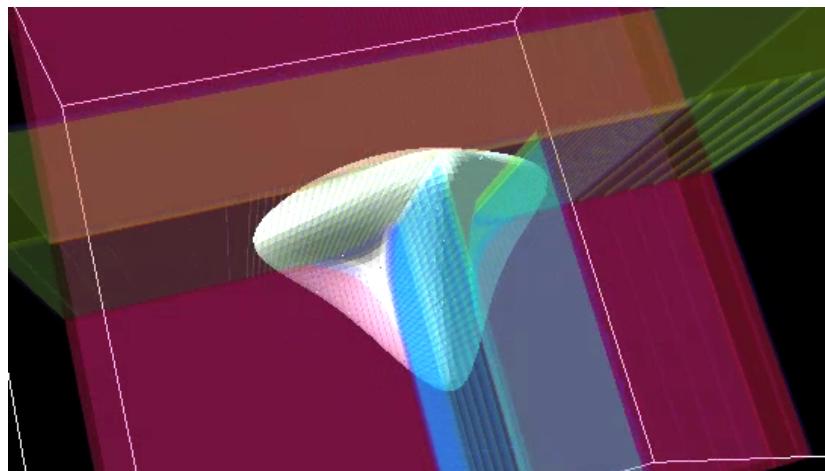




---

# Optimierung und optische Eigenschaften von Quantenstrukturen hergestellt durch Überwachsen von Spaltflächen

---



**Dissertation**  
zur Erlangung des Doktorgrades  
der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)  
der Naturwissenschaftlichen Fakultät II – Physik  
der Universität Regensburg  
vorgelegt von  
**Jörg Ehehalt**  
aus Schriesheim  
im Jahr 2009

Promotionsgesuch eingereicht am 18. Januar 2008.

Die Arbeit wurde angeleitet von Prof. Dr. Werner Wegscheider.

Prüfungsausschuss:

Vorsitzender: Prof. Dr. J. Fabian

1. Gutachter: Prof. Dr. W. Wegscheider

2. Gutachter: Prof. Dr. S. Ganichev

weiterer Prüfer: Prof. Dr. Ch. Strunk

*Meiner lieben Hella  
für alles, was war, was ist und was noch kommt*



# Inhaltsverzeichnis

|   |           |
|---|-----------|
| <b>1 Einleitung</b>   | <b>1</b>  |
| <b>2 Grundlagen</b>   | <b>4</b>  |
| 2.1 Der Halbleiter Galliumarsenid . . . . .                       | 4         |
| 2.2 Niederdimensionale Strukturen . . . . .                       | 8         |
| 2.3 Überwachsen von Spaltflächen . . . . .                        | 14        |
| 2.4 Mehrteilcheneffekte . . . . .                                 | 16        |
| 2.5 Optische Übergänge . . . . .                                  | 19        |
| 2.6 Verspannte Halbleiterstrukturen . . . . .                     | 29        |
| 2.7 Einschlußenergie . . . . .                                    | 34        |
| 2.8 Quantendrahtlaser . . . . .                                   | 37        |
| <b>3 Simulationsverfahren</b>                                     | <b>43</b> |
| 3.1 Berechnung der Bandstruktur . . . . .                         | 43        |
| 3.2 Die Simulationssoftware nextnano3 . . . . .                   | 50        |
| 3.3 Simulationsparameter . . . . .                                | 53        |
| 3.4 Optimierung der Einschlußenergie . . . . .                    | 55        |
| 3.5 Erweiterungen der Simulationssoftware . . . . .               | 57        |
| <b>4 Probenherstellung</b>  | <b>60</b> |
| 4.1 Molekularstrahlepitaxie . . . . .                             | 60        |
| 4.2 Die Regensburger MBE-Anlage . . . . .                         | 63        |
| 4.3 Wachstum von indiumhaltigen Schichten . . . . .               | 68        |
| 4.4 Grenzflächen in Heterostrukturen . . . . .                    | 71        |
| 4.5 Technische Details zum Überwachsen von Spaltflächen . . . . . | 74        |
| 4.6 Annealing . . . . .   | 80        |
| <b>5 Charakterisierungsverfahren</b>                              | <b>84</b> |
| 5.1 Mikrophotolumineszenzspektroskopie . . . . .                  | 84        |
| 5.2 Erweiterung des Aufbaus für seitliche Anregung . . . . .      | 91        |
| 5.3 Erweiterung des Aufbaus für Anregungsspektroskopie . . . . .  | 93        |
| <b>6 Simulationen</b>   | <b>96</b> |
| 6.1 Frühere Rechnungen . . . . .                                  | 96        |
| 6.2 Strukturgeometrien . . . . .                                  | 97        |
| 6.3 Quantenfilme . . . . .  | 99        |

|   |            |
|---|------------|
| 6.4 Quantendrähte . . . . .                                 | 100        |
| 6.5 Quantenpunkte . . . . .                                 | 119        |
| 6.6 Zusammenfassung . . . . .                               | 122        |
| <b>7 Optimierung des Wachstums von Quantenfilmen</b>        | <b>124</b> |
| 7.1 Eigenschaften von dicken GaAs-Schichten . . . . .       | 126        |
| 7.2 Übergangsenergien . . . . .                             | 127        |
| 7.3 Linienbreiten . . . . .                                 | 134        |
| 7.4 Indiumhaltige Schichten . . . . .                       | 146        |
| 7.5 Annealing . . . . .                                     | 151        |
| 7.6 Weitere Messungen an Quantenfilmen . . . . .            | 153        |
| 7.7 Zusammenfassung . . . . .                               | 158        |
| <b>8 Messungen an Quantendraht- und Quantenpunkt-Proben</b> | <b>160</b> |
| 8.1 Symmetrische Quantendrahte . . . . .                    | 160        |
| 8.2 Asymmetrische Quantendrahte . . . . .                   | 164        |
| 8.3 Verspannte T-förmige Quantendrahte . . . . .            | 166        |
| 8.4 Quantenpunkte . . . . .                                 | 170        |
| 8.5 Zusammenfassung . . . . .                               | 179        |
| <b>9 Optisch gepumpte Quantendrahlaser</b>                  | <b>180</b> |
| 9.1 Quantendrahlaser-Proben . . . . .                       | 180        |
| 9.2 Lasertätigkeit . . . . .                                | 184        |
| 9.3 Variation der Anregungsparameter . . . . .              | 189        |
| 9.4 Temperaturabhängigkeit . . . . .                        | 191        |
| 9.5 Zusammenfassung . . . . .                               | 195        |
| <b>10 Zusammenfassung</b>                                   | <b>196</b> |
| <b>11 Ausblick</b>  | <b>199</b> |
| <b>Abkürzungsverzeichnis</b>                                | <b>201</b> |
| <b>Literaturverzeichnis</b>                                 | <b>202</b> |
| <b>Danksagung</b>   | <b>213</b> |

# Kapitel 1

## Einleitung

Kaum ein Forschungsgebiet hat in den letzten Jahren soviel Aufmerksamkeit erfahren wie die Nanotechnologie, die weltweit als Schlüsseltechnologie des beginnenden 21. Jahrhunderts gesehen wird. Getrieben durch die unaufhaltsam fortschreitende Miniaturisierung dringt die Halbleiterelektronik in Größenordnungen vor, in denen die Eigenschaften der Bauelemente zunehmend durch Quantenphänomene bestimmt sind. Bei Ladungen von nur wenigen Elektronen sowie Strukturgrößen von einigen Atomlagen stößt die herkömmliche Mikroelektronik an ihre Grenzen. Es zeichnet sich ab, daß der MOSFET, das bisherige Arbeitspferd der Halbleiterindustrie, bald durch quantenmechanische Schalt- und Speicherelemente ersetzt werden muß, die auf niederdimensionalen Strukturen basieren. Prototypen von Einzelelektronentransistoren [Kas92] und das auf der Rasterkraftmikroskopie basierende Speicherkonzept „Millipede“ [Vet02] sind vielversprechende Ansätze in diese Richtung. Auf die Spintronik [Wol01], die neben der elektrischen Ladung auch das magnetische Moment der Elektronen ausnutzt, wird in diesem Zusammenhang ebenfalls große Hoffnung gesetzt.

Auch im Bereich der Photonik werden Nanostrukturen intensiv erforscht. Sie versprechen einerseits eine leichtere Integrierbarkeit mit anderen Bauelementen der Mikroelektronik und andererseits durch die verminderte Dimensionalität der Strukturen eine erhöhte Effizienz von Halbleiterlasern, Photodetektoren und anderen optoelektronischen Bauteilen. Darüber hinaus eröffnen sie neuartige Anwendungen als Einzelphotonenquellen und -detektoren im Bereich der Quantenkryptographie [Gis02].

Ein Fernziel der heutigen Grundlagenforschung in der Halbleiterphysik ist schließlich die Quanteninformationsverarbeitung [Ben00], die quantenmechanische Prinzipien wie Superposition und Verschränkung ausnutzt, um neuartige Algorithmen zu implementieren. Seit Mitte der 90er Jahre die theoretischen Grundlagen hierfür gelegt wurden, wird fieberhaft nach Realisierungsmöglichkeiten für sogenannte Qubits geforscht. Diese quantenmechanischen Zwei-Niveau-Systeme stellen die kleinsten Speichereinhei-

ten in einem Quantencomputer dar. Lange Kohärenzzeiten und effektive Schreib- und Lesezugriffe sind hier entscheidende Voraussetzungen. Quantenpunkte in Festkörpern gelten dabei als besonders aussichtsreiche Kandidaten.

Nachdem sich die Forschung in der Halbleiterphysik in den vergangenen Jahrzehnten vor allem auf die grundlegenden Eigenschaften von Quantenstrukturen konzentriert hat, richtet sich der Fokus jetzt also verstärkt auf konkrete Anwendungen. Dennoch ist es zu deren Realisierung oft noch ein weiter Weg und somit weiterhin intensive Grundlagenforschung erforderlich. Insbesondere die Herstellung qualitativ hochwertiger ein- und nulldimensionaler Quantenstrukturen stellt nach wie vor eine Herausforderung dar. Zur Erforschung von praktischen Anwendungsmöglichkeiten sind hier Herstellungsverfahren nötig, mit denen sich die Quantenstrukturen nicht nur isoliert untersuchen, sondern auch gut in andere Strukturen einbetten oder mit diesen koppeln lassen.

Das sogenannte Überwachsen von Spaltflächen [Cha85, Pfe90, Gon92] ist ein Verfahren, um Quantendrähte und -punkte durch Molekularstrahlepitaxie in hoher Qualität herzustellen. Der Ladungsträgereinschluß entsteht hier durch die Energieabsenkung an einer T-förmigen Kreuzung von zwei bzw. drei Quantenfilmen als Folge der Ausbreitung der Wellenfunktionen in ein größeres Volumen. Auf diese Weise bildet sich ein Einschlußpotential sowohl für Elektronen als auch für Löcher, so daß optische Übergänge möglich sind. Dieses Verfahren zeichnet sich durch eine präzise Kontrolle der Probengeometrie und Materialzusammensetzung aus. Daher sind diese Systeme besonders geeignet für die Untersuchung der spezifischen Eigenschaften von niederdimensionalen Strukturen und unter anderem vielversprechende Kandidaten für die Quanteninformationsverarbeitung und Versuche mit verschränkten Photonen. Auch für die Realisierung von Quantendrahtlasern [Weg93] wurde dieses Verfahren erfolgreich angewandt.

Eine wichtige Kenngröße dieser Strukturen ist die Einschlußenergie, also die Energie, die den Ladungsträgern zugeführt werden muß, damit sie die Struktur verlassen können. Eine hohe Einschlußenergie ist für viele praktische Anwendungen erforderlich, wie beispielsweise für erhöhte Speicherzeiten von Ladungsträgern, zum Anlegen von elektrischen Feldern ohne Verlust des Ladungsträgereinschlusses, zur Untersuchung angeregter Zustände und insbesondere für die Realisierung von elektronischen und photoni schen Bauelementen bei Zimmertemperatur. Die beim Überwachsen von Spaltflächen bisher erreichten Einschlußenergien von Quantendrähten und besonders Quantenpunkten waren jedoch für viele dieser Anwendungen zu gering. Seit der ersten Realisierung des Verfahrens Anfang der 90er Jahre wurden verschiedene Konzepte zur Erhöhung der Einschlußenergie vorgeschlagen und untersucht [Som96, Gis96, Aki98, Sch04a].

In der vorliegenden Arbeit wird zum einen systematisch untersucht, wie sich durch eine Kombination dieser Verfahren die Einschlußenergie der Strukturen optimieren läßt.

Dabei werden zuerst numerische Simulationen zur Optimierung der Probenstrukturen durchgeführt und anschließend einige dieser Strukturen hergestellt und charakterisiert. Zum anderen werden die einzelnen Prozeßschritte des Wachstums optimiert. Dies hat sich als notwendig erwiesen, da es sich beim Überwachsen von Spaltflächen um ein vergleichsweise komplexes Verfahren handelt, bei dem der Einfluß von vielen Wachstumsparametern noch nicht ausreichend geklärt ist. Besonderes Augenmerk wird hierbei auf die Minimierung der Grenzflächenrauigkeiten der gewachsenen Schichten gerichtet. Die gewonnenen Ergebnisse wurden dazu verwendet, um in der Regensburger Molekularstrahlepitaxie-Anlage erstmals Quantenpunkte und verspannte Quantendrähte erfolgreich herzustellen. Darüber hinaus wurden die verwendeten theoretischen und experimentellen Verfahren verbessert und erweitert. Als konkrete Anwendung des Überwachsens von Spaltflächen wird die Realisierung von Quantendrahlaser-Strukturen vorgestellt.

In Kapitel 2 werden zunächst die grundlegenden Eigenschaften von niederdimensionalen Strukturen, des Überwachsens von Spaltflächen und der verwendeten Charakterisierungsverfahren beschrieben.

In den folgenden drei Kapiteln werden die eingesetzten Verfahren und Techniken sowie die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Verbesserungen und Erweiterungen genauer vorgestellt. Kapitel 3 wendet sich dabei den theoretischen Simulationen zu, Kapitel 4 beschreibt das Wachstumsverfahren und Kapitel 5 stellt die Charakterisierung der Proben durch Mikrophotolumineszenzspektroskopie vor.

Die wissenschaftlichen Ergebnisse dieser Arbeit finden sich vor allem in den Kapiteln 6 bis 9. In Kapitel 6 werden die Ergebnisse der theoretischen Simulationen präsentiert. Die notwendigen Optimierungen des Wachstums von Quantenfilmen werden ausführlich in Kapitel 7 vorgestellt. In Kapitel 8 finden sich experimentelle Realisierungen und Charakterisierungen von verschiedenen Quantendrähten und Quantenpunkten. In Kapitel 9 wird schließlich als konkrete Anwendung die Realisierung von optisch gepumpten Quantendrahlasern beschrieben und deren Eigenschaften untersucht.

Den Abschluß bilden eine Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse und Schlußfolgerungen dieser Arbeit sowie ein Ausblick auf mögliche weiterführende Arbeiten.

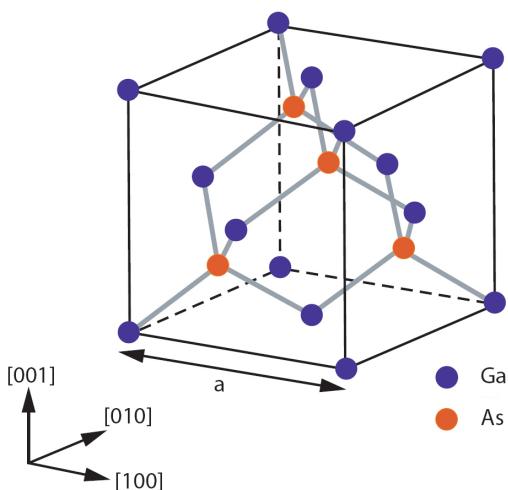
# Kapitel 2

## Grundlagen

In diesem Kapitel werden die grundlegenden Eigenschaften von niederdimensionalen Halbleiterstrukturen beschrieben. Dabei werden die unterschiedlichen Typen, Materialien und Herstellungsverfahren vorgestellt und die im Vergleich zum Volumenkristall besonderen optischen und elektrischen Eigenschaften hervorgehoben. Die allgemeinen Grundlagen der Halbleiterphysik werden als bekannt vorausgesetzt und lassen sich gegebenenfalls in [Kit99] oder [Yu96] nachschlagen. Eine allgemeine Einführung in die Physik von niederdimensionalen Strukturen findet sich darüber hinaus in [Dav98]. Die theoretische quantenmechanische Beschreibung dieser Strukturen ist sehr ausführlich in [Bas96] dargelegt.

### 2.1 Der Halbleiter Galliumarsenid

Die in dieser Arbeit untersuchten Strukturen basieren auf dem III/V-Verbindungshalbleiter Galliumarsenid (GaAs), dem nach Silizium technologisch wichtigsten Halbleiter.



**Bild 2.1:** Die Kristallstruktur von Galliumarsenid. Die Arsenatome sind relativ zu den Galliumatomen entlang der [111]-Richtung um eine viertel Raumdiagonale der Einheitszelle versetzt. (nach U. Niedermeier)

GaAs kristallisiert in der Zinkblendestruktur, die aus einem kubisch flächenzentrierten Gitter und einer zweiatomigen Basis besteht (Bild 2.1). Die Bindung erfolgt dabei primär über  $sp^3$ -Hybridorbitale. Die Herstellung von GaAs-Einkristallen erfolgt durch Kristallzüchtung aus elementarem Gallium und Arsen. Dünne Schichten von GaAs und verwandten Materialien können durch verschiedene Epitaxieverfahren (siehe Kapitel 4) in hoher Qualität auf ein Substrat aufgewachsen<sup>1</sup> werden.

Breite Anwendung erfährt GaAs in der Hochfrequenz- und Optoelektronik. Elektronische Bauelemente aus GaAs schalten aufgrund der hohen Elektronenbeweglichkeit wesentlich schneller als solche aus Silizium und erzeugen ein geringeres Eigenrauschen. Die höhere Durchbruchsspannung bei GaAs erlaubt es, Bauteile bei höheren Spannungen und damit höheren Leistungen zu betreiben. Aufgrund dieser Eigenschaften ist GaAs ein wichtiger Grundstoff für die Hochfrequenz- und Mikrowellentechnik. Darüber hinaus ermöglicht GaAs aufgrund der direkten Bandlücke die effiziente Emission und Absorption von Licht. Daher ist GaAs der bei weitem am häufigsten eingesetzte Halbleiter für Photodetektoren, Leuchtdioden und Halbleiterlaser.

Zu den praktischen Nachteilen von GaAs gegenüber Silizium zählen der hohe Preis und die Giftigkeit aufgrund des Arsens. Wegen der relativ niedrigen Beweglichkeit der Löcher läßt sich die weit verbreitete CMOS-Schaltungstechnik nicht effizient mit GaAs realisieren. Außerdem existiert im Materialsystem GaAs kein guter Isolator, der eine ähnliche Funktion wie Siliziumdioxid bei Silizium übernehmen könnte.

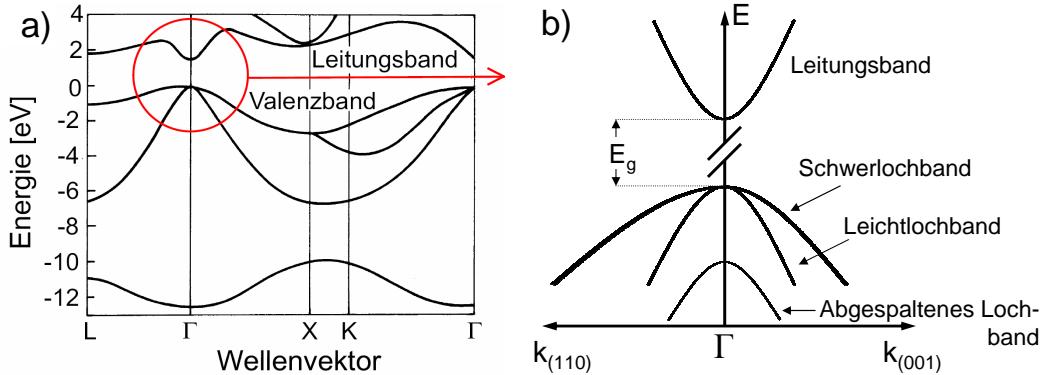
Die Kristallstruktur von GaAs bewirkt unter anderem, daß der Kristall unter geeigneten Umständen entlang der unpolaren [110]-Ebenen über makroskopische Distanzen atomar glatt gespalten werden kann. Dieser Aspekt ist für die in dieser Arbeit untersuchten Strukturen von entscheidender Bedeutung.

## Bandstruktur

Die Bandstruktur eines GaAs-Kristalls ist in Bild 2.2 dargestellt. Am  $\Gamma$ -Punkt, dem Zentrum der Brillouinzone, besitzt GaAs eine direkte Bandlücke, also ein Minimum im Leitungsband und ein Maximum im Valenzband. Dies bewirkt, daß die optischen Eigenschaften im thermodynamischen Gleichgewicht hauptsächlich von Ladungsträgern am  $\Gamma$ -Punkt bestimmt werden. Der Verlauf der Bänder in der Nähe des Zentrums der Brillouinzone ist daher besonders wichtig.

Die Elektronenzustände sind s-artig, das heißt, die Blochfunktion hat die gleiche

<sup>1</sup>Dem grammatisch sensiblen Leser wird an dieser Stelle auffallen, daß das Verb „wachsen“ im Deutschen eigentlich intransitiv ist. Mangels besserer Alternative wird es dennoch in dieser Arbeit transitiv verwendet, um zum Ausdruck zu bringen, daß etwas durch epitaktisches Wachstum auf ein Substrat aufgebracht wird.



**Bild 2.2:** (a) Bandstruktur von Galliumarsenid (b) Verlauf der Bänder am  $\Gamma$ -Punkt unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung (aus [Sch05])

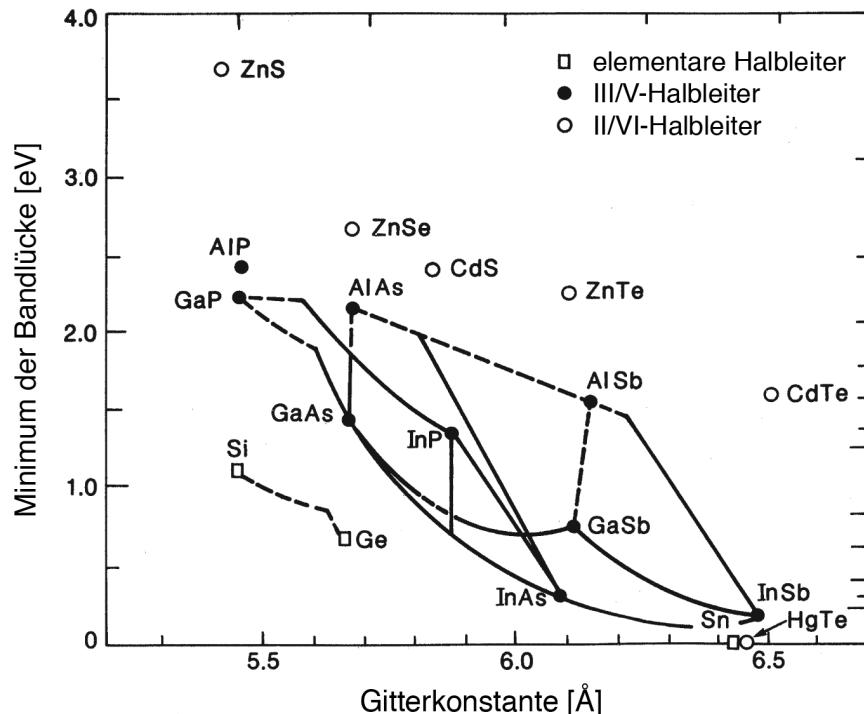
Symmetrie wie die s-Schale eines Wasserstoffatoms (Bahndrehimpuls  $L = 0$ ). Der Verlauf des Leitungsbands in der Nähe des  $\Gamma$ -Punkts im  $\vec{k}$ -Raum ist in guter Näherung isotrop und lässt sich im Rahmen der Effektiven-Masse-Theorie als Parabel darstellen. Das Leitungsband ist zweifach spinentartet (Gesamtdrehimpuls  $J = \frac{1}{2}$ ,  $m_j = \pm \frac{1}{2}$ ).

Die Lochzustände hingegen sind hauptsächlich p-artig ( $L = 1$ ), was zu einer deutlich komplizierteren Bandstruktur mit drei unterschiedlichen Valenzbändern führt (Bild 2.2b). Die ersten beiden (mit  $J = \frac{3}{2}$ ) sind am  $\Gamma$ -Punkt entartet und werden Schwerloch- (engl.: *heavy hole*, Abk.: HH) und Leichtlochband (engl.: *light hole*, Abk.: LH) genannt. Diese Bezeichnungen weisen auf die unterschiedlichen effektiven Massen der jeweiligen Löcher und damit auf die Krümmungen der Parabel im  $\vec{k}$ -Raum hin. Dabei entspricht eine flachere Parabel einer größeren effektiven Masse. Das dritte Lochband (mit  $J = \frac{1}{2}$ ) ist durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung zu kleineren Energien hin verschoben und wird als abgespaltenes Lochband bezeichnet (engl.: *split-off hole*, Abk.: SO). Alle drei Valenzbänder sind jeweils zweifach spinentartet (mit  $m_j = \pm \frac{3}{2}$  für schwere Löcher und  $m_j = \pm \frac{1}{2}$  für leichte und abgespaltene Löcher). Die Krümmung der Valenzbänder im  $\vec{k}$ -Raum und damit auch die effektive Lochmasse ist deutlich anisotrop. Für eine genaue theoretische Beschreibung muß daher statt einer skalaren effektiven Masse ein effektiver Massetensor verwendet werden.

## Heterostrukturen

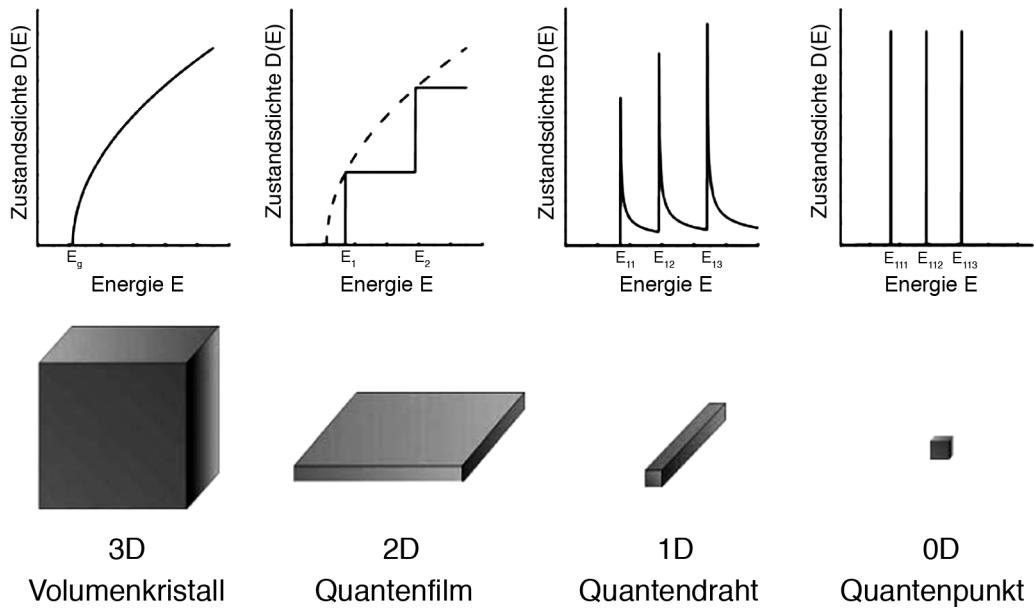
Ein Grund für die große praktische Bedeutung von GaAs besteht darin, daß es sich gut mit anderen III/V-Halbleitern zu Heterostrukturen verbinden läßt. Verbindungs-halbleiter werden nach der Anzahl ihrer Bestandteile in binäre, ternäre und quaternäre Halbleiter unterteilt. GaAs ist somit ein binärer Halbleiter. Ein ternärer Halbleiter stellt

eine Legierung aus zwei binären Halbleitern dar. Ersetzt man beispielsweise 30% der Galliumatome in GaAs durch Aluminium, so erhält man  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ . Ein quaternärer Halbleiter wird analog dazu aus vier Elementen gebildet. Die meisten Eigenschaften von ternären und quaternären Halbleitern lassen sich gut durch lineare Interpolation zwischen den jeweiligen binären Bestandteilen ermitteln (siehe Kapitel 3.3).



**Bild 2.3:** Graphische Darstellung von Bandlücke und Gitterkonstante verschiedener Halbleiter. Auf den eingezeichneten Verbindungslien liegen ternäre Halbleiter, die Legierungen aus den Materialien der jeweiligen Endpunkte darstellen. Gestrichelte Linien kennzeichnen ternäre Halbleiter mit indirekter Bandlücke.

Zur Herstellung von qualitativ hochwertigen Proben ist es in der Regel notwendig, daß das Wachstum pseudomorph verläuft, die aufgewachsenen Schichten also die Gitterstruktur des Substrats annehmen (siehe Kapitel 2.6). Unterscheiden sich die Gitterkonstanten, so entstehen Verspannungen, deren Energie im weiteren Wachstum durch Versetzungen und Fehlstellen abgebaut wird. In Bild 2.3 sind Bandlücken und Gitterkonstanten von verschiedenen binären Halbleitern dargestellt. Die Gitterkonstanten von GaAs und Aluminiumarsenid (AlAs) unterscheiden sich um nur 0,14 %. Folglich läßt sich AlAs und damit auch Aluminiumgalliumarsenid (AlGaAs) praktisch ohne Verspannungen auf ein GaAs-Substrat aufwachsen. Durch das Legierungsverhältnis läßt sich beim Wachstum von AlGaAs-Schichten jede beliebige Bandlückenenergie zwischen den Bandlücken von GaAs und AlAs einstellen. Ferner kann man durch Dotierungen

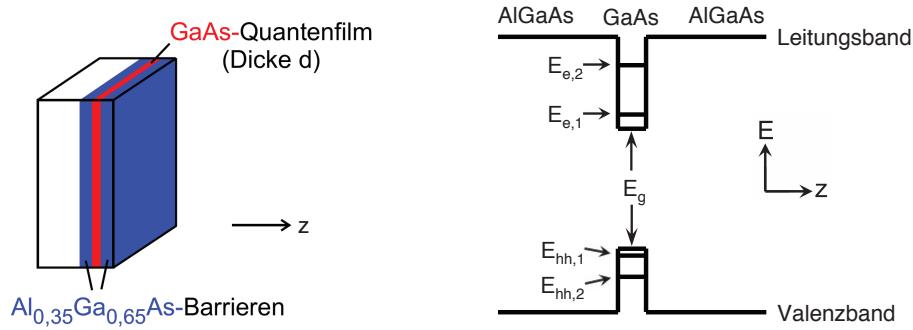


**Bild 2.4:** Vergleich der Zustandsdichten von Strukturen mit unterschiedlicher Dimensionalität. Die eingezeichneten Energien kennzeichnen den Beginn der jeweiligen Bänder bzw. Subbänder. Mit abnehmender Dimensionalität konzentrieren sich die besetzbaren Zustände zunehmend an diesen Punkten.

den Potentialverlauf beeinflussen und durch Wachstum von indiumhaltigen Schichten die Bandlücke noch weiter verkleinern und verspannte Schichten herstellen. Auf diese Weise lässt sich der Verlauf der Leitungs- und Valenzbandkante von Heterostrukturen sehr genau kontrollieren. Dieses Verfahren wird als *Bandgap engineering* bezeichnet [Cap87].

## 2.2 Niederdimensionale Strukturen

Durch Heterostrukturen lässt sich ein Potentialtopf realisieren, in dem die Bewegung von Elektronen und Löchern in bestimmten Richtungen eingeschränkt ist. Ist dessen Breite kleiner als die de-Broglie-Wellenlänge der Ladungsträger (ca. 30 nm), dann können sie sich in der betreffenden Richtung nicht mehr bewegen und nehmen stattdessen quantisierte Zustände ein. Ist die freie Bewegung der Ladungsträger dementsprechend auf weniger als drei Raumdimensionen beschränkt, spricht man von einer niederdimensionalen Struktur. Ein wichtiges Merkmal von niederdimensionalen Strukturen ist die Änderung der Zustandsdichte wie in Bild 2.4 dargestellt. Je niedriger die Dimensionalität der betrachteten Struktur ist, desto mehr konzentrieren sich die besetzbaren Zustände an den unteren Kanten der jeweiligen Subbänder. Dies hat entscheidenden Einfluss auf die Effizienz von optischen Übergängen, wie in Abschnitt 2.5



**Bild 2.5:** Schematische Darstellung einer Quantenfilm-Probe und deren Bandstruktur. Der Quantenfilm besteht aus einer dünnen GaAs-Schicht, die in eine  $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ -Barriere eingebettet ist. Senkrecht zur Quantenfilmebene nehmen die Ladungsträger aufgrund der Einschränkung der Bewegung quantisierte Zustände ein (nach [Neu08]).

genauer erläutert wird. Daher sind niederdimensionale Strukturen prädestiniert für Anwendungen in der Optoelektronik.

## Quantenfilme

Wird den Ladungsträgern ein Freiheitsgrad der Bewegung genommen, die Bewegung also auf zwei Dimensionen eingeschränkt, erhält man einen sogenannten Quantenfilm (engl.: *quantum well*, Abk.: QW)<sup>2</sup>. Bild 2.5 zeigt eine typische Quantenfilm-Struktur. Die Ladungsträger können sich in der Ebene des Quantenfilms frei bewegen und sind senkrecht dazu quantisiert. Entsprechend spaltet sich die Wellenfunktion für die Ladungsträger in zwei Anteile auf:

$$\Psi(x, y, z) = \chi(x, y) \psi_n(z) \quad (2.1)$$

Der erste Anteil entspricht der Bewegung eines freien Teilchens in der  $x$ - $y$ -Ebene. Der zweite Anteil beschreibt die quantisierten Zustände eines Teilchens in einem Kastenpotential [Dav98]. Für ein Elektron lässt sich die Schrödinger-Gleichung dann separieren in die zwei getrennten Differentialgleichungen

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \chi(x, y) = E(k_x, k_y) \chi(x, y) \quad (2.2)$$

und

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right) \varphi_n(z) = \varepsilon_n \varphi_n(z) \quad (2.3)$$

<sup>2</sup>Quantenfilme werden aufgrund ihres Bandkantenverlaufs oft auch als Quantentöpfe oder Quantentröge bezeichnet. In dieser Arbeit wird aus Gründen der begrifflichen Konsistenz in Bezug auf Quantendrähte und Quantenpunkte der Ausdruck Quantenfilm verwendet.

Gleichung (2.2) liefert Lösungen, die der freien Bewegung eines Elektrons senkrecht zu  $z$  entsprechen:

$$E(k_x, k_y) = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_e^*} \quad (2.4)$$

Für den idealisierten Fall eines Kastenpotentials mit unendlich hohen Wänden ergeben sich aus Gleichung (2.3) die Energien der quantisierten Eigenzustände zu

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_e^*d^2} n^2 \quad \text{für } n \in \mathbb{N}^+ \quad (2.5)$$

mit der Dicke des Quantenfilms  $d$  und der Quantenzahl  $n$ . Zustände in breiteren Quantenfilmen weisen also kleinere Energien auf. Die Gesamtenergie ergibt sich als Summe der einzelnen Anteile zu

$$E_n(k_x, k_y) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_e^*} \quad (2.6)$$

Die Zustände, die zu einem bestimmten diskreten Zustand in der quantisierten Richtung gehören, bilden ein kontinuierliches 2D-Subband. Trägt man die Energie über  $k_x$  und  $k_y$  auf, haben diese Subbänder die Form von Rotationsparaboloiden. Innerhalb eines Subbands ist die Zustandsdichte konstant, also unabhängig von der Energie. Dies führt zu der schon in Bild 2.4 dargestellten stufenförmigen Zustandsdichte.

Die Gleichungen 2.2 bis 2.6 gelten in gleicher Weise für Löcher, wenn man die entsprechende effektive Lochmasse einsetzt und das Vorzeichen der Energie umdreht. Aufgrund der unterschiedlichen effektiven Massen von schweren und leichten Löchern ergibt sich aus Gleichung (2.5), daß das leichte Lochband energetisch abgesenkt und so die Entartung der Valenzbänder am  $\Gamma$ -Punkt aufgehoben wird. Schwere Löcher haben also eine betragsmäßig kleinere Energie und dominieren daher die meisten Prozesse.

Für einen realen Potentialtopf mit endlich hohen Wänden  $V_0$  ist die Rechnung komplizierter und nicht mehr analytisch lösbar. Die Wellenfunktion  $\varphi_n(z)$  dringt in diesem Fall in die Barriere ein. Dabei ist zu berücksichtigen, daß die Ladungsträger im Potentialtopf und in der Barriere aufgrund der verschiedenen Materialien jeweils unterschiedliche effektive Massen haben. Innerhalb des Potentialtopfes, dessen Mitte hier bei  $z = 0$  liegt, haben die Wellenfunktionen für Elektronen einen sinusförmigen Verlauf:

$$\begin{aligned} \varphi_{n,Topf}(z) &= A \cos(k_1 z) && (\text{n gerade}) \\ \varphi_{n,Topf}(z) &= A \sin(k_1 z) && (\text{n ungerade}) \end{aligned} \quad \text{mit} \quad k_1 = \sqrt{\frac{2m_{e,Topf}^*}{\hbar^2} \varepsilon_n} \quad (2.7)$$

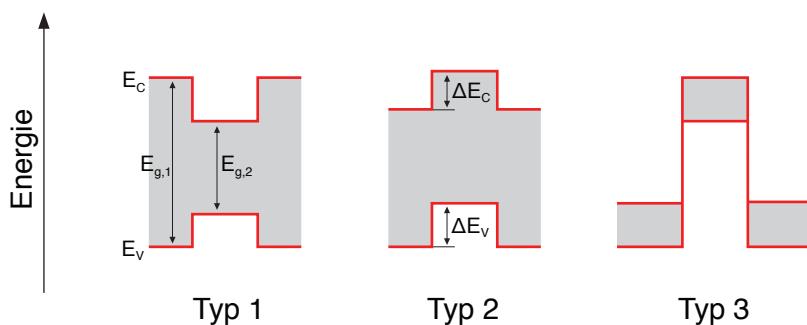
und nehmen in der Barriere exponentiell ab:

$$\varphi_{n,Barr}(z) = B e^{-k_2|z|} \quad \text{mit} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m_{e,Barr}^*}{\hbar^2} (V_0 - \varepsilon_n)} \quad (2.8)$$

Beim Übergang vom Topf in die Barriere muß  $\varphi_n(z)$  stetig und differenzierbar sein. Man erhält dann für die Energien  $\varepsilon_n$  der quantisierten Zustände innerhalb des Potentialtopfes ( $\varepsilon_n < V_0$ ) transzendentale Gleichungen, die nicht mehr analytisch, sondern nur numerisch oder graphisch gelöst werden können [Dav98]. Für Energien  $\varepsilon > V_0$  sind die Teilchen nicht mehr gebunden und nehmen kontinuierliche Zustände ein.

Eine genauere Betrachtung der Valenzbandstruktur in einem Quantenfilm [Yu96] zeigt, daß für die freien Richtungen in der Quantenfilmebene die schweren Löcher (mit  $m_j = \pm \frac{3}{2}$ ) tatsächlich eine kleinere effektive Masse als die leichten Löcher (mit  $m_j = \pm \frac{1}{2}$ ) haben. Dieser Effekt wird Massenumkehr genannt<sup>3</sup>. Außerdem überkreuzen und mischen sich die Bänder in diesem Fall, was die Valenzbandstruktur jenseits vom  $\Gamma$ -Punkt noch komplizierter macht. Zur genauen Beschreibung von realen Quantenfilmen müssen noch verschiedene weitere Effekte berücksichtigt werden, auf die in Kapitel 3 genauer eingegangen wird. Entsprechende Rechnungen werden in Kapitel 6.3 vorgestellt.

Quantenfilme lassen sich mit annähernd atomarer Präzision durch Molekularstrahlepitaxie (MBE) oder Metallorganische Gasphasenepitaxie (MOCVD) herstellen (siehe Kapitel 4). Für Quantenfilme aus GaAs wird als begrenzende Barriere meistens Al<sub>0.35</sub>Ga<sub>0.65</sub>As verwendet. Ein höherer Aluminiumgehalt würde zwar zu einer größeren Barrierenhöhe und somit einem besseren Ladungsträgereinschluß führen, allerdings ist AlGaAs ab einem Aluminiumanteil von etwa 40 % ein indirekter Halbleiter (siehe Abschnitt 2.5), was zu einer deutlich geringeren strahlenden Rekombination, also schlechteren optischen Eigenschaften führt. Außerdem kommt es beim Wachstum von Schichten mit höherem Aluminium-Gehalt eher zu unerwünschten Grenzflächenrauhigkeiten.



**Bild 2.6:** Klassifizierung von Quantenfilmen

Man unterscheidet verschiedene Typen von Quantenfilmen (Bild 2.6). In Typ-1-Quantenfilmen besteht für Elektronen und Löcher ein kastenförmiges Einschlußpoten-

---

<sup>3</sup>Die Bezeichnungen der Löcher sind hier also etwas irreführend. Genaugenommen müßte man von Löchern mit  $m_j = \pm \frac{3}{2}$  bzw.  $m_j = \pm \frac{1}{2}$  sprechen. Trotzdem sind die Bezeichnungen Schwerloch bzw. Leichtloch allgemein üblich und werden auch in dieser Arbeit so verwendet.

tial. Solche Quantenfilme lassen sich beispielsweise durch GaAs in AlGaAs herstellen. Sie eignen sich allgemein gut für optische Übergänge, da Elektronen und Löcher am gleichen Ort lokalisiert sind. Typ-2-Quantenfilme bestehen aus einem Einschlußpotential entweder für Elektronen oder für Löcher und aus einer kastenförmigen Barriere für die jeweils andere Sorte Ladungsträger. Diese Strukturen lassen sich zum Beispiel durch ZnSe in BeTe herstellen. Die eingeschlossenen Ladungsträger sind räumlich gebunden während die jeweils anderen Ladungsträger sich links oder rechts von der Barriere frei bewegen können. Dieser Typ ist im allgemeinen besser geeignet, um lange Speicherzeiten von Ladungsträgern zu erreichen, da die Wahrscheinlichkeit für optische Rekombination hier deutlich geringer ist. Typ 3 ist ein Sonderfall von Typ 2. Hier ist die Bandlücke so klein, daß das Valenzband des einen Materials energetisch über dem Leitungsband des anderen Materials liegt. Ein derartiges semimetallisches Verhalten liegt beispielsweise im Materialsystem InAs/GaSb vor. Diese Klassifizierung wird analog auch für Quantendrähte und Quantenpunkte (siehe unten) verwendet.

## Quantendrähte

Schränkt man die Bewegung der Ladungsträger weiter ein, so daß sie sich nur noch entlang einer Linie bewegen können, erhält man einen Quantendraht (engl.: *quantum wire*, Abk.: QWR). Wie beim Quantenfilm lassen sich die Wellenfunktionen der Ladungsträger auch hier in zwei Anteile zerlegen. Entlang der Richtung des Quantendrahts  $y$  entspricht die Wellenfunktion der eines freien Teilchen. In den beiden senkrechten Richtungen  $x$  und  $z$  sind die Ladungsträger eingesperrt, besetzen also quantisierte Zustände. Für ein Kastenpotential mit unendlich hohen Wänden ergeben sich die Energien nach [Wei91] zu

$$E_{n_x n_z}(k_y) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*} \left( \frac{n_x^2}{d_x^2} + \frac{n_z^2}{d_z^2} \right) + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} \quad \text{für } n_x, n_z \in \mathbb{N}^+ \quad (2.9)$$

mit der effektiven Masse der jeweiligen Ladungsträger  $m^*$  und dem Durchmesser des Quantendrahts  $d_x$  und  $d_z$  in  $x$ - bzw.  $z$ -Richtung. Die zu einer bestimmten Kombination der Quantenzahlen  $n_x$  und  $n_z$  gehörenden Zustände bilden ein eindimensionales Subband mit einer Zustandsdichte proportional zu  $1/\sqrt{E}$ , wie in Bild 2.4 dargestellt.

Während zweidimensionale Schichten routinemäßig mit hoher Qualität epitaktisch aufgewachsen werden können, bleibt die Herstellung von eindimensionalen Strukturen in der Größenordnung von wenigen Nanometern eine Herausforderung. Verschiedene Ansätze zur Herstellung von Quantendrähten gehen von zweidimensionalen epitaktisch gewachsenen Schichten aus und grenzen die Bewegung der Ladungsträger durch lithographische Verfahren weiter ein [Wei91]. Das Verfahren der Lithographie führt

jedoch zu Größenfluktuationen in einer ähnlichen Größenordnung, die die speziellen eindimensionalen Eigenschaften dieser Strukturen zu einem großen Teil zunichte machen [Sch04b]. Ein weiterer Ansatz basiert auf V-förmigen Furchen, die in das Substrat eingeritzt werden und in denen sich beim anschließenden Überwachsen Quantendrähte bilden [Kap89]. Diese Quantendrähte haben einen sichelförmigen Querschnitt, der zwar nur wenige Nanometer dick, aber 80 bis 100 nm lang ist. Durch diesen relativ langgezogenen Querschnitt ähneln die optischen Eigenschaften dieser Strukturen eher denen von zweidimensionalen als von eindimensionalen Systemen.

Ein anderes Herstellungsverfahren, das sogenannte Überwachsen von Spaltflächen, vermeidet diese Nachteile, indem die Begrenzung des Quantendrahts in beiden Raumdimensionen senkrecht zum Draht durch Epitaxie definiert wird. Dadurch läßt sich der Querschnitt mit nahezu atomarer Präzision festlegen. Eine genaue Beschreibung dieses Verfahrens folgt im übernächsten Abschnitt.

## Quantenpunkte

Schränkt man die Ladungsträger in allen drei Raumdimensionen ein, so daß sie sich überhaupt nicht mehr bewegen können, entsteht ein Quantenpunkt (engl.: *quantum dot*, Abk.: QD). Hier nehmen die Elektronen und Löcher einzelne diskrete Zustände ein, was sich in einer  $\delta$ -förmigen Zustandsdichte äußert. Aufgrund des Pauli-Prinzips kann jeder Zustand nur mit zwei Ladungsträgern (mit entgegengesetztem Spin) besetzt werden. Die Ladungsträger nehmen also Zustände ein, die vergleichbar mit denen von Elektronen in einem Atom sind, obwohl der Quantenpunkt selbst aus einigen Hundert bis Tausenden von Atomen besteht. Quantenpunkte werden daher auch als künstliche Atome bezeichnet.

Ein einfaches und weit verbreitetes Verfahren zur Herstellung von Quantenpunkten basiert auf Selbstorganisation [Bim99]. Dabei wird Indiumarsenid (InAs) auf ein GaAs-Substrat epitaktisch aufgewachsen. Aufgrund der unterschiedlichen Gitterkonstanten bilden sich kleine pyramidenförmige Inseln aus InAs. Diese werden anschließend mit GaAs überwachsen, so daß sich InAs-Quantenpunkte eingebettet in eine GaAs-Barriere bilden. Die einzelnen Quantenpunkte für sich genommen sind geometrisch präzise definiert mit Abmessungen von wenigen Nanometern in allen drei Raumdimensionen. Allerdings erhält man beim Wachstum stets ein großes Ensemble von Quantenpunkten mit statistisch verteilten Positionen und Größen. Um einzelne selbstorganisierte Quantenpunkte zu untersuchen, sind weitere technische Verfahren wie zum Beispiel geeignete Lochblenden [Beh04] oder vorstrukturierte Substrate [Bau04] nötig.

In sogenannten elektrostatisch definierten Quantenpunkten [Han07] wird in einem zweidimensionalen Elektronengas durch negativ geladene Gate-Elektroden das Poten-

tial ringförmig so angehoben, daß in der Mitte ein Einschlußpotential entsteht, aus dem die Elektronen nicht ohne weiteres entweichen können. Die Elektroden werden durch Elektronenstrahl-Lithographie mit einer Präzision von etwa 10 Nanometern aufgebracht. Dies ermöglicht es, eine Vielzahl von unterschiedlichen Strukturen (beispielsweise gekoppelte Quantenpunkte oder Quantenpunktkontakte) herzustellen und zu untersuchen. Elektrostatisch definierte Quantenpunkte bieten sich besonders im Bereich der Spintronik an. Da sie nur für eine Sorte Ladungsträger ein Einschlußpotential darstellen, sind sie für optische Experimente und Anwendungen weniger geeignet. Weitere Verfahren zur Herstellung von Quantenpunkten sind das Überwachsen von pyramidenförmigen Furchen [Har97] oder in Nanodrähten eingebettete Quantenpunkte [Bor05].

Auch zur Herstellung von Quantenpunkten läßt sich das Verfahren des Überwachsens von Spaltflächen einsetzen. Diese Quantenpunkte bilden ein Einschlußpotential für Elektronen und Löcher und bieten sich somit für optische Untersuchungen an. Wie bei Quantendrähten kennzeichnet dieses Verfahren, das sich die Geometrie und Position von einzelnen oder gekoppelten Quantenpunkten mit hoher Präzision festlegen läßt. Im folgenden Abschnitt wird diese Methode genauer vorgestellt.

