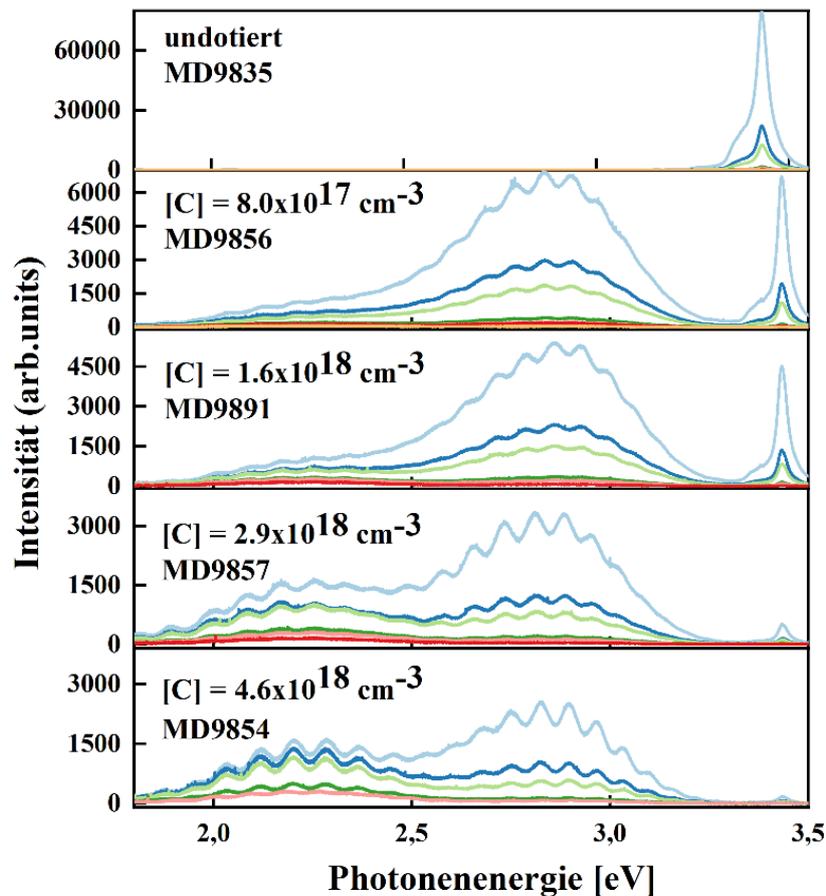


Abbildung 6.4: Anregungsabhängige PL-Spektren bei Raumtemperatur

Leistungsabhängige PL-Messungen an der Probenserie 1 bei Raumtemperatur, die mittels eines YAG:Nd Laser ( $\lambda = 266 \text{ nm}$ ) bei einer maximalen Anregungsdichte von  $100 \text{ kW cm}^{-2}$  durchgeführt wurden, sind in Abbildung 6.4 gezeigt. Bei der undotierten Referenzprobe ist hierbei lediglich die bandkanten nahe Lumineszenz zu beobachten. Wie auch bei Tieftemperatur PL-Messungen sinkt die bandkanten nahe Lumineszenz

mit steigender C-Konzentration. Bei größer werdender Leistungsdichte steigt die Intensität der bandkantennahen Lumineszenz fast linear an, jedoch ist bei der undotierten Probe keine gelbe oder blaue Lumineszenz zu erkennen. Im Gegensatz dazu erscheinen bei allen C-dotierten Proben sowohl die gelbe als auch die blaue Lumineszenz. Des Weiteren ist zu erkennen, dass mit steigender C-Konzentration die Intensitäten der gelben und blauen Lumineszenz relativ zur bandkantennahen Emission ansteigen. Dabei überwiegt bei schwacher Anregung die gelbe Lumineszenz, wobei für hohe Leistungsdichten die blaue Lumineszenz immer intensiver wird, bis diese das Spektrum dominiert.

