

Kritische Punkte und Phononen in $B_xGa_{1-x}As$ und GaN_yAs_{1-y} : ein Vergleich

(HL 38.33)

G. Leibiger^{1*}, V. Gottschalch¹
V. Riede², M. Schubert²



¹Universität Leipzig, Fakultät für Chemie und Mineralogie, AK Halbleiterchemie, Linnéstr. 3, 04103 Leipzig

²Universität Leipzig, Fakultät für Physik und Geowissenschaften, AG Festkörperoptik, Linnéstr. 5, 04103 Leipzig

*E-mail: pge97jrk@studserv.uni-leipzig.de

DPG Frühjahrstagung,
Regensburg, 11.03.02 - 15.03.02

Motivation

- GaN_yAs_{1-y} und $B_xGa_{1-x}As$ als neue Materialien für 1.3/1.55 μm Emitter und Tandem-Solarzellen
- Einfluss von B und N als kleinste Elemente der III. bzw. V. Hauptgruppe auf das GaAs-Wirtsgitter
- wichtige Erkenntnisse über Einfluss der chemischen Bindung auf die elektronische Bandstruktur von Verbindungshalbleitern bzw. isovalent dotierten Halbleitern

Proben/Züchtung

MOVPE

- $B_xGa_{1-x}As$ bzw. GaN_yAs_{1-y} , $d = 300 - 500$ nm
- GaAs Puffer, $d = 200$ nm
- (001) GaAs Substrat
- (metallorganische Gasphasen-Epitaxie)
- $P_{tot} = 50$ mbar, $f_{rot} = 7$ l/min
- GaN_yAs_{1-y} : T = 525 °C, TBAs, DMHy, TMGa
- $B_xGa_{1-x}As$: T = 550-600 °C, Arsin, TEB, TMGa
- *siehe auch Poster „HL 38.31“*

Experimentelle Technik

- **Ellipsometrie:** Variable Angle of Incidence Spectroscopic Ellipsometer; Einfallswinkel $\phi_i = 75^\circ$; Messbereich 0.0124 eV $\leq E \leq 8$ eV (100 nm $\geq \lambda \geq 155$ nm)
- **Raman:** Dilor XY 800 mit Dreifach-Monochromator und N_2 -gekühltem CCD-Detektor, $\lambda_{ex} = 514.5$ nm, $P_{ex} = 50$ mW

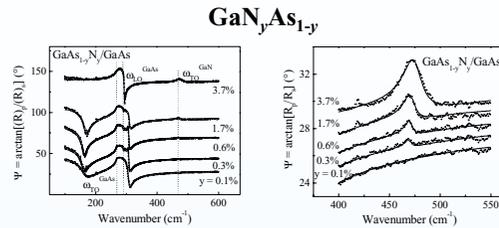
Ionizität der Bindungen

	Elektronegativität		Tetraederadius	
	B	C	N	P
	2.01 (2s ² 2p)	0.853A	3.07 (2s ² 2p)	0.719A
	Al	Si		P
	Ga	Ge	As	2.20 (4s ² 4p)
	In	Sn	Sb	1.225A (4s ² 4p)

- Phillips/Van Vechten-Modell: $E_b^2 = E_n^2 + C^2$ (C ist ionarer, E_n homopolarer Bindungsanteil)
 - Ionizität einer Bindung: $f_i = C^2/E_b^2$
 - mit $C(A_{III}B_V) \approx [(Z_A/r_A) - (Z_B/r_B)]e^{kR}$ ($r_{A,B}$: Tetraederadien)
- | Bas | GaAs | GaN |
|---------------|---------------|---------------|
| $f_i = 0.002$ | $f_i = 0.310$ | $f_i = 0.500$ |

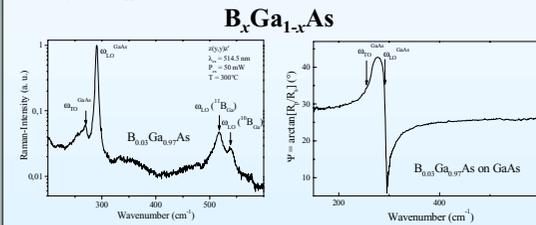
z.B. in: J. A. Van Vechten, Phys. Rev. 187, 1007 (1969).
J. C. Phillips, Bonds and Bands in Semiconductors, Academic Press, New York 1973.