## 2.3 Überwachsen von Spaltflächen

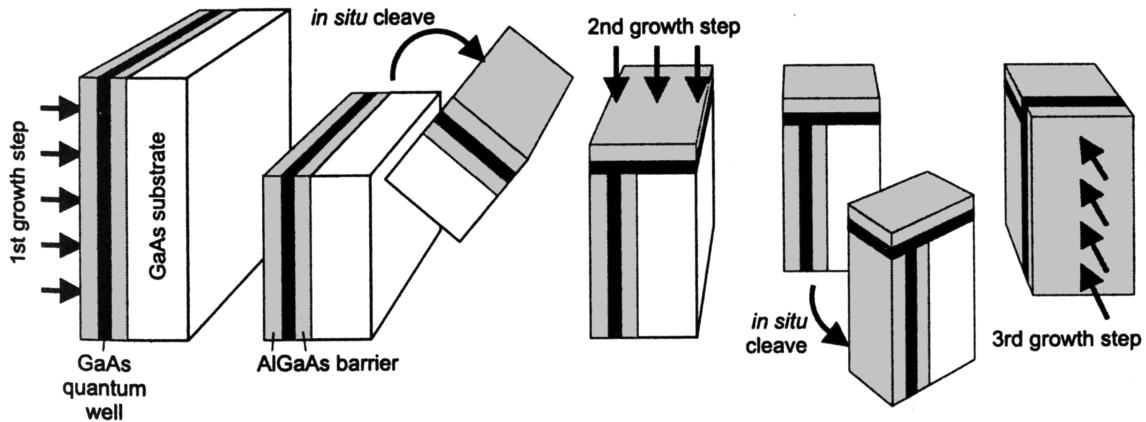
Das Verfahren des Überwachsens von Spaltflächen (engl.: *cleaved edge overgrowth*, Abk.: CEO) bildet den Kern dieser Arbeit. Dabei werden durch Epitaxie Strukturen mit einem T-förmigen Querschnitt hergestellt. Am Kreuzungspunkt entstehen durch quantenmechanische Effekte ein Einschlußpotential für Elektronen und Löcher und somit Quantendrähte oder -punkte.

Das Prinzip wurde 1985 erstmalig von Yia-Chung Chang *et. al.* vorgestellt [Cha85] und 1990 von Loren Pfeiffer *et. al.* experimentell realisiert [Pfe90]. Zwei Jahre später stellten Alexandro Goñi *et. al.* mit diesem Verfahren T-förmige Quantendrähte her [Gon92] und 1997 Werner Wegscheider *et. al.* erstmals Quantenpunkte [Weg97, Sch97].

Bild 2.7 zeigt das prinzipielle Verfahren<sup>4</sup>. Zuerst wird ein Quantenfilm eingebettet in eine AlGaAs-Barriere auf ein Substrat mithilfe der MBE aufgewachsen. Dann wird das Probenstück *in situ* entlang der (110)-Ebene in der MBE-Kammer gespalten. Unter geeigneten Umständen ist die Spaltfläche über makroskopische Distanzen atomar glatt. Unmittelbar darauffolgend wird in einem zweiten Wachstumsschritt auf diese Spaltfläche ein weiterer Quantenfilm aufgewachsen, gefolgt von einer weiteren

---

<sup>4</sup>Das CEO-Verfahren ist hier vereinfacht dargestellt. Die ausgelassenen technischen Details werden ausführlich in Kapitel 4.5 erläutert.



**Bild 2.7:** Herstellung von Quantenpunkten durch Überwachsen von Spaltflächen. Zuerst wird durch MBE ein Quantenfilm hergestellt. Dann wird die Probe gespalten und mit einem weiteren Quantenfilm überwachsen. Entlang der Verbindungslinie bildet sich durch quantenmechanische Effekte ein Quantendraht. Durch erneutes Spalten und Überwachsen entsteht ein Quantenpunkt an der Ecke, wo die drei Quantenfilme aufeinandertreffen (aus [Sch99])

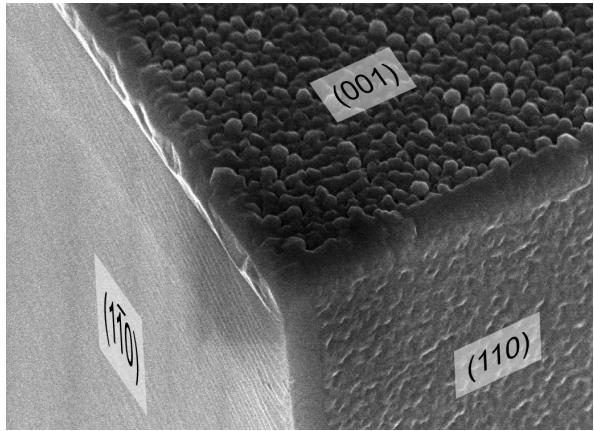
AlGaAs-Barriere.

Es entsteht also eine T-förmige Struktur. Entlang der Schnittgeraden der beiden Quantenfilme kann sich die Wellenfunktion von Elektronen und Löchern in ein größeres Volumen ausdehnen. Diese Ausdehnung führt zu einer Energieabsenkung an dieser Stelle und somit zur Bildung eines Quantendrahts. In Bild 6.4 in Kapitel 6 finden sich graphische Darstellungen der Wellenfunktionen an dieser Kreuzung.

Um Quantenpunkte zu erhalten, wird dieser Prozeß des Spaltens und Überwachsens ein zweites Mal durchgeführt. An der Ecke, an der die drei Quantenfilme aufeinandertreffen, kommt es zu einer weiteren Energieabsenkung und so zur Bildung eines Quantenpunkts. Bild 2.8 zeigt eine Rasterelektronenmikroskopie-Aufnahme einer so hergestellten Quantenpunktstruktur. Der eigentliche Quantenpunkt befindet sich an der Ecke und ist in diesem Bild nicht direkt zu sehen, da er unterhalb der AlGaAs-Deckschicht liegt.

Darüber hinaus kann beim ersten Wachstumsschritt statt eines einzelnen Quantenfilms auch ein Übergitter aus mehreren Quantenfilmen gewachsen werden. Auf diese Weise ergeben sich dann eine Reihe von mehrereinander liegenden Quantendrähten bzw. -punkten. Ist die Barriere zwischen den Quantenfilmen hinreichend schmal, können so auch gekoppelte Quantenpunkte hergestellt werden (Bild 2.9). Diese werden auch Quantenpunkt moleküle genannt.

In dieser Arbeit wird bei der Beschreibung von CEO-Proben der zuerst gewachsene Quantenfilm stets als (001)-Quantenfilm, der zweite als (110)-Quantenfilm und der



**Bild 2.8:** Rasterelektronenmikroskopie-Aufnahme eines CEO-Quantenpunktstruktur. Der Quantenpunkt befindet sich an der Ecke unterhalb der AlGaAs-Barriere. Die Rauigkeit der (001)- und (110)-Oberflächen wird durch unkontrolliertes Überwachsen der bereits gewachsenen Schichten im zweiten und dritten Wachstumsschritt verursacht, hat aber keine Auswirkungen auf die vergrabene Struktur (Bild: Lucia Steinke)

dritte als  $(\bar{1}\bar{1}0)$ -Quantenfilm bezeichnet. Diese drei Richtungen bilden ein kartesisches Koordinatensystem.

Der besondere Vorteil des CEO-Verfahren ist die hohe Präzision des Wachstums. Aufgrund der Zinkblende-Kristallstruktur spaltet der GaAs-Kristall unter geeigneten Bedingungen über makroskopische Distanzen atomar glatt. Die übrigen Geometrie ist durch das MBE-Wachstum bestimmt. Damit lassen sich die Positionen, Größe, Abstände und Materialien der Quantendrähte und -punkte sehr genau festlegen.

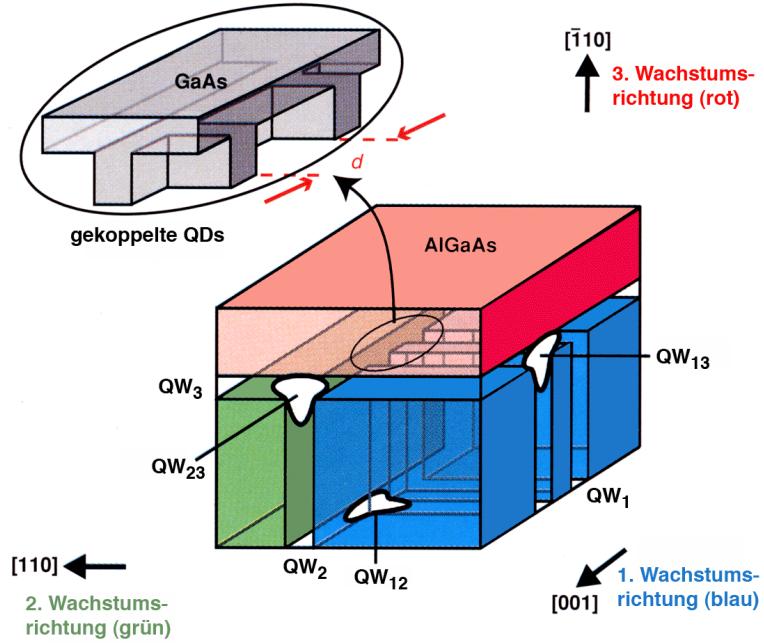
Ein entscheidender Nachteil dieses Verfahrens ist jedoch das relativ geringe Einschlußpotential. Dieses zu optimieren ist ein wesentliches Ziel dieser Arbeit. Außerdem ist CEO ein relativ aufwändiges Verfahren und kaum für den industriellen Einsatz im großen Maßstab einsetzbar. Ein weiterer Nachteil kann für bestimmte Anwendungen die Tatsache sein, daß die Strukturen nur wenige  $\mu\text{m}$  von der Kante bzw. Ecke entfernt sind. Dies erschwert beispielsweise eine elektrische Kontaktierung der Strukturen.

## 2.4 Mehrteilcheneffekte

Ein Elektron und ein Loch in einem Halbleiterkristall können durch die Coulombwechselwirkung einen gebundenen Zustand einnehmen. Dies ist vergleichbar mit der Bildung eines Wasserstoff-Atoms aus einem Proton und einem Elektron. Ein so gebundenes Elektron-Loch-Paar stellt ein Quasiteilchen dar und wird als Exziton bezeichnet.

Man unterscheidet zwei Arten von Exzitonen. Bei den sogenannten Frenkel-Exzitonen sind Elektron und Loch an einem Atom der Kristallstruktur lokalisiert. Im Prinzip stellt es einfach einen angeregten Zustand dieses Atoms dar, allerdings mit der Besonderheit, daß sich die Anregung durch den Kristall von einem Atom zum anderen fortbewegen kann.

Ist die Bindung zwischen Elektron und Loch schwächer und so ihr Abstand groß gegenüber der Gitterkonstante, bilden sich sogenannte Mott-Wannier-Exzitonen. Hierbei



**Bild 2.9:** Schematische Darstellung einer CEO-Struktur mit zwei gekoppelten Quantenpunkten. Das blau dargestellte Material wurde beim ersten Wachstumsschritt aufgebracht, das grüne beim zweiten und das rote beim dritten. Die aufgewachsenen Quantenfilme sind durch Zwischenräume dargestellt und die sich ergebenden Quantendrähte als Querschnittsprofil an den Kanten. Die zwei gekoppelten Quantenpunkte befinden sich in der Mitte der Struktur (nach [Sch97]).

sind Elektronen und Löcher über das Kristallgitter delokalisiert. Dies ist insbesondere im GaAs-Materialsystem der Fall. Man kann sich dies so vorstellen, daß Elektron und Loch sich ähnlich wie im Bohrschen Atommodell gegenseitig umkreisen.

Die Übergangsenergie für die Rekombination eines Exzitons ist im Vergleich zu der eines freien Elektrons und Lochs um die Exziton-Bindungsenergie  $E_X$  abgesenkt. Oft stellt man sich dies so vor, daß Exzitonen im Bandschema zu Zuständen führen, die knapp unterhalb der Leitungsbandkante bzw. oberhalb der Valenzbandkante liegen. Genau genommen ist dies eigentlich nicht korrekt, da das übliche Bandstrukturmodell nur Ein-Teilchen-Zustände beschreibt.

Im dreidimensionalen Volumenkristall läßt sich die Exziton-Bindungsenergie nach dem klassischen Modell des Wasserstoff-Atoms berechnen [Dav98]. Dabei ziehen sich Elektron und Loch durch das Coulombpotential

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{e^2}{r} \quad (2.10)$$

gegenseitig an und umkreisen im Abstand  $r$  voneinander den gemeinsamen Schwerpunkt mit der reduzierten Masse  $\mu$ . Der Einfluß des Kristallgitters wird durch die Dielektrizitätskonstante  $\epsilon$  und die effektiven Massen beschrieben. Analog zum Wasserstoff-Atom ergibt sich die Exzitonen-Bindungsenergie zu [Har05]

$$E_X = -\frac{\mu e^4}{32\pi\epsilon\hbar^2} \quad (2.11)$$

und der Exzitonen-Bohradius zu

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon\hbar^2}{\mu e^2} \quad (2.12)$$

Für GaAs ergibt sich eine Bindungsenergie von  $E_X = 4,2 \text{ meV}$  und ein Bohrradius von  $11,2 \text{ nm}$ .

Es sind ferner auch exzitonische Zustände mit mehr als zwei Ladungsträgern möglich. Enthält ein Exziton ein zusätzliches Loch oder Elektron, spricht man von einem geladenen Exziton. Gehen zwei Exzitonen eine Bindung miteinander ein, so entsteht ein sogenanntes Biexziton aus zwei Elektronen und zwei Löchern, das Ähnlichkeiten zu einem  $H_2$ -Molekül aufweist.

In Strukturen mit niedrigerer Dimensionalität tritt eine verstärkte Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektronen und Löchern auf. Dadurch nimmt der Bohrradius ab und die Exzitonen-Bindungsenergie  $E_X$  wird größer. Für GaAs-Quantenfilme mit  $Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ -Barrieren beispielsweise steigt  $E_X$  auf das Zwei- bis Dreifache im Vergleich zum Volumenkristall an. Anschaulich kann man sich vorstellen, daß durch die räumliche Einschränkung der Abstand zwischen Elektron und Loch verringert und so die Coulomb-Wechselwirkung verstärkt wird. Der genaue Wert von  $E_X$  in niederdimensionalen Strukturen hängt von der Geometrie und der Materialzusammensetzung ab. Ein einfaches Modell für Quantenfilme findet sich in [Mat92]. Genauere Berechnungen für Quantenfilme, -drähte und -punkte werden in Kapitel 6.4 vorgestellt und sind in Bild 6.6 gezeigt.

Exzitonische Effekte sind in der Regel nur bei niedrigen Temperaturen dominant, bei denen  $E_X > k_b T$  gilt. Bei Zimmertemperatur mit  $k_b T = 26 \text{ meV}$  sind im GaAs-Volumenkristall fast alle Exzitonen ionisiert. In niederdimensionalen Systemen hingegen sind höhere Exzitonen-Bindungsenergien bis über  $20 \text{ meV}$  für Quantendrähte möglich. Auf diese Weise lassen sich Strukturen herstellen, deren optische und elektrische Eigenschaften auch noch bei Zimmertemperatur durch Exzitonen bestimmt sind. In nulldimensionalen Quantenpunkten liegen Elektron-Loch-Paare andererseits grundsätzlich in Form von Exzitonen vor.

Im Fall von hohen Ladungsträgerkonzentrationen wie beispielsweise bei starker optischer Anregung wird die Coulomb-Anziehung in Elektron-Loch-Paaren durch freie

Ladungsträger abgeschirmt und so die Exzitonen-Bindungsenergie erniedrigt [Kal96]. Parallel dazu wird die Bandlücke durch Austausch- und Korrelationseffekte abgesenkt, was zur Renormalisierung der Bandlücke (engl.: *band gap renormalization*) führt. Die Erniedrigung der Exzitonen-Bindungsenergie wird zunächst durch die Renormalisierung der Bandlücke ausgeglichen, so daß die Übergangsenergie konstant bleibt. Übersteigt die Ladungsträgerkonzentration jedoch die sogenannte Mott-Dichte, werden die exzitonischen Bindungen aufgelöst und es entsteht ein Plasma aus freien Elektronen und Löchern. Bei einer weiteren Erhöhung der Ladungsträgerdichte wird die Bandlücke weiter abgesenkt und führt zu kleineren Übergangsenergien.

## 2.5 Optische Übergänge

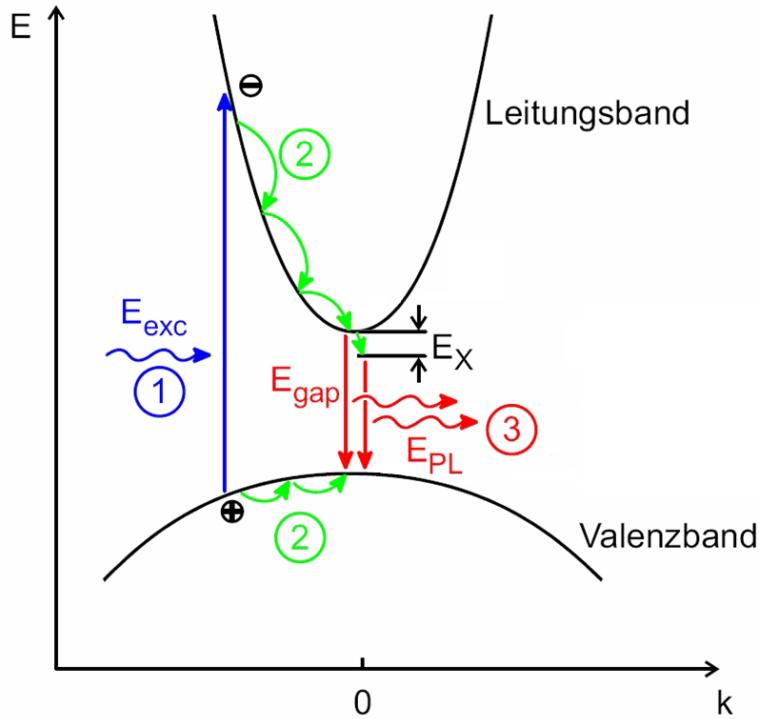
Die in dieser Arbeit untersuchten Proben werden durch optische Verfahren charakterisiert. Es handelt sich dabei um Typ-1-Quantenstrukturen, deren elektronische Eigenschaften vorrangig durch Elektron-Loch-Paare bestimmt werden. Zur Messung dieser Zustände ist die optische Absorptions- und Emissionsspektroskopie besonders gut geeignet, da die Photonenergie des wechselwirkenden Lichts direkt der Übergangsenergie der Elektron-Loch-Paare entspricht.

### Photolumineszenz

Bei der Photolumineszenz (PL) wird ein Halbleiter optisch angeregt und sendet infolgedessen Licht mit einer etwas größeren Wellenlänge aus. Die einzelnen Vorgänge, die dabei ablaufen, sind in Bild 2.10 für tiefe Temperaturen dargestellt.

Bei der Anregung wird Laserlicht mit einer bestimmten Photonenergie  $E_{exc}$  absorbiert (1). Dabei wird ein Elektron-Loch-Paar erzeugt, das sich anfangs in einem angeregten Zustand befindet, da in der Regel  $E_{exc}$  größer als die Bandlücke  $E_{gap}$  ist. Innerhalb von einigen Pikosekunden relaxieren die Ladungsträger zum jeweiligen Bandminimum bzw. -maximum, das für GaAs am  $\Gamma$ -Punkt liegt (2). Die Energie wird dabei in Form von Gitterschwingungen abgegeben. Aufgrund der Coulomb-Wechselwirkung kann es zur Bildung von Exzitonen kommen, die die um die Exzitonen-Bindungsenergie  $E_X$  tiefer gelegenen Exzitonenzustände besetzen. Bei tiefen Temperaturen liegen Elektron-Loch-Paare zum überwiegenden Teil in Form von gebundenen Exzitonen vor. Nach einer Lebensdauer von ungefähr 1 ns rekombiniert dann das Elektron-Loch-Paar (3) unter Emission eines Photons der Energie  $E_{gap}$  bzw.  $E_{gap} - E_X$ , die spektroskopisch gemessen werden kann.

In Bild 2.10 ist zur besseren Übersichtlichkeit nur das schwere Lochband eingezeichnet. Im GaAs-Volumenkristall, in dem das schwere und leichte Lochband am  $\Gamma$ -Punkt



**Bild 2.10:** Schematische Darstellung der einzelnen Prozesse bei der Photolumineszenz. Dargestellt ist der Bandverlauf im  $\vec{k}$ -Raum für einen direkten Halbleiter wie GaAs (aus [Sch05])

entartet sind, verhalten sich leichte Löcher in der PL genauso wie schwere. Ist jedoch die Entartung aufgehoben, wie beispielsweise in einem Quantenfilm, haben Elektron-Loch-Paare mit einem leichten Loch eine höhere Übergangsenergie und führen zu einem zusätzlichen Signal im PL-Spektrum. Dieses Signal ist allerdings sehr schwach, da die Lebensdauer nur wenige Pikosekunden beträgt und so die Wahrscheinlichkeit wesentlich größer ist, daß das leichte Loch durch Aussendung eines Infrarot-Photons zu einem energieärmeren schweren Loch wird.

In Bild 2.10 sind die Prozesse für einen Halbleiter dargestellt, bei dem sich das Leitungsbandminimum und das Valenzbandmaximum im  $\vec{k}$ -Raum an der gleichen Stelle befinden (typischerweise am  $\Gamma$ -Punkt wie bei GaAs). Da hierbei Elektron-Loch-Paare direkt rekombinieren können, werden diese Materialien direkte Halbleiter genannt. In indirekten Halbleitern wie beispielsweise Silizium befinden sich das Leitungsbandminimum und das Valenzbandmaximum an unterschiedlichen Stellen. Dann ist für die Rekombination der relaxierten Ladungsträger ein zusätzliches Phonon notwendig, um die Impulsdifferenz aufzunehmen. Dies verringert die Wahrscheinlichkeit für optische Emission wesentlich und macht beispielsweise Silizium als Grundstoff für Lichtemitter ungeeignet.

Die Lichtemission aus Quantenstrukturen zeigt aufgrund der Grundzustandsenergie der quantisierten Elektronen  $E_e$  und Löcher  $E_{hh}$  eine höhere Übergangsenergie als aus dem Volumenkristall:

$$E_{PL} = E_{gap} + E_e + E_{hh} - E_X \quad (2.13)$$

Die Linienbreite der Emission ist dabei in der Regel durch Grenzflächenfluktuationen verbreitert (siehe unten).

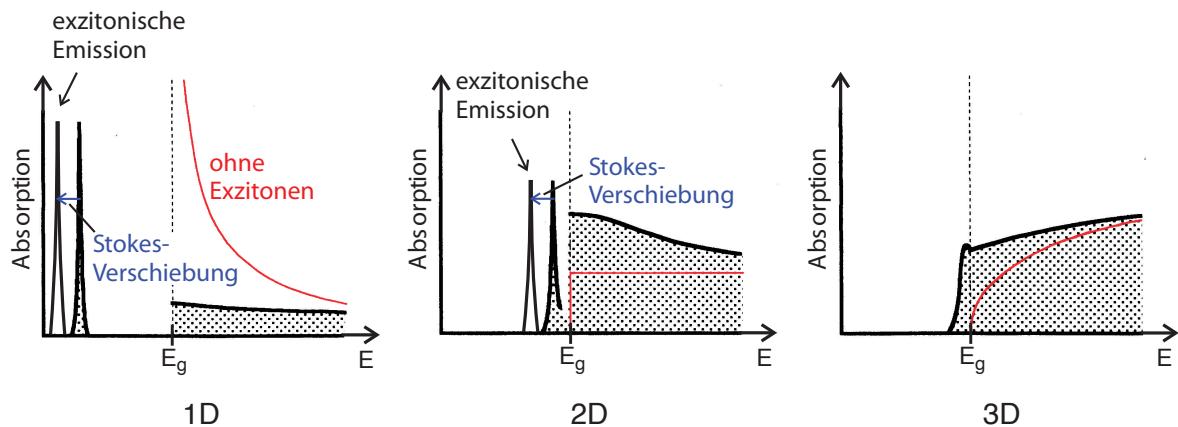
Nichtstrahlende Rekombinationsprozesse verlaufen in der Regel über tiefe Störstellen und sind die vorherrschende Art der Rekombination in indirekten und unreinen Halbleitern. Bei qualitativ hochwertigem GaAs können die nichtstrahlenden Rekombinationsprozesse vernachlässigt werden.

Wichtige Parameter bei der Photolumineszenz sind die Leistung, Polarisation und Wellenlänge der Anregung, die Polarisation der Detektion sowie die Temperatur. Durch eine Variation der Anregungsleistung kann man verschiedene Zustandsdichten in der Probe relativ zueinander untersuchen. Bei einer Erhöhung der Leistung beobachtet man bei manchen Signalen (zum Beispiel der Emission aus Störstellen) eine Sättigung der Emission. Dies ist ein Hinweis darauf, daß die entsprechenden Zustände in begrenzter Zahl in der Probe vorhanden sind und ab einer bestimmten Leistung praktisch alle besetzt sind. Durch die Polarisation von Emission und Detektion kann man aufgrund der Auswahlregeln (siehe unten) die Signale von bestimmten Strukturen besser von anderen oder dem Hintergrundrauschen unterscheiden. Die Möglichkeiten, die sich durch eine Variation der Anregungswellenlänge ergeben, werden im folgenden Abschnitt vorgestellt.

## Absorptionsspektroskopie

Bei der klassischen Absorptionsspektroskopie wird der Absorptionskoeffizient der Probe in Abhängigkeit von der Wellenlänge gemessen. Dabei wird die Leistung des transmittierten Lichts gemessen und mit der Anregungsleistung verglichen. Auf diese Weise erhält man ein Abbild der Zustandsdichte. Der Nachteil dieses Verfahrens ist, daß die Probe außerhalb der zu untersuchenden Strukturen kein Anregungslicht absorbieren darf. Im GaAs-Materialsystem beispielsweise muß dafür in der Regel das Substratmaterial von den aufgewachsenen Schichten abgetrennt werden. Außerdem ist hierbei das Signal-Rausch-Verhältnis meistens sehr schlecht. In der Praxis ist die Absorptionsspektroskopie daher aufwändig und oft ungenau. Als Alternative bietet sich die vielen Fällen eine Variation der Photolumineszenz, die sogenannte Photolumineszenz-Anregungsspektroskopie (engl.: *photoluminescence excitation spectroscopy*, Abk.: PLE) an.

Bei der im vorigen Abschnitt vorgestellten Photolumineszenz werden bei der Anregung Elektron-Loch-Paare in irgendeinem angeregten Zustand erzeugt. Von dort relaxieren die Ladungsträger dann relativ schnell in den Grundzustand. Andererseits kann man auch direkt bestimmte Zustände der zu untersuchenden Struktur anregen, wenn die Wellenlänge, also die Photonenergie der Anregung genau der Energie des jeweiligen Zustands entspricht. Man spricht in diesem Fall von resonanter Absorption. Wie bei der Photolumineszenz relaxieren die Ladungsträger dann relativ schnell in den Grundzustand und können von dort aus emittiert werden. Falls keine Ladungsträger durch andere Prozesse, wie zum Beispiel nichtstrahlende Rekombination verloren gehen, entspricht die Anzahl der emittierten Photonen aus dem Grundzustand dann genau der Anzahl der absorbierten Photonen. Durch Variation der Anregungswellenlänge ergibt sich also ein Absorptionsspektrum unter der Voraussetzung, daß die nichtstrahlende Rekombination vernachlässigbar ist und keine Ladungsträger in andere Bereich der Probe abfließen. Bei den in dieser Arbeit untersuchten GaAs-Proben ist dies der Fall, da GaAs ein direkter Halbleiter ist, die Proben sehr wenig Störstellen aufweisen und die Ladungsträger durch die Verläufe der Bandkanten räumlich eingeschlossen sind.



**Bild 2.11:** Schematischer Vergleich der Absorption in ein-, zwei- und dreidimensionalen Strukturen für tiefe Temperaturen. Die rote Kurve zeigt die Zustandsdichte wie in Bild 2.4. Die schraffierte Fläche stellt das Absorptionsspektrum dar. Die Emission aus exzitonischen Zuständen findet sich aufgrund der Stokes-Verschiebung bei niedrigeren Energien (nach [Oga95]).

In Bild 2.11 ist ein Vergleich der Absorptionsspektren (schraffierte Fläche) im Volumenkristall (3D), in Quantenfilmen (2D) und in Quantendrähten (1D) dargestellt. Bei tiefen Temperaturen findet sich unterhalb der Bandkante ein zusätzliches Signal in der Absorption. Dieses Signal entspricht der Generierung eines Exzitons, dessen Übergangsenergie um den Betrag der Bindungsenergie unterhalb der Bandkante liegt. Wie

in Abschnitt 2.4 beschrieben, steigt die Exzitonen-Bindungsenergie mit abnehmender Dimensionalität. Die Emission aus exzitonischen Zuständen liegt aufgrund der Stokes-Verschiebung (siehe unten) bei niedrigeren Energien.

Bei der optischen Generierung von ungebundenen Elektron-Loch-Paaren spricht man von Band-zu-Band-Absorption. Hierbei können Elektron und Loch noch einen zusätzlichen Impuls aufnehmen, wodurch sich oberhalb der Bandkante ein kontinuierliches Absorptionsspektrum ergibt. Da das absorbierte Photon einen vernachlässigbar kleinen Impuls hat, bewegen sich dabei wegen der Impulserhaltung das erzeugte Elektron und Loch in entgegengesetzte Richtungen fort. Aus diesem Grund können auch Exzitonen, in denen Elektronen und Löcher ja gebunden sind, bei optischen Übergängen keinen Impuls aufnehmen bzw. abgeben, was zu den in Bild 2.11 gezeigten scharfen Linien führt. Die Coulomb-Wechselwirkung, die zur Bildung von Exzitonen führt, wirkt auch bei der Band-zu-Band-Absorption von ungebundenen Ladungsträgern und führt dazu, daß das Absorptionsspektrum (schwarze Linie) von der Zustandsdichte (rote Linie) abweicht. Diese Abweichung wird durch den sogenannten Sommerfeld-Faktor [Dav98] beschrieben.

## Fermis Goldene Regel

Die optische Übergangswahrscheinlichkeit  $P$  bzw. Lebensdauer  $\tau$  für die Absorption und stimulierte Emission wird in zeitabhängiger Störungstheorie durch Fermis Goldene Regel beschrieben [Bas96]:

$$P = \frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_I | i \rangle|^2 \rho_f \quad (2.14)$$

mit dem Übergangs-Matrixelement  $\langle f | H_I | i \rangle$  und der Zustandsdichte des jeweiligen Endzustands  $\rho_f$ . Die optische Übergangswahrscheinlichkeit hängt also unter anderem von der Zustandsdichte des Endzustands ab. Aus diesem Grund weisen niederdimensionale optoelektronische Bauelemente meistens eine höhere Effizienz auf. Für diskrete Zustände ergibt sich

$$P = \frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_I | i \rangle|^2 \delta(E_i - E_f \pm \hbar\omega) \quad (2.15)$$

Das Pluszeichen steht dabei für die Absorption und das Minuszeichen für die Emission eines Photons der Energie  $\hbar\omega$ . Der Wechselwirkungs-Hamiltonoperator  $H_I$ , der den Zustand  $|i\rangle$  mit der Energie  $E_i$  in den Zustand  $|f\rangle$  mit der Energie  $E_f$  überführt, lässt sich unter Vernachlässigung des Photonen-Wellenvektors ausdrücken durch

$$H_I = \frac{ieF}{2m_0\omega} \vec{\eta} \cdot \vec{p} \quad (2.16)$$

mit der freien Elektronenmasse  $m_0$ , der elektrischen Feldstärke  $F$ , dem Polarisationsvektor  $\vec{\eta}$  und dem Impulsoperator  $\vec{p}$ .

Im Rahmen der Einhüllendennäherung (siehe Kapitel 3.1) wird die Wellenfunktion  $\psi(\vec{r})$  als Produkt aus einer schnell oszillierenden Blochfunktion  $u(\vec{r})$  und einer einhüllenden Wellenfunktion  $\varphi(\vec{r})$  geschrieben. Nimmt man letztere als innerhalb einer Elementarzelle näherungsweise konstant an, läßt sich das Matrixelement für optische Interbandübergänge als Produkt schreiben [Har05]:

$$\langle f | H_I | i \rangle = \langle u_f | H_I | u_i \rangle_{\text{EZ}} \langle \varphi_f | \varphi_i \rangle \quad (2.17)$$

Der Index EZ drückt hierbei aus, daß über eine Einheitszelle integriert wird und die Indizes  $i$  und  $f$  kennzeichnen wiederum den Anfangs- bzw. Endzustand.

## Auswahlregeln

Das Matrixelement in Fermis Goldener Regel (2.15) ist ein Maß für die Wahrscheinlichkeit des entsprechenden Übergangs. Ist das Matrixelement  $\langle f | H_I | i \rangle = 0$ , so ist auch die Übergangswahrscheinlichkeit  $P = 0$ , der entsprechende Übergang also verboten.

Für optische Interbandübergänge in Heterostrukturen ergeben sich zwei Arten von Auswahlregeln aus Gleichung (2.17). Der Überlapp der einhüllenden Wellenfunktionen  $\langle \varphi_f | \varphi_i \rangle$  bestimmt, welche Quantenzahlen die quantisierten Zustände im Leitungs- und Valenzband haben dürfen, damit ein Übergang erlaubt ist. Allgemein weisen Übergänge zwischen Subbändern mit gleicher Quantenzahl die höchsten Wahrscheinlichkeiten auf. Anschaulich bedeutet diese Auswahlregel, daß optische Absorption und Emission nicht möglich sind, wenn Elektronen und Löcher räumlich voneinander getrennt sind.

| Art des Übergangs       | Polarisation | rel. Wahrscheinlichkeit |
|-------------------------|--------------|-------------------------|
| Elektron - Schwerloch   | zum QW       | 1/2                     |
|                         | ⊥ zum QW     | verboten                |
| Elektron - Leichtloch   | zum QW       | 1/6                     |
|                         | ⊥ zum QW     | 2/3                     |
| Elektron - abgesp. Loch | zum QW       | 1/3                     |
|                         | ⊥ zum QW     | 1/3                     |

**Tabelle 2.1:** Auswahlregeln für optische Interbandübergänge in einem Quantenfilm am  $\Gamma$ -Punkt. Für schwere Löcher ist insbesondere die Absorption und Emission von Licht bei Ausbreitung entlang der Quantenfilmebene und senkrechter Polarisation verboten. Für leichte Löcher sind alle Polarisationsrichtungen erlaubt, weisen aber verschiedene Übergangswahrscheinlichkeiten auf.

| Art des Übergangs     | Polarisation | rel. Wahrscheinlichkeit |
|-----------------------|--------------|-------------------------|
| Elektron - Schwerloch | zum QWR      | verboten                |
|                       | ⊥ zum QWR    | 1/2                     |
| Elektron - Leichtloch | zum QWR      | 2/3                     |
|                       | ⊥ zum QWR    | 1/6                     |

**Tabelle 2.2:** Auswahlregeln für optische Interbandübergänge in einem Quantendraht mit kreisförmigem Querschnitt am  $\Gamma$ -Punkt.

Der andere Faktor  $\langle u_f | H_I | u_i \rangle_{EZ}$  in Gleichung (2.17) führt zu Auswahlregeln bezüglich der Polarisation des absorbierten oder emittierten Lichts. Für Ladungsträger am  $\Gamma$ -Punkt sind diese in Tabelle 2.1 für Quantenfilme und in Tabelle 2.2 für Quantendrähte zusammengefaßt. Die mathematische Herleitung hierzu findet sich in [Bas96] bzw. [Ser91]. Für kugelsymmetrische Quantenpunkte sind aus Symmetriegründen alle Polarisationsrichtungen erlaubt.

Experimentell läßt sich der Polarisationszustand des anregenden und emittierten Lichts bestimmen, indem man durch Polarisationsfilter die lineare Polarisation für  $0^\circ$ ,  $45^\circ$ ,  $90^\circ$  und  $135^\circ$  sowie die rechtszirkulare (RZ) und linkszirkulare (LZ) Polarisation mißt. Aus den jeweiligen Intensitäten lassen sich die Stokes-Parameter

$$\begin{aligned} I &= I_{0^\circ} + I_{90^\circ} \\ Q &= I_{0^\circ} - I_{90^\circ} \\ U &= I_{45^\circ} - I_{135^\circ} \\ V &= I_{RZ} - I_{LZ} \end{aligned} \tag{2.18}$$

ermitteln, die den Polarisationszustand des Lichts vollständig beschreiben. Der Polarisationsgrad

$$\Pi = \frac{\sqrt{Q^2 + U^2 + V^2}}{I} \tag{2.19}$$

gibt den Anteil der polarisierten Strahlung an der Gesamtstrahlung an. Für nur linear polarisiertes Licht ergibt sich

$$\Pi_{lin} = \frac{\sqrt{Q^2 + U^2}}{I} \tag{2.20}$$

## Linienformen

Die Form der Spektrallinien bei der optischen Emission steht in einem engen Zusammenhang mit der Qualität der gewachsenen Probe. Abweichungen in Geometrie und Materialzusammensetzung von der Idealstruktur beeinflussen die Linienbreite und können zu zusätzlichen Signalen im Spektrum führen. Die Photolumineszenz ist somit

ein einfaches und effektives Verfahren, um die Qualität des Wachstums beurteilen zu können. In diesem Abschnitt werden zunächst die Ursachen von Linienverbreiterungen dargestellt. In Kapitel 4.4 wird dann genauer auf die Wachstumsprozesse eingegangen, die Einfluß auf die Linienbreite und -form haben. Allgemeine Einführungen zu optischen Linienbreiten finden sich in vielen Büchern über Laserphysik wie zum Beispiel [Kne99]. Verschiedene Mechanismen tragen zur Linienverbreiterung bei. Hierbei ist zu unterscheiden zwischen Effekten im Volumenkristall und Grenzflächenrauigkeiten bei Quantenstrukturen.

In dicken Halbleiterschichten spielen die Grenzflächen eine vernachlässigbare Rolle und die Spektrallinien sind hauptsächlich durch Prozesse verbreitert, die im Volumenkristall stattfinden. Die Linienbreite  $\Gamma_{bulk}$  der optischen Emission setzt sich dabei zusammen aus der Verbreiterung durch Streuung an Störstellen, gebundenen Exzitonen, akustischen und optischen Phononen und der intrinsischen Linienbreite, die durch strahlende Rekombination, Spinflipstreueung, Exziton-Exziton-Streuung und Exziton-Ladungsträger-Streuung bestimmt ist [Sri92]. Bei den in dieser Arbeit untersuchten Proben ist aufgrund der hohen Reinheit des MBE-Wachstums der Beitrag, der durch Störstellen verursacht wird, vernachlässigbar klein. Ebenso sind im GaAs-Materialsystem Legierungsfluktuationen sehr gering. Die Linienbreite im Volumenkristall weist daher ein lorenzförmiges Profil auf und ist durch die Energie-Zeit-Unschärferelation  $\Gamma_{bulk} = \hbar/\tau$  mit der Lebensdauer  $\tau$  verknüpft.

Bei niederdimensionalen Halbleiterstrukturen hingegen sind die Spektrallinien vor allem durch Grenzflächenrauigkeiten verbreitert. Diese inhomogene Verbreiterung zeigt in der Regel ein gaußförmiges Profil. Neben der Stärke der Grenzflächenfluktuationen ist dabei vor allem deren räumliche Verteilung im Vergleich zur Größe und Diffusionslänge der Exzitonen entscheidend (siehe Kapitel 4.4). Je kleiner die Strukturgrößen sind, desto stärker wirken sich Größenfluktuationen auf die optische Emission aus. Die Verbreiterung durch eine Fluktuation der Strukturgröße  $d$  (beispielsweise der Breite eines Quantenfilms) lässt sich durch

$$\Gamma_{inhom} = \left| \frac{\partial E_{PL}}{\partial d} \Delta d \right| \quad (2.21)$$

ausdrücken. Dabei bezeichnet  $\Delta d$  die mittlere Fluktuation der Strukturgröße und  $\frac{\partial E_{PL}}{\partial d}$  die Abhängigkeit der Emissionsenergie von  $d$ . Diese lässt sich für einen Quantenfilm beispielsweise durch Ableitung der Kurve in Bild 6.1 ermitteln.

Allgemein ist die optische Emission aus Halbleiterstrukturen sowohl homogen durch Prozesse im Volumenkristall als auch inhomogen durch Grenzflächenrauigkeiten verbreitert. Die Linienform ist dann eine Überlagerung aus einem Gauß- und einem Lorenz-Profil, die auch als Voigt-Profil bezeichnet wird. Für die Halbwertsbreite eines Voigt-

Profils lässt sich kein einfacher analytischer Ausdruck angeben. Sie kann jedoch durch die Formel

$$\Gamma_{Voigt} \approx 0,5346 \Gamma_{Lorentz} + \sqrt{0,2166 \Gamma_{Lorentz} + \Gamma_{Gauss}^2} \quad (2.22)$$

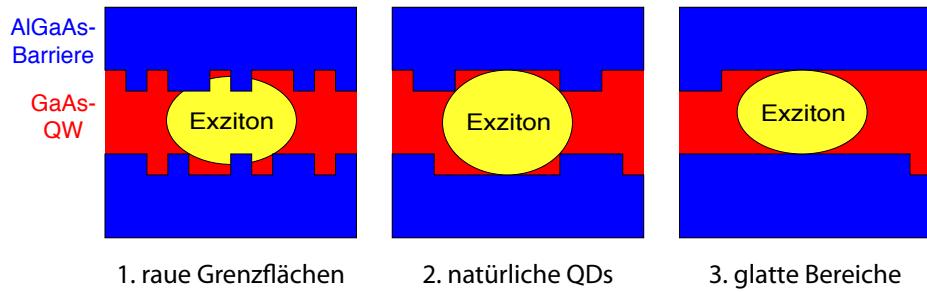
mit einer Abweichung von maximal 0,02 % angenähert werden [Oli77]. Wird die Linienbreite durch die inhomogene Verbreiterung dominiert ( $\Gamma_{Gauss} > \Gamma_{Lorentz}$ ), so ergibt die vereinfachte Formel

$$\Gamma_{Voigt} \approx 0,5346 \Gamma_{Lorentz} + \Gamma_{Gauss} \quad (2.23)$$

eine maximale Abweichung von wenigen Prozent, was in vielen Fällen ausreicht. Mit dieser Näherung und (2.21) lässt sich die gemessene Linienbreite beschreiben durch

$$\Gamma = 0,5346 \Gamma_{bulk} + \left| \frac{\partial E_{PL}}{\partial d} \Delta d \right| \quad (2.24)$$

In [Sri92] wurde für (001)-GaAs-Quantenfilme von besonders hoher Qualität eine homogene Linienbreite von  $\Gamma_{bulk} = 120 \mu\text{eV}$  und eine Dickenfluktuation von  $\Delta d = 0,03 \text{ nm}$  ermittelt.



**Bild 2.12:** Einschluß von Exzitonen bei unterschiedlich rauen Grenzflächen. Von links nach rechts nimmt die Längenskala der Grenzflächenrauigkeiten zu.

Dickenfluktuationen in Heterostrukturen bewirken allgemein nicht nur eine Linienverbreiterung, sondern können auch zu einer Aufspaltung des Signals in mehrere Spektrallinien führen. Die Form des PL-Signals hängt dabei entscheidend von der Größenordnung der Fluktuationen im Vergleich zum Durchmesser der Exzitonen ab. Der Bohrradius von Exzitonen in GaAs-Quantenfilmen beträgt typischerweise 9 bis 11 nm [Har05]). In Bild 2.12 sind drei unterschiedliche Situationen schematisch am Beispiel eines Quantenfilms dargestellt:

1. Die Oberfläche ist relativ rau mit Fluktuationen in einer Größenordnung von wenigen Nanometern. Für ein Exziton ergibt sich dann eine gemittelte Quantenfilmdicke. Das PL-Spektrum zeigt ein einzelnes Signal, das allerdings durch die Fluktuationen stark verbreitert ist.

2. Wenn sich durch Dickenfluktuationen im Quantenfilm ein breiterer Bereich bildet, dessen Ausdehnung dem Exziton-Durchmesser entspricht, kann das Exziton dort einen Zustand einnehmen, der in allen Raumrichtungen lokalisiert ist. Diese nulldimensionalen Zustände werden als natürliche Quantenpunkte bezeichnet. Sie führen zu zahlreichen sehr scharfen Signalen im PL-Spektrum auf der niedrigerenergetischen Seite des Quantenfilm-Signals bei niedrigen Anregungsenergien [Bru94, Zre94, Sch05]. Da jeder dieser natürlichen Quantenpunkte nur ein Exziton oder Biexziton aufnehmen kann, sättigen diese Signale sehr schnell und gehen bei höheren Anregungsleistungen im Quantenfilm-Signal unter.
3. Ist die Längenskala der Unebenheiten deutlich größer als der Durchmesser der Exzitonen, ergeben sich für die Exzitonen zwei oder mehr verschiedene Quantenfilmdicken. Entsprechend spaltet das PL-Spektrum in mehrere getrennte Signale auf, die jeweils für sich eine relativ schmale Linienbreite aufweisen, da innerhalb der einzelnen Abschnitte die Grenzflächen glatt sind. Bei starker Linienverbreiterung können sich diese Signale auch überlagern, so daß sie nicht mehr zu trennen sind und als einzelnes sehr breites Signal erscheinen.

Im Allgemeinen finden sich in MBE-gewachsenen Quantenfilmen alle drei genannten Fälle wieder. Welcher von diesen dominiert, hängt von den gewählten Wachstumsparametern ab, die in Kapitel 4.4 genauer behandelt werden.

## Stokes-Verschiebung

Eine größere Linienbreite entspricht einer verbreiterten Zustandsdichte. Die einzelnen Zustände in den quantisierten Richtungen sind dann nicht mehr  $\delta$ -förmig, sondern weisen eine bestimmte Breite auf. Diese Verbreiterung der Zustände läßt sich (zumindest für exzitonische Zustände) durch Absorptionsspektroskopie direkt messen. Die Emission hingegen findet nicht aus allen Zuständen dieser verbreiterten Verteilung statt, sondern vor allem aus Zuständen mit niedrigerer Energie, da die Ladungsträger zu tieferliegenden Energien relaxieren. Die Emission zeigt somit eine Rotverschiebung, die sogenannte Stokes-Verschiebung, wie in Bild 2.11 dargestellt ist. Eine Messung der Stokes-Verschiebung findet sich in Bild 7.19.

In [Yan93] wurde gezeigt, daß es einen universellen Zusammenhang zwischen der Linienbreite der Emission  $\Gamma$  und der Stokes-Verschiebung  $\Delta E_{Stokes}$  gibt:

$$\Delta E_{Stokes} = 0,553 \Gamma \quad (2.25)$$

Bei der Herleitung wurde von einer gaußförmigen Linienverbreiterung ausgegangen. Diese Beziehung wurde experimentell für verschiedene Materialien und experimentelle

Verfahren in einem weiten Bereich bestätigt. Allerdings wurden dabei nur Quantenfilme in (001)-Richtung untersucht. Für (110)-Quantenfilme wurde in [Sch99] eine etwa doppelt so große Stokes-Verschiebung gemessen, die nicht plausibel erklärt werden konnte. Messungen von CEO-Quantendrähten und (001)-Quantenfilmen in derselben Arbeit stimmen hingegen gut mit Gleichung (2.25) überein.

## 2.6 Verspannte Halbleiterstrukturen

Verspannungen in einer Halbleiterstruktur führen zu einer Verbiegung und Aufspaltung der Bänder und ändern somit die elektronischen Eigenschaften. Dies kann in CEO-Quantendrähten ausgenutzt werden, um die Einschlußenergie (siehe Abschnitt 2.7) deutlich zu erhöhen. Dabei müssen allerdings die besonderen Erfordernisse beim Wachstum von Materialien mit unterschiedlichen Gitterkonstanten beachtet werden.

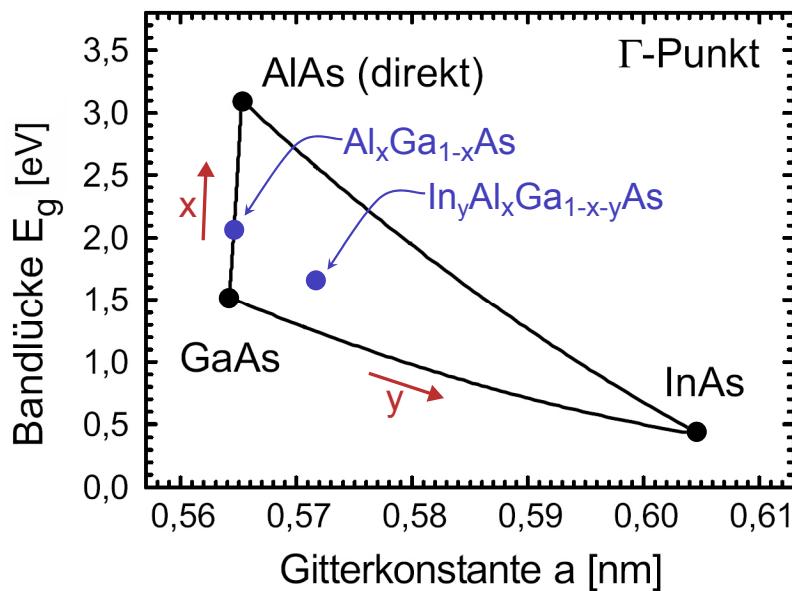
### Pseudomorphes Wachstum

Wächst man in einer Heterostruktur Schichten verschiedener Materialien aufeinander, deren Gitterkonstanten übereinstimmen, so erhält man pseudomorphes Wachstum, das heißt, die aufgewachsenen Schichten nehmen die Gitterstruktur des Substrates an, ohne daß Versetzungen oder Fehlstellen auftreten. Dies ist beispielsweise bei AlGaAs der Fall, da die Gitterkonstanten von GaAs und AlAs nahezu identisch sind (siehe Bild 2.13). In der Regel ist pseudomorphes Wachstum notwendig, um qualitativ hochwertige Strukturen zu erhalten, da Gitterfehler zu Grenzflächenrauigkeiten und Störstellen führen<sup>5</sup>.