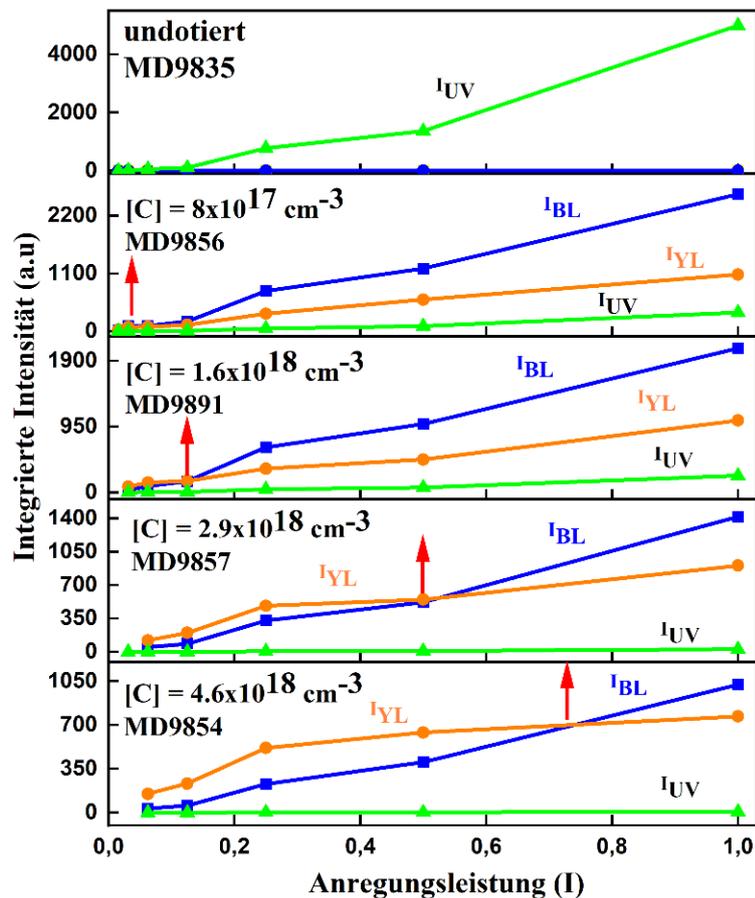


Abbildung 6.5: Integrierte Intensitäten von bandkantennaher (UV), gelber (YL) und blauer (BL) Lumineszenz als Funktion der Anregungsleistung der Probenserie 1

Die integrierten leistungsabhängigen PL-Intensitäten der bandkantennahen, gelben und blauen Lumineszenz sind in Abbildung 6.5 dargestellt. Dabei ist zu erkennen, dass die integrierten Intensitäten aller drei PL-Bänder mit zunehmender Anregungsleistung zu Beginn steigen. Jedoch setzt bei der gelben Lumineszenz bei ca. 30% der maximalen Anregungsleistung eine Sättigung der Intensität ein, welche unabhängig von der C-Konzentration ist. Der lineare Anstieg der gelben Lumineszenz für relativ geringe Anregungsdichten bei GaN konnte bereits beobachtet werden bzw. ist aus der Literatur bekannt [38]. Bei diesen Anregungsdichten ist ebenfalls bei der blauen und bandkantennahen Lumineszenz ein nahezu linearer Anstieg zu erkennen. Zusätzlich ist jedoch eine von der C-Konzentration abhängige Leistungsdichte zu finden ab der die blaue die gelbe Lumineszenz übersteigt. Dieser Schnittpunkt ist durch Pfeile in Abbildung 6.5 für die jeweilige Probe eingezeichnet. Die Intensität der gelben Lumineszenz sättigt sich bei hohen Anregungsintensitäten aufgrund der Füllung der  $C_N$ -Defekte mit photogenerierten Löchern. Im Gegensatz dazu zeigt die blaue Lumineszenz bis zu sehr hohen Anregungsintensitäten keine Sättigung, was auf einen anderen Rekombinationsmechanismus hinweist, der den  $C_N^+$ -Zustand betrifft. Diese Ergebnisse stehen somit in Einklang mit dem Modell von Lyons et al. [26, 29].

Durch das Auftreten der gelben und blauen Lumineszenz, kann dies nicht mehr durch das Model von Reshchikov und Demchenko [30] erklärt werden. Somit entstehen die gelbe und die blaue Lumineszenz in den durch Propan dotierten Proben durch zwei verschiedene Ladungszustände von Kohlenstoff auf dem Stickstoffgitterplatz in GaN.

Die blaue Lumineszenz kann daher wie folgt beschrieben werden. Falls Elektron-Loch-Paare in einer großen Anzahl verfügbar sind, so fängt das  $C_N^0$  ein zweites Loch ein, wodurch es positiv geladen und zu  $C_N^+$  wird. Wenn nun ein Elektron aus dem Leitungsband mit diesem Loch in  $C_N^+$  rekombiniert, so wird ein Photon emittiert, welches dann zur blauen Lumineszenz beiträgt.

Mit steigender C-Konzentration in GaN muss ebenfalls die Anregungsdichte bei leistungsabhängigen Raumtemperatur PL-Messungen steigen, damit die Intensität der blauen Lumineszenz höher als die der gelben Lumineszenz wird. Dies ist damit zu erklären, dass bei steigender C-Konzentration eine größere Anzahl an  $C_N^-$  Zuständen

vorhanden ist, wodurch wiederum höhere Leistungsdichten notwendig werden, um eine Sättigung der gelben Lumineszenz zu erreichen. Das simultane Auftreten und Verhalten der gelben und blauen Lumineszenz bei Änderung der Anregungsintensität entsprechen sehr gut dem Modell von Lyons et al. [29], d.h. das beide Bänder vom  $C_N$ -Defekt stammen.

Einige der für diese Arbeit hergestellten und untersuchten Proben wurden auf Anfrage von Prof. Reshchikov an ihn zu weiterführenden Analysen gesandt [39]. Basierend auf den hier vorgestellten und publizierten Ergebnissen sowie von weiterführenden Untersuchungen dieser Proben durch Reshchikov et al., wurde unsere Vermutung, dass die blaue Lumineszenz um 2.92 eV zum zweiten Übergang von isolierten  $C_N$  gehört, bestätigt. Reshchikov et al. [25] widerrief daraufhin sein Modell und präsentierte im weiteren Verlauf eine detaillierte Charakterisierung (Abbildung 6.6) einer PL Bande um 2.85 eV, welches die vorhergesagten Eigenschaften zeigt und ab dato als  $BL_C$  in der Literatur bezeichnet wird [25, 39].