Ga- und BA-s-artige Phononen

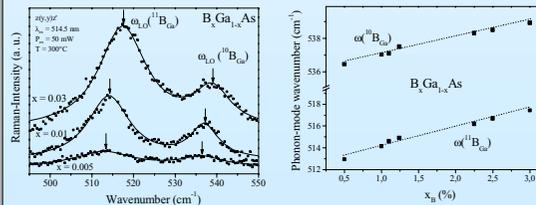


[$R_{p,s}$...Reflektivität für parallel (p) bzw. senkrecht (s) zur Einfallsebene polarisiertes Licht]

- Zweimoden-Phonon-Verhalten in GaN_yAs_{1-y} : GaAs-artiges Phonon ($\omega_{LO}^{GaAs} \approx 268$ cm⁻¹) und GaN-artiges Phonon ($\omega_{LO}^{GaN} \approx 470-474$ cm⁻¹) [*]
- GaN-Phonon ist IR- und Raman-aktiv
- Oszillatorstärke des GaN-artigen Phonons steigt linear mit der Stickstoffkonzentration [*]

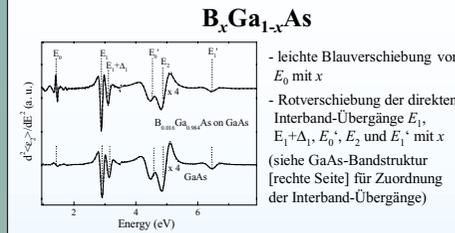


- $B_xGa_{1-x}As$ zeigt ebenfalls Zweimoden-Phonon-Verhalten: GaAs-Phonon und BA-s-Phonon mit $\omega_{LO}^{(11)B} = 513-518$ cm⁻¹ und $\omega_{LO}^{(10)B} = 537-539$ cm⁻¹ (Bor hat zwei natürliche Isotope: ¹¹B mit 80%, ¹⁰B mit 20% Häufigkeit)
- BA-s-Phonon ist *nicht* mittels IR-Ellipsometrie oder IR-Transmission anzuregen

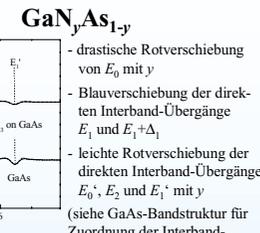
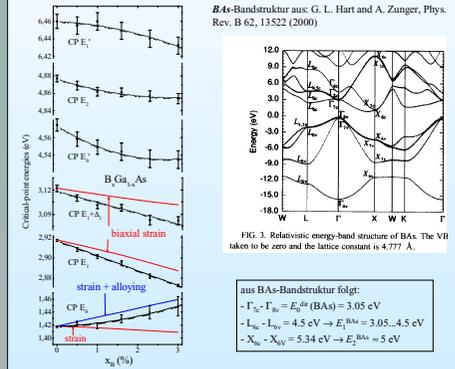


- berechnete lokale Moden von B in GaAs (modifizierte lineare Kette): $\omega_{LO}^{(10)B_{Ga}} = 545.8$ cm⁻¹, $\omega_{LO}^{(11)B_{Ga}} = 522.5$ cm⁻¹
- Häufigkeit der Isotope spiegelt sich im Amplitudenverhältnis wieder
- die Frequenzen beider BA-s-LO Phononmoden steigen linear mit der Borkonzentration an
- mögliche Erklärung: Summe aus „alloying“ [ω_{LO} von BA-s (polycr.) = 714 cm⁻¹] und biaxialer, tensiler Verspannung [Rotverschiebung von Phononmoden, Quantifizierung nicht möglich wegen fehlender Deformationspotentiale von BA-s]
- alloying: lineare Interpolation zwischen entsprechenden Werten der binären Endkomponenten (BA-s und GaAs bzw. GaN und GaAs)