Doch auch bei Materialien mit unterschiedlicher Gitterkonstante kann es bei dünnen Schichten zu pseudomorphem Wachstum kommen. Wächst man ein Material mit einer anderen Gitterkonstante auf ein Substrat auf (zum Beispiel InAs auf ein GaAs-Substrat), so übernimmt das neue Material zunächst die Gitterstruktur des Substrats, ist dabei jedoch verspannt. Dies führt zu einer Verspannungsenergie, die sich über die Dicke der gewachsenen Schicht aufsummert. Übersteigt die Dicke der verspannten Schicht eine bestimmte kritische Schichtdicke  $h_c$  (siehe Kapitel 4.3), dann wird die Verspannungsenergie über Versetzungen und Fehlstellen abgebaut. Es lassen sich so also verspannte Heterostrukturen pseudomorph aus Materialien mit verschiedenen Gitterkonstanten herstellen, solange die Dicken der verspannten Schichten diese kritische Schichtdicke nicht übersteigen. Bild 2.14 zeigt schematisch eine solche Struktur.

---

<sup>5</sup>Es gibt auch Anwendungen für nichtpseudomorphes Wachstum wie zum Beispiel selbstorganisierte Quantenpunkte (Abschnitt 2.2) oder relaxierte Pufferschichten [Wur08].



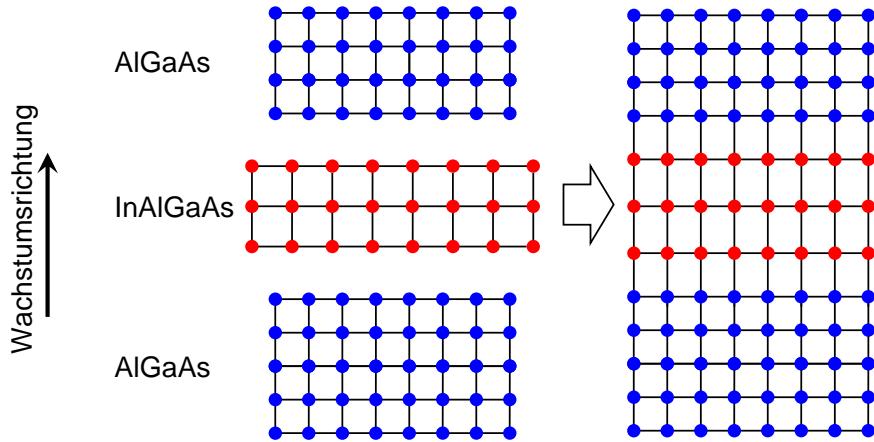
**Bild 2.13:** Bandlücke und Gitterkonstante für GaAs, InAs, AlAs und daraus gebildeten ternären und quaternären Halbleitern. Die ternären Halbleiter liegen auf den eingezeichneten Verbindungslien und die quaternären innerhalb der dreieckigen Fläche. Die leichte Krümmung der Linien resultiert aus der nichtlinearen Abhängigkeit der Bandlücke vom Legierungsverhältnis (vgl. Kapitel 3.3). Die Bandlücke ist jeweils für den  $\Gamma$ -Punkt angegeben.

Um absichtlich verspannte Strukturen herzustellen, bietet sich im GaAs-Materialsystem der Halbleiter Indiumarsenid (InAs) an, der eine größere Gitterkonstante und eine kleinere Bandlücke als GaAs besitzt. Bild 2.13 zeigt die Bandlücken und Gitterkonstanten von GaAs, AlAs und InAs. Besonders flexibel ist man bei der Verwendung des quaternären Halbleiters  $In_yAl_xGa_{1-x-y}As$ . Der Indium-Anteil  $y$  legt dabei den Grad der Verspannung fest und durch den Aluminium-Anteil  $x$  lässt sich die Bandlücke beliebig innerhalb des Dreiecks in Bild 2.13 einstellen.

Für Schichtstrukturen wie in Bild 2.14, die senkrecht zur Wachstumsrichtung translationsinvariant sind, lässt sich die Verformung relativ einfach berechnen. Die einzelnen Schichten nehmen beim pseudomorphen Wachstum die Gitterkonstante des Substrats an. Wenn sie dabei gedehnt oder gestaucht werden, findet eine Querkontraktion bzw. -dehnung statt, die durch die Poissonzahl  $\nu$  beschrieben wird:

$$\nu = -\frac{\Delta d/d}{\Delta l/l} \quad (2.26)$$

Dabei bezeichnet  $\Delta l/l$  die relative Längenänderung in der Substratebene und  $\Delta d/d$  die Dickenänderung in Wachstumsrichtung. Bei komplexeren Strukturen wie den in dieser Arbeit untersuchten CEO-Proben muß zur Berechnung der Verformungen die



**Bild 2.14:** Pseudomorphes Wachstum von Schichten mit unterschiedlichen Gitterkonstanten. Der indiumhaltigen Schicht wird dabei die Gitterkonstante des AlGaAs-Substrats aufgezwungen. Eine Kontraktion in der Substratebene führt dabei zu einer Querdehnung in Wachstumsrichtung (aus [Neu08]).

Verspannungsenergie auf einem diskreten Gitter mithilfe der Elastizitätstheorie minimiert werden.

## Elastizitätstheorie

In diesem Abschnitt wird in verkürzter Form dargestellt, wie sich Verspannungen in einem Kristall im Rahmen der klassischen Elastizitätstheorie [Lan70] beschreiben und berechnen lassen. Im darauf folgenden Abschnitt wird dann dargelegt, wie sich diese Verspannungen auf die Bandstruktur auswirken. Ausführliche Abhandlungen hierzu findet sich in [Sch05] und [Haj03].

In diesem Abschnitt kennzeichnet der Vektorpfeil einen Vektor im dreidimensionalen Ortsraum. Die zugehörigen Komponenten werden durch das entsprechende Formelzeichen ohne Pfeil dargestellt und die Koordinatenachsen durchnummeriert, also zum Beispiel  $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3)$ .

Unter dem Einfluß von Kräften können sich Form und Volumen eines Festkörpers ändern. Dabei wird jeder Körperraum von seinem ursprünglichen Ort  $\vec{x}$  zu einem neuen Platz  $\vec{x}'$  verschoben. Die Differenz wird durch den Auslenkungsvektor

$$\vec{u}(\vec{x}) = \vec{x}' - \vec{x} \quad (2.27)$$

beschrieben. Durch die Verformung ändert sich auch der Abstandsvektor  $\vec{d}$  zweier Punkte von

$$\vec{d} = \vec{x}_a - \vec{x}_b \quad (2.28)$$

zu

$$\vec{d}' = \vec{x}'_a - \vec{x}'_b \quad (2.29)$$

Für infinitesimal benachbarter Punkte lässt sich die Differenz der quadratischen Abstände dann mithilfe der Taylorentwicklung wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned} |\vec{d}'|^2 - |\vec{d}|^2 &= 2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 d_i d_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \\ &= 2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \epsilon_{ij} d_i d_j \end{aligned} \quad (2.30)$$

mit dem Verzerrungstensor

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.31)$$

Der Verzerrungstensor ist symmetrisch, dimensionslos und eine Funktion des Ortes  $\vec{x}$ . Positive Hauptdiagonalelemente drücken eine Dehnung entlang der betreffenden Koordinatenachse aus und negative eine Stauchung. Die Elemente außerhalb der Hauptdiagonalen beschreiben Scherungen, die das Volumen nicht ändern. Die Spur des Verzerrungstensors gibt die relative Änderung des Volumens an und wird als hydrostatische Verzerrung

$$\epsilon_{hyd} = Sp(\epsilon) = \epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33} \quad (2.32)$$

bezeichnet. Das Hooke'sche Gesetz lautet in der Elastizitätstheorie

$$\sigma_{ij} = \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 C_{ijkl} \epsilon_{kl} \quad (2.33)$$

Dabei werden der Spannungstensor  $\sigma_{ij}$  („Kraft“) durch den Elastizitätstensor  $C_{ijkl}$  mit dem Verzerrungstensor  $\epsilon_{kl}$  („Längenänderung“) verknüpft. Die 81 Elemente des Elastizitätstensors sind Materialkonstanten und lassen sich durch Symmetrieverlegungen auf 21 unabhängige reduzieren. Durch Berücksichtigung der Kristallsymmetrie lässt sich diese Anzahl weiter verringern. In Kristallen mit kubischer Symmetrie gibt es nur drei linear unabhängige Elemente des Elastizitätstensors, die sich zum Beispiel als  $C_{1111}$ ,  $C_{1122}$  und  $C_{1212}$  angeben lassen.

Die Verspannungsenergie pro Volumeneinheit des Kristalls lautet

$$E_F = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} \quad (2.34)$$

Um die Verformung eines Kristalls durch innere oder äußere Spannungen zu berechnen, muß der Gleichgewichtszustand gefunden werden, bei dem die Verspannungsenergie des

gesamten Kristalls  $\int E_F dV$  minimal ist. Durch Variationsrechnung läßt sich zeigen, daß dieser Zustand erreicht ist, wenn für alle Punkte  $\vec{x}$  gilt:

$$\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \sigma_{ij}(\vec{x})}{\partial x_j} = 0 \quad \text{für } i = 1, 2, 3 \quad (2.35)$$

Für ein diskretes Gitter mit  $N$  Gitterpunkten ergibt sich hieraus ein System von  $3N$  Gleichungen, aus denen sich dann für jeden Gitterpunkt die Auslenkung  $\vec{u}(\vec{x})$  berechnen läßt.

## Einfluß von Verspannungen auf die Bandstruktur

Die so berechneten Auslenkungen der Atome des Kristallgitters haben einen wesentlichen Einfluß auf die Bandstruktur. Für Halbleiter mit Zinkblendestruktur kann dieser im Rahmen der  $k \cdot p$ -Störungstheorie durch Hinzunahme von sogenannten linearen Deformationspotentialen nach Bir und Pikus berechnet werden. Es ergeben sich dabei zusätzliche Terme im Hamiltonoperator, die zur Verschiebung und Aufspaltung der Valenz- und Leitungsbänder führen. Die genaue Herleitung findet sich in [Bir74]. Im Folgenden werden einige Konsequenzen für die Bandstruktur vorgestellt.

Für Elektronen am  $\Gamma$ -Punkt besteht ein proportionaler Zusammenhang zwischen der Verschiebung des Leitungsbandes  $\Delta E_C$  und der relativen Volumenänderung durch Verspannungen:

$$\Delta E_c = a_c \frac{\Delta V}{V} = a_c \text{Sp}(\epsilon) \quad (2.36)$$

Die empirisch bestimmte Proportionalitätskonstante ist das sogenannte absolute Deformationspotential des Leitungsbands  $a_c$ . Für Elektronen jenseits des  $\Gamma$ -Punkts kommt es zusätzlich zu einer Aufspaltung des Leitungsbandes in Abhängigkeit von  $\vec{k}$ .

Für das Valenzband zeigen die Berechnungen in [Bir74], daß das analog definierte absolute Deformationspotential des Valenzbands  $a_v$  nicht ausreicht, um die Auswirkungen der Verspannungen widerzugeben. Zwei weitere Parameter, die sogenannten uniaxialen Deformationspotentiale  $b$  und  $d$  sind hier notwendig, um die Auswirkungen von Scherspannungen zu beschreiben, die die Entartung von schweren und leichten Löchern am  $\Gamma$ -Punkt aufheben.

## Piezoelektrische Polarisation

Halbleiter mit Zinkblendestruktur besitzen ionische Bindungen und weisen kein Inversionszentrum auf. Sie sind daher piezoelektrisch. Unter dem Einfluß von Verspannungen kommt es zu Ladungsverschiebungen, die zu einer makroskopischen Polarisation  $\vec{P}$

führen. Die Komponenten von  $\vec{P}$  sind über die piezoelektrischen Koeffizienten  $e_{ijk}$  mit dem Verzerrungstensor verknüpft [Vur01]:

$$P_i = \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 e_{ijk} \epsilon_{jk} \quad (2.37)$$

Vereinfacht gesagt ist die Polarisation also proportional zur Verspannung. Durch Symmetrieverlegungen ergibt sich für Zinkblendestrukturen, daß nur ein einzelner der piezoelektrischen Konstanten wirklich unabhängig ist. Dies führt zu dem vereinfachten Ausdruck

$$\vec{P}(\vec{x}) = 2 e_{123} \begin{pmatrix} \epsilon_{23} \\ \epsilon_{31} \\ \epsilon_{12} \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

Hier treten nur die Elemente des Verzerrungstensors auf, die außerhalb der Hauptdiagonale liegen. Für die piezoelektrische Polarisation sind also nur Scherungen, nicht aber Dehnungen oder Stauchungen relevant. Die piezoelektrische Polarisation führt zu Raumladungsdichten

$$\rho_{piezo}(\vec{x}) = -\nabla \cdot \vec{P}(\vec{x}) = -2 e_{123} \left( \frac{\partial}{\partial x_1} \epsilon_{23} + \frac{\partial}{\partial x_2} \epsilon_{31} + \frac{\partial}{\partial x_3} \epsilon_{12} \right), \quad (2.39)$$

die bei der Berechnung der Bandverläufe berücksichtigt werden müssen.

## 2.7 Einschlußenergie

Eine der wichtigsten Eigenschaften von Quantenfilmen, -drähten und -punkten ist deren Einschlußenergie  $E_c$  (engl.: *confinement energy*), auch Einschlußpotential genannt. Hierunter versteht man die Energie, die man einem Elektron-Loch-Paar zuführen muß, damit es die Struktur verlassen kann. Eine große Einschlußenergie ist nötig, um die Vorteile von niederdimensionalen Strukturen voll nutzen zu können. Ist sie zu klein, geht bei höheren Temperaturen oder elektrischen Feldern der Ladungsträgereinschluß verloren oder die Lebens- und Speicherdauern von Ladungsträgern werden zu kurz. Daher sind große Einschlußenergien insbesondere für Anwendungen in der Quanteninformationsverarbeitung und für optoelektronische Bauelemente bei Zimmertemperatur eine entscheidende Voraussetzung.

Für Quantenfilme ist die Einschlußenergie die Differenz zwischen den Übergangsentgien der gebundenen Zuständen im Quantenfilm  $E_{QW}$  (wie in Formel 2.13 definiert) und der Bandlücke in der Barriere  $E_{Barr}$ :

$$E_{c,QW} = E_{Barr} - E_{QW} \quad (2.40)$$

Für CEO-Quantendrähte ist der Sachverhalt etwas komplizierter. Bei höheren Temperaturen sind die Elektron-Loch-Paare überwiegend nicht als Exzitonen gebunden. Hier ist die Einschlußenergie für Elektronen  $E_c^e$  die Differenz zwischen dem Quantendrahtzustand und demjenigen angrenzenden Quantenfilm, der für Elektronen die niedrigere Energie hat. Entsprechendes gilt für die Einschlußenergie für Löcher  $E_c^h$ :

$$\begin{aligned} E_{c,QWR}^e &= \min(E_{(001)QW}^e, E_{(110)QW}^e) - E_{QWR}^e \\ E_{c,QWR}^h &= -\min(E_{(001)QW}^h, E_{(110)QW}^h) + E_{QWR}^h \end{aligned} \quad (2.41)$$

Dabei kennzeichnen  $E^e$  und  $E^h$  die Energie des jeweiligen Elektron- bzw. Lochzustands. Die gesamte Einschlußenergie ist die Summe dieser beiden, wobei zu beachten ist, daß es möglicherweise energetisch am günstigsten ist, wenn Elektron und Loch in unterschiedliche Quantenfilme abwandern:

$$\begin{aligned} E_{c,QWR} &= E_{c,QWR}^e + E_{c,QWR}^h \\ &= \min(E_{(001)QW}^e, E_{(110)QW}^e) - \min(E_{(001)QW}^h, E_{(110)QW}^h) - E_{QWR} \end{aligned} \quad (2.42)$$

Bei tiefen Temperaturen liegen die Ladungsträger andererseits hauptsächlich im Form von gebundenen Exzitonen vor. Dabei gibt es grundsätzlich zwei Emissionsmechanismen für die Ladungsträger: Entweder das Exziton dissoziert und die Ladungsträger werden wie oben beschrieben emittiert. In diesem Fall ist das Einschlußpotential durch Gleichung (2.42) gegeben und die in  $E_{QWR}$  enthaltene Exzitonen-Bindungsenergie  $E_X$  muß zusätzlich aufgebracht werden, damit die Ladungsträger den Quantendraht verlassen können. Auf der anderen Seite ist es auch möglich, daß das Exziton in gebundener Form in denjenigen angrenzenden Quantenfilm wandert, der die niedrigere Exzitonen-Bindungsenergie  $E_X$  aufweist. In diesem Fall ist die Einschlußenergie gegeben durch

$$E_{c,QWR} = \min(E_{(001)QW}, E_{(110)QW}) - E_{QWR} \quad (2.43)$$

In diesem Fall ist keine Energie zum Dissoziieren des Exzitons nötig, aber der Endzustand, in dem beiden Ladungsträger im gleichen Quantenfilm sind, ist möglicherweise energetisch ungünstiger.

Welcher dieser zwei Emissionsmechanismen dominiert, hängt neben der Temperatur vom Verlauf des Leitungs- und Valenzbandes und  $E_X$  ab. Bei den in dieser Arbeit untersuchten CEO-Strukturen im GaAs-Materialsystem ist  $E_X$  groß gegenüber der Bandverschiebung von (001)- und (110)-Quantenfilmen, so daß bei niedrigen Temperaturen der zweite Emissionsmechanismus nach Gleichung (2.43) dominiert.

Die Einschlußenergie in Quantenpunkten ergibt sich analog dazu als Differenz zwischen den Quantenpunkt- und den entsprechenden Quantendrahtzuständen. Auch hier

sind grundsätzlich zwei verschiedene Emissionsmechanismen mit aufgetrennten oder gebundenen Elektron-Loch-Paaren möglich. Für die in dieser Arbeit untersuchten CEO-Strukturen dominiert wiederum bei tiefen Temperaturen die Emission von Exzitonen, so daß die Einschlußenergie durch

$$E_{c,QD} = \min(E_{(001)QWR}, E_{(110)QWR}, E_{(1\bar{1}0)QWR}) - E_{QD} \quad (2.44)$$

gegeben ist.

Die Optimierung der Einschlußenergie ist ein zentrales Thema dieser Arbeit. In Kapitel 6 wird zunächst anhand von Simulationen systematisch untersucht, welchen Einfluß die Strukturgrößen und Materialien von CEO-Quantendrähten und -punkten dabei haben und verschiedene Konzepte zur Erhöhung der Einschlußenergie verglichen. In Kapitel 8 werden dann experimentelle Messungen an derartigen Proben präsentiert. Im nun folgenden Abschnitt wird zunächst ein Überblick über die bisherige experimentelle Forschung an CEO-Quantendrähten und -punkten gegeben. Eine Übersicht über die bisherigen theoretischen Untersuchungen gibt Kapitel 6.1.

## Historische Entwicklung

Kurz nach dem ersten erfolgreichen Einsatz des CEO-Verfahren zur Herstellung von zweidimensionalen Elektronengasen [Pfe90] wurde es von D. Gershoni et. al. verwendet, um verspannungsinduzierte Quantendrähte in einem Quantenfilm mit einer Einschlußenergie von 21 meV herzustellen [Ger90]. Die ersten T-förmigen Quantendrähte wurden 1992 von Alejandro Goñi et. al. verwirklicht und wiesen eine Einschlußenergie von 28 meV auf [Gon92]. Kurz darauf realisierten Werner Wegscheider et. al. den ersten Quantendraht-Laser auf Basis des CEO-Verfahrens [Weg93]. Das aktive Medium bestand hier aus 22 parallelen  $7 \times 7 \text{ nm}^2$  großen T-förmigen GaAs-Quantendrähten, die in  $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$  eingebettet waren. Dabei wurde eine Einschlußenergie von 17 meV erzielt.

Durch eine weitere Verkleinerung der Querschnittsfläche auf  $5,5 \times 5,3 \text{ nm}^2$  und der Verwendung von AlAs-Barrieren konnten Takao Someya et. al. im Jahr 1995 eine Einschlußenergie von 35 meV erzielen [Som96]. Es stellte sich heraus, daß sich durch asymmetrische Kreuzungen Quantendrähte mit wesentlich größerem Ladungsträgereinschluß herstellen lassen. Dabei ist der (001)-Quantenfilm breiter als der überwachsene und beinhaltet zur Angleichung der Energieniveaus einen gewissen Anteil Aluminium. H. Gislason et. al. berichten 1996 von Quantendrähten, die auf diese Weise an einer stark asymmetrischen Kreuzung eines 12 nm breiten  $\text{Al}_{0,14}\text{Ga}_{0,86}\text{As}$ -Quantenfilms mit einer 2,5 nm breiten GaAs-Schicht entstehen und eine Einschlußenergie von 54 meV aufweisen [Gis96, Lan96].

Später wurde untersucht, inwieweit sich die Einschlußenergie durch verspannte Strukturen weiter erhöhen läßt. Hidefumi Akiyama *et. al.* berichteten im Jahr 1998 von verspannten T-förmigen Quantendrähten, die sich an der  $3,7 \times 3,4 \text{ nm}^2$  großen Kreuzung von zwei  $\text{In}_{0,17}\text{Ga}_{0,83}\text{As}$ -Quantenfilmen bilden [Aki98, Yos98]. Die Autoren führen die erhöhte Einschlußenergie von 34 meV sowohl auf die verkleinerte Strukturgröße als auch den Einfluß der Verspannungen zurück. Simulationen von Marius Grundmann im gleichen Jahr [Gru98] an vergleichbaren Strukturen legen jedoch nahe, daß die Verspannungen bei diesen Proben nicht zu einer Erhöhung der Einschlußenergie führen.

Robert Schuster *et. al.* stellten im Jahr 2004 Untersuchungen an CEO-Quantendrähten vor, die nicht durch eine T-förmige Kreuzung, sondern allein durch Verspannungen gebildet werden [Sch04a]. Im Gegensatz zu den oben erwähnten früheren Arbeiten von D. Gershoni *et. al.* stellt hier die Verspannungsschicht aus  $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$  eine Barriere dar, so daß keine zusätzliche Barriereforschicht notwendig ist. Hierdurch ließen sich Einschlußenergien von bis zu 52 meV erzielen.

Die ersten CEO-Quantenpunkte von Werner Wegscheider *et. al.* im Jahr 1997 basierten auf Quantenfilmen mit einer Breite von je 7 nm und zeigten eine Einschlußenergie von 8 bis 10 meV [Weg97]. In der gleichen Arbeitsgruppe wurden kurz darauf Quantenpunkte mit kleineren Strukturgrößen und Einschlußenergien von 7 bis 15 meV hergestellt [Sch99]. Seitdem gab es wenig Fortschritte auf diesem Gebiet, vermutlich weil das dabei verwendete Verfahren des zweifachen Überwachens von Spaltflächen technisch sehr anspruchsvoll ist. Anfang 2009 wurden vielversprechende Ergebnisse zu CEO-Quantenpunkten von Johanna Rössler veröffentlicht [Roe09], bei denen mit der gleichen nominellen Probenstruktur wie in [Weg97] Einschlußenergien von 21 meV erzielt wurden. Leider wurden an diesen Strukturen keine weiterführenden Messungen durchgeführt, um diesen Unterschied zu erklären.

Zusammenfassend sind also drei verschiedene Konzepte bekannt, um die Einschlußenergie in CEO-Quantenstrukturen zu erhöhen: die Verkleinerung der Strukturgröße, die Verwendung von asymmetrischen Strukturen und der Einsatz von Verspannungen. In Kapitel 6 wird untersucht, inwieweit sich durch eine Kombination dieser Verfahren das Einschlußpotential optimieren läßt.

## 2.8 Quantendrahtlaser

Im Rahmen dieser Arbeit wurden als konkrete Anwendung des CEO-Verfahrens Quantendrahtlaser hergestellt und charakterisiert. In diesem Abschnitt werden die nötigen Grundlagen kurz zusammengefaßt. Eine ausführliche Einführung findet sich in vielen

Lehrbüchern zur Laserphysik wie beispielsweise [Eic06] oder [Kne99].

Ein Laser besteht im Wesentlichen aus drei Komponenten: einem aktiven Medium, in dem die Lichtverstärkung stattfindet, einem optischen Resonator für die Strahlungsrückkopplung und einem Pumpmechanismus, der die Besetzungsinvolution im aktiven Medium erzeugt. Diese ist notwendig, damit die stimulierte Emission gegenüber der Absorption überwiegt und so Lichtverstärkung stattfinden kann. Der Resonator ist in der Regel notwendig, damit das Licht das aktive Medium mehrfach durchläuft, da die Lichtverstärkung während eines Durchgangs meistens nicht ausreichend ist.

Damit Laserbetrieb stattfindet, ist es erforderlich, daß das Licht während eines Umlaufs im Resonator tatsächlich verstärkt wird. Dies ist der Fall, wenn die Lichtverstärkung im aktiven Medium die Verluste im Medium und an den Resonatorspiegeln mehr als aufwiegt. Hierfür läßt sich folgende Schwellenbedingung angeben, oberhalb derer Lasertätigkeit stattfindet:

$$e^{\gamma L} > e^{-\alpha_i L} \sqrt{R_1 R_2} \quad (2.45)$$

Dabei bezeichnet  $e^{-\alpha_i L}$  die gesamte Absorption und  $e^{\gamma L}$  die gesamte Verstärkung bei einem Durchgang durch den Resonator der Länge  $L$ . Der Verstärkungskoeffizient  $\gamma$  wird entsprechend analog zum Absorptionskoeffizienten  $\alpha_i$  definiert<sup>6</sup>. Er hängt in erster Linie vom verwendeten aktiven Medium und der Pumpleistung ab.  $\sqrt{R_1 R_2}$  ist die mittlere Reflektivität der Spiegel. Diese Größen sind allgemein wellenlängenabhängig. Eine äquivalente Formulierung der Schwellenbedingung lautet [Kne99]

$$\gamma > \alpha_i - \frac{1}{2L} \ln(R_1 R_2) \quad (2.46)$$

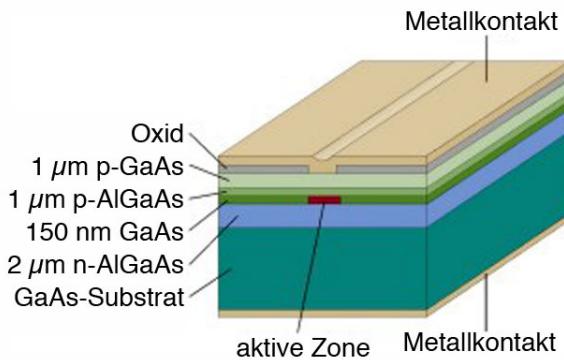
Die modale Verstärkung  $g = \gamma - \alpha_i$  (engl.: *modal gain*) kann unterhalb der Laserschwelle mit der Methode von Hakki und Paoli [Hak75, Sch03b] gemessen werden. Hier wirkt der Resonator als Fabry-Perot-Etalon und moduliert das Lumineszenz-Spektrum. Beispiele für derartige Spektren finden sich in Bild 9.5 in Kapitel 9. Es ergibt sich folgender Zusammenhang zwischen der modalen Verstärkung  $g$  und den Intensitätsmaxima  $p_{max}$  und -minima  $p_{min}$  dieser Modulation:

$$g(\lambda) = \frac{1}{L} \ln \left( \frac{\sqrt{p_{max}/p_{min}} - 1}{\sqrt{p_{max}/p_{min}} + 1} \right) - \frac{1}{2L} \ln(R_1 R_2) \quad (2.47)$$

Im Grenzfall der Laserschwelle gilt  $p_{min} = 0$ . Mit dieser Formel kann also unter anderem anhand des Emissionsspektrums ermittelt werden, ob die Laserschwelle bereits überschritten wurde.

---

<sup>6</sup>Die in diesem Abschnitt eingeführten Bezeichnungen werden in der Literatur leider nicht einheitlich verwendet, so daß bei Vergleichen stets auf die jeweiligen Definitionen zu achten ist.



**Bild 2.15:** Schematische Darstellung eines Halbleiterlasers mit einem AlGaAs-Wellenleiter und einer p-n-Struktur als Pumpmechanismus (nach einer Veröffentlichung der Firma Veeco)

Laser können kontinuierlich (engl.: *continuous wave*, Abk.: cw) oder gepulst betrieben werden. Im gepulsten Betrieb ist es oft einfacher, die Laserschwelle zu überschreiten. Zudem können während der kurzen Pulsdauer deutlich höhere Ausgangsleistungen erreicht werden.

## Halbleiterlaser

Bei Halbleiterlasern besteht das aktive Medium aus einem Halbleiter mit direkter Bandlücke. Der Laserübergang entspricht dabei der Rekombination eines Elektron-Loch-Paares<sup>7</sup>. Der Resonator wird durch die Endflächen des Halbleiterkristalls gebildet. Aufgrund des hohen Unterschieds der Brechzahlen verfügen diese Oberflächen schon von sich aus über eine ausreichende Reflektivität von  $R \approx 0,3$  [Kne99], die durch metallische Beschichtung noch weiter erhöht werden kann. Der Pumpmechanismus besteht üblicherweise aus einer pn-Diodenstruktur, in die die benötigten Elektronen und Löcher direkt durch elektrischen Strom in Durchlaßrichtung injiziert werden (Bild 2.15).

Die Hauptanwendungen von Halbleiterlasern liegen in der Informations- und Meßtechnik. Vorteile sind die direkte Anregung mit elektrischem Strom, der hohe Wirkungsgrad (über 50 % möglich), kleine Abmessungen (mm- bis  $\mu\text{m}$ -Bereich), die Möglichkeit der direkten Modulation bis über 10 GHz, die gute Integrierbarkeit mit anderen Baulementen und die kostengünstige Massenproduktion. Zu den Nachteilen zählen die vergleichsweise schlechte Strahlqualität und geringere Frequenzstabilität.

Wie oben erwähnt bilden die Endflächen des Halbleiterkristalls den Resonator und sind somit planparallel. Eine optische Mode in einem solchen Resonator ist von sich aus jedoch nicht stabil und führt zu großen Beugungsverlusten. Daher wird in der Regel ein Wellenleiter eingesetzt, der den seitlichen Austritt von Licht verhindert, zu einer stabilen transversalen Mode im Resonator führt und die Maxima dieser Mode möglichst gut auf das aktive Medium konzentriert. Der optische Füllfaktor (engl.: *confinement*

<sup>7</sup>Eine Ausnahme bilden Quantenkaskadenlaser, die in dieser Arbeit nicht weiter behandelt werden.

*factor)*

$$\Gamma = \frac{\int_{akt.Zone} |\vec{E}|^2 d\vec{A}}{\int |\vec{E}|^2 d\vec{A}} \quad (2.48)$$

mit der elektrischen Feldstärke  $\vec{E}$  und der Querschnittsfläche  $\vec{A}$  ist ein Maß für den Überlapp zwischen aktiver Zone und optischer Mode. Je größer der Füllfaktor ist, desto höher ist die modale Verstärkung im Laser.

Die Verwendung von niederdimensionalen Strukturen als aktives Medium in Halbleiterlasern bringt entscheidende Vorteile. Da sich mit abnehmender Dimensionalität die besetzbaren Zustände vermehrt an der Bandkante konzentrieren (Bild 2.4) und die Stärke des optischen Übergangs nach Gleichung (2.14) von der Zustandsdichte abhängt, führt dies zu einer höheren Effizienz und einer Reduzierung des Schwellstrom. Die Wellenlänge des optischen Übergangs ist in niederdimensionalen Strukturen von den Quantisierungsenergien abhängig, also durch die Strukturgeometrie mitbestimmt. Hieraus ergeben sich eine höhere Frequenzstabilität, eine niedrigere Temperaturabhängigkeit und eine höhere Lebensdauer. Außerdem decken die möglichen Emissionswellenlängen einen größeren Spektralbereich ab.

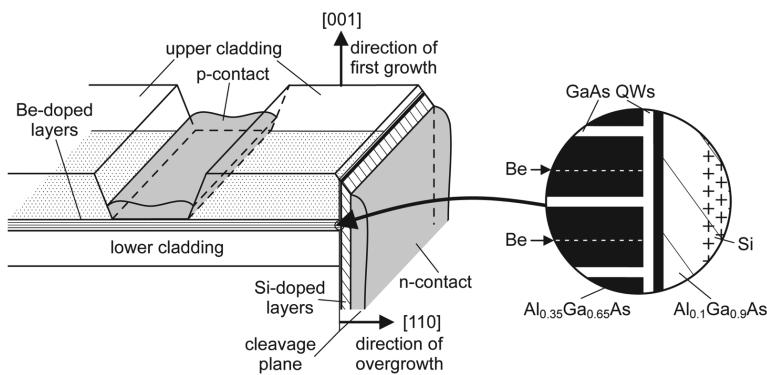
Aus diesem Grund sind heutige Halbleiterlaser in der Regel Quantenfilmlaser und werden in der Massenproduktion durch MOCVD hergestellt. An einer weiteren Verbesserung durch Verwendung von Quantendrähten und Quantenpunkten wird geforscht. Im Fall der Quantenpunkte werden hierzu selbstorganisierte Quantenpunkte verwendet [Bim99], da zum Einsatz als aktives Lasermedium sehr viele davon nötig sind. In dieser Arbeit werden Quantendrahlaser untersucht, die auf Basis des Überwachsens von Spaltflächen hergestellt werden.

## CEO-Quantendrahlaser

Die erste stimulierte Emission aus Quantendrähten wurde zwar schon 1989 beobachtet [Kap89], allerdings fand hierbei der Laserübergang nur in höheren Subbändern statt. 1993 gelang es Werner Wegscheider *et. al.* erstmals [Weg93], in einer Struktur mit 22 parallelen  $7 \times 7 \text{ nm}^2$  CEO-Quantendrähten Lasertätigkeit zu erreichen. Die Quantendrahte wiesen eine Einschlußenergie von 17 meV auf. Die gemessene Emissionswellenlänge entspricht hier der Rekombination von Exzitonen in den Quantendrähten. Dies legt den Schluß nahe, daß in den untersuchten eindimensionalen Strukturen der Übergang zum Elektron-Loch-Plasma erst bei deutlich höheren Ladungsträgerkonzentrationen als bei entsprechenden zwei- und dreidimensionalen Strukturen stattfindet.

Zehn Jahre später stellten Hidefumi Akiyama *et. al.* Messungen an einer verbesserten Laserstruktur mit 20 asymmetrischen  $14 \times 6 \text{ nm}^2$  Quantendrähten vor [Aki03,

Aki04]. Da die Energien der angrenzenden Quantenfilme nicht optimal angeglichen waren, ergab sich nur eine geringfügig erhöhte Einschlußenergie von 21 meV gegenüber der früheren Struktur mit 17 meV. Um die Grenzflächen des überwachsenen Quantenfilms zu glätten, setzten Akiyama *et. al.* ein neu entwickeltes Annealing-Verfahren ein, das zu sehr scharfen optischen Übergängen führte. In dieser Struktur zeigt die Laserrmission eine deutliche Rotverschiebung gegenüber dem Exzitonen-Übergang von mehr als 5 meV. Diese wird darauf zurückgeführt, daß die Rekombination nicht aus exzitonischen Zuständen, sondern aus einem Elektron-Loch-Plasma stattfindet, dessen Energie durch die Bandlücken-Renormalisierung reduziert ist. Bislang konnte nicht geklärt werden, warum die Laseremission offenbar hier aus einem Elektron-Loch-Plasma und bei der Probe aus [Weg93] aus exzitonischen Zuständen erfolgt. In der Arbeitsgruppe von Akiyama gelang es darüber hinaus, in einer ähnlichen Laserstruktur mit nur einem einzelnen CEO-Quantendraht eine Lasertätigkeit zu erreichen [Hay02].

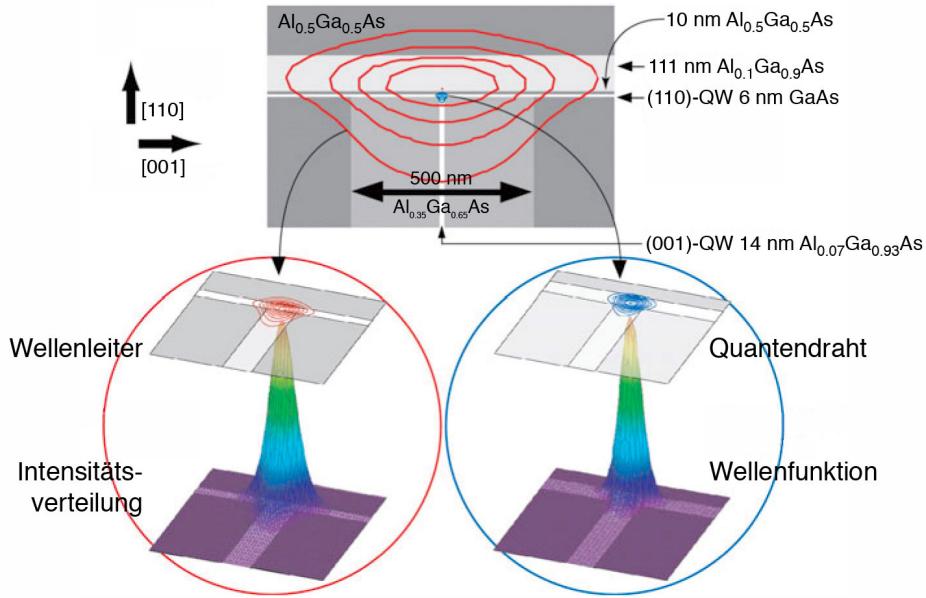


**Bild 2.16:** Elektrisch gepumpter Quantendraht-Laser. Die Injektion von Ladungsträgern mithilfe einer p-n-Diodenstruktur ist in diesem Fall vergleichsweise aufwändig, da die aktive Zone sehr nahe an der Kante der Probe liegt. (aus [Weg94])

Die bisher genannten Quantendrahlaser werden durch optische Anregung gepumpt. Der erste elektrisch gepumpte Quantendrahlaser wurde 1994 von Werner Wegscheider *et. al.* auf der Basis der früheren optisch gepumpten Struktur hergestellt. Der schematische Aufbau ist in Bild 2.16 gezeigt. Das aktive Medium besteht wiederum aus 15 parallelen  $7 \times 7 \text{ nm}^2$  CEO-Quantendrähten, die jetzt aber in eine Diodenstruktur mit zueinander senkrechten p- und n-Schichten eingebettet sind. Mit dieser Probe ergab sich ein Schwellstrom von 0,4 mA in flüssigem Helium.

2007 wurden Untersuchungen an einer Variante dieser Struktur mit asymmetrischen  $14 \times 6 \text{ nm}^2$  Quantendrähten vorgestellt [Oka07]. Trotz der niedrigen Einschlußenergie von 12 meV konnte hier ein Einzelmoden-Laserbetrieb bei Temperaturen von 5 bis 110 K erreicht werden. Der differenzielle Quantenwirkungsgrad und der Schwellstrom betrugen im besten Fall bei 100 K allerdings nur 0,9 % bzw. 2,1 mA, was auf

eine schlechte Strominjektion hindeutet. Etwa zur gleichen Zeit wurde ein alternatives Konzept zur Strominjektion mit parallelen p- und n-dotierten Schichten realisiert [Liu07], das bei 30 K zu einem differenziellen Quantenwirkungsgrad von 12 % und einem Schwellstrom von 0,3 mA führte.



**Bild 2.17:** Prinzip des Wellenleiters beim Quantendrahtlaser. Rechts ist der T-förmige Quantendraht mitsamt der Elektronen-Wellenfunktion dargestellt. Links analog dazu der Wellenleiter mit der sich ergebenden Intensitätsverteilung, der den Quantendraht umgibt. Die dargestellte Struktur entspricht dem in [Hay02] vorgestellten Einzelquantendrahtlaser (nach [Aki04]).

Der Wellenleiter wird in CEO-Quantendrahtlasern durch Schichten von AlGaAs mit unterschiedlichem Aluminiumanteil gebildet. Dazu werden die T-förmigen Quantendrahte in einen ebenfalls T-förmigen Wellenleiter eingebettet, der nach dem gleichen Prinzip des Überwachsens von Spaltflächen hergestellt wird. In Bild 2.17 ist der prinzipielle Aufbau dargestellt. Weitere Details zur Berechnung von Wellenleitern für CEO-Strukturen finden sich in [Kam07, Her07, Sch03a].

# Kapitel 3

## Simulationsverfahren

In dieser Arbeit werden die elektronischen Eigenschaften der untersuchten Strukturen mit dem Programm nextnano3 [Bir09] berechnet. Diese Software wurde in der Arbeitsgruppe von Peter Vogl im Walter-Schottky-Institut in Garching entwickelt und wird zur Zeit von Stefan Birner erweitert und gepflegt.

Nextnano3 ist ein Simulationsprogramm, um die elektronische Struktur von dreidimensionalen Heterostrukturen quantenmechanisch zu berechnen. Die Software ist sehr umfangreich und kann Verspannungen, anisotrope effektive Massen, piezoelektrische Ladungen, Exzitonen, Dotierungen, angelegte Spannungen und Ströme, verschiedene Punkte im reziproken Raum und vieles mehr berücksichtigen. Die folgende Einführung beschränkt sich dabei auf die Aspekte, die für die in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen relevant sind.

### 3.1 Berechnung der Bandstruktur

Da die zugrundeliegenden Gleichungen viel zu komplex sind, um sie für alle Atome einer Halbleiterstruktur einzeln auszurechnen, muß eine Reihe von Vereinfachungen und Näherungen durchgeführt werden, um die elektronischen Eigenschaften der Strukturen zu berechnen. Grundsätzlich unterscheidet man zwischen atomistischen und Kontinuumsansätzen. Zu ersteren gehören die *Tight-Binding*- und die Pseudopotential-Methode [Yu96, Har05]. Diese Modelle geben die Kristallstruktur besonders gut wieder, sind aber sehr rechenintensiv. Zu den Kontinuumsansätzen gehört insbesondere die Effektive-Masse-Näherung. Hierbei werden nicht einzelne Atome berücksichtigt, sondern die Eigenschaften des Kristalls werden auf ein frei gewähltes Gitter abgebildet. Die Schrödinger- und Poisson-Gleichung werden dann für jeden Gitterpunkt gelöst. Dieses Verfahren hat den Vorteil, daß andere Berechnungen wie Ladungs- und Stromdichten oder Verspannungen, die auf Kontinuumsgleichungen basieren, auf denselben

Gitter selbstkonsistent berechnet werden können.

In der Einband-Näherung wird dabei der Bandverlauf im  $\vec{k}$ -Raum durch eine Parabel angenähert, deren Krümmung durch die effektive Masse  $m^*$  beschrieben wird. Für das s-artige Leitungsband führt dieses Verfahren oft zu guten Ergebnissen. Das p-artige Valenzband lässt sich hierdurch allerdings oft nur unzureichend genau beschreiben. In diesem Fall muß die Mehrband-Effektive-Masse-Näherung verwendet werden, die zwar deutlich aufwändiger ist, aber auch die Kopplung zwischen den Bändern berücksichtigt. Diese Methode wird oft auch k·p-Theorie genannt. Im Folgenden werden die Herleitung skizziert und die wichtigsten Formeln angegeben. Eine besonders gut verständliche Einführung findet sich in [And04] und eine ausführliche Behandlung in [Har05] sowie in den darin zitierten Werken.

Die Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$\left( \frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right) \psi_n(\vec{r}) = E_n \psi_n(\vec{r}) \quad (3.1)$$

in einem periodischen Potential  $V(\vec{r} + \vec{a}) = V(\vec{r})$  sind Bloch-Funktionen

$$\psi_n(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_n(\vec{k}, \vec{r}) \quad (3.2)$$

Setzt man diese in die Schrödinger-Gleichung ein, ergibt sich

$$\left( \frac{p^2}{2m_0} + \frac{\hbar k \cdot p}{m_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right) u_n(\vec{k}, \vec{r}) = E_n(\vec{k}) u_n(\vec{k}, \vec{r}). \quad (3.3)$$

Angenommen, diese Gleichung ist für einen Punkt  $k_0$  im  $\vec{k}$ -Raum gelöst, bei dem ein Minimum bzw. Maximum im entsprechenden Band vorliegt (man denke im Fall von GaAs an den  $\Gamma$ -Punkt). Die Lösungen  $u_n(\vec{k}_0, \vec{r})$  bilden dann eine vollständige Basis, in der sich die Lösungen für alle anderen Punkte im  $\vec{k}$ -Raum darstellen lassen:

$$u_n(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{\mu} c_{n,\mu}(\vec{k} - \vec{k}_0) u_{\mu}(\vec{k}_0, \vec{r}) \quad (3.4)$$

Schreibt man  $\vec{k}$  in Gleichung (3.3) als Summe von  $\vec{k}_0$  und  $\vec{k} - \vec{k}_0$ , so ergibt sich

$$\left( H_0 + \frac{\hbar(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{p}}{m_0} + \frac{\hbar^2(k^2 - k_0^2)}{2m_0} \right) u_n(\vec{k}, \vec{r}) = E_n(\vec{k}) u_n(\vec{k}, \vec{r}) \quad (3.5)$$

mit dem konstanten Anteil des Hamilton-Operators

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_0} + \frac{\hbar \vec{k}_0 \cdot \vec{p}}{m_0} + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_0} + V(\vec{r}). \quad (3.6)$$

Setzt man Gleichung (3.4) in 3.5 ein, multipliziert beide Seiten mit  $u_\nu(\vec{k}_0, \vec{r})$  und integriert über die Einheitszelle, erhält man die Eigenwertgleichung in Matrixform

$$\sum_{\mu} \underbrace{\left[ \left( E_{\mu}(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2(k^2 - k_0^2)}{2m_0} \right) \delta_{\nu,\mu} + \frac{\hbar(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{p}_{\nu,\mu}}{m_0} \right]}_{H_{\nu,\mu}} c_{n,\nu} = E_n(\vec{k}) c_{n,\nu} \quad (3.7)$$

mit dem Impulsoperator

$$\vec{p}_{\nu,\mu} = \int u_{\nu}^*(\vec{k}_0, \vec{r}) \vec{p} u_{\mu}(\vec{k}_0, \vec{r}) d\vec{r} \quad (3.8)$$

Die eckige Klammer in Gleichung (3.7) beinhaltet die Matrixelemente des Hamiltonoperators  $H_{\nu,\mu}$ . Bis zu diesem Punkt wurden keine Näherungen durchgeführt und alle Bänder sind über  $\vec{p}_{\nu,\mu}$  miteinander gekoppelt. Wären alle Bandkantenenergien  $E_{\mu}(\vec{k}_0)$  und Matrixelemente des Impulsoperators  $\vec{p}_{\nu,\mu}$  bekannt und verfügte man über sehr viel Rechenkapazität, könnte man also die vollständige Bandstruktur exakt berechnen. In der Praxis ist dies leider nicht möglich. Daher werden zur Lösung verschiedene Näherungsverfahren eingesetzt.

## Einband-Näherung

Im einfachsten Fall werden von Gleichung (3.7) nur die Hauptdiagonalelemente ( $\nu = \mu$ ) berechnet und alle Kopplungen zwischen den Bändern vernachlässigt. Die Energieniveaus ergeben sich dann zu

$$E_{n,\vec{k}} = E_{n,\vec{k}_0} + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i,j} \frac{1}{m_{ij}^*} (\vec{k} - \vec{k}_0)_i (\vec{k} - \vec{k}_0)_j \quad (3.9)$$

mit dem effektiven Massetensor  $m_{ij}^*$ . Dies entspricht der Einband-Effektive-Masse-Näherung mit parabolischem Bandverlauf. Der Einfluß der anderen Bänder ist hier näherungsweise in der effektiven Masse enthalten. Der effektive Massetensor hat gegenüber einer skalaren effektiven Masse den Vorteil, daß auch anisotrope Bandverläufe, wie sie beispielsweise im Valenzband bei GaAs vorliegen, beschrieben werden können.

Diese Näherung liefert allgemein gute Ergebnisse für das Leitungsband und ist auch für das Valenzband im Volumenkristall brauchbar. In Heterostrukturen hingegen ist das Valenzband oft eine Mischung aus mehreren Bändern des Volumenkristalls. Die Wechselwirkungen zwischen den Bändern werden jedoch in der Einband-Näherung nicht berücksichtigt, was hier zu deutlich schlechteren Ergebnissen führt.