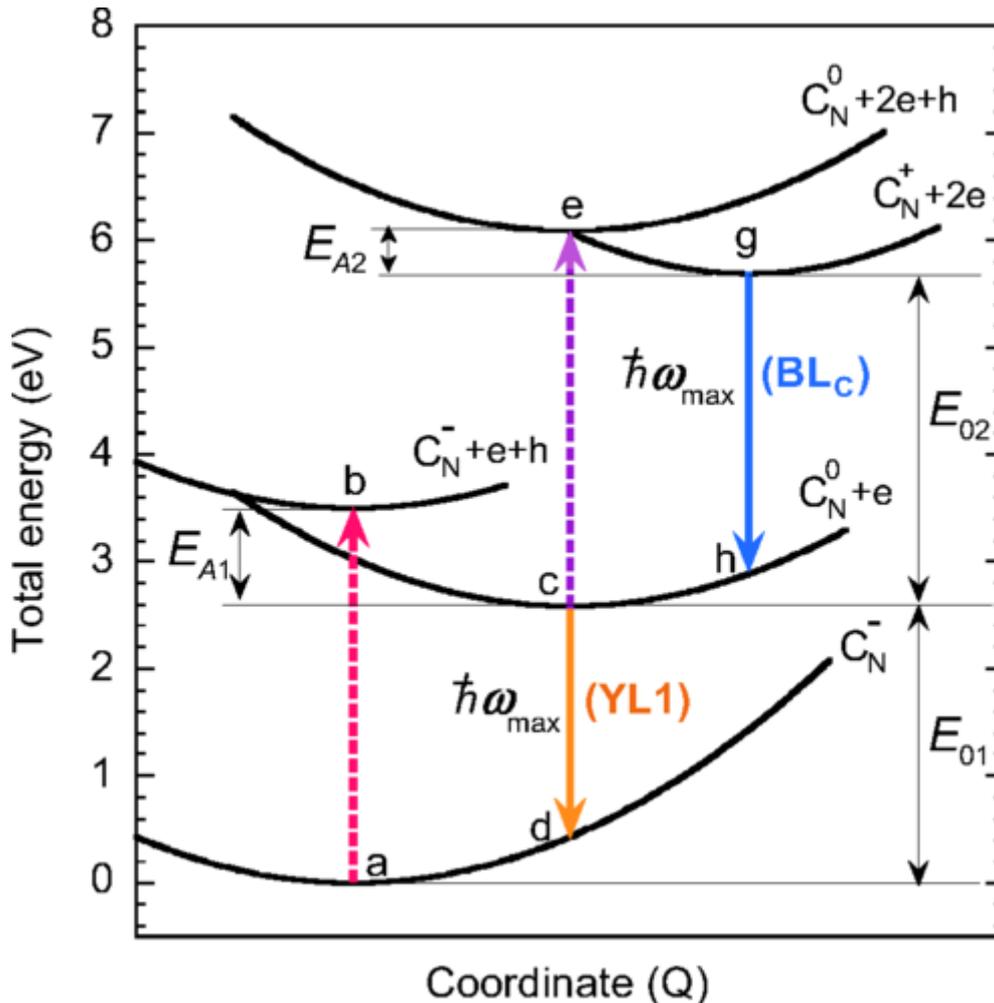


Abbildung 6.6: Konfigurationskoordinationsdiagramm für den  $C_N$ -Defekt in GaN. Die Parabel mit dem Minimum bei 0 eV (Punkt a) stellt den Grundzustand des Systems dar ( $C_N^-$ -Defekt gefüllt mit einem Elektron:  $C_N^-$ ). Der Übergang von Punkt a nach b entspricht der Anregung eines Elektrons vom Valenzband in das Leitungsband, wobei  $C_N$  negativ geladen bleibt. Der Übergang von Punkt b nach c ist das Einfangen eines Lochs durch den  $C_N$ -Defekt ( $C_N^-$  wird zu  $C_N^0$ ). Der Übergang von Punkt c nach d entspricht dem Maximum des YL1-Bandes bei 2.17 eV. Der Übergang von d nach a ist die Gitterrelaxation nach der Emission eines Photons. Der Übergang von Punkt c nach a verursacht die Null-Phononen-Linie des YL1-Bandes mit der Energie  $E_{01} = 2.587$  eV. Die Parabel mit dem Minimum bei Punkt e ist identisch mit der Parabel bei c, jedoch um  $E_g = 3.503$  eV nach oben verschoben. Der Übergang e-g entspricht dem Einfang eines zweiten Lochs durch den  $C_N$ -Defekt, wodurch  $C_N^0$  zu  $C_N^+$  wird. Der Übergang g-h entspricht dem Maximum des BLc-Bandes bei 2.9 eV. Der Übergang von g nach c verursacht die Null-Phononen-Linie des BLc-Bandes mit der Energie  $E_{02} = 3.2$  eV. (Abbildung entnommen aus [39])