Bandstruktur von $B_xGa_{1-x}As$ und GaN_yAs_{1-y}



- leichte Blauverschiebung von E_0 mit x
- Rotverschiebung der direkten Interband-Übergänge E_{11} , $E_{11}+\Delta_{11}$, E_0' , E_2 und E_1' mit x (siehe GaAs-Bandstruktur [rechte Seite] für Zuordnung der Interband-Übergänge)



- drastische Rotverschiebung von E_0 mit y
- Blauverschiebung der direkten Interband-Übergänge E_{11} und $E_{11}+\Delta_{11}$
- leichte Rotverschiebung der direkten Interband-Übergänge E_0' , E_2 und E_1' mit y (siehe GaAs-Bandstruktur für Zuordnung der Interband-Übergänge)

- leichte Blauverschiebung der Bandlücke von $B_xGa_{1-x}As$ mit x kann auf kombinierten Einfluss von tensiler Verspannung und „alloying“ (blaue Linie in obiger Abb.) zurückgeführt werden
- für alle weiteren direkten Interbandübergänge ist der Beitrag der „alloying“ sehr klein (z. B.: $E_2^{BA-s} \approx E_2^{GaAs} \approx 5$ eV)
- \rightarrow Einfluss von tensiler Verspannung entscheidend, was die Rotverschiebung von E_{11} , $E_{11}+\Delta_{11}$, E_2 und E_1' mit x erklärt

- dramatische Rotverschiebung von E_0 mit y als Folge von Lokalisierung der e-WF (\rightarrow band mixing \rightarrow level repulsion) [**]
- Blauverschiebung der E_1 (und $E_{11}+\Delta_{11}$)-Übergangsenergie als Folge von tensiler Verspannung und „alloying“ [***]
- für kritische Punkte E_0' , E_2 und E_1' sind keine Deformationspotentiale von GaAs bzw. keine gesicherten Übergangsenergien in β -GaN bekannt \rightarrow Einflüsse von Verspannung und alloying nicht berechenbar

Zusammenfassung

$B_xGa_{1-x}As$	GaN_yAs_{1-y}
- B auf Gruppe III-Gitterplatz	- N auf Gruppe V-Gitterplatz
- $a_0^{BAs} = 4.777$ Å $\rightarrow \Delta a/a = 16\%$	- $a_0^{GaN} = 4.52$ Å $\rightarrow \Delta a/a \approx 20\%$
- Ionizität: $f_i^{BAs} = 0.002$	- $f_i^{GaN} = 0.500$
\rightarrow BA-s-Phonon nur mittels Raman-Spektroskopie nachweisbar	\rightarrow GaN-artige Phonon-Mode ir-aktiv
- B-Störpotential nur durch lokale Spannungsfelder bestimmt	- starkes, kurzreichweitiges N-Störpotential
\rightarrow entschieden schwächer als N-Störpotential	\rightarrow lokalisierte Zustände in der Bandlücke für N-Konzentrationen im Dotierbereich ($y \sim 10^{18}$ cm ⁻³)
\rightarrow alle (nachgewiesenen) kritischen Punkte der Bandstruktur werden durch biaxiale Verspannung und „alloying“ beeinflusst	\rightarrow für höhere Konz.: Lokalisierung im Ortsraum \rightarrow Wechselwirkung zwischen Wellenfunktionen verschiedener k-Anteile
$\rightarrow B_xGa_{1-x}As$ verhält sich wie „normaler Mischkristall“	\rightarrow drastische Rotverschiebung von E_0 mit y
	$\rightarrow GaN_yAs_{1-y}$ verhält sich <i>nicht</i> wie „normaler Mischkristall“