## 6-Band-k·p-Rechnung

Bei der k·p-Methode werden in Gleichung (3.7) auch Matrixelemente

$$\frac{\hbar(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{p}_{\nu,\mu}}{m_0} \quad (3.10)$$

außerhalb der Hauptdiagonalen ( $\nu \neq \mu$ ), die die Wechselwirkungen zwischen den Bändern beschreiben, berücksichtigt. Der Rechenaufwand wird dabei verringert, indem diese Matrixelemente einerseits durch Störungstheorie behandelt werden und andererseits ihre Anzahl nach der Löwdinschen Störungstheorie [Loe51] auf die stärker gekoppelten Bänder reduziert wird. Das innere Produkt in (3.10) hat der Methode den Namen k·p-Theorie gegeben. Im Folgenden werden die Ergebnisse dieser Rechnungen für Halbleiter mit Zinkblende-Struktur vorgestellt. Für Wurtzit-Strukturen lassen sich ähnliche Formeln herleiten [And04].

Bei der sogenannten 6-Band-k·p-Rechnung wird die Kopplung zwischen den drei Valenzbändern, die jeweils spinentartet sind, berücksichtigt und das Leitungsband im Rahmen der Einband-Näherung behandelt. Der Hamiltonoperator für diesen Fall wurde erstmals 1955 von Luttinger und Kohn entwickelt [Lut55]. Vernachlässigt man zunächst die Spinentartung, ergibt sich der Hamiltonoperator für die drei Valenzbänder in der Basis  $|x\rangle, |y\rangle, |z\rangle$  zu

$$H_{vv}^{3 \times 3}(\vec{k}) = E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \begin{pmatrix} Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) & Nk_x k_y & Nk_x k_z \\ Nk_x k_y & Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) & Nk_y k_z \\ Nk_x k_z & Nk_y k_z & Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

mit den Dresselhaus-Parametern  $L$ ,  $M$  und  $N$ . Diese stellen für Löcher das Äquivalent zur effektiven Masse bei der Einband-Näherung dar. Die Dresselhaus-Parameter lassen sich durch

$$\begin{aligned} L &= -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + 4\gamma_2 + 1) \\ M &= \frac{\hbar^2}{2m_0}(2\gamma_2 - \gamma_1 - 1) \\ N &= -\frac{\hbar^2}{2m_0}6\gamma_3 \end{aligned} \quad (3.12)$$

aus den Luttinger-Parametern  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  und  $\gamma_3$  [Lut56] berechnen, die wiederum über die Gleichungen (3.29) bis (3.31) (siehe Abschnitt 3.3) mit den effektiven Lochmassen in Beziehung stehen.

Durch die Spin-Bahn-Kopplung wird die Entartung der Valenzbänder am  $\Gamma$ -Punkt teilweise aufgehoben. Um den Einfluß der Spins zu berücksichtigen, muß man die Basis auf sechs Elemente  $|x\uparrow\rangle, |y\uparrow\rangle, |z\uparrow\rangle, |x\downarrow\rangle, |y\downarrow\rangle, |z\downarrow\rangle$  erweitern. Der Hamiltonoperator lautet dann

$$H^{6 \times 6}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} H_{vv}^{3 \times 3}(\vec{k}) & 0 \\ 0 & H_{vv}^{3 \times 3}(\vec{k}) \end{pmatrix} + H_{so}^{6 \times 6} \quad (3.13)$$

mit dem zusätzlichen Term

$$H_{so}^{6 \times 6} = \frac{\Delta_0}{3} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 1 \\ i & 0 & 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & -1 & i & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & -i & -i & 0 & 0 \\ 1 & i & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

Die Spin-Bahn-Wechselwirkung führt zur Abspaltung eines Lochbandes am  $\Gamma$ -Punkt. Der Parameter  $\Delta_0$  ist die Energiedifferenz zwischen diesem abgespaltenen Lochband und dem Leicht- bzw. Schwerlochband.

## 8-Band-k·p-Rechnung

Bei der 8-Band-Näherung wird zusätzlich auch die Kopplung zwischen Leitungs- und Valenzbändern berücksichtigt. Hierfür wird die Basis um den s-artigen Grundzustand des Leitungsbandes auf  $|s \uparrow\rangle, |x \uparrow\rangle, |y \uparrow\rangle, |z \uparrow\rangle, |s \downarrow\rangle, |x \downarrow\rangle, |y \downarrow\rangle, |z \downarrow\rangle$  erweitert. Analog zur 6-Band-Rechnung ergibt sich der Hamiltonoperator zu

$$H^{8 \times 8}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} H_{vv}^{4 \times 4}(\vec{k}) & 0 \\ 0 & H_{vv}^{4 \times 4}(\vec{k}) \end{pmatrix} + H_{so}^{8 \times 8} \quad (3.15)$$

mit

$$H_{vv}^{4 \times 4}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} E_c + Sk^2 & iPk_x + BPk_yk_z & iPk_y + Bk_xk_z & iPk_z + Bk_xk_y \\ -iPk_x + Bk_yk_z & & & \\ -iPk_y + Bk_xk_z & & H_{vv}^{3 \times 3}(\vec{k}) & \\ -iPk_z + Bk_xk_y & & & \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

und

$$H_{so}^{8 \times 8} = \frac{\Delta_0}{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i & 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 1 & i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

Der letzte Ausdruck entspricht  $H_{so}^{6 \times 6}$ , wobei aufgrund der veränderten Basis noch zwei leere Spalten und Zeilen bei  $|s \uparrow\rangle$  und  $|s \downarrow\rangle$  eingefügt wurden.

Der 8-Band-k·p-Hamiltonoperator beinhaltet drei weitere Parameter:  $P$  drückt die Kopplung zwischen Valenz- und Leitungsband aus und lässt sich aus dem optischen Matrixparameter  $E_p$  berechnen:

$$P = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_0} E_p} \quad (3.18)$$

Der Inversionssymmetrie-Operator  $B$  ergibt sich aus der Herleitung, da Zinkblende-Strukturen kein Inversionssymmetriezentrum besitzen, wird aber üblicherweise auf 0 gesetzt.  $S$  tritt an die Stelle der effektiven Elektronenmasse, die hier modifiziert werden muß. In der Einband-Näherung wurde der Einfluß der Valenzbänder durch eine entsprechende effektive Masse beschrieben. Da die Kopplung mit den Valenzbändern hier explizit ausgerechnet wird, muß dieser Anteil aus der effektiven Masse herausgenommen werden:

$$S = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( \frac{1}{m_c^*} - E_p \frac{E_g + \frac{2}{3}\Delta_0}{E_g(E_g + \Delta_0)} \right) \quad (3.19)$$

Dabei bezeichnet  $E_g$  die Energiedifferenz der Bandlücke. Aus dem gleichen Grund müssen auch die Dresselhaus-Parameter in  $H_{vv}^{3 \times 3}(\vec{k})$  im Vergleich zur 6-Band-Rechnung modifiziert werden:

$$L' = L + \frac{P^2}{E_g} \quad M' = M \quad N' = N + \frac{P^2}{E_g} \quad (3.20)$$

## Verspannungen

Verspannungen in einer Heterostruktur führen zu einer Verschiebung und weiteren Aufspaltung der Bänder. Dies wird durch einen zusätzlichen Hamiltonoperator beschrieben, der in Störungsrechnung erster Ordnung lautet [Bah90]:

$$H_{str}^{8 \times 8} = \begin{pmatrix} H_{str}^{4 \times 4} & 0 \\ 0 & H_{str}^{4 \times 4} \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

mit

$$H_{str}^{4 \times 4} = \begin{pmatrix} a_c \text{Sp}(\epsilon) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & l\epsilon_{xx} + m(\epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) & n\epsilon_{xy} & n\epsilon_{xz} \\ 0 & n\epsilon_{xy} & l\epsilon_{yy} + m(\epsilon_{xx} + \epsilon_{zz}) & n\epsilon_{yz} \\ 0 & n\epsilon_{xz} & n\epsilon_{yz} & l\epsilon_{zz} + m(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

Dabei ist  $\epsilon$  der Verzerrungstensor und  $a_c$  das in Kapitel 2.6 eingeführte absolute Deformationspotential des Leitungsbands. Die Parameter  $l$ ,  $m$  und  $n$  beziehen sich auf das

Valenzband und stehen mit dem absoluten Deformationspotential  $a_v$  und den uniaxialen Deformationspotentialen  $b$  und  $d$  wie folgt in Beziehung:

$$\begin{aligned} l &= a_v + 2b \\ m &= a_v - b \\ n &= \sqrt{3}d \end{aligned} \quad (3.23)$$

Für Elektronen (erstes Element der Basis) ergibt  $H_{str}^{4\times 4}(\vec{k})$  eine zur relativen Volumenänderung  $\text{Sp}(\epsilon)$  proportionale Verschiebung des Bandes wie in Gleichung (2.36). Für die Valenzbänder sind neben der Volumenänderung auch noch die Scherspannungen relevant, deren Einfluß durch  $b$  und  $d$  beschrieben wird.

Der gesamte Hamiltonoperator für die 8-Band-k·p-Rechnung für Halbleiter mit Zinkblende-Struktur ergibt sich dann zu

$$H^{8\times 8}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} H_{vv}^{4\times 4}(\vec{k}') & 0 \\ 0 & H_{vv}^{4\times 4}(\vec{k}') \end{pmatrix} + H_{so}^{8\times 8} + H_{str}^{8\times 8} \quad (3.24)$$

wobei die Elemente des Wellenvektors  $\vec{k}_i$  aufgrund der Verspannungen durch  $\vec{k}'_i = \sum_j (\delta_{ij} - \epsilon_{ij}) k_j$  ersetzt werden [End95].

## Heterostrukturen

Den Bloch-Funktionen in Gleichung (3.2) liegt ein unendlich ausgedehntes periodisches Potential zugrunde. Für Heterostrukturen ist also obige Herleitung in der dargestellten Form zunächst einmal nicht gültig. Einen Ausweg stellt die sogenannte Einhüllenden-Näherung (engl.: *envelope function approximation*) dar [Bas81, Bas96]. Dabei wird die Wellenfunktion zerlegt in einen Bloch-Anteil  $u(\vec{r})$ , der mit der Gitterperiode oszilliert, und eine Einhüllende  $\varphi(\vec{r})$ , die sich nur auf größerem Maßstab ändert:

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) u(\vec{r}) \quad (3.25)$$

Im Rahmen der Löwdinschen Störungstheorie [Loe51] kann der Bloch-Anteil aus der Hamilton-Funktion eliminiert werden, so daß die oben beschriebene Herleitung der k·p-Rechnung auch für Heterostrukturen gültig ist, wenn man die Wellenfunktion  $\psi(\vec{r})$  durch die Einhüllende  $\varphi(\vec{r})$  ersetzt und den Bloch-Anteil vernachläßigt.

Die Einhüllenden-Näherung ist allgemein weit verbreitet und wurde für die Berechnung von zahlreichen Heterostrukturen erfolgreich eingesetzt. Genaugenommen ändern sich die Materialeigenschaften in Heterostrukturen allerdings nicht nur in großem Maßstab, wie für die Einhüllende vorausgesetzt, sondern meistens abrupt. In [Bur92] wurde gezeigt, daß die Einhüllenden-Näherung mit bestimmten weiteren Annahmen auch für abrupte Übergänge gültig ist. Dennoch ist der Gültigkeitsbereich der

Einhüllenden-Näherung theoretisch nicht endgültig geklärt und weiterhin ein aktuelles Forschungsthema [Bur99]. Sie stößt insbesondere für sehr kleine Heterostrukturen (1 bis 2 nm) an ihre Grenzen, da sich die Einhüllende dann nicht mehr wesentlich von der schnell oszillierenden Bloch-Funktion unterscheidet. In diesem Fall müssen andere Rechenverfahren wie die Pseudopotential-Methode eingesetzt werden, die die Potentiale der einzelnen Atome berücksichtigen.

Für allgemeine Anwendungen gilt die 8-Band-k·p-Theorie in Verbindung mit der Einhüllenden-Näherung heute als das zuverlässigste und genaueste Verfahren, um quantenmechanische Strukturen zu berechnen. Die höheren Anforderungen an die Rechenleistung stellen dank der fortgeschrittenen Computertechnik mittlerweile kein Problem mehr dar.

## Ladungsverteilung

Um die elektronischen Eigenschaften von Halbleiterstrukturen zu bestimmen, muß allgemein die Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m_c^*(\vec{r})} \nabla \varphi(\vec{r}) + E_c(\vec{r}) - e\Phi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}) \quad (3.26)$$

(hier in der Einband-Näherung für Elektronen im Leitungsband) gelöst werden. In die Schrödinger-Gleichung geht das elektrische Potential  $\Phi(\vec{r})$  ein, das sich durch die Poisson-Gleichung

$$\nabla \epsilon(\vec{r}) \nabla \Phi(\vec{r}) = -4\pi\rho(\vec{r}, \Phi) \quad (3.27)$$

berechnen lässt. Allerdings benötigt man zum Lösen der Poisson-Gleichung die Ladungsverteilung, die sich wiederum aus der Schrödinger-Gleichung ergibt, wenn man die errechneten Zustände gemäß der Fermi-Verteilung auffüllt:

$$n(r) = \sum_i |\varphi(\vec{r})|^2 f\left(\frac{E_F(\vec{r}) - E_i}{k_b T}\right) \quad (3.28)$$

Es ist also im allgemeinen notwendig, die beiden gekoppelten nichtlinearen Differentialgleichungen (3.26) und (3.27) selbstkonsistent zu lösen. Elektrische Ströme werden in netxnano3 durch einen semiklassischen Ansatz mit lokalen Quasiferminiveaus berücksichtigt, aber hier nicht weiter besprochen, da in den hier betrachteten Strukturen keine Ströme fließen.

## 3.2 Die Simulationssoftware nextnano3

Mit nextnano3 können ein-, zwei- und dreidimensionale Simulationen durchgeführt werden. Die Anzahl der Dimensionen richtet sich dabei in der Regel nach der An-

zahl der quantisierten Richtungen. Die übrigen Richtungen werden als vorhanden und translationsinvariant vorausgesetzt. Für einen Quantenfilm beispielsweise läßt sich die Wellenfunktion nach Gleichung (2.1) in einen quantisierten Anteil senkrecht zur Quantenfilmebene und einen Anteil parallel zur Quantenfilmebene aufspalten. Da letzterer der Bewegung eines freien Teilchens entspricht, muß die Schrödinger-Gleichung nur für den quantisierten Anteil in einer Dimension gelöst werden. Analog dazu ist für einen Quantendraht eine Simulation in zwei Dimensionen (in der Querschnittsebene) und für einen Quantenpunkt in drei Dimensionen nötig.

Im Folgenden wird der konkrete Programmablauf zur Implementierung der oben angegebenen Rechenverfahren beschrieben. Beim Start des Programms werden alle speziellen Simulationsparameter aus einer Eingabedatei und die allgemeinen Materialparameter aus einer Datenbank eingelesen. In der Eingabedatei ist insbesondere eine Gitterstruktur definiert, bei der jedem Gitterpunkt ein bestimmtes Material zugeordnet wird. Auf diesem Gitter werden alle folgenden Berechnungen durchgeführt. Die Abstände der Gitterlinien können beliebig gewählt werden. Auf diese Weise kann man zum Beispiel dort, wo man das Maximum der Wellenfunktion erwartet, ein feineres Gitter verwenden, was zu genaueren Ergebnissen führt. Die Orientierung des Koordinatensystems der Simulation kann frei gewählt werden und ist nicht auf das Kristallsystem (definiert durch die Einheitszelle) beschränkt.

Zuerst werden auf dem Gitter die Verspannungen ausgerechnet und der Verzerrungstensor  $\epsilon$  für jeden Gitterpunkt bestimmt. Für eindimensionale Simulationen wird pseudomorphes Wachstum vorausgesetzt. Dabei übernimmt die Struktur senkrecht zur Simulationsrichtung die Gitterstruktur des Substrats. Dies führt im allgemeinen zu einer Querdehnung bzw. -kontraktion in der Simulationsrichtung, die durch die einfache Gleichung (2.26) berechnet werden kann. Für zwei- und dreidimensionale Strukturen ist die Berechnung der Verspannungen aufwändiger. Hier muß wie in Kapitel 2.6 dargelegt die Verspannungsenergie minimiert werden. Bei den Simulationen in dieser Arbeit hat sich gezeigt, daß es dabei wichtig ist, ein relativ weit ausgedehntes Gitternetz zu verwenden, um Auswirkungen von Randeffekten zu vermeiden (siehe Kapitel 6.2).

Die Verspannungen beeinflussen die weiteren Rechnungen einerseits durch eine Erweiterung des Hamilton-Operators nach Gleichung (3.22). Andererseits führt der piezoelektrische Effekt zu induzierten Polarisationsladungen, die als zusätzliche Raumladungen in die Poisson-Gleichung eingehen.

Die folgende Lösung der Schrödinger- und Poisson-Gleichung kann dann auf einem kleineren Bereich der Struktur durchgeführt werden, der Quantenregion genannt wird. Für den Rand dieser Region können Dirichlet-, Neumann- oder periodische Randbedingungen gewählt werden. Die Quantenregion muß so groß sein, daß die Wellenfunktion

am Rand vernachlässigbar klein ist. Als Test für diese Bedingung kann man Rechnungen mit verschiedenen Randbedingungen vergleichen: Ist die Quantenregion groß genug, sollten die Ergebnisse nicht von den gewählten Randbedingungen abhängen.

Im allgemeinen werden die Schrödinger- und Poisson-Gleichung durch nextnano3 selbstkonsistent gelöst. Da bei den in dieser Arbeit simulierten Strukturen jedoch keine freien Ladungen aufgrund von Dotierungen oder elektrischen Strömen auftreten, hat die Lösung der Schrödinger-Gleichung keine Rückwirkungen auf die Ladungsverteilung. Daher kann hier auf die Selbstkonsistenz verzichtet werden. Es werden also zuerst die Verläufe der Bandkanten durch die Poisson-Gleichung bestimmt und danach die Wellenfunktionen und Eigenenergien der quantisierten Zustände mithilfe der Schrödinger-Gleichung berechnet. Der genaue Rechenweg und die verwendeten numerischen Verfahren sind ausführlich in [Hac02] und [Zib07] beschrieben.

Die Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektronen und Löchern wirkt sich allgemein auf die Wellenfunktionen und Energieeigenwerte aus und führt zur Bildung von Exzitonen. In nextnano3 wird dieser Einfluß auf die Energien näherungsweise berechnet und der Einfluß auf die Wellenfunktionen vernachlässigt. Konkret wird nach dem Lösen der Schrödinger-Gleichung die Exzitonen-Bindungsenergie durch ein Näherungsverfahren ausgerechnet und von der Übergangsenergie (also der Differenz der Energieeigenwerte von Elektronen und Löchern) abgezogen. Die Coulomb-Wechselwirkung hat jedoch bei dieser Näherung keine Rückwirkung auf die Schrödinger-Gleichung. Diese Näherung ist zulässig, solange die Elektronen und Löcher durch das Einschlußpotential stark genug gebunden sind und so die Coulomb-Anziehung nur eine vernachlässigbare Wirkung auf die Wellenfunktionen ausübt.

Das numerische Verfahren zur Berechnung der Exzitonen in Quantenfilmen basiert auf dem Modell des Wasserstoffatoms und ist für zweidimensionale Strukturen entsprechend modifiziert. Der Algorithmus ist in [Har05] beschrieben und geht auf [Bas82] zurück. Die Exzitonen-Bindungsenergie in eindimensionalen Strukturen wird durch ein Variationsansatz nach [Pov04] berechnet und in nulldimensionalen Strukturen im Rahmen der Hartree-Näherung nach [Hac02] behandelt. Diese Berechnungen sind in nextnano3 zur Zeit zwar für die Einband-Effektive-Masse-Näherung, aber noch nicht für die Mehrband- $k\cdot p$ -Rechnung implementiert. Daher wurde bei den in dieser Arbeit durchgeföhrten Simulationen die Berechnung der Exzitonen-Bindungsenergie stets im Rahmen der Einband-Näherung durchgeführt.

### 3.3 Simulationsparameter

Alle benötigten Materialparameter liegen bei nextnano3 in Form einer sehr umfangreichen Datenbank vor. Die Eigenschaften von GaAs-basierten III-V-Halbleitern sind dabei aus der umfassenden Parametersammlung in [Vur01] übernommen. Dort finden sich auch weitere allgemeine Erläuterungen zu den Parametern und Hinweise zu deren experimenteller Bestimmung. In diesem Abschnitt wird auf Besonderheiten von einigen speziellen Parameter eingegangen und die Interpolation für Verbindungshalbleiter beschrieben.

Um bei der Einband-Effektive-Masse-Näherung anisotrope Lochmassen zu berücksichtigen, wird statt einer skalaren Masse der effektive Massetensor in den Richtungen des Simulationssystems angegeben. Dieser lässt sich für schwere Löcher wie folgt aus den Luttinger-Parametern [Lut56] berechnen:

$$\begin{aligned}\frac{m_0}{m_{hh,001}^*} &= \gamma_1 - 2\gamma_2 && \text{in } \langle 001 \rangle\text{-Richtung} \\ \frac{m_0}{m_{hh,110}^*} &= \frac{1}{2}(2\gamma_1 - \gamma_2 - 3\gamma_3) && \text{in } \langle 110 \rangle\text{-Richtung} \\ \frac{m_0}{m_{hh,111}^*} &= \gamma_1 - 2\gamma_3 && \text{in } \langle 111 \rangle\text{-Richtung}\end{aligned}\quad (3.29)$$

Für leichte Löcher gilt entsprechend:

$$\begin{aligned}\frac{m_0}{m_{lh,001}^*} &= \gamma_1 + 2\gamma_2 && \text{in } \langle 001 \rangle\text{-Richtung} \\ \frac{m_0}{m_{lh,110}^*} &= \frac{1}{2}(2\gamma_1 + \gamma_2 + 3\gamma_3) && \text{in } \langle 110 \rangle\text{-Richtung} \\ \frac{m_0}{m_{lh,111}^*} &= \gamma_1 + 2\gamma_3 && \text{in } \langle 111 \rangle\text{-Richtung}\end{aligned}\quad (3.30)$$

Für das abgespaltene Lochband genügt eine isotrope effektive Masse:

$$\frac{m_0}{m_{so}^*} = \gamma_1 - \frac{E_p \Delta_0}{3E_g(E_g + \Delta_0)} \quad (3.31)$$

Für die  $k \cdot p$ -Rechnung gehen anstelle der effektiven Lochmassen die entsprechenden Dresselhaus-Parameter in den Hamiltonoperator ein. Diese werden nach Gleichung (3.12) und (3.20) aus den Luttinger-Parametern berechnet, die ebenfalls in der Datenbank von nextnano3 angegeben sind.

Der Einfluß der Probentemperatur muß bei zwei Materialparametern berücksichtigt werden. Für die Gitterkonstante  $a$  wird eine lineare Abhängigkeit angenommen. Die Abhängigkeit der Bandlücke  $E_g$  von der Temperatur wird durch die empirische Varshni-Formel [Var67]

$$E_g(T) = E_{g,0} - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (3.32)$$

berechnet mit der Bandlücke  $E_{g,0}$  bei  $T = 0$  K und den materialabhängigen Varshni-Parametern  $\alpha$  und  $\beta$ . Eine graphische Darstellung der Varshni-Formel für GaAs findet sich als gestrichelte Linie in Bild 7.18.

Für die binären Halbleiter GaAs, AlAs und InAs sind die Materialparameter direkt angegeben. Für ternäre und quaternäre Verbindungen werden sie zwischen den jeweiligen Bestandteilen interpoliert. Für die meisten Parameter reicht eine lineare Interpolation aus, zumal die experimentell gemessenen Werte in vielen Fällen mit einer vergleichsweise hohen Unsicherheit behaftet sind. Für einige wenige Materialparameter hingegen lassen sich die verfügbaren Meßwerte besser durch eine quadratische Interpolation wiedergeben. Für einen Materialparameter  $P$  eines ternären Verbindungshalbleiters  $A_xB_{1-x}C$ , der aus den binären Halbleitern AC und BC besteht, lautet diese Interpolation

$$P(A_xB_{1-x}C) = x P(AC) + (1 - x) P(BC) - x(1 - x) K \quad (3.33)$$

Das letzte Glied beinhaltet dabei die quadratische Korrektur mit dem Krümmungsparameter  $K$  (engl.: *bowing parameter*). Diese Form ist äquivalent zu einer einfachen quadratischen Gleichung, hat aber den Vorteil, daß die beiden Endpunkte und die quadratische Korrektur einzeln auf übersichtliche Weise auftreten.

Für quaternäre Verbindungshalbleiter  $A_yB_xC_{1-x-y}D$  verläuft die lineare Interpolation analog. Die quadratische Interpolation ist jedoch komplexer, da die möglichen Verbindungen jetzt in einem zweidimensionalen Raum liegen, der durch  $x$  und  $y$  aufgespannt wird. Dies ist in Bild 2.13 für  $In_yAl_xGa_{1-x-y}As$  veranschaulicht. Die ternären Halbleiter liegen auf den Verbindungslien zwischen den entsprechenden binären Bestandteilen. Die quaternären Halbleiter liegen innerhalb des sich so ergebenden Dreiecks. Allgemein ist eine zuverlässige quadratische Interpolation für quaternäre Halbleiter schwierig, da es viele unterschiedliche Legierungsverhältnisse gibt, deren Eigenschaften noch relativ wenig untersucht wurden [Jen99]<sup>1</sup>.

Eine Interpolation für quaternäre Verbindungshalbleiter sollte als Grenzfälle die entsprechenden ternären Verbindungen beinhalten. Daher wird in dieser Arbeit zur Bestimmung der Materialparameter von  $In_yAl_xGa_{1-x-y}As$  zunächst die Interpolation für den ternären Halbleiter  $Al_xGa_{1-x}As$  durchgeführt:

$$P(Al_xGa_{1-x}As) = x P(AlAs) + (1 - x) P(GaAs) - x(1 - x) K_{AlGaAs} \quad (3.34)$$

Anschließend wird zwischen  $Al_xGa_{1-x}As$  und InAs wiederum gemäß Gleichung (3.33) interpoliert:

$$P(In_yAl_xGa_{1-x-y}As) = y P(InAs) + (1 - y) P(Al_xGa_{1-x}As) - y(1 - y) K_{InAlGaAs} \quad (3.35)$$

---

<sup>1</sup>Eine Ausnahme ist auf Indiumphosphid (InP) gitterangepaßtes InAlGaAs. Dieses Material kann jedoch aufgrund des relativ hohen InAs-Anteils von etwa 52 % kaum auf ein GaAs-Substrat aufgewachsen werden und kommt daher für die in dieser Arbeit untersuchten Strukturen nicht in Betracht.

Der dabei verwendete Krümmungsparameter  $K_{InAlGaAs}$  wird durch lineare Interpolation zwischen den Krümmungsparametern für InAlAs und InGaAs bestimmt:

$$K_{InAlGaAs} = x K_{InAlAs} + (1 - x) K_{InGaAs} \quad (3.36)$$

Nextnano3 kann in der derzeitigen Version die quadratische Interpolation für ternäre, nicht aber für quaternäre Verbindungshalbleiter durchführen. Daher wurden im Rahmen dieser Arbeit alle Interpolationen für ternäre und quaternäre Halbleiter außerhalb von nextnano3 durchgeführt und die so individuell für die jeweiligen Materialzusammensetzungen bestimmten Parameter in der Eingabedatei für nextnano3 explizit angegeben.

## 3.4 Optimierung der Einschlußenergie

Eines der Ziele dieser Arbeit stellt die Optimierung der Einschlußenergie in CEO-Strukturen dar. Um die Strukturen mit der höchsten Einschlußenergie zu ermitteln, wurde ein automatisches evolutionäres Optimierungsverfahren für nextnano3 implementiert, das in diesem Abschnitt vorgestellt wird.

### Optimierungsproblem

CEO-Quantendrähte und -punkte entstehen an der Kreuzung von zwei bzw. drei Quantenfilmen. Jeder dieser Quantenfilme weist eine bestimmte Dicke auf und kann im GaAs-Materialsystem einen bestimmten Anteil von Aluminium und Indium enthalten. Außerdem kann der Aluminiumanteil im Barrierenmaterial variiert werden. Somit ergeben sich insgesamt sieben bzw. zehn unabhängige Parameter, die die Geometrie und Zusammensetzung dieser Strukturen festlegen. Durch eine Simulation mit nextnano3 lässt sich für jede dieser Strukturen die Einschlußenergie berechnen. Die Rechnung dauert dabei je nach Art der Struktur und gewünschter Genauigkeit zwischen 2 Minuten und 10 Stunden.

Gesucht ist nun derjenige Punkt im sieben- bzw. zehndimensionalen Parameterraum, bei dem die Einschlußenergie der Quantenstruktur maximal ist. Dabei kann es weitere frei gewählte Einschränkungen geben, die die Anzahl der freien Parameter reduzieren, zum Beispiel wenn man nur symmetrische Strukturen oder solche ohne Indium untersuchen möchte. Durch reine Überlegung ist es bedauerlicherweise nicht immer möglich, die beste Struktur zu finden, da sich für manche Mechanismen zur Erhöhung der Einschlußenergie bislang keine anschauliche Erklärung finden ließ, wie zum Beispiel für asymmetrische CEO-Strukturen. Außerdem ist die Anzahl der Para-

meter zu groß, um einfach alle Strukturen durchzuprobieren. Daher ist ein geeigneter Optimierungsalgorithmus notwendig.

## Optimierungsalgorithmus

Herkömmliche Optimierungsverfahren gehen von einem gewählten Ausgangspunkt aus und folgen so lange dem Gradienten (also den partiellen Ableitungen der zu optimierenden Größe nach den Parametern), bis ein Maximum erreicht ist. Hierzu gehört unter anderem der bei der nichtlinearen Kurvenanpassung oft verwendete Algorithmus nach Marquardt und Levenberg. Dieses Verfahren funktioniert allerdings nur, wenn die zu optimierende Größe überall differenzierbar ist und sich der Algorithmus nicht in lokalen Maxima verirrt.

Zur Veranschaulichung stelle man sich einen blinden Bergwanderer vor, der im Gebirge den höchsten Gipfel sucht und sich nur durch Ertasten der unmittelbaren Umgebung orientieren kann. Kleinere Hügel (also lokale Maxima) können den Blinden zu der irrgigen Annahme verleiten, er sei bereits am Gipfel angekommen. Wandert der Blinde auf einem Grat (nicht differenzierbar), so führen allgemein alle Richtungen außer einer einzigen nach unten. Ein durchschnittlich intelligenter Blinder wird in diesem Fall trotzdem noch den Weg nach oben finden, ein durchschnittlich intelligenter Algorithmus jedoch nicht.

Da der Parameterraum der CEO-Strukturen lokale Maxima aufweist und nicht überall differenzierbar ist, ist ein solcher Algorithmus hier also ungeeignet. Statt dessen bieten sich evolutionäre Optimierungsalgorithmen an, die besonders für zerklüftete Parameterräume geeignet sind [Wei07]. Dabei wird zunächst ein zufälliges Ensemble von Punkten im Parameterraum ausgewählt. Zu jedem dieser Individuen werden dann Nachkommen generiert, deren Parameter sich auf zufällige Weise leicht von denen ihrer Eltern unterscheiden<sup>2</sup>. Danach wird die zu optimierende Größe für alle diese Nachkommen bestimmt und die besten Nachkommen als neues Ensemble ausgewählt. Von diesen werden dann wiederum Nachkommen generiert und so weiter, bis ein Maximum gefunden wurde, das sich nicht mehr weiter optimieren lässt. Die Entfernung zwischen den Eltern und ihren Nachkommen im Parameterraum muß bei diesem Vefahren sorgfältig gewählt werden. Ist sie zu groß, haben die Nachkommen kaum noch Ähnlichkeit mit den Eltern und das Konzept der Evolution funktioniert nicht mehr. Ist sie zu klein,

---

<sup>2</sup>Es gibt auch evolutionäre Optimierungsverfahren, bei denen die Nachkommen aus jeweils zwei Elternteilen gebildet werden und deren Eigenschaften dann eine Mischung der Eigenschaften ihrer Vorfahren darstellen. Für das hier betrachtete Problem sind solche Verfahren weniger geeignet, da in diesem Fall die Mischung der Eigenschaften von zwei guten Eltern nicht allgemein auch zu guten Nachkommen führt.

kann es passieren, daß sich das gesamte Ensemble in einem lokalen Maximum sammelt und aus diesem nicht mehr herauskommt. In der Praxis wird die Entfernung der Nachkommen oft durch eine Binomialverteilung bestimmt. Dadurch wird gewährleistet, daß auch hin und wieder ein weiter entfernter Nachkomme erzeugt wird.

Veranschaulichen läßt sich dieses Verfahren mit Pflanzen in einem Gebirge, die durch Samenflug Nachkommen in ihrer näheren Umgebung bilden. Haben nun aus irgendeinem Grund nur diejenigen Pflanzen eine Überlebenschance, die sich am höchsten befinden, wird die Gesamtmenge der Pflanzen im Laufe der Evolution im Gebirge immer höher wandern, bis eine Pflanze den höchsten Gipfel erreicht hat.

Dieses evolutionäre Optimierungsverfahren wurde hier zusammen mit nextnano3 eingesetzt, um das Einschlußpotential für Quantendrähte und -punkte zu optimieren. Im folgenden Abschnitt wird die konkrete Implementierung beschrieben.

## 3.5 Erweiterungen der Simulationssoftware

Da einige der in dieser Arbeit verwendeten Rechenverfahren bei nextnano3 noch nicht implementiert oder gründlich getestet waren, wurden von Stefan Birner verschiedene Modifikationen an der Simulationssoftware vorgenommen. Außerdem war ein wesentliches Ziel dieser Arbeit die Optimierung der Strukturen. Dazu wurde im Rahmen dieser Arbeit eine weitere Software erstellt, die die Ein- und Ausgaben von nextnano3 verarbeitet und es ermöglicht, eine große Anzahl von möglichen Strukturen automatisch zu simulieren und das oben beschriebene Optimierungsverfahren anzuwenden.

### Die Entwicklungsumgebung Nextnanomat

Nextnano3 ist ein Kommandozeilenprogramm, das für jede Simulation eine individuelle Eingabedatei erwartet, die darin spezifizierten Berechnungen durchführt und dann die Ergebnisse in bestimmte Ausgabedateien schreibt. Eine große Anzahl von Simulationen auf diese Weise manuell durchzuführen, ist sehr zeitaufwändig und umständlich. Daher wurde im Rahmen dieser Arbeit die Software Nextnanomat erstellt, die eine komfortable Entwicklungsumgebung für nextnano3 darstellt und einen großen Teil dieser Aufgaben automatisiert durchführen kann.

Die Eingabedateien für die Simulationen können mit Nextnanomat einerseits manuell erstellt werden. Hierfür steht ein Editor mit Syntaxhervorhebung bereit. Andererseits können Eingabedateien für CEO-Strukturen auch nach Eingabe bestimmter Strukturparameter wie zum Beispiel Dicke und Zusammensetzung der Quantenfilme automatisch generiert werden. Dabei wird auch die in Abschnitt 3.3 beschriebene quadratische Interpolation der Materialparameter durchgeführt.

Die Simulationen können aus der Entwicklungsumgebung heraus gestartet werden. Dabei werden automatisch die für nextnano3 benötigten Dateien und Verzeichnisse erstellt. Mit einer Batchliste können mehrere Simulationen auf einmal gestartet werden. Um Zeit zu sparen, werden die Simulationen dabei einerseits auf die vorhandenen Prozessorkerne verteilt. Andererseits wurde eine Verwaltung für einen PC-Cluster programmiert (siehe unten), die es ermöglicht, eine größere Anzahl von Simulationen auf mehreren Rechnern gleichzeitig durchzuführen.

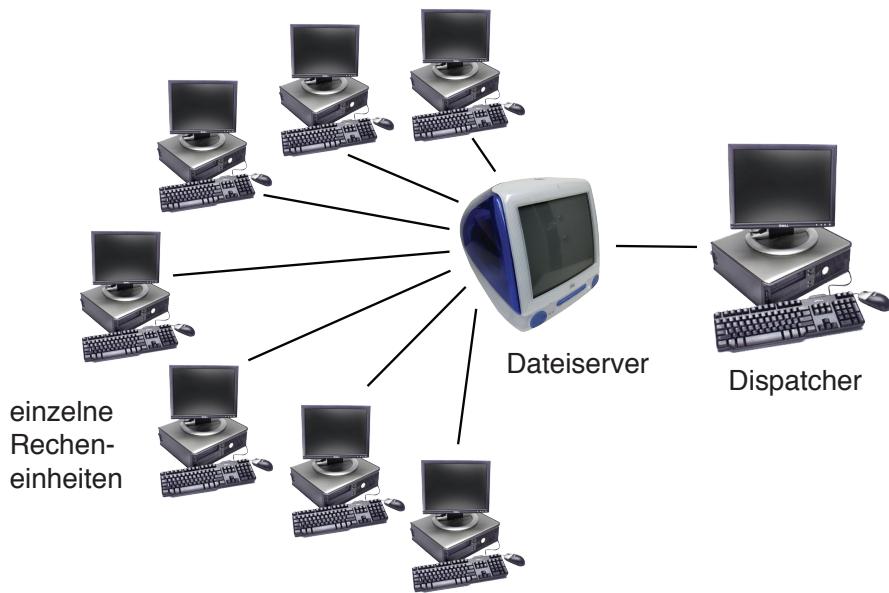
Nextnanomat verfügt außerdem über ein Visualisierungsmodul, mit dem die Ausgabedateien schnell graphisch dargestellt werden können. Darüber hinaus können die wichtigsten Ergebnisse der verschiedenen Simulationen ausgelesen und zusammen mit den Strukturparametern in einer Datenbank gespeichert werden. Das evolutionäre Optimierungsverfahren für CEO-Strukturen wurde ebenso als Bestandteil von Nextnanomat programmiert. Weitere Details zu dessen Implementierung finden sich bei der Vorstellung der Ergebnisse in Kapitel 6.4.

## Verteiltes Rechnen im einem Cluster

Wird für Berechnungen eine hohe Rechenleistung benötigt, die sich durch einen einzelnen Computer nicht erreichen lässt, so können mehrere Computer zu einem Cluster zusammengeschlossen werden, die durch ein Netzwerk verbunden sind [Bau05]. Die Software muß dabei so konzipiert sein, daß die gesamte Berechnung in viele kleinere Teilaufgaben aufgespaltet werden kann, die dann von den einzelnen Elementen des Clusters berechnet werden. Berechnungen werden als feinkörnig parallel bezeichnet, wenn die Prozesse, die die einzelnen Teilaufgaben durchführen, sehr oft Daten miteinander austauschen müssen. In diesem Fall müssen die einzelnen Recheneinheiten durch ein sehr schnelles Netzwerk miteinander verbunden sein. Grobkörnig parallele Berechnungen lassen sich einfacher implementieren, da hier die einzelnen Prozesse weniger oft Daten austauschen müssen und weitgehend eigenständig arbeiten. Eine dritte Kategorie stellen die sogenannten *embarrassingly* parallelen Rechnungen dar. Dabei sind die einzelnen Prozesse von sich aus eigenständig und müssen nie oder nur sehr selten Daten miteinander austauschen. Derartige Cluster werden auch als Grid bezeichnet.

Sollen mit nextnano3 eine größere Anzahl von Strukturen simuliert werden, so gehört diese Aufgabe zur dritten Kategorie, da die einzelnen Simulationen unabhängig voneinander durchgeführt werden. Es bietet sich hier also besonders an, die Simulationen auf mehrere Rechner zu verteilen. Zu diesem Zweck wurde in der Entwicklungsumgebung Nextnanomat eine Clusterverwaltung programmiert. Als einzelne Recheneinheiten wurden verschiedene Arbeitsgruppenrechner und insbesondere die Computer in einem PC-Pool der Universität eingesetzt, die nachts und am Wochenende normalerweise

se nicht benutzt werden. Da jeder dieser Rechner mit zwei Prozessorkernen ausgestattet ist, konnten auf diese Weise bis zu 60 Simulationen gleichzeitig durchgeführt werden.



**Bild 3.1:** Schematischer Aufbau des in dieser Arbeit implementierten PC-Clusters. Die einzelnen Recheneinheiten sind Arbeitsgruppenrechner und Computer im PC-Pool der Universität. Der Cluster wird durch den *Dispatcher* verwaltet.

Bild 3.1 zeigt den prinzipiellen Aufbau des Clusters. Zum Austausch von Daten wird ein Dateiserver verwendet. Da die schon vorhandenen Dateiserver der Universität es nicht gestatten, auf bestimmte Netzlaufwerke unabhängig vom Standort und vom gerade angemeldeten Benutzer zuzugreifen, wurde eine eigener Dateiserver (in diesem Fall ein älterer Apple iMac) eingesetzt. Auch der Austausch von Statusnachrichten geschieht über das Dateisystem, da die Geschwindigkeit für diesen Fall ausreicht und so kein weiterer Kommunikationskanal eingerichtet werden muß. Die Rechnungen im Cluster werden durch einen *Dispatcher* verwaltet, der unter anderem die Eingabedateien für die Simulationen erstellt, die Berechnungen auf die einzelnen Computer verteilt und die Ergebnisse der fertigen Rechnungen sammelt und auswertet. Auch das automatische Optimierungsverfahren läuft auf diesem Rechner.

# Kapitel 4

## Probenherstellung

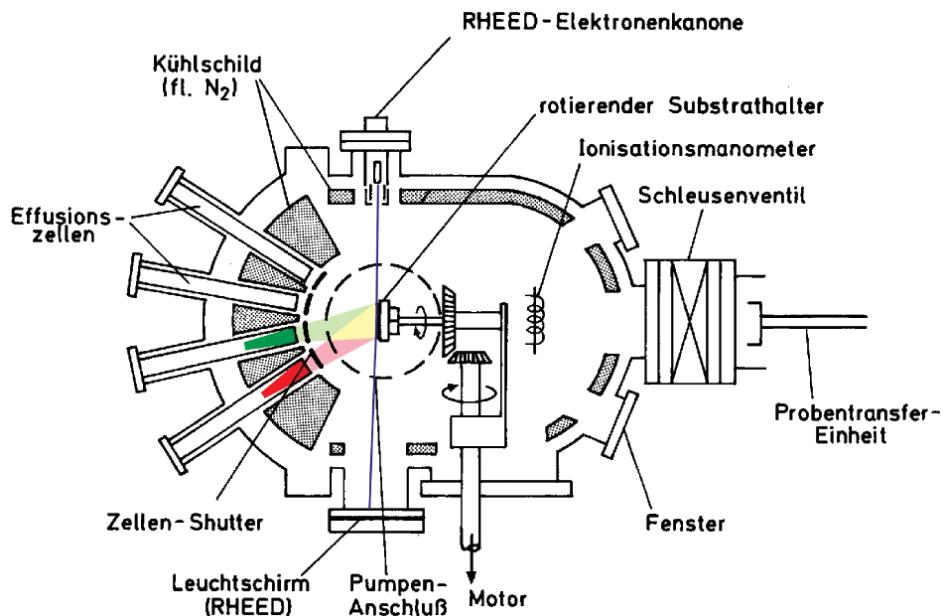
Die in dieser Arbeit untersuchten CEO-Proben wurden durch Molekularstrahlepitaxie (MBE) hergestellt, einem weit verbreiteten Verfahren zum atomlagengenauen Wachstum von Halbleiterschichten. Der besondere Vorteil der MBE im Vergleich zu anderen Epitaxieverfahren ist die präzise Kontrolle der Flußraten und Wachstumsbedingungen. Auf diese Weise lassen sich Schichtstrukturen mit hoher Genauigkeit, abrupten Übergängen und guter Reproduzierbarkeit herstellen. Da das Wachstum im Ultra-hochvakuum (UHV) stattfindet, sind verschiedene *in-situ*-Charakterisierungsverfahren möglich. Aufgrund der Komplexität und schlechten Skalierbarkeit ist die MBE kaum für die Massenproduktion geeignet, so daß in der Industrie eher andere Epitaxieverfahren wie insbesondere die Metallorganische Gasphasenepitaxie eingesetzt werden. In der Forschung hingegen ist die MBE weit verbreitet.

In diesem Kapitel wird dieses Epitaxieverfahren zuerst allgemein vorgestellt und dann die technische Details der Regensburger Anlage erläutert. Eine ausführliche Behandlung der MBE findet sich in [Her91, Her04] und weitere Details zur Regensburger MBE-Anlage in [Rei05] und [Wur08].

### 4.1 Molekularstrahlepitaxie

Das grundsätzliche Prinzip der MBE zeigt Abbildung 4.1. Im UHV bei einem Druck von weniger als  $10^{-11}$  hPa erhitzt man die aufzuwachsenden Materialien in Effusionszellen, bis sie verdampfen und die Zelle durch eine Öffnung verlassen. Hinter dieser Öffnung breiten sich die gasförmigen Moleküle aufgrund des UHV strahlenförmig aus und treffen auf ein erhitztes monokristallines Substrat (engl.: *Wafer*).

Auf der Oberfläche des Substrats können die Atome nun adsorbiert werden, sich auf der Oberfläche bewegen, in die Kristallstruktur eingebaut werden oder auch wieder thermisch desorbieren. Das genaue Zusammenwirken dieser Prozesse ist entscheidend



**Bild 4.1:** Schematischer Aufbau einer MBE-Wachstumskammer (nach [Wur08])

für die Qualität der gewachsenen Probe und wird durch die Wachstumsbedingungen, insbesondere durch die Temperatur des Substrats bestimmt. Bei geeigneten Bedingungen führen die aufgewachsenen Materialien schichtweise die Gitterstruktur des Substrats fort.

Die verschiedene Materialien lassen sich durch mechanische Shutter vor den Zellenöffnungen auswählen. Auf diese Weise sind abrupte Übergänge zwischen verschiedenen Materialien in der Größenordnung einer Monolage möglich. Zum Wachstum von Legierungen werden im allgemeinen mehrere Shutter gleichzeitig geöffnet. Das Legierungsverhältnis wird dann durch die Flußraten der einzelnen Bestandteile bestimmt.

Die Probe ist in der Wachstumskammer mit flüssigem Gallium auf einem speziellen Probenhalter befestigt, der wiederum auf den sogenannten Manipulator (eine Art Roboterarm) gesteckt wird. Durch den Manipulator kann die Probe geschwenkt und rotiert werden. Da die einzelnen Molekularstrahlen schräg auf das Substrat auftreffen, ist die Verteilung der Materialflüsse über die Oberfläche inhomogen. Um dies auszugleichen, wird die Probe im allgemeinen mit einer Geschwindigkeit von 7 Umdrehungen/min rotiert. Außerdem wird die Probe durch einen auf dem Manipulator angebrachten Tantal-Heizdraht auf die erforderliche Wachstumstemperatur erhitzt. Die Substrattemperatur für das Wachstum von GaAs liegt typischerweise bei 640 °C.

Im GaAs-Kristall liegen in der [001]-Richtung abwechselnd atomare Schichten aus Gallium und Arsen vor. Beim MBE-Wachstum von GaAs in dieser Richtung kann Arsen autokatalytisch an eine Gallium-terminierte Oberfläche angelagert werden, aber

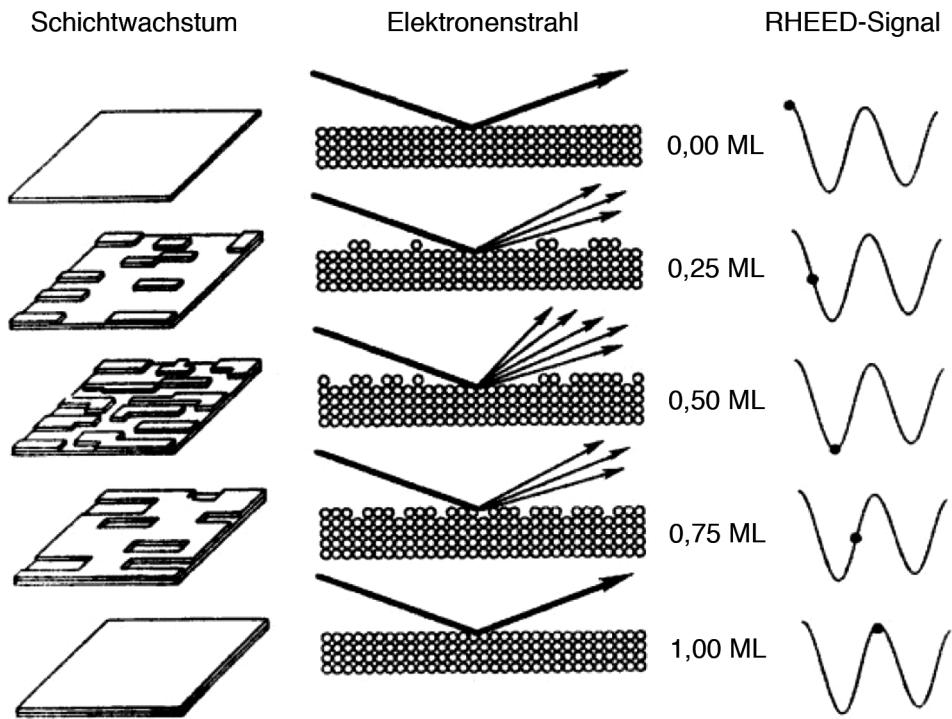
| Wachstumsrichtung | GaAs       | AlAs      | InAs       |
|-------------------|------------|-----------|------------|
| [001]             | 0,28265 nm | 0,2833 nm | 0,30292 nm |
| [110]             | 0,19986 nm | 0,2003 nm | 0,21429 nm |
| [111]             | 0,32638 nm | 0,3271 nm | 0,34978 nm |

**Tabelle 4.1:** Dicken einer Monolage von verschiedenen Halbleitern in unterschiedlichen Wachstumsrichtungen bei  $T = 300$  K. In der [001]-Richtung entsprechen die Werte der halben Gitterkonstante.

kaum an eine Arsen-Oberfläche, so daß Schichten von Arsen- und Galliumatomen abwechselnd aufwachsen und die gewünschte Kristallstruktur erzeugen. Dabei besteht in der Regel ein Überangebot an Arsen, so daß die Wachstumsgeschwindigkeit durch das Angebot an Gallium bestimmt wird. Eine Schicht aus je einer Atomlage Gallium und Arsen wird als Monolage (ML) bezeichnet. Die Dicken der Monolagen von verschiedenen Materialien sind in Tabelle 4.1 aufgeführt.