## 6.1 Literaturverzeichnis

- [1] S. Pimputkar, J. S. Speck, S. P. DenBaars, and S. Nakamura, "Prospects for LED lighting," *Nat. Photon.* **3**, 180 (2009), <https://doi.org/10.1038/nphoton.2009.32>.
- [2] U. K. Mishra, P. Parikh, and Y.-F. Wu, "AlGaIn/GaN HEMTs—an overview of device operation and applications," *Proc. IEEE* **90**, 1022 (2002), <https://doi.org/10.1109/JPROC.2002.1021567>.
- [3] E. Glaser, W.E Carlos, G.C.B Braga, J.A Freitas, W.J Moore, B.V Shanabrook, A.E Wickenden, D.D Koleske, R.L Henry, M.W Bayerl, M.S Brandt, H Obloh, P Kozodoy, S.P DenBaars, U.K Mishra, S Nakamura, E Haus, J.S Speck, J.E Van Nostrand, M.A Sanchez, E Calleja, A.J Ptak, T.H Myers, and R.J Molnar, "Characterization of nitrides by electron paramagnetic resonance (EPR) and optically detected magnetic resonance (ODMR)," *Mater. Sci. Eng. B* **93**, 39 (2002), [https://doi.org/10.1016/S0921-5107\(02\)00007-7](https://doi.org/10.1016/S0921-5107(02)00007-7).
- [4] S. Fischer, C. Wetzell, E. E. Haller, and B. K. Meyer, "On p-type doping in GaN—acceptor binding energies," *Appl. Phys. Lett.* **67**, 1298 (1995), <https://doi.org/10.1063/1.114403>.
- [5] J. Neugebauer and C. G. van de Walle, "Gallium vacancies and the yellow luminescence in GaN," *Appl. Phys. Lett.* **69**, 503 (1996), <https://doi.org/10.1063/1.117767>.
- [6] P. Bogusławski and J. Bernholc, "Doping properties of C, Si, and Ge impurities in GaN and AlN," *Phys. Rev. B* **56**, 9496 (1997), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.56.9496>.
- [7] C. H. Seager, A. F. Wright, J. Yu, and W. Götz, "Role of carbon in GaN," *J. Appl. Phys.* **92**, 6553 (2002), <https://doi.org/10.1063/1.1518794>.
- [8] A. Armstrong, C. Poblentz, D. S. Green, U. K. Mishra, J. S. Speck, and S. A. Ringel, "Impact of substrate temperature on the incorporation of carbon-related defects and mechanism for semi-insulating behavior in GaN grown by molecular beam epitaxy," *Appl. Phys. Lett.* **88**, 082114 (2006), <https://doi.org/10.1063/1.2179375>.
- [9] M. A. Reshchikov and H. Morkoç, "Luminescence properties of defects in GaN," *J. Appl. Phys.* **97**, 061301 (2005), <https://doi.org/10.1063/1.1868059>.
- [10] T. Ogino and M. Aoki, "Mechanism of Yellow Luminescence in GaN," *Jpn. J. Appl. Phys.* **19**, 2395 (1980), <https://doi.org/10.1143/JJAP.19.2395>
- [11] T. Suski, P. Perlin, H. Teisseyre, M. Leszczyński, I. Grzegory, J. Jun, M. Boćkowski, S. Porowski, and T. D. Moustakas, "Mechanism of yellow luminescence in GaN," *Appl. Phys. Lett.* **67**, 2188 (1995), <https://doi.org/10.1063/1.115098>.
- [12] Q. Mao, J. Liu, X. Wu, Jianli Zhang, C. Xiong C. Mo, M. Zhang and F. Jiang, "Influence of growth rate on the carbon contamination and luminescence of GaN grown on silicon," *J. Semicond.* **36**, 093003 (2015), <https://doi.org/10.1088/1674-4926/36/9/093003>.
- [13] A. Armstrong, A. R. Arehart, B. Moran, S. P. DenBaars, U. K. Mishra, J. S. Speck, and S. A. Ringel, "Impact of carbon on trap states in n-type GaN grown by metalorganic chemical vapor deposition," *Appl. Phys. Lett.* **84**, 374 (2004), <https://doi.org/10.1063/1.1643540>.
- [14] R. Armitage, Q. Yang, and E. R. Weber, "Analysis of the carbon-related "blue" luminescence in GaN," *J. Appl. Phys.* **97**, 073524 (2005), <https://doi.org/10.1063/1.1856224>.
- [15] F. J. Xu, B. Shen, L. Lu, Z. L. Miao, J. Song, Z. J. Yang, G. Y. Zhang, X. P. Hao, B. Y. Wang, X. Q. Shen, and H. Okumura, "Different origins of the yellow luminescence in as-grown high-resistance GaN and unintentional-doped GaN films," *J. Appl. Phys.* **107**, 023528 (2010), <https://doi.org/10.1063/1.3294965>.
- [16] S. O. Kucheyev, M. Toth, M. R. Phillips, J. S. Williams, C. Jagadish, and G. Li, "Chemical origin of the yellow luminescence in GaN," *J. Appl. Phys.* **91**, 5867 (2002), <https://doi.org/10.1063/1.1467605>.