Die Wachstumsraten sind durch die Flußraten der Molekularstrahlen bestimmt und lassen sich durch die Zellentemperaturen beliebig einstellen. Typische Wachstumsraten sind  $1 \mu\text{m}/\text{h}$  bzw.  $1 \text{ ML}/\text{s}$ . Diese relativ niedrigen Raten lassen den Atomen genug Zeit zur Oberflächenmigration, was zu glatteren Grenzflächen führt.

Die Wachstumsraten können durch Reflexionsbeugung hochenergetischer Elektronen (engl.: *reflected high energy electron diffraction*, Abk.: RHEED) gemessen werden. Dabei trifft ein Elektronenstrahl während des Wachstums unter flachem Winkel auf die Probe und wird an der GaAs-Gitterstruktur gebeugt (Bild 4.2). Das Beugungsbild wird auf einem Fluoreszenzschirm sichtbar gemacht und mit einer Videokamera aufgenommen und ausgewertet. Durch den streifenden Einfall findet die Beugung fast nur an der Oberfläche statt. Je glatter die Oberfläche ist, desto stärker ist der Beugungsreflex 0. Ordnung, also die direkte Spiegelung des Elektronenstrahls. Bei rauen Oberflächen dringen die Elektronen etwas tiefer in die Probe ein und werden stärker in die Reflexe höherer Ordnung gebeugt. Beim MBE-Wachstum werden unter idealen Bedingungen die einzelnen Schichten nacheinander aufgewachsen. Ist gerade eine Monolage abgeschlossen, so ist die Probenoberfläche glatt, ansonsten rau (Bild 4.2 linke Seite). Dies führt beim Wachstum zu entsprechenden Intensitätsoszillationen des Spiegelreflexes, anhand derer sich das Wachstum der einzelnen Monolagen genau mitverfolgen läßt. Aus der Periodendauer dieser Oszillationen ergibt sich dann die Wachstumsrate. Mit Hilfe dieser RHEED-Eichung werden beim MBE-Wachstum in der Regel zu Beginn des Tages die Wachstumsraten von GaAs und AlAs eingestellt und gemessen.

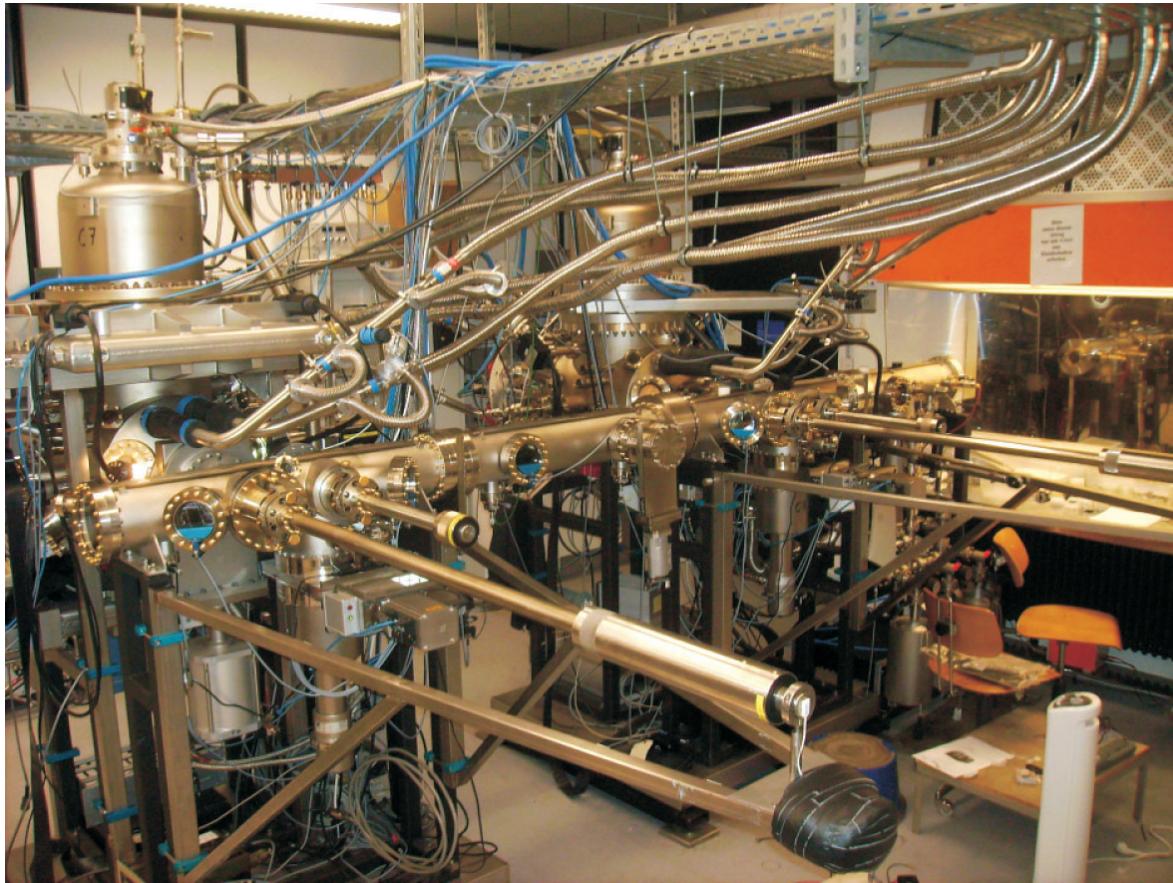


**Bild 4.2:** Intensitätsoszillationen des RHEED-Signals beim Schichtwachstum. Bei glatten Oberflächen (ganze Anzahl von Monolagen) ist die Intensität des Spiegelreflexes (0. Ordnung) maximal. Bei rauen Oberflächen (oberste Monolage unvollständig) wird mehr Intensität in die Reflexe höherer Ordnung gebeugt und die Intensität der 0. Ordnung nimmt ab.

## 4.2 Die Regensburger MBE-Anlage

In Regensburg gibt es am Lehrstuhl von Prof. Wegscheider zwei MBE-Wachstumskammern (Bild 4.3): eine für manganhaltige Proben für Spintronik-Experimente (C-Kammer) und eine mit einem besonders niedrigen Anteil von Fremdatomen für Proben mit einer hohen Ladungsträgerbeweglichkeit (D-Kammer). Beide Kammern sind modifizierte Gen-II-Systeme der Firma Veeco. Die D-Kammer ist mit zwei Aluminium-Zellen, zwei Gallium-Zellen, einer Indium-Zelle und einer Arsen-*valved-cracker*-Zelle (siehe unten) sowie den Dotierstoffen Silizium und Kohlenstoff ausgestattet. Außerdem verfügen beide Kammern über einen CEO-Spaltbügel, mit dem die Probenstücke auf einem speziellen Halter für das CEO-Verfahren *in situ* gespalten werden können. Die in dieser Arbeit untersuchten Proben wurden fast ausschließlich in der D-Kammer hergestellt.

Den einzelnen Proben werden zur Unterscheidung Bezeichnungen wie zum Beispiel „D080623B“ gegeben. Dabei bezeichnet das „D“ die MBE-Kammer, die Ziffern geben



**Bild 4.3:** Die Regensburger MBE-Anlage mit der D-Kammer (links) und der C-Kammer (rechts). Vor den Wachstumskammern befindet sich der langgezogene Transferkanal, über den die Probenstücke eingeschleust werden. Ganz rechts befindet sich ein Arbeitsplatz zum Präparieren der Proben (aus [Wur08]).

das Datum des Wachstums in der Form „JJMMTT“ an und das „B“ drückt aus, daß es sich um die zweite an diesem Tag in dieser Kammer gewachsene Probe handelt. Die umgekehrte Schreibweise des Datums hat den Vorteil, daß die Proben bei Sortierung nach dem Namen gleich in der chronologisch richtigen Reihenfolge aufgelistet werden.

## Effusionszellen

Als Effusionszellen für die Gruppe-III-Elemente Gallium, Aluminium und Indium werden sogenannte Knudsen-Zellen verwendet. Diese bestehen in der Standardausführung aus einem konischen Tiegel aus pyrolytisch abgeschiedenem Bor-Nitrid (PBN), in denen die Materialien durch einen Heizdraht erhitzt werden und während des Wachstums verdampfen. (Bild 4.4). In der Regensburger D-Kammer bestehen die Al7- und Ga8-Zelle aus diesem Zellentyp.

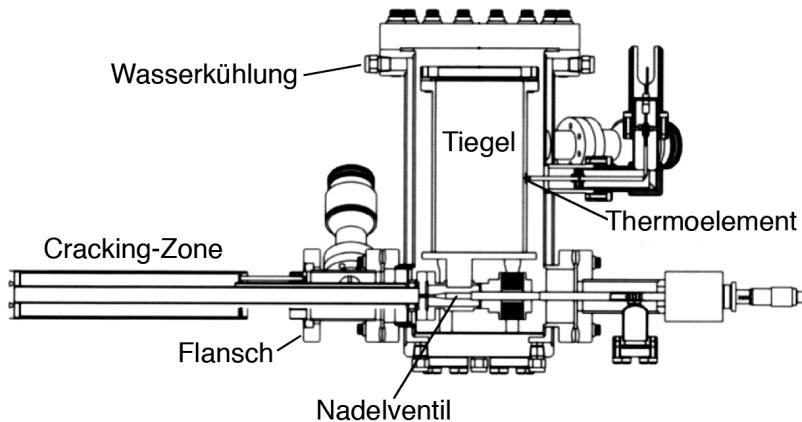


**Bild 4.4:** Verschiedene Typen von Effusionszellen für Gruppe-III-Elemente (nach Veröffentlichungen der Firma Veeco).

Die Ga4- und Al5-Zelle weisen hingegen eine andere Bauform auf. Diese sogenannten Sumo-Zellen sind ähnlich wie eine Flasche aufgebaut. Aufgrund des großen Bauchs verfügt die Sumo-Zelle über ein etwa viermal so großes Fassungsvermögen, so daß sie weniger oft nachgefüllt werden muß. Durch die schmale Öffnung der Zelle werden Verunreinigungen minimiert, was vor allem für das Wachstum von Proben mit einer hohen Ladungsträgerbeweglichkeit vorteilhaft ist. Dies hat allerdings auch den Nachteil, daß das verdampfte Material an der kälteren Öffnung kondensieren kann und dort zu Tröpfchenbildung führt. Diese Tröpfchen können die kleine Öffnung teilweise verdecken und so zu einem inhomogenen Molekularstrahl führen. Außerdem können diese Tröpfchen auf die Probenoberfläche gelangen und dort zu  $\mu\text{m}$ -großen Wachstumsdefekten führen. Dieser Nachteil wird zum Teil dadurch ausgeglichen, daß der Hals der Zelle durch eine zweite Heizung erhitzt und so die Tröpfchenbildung verringert wird. Ganz unterdrücken läßt sie sich hierdurch jedoch nicht.

Die Indium-Zelle zeigt aufgrund der Kammergeometrie nach unten. Hier wird eine spezielle nach unten gerichtete Sumo-Zelle eingesetzt, die einen Knick im Flaschenhals hat, so daß das Material nicht einfach herausfließen kann. Durch die nochmals verkleinerte Zellenöffnung kann die Problematik der Bildung von kondensierten Tröpfchen bei dieser Zelle noch stärker auftreten.

Als Arsenquelle wird eine sogenannte *Valved-cracker*-Zelle verwendet (Bild 4.5), in der Arsen vorwiegend zu  $\text{As}_4$ -Molekülen sublimiert. Die Zelle hat einen relativ großen Vorratstiegel, da beim MBE-Wachstum Arsen in deutlich größeren Mengen als die übrigen Elemente verbraucht wird. Da sich die Temperatur aufgrund der Größe nur relativ langsam ändert, besitzt diese Zelle ein motorisiertes Ventil, mit dem der Arsen-Fluß schnell und präzise eingestellt werden kann. Die verwendete Zelle hat ferner eine sogenannte *Cracking*-Zone, in der die  $\text{As}_4$ -Moleküle bei einer Temperatur von  $1000^\circ\text{C}$  in  $\text{As}_2$ -Moleküle gespalten werden können. Dies kann die Wachstumskinetik

**Bild 4.5:**

Schemazeichnung der Arsen-Zelle (nach Veröffentlichungen der Firma Veeco).

abhängig von den übrigen Wachstumsparametern verbessern.

## Temperaturmessung

Da die Wachstumskinetik entscheidend durch die Temperatur der Substratoberfläche bestimmt wird, ist es nötig, diese Temperatur so genau wie möglich zu messen. In der D-Kammer geschieht dies durch ein Pyrometer. Bei der Pyrometrie wird die Intensität der vom Substrat ausgesandten Wärmestrahlung bei einer bestimmten Wellenlänge gemessen. Nach dem Planckschen Strahlungsgesetz kann daraus mit einer geeigneten Kalibrierung die Temperatur berechnet werden. Die Pyrometrie liefert gute relative Meßwerte, die absoluten Temperaturen sind jedoch mit einer vergleichsweise großen Unsicherheit behaftet. Daher ist es schwierig, Wachstumstemperaturen zwischen verschiedenen MBE-Anlagen oder von Proben, die mit einem großen zeitlichem Abstand gewachsen wurden, zu vergleichen.

Eine grobe Kontrolle dieser Kalibrierung ergibt sich durch Beobachtung der Oxiddesorption von der Waferoberfläche. Allgemein werden GaAs-Substrate vom Hersteller mit einer Oxidschicht versehen, um die Oberfläche zu schützen. Kurz vor dem MBE-Wachstum wird diese Oxidschicht durch Heizen der Probe entfernt. Das Verschwinden des Oxyds tritt bei einer Temperatur von etwa 600 °C auf und kann im RHEED-Beugungsbild beobachtet werden. Auf diese Weise kann mit einer Genauigkeit von etwa  $\pm 15^\circ\text{C}$  nachgeprüft werden, ob das Pyrometer an diesem Punkt die richtige Temperatur anzeigt.

Eine alternative Meßmethode, die sogenannte Bandkanten-Thermometrie, gilt allgemein als wesentlich genauer. Dabei wird durch ein Spektrometer die Bandlücke von GaAs gemessen und aus deren Temperaturabhängigkeit die Probentemperatur bestimmt. Dieses Verfahren wird mittlerweile regelmäßig bei der C-Kammer für das Wachstum bei niedrigeren Substrattemperaturen eingesetzt. Um das Pyrometer in

der D-Kammer zu überprüfen, wurde von Martin Utz und Christian Reichl hier eine Kontrollmessung mit der Bandkanten-Thermometrie durchgeführt. Dabei ergaben sich Temperaturen, die um 35 bis 80 °C über der vom Pyrometer gemessenen Temperatur lagen. Eine derart große Abweichung erscheint unrealistisch, zumal die durch die Bandkanten-Thermometrie gemessenen Werte nicht mit der beobachteten Oxid-desorption konsistent sind. Vermutlich ist die Kalibrierung der GaAs-Bandlücke in dem verwendeten Gerät für höhere Temperaturen zu ungenau. Nichtsdestotrotz ist diese Messung ein Hinweis darauf, daß das Pyrometer in der D-Kammer möglicherweise zu geringe Temperaturen anzeigt.

## Steuerungssoftware

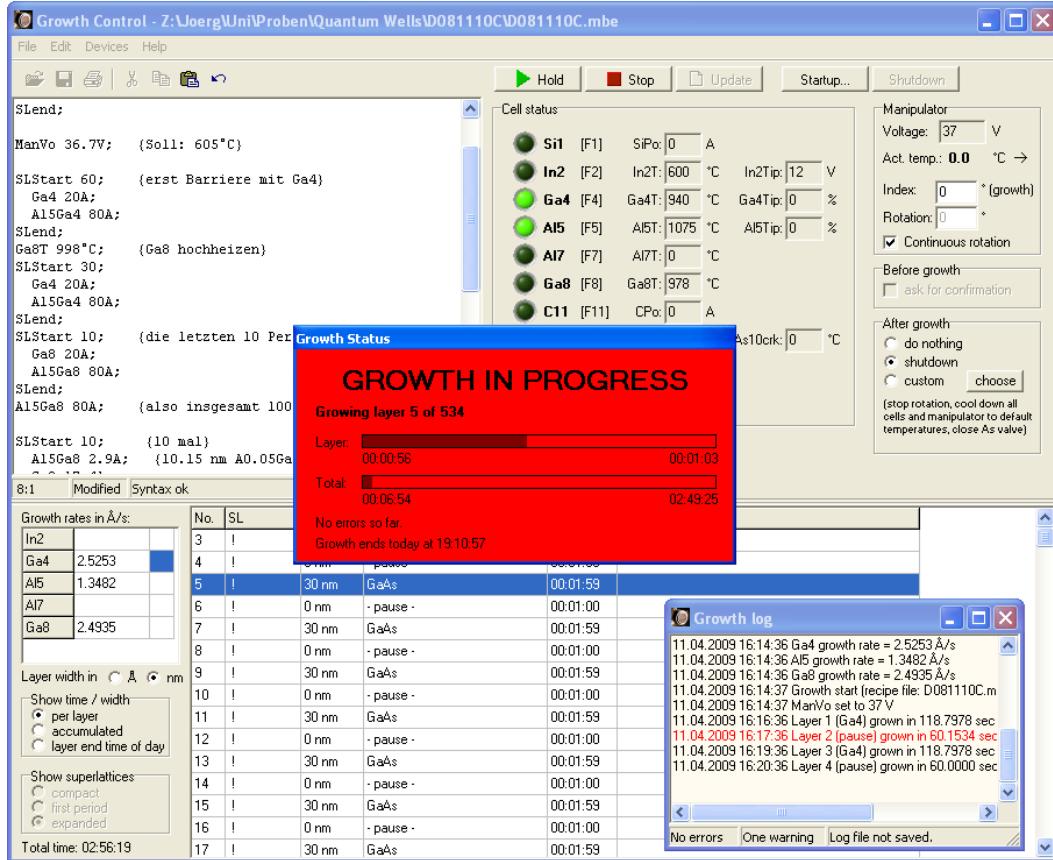
Nachdem das Substrat in die MBE-Kammer eingeschleust und alle Temperaturen und übrigen Parameter eingestellt sind, verläuft das eigentliche Wachstum der verschiedenen Schichten komplett computergesteuert, ohne daß ein manueller Eingriff nötig ist. Das hierzu verwendete Steuerungsprogramm erhält ein Wachstumsrezept, in dem aufgelistet ist, welche Schichtdicken mit welchen Materialien und Parametern aufgewachsen werden sollen. Während des Wachstums werden dann die Zellenshutter zum richtigen Zeitpunkt geöffnet und geschlossen und gegebenenfalls weitere Parameter wie zum Beispiel Temperaturen eingestellt.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Steuerungssoftware komplett überarbeitet. Die neue Software beinhaltet neben dem eigentlichen Wachstumsprogramm einen Editor für Wachstumsrezepte, eine Schichtliste, in der die einzelnen Schichten der zu wachsenden Probe übersichtlich aufgeführt sind, eine Steuerung für das automatische Hoch- und Herunterfahren der Anlage sowie die Möglichkeit zur manuellen Einstellung aller computergesteuerten Parameter. Bild 4.6 zeigt die Benutzeroberfläche. Zu den Vorteilen der neuen Software zählen unter anderem:

- höhere Sicherheit gegen Fehlbedienung durch mehr Kontrollen und gegebenenfalls Nachfragen des Programms sowie eine transparentere und konsistenter Benutzeroberfläche
- höherer Komfort beim Erstellen des Wachstumsrezeptes durch Syntaxprüfung und Umrechnung in eine übersichtliche Schichtliste während der Eingabe
- erhöhte Portabilität und Erweiterbarkeit der Software. Durch den konsequenten Einsatz von objektorientierten Programmiertechniken kann die Software ohne Änderung am Code auf beiden MBE-Kammern zu Einsatz kommen und vergleichsweise leicht auf die Ansteuerung von neuen Geräten angepaßt werden.
- zu Beginn wird während der Initialisierung geprüft, ob alle Geräte angesteuert werden können. Werden bestimmte Geräte nicht gefunden, wird dies detail-

liert gemeldet und die Software kann trotzdem mit entsprechend eingeschränkter Funktionalität verwendet werden.

- höhere Ablaufgeschwindigkeit durch die Verwendung der Compilersprache Delphi als bei der bisherigen in LabView programmierten Software



**Bild 4.6:** Die Benutzeroberfläche der neuen MBE-Steuerung „GrowthControl“

### 4.3 Wachstum von indiumhaltigen Schichten

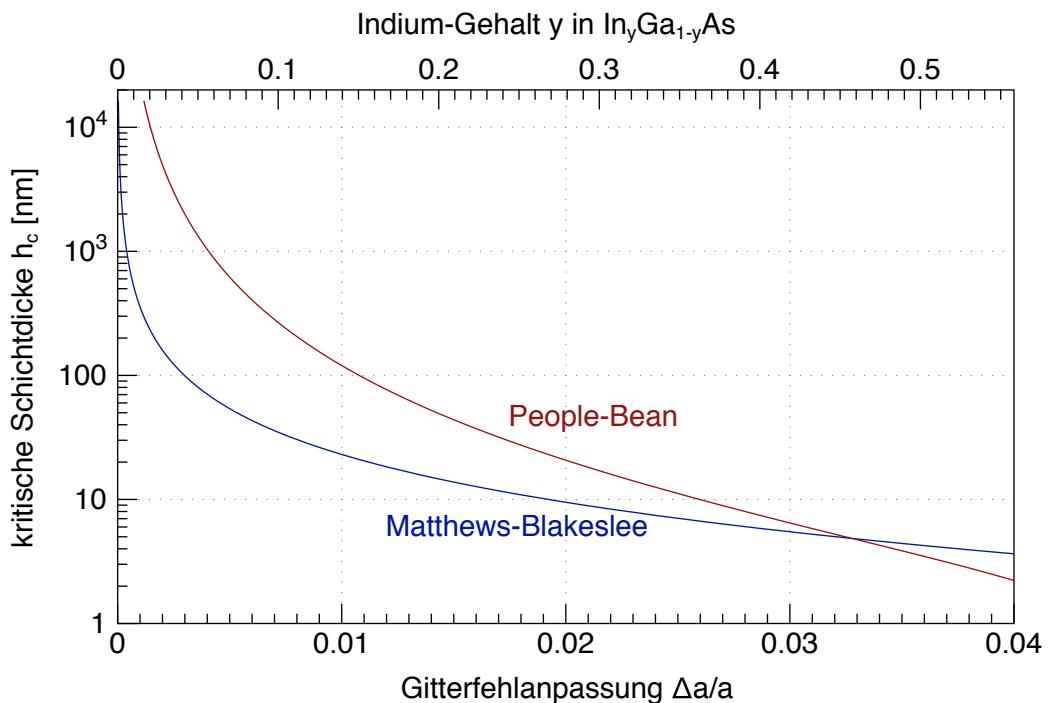
Indiumhaltige Schichten führen im GaAs-Materialsystem zu Verspannungen und zur Verringerung der Bandlücke. Beides läßt sich ausnutzen, um Strukturen mit neuartigen Eigenschaften herzustellen. Allerdings muß beim Wachstum von Indium auf einige Besonderheiten Rücksicht genommen werden.

Indium diffundiert beim Wachstum sehr leicht in angrenzende Schichten. Dieser Effekt ist als Oberflächensegregation bekannt und tritt grundsätzlich bei allen Materialien auf, ist aber bei Indium besonders ausgeprägt [Jen99, Moi89]. Durch Reduzierung der Wachstumstemperatur auf etwa 530 °C kann die Indium-Segregation verringert werden, allerdings werden dann auch die Grenzflächen zu den angrenzenden Schichten

rauer. In Abschnitt 4.4 wird genauer auf die Oberflächensegregation eingegangen und theoretische Modelle dafür vorgestellt.

## Kritische Schichtdicke

Die kritische Schichtdicke  $h_c$ , bis zu der pseudomorphes Wachstum von verspannten Schichten möglich ist, hängt vor allem von der relativen Gitterfehlانpassung  $\Delta a/a$  ab. Bei indiumhaltigen Schichten ist also der Indium-Anteil entscheidend. Es gibt verschiedene Modelle zur Berechnung der kritischen Schichtdicke. Die bekanntesten sind das Kräftegleichgewichtsmodell nach Matthews und Blakeslee [Mat74] und das Energiegleichgewichtsmodell nach People und Bean [Peo85]. Bild 4.7 zeigt die mit diesen beiden Modellen berechneten kritischen Schichtdicken.



**Bild 4.7:** Berechnung der kritischen Schichtdicke  $h_c$  nach zwei unterschiedlichen Modellen in Abhängigkeit von der relativen Gitterfehlانpassung (untere Skala) bzw. dem Indium-Gehalt in InGaAs (obere Skala).

Es zeigt sich, daß beide Modelle deutlich voneinander abweichen. Außerdem lassen sich in der Praxis oft Proben herstellen, die die theoretische kritische Schichtdicke übersteigen und dennoch gute optische und elektrische Eigenschaften aufweisen [Sch05].

Eine Erklärung hierfür ist, daß beide Modelle voraussetzen, daß das Wachstum im thermodynamischen Gleichgewicht verläuft. Das MBE-Wachstum findet jedoch jenseits vom Gleichgewicht statt, was eine größere kritische Schichtdicke erwarten läßt.

Außerdem hängt die Qualität der gewachsenen Schichten noch von vielen weiteren Parametern ab (siehe Kapitel 7), so daß diese Modelle nur einen ersten Anhaltspunkt liefern können und letzten Endes die kritische Schichtdicke in der Praxis durch Ausprobieren ermittelt werden muß.

## Indium-Rateneichung

Für die Bestimmung der Wachstumsraten von AlAs und GaAs wird beim RHEED-Verfahren eine spezielle RHEED-Probe verwendet. Aufgrund der unterschiedlichen Gitterkonstanten kann InAs jedoch nicht ohne weiteres auf diese Probe aufgewachsen werden. Um die Wachstumsrate von InAs trotzdem bestimmen zu können, gibt es vier Möglichkeiten:

1. Man verwendet ein spezielle RHEED-Probe mit einem InAs-Substrat. Allerdings sind InAs-Substrate relativ teuer und schwierig in der Anwendung. Außerdem würde eine zusätzliche RHEED-Probe mehr Aufwand beim Schleusen und Transferieren bedeuten. In Regensburg wird diese Möglichkeit daher nicht eingesetzt.
2. Es werden sehr dünne Schichten von InAs auf die normale RHEED-Probe aufgewachsen. Aufgrund der Verspannungen setzt dabei nach ein bis zwei Monolagen das dreidimensionale Wachstum von InAs-Quantenpunkten ein. Dieser Übergang ist im RHEED-Beugungsbild gut zu beobachten. Aus der kurzen Zeitdauer bis zum Einsetzen des dreidimensionalen Wachstums lässt sich die Wachstumsrate berechnen. Dieses Verfahren lässt sich jedoch nur für kleine Wachstumsraten einsetzen und ist auch dann noch sehr ungenau. Außerdem muß die RHEED-Probe nach jedem Versuch durch Überwachsen mit GaAs- und AlAs-Schichten aufwändig geglättet werden.
3. Man wächst abwechselnd Schichten aus AlAs und  $\text{In}_{0,2}\text{Al}_{0,8}\text{As}$  auf die RHEED-Probe auf. Die Verspannungen sind wegen des geringeren In-Gehalts klein genug, um dünne Schichten pseudomorph ohne Gitterfehler aufzubringen. Die Wachstumsraten für diese beiden Materialien werden ganz normal mit RHEED gemessen und aus deren Differenz die Wachstumsrate von InAs bestimmt. Da Indium hier nur zu 20 % zum Wachstum beiträgt, ist die Genauigkeit dieser Rateneichung entsprechend um den Faktor 5 geringer. Daher muß diese Eichung mehrere Male wiederholt werden. Da dies einige Zeit in Anspruch nimmt, wird die Eichung in der Regel seltener durchgeführt. Aufgrund des kontinuierlich abnehmenden Füllstands der Indiumzelle ergeben sich hierdurch weitere Ungenauigkeiten.

4. Man wächst eine Testprobe mit zwei InGaAs-Übergittern mit unterschiedlichem nominellen Indiumgehalt und bestimmt nachträglich durch Röntgendiffraktometrie die Wachstumsraten. Dabei wird durch Röntgenbeugung für beide Übergitter jeweils die Periodenlänge und die mittlere Gitterkonstante bestimmt. Aus dem Vergleich der Gitterkonstanten ergibt sich der tatsächliche relative Indiumgehalt. Zusammen mit der gemessenen Periodenlänge lassen sich daraus die tatsächlichen Wachstumsraten für GaAs und InAs berechnen.

## 4.4 Grenzflächen in Heterostrukturen

Die Qualität der Grenzflächen zwischen verschiedenen Materialien hat entscheidenden Einfluß auf die optischen und elektrischen Eigenschaften von Heterostrukturen. In der Regel werden möglichst glatte Grenzflächen angestrebt, die bei optischen Messungen geringere Linienbreiten und ein stärkeres PL-Signal bewirken. Bei der Molekularstrahlepitaxie ist es grundsätzlich nicht möglich, perfekt atomar glatte Schichten zu wachsen, da immer schon eine neue Schicht anfängt zu entstehen, bevor die vorige komplett abgeschlossen ist. Aus diesem Grund gibt es in epitaktisch hergestellten Heterostrukturen stets Grenzflächenfluktuationen, deren Ausmaß von den gewählten Wachstumsparametern abhängt. Bei ternären Halbleitern wie beispielsweise AlGaAs kommt hinzu, daß perfekt glatte Grenzflächen prinzipiell nicht möglich sind, da hier der Kristall eine Legierung mit statistisch verteilten Atomen ist. Die Form der Grenzflächen wird beim MBE-Wachstum vor allem durch zwei Prozesse an der Oberfläche bestimmt, die in den folgenden beiden Abschnitten erläutert werden.

### Oberflächenmigration

Durch Wachstumspausen von etwa einer Minute an den Grenzflächen kann sich das PL-Spektrum der Probe wie in Kapitel 2.5 beschrieben in mehrere Signale aufspalten, die jeweils für sich eine schmalere Linienbreite aufweisen. Diese Wachstumspausen bewirken, daß sich einzelne Atome auf der Oberfläche verstärkt bewegen (Oberflächenmigration) und Löcher in der Schicht ausfüllen, so daß sich großflächige glattere Bereiche bilden, die Durchmesser von einigen  $\mu\text{m}$  erreichen können [Her91]. Durch Oberflächenmigration beim Wachstum werden die Grenzflächen also allgemein glatter. Ohne Wachstumspause hingegen weist die Oberfläche vor allem kurzreichweitige Fluktuationen in der Größenordnung von wenigen nm auf. Bei Untersuchungen an Quantenfilmen, bei denen nur an einer der beiden Grenzflächen eine Wachstumspause eingelegt wurde, hat sich gezeigt, daß sich die GaAs-Oberfläche allgemein schneller glättet als die AlGaAs-Oberfläche [Kop91]. Dies läßt sich auf die geringere Oberflächenbeweglichkeit

von Aluminium zurückführen. Die Dynamik der Oberflächenmigration lässt sich qualitativ bei der RHEED-Messung beobachten. Schließt man eine Effusionszelle, nimmt die Intensität des RHEED-Signals noch eine Weile zu bis sie nach etwa einer Minute den Endwert erreicht.

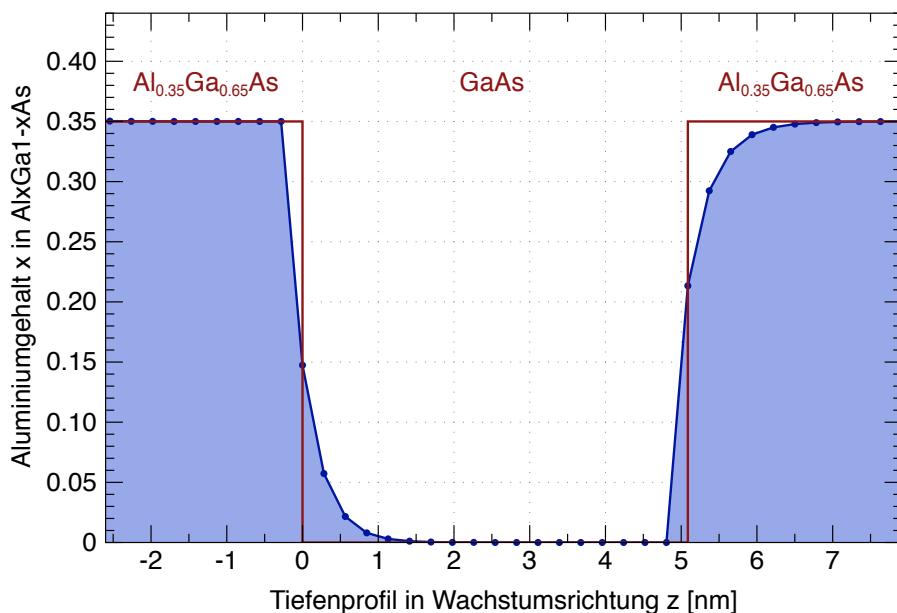
Ursprünglich wurden die scharfen PL-Signale bei Quantenfilmen, die mit Wachstumspausen hergestellt wurden, auf großflächige atomar glatte Bereiche an den Grenzflächen zurückgeführt, deren Dicken sich jeweils um eine Monolage unterscheidet [Her91]. Warwick *et. al.* haben 1990 jedoch darauf hingewiesen [War90], daß die Abstände der Signale im PL-Spektrum bei bis dahin gemessenen Proben meistens eher einem Abstand von etwa 0,8 ML entsprechen. Diese Diskrepanz lässt sich nur dadurch erklären, daß die Grenzflächenrauigkeiten in Wirklichkeit eine deutlich komplexere Statistik aufweisen. Genauere Untersuchungen mit Raman-Streuung und Kathodolumineszenz-Mikroskopie ergaben, daß in der Regel eine Kombination von kurz- und langreichweitigen Fluktuationen vorliegt [Gam91, War92].

## Oberflächensegregation

Ein weiterer Prozeß, der das Wachstum an den Grenzflächen bestimmt, ist die sogenannte Oberflächensegregation [Sch06]. Dies bedeutet, daß Atome beim Wachstum zwischen den Schichten diffundieren. So kann zum Beispiel ein Atom an der Oberfläche mit einem anderen, das in der nächsttieferen Atomlage sitzt, den Platz tauschen. Sind unmittelbar unter der Oberfläche verschiedene Atomsorten vorhanden, wie zu Beispiel beim Wachstum von Verbindungen oder an Grenzflächen, so hat eine Atomsorte immer eine höhere Wahrscheinlichkeit, an die Oberfläche zu diffundieren. Dieser Effekt tritt vor allem in indiumhaltigen Schichten auf, aber in geringerem Ausmaß auch bei AlAs und GaAs [Leo00]. Die Segregation an der Oberfläche lässt sich durch Augerelektronenspektroskopie oder Röntgen-Photoemissionsspektroskopie messen [Moi89]. Es zeigt sich, daß sich auf einer AlGaAs-Oberfläche stets mehr Gallium befindet als in den darunterliegenden Schichten. Gallium hat demzufolge eine stärkere Tendenz als Aluminium, an die Oberfläche zu diffundieren. Bei InAlAs- oder InGaAs-Schichten findet sich stets mehr Indium an der Oberfläche.

Zur Beschreibung der Oberflächensegregation wurden verschiedene Modelle entwickelt. Ein einfaches Modell geht davon aus, daß die Gallium- bzw. Indiumatome in der gerade gewachsenen Schicht mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit in die darauf folgende Schicht diffundieren [Mur92]. Ein anderes Modell betrachtet die Oberflächensegregation als Gleichgewichtsreaktion und leitet das Profil der Materialzusammensetzung aus dem Massenwirkungsgesetz her [Ger92]. Ein mit diesem Modell berechnetes Tiefenprofil der Materialzusammensetzung für einen Quantenfilm ist in Bild 4.8 dar-

gestellt. Dieses Modell setzt jedoch ein thermodynamisches Gleichgewicht voraus und gilt daher für das MBE-Wachstum nur näherungsweise. In [Deh94] findet sich darüber hinaus ein kinetisches Modell und in [Gra96] eine Monte-Carlo-Simulation der Oberflächensegregation. Leider lässt sich die Oberflächensegregation experimentell nur sehr ungenau bestimmen [Moi89]. Somit sind die Daten, die den theoretischen Modellen zugrundeliegen, zwar ausreichend, um den Effekt qualitativ zu verstehen, aber nicht genau genug, um zuverlässige quantitative Aussagen treffen zu können. Daher wird an dieser Stelle darauf verzichtet, die Rechnungen weiter zu vertiefen.



**Bild 4.8:** Berechnung der Oberflächensegregation mit dem in [Ger92] vorgestellten Modell für das Wachstum eines in  $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$  eingebetteten 5,09 nm breiten GaAs-Quantenfilms. Die rote Linie zeigt das nominelle Tiefenprofil des Aluminiumgehaltes. Die blau markierte tatsächliche Verteilung zeigt die Aufweichung der Grenzfläche. Die blauen Punkte entsprechen den einzelnen Monolagen.

Die Oberflächensegregation hat für das Wachstum von Quantenfilmen zwei Konsequenzen. Zum einen werden wie in Bild 4.8 zu sehen ist die beiden Grenzflächen zwischen dem Quantenfilm und den Barrieren aufgeweicht. Dies führt nach Berechnungen in [Leo00] zu einer Erhöhung der Übergangsenergie um etwa 10 meV für GaAs-Quantenfilme. Zum anderen werden die Grenzflächen rauer und damit die optischen Linien verbreitert.

In diesem Zusammenhang ist zu beachten, daß die Oberflächensegregation zwar zu raueren Grenzflächen zwischen zwei Schichten, aber nicht zu raueren Oberflächen führt, da die Rauigkeiten erst beim Überwachsen einer Oberfläche entstehen. Wenn

sich auf Rastersondenmikroskopie-Aufnahmen von MBE-gewachsenen Oberflächen atomar glatte Bereiche zeigen [Kop93, Yos02], bedeutet dies also nicht zwangsläufig, daß beim Überwachsen dieser Oberflächen die entstehenden Grenzflächen ebenso glatt sind [Leo00].

## 4.5 Technische Details zum Überwachsen von Spaltflächen

In den folgenden Abschnitten werden die einzelnen Schritte des CEO-Verfahrens genau beschrieben. Dabei wird besonderes Augenmerk auf diejenigen Details gelegt, die in früheren Arbeiten noch nicht behandelt wurden, aber entscheidenden Einfluß auf die Qualität der gewachsenen Proben haben.

### Wachstum in der [001]-Richtung

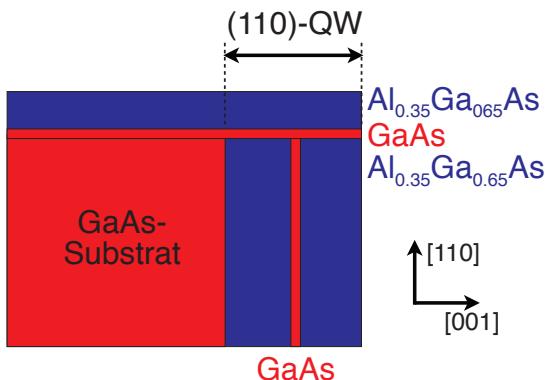
Der erste Schritt beim CEO-Verfahren besteht aus dem Wachstum eines oder mehrerer Quantenfilme in [001]-Richtung, die in Barrieren aus AlGaAs eingebettet sind. Die Standardparameter für dieses Wachstum sind eine Substrattemperatur von 580 bis 640 °C, ein Arsen-Partialdruck von 6 bis  $7 \cdot 10^{-6}$  Torr<sup>1</sup> und eine Wachstumsrate von 2,4 Å/s für GaAs.

Zuerst wird auf den Wafer ein GaAs-Puffer aufgewachsen, um dessen noch relativ raue Oberfläche zu glätten. Das Wachstum dieser 300 nm dicken GaAs-Schicht wird alle 30 nm durch eine Wachstumspause von 1 Minute unterbrochen, damit die Atome durch Oberflächenmigration eventuelle Unebenheiten ausfüllen können.

Der eigentliche Quantenfilm wird von beiden Seiten von einer je mindestens 1 µm dicken Barriere umgeben. Der Grund für die Dicke dieser Barriere liegt in der Geometrie der CEO-Strukturen (Bild 4.9). Die nach dem Spalten überwachsene Schicht stellt nur dort einen Quantenfilm dar, wo beim ersten Wachstumsschritt eine Barriere aufgewachsen wurde. Somit wird durch die Dicke der AlGaAs-Barriere beim ersten Wachstumsschritt die Gesamtlänge des überwachsenen Quantenfilms festgelegt. Bei der Photolumineszenz wird in der Regel ein Exziton in einem der angrenzenden Quantenfilme erzeugt, das dann in den Quantendraht bzw. -punkt relaxieren kann. Die Diffusionslänge der Ladungsträger (also die durchschnittliche Strecke, die sie zurücklegen, bevor sie rekombinieren) beträgt in GaAs-Quantenfilmen nach [Gro94] etwa 0,5 µm. Aus diesem Grund sollten die Barrieren mindestens 1 µm dick sein, damit möglichst

---

<sup>1</sup>Der Arsen-Partialdruck beim MBE-Wachstum wird in dieser Arbeit in Torr angegeben. 1 Torr = 1,33 hPa



**Bild 4.9:** Schematischer Aufbau einer CEO-Quantendraht-Probe. Die in [110]-Richtung überwachsene Schicht stellt nur dort einen Quantenfilm dar, wo sie auf beiden Seiten von einer AlGaAs-Barriere umgeben ist.

viele Ladungsträger in den Quantendraht bzw. -punkt gelangen und so zu einem stärkeren PL-Signal führen.

Da die Ladungsträger am Ort der T-förmigen Kreuzung in den Quantendraht bzw. -punkt relaxieren, ist an dieser Stelle oft keine Lumineszenz aus den Quantenfilmen zu sehen. Möchte man die Lumineszenz aus dem überwachsenen Quantenfilm messen, bietet es sich an, die Barriere beim ersten Wachstumsschritt noch dicker zu wachsen. Alternativ kann man auch beim Überwachsen als Referenz einen zweiten identischen (110)-Quantenfilm in gewissem Abstand vom ersten aufbringen.

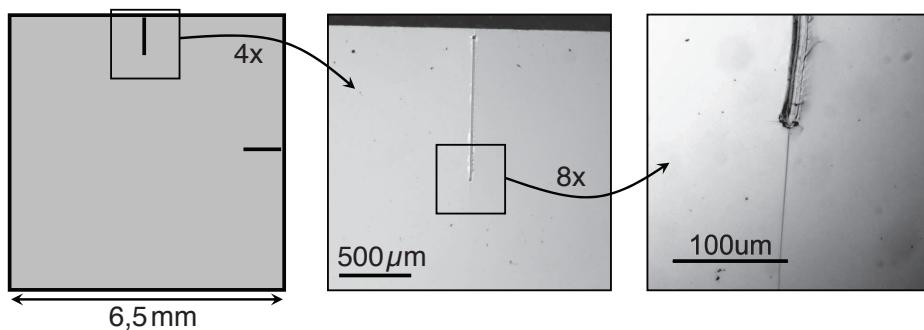
Für das Wachstum der AlGaAs-Barriere gibt es verschiedene Möglichkeiten, die in Kapitel 7.3 dargestellt und untersucht werden. Zum Ende des Wachstums wird noch eine 10 nm dicke Deckschicht aus GaAs aufgebracht, damit keine Oxidation von Aluminium an Luft stattfinden kann.

## Dünnen des Wafers

Damit die Proben beim CEO-Verfahren atomar glatt spalten können, muß die Dicke des Wafers von 400 auf etwa 100  $\mu\text{m}$  reduziert werden. Dies geschieht durch einen chemisch-mechanischen Dünnprozess. Dabei wird der Wafer mit der epitaktisch gewachsenen Seite auf einen Glasträger aufgeklebt und die Rückseite des Wafers gleichmäßig über ein Labortuch gerieben, das mit Brommethanol ( $\text{Br}_2\text{CH}_3\text{OH}$ ) getränkt ist. Während des Dünnens wird die Dicke an verschiedenen Stellen des Wafers wiederholt mit einer Mikrometerfederuhr gemessen, um die Solldicke von 100  $\mu\text{m}$  möglichst genau zu erreichen. Ist der Wafer dicker als etwa 120  $\mu\text{m}$ , spalten die Probenstücke beim CEO oft nicht atomar glatt. Wird der Wafer dünner als etwa 90  $\mu\text{m}$ , kann es leicht passieren, daß die Probenstücke beim weiteren Prozessieren vorzeitig brechen.

## Teilen, Anritzen und Reinigen der Proben

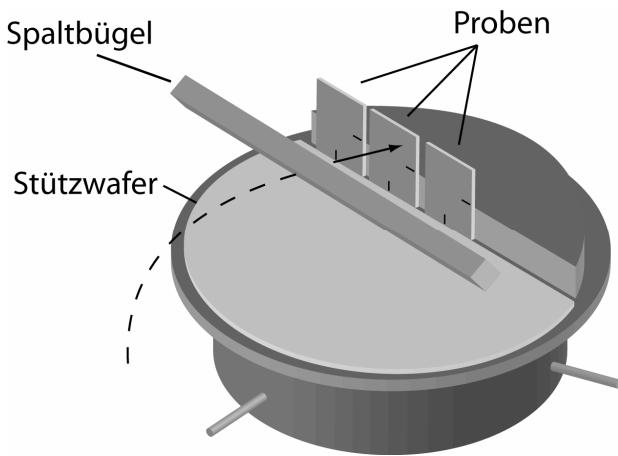
Das so gedünnte Substrat wird durch einen computergesteuerten Ritztisch in etwa  $6,5 \times 6,5$  mm große Probenstücke geteilt. Anschließend werden diese Stücke an einer oder zwei Kanten mit einem senkrechten 1 mm langen Ritz versehen. Dazu wird die Ritznadel mit einem Gewicht von etwa 60 g beschwert. Da die Probenstücke sehr dünn sind, werden sie zum Anritzen mit einem speziellen Wachs bei 125 °C auf einen Glasträger aufgeklebt. Dieser Ritz wirkt als Sollbruchstelle und legt für das folgende *in-situ* Spalten die Position der Spaltfläche fest. Da der Ritz möglichst präzise durchgeführt werden muß, empfiehlt es sich, für das Anritzen eine eigene Ritznadel zu verwenden, die nicht schon durch häufigen Gebrauch stumpf geworden ist.



**Bild 4.10:** Schema und lichtmikroskopische Aufnahmen eines zweifach angeritzten Probenstücks. Rechts ist zu sehen, wie sich der Ritz als feiner Haarriß fortpflanzt. (aus [Neu08])

Für CEO-Quantendrähte benötigt man einen Ritz, für Quantenpunkte zwei Ritze. In Bild 4.10 ist eine zweifach angeritzte Probe abgebildet. Es empfiehlt sich, die Ritze im Lichtmikroskop zu kontrollieren. In der Regel pflanzt sich der Ritz wie im Bild rechts zu sehen in Form eines Haarrisses fort. Auch auf der Unterseite der Proben ist oft ein Haarriß zu erkennen. Diese gelten allgemein als gutes Zeichen dafür, daß die Probe später atomar glatt spalten kann, ohne daß sich Stufen bilden [Sch99]. Eine signifikante Korrelation zwischen den Haarrissen und der Qualität der Spaltkante konnte in dieser Arbeit jedoch nicht bestätigt werden. Allerdings kann ein nicht vorhandener Haarriß ein Hinweis darauf sein, daß der Ritz nicht tief genug ist. Ist der Haarriß zu lang, kann dies von Nachteil sein, da zum einen die Spaltkante an dieser Stelle bereits oxidiert und zum anderen die Probe dann sehr leicht vorzeitig durchbrechen kann.

Die genaue Geometrie der Probenstücke ist durch den Aufbau der CEO-Probenhalter für die MBE und des CEO-Spaltbügels (siehe Bild 4.11) bestimmt und muß sehr genau eingehalten werden. Ist die Probe etwas zu groß, stößt sie beim Einschleusen in die MBE gegen den Greifer, mit dem die Probenhalter bewegt werden, und bricht vorzeitig durch. Ist sie dagegen zu klein, wird sie möglicherweise nicht durch den CEO-



**Bild 4.11:** Schematische Darstellung eines CEO-Probenhalters mit darauf montierten Probenstücken, die für die Herstellung von Quantenpunkten zweifach angeritzt sind. In der MBE-Kammer trifft der CEO-Spaltbügel in der ange deuteten Richtung auf die Proben (aus [Neu08]).

Spaltbügel in der MBE-Kammer erfaßt.

Die Abmessungen der verschiedenen Probenhalter variieren leicht aufgrund von Fertigungstoleranzen und Abrieb beim gelegentlichen Polieren der Halter. Die erforderliche Größe der Probenstücke muß daher für jeden Probenhalter individuell bekannt sein und liegt zur Zeit im Bereich von 6,5 bis 6,8 mm. Entsprechend ist die Lage des Ritzes anzupassen.

Da in der MBE-Wachstumskammer jede auch noch so geringe Verunreinigung zu vermeiden ist, müssen die Probenstücke vor dem Einschleusen mit einer speziellen Prozedur gereinigt werden. Dabei werden sie zweimal für je 20 bis 30 min in einem Bad aus besonders reinem Aceton („Selectipur“) bei 60 °C und danach wiederum zweimal für je 20 bis 30 min in entsprechend reinem Methanol bei 70 °C gespült. Vor der letzten Reinigung wird das dazu verwendete Becherglas noch einmal mit etwas Methanol ausgeschwenkt.

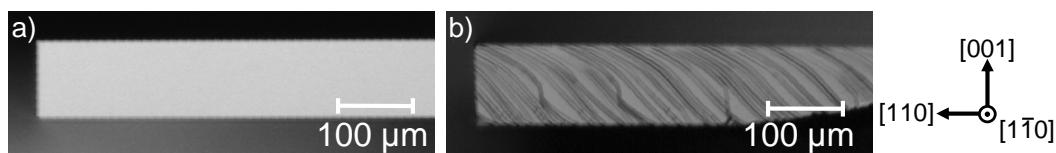
Zum Einschleusen in die MBE-Kammer werden die Probenstücke auf einem speziellen CEO-Probenhalter montiert, auf dem sie aufrecht stehen, so daß sie in der Kammer durch den CEO-Spaltbügel gespalten werden können (Bild 4.11). Auf diesem Probenhalter aus Tantal werden die Stücke mit flüssigem Gallium befestigt und durch einen Stützwafer sanft eingeklemmt. Da die gedünnten und angeritzten Probenstücke sehr leicht zerbrechen, muß dabei extrem behutsam vorgegangen werden<sup>2</sup>. Ist der Halter vollständig bestückt, wird er in den Transferkanal der MBE eingeschleust und dort bei ca. 400 °C ausgeheizt.

---

<sup>2</sup>Möchte man 5 Probenstücke auf den CEO-Halter montieren, empfiehlt es sich, beim Anritzen mit 7 Stücken zu beginnen, da fast immer ein oder zwei Stücke vor dem Einschleusen zerbrechen.

## Spalten der Probe

Das CEO-Verfahren basiert auf dem atomlagengenauen Spalten der Probenstücke. Daher ist der Spaltvorgang kritisch für die Qualität der gewachsenen Proben. Unter ungünstigen Bedingungen spalten die Probenstücke nicht glatt, sondern mit zahlreichen Stufen, die auch im Lichtmikroskop zu sehen sind (Bild 4.12). Diese Stufen führen zu einer schlechten Probengeometrie beim Überwachsen und damit zu schwachen und stark inhomogen verbreiterten Signalen in der PL.



**Bild 4.12:** Lichtmikroskop-Aufnahme der Spaltkanten von überwachsenen Proben. Die linke Probe ist gut gespalten und zeigt eine optisch glatte Spaltkante. Die rechte Probe hingegen ist unbrauchbar, da sie viele mikroskopische Stufen aufweist (aus [Neu08]).

Um die Qualität der Proben zu kontrollieren, werden die Spaltkanten der Probenstücke nach dem Überwachsen im Lichtmikroskop untersucht. Zeigen sich dort keine Stufen, gilt die Probe als gut gespalten. Eine glatte Spaltkante im Lichtmikroskop ist zwar kein Beweis dafür, daß die Probe wirklich (zumindest abschnittsweise) atomar glatt gespalten ist, da Stufen in der Größenordnung von Nanometern nicht optisch sichtbar sind. Erfahrungsgemäß gibt es allerdings eine starke Korrelation zwischen optisch glatten Spaltkanten im Lichtmikroskop und schmalen Linien in der PL, die auf eine gute Probengeometrie hinweisen.

Um die Ausbeute an brauchbaren Proben zu erhöhen, wurden verschiedene für das Spalten wichtige Parameter einzeln untersucht. Der Einfluß von Probendicke und Ritztiefe wurde bereits oben diskutiert. Beim Spalten ist der Winkel wichtig, unter dem der CEO-Bügel auf die Probenstücke trifft. Der Spaltbügel sollte nicht exakt parallel auf die Proben treffen, sondern um etwa 1° verkippt sein, so daß die Probenstücke zuerst an der angeritzten Seite getroffen werden und sich der Ritz von dort aus über die Probe fortpflanzen kann. Aufgrund von Ungenauigkeiten bei der Positionierung sollte der Probenhalter vor jedem Wachstum noch einmal genau ausgerichtet werden. Ferner ist es beim Spalten wichtig, den Spaltbügel langsam und gleichmäßig über die Proben zu führen. Durch diese Optimierungen wurde erreicht, daß über 80 % der Probenstücke glatt gespalten wurden.

## Überwachsen

Nach dem Spalten der Probe in der MBE-Kammer beginnt sofort das Überwachsen. Für das Wachstum auf der (110)-Spaltfläche sind besondere Wachstumsbedingungen nötig, da der Haftungskoeffizient von Arsen auf dieser unpolaren Kristallfläche deutlich geringer ist. Daher verwendet man einerseits eine niedrigere Substrattemperatur von 480 bis 500 °C, um die thermische Desorption von der Oberfläche zu verhindern und andererseits einen höheren Arsen-Partialdruck von etwa  $3 \cdot 10^{-5}$  Torr. Außerdem muß man die Wachstumsraten etwa halbieren (für GaAs auf 1,2 Å/s).

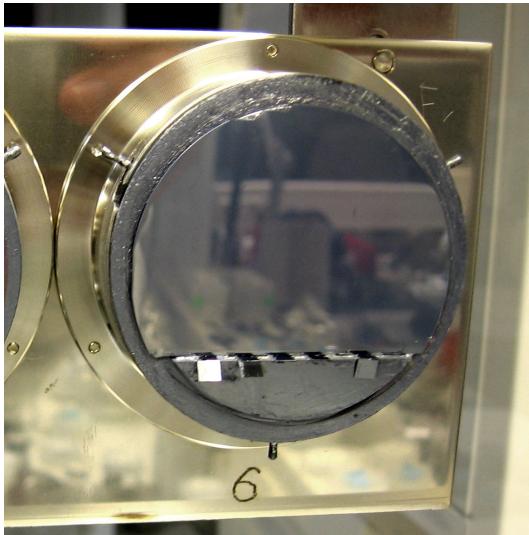
Bei der Bestimmung der Temperatur ist zu beachten, daß das Pyrometer die Temperatur des Stützwafers mißt. Es ist jedoch davon auszugehen, daß die Temperatur an der Spaltfläche niedriger ist, da dort die Wärme gut in alle Richtungen abgestrahlt werden kann und durch den dünnen Wafer weniger gut nachfließt. Abschätzungen von Dieter Schuh ergaben, daß die Temperatur an der Spaltkante um etwa 15 °C niedriger ist als die gemessene Temperatur des Stützwafers.

## Aufrichten der Probe und zweites Spalten und Überwachsen

Um Quantenpunkte zu erhalten, muß das CEO-Verfahren ein zweites Mal, jetzt in der [1̄10]-Richtung, durchgeführt werden. Dazu müssen die überwachsenen Proben aus der MBE ausgeschleust und auf dem Probenhalter mit einer Pinzette um 90 ° gedreht werden. Bei diesem Aufrichten der Probenstücke muß sehr behutsam vorgegangen werden, da die angeritzten Proben sehr leicht durchbrechen. Bei frisch gereinigten Probenhaltern ist dies kaum möglich, da die Proben in diesem Fall sehr fest am glatten Probenhalter haften. Nach dem Aufrichten werden die Proben zum erneuten Spalten und Überwachsen wieder in die MBE eingeschleust.

Wie oben beschrieben werden die Probenstücke mit flüssigem Gallium am Halter befestigt. Es hat sich als problematisch erwiesen, daß die Probenstücke nach dem Aufrichten an der Rückseite mit Gallium benetzt sind. Aufgrund der Geometrie der MBE-Kammer stehen die Probenstücke waagerecht und werden vom Spaltbügel von unten getroffen. Aufgrund der Adhäsionskraft des Galliums fallen die abgebrochenen Stücke dabei manchmal nicht herunter, sondern bleiben an der Probe oder am Halter haften und verdecken beim Überwachsen die Spaltkante (Bild 4.13). Dadurch kann die Ausbeute an Probenstücke um über 50 % reduziert werden.

Um dieses Problem zu vermeiden, wurden die Proben mit wesentlich weniger Gallium am Probenhalter befestigt. Damit sie dennoch gut haften, mußten die Seitenflächen der Probenhalter frisch poliert werden. Hierdurch konnte das Problem so weit reduziert werden, daß die abgebrochenen Stücke nur noch bei etwa 25 % der Proben haften



**Bild 4.13:** Aufgrund von Gallium an der Probenrückseite fallen die abgespaltenen Stücke teilweise nicht herunter, sondern bleiben haften und verdecken die Spaltkante. Das Photo wurde beim Ausschleusen der Proben aufgenommen. In der MBE-Kammer sind die Probenhalter um  $180^\circ$  gedreht.

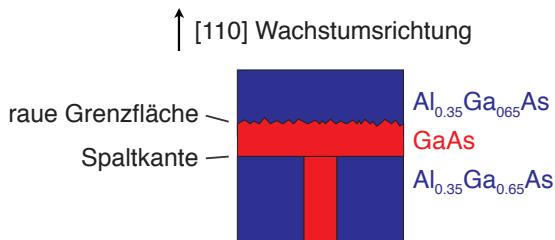
bleiben.

Die angeritzte Probe vom Gallium zu reinigen wäre sehr schwierig, da sie sehr leicht durchbricht. Man könnte dieses Problem umgehen, indem die Proben zuerst nur mit einem Ritz versehen werden und nach dem ersten Überwachsen vom Halter entfernt, gereinigt und erst danach erneut angeritzt werden. Dieses Verfahren wäre allerdings wesentlich aufwändiger. Alternativ könnte man versuchen, auf die Probenrückseite vor dem zweiten Spalten zuerst einige  $\mu\text{m}$  GaAs aufzuwachsen, um das flüssige Gallium zu verdecken. Dies würde allerdings den Materialverbrauch erhöhen.

## 4.6 Annealing

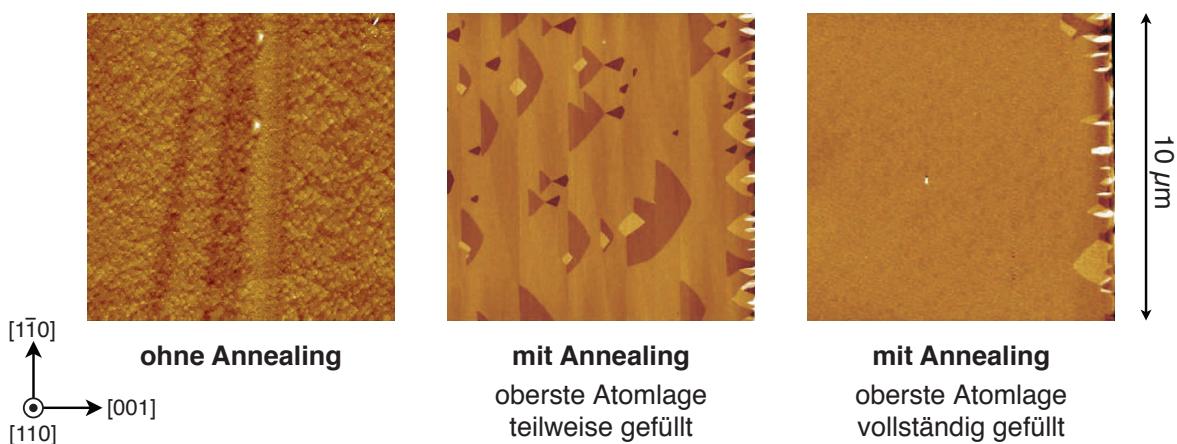
Beim Wachsen des (110)-Quantenfilms ist die untere Grenzfläche sehr glatt, da diese Schicht auf die über weite Bereiche atomar glatte Spaltfläche aufgewachsen wird und die Oberflächensegregation von GaAs bei diesen Wachstumstemperaturen gering ist. Die obere Grenzfläche ist jedoch relativ rau, da bei diesen niedrigen Temperaturen auch die Oberflächenmigration, die zur Glättung der Schicht beiträgt, vermindert ist (Bild 4.14). Dies führt zu einer Linienbreite, die etwa doppelt so groß ist wie bei gewöhnlichen (001)-Quantenfilmen. Rasterkraftmikroskopie-Aufnahmen von Elisabeth Reinwald [Rei09] zeigen, daß die obere Grenzfläche starke feinkörnige Rauigkeiten mit Höhenunterschieden von mehreren Monolagen aufweist (Bild 4.15 links).

Abhilfe schafft hier das sogenannte Annealing [Yos02]. Bei diesem Nachheizverfahren wird nach dem Wachsen des (110)-Quantenfilms das Wachstum unterbrochen, die Probe für etwa 10 Minuten auf  $600^\circ\text{C}$  erhitzt und danach bei der ursprünglichen Temperatur das Wachstum fortgesetzt. Auf diese Weise können sich die Atome auf der Oberfläche relativ weit bewegen und Unebenheiten ausfüllen.



**Bild 4.14:** Schematische Darstellung einer CEO-Probe. Aufgrund der speziellen [110]-Wachstumsbedingungen weist die obere Grenzfläche des überwachsenen Quantenfilms eine hohe Rauigkeit auf.

Durch das Annealing-Verfahren entstehen größere glatte Bereiche auf der Probenoberfläche (Bild 4.15 Mitte). Dort wo die gewachsene Quantenfilm-Schicht genau eine ganze Anzahl von Monolagen dick ist, können diese Bereiche über makroskopische Distanzen von bis zu  $100\ \mu\text{m}$  atomar glatt sein (Bild 4.15 rechts). Ist die oberste Atomlage hingegen nicht vollständig gefüllt, bilden sich Löcher mit charakteristischen Formen. Es zeigen sich hügelartige Löcher, die eine Monolage tief sind (in Bild 4.15 Mitte nach rechts gerichtet) und pfeilspitzenartige Löcher, die zwei Monolagen tief sind (im Bild nach links gerichtet). Die Orientierung dieser Strukturen hängt davon ab, ob die Schicht auf die (110)- oder die ( $1\bar{1}0$ )-Fläche aufgewachsen wurde. Dieser Zusammenhang wird im folgenden Abschnitt genauer dargestellt.



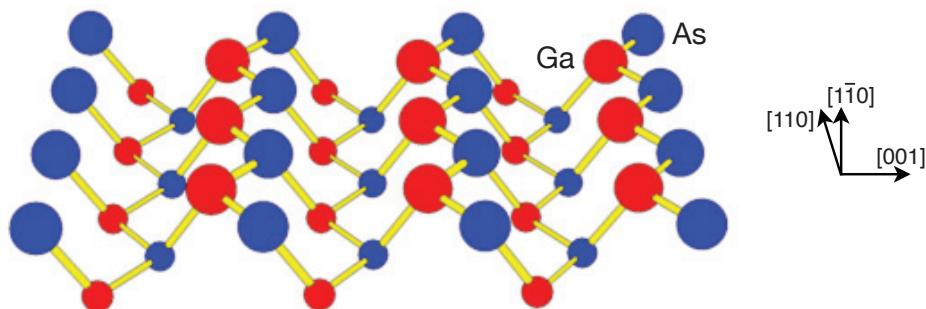
**Bild 4.15:** Rasterkraftmikroskop-Aufnahme von CEO-Proben ohne und mit Annealing. Ist die aufgewachsene GaAs-Schicht genau eine ganze Anzahl von Monolagen dick, dann ist die oberste Atomlage vollständig gefüllt (links) und es bilden sich makroskopische atomar glatte Bereiche. Die rechte Seite des mittleren und rechten Bildes entspricht der Probenkante zur (001)-Fläche (Bild: Elisabeth Reinwald).

In [Yos07] wird gezeigt, daß die besten Temperaturen für das Annealing im Bereich von 590 bis  $630\ ^\circ\text{C}$  liegen. Bei höheren Temperaturen kann Gallium wieder von der (110)-Probenoberfläche desorbieren, was zu 2-ML-tiefen Löchern in der Oberfläche führt.

In [Yos02] wird davon ausgegangen, daß atomar glatte Oberflächen beim Überwachsen mit AlGaAs zu atomar glatten Grenzflächen führen. Es sei daher hier noch einmal darauf hingewiesen, daß diese einfache Vorstellung nicht die Oberflächensegregation berücksichtigt, durch die die Grenzflächen beim Überwachsen rauer werden. Es ist zwar damit zu rechnen, daß die Oberflächensegregation beim (110)-Wachstum aufgrund der niedrigeren Wachstumstemperatur deutlich geringer ist, genaue Aussagen hierüber lassen sich jedoch nur durch Rastersonden- oder Elektronenmikroskopie an Querschnittsproben ermitteln.

## Kristallrichtungen beim Überwachsen

Im GaAs-Kristall entspricht ein Wechsel von der  $[110]$ - zur  $[1\bar{1}0]$ -Richtung (also eine Drehung um  $90^\circ$ ) einem Vertauschen der Gallium- und Arsen-Atome. Im Inneren des Kristalls sind diese beiden Richtungen äquivalent und nicht unterscheidbar. Auch für Prozesse an der Oberfläche spielt es in den meisten Fällen keine Rolle, ob man die  $(110)$ - oder die  $(1\bar{1}0)$ -Ebene betrachtet.



**Bild 4.16:** Kristallgitter von GaAs an der  $(110)$ -Oberfläche (große Kugeln) und eine Monolage darunter (kleine Kugeln). Es bilden sich in dieser Kristallebene Zickzack-Ketten aus Ga- und As-Atomen. Auf der hier gezeigten  $(110)$ -Oberfläche zeigen die As-Atome in die  $[001]$ -Richtung. Auf der  $(1\bar{1}0)$ -Oberfläche hingegen zeigen sie in die entgegengesetzte  $[00\bar{1}]$ -Richtung (nach [Aki04]).

Beim Annealing-Verfahren zeigt sich jedoch ein entscheidender Unterschied, je nachdem, ob man die  $(110)$ - oder die  $(1\bar{1}0)$ -Spaltkante überwächst [Sch05, Rei09]. Dies liegt in der Anisotropie der  $(110)$ -Oberfläche begründet, die in Bild 4.16 dargestellt ist. Die Gallium- und Arsenatome bilden lange Zickzack-Ketten, wobei die Gallium-Atome sich immer auf der einen Seite und die Arsen-Atome auf der anderen Seite dieser Ketten befinden. Auf der  $(110)$ -Oberfläche befinden sich die Arsenatome auf derjenigen Seite dieser

Zickzack-Ketten, die in die [001]-Richtung zeigt (Bild 4.16)<sup>3</sup>. Auf der (1 $\bar{1}$ 0)-Oberfläche ist dies entsprechend umgekehrt.

In Bild 4.15 Mitte sind die oben erwähnten charakteristischen Löcher dargestellt. Beim Wachstum in [110]-Richtung zeigen die hügelförmigen Löcher in die [001]-Richtung und die pfeilspitzenartigen Löcher in die entgegengesetzte [00 $\bar{1}$ ]-Richtung. Beim Wachstum in [1 $\bar{1}$ 0]-Richtung ist es jedoch genau umgekehrt. Somit lässt sich anhand der Richtung dieser Löcher im Rasterkraftmikroskopie-Bild die genaue Wachstumsrichtung ermitteln. In [Ish03] werden diese Löcherstrukturen durch *ab initio* Rechnungen theoretisch modelliert.

Es zeigt sich außerdem noch ein weiterer Unterschied zwischen der [110]- und der [1 $\bar{1}$ 0]-Richtung. Wird das Annealing-Verfahren auf einer (110)-Fläche wie in Bild 4.15 gezeigt angewendet, entstehen an der Kante zur (001)-Fläche (also zum ersten Wachstumsschritt beim CEO-Verfahren) in einem etwa 1 bis 2  $\mu\text{m}$  breiten Streifen relative starke Oberflächenrauigkeiten [Rei09]. Diese sind im mittleren und rechten Teilbild an der rechten Kante zu sehen. Da bei CEO-Proben die Quantendrähte genau an dieser Kante liegen, wirken sich diese Rauigkeiten nachteilig auf die Qualität der gewachsenen Quantendrähte aus. Beim Wachstum auf der (1 $\bar{1}$ 0)-Fläche hingegen befinden sich diese Rauigkeiten an der gegenüberliegenden Kante zur (00 $\bar{1}$ )-Fläche, also an der Rückseite der Probe. Die Kante zur (001)-Fläche ist in diesem Fall genauso glatt wie die überwachsene Schicht. Daher ist beim Wachstum von CEO-Quantendrähten darauf zu achten, daß das Überwachsen auf der (1 $\bar{1}$ 0)- und nicht der (110)-Fläche geschieht, um möglichst homogene Strukturen zu erhalten. Dabei ist zu beachten, daß bei europäischen und japanischen Wafern die Hauptmarkierung (engl.: *primary flat*) in der (110)-Ebene liegt, bei amerikanischen Wafern jedoch in der (1 $\bar{1}$ 0)-Ebene.

Bei CEO-Quantenpunkten lässt sich aufgrund des Überwachsens von zwei zueinander senkrechten Spaltfläche nicht vermeiden, daß jeweils eine Kante zur (001)-Fläche rauer und die andere glatter wird. Daher wurde bei den in dieser Arbeit untersuchten Quantepunkt-Proben nicht darauf geachtet, ob das erste Überwachsen in der [110]- oder der [1 $\bar{1}$ 0]-Richtung geschieht. Der Einfachheit halber wird bei hier Quantenpunkten die Richtung des ersten Überwachsens stets mit [110] und die des zweiten mit [1 $\bar{1}$ 0] bezeichnet.

---

<sup>3</sup>Hierbei wird entsprechend der üblichen Konvention davon ausgegangen, daß sich im GaAs-Kristall an den Ecken der Einheitszelle jeweils ein Galliumatom befindet (wie in Bild 2.1 dargestellt).

# Kapitel 5

## Charakterisierungsverfahren

Die in dieser Arbeit durchgeführten Messungen an Halbleiterstrukturen basieren auf der Photolumineszenz (PL), die schon in Kapitel 2 vorgestellt wurde. Da die untersuchten Strukturen sehr klein sind und teilweise nur schwach leuchten, wurde eine Variante der PL eingesetzt, mit der hochortsauflöste Messungen möglich sind. Der verwendete Versuchsaufbau wurde von Robert Schuster konzipiert und aufgebaut [Sch05] und im Rahmen dieser Arbeit erweitert.

### 5.1 Mikrophotolumineszenzspektroskopie

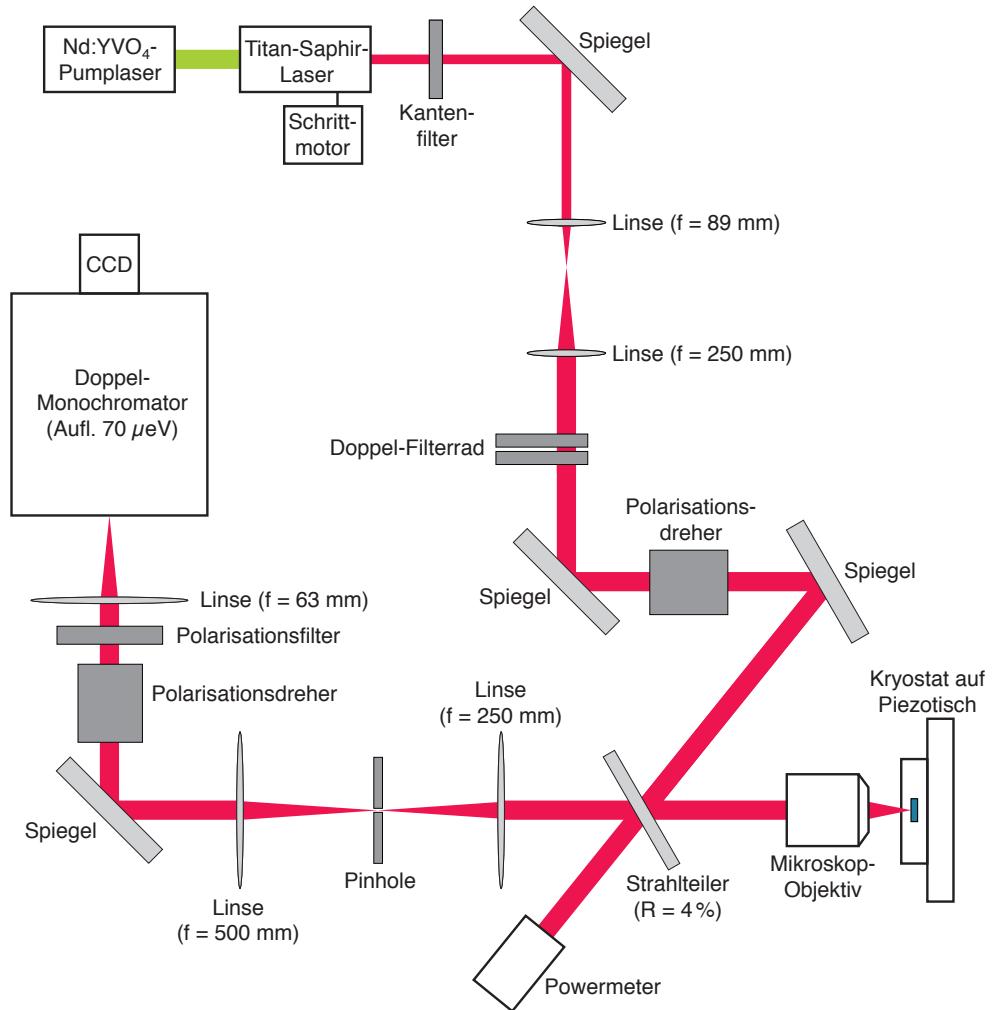
Bei der Photolumineszenzspektroskopie regt man die zu messende Probe mit Licht einer bestimmten Wellenlänge an und nimmt ein Spektrum der dabei emittierten Strahlung auf. Das Spektrum zeigt in der Regel mehrere Peaks, die sich bestimmten energetischen Zuständen in der Probe zuordnen lassen.

Bei der Mikrophotolumineszenz ( $\mu$ PL) erstrecken sich Anregung und Emission nicht großflächig über die Probe, sondern werden auf einen mikroskopisch kleinen Punkt auf der Probenoberfläche beschränkt. Ein entscheidender Vorteil dieser Methode ist neben der hohen räumlichen Auflösung, daß man auch schwache Signale von sehr kleinen Strukturen messen kann, die sonst im großflächigen Rauschen untergehen würden.

Dabei wird das Verfahren der Konfokalen Mikroskopie [Cor96] angewandt. Hierbei liegt der Anregungs- und Detektionsstrahl auf der gleichen optischen Achse und die Brennpunkte fallen zusammen, so daß sowohl die Anregung als auch die Detektion hochortsauflöst sind. Dadurch wird die bestmögliche optische Auflösung erzielt, die im Idealfall nur noch beugungsbegrenzt ist.

Durch einen Piezo-Verschiebetisch ist es möglich, über die Probenoberfläche zu rastern und so ein zweidimensionales Bild zu erstellen. Dabei wird für jeden Punkt der Oberfläche ein Spektrum aufgenommen. Ein Beispiel für eine solche Messung zeigt Bild

8.1 in Kapitel 8. Da der Piezotisch eine Verschiebung in allen drei Raumdimensionen erlaubt, sind auch Messungen des Tiefenprofils möglich, soweit es die Eindringtiefe des Lichts erlaubt.



**Bild 5.1:** Versuchsaufbau zur Mikrophotolumineszenzspektroskopie

Der verwendete Versuchsaufbau ist in Bild 5.1 schematisch dargestellt. Die Hersteller und Modellbezeichnungen der wichtigsten Geräte und Bauteile finden sich in [Sch05]. Ein ähnlicher Aufbau im gleichen Labor ist in [Gme02] und [Gme06] beschrieben. Alle optischen Elemente sind auf einem optischen Tisch angeordnet. Zur Schwingungsdämpfung ist eine Lagerung auf Druckluft möglich, was in dieser Arbeit aber nicht nötig war, da sich typische Erschütterungen nicht in der Messung bemerkbar gemacht haben.

## Anregung

Zur Anregung der Probe wird ein Titan-Saphir( $Ti^{3+}:Al_2O_3$ )-Laser verwendet, der durch einen diodengepumpten Neodym-Yttriumvanadat(Nd:YVO<sub>4</sub>)-Laser gepumpt wird. Der Pumplaser liefert eine Leistung von 0,2 bis 5,5 W bei einer Wellenlänge von 532 nm. Für die hier durchgeföhrten Messungen wurde der Titan-Saphir-Laser im Wellenlängenbereich von 700 bis 850 nm betrieben. Durch Verwendung eines alternativen Spiegelsatzes ist darüber hinaus auch ein Betrieb bei 850 bis 1000 nm möglich. Die Einstellung der Wellenlänge geschieht durch einen doppelbrechenden Kristall, der durch eine Mikrometerschraube von außen gedreht werden kann. Für die computergesteuerte Wellenlängenselektion wurde hier eine Schrittmotorsteuerung entwickelt. Die Kalibrierung der Wellenlängen wird dabei von der Steuerungssoftware vollautomatisch durchgeführt. Die Leistung des Titan-Saphir-Lasers hängt von der Sauberkeit und Justage der Spiegel ab. Mit frisch gereinigten<sup>1</sup> und optimal justierten Spiegeln beträgt die Ausgangsleistung bis zu 1,2 W. Nach einigen Monaten erreicht man typischerweise noch 200 bis 300 mW. Der Laserstrahl am Ausgang ist waagerecht polarisiert.

Anfänglich schwankte die Ausgangsleistung kurzzeitig um bis zu 5 % während des Betriebs. Da insbesondere für die Anregungsspektroskopie eine konstante Anregungsleistung notwendig ist, wurde von Christoph Thiel im Rahmen dieser Arbeit untersucht, wie sich die Leistung des Lasers stabilisieren lässt [Thi05]. Es zeigte sich, daß neben einer sorgfältigen Justage die Stabilität durch eine im Laserresonator eingebaute Modenblende signifikant erhöht wird, da der Laser auf diese Weise nicht mehr in eine andere transversale Mode wechseln kann. Außerdem wurde ein Regelkreis realisiert, der die Pumpleistung anhand der mit einem optische Powermeter gemessenen Ausgangsleistung nachregelt.

Nach dem Verlassen des Lasers passiert der Strahl einen Kantenfilter, der die übrige Pumpstrahlung herausfiltert. Durch eine Aufweitungsoptik und mehrere Irisblenden wird ein möglichst homogenes Strahlprofil und eine minimale Divergenz erreicht. Durch ein Doppel-Filterrad, das mit verschiedenen Graufiltern bestückt ist, lässt sich die Leistung stufenweise um bis zu OD 4,5 abschwächen<sup>2</sup>. Durch einen Polarisationsdreher (Fresnelrhombus) lässt sich die lineare Polarisation des Laserstrahls beliebig drehen.

Bei der konfokalen Mikroskopie wird allgemein ein Strahlteiler verwendet, um Anregungs- und Detektionsstrahl zu trennen. Im hier verwendeten Aufbau muß der Strahlteiler eine geringe Reflektivität aufweisen, damit die von der Probe emittierte Strahlung weitgehend ungehindert detektiert werden kann. Die starke Abschwächung des reflek-

---

<sup>1</sup>Bei der Reinigung der Spiegel im Laser ist extreme Sorgfalt nötig. Man sollte sich dabei unbedingt genau an die Bedienungsanleitung halten.

<sup>2</sup>OD 4,5 bedeutet 10<sup>4,5</sup>-fache Abschwächung

tierten Laserstrahls ist dabei in der Regel kein Problem, da der Laser über genügend Leistung verfügt.

Anfangs wurde als Strahlteiler ein Pellicle, also eine  $2\text{ }\mu\text{m}$  dünne beschichtete Membran eingesetzt. Diese zeigte jedoch eine starke Wellenlängenabhängigkeit der Reflexion und ist daher für die Anregungsspektroskopie ungeeignet. Statt dessen wurde ein leicht keilförmiger ( $0,5^\circ$ ) unbeschichteter Strahlteiler verwendet (im wesentlichen ein Stück Glas), an dessen Vorderseite 4 % des Laserstrahls reflektiert wird. Die Reflexion an der Rückseite geht aufgrund der Keilform zur Seite weg. Eine kurze Abschätzung hat gezeigt, daß die Dispersion im Strahlteiler vernachlässigbar ist.

Der Anteil des Laserstrahls, der nicht reflektiert wird, trifft auf ein optisches Powermeter. Da die hier gemessene Leistung in einem festen Verhältnis zu der auf die Probe fallenden Leistung steht, kann so nach entsprechender Kalibrierung die Anregungsleistung gemessen werden. Das Powermeter dient ferner zur Leistungsregelung des Lasers.

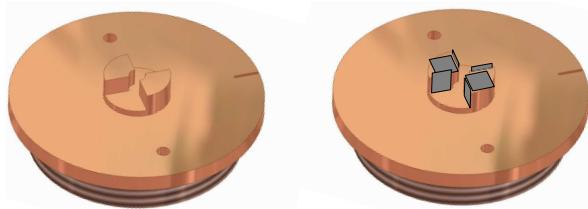
Die Linsen im Anregungs- und Detektionsstrahlengang sind für den Spektralbereich des nahen Infrarot entspiegelt. Als Spiegel werden Silberspiegel mit einer Genauigkeit von  $\lambda/10$  eingesetzt. Aluminiumspiegel sind hier ungeeignet, da sie bei einer Wellenlänge von 800 nm eine relativ große Absorption aufweisen.

## Kryostat

Nach dem Strahlteiler wird der Laserstrahl mit einem Mikroskop-Objektiv auf die in einem Helium-Durchflußkryostat befindliche Probe fokussiert. Es stehen drei verschiedene Objektive zur Auswahl: ein  $20\times$  Objektiv mit einer numerischen Apertur von  $NA = 0,4$ , ein  $80\times$  Objektiv mit  $NA = 0,55$  und ein  $100\times$  Objektiv mit  $NA = 0,8$ . Letzteres weist trotz der hohen Apertur einen vergleichsweise großen Arbeitsabstand von 3,5 mm auf, so daß auch mit diesem Objektiv Messungen an Proben im Kryostaten möglich sind. In dieser Arbeit wurde in der Regel das  $20\times$  Objektiv für Justagezwecke und das lichtstarke  $100\times$  Objektiv für die eigentlichen Messungen eingesetzt.

Das Auflösungsvermögen bei Verwendung des  $100\times$  Objektivs wird in [Sch05] ausführlich behandelt und liegt bei etwa 680 nm für eine Wellenlänge von 800 nm. Messungen von Tiefenprofilen ergaben eine Auflösung von etwa  $4\text{ }\mu\text{m}$  in z-Richtung, also senkrecht zur Probenoberfläche.

Die Probe wird mit Vakuumfett auf einen Kupferhalter aufgeklebt, der in den Kryostaten geschraubt wird. Die Anbringung mit Vakuumfett hat den Vorteil, daß sich die Probe leicht drehen und auch wieder abnehmen läßt, keinen mechanischen Belastungen ausgesetzt ist und einen ausreichenden thermischen Kontakt zum Probenhalter hat. Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein neuer Probenhalter konzipiert, der sechs Proben in



**Bild 5.2:** Der neue Probenhalter für den Kryostat, links ohne und rechts mit Probenstücken (Bild: Johann Deinhart)

unterschiedlichen Orientierungen gleichzeitig aufnehmen kann (Bild 5.2).

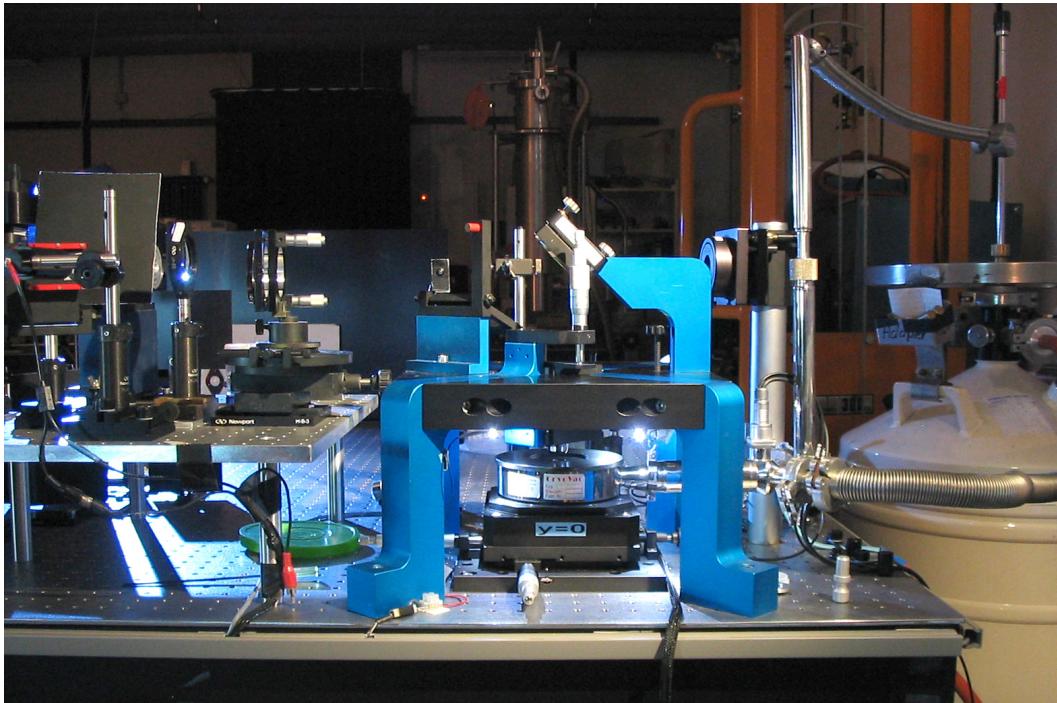
Der Kryostat wird durch einen kontinuierlichen Durchfluß von flüssigem Helium gekühlt. Eine Turbomolekularpumpe erzeugt das notwendige Isolationsvakuum. Die Temperatur im Kryostat kann durch den Heliumfluß und eine elektrische Heizung eingestellt werden und wird mithilfe einer Siliziumdiode als Temperatursensor gemessen. Die Heizung kann durch einen PID-Temperaturregler gesteuert werden, so daß sich beliebige Temperaturen einstellen lassen. Für Temperaturen im Bereich von 4 bis 15 K empfiehlt es sich allerdings, die Heizung auszuschalten und die Temperatur durch den Heliumfluß einzustellen, um den Verbrauch von Helium zu verringern.

Da der Temperatursensor nicht direkt an der Probe angebracht ist, sondern im unteren Bereich des Kryostaten, ist es möglich, daß die gemessene Temperatur von der tatsächlichen Probentemperatur abweicht. Messungen an einem baugleichen Kryostaten mit einem ähnlichen Kryostaten in [Gme02] ergaben eine Abweichung von weniger als 5 K. Bei der Bestimmung der Temperatur ist außerdem darauf zu achten, daß die Probe möglicherweise durch den Anregungslaser erwärmt wird. Die Anregungsleistung beträgt zwar in der Regel nicht mehr als  $10 \mu\text{W}$ , aber durch die Fokussierung auf eine Fläche von etwa  $1 \mu\text{m}^2$  ergibt sich eine sehr große Leistungsdichte.

Der ganze Kryostat ist auf einem xyz-Piezoverschiebetisch montiert, mit dem die Probenoberfläche abgerastert werden kann (Bild 5.3). Statt dem Anregungs- und Detektionsstrahl wird bei diesem Aufbau also die Probe verschoben. Dies hat den Vorteil, daß der Strahlengang auch beim Verschieben optimal justiert bleibt. Die Probe läßt sich damit in horizontaler Richtung um maximal  $100 \mu\text{m}$  und in der Höhe um  $20 \mu\text{m}$  verschieben. Die Positioniergenauigkeit beträgt etwa  $\pm 40 \text{ nm}$ . Für die Grobpositionierung ist der Piezotisch auf einem weiteren Verschiebetisch montiert, der manuell mit Mikrometerschrauben bewegt werden kann.

## Detektion

Das von der Probe emittierte Licht passiert das Objektiv und den Strahlteiler und wird durch eine Linse auf ein Pinhole fokussiert. Das Pinhole ist eine Lochblende mit einem Durchmesser von 0,1 mm. In der Ebene des Pinholes entsteht dabei ein  $100\times$  vergrößertes Abbild der Probenoberfläche (bei Verwendung des  $100\times$  Objektivs). Das



**Bild 5.3:** Teilansicht des Versuchsaufbaus mit dem auf dem Piezotisch montierten Kryostaten (Mitte unten). Das Mikroskop-Objektiv befindet sich in der Mitte der blauen Aluminium-Halterung. Der Anregungsstrahl kommt von links und wird durch einen Spiegel nach unten in das Objektiv umgelenkt. Aus der Heliumkanne (rechts hinten) fließt kontinuierlich flüssiges Helium durch den Kryostat. Der Wellschlauch rechts vorne führt zu einer Turbomolekularpumpe für das Isolationsvakuum.

Pinhole bestimmt die räumliche Auflösung der Detektion, indem es nur das Licht zum Monochromator durchläßt, das von dem etwa  $1\mu\text{m}^2$  großen Punkt auf der Oberfläche emittiert wird, der vom Anregungsstrahl beleuchtet wird.

Zur Positionierung der Probe kann die Probenoberfläche durch einen Klappspiegel statt auf das Pinhole auf eine CCD-Videokamera abgebildet und auf einem Monitor betrachtet werden. Ferner kann mithilfe einer speziellen Konstruktion von Clemens Vierheilig auch die Pinhole-Ebene mit Schrittmotoren abgerastert und für jeden Punkt ein Spektrum aufgenommen werden. Damit ist zum Beispiel eine genauere Untersuchung der Ladungsträgerdiffusion möglich.

Hinter dem Pinhole wird das Licht durch zwei Linsen und Spiegel auf den Eintrittsspalt eines Doppelmonochromators abgebildet. Für polarisationsabhängige Messungen durchläuft es dabei einen weiteren Polarisationsdreher sowie einen Polarisationsfilter mit einem Intensitätsverhältnis von 1:1000. Da der Versuchsaufbau nicht speziell hierfür optimiert wurde, ergeben sich bei polarisationsabhängigen Messungen Ungenauigkeiten der gemessenen Intensitäten von etwa 10 bis 20 %, die sich auf Anisotropien im

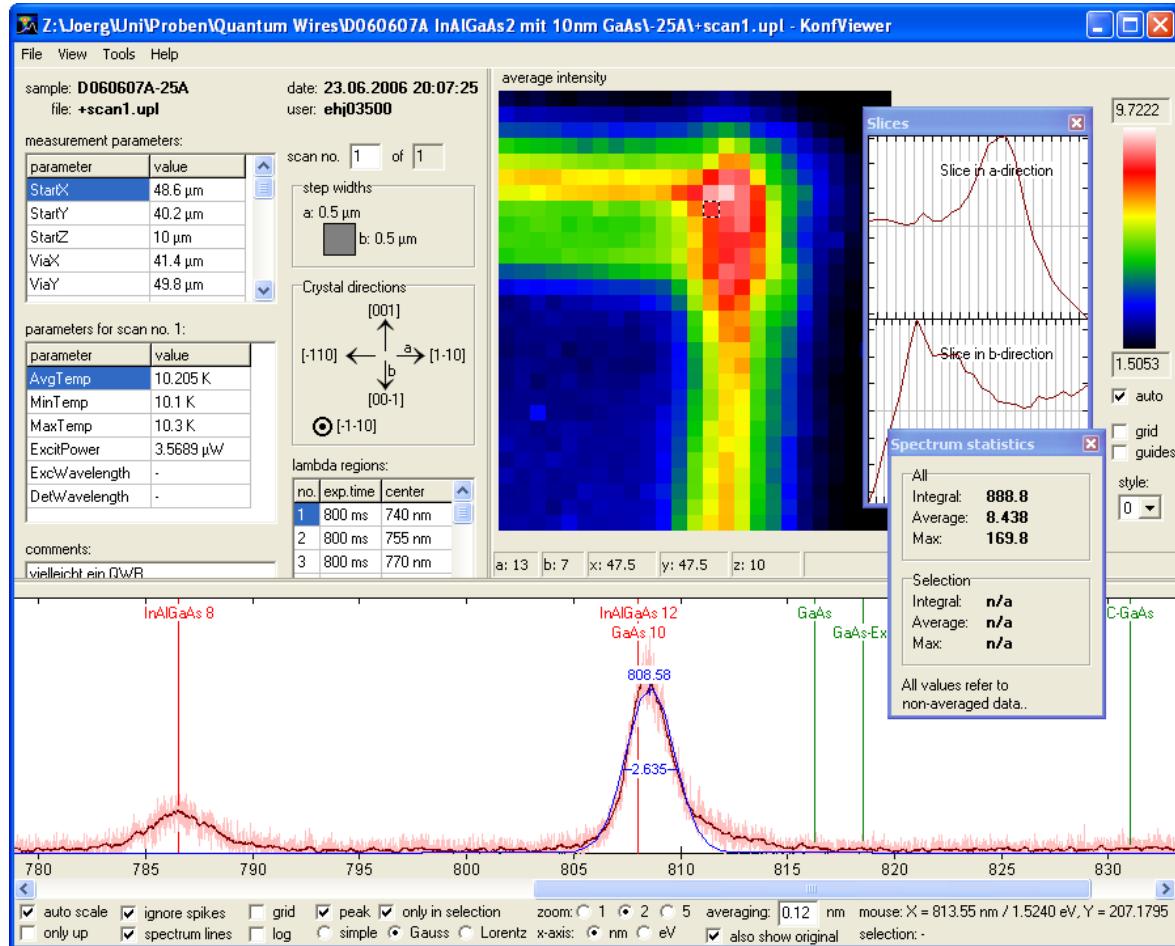
Strahlengang, den verwendeten Objektiven, der Positioniergenauigkeit der Polarisationsdreher und allgemeinen Drift zurückführen lassen.

Der Monochromator besitzt eine Brennweite von zweimal 1 m, eine numerische Apertur von  $NA = 0,0625$  und ist mit zwei Gittern mit je 600 Linien/mm bestückt. Ein weiteres Gitterpaar mit 2400 Linien/mm ist vorhanden, wurde aber nicht benutzt. Der Vorteil des Doppelmonochromators ist neben einer guten Streulichtunterdrückung eine hohe spektrale Auflösung von  $70 \mu\text{eV}$  bei 764 nm [Sch05]. Der Hauptnachteil ist der große Intensitätsverlust von etwa 90 % beim Durchgang durch den Monochromator. Diese hohe Abschwächung liegt zum einen im Prinzip des Doppelmonochromators begründet, zum anderen ist die Reflektivität der insgesamt zehn im Monochromator verwendeten Spiegel durch Alterung auf jeweils etwa 90 % gesunken.

Das am Ausgang des Monochromators entstehende Spektrum wird durch eine besonders empfindliche stickstoffgekühlte CCD-Kamera mit einer Auflösung von  $2048 \times 512$  Pixeln aufgenommen. Der verwendete CCD-Chip (*Jobin-Yvon PCCD2048x512-3 CCD back illum./VIS-AR-coated*) hat im Spektralbereich von 700 bis 830 nm eine Quanteneffizienz von 70 bis 40 %. Die Belichtungszeit wird durch einen elektromechanischen Shutter am Eingang des Monochromators festgelegt. Aufgrund der hohen spektralen Auflösung des Monochromators kann die CCD-Kamera nur einen relativ kleinen Wellenlängenbereich von etwa 10 nm auf einmal aufnehmen. Die Steuerungssoftware für den Versuchsaufbau kann jedoch automatisch mehrere Spektren zu einem größeren Wellenlängenbereich zusammensetzen. Zur Kalibrierung des Monochromators dient eine Quecksilberdampf-Argon-Spektrallampe. Die Spektrallinien sind in der Konfiguration der Steuerungssoftware abgelegt, so daß eine halbautomatische Kalibrierung möglich ist.