- [17] R. Armitage, William Hong, Qing Yang, H. Feick, J. Gebauer, E. R. Weber, S. Hautakangas, and K. Saarinen, "Contributions from gallium vacancies and carbon-related defects to the "yellow luminescence" in GaN," *Appl. Phys. Lett.* **82**, 3457 (2003), <https://doi.org/10.1063/1.1578169>.
- [18] T. Mattila and R. M. Nieminen, "Point-defect complexes and broadband luminescence in GaN and AlN," *Phys. Rev. B* **55**, 9571 (1997), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.55.9571>.
- [19] K. Saarinen, T. Laine, S. Kuisma, J. Nissilä, P. Hautojärvi, L. Dobrzynski, J. M. Baranowski, K. Pakula, R. Stepniewski, M. Wojdak, A. Wyszomlek, T. Suski, M. Leszczynski, I. Grzegory, and S. Porowski, "Observation of Native Ga Vacancies in GaN by Positron Annihilation," *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3030 (1997), <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.79.3030>.
- [20] A. Sedhain, J. Li, J. Y. Lin, and H. X. Jiang, "Nature of deep center emissions in GaN," *Appl. Phys. Lett.* **96**, 151902 (2010), <https://doi.org/10.1063/1.3389497>.
- [21] F. Reurings and F. Tuomisto, "Interplay of Ga vacancies, C impurities, and yellow luminescence in GaN," in *Gallium Nitride Materials and Devices II*, San Jose, CA, H. Morkoç and C. W. Litton, Eds., *Proc. SPIE* **6473**, 64730M (2007), <https://doi.org/10.1117/12.698980>.
- [22] A. Armstrong, A. R. Arehart, D. Green, U. K. Mishra, J. S. Speck, and S. A. Ringel, "Impact of deep levels on the electrical conductivity and luminescence of gallium nitride codoped with carbon and silicon," *J. Appl. Phys.* **98**, 053704 (2005), <https://doi.org/10.1063/1.2005379>.
- [23] D. S. Green, U. K. Mishra, and J. S. Speck, "Carbon doping of GaN with CBr<sub>4</sub> in radio-frequency plasma-assisted molecular beam epitaxy," *J. Appl. Phys.* **95**, 8456 (2004), <https://doi.org/10.1063/1.1755431>.
- [24] R. Zhang and T. F. Kuech, "Photoluminescence of carbon in situ doped GaN grown by halide vapor phase epitaxy," *Appl. Phys. Lett.* **72**, 1611 (1998), <https://doi.org/10.1063/1.121144>.
- [25] F. Zimmermann, J. Beyer, C. Röder, F. C. Beyer, E. Richter, K. Irmischer, and J. Heitmann, "Current Status of Carbon-Related Defect Luminescence in GaN," *Phys. Status Solidi A* **218**, 2100235 (2021), <https://doi.org/10.1002/pssa.202100235>.
- [26] J. L. Lyons, A. Janotti, and C. G. van de Walle, "Effects of carbon on the electrical and optical properties of InN, GaN, and AlN," *Phys. Rev. B* **89**, 035204 (2014), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.035204>.
- [27] H.-S. Zhang, L. Shi, X.-B. Yang, Y.-J. Zhao, K. Xu, and L.-W. Wang, "First-Principles Calculations of Quantum Efficiency for Point Defects in Semiconductors: The Example of Yellow Luminescence in GaN: C<sub>n</sub> + O<sub>n</sub> and GaN:C<sub>n</sub>," *Adv. Opt. Mater.* **5**, 1700404 (2017), <https://doi.org/10.1002/adom.201700404>.
- [28] J. L. Lyons and C. G. van de Walle, "Computationally predicted energies and properties of defects in GaN," *npj Comput. Mater.* **3**, 1 (2017), <https://doi.org/10.1038/s41524-017-0014-2>.
- [29] J. L. Lyons, A. Janotti, and C. G. van de Walle, "Carbon impurities and the yellow luminescence in GaN," *Appl. Phys. Lett.* **97**, 152108 (2010), <https://doi.org/10.1063/1.3492841>.
- [30] D. O. Demchenko, I. C. Diallo, and M. A. Reshchikov, "Yellow Luminescence of Gallium Nitride Generated by Carbon Defect Complexes," *Phys. Rev. Lett.* **110**, 087404 (2013), <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.087404>.
- [31] M. A. Reshchikov, H. Morkoç, S. S. Park, and K. Y. Lee, "Photoluminescence study of deep-level defects in undoped GaN," *MRS Proc.* **693**, I6.19.1 (2001), <https://doi.org/10.1557/PROC-693-I6.19.1>.
- [32] M. A. Reshchikov, D. O. Demchenko, A. Usikov, H. Helava, and Y. Makarov, "Carbon defects as sources of the green and yellow luminescence bands in undoped GaN," *Phys. Rev. B* **90**, 235203 (2014), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.235203>.
- [33] G. Callsen, M. R. Wagner, T. Kure, J. S. Reparaz, M. Bügler, J. Brunmeier, C. Nenstiel, A. Hoffmann, M. Hoffmann, J. Tweedie, Z. Bryan, S. Aygun, R. Kirste, R. Collazo, and Z. Sitar,

- "Optical signature of Mg-doped GaN: Transfer processes," *Phys. Rev. B* **86**, 075207 (2012), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.075207>.
- [34] B. Monemar, P.P. Paskov, J.P. Bergman, A.A. Toropov, T.V. Shubina, S. Figge, T. Paskova, D. Hommel, A. Usui, M. Iwaya, S. Kamiyama, H. Amano, and I. Akasaki., "Optical signatures of dopants in GaN," *Mater. Sci. Semicond. Process.* **9**, 168 (2006), <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2006.01.075>.
- [35] C. Kisielowski, J. Krüger, S. Ruvimov, T. Suski, J. W. Ager III, E. Jones, Z. Liliental-Weber, M. Rubin, E. R. Weber, M. D. Bremser, and R. F. Davis., "Strain-related phenomena in GaN thin films," *Phys. Rev. B* **54**, 17745 (1996), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.17745>.
- [36] A. Lesnik, M. P. Hoffmann, A. Fariza, J. Bläsing, H. Witte, P. Veit, F. Hörich, C. Berger, J. Hennig, A. Dadgar, and A. Strittmatter, "Properties of C-doped GaN," *Phys. Status Solidi B* **254**, 1600708 (2017), <https://doi.org/10.1002/pssb.201600708>.
- [37] M. A. Reshchikov, F. Shahedipour, R. Y. Korotkov, M. P. Ulmer, and B. W. Wessels, "Deep acceptors in undoped GaN," *Physica B* **273–274**, 105 (1999), [https://doi.org/10.1016/S0921-4526\(99\)00417-2](https://doi.org/10.1016/S0921-4526(99)00417-2).
- [38] W. Grieshaber, E. F. Schubert, I. D. Goepfert, R. F. Karlicek, M. J. Schurman, and C. Tran, "Competition between band gap and yellow luminescence in GaN and its relevance for optoelectronic devices," *J. Appl. Phys.* **80**, 4615 (1996), <https://doi.org/10.1063/1.363443>.
- [39] M. A. Reshchikov, M. Vorobiov, D. O. Demchenko, Ü. Özgür, H. Morkoç, A. Lesnik, M. P. Hoffmann, F. Hörich, A. Dadgar, and A. Strittmatter, "Two charge states of the CN acceptor in GaN: Evidence from photoluminescence," *Phys. Rev. B* **98**, 125207 (2018), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.125207>

# 7 Zusammenfassung

Undotierte GaN Schichten, die mittels der MOVPE hergestellt werden, weisen typischerweise aufgrund von Eigendefekten und Verunreinigungen eine n-Typ Leitung auf [1]. Dadurch kann GaN, insbesondere in Hinblick auf den Anwendungsbereich in der Leistungselektronik, sein volles Potential nicht ausschöpfen. GaN-on-Si hat das Potential, die CMOS-Technologie im Spannungsbereich von  $\leq 1200$  V abzulösen [2] und durch die aufgrund höherer Betriebsfrequenzen möglichen, deutlich geringeren Verluste u.a. von Spannungswandlern einen großen Beitrag zur Energiewende zu leisten. Das epitaktische Wachstum auf kostengünstigen Si-Substraten mit großen verfügbaren Durchmessern ist der treibende wirtschaftliche Faktor für die Untersuchungen im Rahmen dieser Arbeit [2].

Die systematische Untersuchung einer alternativen Methode zur Kohlenstoffdotierung von GaN-Schichten führte erfolgreich zur Herstellung hochohmiger Schichten mit exzellenter Isolationswirkung und zeigt, dass die in dieser Arbeit erforschte Kohlenstoffdotierung besser ist als die bislang bekannten Verfahren, weshalb diese Methode inzwischen auch von kommerziellen Halbleiterherstellern eingesetzt wird.

Typischerweise wurde die Kohlenstoffkonzentration bisher intrinsisch durch Änderung der Prozessparameter wie Temperatur, Druck und V/III-Verhältnis variiert. Diese Art der Kohlenstoffdotierung erfolgt oftmals unter nachteiligen Wachstumsbedingungen. So zeigen intrinsisch dotierte GaN-Schichten mit einer hohen Kohlenstoffkonzentration oft eine schlechtere strukturelle Qualität und eine raue Oberflächenmorphologie [3].

Als Alternative wurde in dieser Arbeit erstmals systematisch die extrinsische C-Dotierstoffkonzentration durch die Verwendung eines Propan-Präkursors auf die elektrischen, strukturellen und optischen Eigenschaften von GaN detailliert untersucht.

Die C-Dotierung mit Propan ermöglicht eine präzise Kontrolle der Kohlenstoffkonzentration in MOCVD-gewachsenen GaN-Schichten durch das Einstellen des Propanflusses während des Wachstumsprozesses, ohne dabei die Wachstumsbedingungen zu ändern.

Anhand von SIMS-Tiefenprofilen ist die hervorragende Steuerbarkeit der C-Dotierkonzentration über die Flussrate des Präkursors belegt, die eine lineare Abhängigkeit zum eingestellten Propanfluss zeigt. Steile Flanken in kohlenstoffdotierten Bereichen von GaN-Schichten schließen einen nennenswerten Anström- sowie Memoryeffekt aus.

Es konnte gezeigt werden, dass bei für GaN optimalen Wachstumsbedingungen eine C-Dotierung im Bereich von  $1 \cdot 10^{17}$ - $1.2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  erreicht werden kann, bei gleichbleibend sehr guter Kristallqualität. Untersuchungen mittels HRXRD und AFM bestätigten, dass hohe Kohlenstoffkonzentrationen zu keiner strukturellen Degradation führen. Propan als extrinsische Kohlenstoffquelle hat somit keinen negativen Einfluss auf die Materialeigenschaften von GaN, was zu konsistenten und qualitativ hochwertigen Ergebnissen führt.