## Software

Die Messungen werden durch eine komfortable Software automatisch durchgeführt und alle elektrischen Geräte des Versuchsaufbaus durch den Computer gesteuert. Das verwendete Programm „Konfokal“ wurde ursprünglich von Nikolaus Gmeinwieser [Gme02] in der Programmiersprache Delphi entwickelt und im Verlauf dieser Arbeit fast vollständig überarbeitet und weiterentwickelt. Dabei wurden fortgeschrittene Programmierkonzepte wie objektorientierte Programmierung, Polymorphie und Hardwareabstraktion eingesetzt, die unter anderem eine hohe Flexibilität bei der Ansteuerung unterschiedlicher Geräte ermöglichen. So konnte beispielsweise eine Rasterung in der Pinhole-Ebene mit Schrittmotoren auf einfache Weise implementiert werden, indem der Gerätetreiber für den Piezotisch gegen eine entsprechende Schrittmotorsteuerung ausgetauscht wurde. Die Software zeichnet sich darüber hinaus durch eine hohe Benutzerfreundlichkeit



**Bild 5.4:** Die Benutzeroberfläche des Auswertungsprogramm „Konfokal“

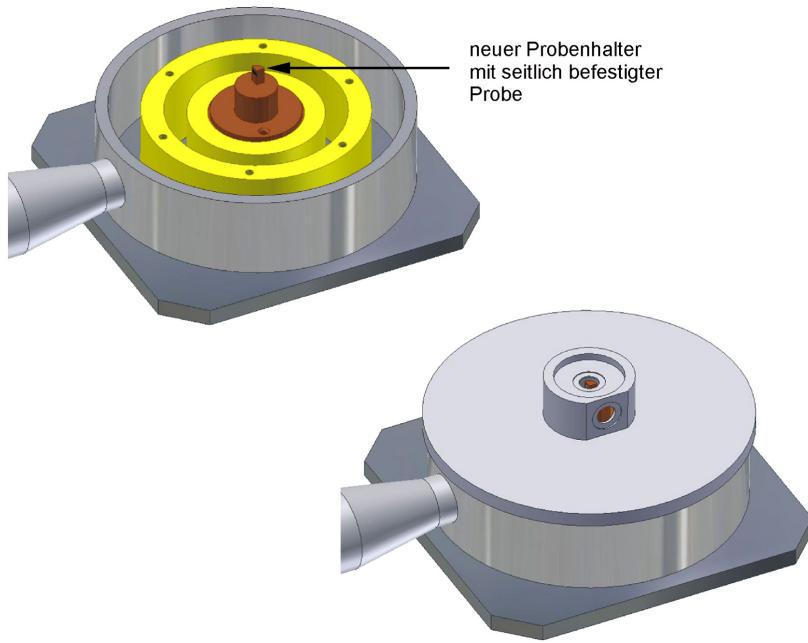
und eine Vielzahl von nützlichen Funktionen aus.

Als Pendant zur Steuerungssoftware wurde das Auswertungsprogramm „Konfokal“ entwickelt, das es ermöglicht, die Meßdaten interaktiv graphisch darzustellen, auszuwerten und in andere Datenformate zu exportieren. Bild 5.4 zeigt ein Bildschirmfoto des Auswertungsprogramms.

## 5.2 Erweiterung des Aufbaus für seitliche Anregung

Bei der Untersuchung der optisch gepumpten Quantendrahtlaser (Kapitel 9) hat sich herausgestellt, daß die seitliche Anregung der Quantendrähte deutlich effektiver ist als die konfokale Anregung parallel zu den Quantendrähten. Um dies zu ermöglichen, wurde der Kryostat umgebaut und ein zweiter Anregungsstrahlengang aufgebaut.

Bild 5.5 zeigt den modifizierten Kryostat. Für die seitliche Anregung mußte die Probe nach oben verlegt und ein neuer Kryostatdeckel mit zwei Fenster hergestellt



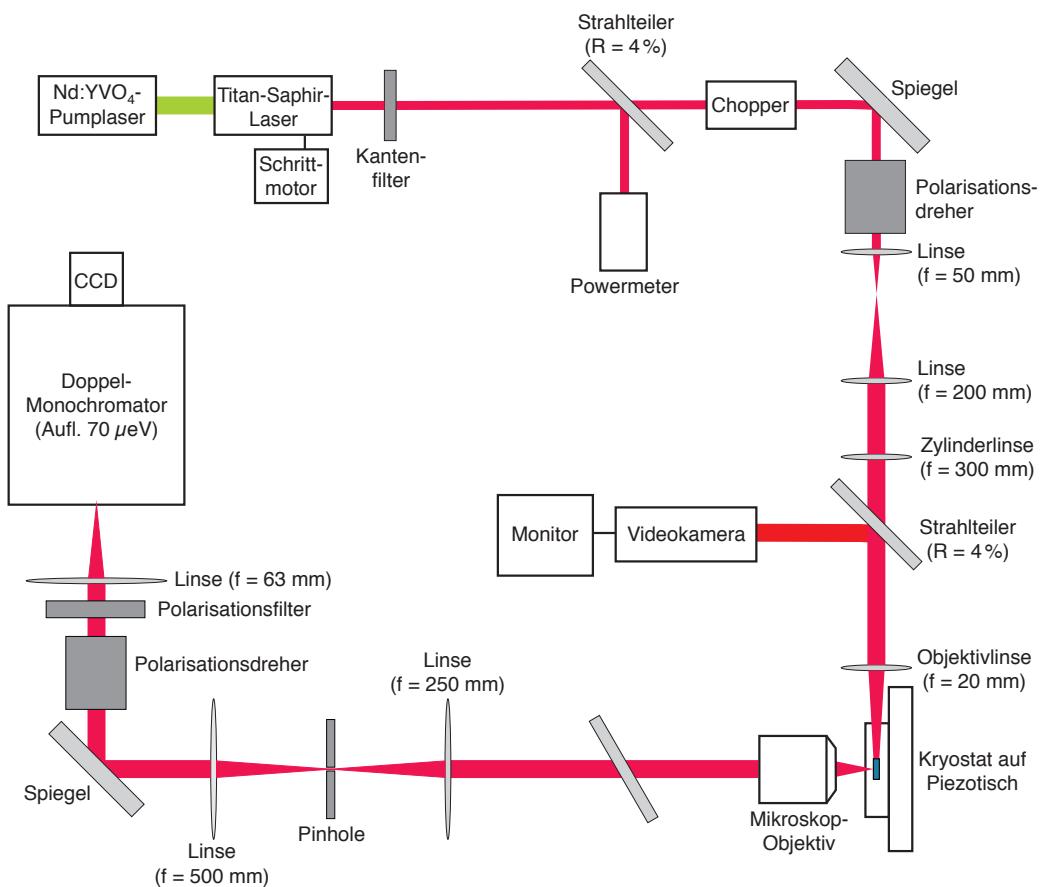
**Bild 5.5:** Umgebauter Kryostat für die seitliche Anregung der Proben ohne und mit Deckel.  
Im oberen Bild sind die Heliumleitungen gelb gekennzeichnet. (aus [Kam07])

werden. Der neue Probenhalter ist außerdem drehbar, um die Probe genau rechtwinklig zum seitlichen Fenster ausrichten zu können.

Durch die veränderte Geometrie wurde der nötige Arbeitsabstand zwischen der Probe und dem Mikroskop-Objektiv vergrößert. Dadurch konnte nur noch das  $20\times$  Objektiv verwendet werden, das einen entsprechend großen Abstand erlaubt. Dies stellte allerdings kein Problem dar, da die emittierte Laserstrahlung von den Quantendrahtproben ohnehin sehr leistungsstark ist und die räumliche Auflösung bei diesen Messungen nicht entscheidend war. Eine weitere Konsequenz der Modifikation ist eine möglicherweise weniger genaue Temperaturmessung, da die Probe jetzt noch weiter von der Kältequelle und dem Temperatursensor entfernt ist.

Der neue Anregungsstrahlengang ist in Bild 5.6 dargestellt. Um die Quantendraht-laserproben effizient optisch anregen zu können, muß der Laser auf der Probe auf einen  $1\text{ }\mu\text{m}$  breite und  $0,6\text{ mm}$  langen Streifen so fokussiert werden, daß dieser einerseits gleichmäßig beleuchtet, andererseits aber auch nicht zu sehr überstrahlt wird. Dies wurde durch eine Kombination aus einer Aufweitungsoptik, einer Zylinderlinse und einer Objektivlinse realisiert. Details zur Berechnung dieses Linsensystems finden sich in [Kam07].

Um zu verhindern, daß die hohe Anregungsleistung die Proben erwärmt, wurde ein Chopper eingesetzt, der die kontinuierliche Laserstrahlung in kurze Pulse mit einem



**Bild 5.6:** Erweiterung des Versuchsaufbaus für die seitliche Anregung von optisch gepumpten Quantendrahlasern

geringen Tastverhältnis zerteilt. Zur Justage des Anregungsstrahls können eine zweite Videokamera und eine Probenbeleuchtung durch je einen Strahlteiler in den Strahlenweg eingekoppelt werden, um die Probe von der Seite zu betrachten. Die Justage setzt bei der hier verwendeten Anordnung viel Geduld voraus, da nicht alle mechanischen Teile für die erforderliche Positioniergenauigkeit von bis zu 1  $\mu$ m ausgelegt sind.

Der Detektionsstrahlengang bleibt bei dieser Anordnung im wesentlichen unverändert. Lediglich ein zusätzlicher Graufilter muß unter Umständen eingebaut werden, damit die von der Probe ausgehende Laserstrahlung die CCD-Kamera nicht überlastet.

### 5.3 Erweiterung des Aufbaus für Anregungsspektroskopie

Bei der oben beschriebenen Photolumineszenzspektroskopie (PL) wird eine bestimmte Anregungswellenlänge gewählt und das sich ergebende Emissionsspektrum gemessen.

sen. Bei der Photolumineszenz-Anregungsspektroskopie (PLE) hingegen wird eine bestimmte Emissionswellenlänge festgelegt und die Anregungswellenlänge kontinuierlich verändert. Die Intensität dieser Emission in Abhängigkeit von der Anregungswellenlänge ergibt unter den in Kapitel 2.5 beschriebenen Voraussetzungen ein Absorptionsspektrum der Probe. Aus diesem lassen sich unter anderen die Stokes-Verschiebung und die Exzitonen-Bindungsenergie ermitteln sowie leichte Löcher, angeregte Zustände und die Diffusionsmechanismen von Ladungsträgern untersuchen. Die Verwendung von hochortsaufgelöster PLE hat ähnlich wie bei der PL zusätzlich den Vorteil, daß auch mikroskopisch kleine Strukturen gemessen und unterschieden werden können.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde der Versuchsaufbau auf Mikrophotolumineszenz-Anregungsspektroskopie erweitert. Dabei wurde wiederum die Konfokale Mikroskopie eingesetzt, um eine hohe räumliche Auflösung zu erreichen. Auch in diesem Fall ist ein Rastern über die Probenoberfläche möglich, allerdings auch sehr zeitintensiv, da die Spektren nicht wie mit der CCD-Kamera in einer einzelnen Belichtung aufgenommen werden können, sondern alle Wellenlängen nacheinander gemessen werden müssen.

Grundvoraussetzung für die PLE ist ein Anregungslaser, dessen Wellenlänge sich abstimmen läßt wie beispielsweise der hier verwendete Titan-Saphir-Laser. Um eine computergesteuerte Messung zu ermöglichen, wurde für den Laser eine Schrittmotorsteuerung nachgerüstet sowie eine automatische Leistungsnachregelung entwickelt, da die ungeregelte Ausgangsleistung des Lasers deutlich von der Wellenlänge abhängt. Die Meßsoftware wurde entsprechend angepaßt, so daß eine PLE-Messung auf ähnliche Weise wie bei der PL automatisch durchgeführt werden kann.

Bei der PLE-Messung kommen sich Anregungs- und Detektionswellenlänge oft sehr nahe. Da die Anregungsleistung jedoch wesentlich größer ist als die detektierte Leistung, muß darauf geachtet werden, daß kein Streulicht von der Anregung detektiert wird. Für diese Aufgabe ist ein Doppelmonochromator prädestiniert, mit dem sich eine besonders gute Streulichtunterdrückung erreichen läßt. Hierzu müssen die inneren Spalte, also der Ausgangsspalt des ersten Teilmonochromators und der Eingangsspalt des zweiten so schmal wie möglich eingestellt werden. Bei dem hier verwendeten Monochromator wird so das Streulich bei einer Wellenlänge, die nur  $0,3\text{ nm}$  neben der Anregungswellenlänge liegt, bereits auf etwa  $3 \cdot 10^{-7}$  der Anregungsleistung reduziert.

Zur Detektion der Emissionswellenlänge wurde zunächst statt der CCD-Kamera ein Photomultiplier eingesetzt, um einerseits eine höhere Empfindlichkeit zu erreichen und andererseits eine versehentliche Beschädigung der CCD-Kamera durch eventuell auftreffende Anregungslaserstrahlung zu vermeiden. Dazu wurde ein GaAs-Photomultiplier im Impulszählbetrieb verwendet, der durch ein Peltierelement auf  $-20^\circ\text{C}$  gekühlt wurde, um das Dunkelrauschen erheblich zu reduzieren. Die Wärme an der anderen

Seite des Peltierelements wurde durch Wasserkühlung abgeführt. Die Impulse vom Photomultiplier wurden durch einen Diskriminatormit einem Frequenzzähler gezählt. Weitere Details zu dieser Erweiterung sind in [Neu08] beschrieben.

Es hat sich jedoch gezeigt, daß zum einen der Photomultiplier etwa die gleiche Empfindlichkeit wie die CCD-Kamera aufweist und zum anderen das auf die CCD-Kamera auftreffende Spektrum mit zugeschobenen inneren Monochromator-Spalten so schmal ist, daß sich eine versehentliche Beschädigung durch den Anregungslaser leicht ausschließen läßt. Daher wurde für alle weiteren PLE-Messungen die CCD-Kamera verwendet.

Um eine PLE-Messung von einem Punkt auf der Probe durchzuführen, bietet sich in der Praxis folgendes Vorgehen an: Zunächst wird mit der Mikrophotolumineszenzspektroskopie eine Rasterung der Probenoberfläche durchgeführt, um die gewünschte Position auf der Probe zu bestimmen und eine geeignete Detektionswellenlänge zu ermitteln. In der Regel legt man diese in die niedrigerenergetische Flanke des Grundzustands. Auf diese Weise kann die Absorption sowohl in den Grundzustand als auch in die höheren Zustände gemessen werden.

Danach werden die inneren Spalte des Monochromators so schmal wie möglich eingestellt und die Wellenlängenkalibrierung des Monochromators und der CCD-Kamera kontrolliert. Bei der folgenden eigentlichen PLE-Messung wird computergesteuert die Laserwellenlänge schrittweise verändert und jeweils die Intensität der Emissionswellenlänge mit der CCD-Kamera gemessen. Die Meßdaten werden im gleichen Datenformat wie bei der PL-Messung gespeichert und können mit dem Programm „KonfViewer“ ausgewertet werden.

# Kapitel 6

## Simulationen

In diesem Kapitel werden eine große Anzahl unterschiedlicher CEO-Strukturen systematisch theoretisch berechnet. Im Gegensatz zu früheren Rechnungen werden die Simulationen hier mithilfe der k·p-Theorie unter Berücksichtigung von Verspannungen, piezoelektrischen Effekten und Exzitonen durchgeführt. Die Probenstrukturen werden auf ein relativ großes Gitternetz abgebildet, um eine hohe numerische Genauigkeit zu erzielen. Das vorrangige Ziel dieser Berechnungen ist die Optimierung des Einschlußpotentials. Dabei werden auch andere wichtige Parameter wie die Effizienz des optischen Übergangs untersucht. Vergleiche mit experimentell ermittelten Werten finden sich in Kapitel 8.

### 6.1 Frühere Rechnungen

Erste Berechnungen der Übergangsenergien in CEO-Quantendrähten finden sich in [Kis96]. Dort werden die Übergangsenergien der Quantendrähte und -filme mithilfe der Einband-Näherung ohne Berücksichtigung von Verspannungen oder anisotropen Lochmassen berechnet. Exzitonen werden hier durch eine einfache Abschätzung berücksichtigt. Bereits in [Lan96] werden 6-Band-k·p-Rechnungen für symmetrische und asymmetrische CEO-Quantendrähte mit (Al)GaAs-Quantenfilmen präsentiert.

Erste Untersuchungen der Exzitonen-Bindungsenergie in CEO-Quantendrähten finden sich in [Som96]. Dort werden die elektronischen Zustände durch Einband-Näherung zunächst ohne Berücksichtigung von Exzitonen und Verspannungen berechnet. Durch Vergleich der theoretischen und experimentellen Übergangsenergie ermitteln die Autoren eine Exzitonen-Bindungsenergie von 27 meV. Da das Rechenverfahren relativ ungenau ist und darüber hinaus weitere Differenzen zwischen Theorie und Experiment bestehen (siehe Kapitel 7), ist dieser Wert massiv überschätzt. Realistischere Werte für die Exzitonen-Bindungsenergie werden in [Wal97] berechnet. Dabei wird wiederum die

Einband-Näherung eingesetzt und für die Exzitonen ein Variationsansatz verwendet.

In [Glu97] werden Wellenfunktionen und Exzitonen in CEO-Quantendrähten auf ähnliche Weise berechnet. Leider werden hier nur wenige Strukturen explizit ausgerechnet. In [Szy01] finden sich umfassende Rechnungen von exzitonischen Zuständen in Quantendrähten durch Einband-Näherung mit anisotropen Lochmassen. Die berechneten Einschlußenergien werden dort mit den bis dahin veröffentlichten Meßergebnissen verglichen. Es zeigt sich, daß die berechneten Einschlußenergien systematisch kleiner als die experimentellen Werte sind. In [Szy01] heißt es dazu selbstbewußt nur, die experimentellen Ergebnisse seien wohl „überschätzt“.

Die Bildung von Quantenpunkten durch zweifache Anwendung des CEO-Verfahren wurde erstmals in [Gru97] theoretisch untersucht. Dabei werden die exzitonischen Zustände in symmetrischen CEO-Quantenpunkten mit Einband-Näherung, isotropen Lochmassen und ohne Verspannungen berechnet. Abhängig von der Dicke der drei Quantenfilme ergeben sich Einschlußenergien von bis zu 11,5 meV.

Die gleichen Autoren präsentierten kurz darauf in [Gru98] die ersten Rechnungen von verspannten CEO-Quantendrähten und -punkten mit Einband-Näherung und Exzitonen. Die betrachteten Strukturen bestehen dabei aus einer Kreuzung von zwei oder drei InGaAs-Quantenfilmen mit gleichem Indium-Gehalt. Die Berechnungen der Verspannungen werden mit der Elastizitätstheorie im Rahmen der Kontinuumsmechanik durchgeführt, wie sie in Kapitel 2.6 vorgestellt und auch für die Rechnungen in dieser Arbeit verwendet werden. In [Gru98] werden allerdings keine piezoelektrischen Effekte berücksichtigt. Die Rechnungen ergeben, daß bei den betrachteten Strukturen die Verspannungen nicht zu einer Erhöhung, sondern zu einer Erniedrigung der Einschlußenergie führen.

In [Gru00] finden sich die ersten Simulationen von rein verspannungsinduzierten Quantendrähten. Hier werden die Rechnungen mit der 8-Band- $k \cdot p$ -Theorie durchgeführt. Der Einfluß der piezoelektrischen Felder wird hier nicht explizit ausgerechnet, sondern nur abgeschätzt. In [Sch05] werden ähnliche Rechnungen mit nextnano3 bei voller Berücksichtigung der piezoelektrischen Felder durchgeführt und mit experimentellen Ergebnissen verglichen, allerdings innerhalb der damaligen Möglichkeiten von nextnano3 nur mit Einband-Näherung und ohne Berücksichtigung von Exzitonen.

## 6.2 Strukturgeometrien

Alle in diesem Kapitel untersuchten CEO-Strukturen bestehen aus einem (001)-Quantenfilm, der mit einem oder zwei (110)- bzw. ( $\bar{1}\bar{1}0$ )-Quantenfilmen überwachsen wurde. Die Dicke dieser Quantenfilme wurde im Bereich zwischen 3 und 18 nm variiert. Sie be-

stehen allgemein aus  $\text{In}_y\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x-y}\text{As}$  mit unterschiedlichen Legierungsverhältnissen, wobei der Anteil einzelner Gruppe-III-Elemente auch Null sein kann. Die Quantenfilme sind in eine Barriere aus  $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$  eingebettet. Auf diese Weise ergeben sich 9 unabhängige Strukturparameter, die variiert werden können.

Für die Rechnungen mit nextnano3 werden diese Strukturen auf ein Gitternetz abgebildet. Dabei kommen unterschiedliche Gitternetze zum Einsatz. Die CEO-Kreuzung liegt jeweils in der Mitte. Es hat sich gezeigt, dass das gesamte Simulationsgebiet vor allem für verspannte Strukturen relativ groß gewählt werden muss, damit Randeffekte keine Auswirkungen auf die betrachtete Struktur haben. Das gesamte Simulationsgebiet umfasst daher je nach Rechnung 240 oder 1000 nm in allen Richtungen. Die Quantenregion, innerhalb derer die Schrödinger und Poisson-Gleichung gelöst werden, kann dann kleiner sein und umfasst beim 240-nm-Gitternetz die mittleren 80 nm und beim 1000-nm-Netz die mittleren 120 nm.

Der Abstand der Gitterlinien beträgt im Zentrum des Simulationsgebietes bei allen verwendeten Gitternetzen 0,5 nm, damit die Wellenfunktionen dort mit hoher räumlicher Auflösung berechnen werden können. Der Zeitaufwand der Simulationen nimmt jedoch mit der Anzahl der Gitterpunkte überproportional zu. Das verwendete Gitternetz ist also immer ein Kompromiss zwischen Rechenzeit und gewünschter Genauigkeit. Um den Zeitaufwand in vernünftigen Grenzen zu halten, wird der Abstand der Gitterlinien zum Rand hin in mehreren Stufen größer. Dabei werden hier je nach Umfang der Rechnungen sowohl das 240-nm- als auch das 1000-nm-Gitternetz jeweils in einer größeren oder einer feineren Variante eingesetzt.

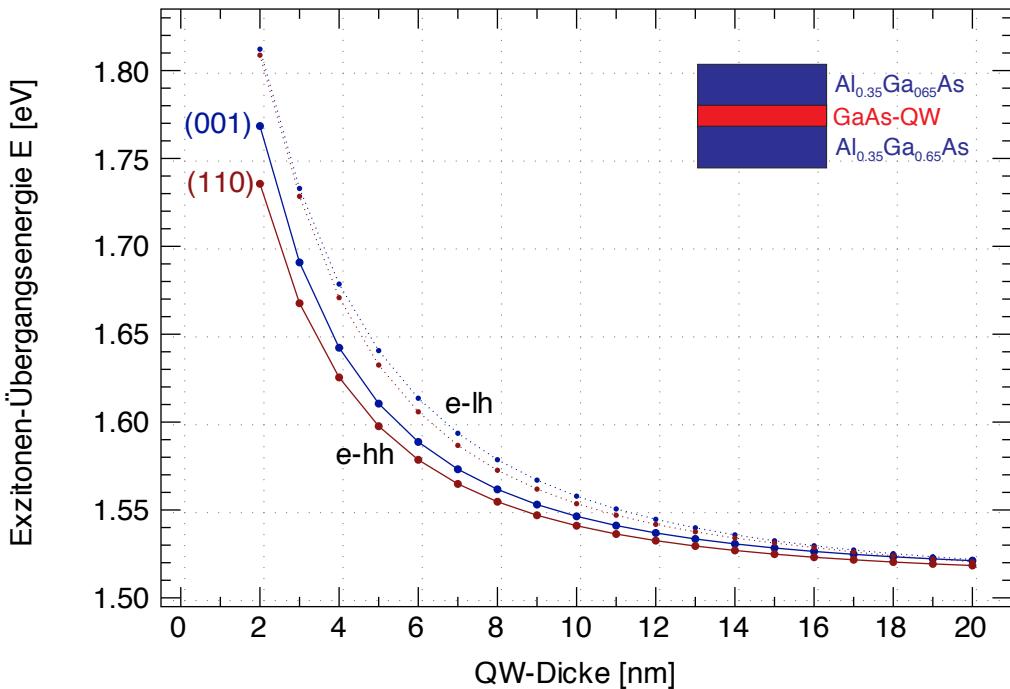
Für die Berechnungen der Eigenenergien der Ladungsträger werden in einer und zwei Dimensionen<sup>1</sup> (für Quantenfilme bzw. -drähte) die 8-Band-k·p-Rechnung auf dem feineren 1000-nm-Gitter eingesetzt. In drei Dimensionen (für Quantenpunkte) funktioniert die 8-Band-k·p-Rechnung bei nextnano3 zur Zeit leider noch nicht zuverlässig, so dass auf die 6-Band-k·p-Rechnung ausgewichen werden muss. Dabei wird das größere 240-nm-Gitter verwendet, um die Rechenzeiten in einem akzeptablen Rahmen zu halten.

Da die Berechnung der Exzitonen-Bindungsenergie in nextnano3 noch nicht für die k·p-Rechnung implementiert ist, muss sie in einer separaten Simulation mit der Einband-Näherung berechnet werden. Dabei wird in einer und drei Dimensionen das feinere 240-nm-Gitter und in zwei Dimensionen das größere 1000-nm-Gitter eingesetzt.

Alle Simulationen werden für eine Probentemperatur von  $T = 4 \text{ K}$  berechnet. Da

---

<sup>1</sup>Es ist zu beachten, dass die Anzahl der Dimensionen bei der Simulation nicht gleich der Dimensionalität der betrachteten Struktur ist. Die Dimensionalität der Struktur ist durch die Anzahl der freien Richtungen gegeben. Die Dimensionalität der Simulation hingegen entspricht der Anzahl der quantisierten Richtungen, da nur diese berechnet werden müssen.



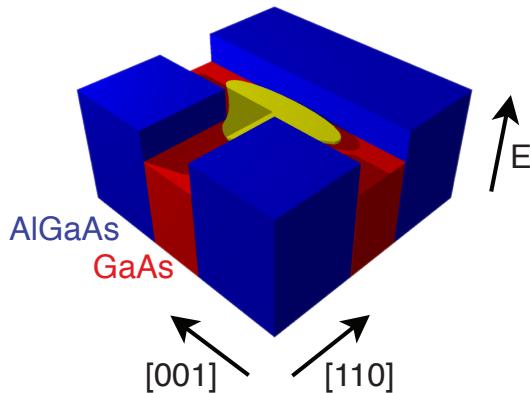
**Bild 6.1:** Simulierte Übergangsenergien von GaAs-Quantenfilmen in der (001)-Ebene (blau) und (110)-Ebene (rot). Die durchgezogene Linie kennzeichnet die dominanten Elektron-Schwerloch-Übergänge und die gepunktete Linie die Elektron-Leichtloch-Übergänge. In der (110)-Ebene ergibt sich aufgrund der höheren effektiven Lochmasse in der [110]-Richtung eine geringere Energie.

die betrachteten Strukturen nicht dotiert sind, liegen bei diesen Temperaturen keine freien Ladungsträger vor. Da GaAs ein direkter Halbleiter ist und an die hier untersuchten Proben keine elektrische Spannung angelegt wurde, wurden alle Simulationen für Ladungsträger am  $\Gamma$ -Punkt durchgeführt.

## 6.3 Quantenfilme

Bild 6.1 zeigt die simulierten exzitonischen Übergangsenergien in GaAs-Quantenfilmen in Abhängigkeit von der Quantenfilmdicke. Dabei wurden Exzitonen mit schweren und mit leichten Löchern berücksichtigt. Wie in Kapitel 2.2 dargelegt wurde, sind leichte Löcher in Quantenfilmen aufgrund der höheren Grundzustandsenergie energetisch abgesenkt und weisen daher eine höhere Übergangsenergie auf. Es zeigt sich außerdem eine signifikante Abhängigkeit von der Kristallrichtung der Quantenfilme, die in der Anisotropie der effektiven Lochmasse begründet liegt.

Im Gegensatz zu früheren Rechnungen wurden in allen Simulationen dieser Arbeit



**Bild 6.2:** Vereinfachter Verlauf der Leitungsbandkante in symmetrischen Quantendrähten. Die Energie ist in vertikaler Richtung aufgetragen. Die Wellenfunktion von Elektronen im Quantendraht ist gelb eingezeichnet (aus [Sch05]).

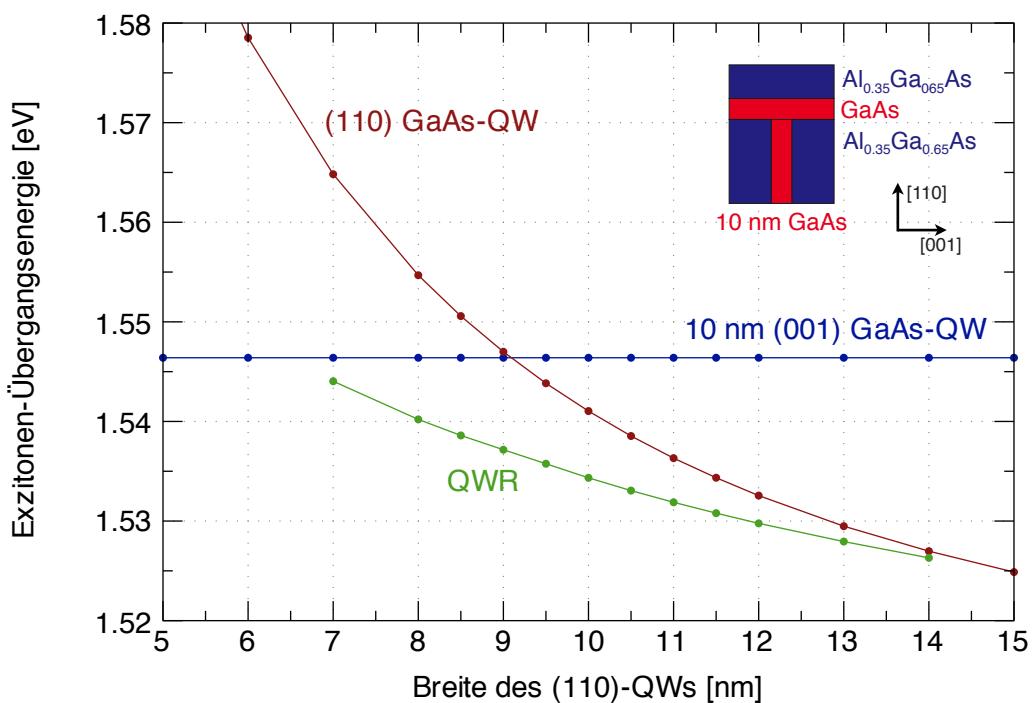
der Einfluß der Verspannungen mit berücksichtigt, also auch in Strukturen, die nur GaAs und AlGaAs enthalten. Der Unterschied der Gitterkonstante zwischen GaAs und  $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$  beträgt etwa 0,05 % und bewirkt in den hier untersuchten Quantenfilmen eine leichte Verspannung, die zu einer Änderung der Übergangsenergie um etwa 2 bis 3 meV führt. Dies mag sehr gering erscheinen, ist bei den hier untersuchten Strukturen jedoch durchaus relevant. Einerseits sind diese Energien durch optische Spektroskopie sehr genau meßbar, andererseits sind die Einschlußenergien, also die Differenzen der Übergangsenergien, deutlich kleiner als die Übergangsenergien selbst, so daß hier eine Abweichung von wenigen meV durchaus einen signifikanten Einfluß haben kann.

Die Übergangsenergie von Quantenfilmen läßt sich durch Beimischung von Aluminium erhöhen und durch Indium erniedrigen. Die Abhängigkeit vom Aluminium- bzw. Indium-Anteil im Bereich bis 20 % läßt sich näherungsweise linear beschreiben (mit einer maximalen Abweichung von 5 meV). Für 10 nm breite (001)  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -Quantenfilme in einer  $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ -Barriere ergibt sich eine Erhöhung der e-hh-Übergangsenergie um 14,2 meV pro Al-%. Für entsprechende  $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ -Quantenfilme ergibt sich eine Erniedrigung der Energie um 11,6 meV pro In-%. Diese Werte hängen leicht von der Dicke der Quantenfilme, der Kristallrichtung und der Zusammensetzung der Barriere ab. Für die Angleichung von Aluminium- und Indium-Gehalten in den folgenden Kapiteln wurde anstelle dieser Näherung eine wesentlich genauere Interpolation zwischen einzelnen explizit berechneten Punkten verwendet.

## 6.4 Quantendrähte

### Symmetrische Quantendrähte

Symmetrische Quantendrähte entstehen an der T-förmigen Kreuzung von zwei GaAs-Quantenfilmen mit gleicher (oder nahezu gleicher) Dicke. Der schematische Verlauf der Leitungsbandkante für derartige Strukturen ist in Bild 6.2 dargestellt.

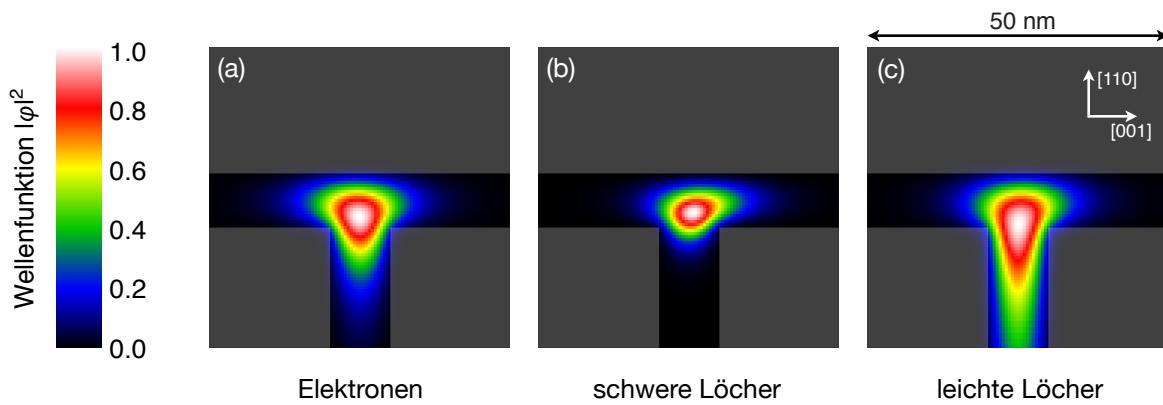


**Bild 6.3:** Simulierte Übergangsenergien von GaAs-Quantendrähten und den angrenzenden Quantenfilmen. Die Breite des (001)-QWs wurde dabei auf 10 nm festgelegt und die Breite des überwachsenen (110)-QWs variiert. Die Einschlußenergie ist die Differenz zwischen der QWR- und der jeweils niedrigeren QW-Energie. Sie ist maximal wenn beide QWs die gleiche Übergangsenergie haben. Die QWR-Energie ist nur für den Bereich dargestellt, in dem die Simulation gebundene Zustände ergab.

Bild 6.3 zeigt die simulierten Übergangsenergien für eine CEO-Quantendrahtstruktur in Abhängigkeit von der Dicke des überwachsenen GaAs-Quantenfilms. Der (001)-Quantenfilm besteht hier aus einer 10 nm dicken GaAs-Schicht. Dargestellt sind die Übergangsenergien der beiden Quantenfilme und des Quantendrahts. Die Einschlußenergie ist nach Gleichung (2.43) die Differenz zwischen der Quantendraht- und der jeweils niedrigeren Quantenfilmenergie. Es ist zu erkennen, daß die Einschlußenergie an dem Punkt maximal ist, an dem beide Quantenfilme die gleiche Übergangsenergie aufweisen. In diesem Fall breitet sich die Wellenfunktion an der Kreuzung am weitesten in beide Quantenfilme aus, was zur größtmöglichen Energieabsenkung führt. Bei der Herstellung von CEO-Quantendrähten sollte also immer darauf geachtet werden, daß die Energie der beiden Quantenfilme möglichst gleich ist.

In Bild 6.3 ist dies für einen  $9 \times 10 \text{ nm}^2$  großen GaAs-Quantendraht der Fall. Die ent-

sprechende räumliche Verteilung der Wellenfunktionen<sup>2</sup> der Ladungsträger ist in Bild 6.4 dargestellt. Die Elektronenwellenfunktion breitet sich etwa gleich weit in die beiden angrenzenden Quantenfilme aus. Schwere Löcher hingegen sind aufgrund der anisotropen Lochmasse stärker im überwachsenen (110)-Quantenfilm und leichte Löcher stärker im (001)-Quantenfilm lokalisiert. Dies und die insgesamt größere effektive Masse der Löcher führen dazu, daß die Löcher zur Einschlußenergie einen kleineren Beitrag als die Elektronen leisten.

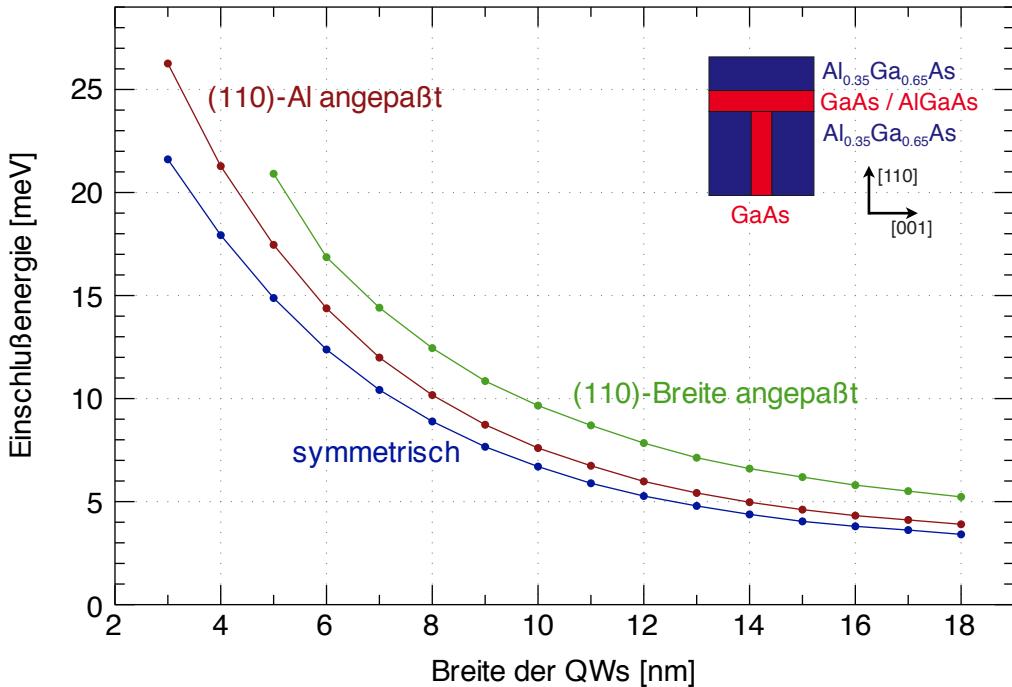


**Bild 6.4:** Quadrat der Wellenfunktionen von Elektronen, schweren und leichten Löchern in einem CEO-Quantendraht, der an der Kreuzung von einem 9 nm und einem 10 nm dicken GaAs-QW entsteht. Die Geometrie der Struktur ist grau eingezeichnet. Die Wellenfunktionen breiten sich unterschiedlich weit in die angrenzenden Quantenfilme aus.

In Bild 6.5 sind die Einschlußenergien von symmetrischen GaAs-Quantendrähten in Abhängigkeit von der Dicke beider Quantenfilme dargestellt. Allgemein führen kleinere Strukturgrößen bei T-förmigen CEO-Strukturen zu höheren Einschlußenergien. Die untere blaue Kurve zeigt die Energien für exakt symmetrische Quantendrähte. Aufgrund der anisotropen Lochmasse haben in diesem Fall die beiden Quantenfilme nicht die gleiche Übergangsenergie. Die Einschlußenergie läßt sich daher noch optimieren, indem man die Energien der beiden Quantenfilme anpaßt. Dies kann entweder durch einen geringen Aluminium-Anteil im (110)-Quantenfilm (rote Kurve) oder eine etwas kleinere Breite des (110)-Quantenfilms (grüne Kurve) bewirkt werden. Bei der Anpassung der Quantenfilmbreite ergeben sich die größten Einschlußenergien, da hier bereits der Vorteil von asymmetrischen Strukturen (siehe unten) in geringem Maße ausgenutzt wird.

Die in Bild 6.5 gezeigten Ergebnisse stimmen relativ gut mit den bisher veröffentlichten Berechnungen von symmetrischen CEO-Quantenfilmen überein. Die hier ermit-

<sup>2</sup>In diesem Kapitel sind damit stets die in Gleichung (3.25) definierten einhüllenden Wellenfunktionen  $\varphi(\vec{r})$  gemeint.

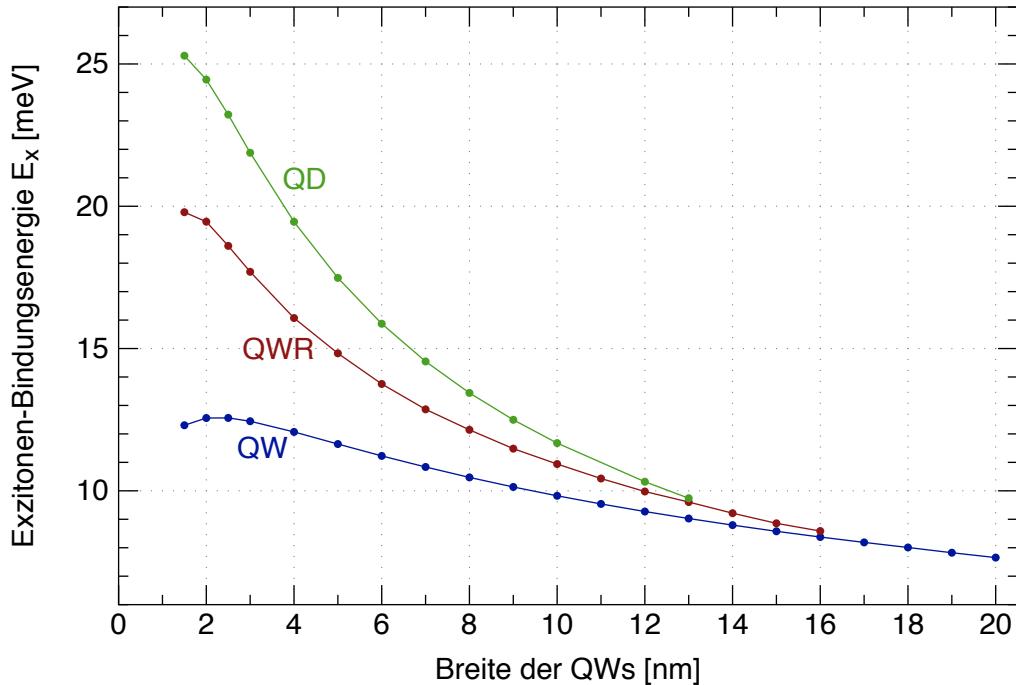


**Bild 6.5:** Einschlußenergie von symmetrischen GaAs-Quantendrähten. Die Einschlußenergie läßt sich durch Anpassung der Übergangsenergien der QWs erhöhen. Dies kann durch einen geringen Aluminium-Anteil im (110)-QW oder durch eine kleineren Breite des (110)-QWs erreicht werden.

telten Einschlußenergien weichen von denen in [Lan96, Szy01, Wal97] um nicht mehr als 2 meV ab. In [Kis96] werden zwar um etwa 5 meV größere Einschlußenergien berechnet, aber das dort verwendete Rechenverfahren stellt nur eine vergleichsweise grobe Näherung dar.

## Einfluß der Exzitonen

In Bild 6.6 sind die berechneten Exzitonen-Bindungsenergien  $E_X$  für Quantenfilme (aus Bild 6.1), Quantendrähte (aus Bild 6.5) und Quantenpunkte (aus Bild 6.22) dargestellt. Es zeigt sich bestätigt, daß mit abnehmender Dimensionalität und Größe der Strukturen die Bindungsenergien zunehmen, weil dadurch die Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektronen und Löchern ansteigt. Mit der Zunahme von  $E_X$  geht eine Reduzierung des Exzitonen-Bohradius  $a_0$  einher. Der Beitrag der Exzitonen-Bindungsenergie  $E_X$  zur Einschlußenergie  $E_c$  von Quantendrähten entspricht der Differenz der Bindungsenergien von Exzitonen in Quantendrähten und Quantenfilmen. Entsprechend ist die Beitrag zur Einschlußenergie von Quantenpunkten die Differenz zwischen der Bindungsenergie in Quantenpunkten und Quantendrähten.



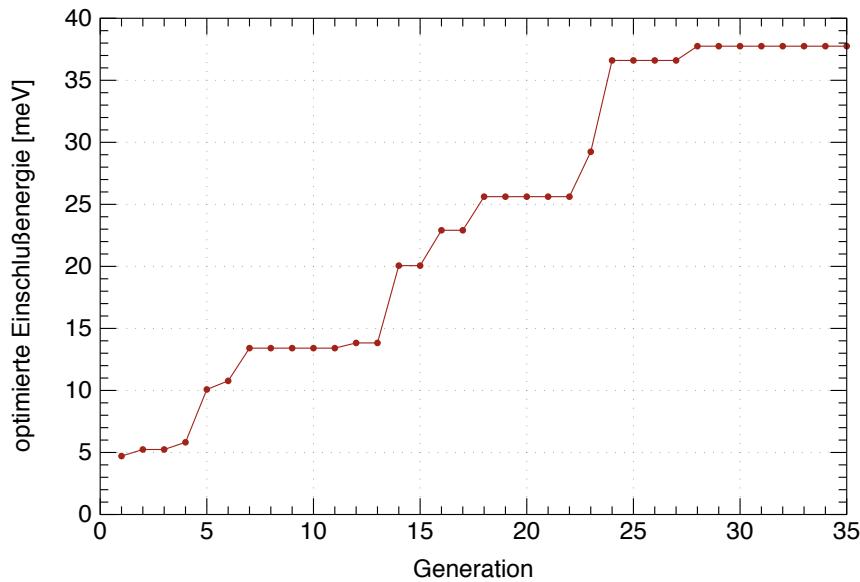
**Bild 6.6:** Berechnete Exzitonen-Bindungsenergien  $E_x$  für Quantenfilme und symmetrische Quantendrähte und -punkte. Mit abnehmender Dimensionalität und Größe steigt die Bindungsenergie.

Auch diese Werte stimmen gut mit bisherigen Veröffentlichungen überein. Die Abweichungen zwischen den hier berechneten Exzitonen-Bindungsenergien und den in [Glu97, Szy01, Gru97, Tho90] vorgestellten Werten betragen nicht mehr als 1 meV. In [Har05] finden sich um bis zu 1,4 meV geringere Werte für Quantenfilme. Eine Ausnahme bilden die Ergebnisse in [Wal97] für Quantendrähte, die etwa in der Mitte zwischen den hier ermittelten Bindungsenergien für Quantendrähte und Quantenfilme liegen.

## Optimierung des Einschlußpotentials

In früheren Veröffentlichungen wurden verschiedene Verfahren vorgestellt, um die Einschlußenergie von CEO-Strukturen zu verbessern (siehe Kapitel 2.7). Um nun systematisch die bestmöglichen Probenstrukturen zu finden, wurde im Rahmen dieser Arbeit das in Kapitel 3.4 vorgestellte Optimierungsverfahren eingesetzt. Die zu optimierende Größe ist in diesem Fall die Einschlußenergie der CEO-Quantendrähte und -punkte. Während der Optimierung wird der Beitrag der Exzitonen-Bindungsenergie nicht berücksichtigt, da die Algorithmen in nextnano3 zur Berechnung der Exzitonen bislang noch sehr viel Zeit (bis zu 8 Stunden) benötigen. Wie eingangs erläutert gibt es bei den hier betrachteten Strukturen bis zu 9 unabhängige Parameter, die die Ge-

metrie und Materialzusammensetzung betreffen. Die Dicken der Quantenfilme werden hier im Bereich von 3 bis 18 nm und die Aluminium- und Indium-Anteile im Bereich von 0 bis 20 % variiert. Die Anzahl der freien Parameter kann wahlweise eingeschränkt werden, um beispielsweise nur symmetrische Strukturen oder Strukturen ohne Indium zu untersuchen.



**Bild 6.7:** Beispielhafter Verlauf des Optimierungsverfahrens für eine CEO-Quantendrahtstruktur. Als zusätzliche Einschränkung wurde in diesem Fall festgelegt, daß der (001)-QW aus AlGaAs und der (110)-QW aus GaAs bestehen soll. Dies entspricht den in Bild 6.8 dargestellten Strukturen. Es ergibt sich als Optimum ein asymmetrischer  $18 \times 3 \text{ nm}^2$ -Quantendraht mit 9 % Aluminium im (001)-QW. Die Einschlußenergie ist hier ohne Berücksichtigung von Exzitonen angegeben.

Zu Beginn des Optimierungsverfahrens wird ein Ensemble aus etwa hundert zufälligen Strukturen erzeugt und an den Cluster zur Berechnung übergeben. Dabei werden neben den betreffenden Quantendraht- und Quantenpunktstrukturen auch die angrenzenden Quantenfilme bzw. Quantendrähte simuliert, um aus den Differenzen der Übergangsenergien jeweils die Einschlußenergie nach Gleichung (2.43) bzw. (2.44) bestimmen zu können. Sind alle Berechnungen abgeschlossen, werden die Einschlußenergien ermittelt und in eine Datenbank zusammen mit den jeweiligen Strukturparametern eingetragen. Aus dieser Datenbank werden dann die Strukturen mit den größten Einschlußenergien bestimmt und von jeder dieser Strukturen mehreren Nachkommen generiert, deren Parameter sich auf zufällige Weise leicht von denen ihrer Vorfahren unterscheiden. Dabei werden die Quantenfilmdicken in Schritten von 0,5 nm und die Indium- und Aluminium-Anteile in Schritten von 0,5 % variiert. Die Gesamtzahl der

Nachkommen ist auf die Anzahl der einzelnen Rechner im Cluster abgestimmt, um diese optimal ausnutzen zu können. Dieses neue Ensemble wird wiederum an den PC-Cluster zur Berechnung übergeben und so weiter.