Der Einbau von  $C_N$  als bevorzugtem elektrisch aktivem Akzeptor liegt mit diesem neuen Verfahren bei nahezu 100%, was inzwischen auch von einer unabhängigen Gruppe [4] verifiziert wurde. Anhand von Si und C kodotierten GaN-Schichten konnte der Einbau von Kohlenstoff als Akzeptor eindeutig belegt und semiisolierenden Eigenschaften erzielt werden, die für Anwendungen in elektronischen Leistungsbau-elementen vorteilhaft sind.

Die Ergebnisse der elektrischen Charakterisierung zeigen eine deutliche Steigerung der Durchbruchfeldstärke mit zunehmender Kohlenstoffkonzentration und eine Reduzierung des Leckstroms um mehrere Größenordnungen. Die damit erzielten hochisolierenden GaN-Pufferschichten zeigen Durchbruchfeldstärken von bis zu  **$\sim 2.5 \text{ MV/cm}$** . Dies ist in Hinblick auf die Serienproduktion von GaN-on-Si Schichtstrukturen ein bedeutender Schritt, da der GaN Puffer auf ca.  $\sim 7 \mu\text{m}$  Dicke begrenzt ist. Bei dickeren GaN Schichten wird die Waferkrümmung zu groß, d.h.

>50 1/km bzw. tritt plastische Deformation auf, was die weitere Prozessierung in einer standard CMOS Fab erschwert.

Durch die extrinsische C-Dotierung mit Propan konnte ebenfalls gezeigt werden, dass die gelbe und blaue Lumineszenz der Schichten durch den  $C_N$ -Defekt entsteht. So wurden Proben der Serie 1, 2 und 3 an Prof. Reshchikov geschickt, der nach weiteren aufwendigeren PL-Messungen an diesen Proben seine ursprüngliche Theorie [5, 6] überarbeiten musste und ebenfalls verifizieren konnte, dass die blaue Lumineszenz durch den  $C_N$ -Defekt in GaN verursacht wird [5].

Die Analyse im Rahmen dieser Arbeit zeigt darüber hinaus, dass die neu entdeckte blaue Lumineszenz-Bande ( $BL_C$ ) in GaN auf Übergänge zurückzuführen ist, die durch den  $C_N$ -Defekt verursacht wird. Die erzielten Ergebnisse erweitern das Verständnis der defektbezogenen Lumineszenz in GaN und können entscheidende Einblicke liefern, die zur Optimierung von GaN-basierten Technologien beitragen.

Zusammenfassend bietet die extrinsische Dotierung von GaN mit Kohlenstoff durch die Verwendung von Propan eine präzise und kontrollierte Methode, um die Kohlenstoffkonzentration unabhängig von den Wachstumsparametern einzustellen und ermöglicht die Herstellung hochisolierender GaN-Schichten ohne Beeinträchtigung der strukturellen Qualität. Damit ist die extrinsische Dotierung von GaN mit Kohlenstoff derzeit die ideale Methode zur Erzeugung hochohmiger GaN-Schichten, was sie besonders vorteilhaft für Anwendungen in der Hochleistungselektronik macht.

## 7.1 Literaturverzeichnis

- [1] M. A. Reshchikov and H. Morkoç, "Luminescence properties of defects in GaN," *J. Appl. Phys.* **97**, 061301 (2005), <https://doi.org/10.1063/1.1868059>.
- [2] H. Amano, Y. Baines, E. Beam, M. Borga, P. Boulay, J. Brammertz, A. L. Brown, B. Cheng, T. Dang, A. Dekker, S. Fahlbusch, and S. Stoffels, "The 2018 GaN power electronics roadmap," *J. Phys. D: Appl. Phys.* **51**, 163001 (2018), <https://doi.org/10.1088/1361-6463/aaaf9d>.
- [3] G. Parish, S. Keller, S. P. DenBaars, and U. K. Mishra, "SIMS investigations into the effect of growth conditions on residual impurity and silicon incorporation in GaN and  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ," *J. Electron. Mater.* **29**, 15 (2000), <https://doi.org/10.1007/s11664-000-0087-3>.
- [4] Y. Xu, X. Yang, P. Zhang, X. Cao, Y. Chen, S. Guo, S. Wu, J. Zhang, Y. Feng, F. Xu, X. Wang, W. Ge, and B. Shen, "Influence of intrinsic or extrinsic doping on lattice locations of carbon in semi-insulating GaN," *Appl. Phys. Express* **12**, 061002 (2019), <https://doi.org/10.7567/1882-0786/ab1c19>.
- [5] F. Zimmermann J. Beyer, C. Röder, F. C. Beyer, E. Richter, K. Irmscher, and J. Heitmann, "Current Status of Carbon-Related Defect Luminescence in GaN," *Phys. Status Solidi A* **218**, 2100235 (2021), <https://doi.org/10.1002/pssa.202100235>.
- [6] M. A. Reshchikov, M. Vorobiov, D. O. Demchenko, Ü. Özgür, H. Morkoç, A. Lesnik, M. P. Hoffmann, F. Hörich, A. Dadgar, and A. Strittmatter, "Two charge states of the CN acceptor in GaN: Evidence from photoluminescence," *Phys. Rev. B* **98**, 125207 (2018), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.125207>

# 8 Veröffentlichungen

Teile dieser Arbeit wurden bereits in begutachteten Artikeln in wissenschaftlichen Fachzeitschriften veröffentlicht:

- S. Besendörfer, E. Meißner, A. Lesnik, J. Friedrich, A. Dadgar, and T. Erlbacher, “Methodology for the investigation of threading dislocations as a source of vertical leakage in AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>-HEMT heterostructures for power devices”, *J. of Appl. Phys.* 125, 095704 (2019), DOI 10.1063/1.5065442
- M. A. Reshchikov, M. Vorobiov, D. O. Demchenko, Ü. Özgür, H. Morkoc, A. Lesnik, M. P. Hoffmann, F. Hörich, A. Dadgar, and A. Strittmatter, “Two charge states of the C<sub>N</sub> acceptor in GaN: Evidence from photoluminescence”, *Phys. Rev. B.* 98 12 (2018), DOI 10.1103/PhysRevB.98.125207
- A. Fariza, A. Lesnik, S. Neugebauer, M. Wieneke, J. Hennig, J. Bläsing, H. Witte, A. Dadgar, and A. Strittmatter, “Leakage currents and Fermi-level shifts in GaN layers upon iron and carbon-doping”, *J. of Appl. Phys.* 122, 025704 (2017), DOI 10.1063/1.4993180
- V. Holý, D. Kriegner, A. Lesnik, J. Bläsing, M. Wieneke, A. Dadgar, and P. Harcuba, “Observation of individual stacking faults in GaN microcrystals by x-ray nanodiffraction”, *Appl. Phys. Lett.* 110, 121905 (2017), DOI 10.1063/1.4978870
- D. Kriegner, P. Harcuba, J. Veselý, A. Lesnik, G. Bauer, G. Springholz, and V. Holý, “Twin domain imaging in topological insulator Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> and Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> epitaxial thin films by scanning x-ray nano-beam microscopy and electron backscatter diffraction”, *J. of Appl. Cryst.* 50, 369-377 (2017), DOI 10.1107/S1600576717000565
- A. Lesnik, M. P. Hoffmann, A. Fariza, J. Bläsing, H. Witte, P. Veit, F. Hörich, C. Berger, J. Hennig, A. Dadgar, and A. Strittmatter, “Properties of C-doped GaN”, *Phys. Status Solidi B*, 1521 (2016), DOI 10.1002/pssb.201600708
- C. Berger, A. Lesnik, T. Zettler, G. Schmidt, P. Veit, A. Dadgar, J. Bläsing, J. Christen and A. Strittmatter, “Metalorganic chemical vapor phase epitaxy of narrow-band distributed Bragg reflectors realized by GaN:Ge modulation doping”, *Journal of Crystal Growth* 440, 6-12 (2016), DOI 10.1016/j.jcrysro.2016.01.027

- A. Fariza, A. Lesnik, J. Bläsing, M. P. Hoffmann, F. Hörich, P. Veit, H. Witte, A. Dadgar, and A. Strittmatter, “On reduction of current leakage in GaN by carbon-doping”, *Appl. Phys. Lett.* 109, 212102 (2016), DOI 10.1063/1.4968823
- C. Berger, A. Dadgar, J. Bläsing, A. Lesnik, P. Veit, G. Schmidt, T. Hempel, J. Christen, A. Krost and A. Strittmatter, “Growth of AlInN/GaN distributed Bragg reflectors with improved interface quality”, *Journal of Crystal Growth* 414, 105-109 (2015), DOI 10.1016/j.jcrysgro.2014.09.008
- J. Hennig, A. Dadgar, H. Witte, J. Bläsing, A. Lesnik, A. Strittmatter, and A. Krost, “Enhanced sheet carrier densities in polarization controlled AlInN/AlN/GaN/InGaN field-effect transistor on Si (111)”, *AIP Advances* 5, 077146 (2015), DOI 10.1063/1.4927402
- A. Lesnik, J. Bläsing, J. Hennig, A. Dadgar, and A. Krost, “Characterization of AlInN/AlN/GaN FET structures using x-ray diffraction, x-ray reflectometry and grazing incidence x-ray fluorescence analysis”, *Journal of Physics D: Applied Physics* 47 35 (2014), DOI 10.1088/0022-3727/47/35/355106

# 9 Ehrenerklärung

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

Ich habe insbesondere nicht wissentlich:

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

Mir ist bekannt, dass Verstöße gegen das Urheberrecht Unterlassungs- und Schadensersatzansprüche des Urhebers sowie eine strafrechtliche Ahndung durch die Strafverfolgungsbehörden begründen kann.

Ich erkläre mich damit einverstanden, dass die Arbeit ggf. mit Mitteln der elektronischen Datenverarbeitung auf Plagiate überprüft werden kann.

Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form als Dissertation eingereicht und ist als Ganzes auch noch nicht veröffentlicht.

Sicke, 13.08.2024

-----

Ort, Datum

-----

Dipl.-Phys. Andreas Lesnik