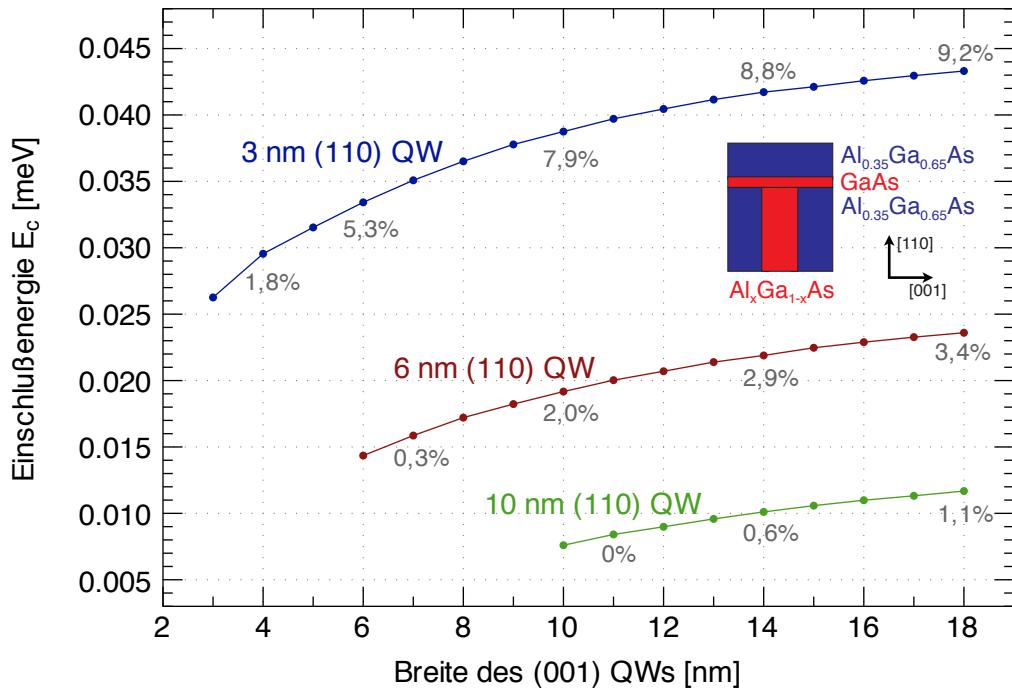
Nach jeder Generation wird die Struktur mit dem bisher höchsten Einschlußpotential bestimmt. Ändert sich dieses über etwa 10 bis 20 Generationen nicht mehr, kann davon ausgegangen werden, daß das Optimum gefunden wurde. In Bild 6.7 ist dieser Verlauf beispielhaft dargestellt. Typisch für das hier verwendete evolutionäre Optimierungsverfahren ist, daß die Optimierung nicht gleichmäßig, sondern in größeren und kleineren Schritten verläuft.

Um die verschiedenen Möglichkeiten zur Erhöhung der Einschlußenergie genauer zu untersuchen, wurden mehrere Optimierungsläufe durchgeführt, bei denen unterschiedliche Parameter zusätzlich eingeschränkt wurden. Auf diese Weise ergaben sich verschiedene Konzepte zur Optimierung der Einschlußenergie. Diese wurden danach unter Einbeziehung der Exzitonen-Bindungsenergie systematisch untersucht und sind in den folgenden Kapiteln beschrieben. Durch das Optimierungsverfahren ergaben sich gegenüber bisherigen Veröffentlichungen einige neue Erkenntnisse, beispielsweise für asymmetrische Quantendrähte mit Indium oder asymmetrische Quantenpunkte. Außerdem kann so mit hoher Wahrscheinlichkeit ausgeschlossen werden, daß mit den genannten Rahmenbedingungen Strukturkonzepte mit noch höheren Einschlußenergien möglich sind.

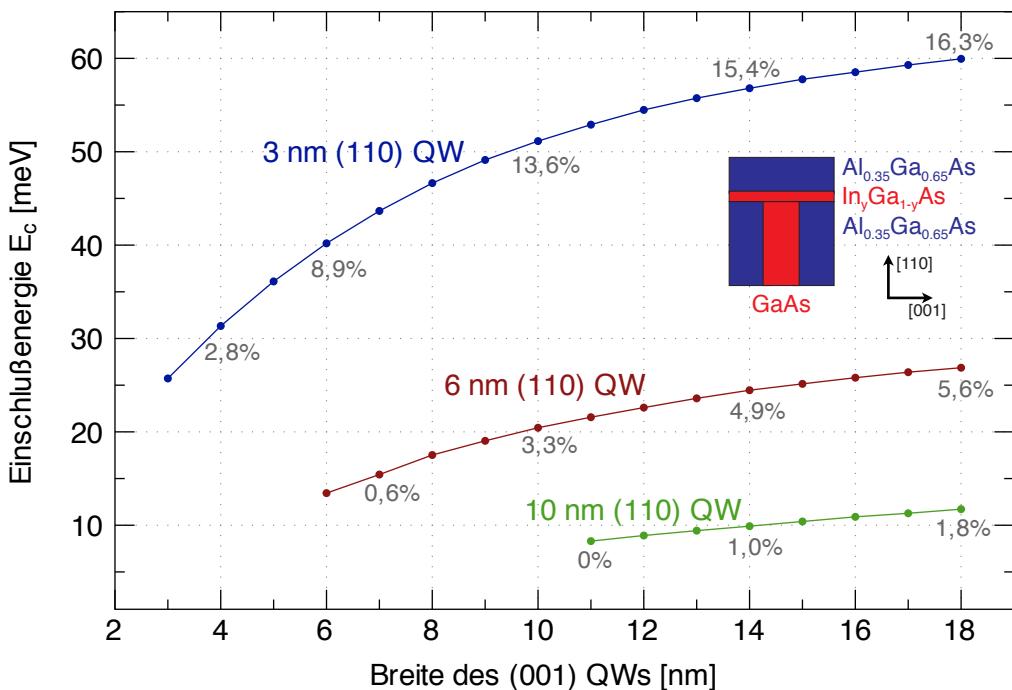
## Asymmetrische Quantendrähte

Ein weit verbreitetes Verfahren, um das Einschlußpotential in CEO-Quantendrähten zu erhöhen, ist die Verwendung von asymmetrischen Kreuzungen mit unterschiedlichen Schichtdicken. Dabei ist der (001)-Quantenfilm breiter als der überwachsene (110)-Quantenfilm. Um die Übergangsenergien anzugeleichen, wird ein geringer Anteil Aluminium in den (001)-Quantenfilm eingebracht. Entsprechende Simulationen der Einschlußenergien sind in Bild 6.8 dargestellt. Der notwendige Aluminiumanteil  $x$  ist im Bild für einige ausgewählte Strukturen als Prozentwert angegeben. Es zeigt sich, daß die Einschlußenergie in diesen Strukturen umso größer ist, je mehr sich die Dicken der beiden Quantenfilme unterscheiden.

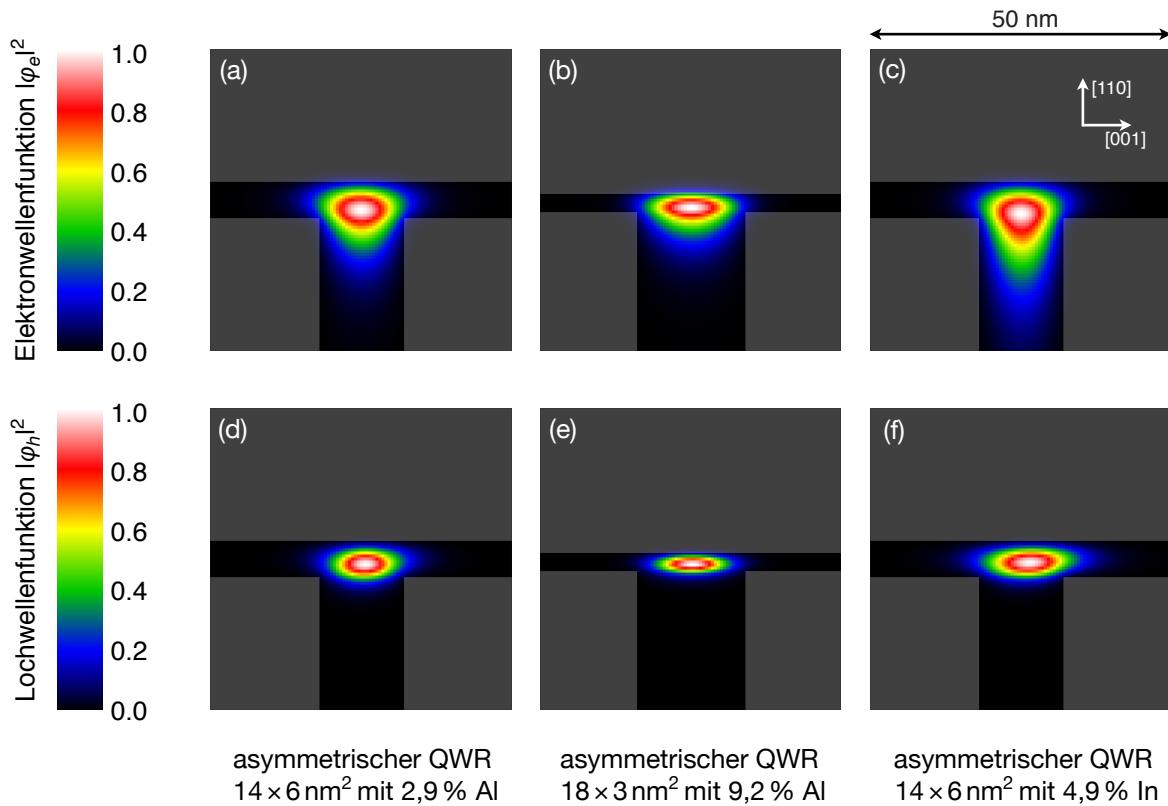
Statt Aluminium im (001)-Quantenfilm kann auch Indium im (110)-Quantenfilm verwendet werden, um die Übergangsenergien anzugeleichen. Durch die Verspannungen wird das Einschlußpotential dabei noch deutlich größer, wie in Bild 6.9 zu sehen ist. Allerdings bringt das Wachstum von indiumhaltigen Schichten weitere Herausforderungen mit sich (wie in Kapitel 4.3 beschrieben). Über Versuche zur Herstellung derartiger Strukturen ist bisher nichts bekannt.



**Bild 6.8:** Asymmetrische Quantendrähte mit Aluminium zur Angleichung der QW-Energien. Die Prozentangaben drücken den Aluminium-Anteil  $x$  im (001)-Quantenfilm aus.



**Bild 6.9:** Asymmetrische Quantendrähte mit Indium zur Angleichung der QW-Energien. Die Prozentangaben drücken den Indium-Anteil  $y$  im (110)-Quantenfilm aus.



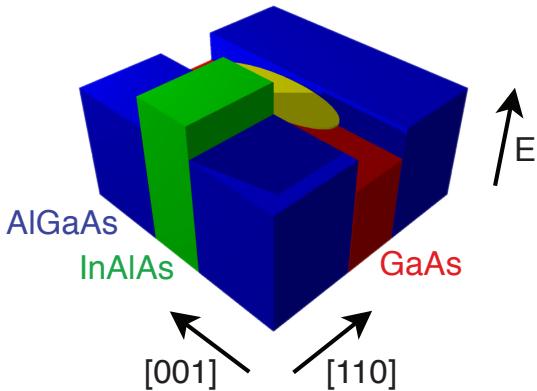
**Bild 6.10:** Quadrat der Wellenfunktionen von Elektronen (oben) und schweren Löchern (unten) in asymmetrischen Quantendrähten, in denen die Energien der Quantenfilme durch Aluminium (links und Mitte) und Indium (rechts) angeglichen wurden. Die Geometrie der Struktur ist grau eingezeichnet.

In Bild 6.10 finden sich Abbildungen der Elektronen- und Lochwellenfunktion in drei verschiedenen asymmetrischen Quantendrähten. Eine anschauliche Erklärung für die Erhöhung der Einschlußenergie in asymmetrischen Quantendrähten konnte bislang nicht gefunden werden.

Rechnungen von vergleichbaren Strukturen, die in [Lan96, Szy01] präsentiert wurden, ergeben Einschlußenergien für asymmetrische Quantendrähte mit Aluminium, die um 1 bis 2 meV kleiner sind. Die hier berechneten Werte stimmen also wiederum gut mit bisherigen Simulationen überein. Für asymmetrische Quantendrähte mit Indium zur Angleichung der Energien wurden bisher keine Berechnungen veröffentlicht.

## Rein verspannungsinduzierte Quantendrähte

Ein alternatives Konzept, um eine hohe Einschlußenergie zu erzielen, wurde erstmals in [Reg99] vorgestellt. Dabei wird der Ladungsträgereinschluß nicht durch eine T-förmige Kreuzung von zwei Quantenfilmen, sondern rein aufgrund von Verspannung



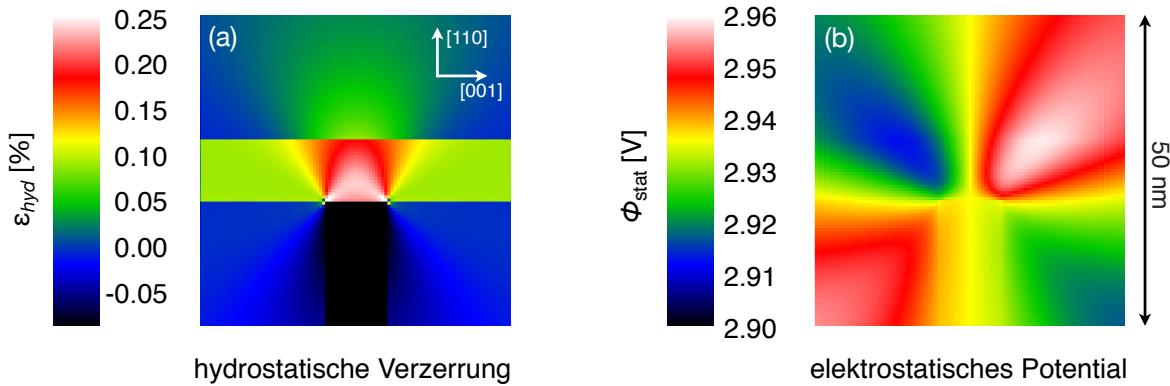
**Bild 6.11:** Vereinfachter Verlauf der Leitungsbandkante in rein verspannungsinduzierten Quantendrähten. Die Wellenfunktion von Elektronen im Quantendraht ist gelb eingezeichnet (aus [Sch05]).

gen im überwachsenen (110)-Quantenfilm erzeugt. Gegenüber herkömmlichen CEO-Quantendrähten besteht dabei der (001)-Quantenfilm aus  $\text{In}_y\text{Al}_{1-y}\text{As}$  statt aus GaAs. Der Indiumgehalt  $y$  beträgt dabei etwa 10 bis 20 %. In Bild 6.11 ist der schematische Verlauf der Leitungsbandkante für derartige Strukturen dargestellt.

Der Indium-Anteil im (001)-Quantenfilm führt aufgrund der unterschiedlichen Gitterkonstanten zu Verspannungen im überwachsenen Quantenfilm. Diese Verspannungen haben zwei unterschiedliche Auswirkungen auf die Bandstruktur, die beide eine erhöhte Einschlußenergie für Elektronen und Löcher bewirken können (vgl. Kapitel 2.6). In Bild 6.12 sind Simulationen der Verspannungen in einer derartigen Struktur gezeigt. Einerseits bewirkt die im Bild links dargestellte hydrostatische Verzerrung eine proportionale Verschiebung der Bandkanten. Sie entspricht der relativen Volumenänderung, die durch die Verspannungen verursacht wird. Andererseits führen piezoelektrische Effekte zu Ladungsverschiebungen und damit zu einer Änderung des elektrostatischen Potentials (rechts im Bild).

Die Auswirkungen auf die Bandstruktur sind in Bild 6.13 zu sehen. Die linke und mittlere Spalte zeigen Simulationen eines rein verspannungsinduzierten  $10 \times 10 \text{ nm}^2$  Quantendrahts mit einem Indiumanteil von 8 bzw. 12 % im (001)-Quantenfilm. Die oberen beiden Zeilen stellen den Verlauf der Leitungs- und Valenzbandkante unter dem Einfluß der Verspannungen dar. Anschaulich kann man sich diese Bilder als Überlagerung der unverspannten Bandstruktur mit der hydrostatischen Verzerrung und dem elektrostatischen Potential aus Bild 6.12 vorstellen.

Im Leitungsband bewirken die piezoelektrischen Effekte ein Minimum im überwachsenen Quantenfilm, das sich nicht genau an der Kreuzung, sondern etwas seitlich versetzt findet (Bild 6.13a und b). Dieses Minimum stellt ein Einschlußpotential für Elektronen dar und entsprechend ergibt die Lösung der Schrödinger-Gleichung einen gebundenen Zustand für Elektronen (Bild 6.13g und h). Ist der Indium-Anteil im (001)-Quantenfilm kleiner als etwa 10 %, ergibt sich für Löcher ebenso aufgrund der piezoelektrischen Effekte ein Maximum im Valenzband, das auf der anderen Seite der



**Bild 6.12:** Simulation der Verspannungen in rein verspannungsinduzierten CEO-Quantendrähten. Die Struktur besteht aus einem 10 nm breiten  $In_{0.12}Al_{0.88}As$ -(001)-Quantenfilm und einem ebenfalls 10 nm breiten GaAs-(110)-Quantenfilm. Die Verspannungen führen sowohl zu einer Verschiebung der Bänder, die zur hydrostatischen Verzerrung (links) proportional ist, als auch zu Ladungsverschiebungen aufgrund piezoelektrischer Effekte, deren Auswirkung auf das elektrische Potential rechts zu sehen ist.

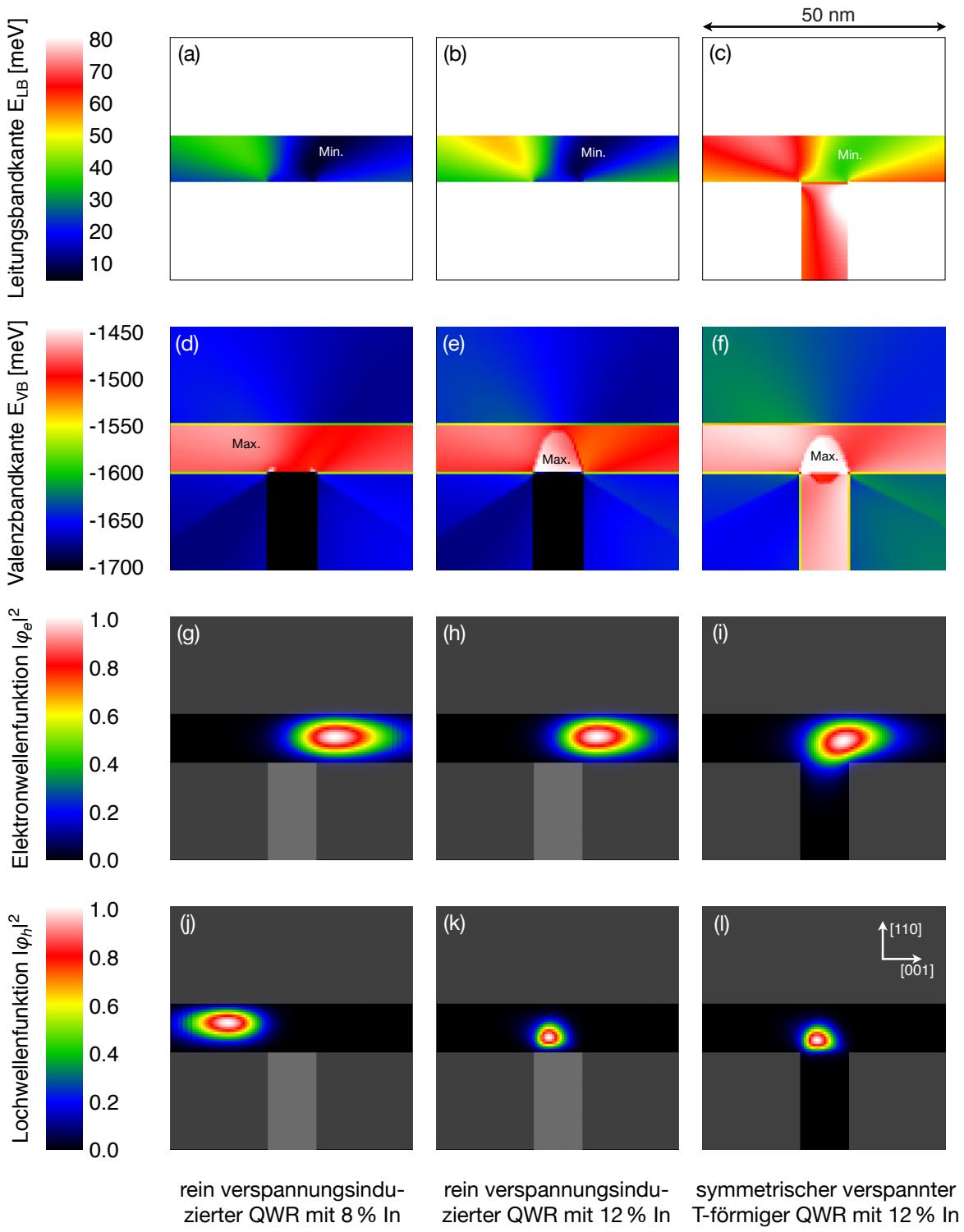
Kreuzung liegt (Bild 6.13d) und analog zu einem dort gebundenen Lochzustand führt (Bild 6.13j).

Ist der Indium-Anteil andererseits größer als etwa 10 %, gewinnt im Valenzband die Bandverbiegung aufgrund der hydrostatischen Verzerrung einen stärkeren Einfluß als die piezoelektrischen Effekte und es ergibt sich ein Maximum in der Mitte der Kreuzung (Bild 6.13d), so daß die Lochwellenfunktion entsprechend dort lokalisiert ist (Bild 6.13k).

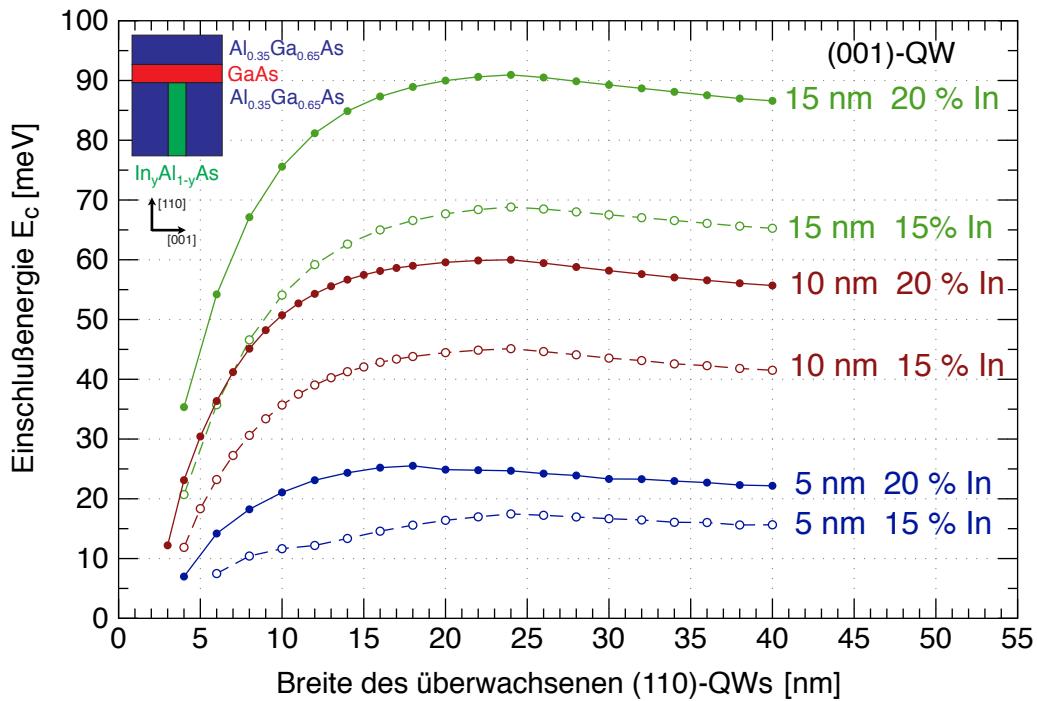
In diesem Zusammenhang ist es wichtig, bei den betrachteten Strukturen auch den Überlapp der einhüllenden Wellenfunktionen  $\langle \varphi_e | \varphi_h \rangle$  zu untersuchen. Aus den Gleichungen 2.14 und 2.17 ergibt sich, daß die optische Übergangswahrscheinlichkeit  $P$  für Interbandübergänge proportional zu  $|\langle \varphi_e | \varphi_h \rangle|^2$  ist. Je größer der Überlapp der Wellenfunktionen also ist, desto effizienter kann die Struktur Licht emittieren und absorbieren, was insbesondere für optoelektronische Bauelemente wie beispielsweise Halbleiterlaser wichtig ist.

In Bild 6.13 befinden bei einem Indium-Gehalt von 8 % im (001)-Quantenfilm (linke Spalte) die Elektron- und Lochwellenfunktion an unterschiedlichen Orten. Dies führt zu einem sehr geringen Überlapp von weniger als 2 %, was für die meisten praktischen Anwendungen zu klein ist. Bei einem Indium-Gehalt von 12 % (mittlere Spalte) überlappen sich jedoch die Elektron- und Lochwellenfunktionen zumindest teilweise. Hier ergibt sich ein Überlapp von etwa 35 %, der in der Regel noch akzeptabel ist.

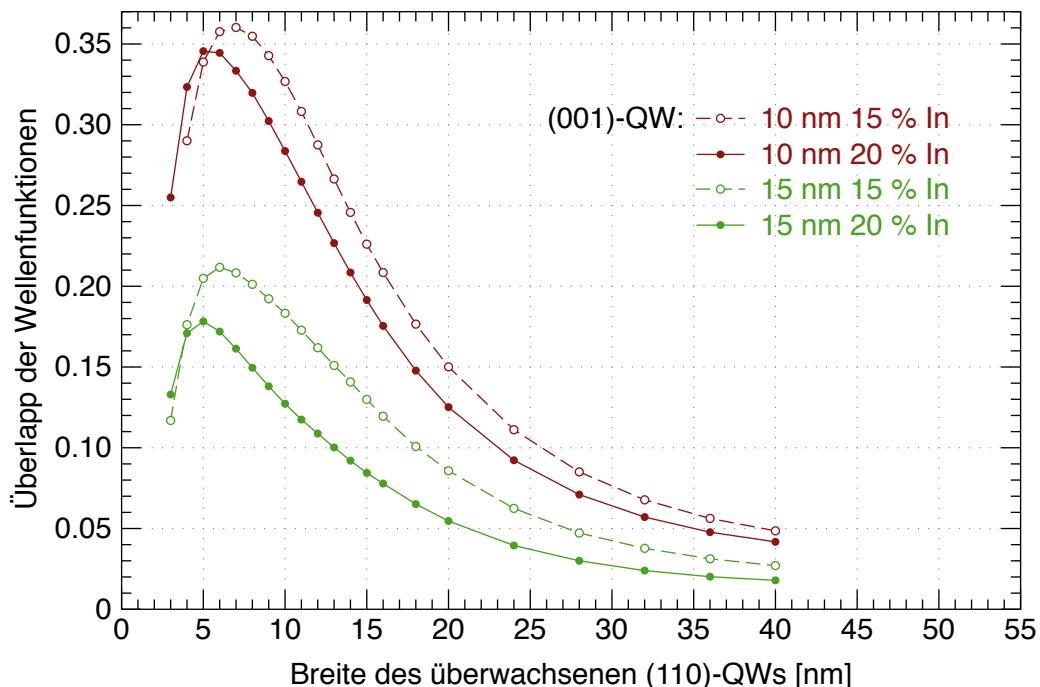
Bei der Optimierung von rein verspannungsinduzierten Quantendrähten hat sich gezeigt, daß für Strukturen mit der größtmöglichen Einschlußenergie die Elektronen-



**Bild 6.13:** Berechnungen der Bandkanten und Wellenfunktionen der Ladungsträger in rein verspannungsinduzierten (links und Mitte) und verspannten T-förmigen (rechts) Quantendrähten. Alle Quantenfilme sind 10 nm breit. In (a) bis (f) kennzeichnen weiße und schwarze Bereiche Werte, die außerhalb der jeweiligen Farbskala liegen. Außerdem sind die Positionen der Maxima bzw. Minima der Bandkanten eingezeichnet.



**Bild 6.14:** Einschlußenergie von rein verspannungsinduzierten Quantendrähten in Abhängigkeit von der Dicke des überwachsenen (110)-GaAs-QWs für verschiedene (001)-QWs.



**Bild 6.15:** Überlapp der einhüllenden Wellenfunktionen  $\langle \varphi_e | \varphi_{hh} \rangle$  in rein verspannungsinduzierten Quantendrähten in Abhängigkeit von der Dicke des überwachsenen (110)-GaAs-QWs.

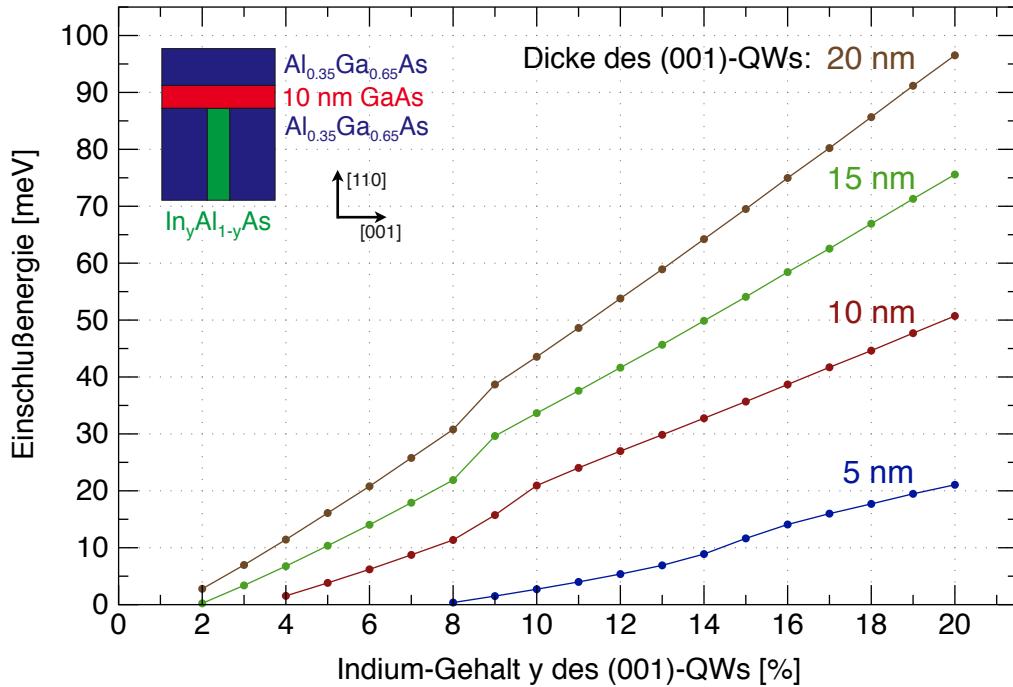
und Lochwellenfunktionen kaum noch überlappen. Daher ist es wichtig, Strukturen mit einem möglichst großem Einschlußpotential bei noch akzeptablem Überlapp zu finden.

Hierfür soll zunächst der Einfluß der Breite des überwachsenen Quantenfilms bei rein verspannungsinduzierten Quantendrähten untersucht werden. Die entsprechenden Einschlußenergien sind in Bild 6.14 dargestellt. In Bild 6.15 ist der zugehörige Überlapp der Wellenfunktionen abgebildet. Bei diesen Werten ist zu bedenken, daß nextnano3 die Wellenfunktionen ohne Berücksichtigung der Coulomb-Anziehung ausrechnet. Diese kann dazu führen, daß Elektronen und Löcher in Wirklichkeit enger zusammenrücken und der Überlapp somit etwas größer ist als hier angegeben. Außerdem wird zur Berechnung des Überlapps der Wellenfunktionen aufgrund von Einschränkungen im Programmablauf von nextnano3 die Einband-Näherung eingesetzt.

Es zeigt sich, daß für die meisten Strukturen bei einer Breite des überwachsenen Quantenfilms von 24 nm die Einschlußenergie maximal wird. Bei größeren Breiten sinkt die Einschlußenergie nur langsam wieder ab. Es sollten somit auch verspannungsinduzierte CEO-Quantendrähte möglich sein, bei denen die überwachsene Schicht nur aus einer dicken GaAs-Schicht ohne AlGaAs-Barriere besteht. In Bild 6.15 ist jedoch zu sehen, daß bei derart breiten überwachsenen Quantenfilmen die Wellenfunktionen kaum noch überlappen. Der größte Überlapp findet sich bei Breiten von 5 bis 7 nm. Als Kompromiß zwischen hohem Einschlußpotential und Effizienz des optischen Übergangs wurde daher für die folgenden Betrachtungen die Dicke des überwachsenen Quantenfilms auf 10 nm festgelegt.

In Bild 6.16 ist die Abhängigkeit der Einschlußenergie von der Breite und dem Indium-Gehalt des (001)-Quantenfilms dargestellt. Es zeigt sich, daß die Einschlußenergie mit steigender Breite und steigendem Indium-Gehalt zunimmt. Dies überrascht nicht, da beides zu größeren Verspannungen führt. Allerdings wird es dann auch immer schwieriger, den (001)-Quantenfilm durch MBE herzustellen. Die maximal erreichbare Einschlußenergie ist somit im wesentlichen durch die maximale Dicke bzw. den maximalen Indium-Gehalt des (001)-Quantenfilms begrenzt, der in der MBE noch ohne Gitterfehler gewachsen werden kann. Wenn es gelingt, einen 20 nm breiten  $\text{In}_{0.2}\text{Al}_{0.8}\text{As}$ -Quantenfilm in guter Qualität herzustellen, sollten damit Einschlußenergien von bis zu 97 meV erreichbar sein.

In Bild 6.16 sind ferner etwa in der Mitte der Kurven Sprungstellen zu erkennen. Der Grund hierfür liegt im bereits anhand von Bild 6.13j und k beschriebenen Wechsel des Maximums des Valenzbandes begründet. Ab einer bestimmten Indiumkonzentration wechselt die Lochwellenfunktion von der Seite zur Mitte der CEO-Kreuzung und nähert sich dabei der Elektronenwellenfunktion an. Damit geht eine Erhöhung der Exzitonen-Bindungsenergie einher, die sich in einer Erhöhung der Einschlußenergie



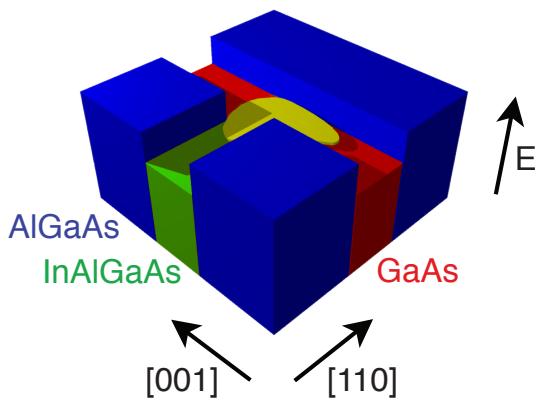
**Bild 6.16:** Einschlußenergie von rein verspannungsinduzierten Quantendrähten in Abhängigkeit von der Dicke und dem Indium-Gehalt des (001)-Quantenfilms.

äußert. In diesem Zusammenhang sei noch einmal darauf hingewiesen, daß die näherungsweise Berechnung der Exzitonen-Bindungsenergie in nextnano3 nur gültig ist, solange die Ladungsträger relativ stark gebunden sind und die Coulomb-Anziehung nur eine vernachlässigbare Wirkung auf die Wellenfunktionen ausübt (Kapitel 3.2). Daher sind die Werte in der Nähe der Sprungstellen mit einer größeren Unsicherheit behaftet.

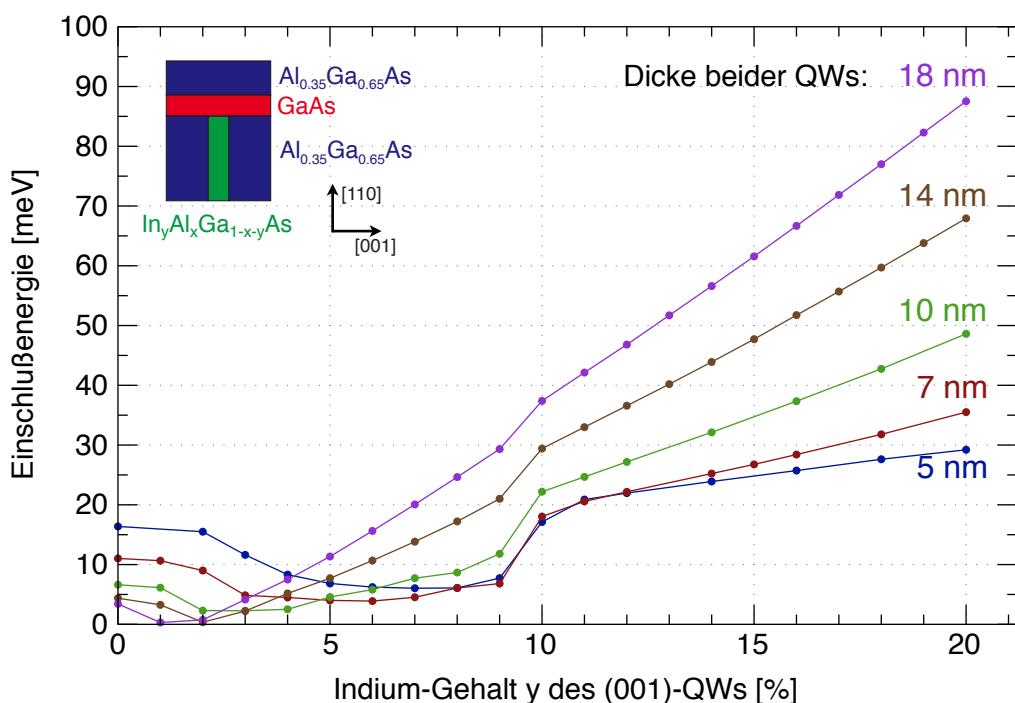
## Symmetrische verspannte Quantendrähte

Um den Überlapp der Wellenfunktionen bei verspannten Systemen zu erhöhen, wurde in [Sch05] das Konzept der verspannten T-förmigen Quantendrähte vorgeschlagen. Hierbei geht man von herkömmlichen T-förmigen Quantendrähten aus und ersetzt einen Teil des GaAs im (001)-Quantenfilm durch InAs. Damit die Energien der beiden Quantenfilme dabei angeglichen bleiben, muß gleichzeitig ein bestimmter Anteil AlAs in diesen Quantenfilm eingebracht werden, so daß dieser insgesamt aus dem quaternären Halbleiter InAlGaAs besteht. Der Verlauf der Leitungsbandkante in derartigen Strukturen ist in Bild 6.17 skizziert.

Der Ladungsträgereinschluß in diesen Strukturen ist grundsätzlich sowohl durch die T-förmige Kreuzung als auch durch Verspannungen möglich. Ideal wäre es, beide



**Bild 6.17:** Vereinfachter Verlauf der Leitungsbandkante in symmetrischen verspannten T-förmigen Quantendrähten. Die Energie ist in vertikaler Richtung aufgetragen. Die Wellenfunktion von Elektronen im Quantendraht ist gelb eingezeichnet (aus [Sch05]).



**Bild 6.18:** Einschlußenergie von symmetrischen verspannten Quantendrähten in Abhängigkeit von der Dicke und dem Indium-Gehalt des (001)-Quantenfilms. Die Übergangsenergien beider Quantenfilme wurden durch den Aluminium-Gehalt im (001)-Quantenfilm angepaßt.

Verfahren zu kombinieren, um ein Maximum der Einschlußenergie zu erreichen. Die Simulationen zeigen jedoch, daß stets entweder die eine oder die andere Art des Ladungsträgereinschlusses vorliegt. Bild 6.18 zeigt die Einschlußenergie derartiger Strukturen in Abhängigkeit von der Indiumkonzentration. Der notwendige Aluminiumgehalt wurde durch separate Rechnungen bestimmt und beträgt etwa 60 bis 80 % des Indiumgehalts.

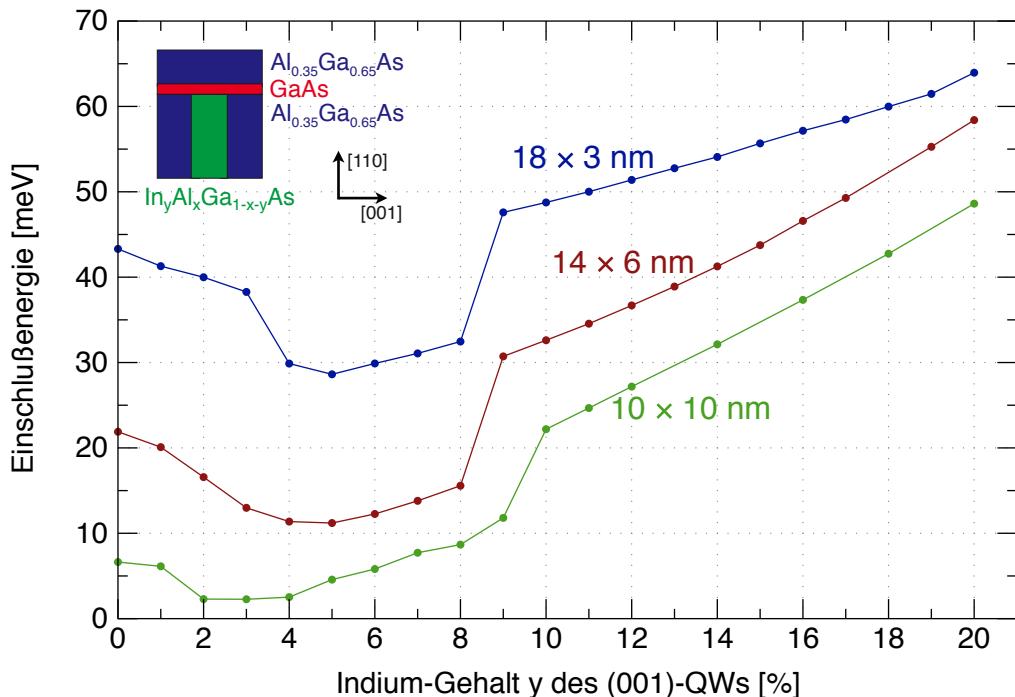
Die dargestellten Kurvenverläufe lassen sich wie folgt erklären: Strukturen ohne oder mit nur sehr wenig Indium im (001)-Quantenfilm entsprechen symmetrischen unverspannten Quantenfilmen wie in Bild 6.5. Erhöht man den Indium-Anteil, bricht der Ladungsträgereinschluß zusammen, da die Wellenfunktionen durch die Ladungsverschiebungen aufgrund der piezoelektrischen Effekte von der T-förmigen Kreuzung entfernt werden. Bei einem noch höheren Indium-Anteil tritt erneut ein Ladungsträgereinschluß ein, jetzt aufgrund der Verspannungen genau wie bei rein verspannungsinduzierten Quantendrähten. Die Einschlußenergie unterscheidet sich hier kaum von der in rein verspannungsinduzierten Quantendrähten, so daß sich in dieser Hinsicht hier praktisch keine Vorteile ergeben.

In der rechten Spalte von Bild 6.13 sind der Verlauf der Bandkanten und die Wellenfunktionen von Elektronen und Löchern für einen symmetrischen verspannten Quantendraht dargestellt. Es zeigt sich bestätigt, daß die Bandkanten und Wellenfunktionen sehr ähnlich zu denen von rein verspannungsinduzierten Quantendrähten (mittlere Spalte) sind. Es ergibt sich allerdings ein etwas größerer Überlapp der Wellenfunktionen, auf den im übernächsten Abschnitt genauer eingegangen wird.

## Asymmetrische verspannte Quantendrähte

Es wurde darüber hinaus untersucht, ob sich die Einschlußenergie durch eine Kombination von asymmetrischen T-förmigen Kreuzungen und Verspannungen weiter optimieren läßt. Die dazu betrachteten Strukturen ähneln den oben vorgestellten symmetrischen verspannten Quantendrähten, allerdings ist der (001)-Quantenfilm hier breiter als der überwachsene und beinhaltet zum Ausgleich entsprechend mehr Aluminium. Die Einschlußenergie in Abhängigkeit von der Indiumkonzentration ist in Bild 6.19 dargestellt.

Es ergeben sich ähnliche Kurvenverläufe wie bei symmetrischen verspannten Quantendrähten. Im Vergleich mit Bild 6.18 zeigt sich allerdings, daß die Einschlußenergien tatsächlich niedriger sind als die Einschlußenergien von symmetrischen verspannten Quantendrähten mit gleicher Breite des (001)-Quantenfilms. Die Verwendung von asymmetrischen Strukturen bringt hier also für die Einschlußenergie keinen Vorteil, was sich dadurch erklären läßt, daß bei höheren Indiumkonzentrationen der Ladungsträgereinschluß durch die Verspannungen bestimmt ist und die spezielle Form der T-förmigen Kreuzung hier daher nicht ausgenutzt wird. Bei genauerer Untersuchung ergeben sich



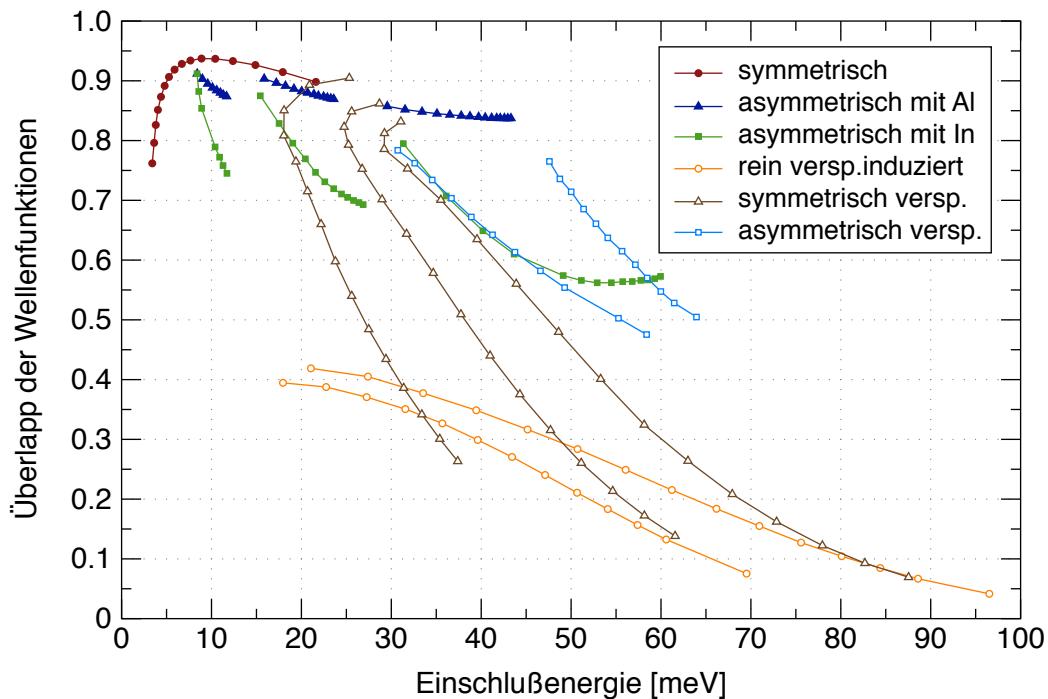
**Bild 6.19:** Einschlußenergie von symmetrischen verspannten Quantendrähten in Abhängigkeit von der Dicke und dem Indium-Gehalt des (001)-Quantenfilms. Die Übergangsenergien beider Quantenfilme wurden durch den Aluminium-Gehalt des (001)-Quantenfilms angepaßt.

bei diesen asymmetrischen Strukturen bezüglich des Überlapps der Wellenfunktionen bestimmte Vorteile, die im folgenden Abschnitt dargestellt werden.

## Überlapp der Wellenfunktionen

In Bild 6.20 ist der Überlapp der Elektron- und Lochwellenfunktion in Quantendrähten in Abhängigkeit von der Einschlußenergie für verschiedene Strukturkonzepte dargestellt. Für praktische Anwendungen sind in der Regel sowohl ein großer Überlapp als auch eine hohe Einschlußenergie wünschenswert. Bild 6.20 zeigt, daß sich beides nicht gleichzeitig in einer Struktur optimieren läßt, so daß stets ein Kompromiß eingegangen werden muß.

Es zeigt sich, daß sich der größte Überlapp der Wellenfunktionen für symmetrische Quantendrähte (rot) und asymmetrische Quantendrähte mit Aluminium (dunkelblau) ergibt. Bei asymmetrischen Quantendrähten mit Indium (grün) können signifikant höhere Einschlußenergien erzielt werden, allerdings geht dies mit einer Reduzierung des Überlapps auf bis unter 60 % einher. Die größten Einschlußenergien lassen sich mit rein verspannungsinduzierten Quantendrähten (orange) erzielen, allerdings weisen diese Strukturen auch den niedrigsten Überlapp von 40 % bis hinab zu 4 % auf. Symmetrische



**Bild 6.20:** Überlapp der Wellenfunktionen in Abhängigkeit von der Einschlußenergie für die in diesem Kapitel vorgestellten Strukturkonzepte für Quantendrähte. Die asymmetrischen verspannten Quantendrähte (hellblau) entsprechen den in Bild 6.19 dargestellten Strukturen mit variierendem Indiumgehalt. Bei allen übrigen Strukturen wurde entlang der Kurven die Breite des (001)-Quantenfilms variiert. Die dargestellten unverspannten Strukturen entsprechen den in den Bildern 6.5, 6.8 und 6.9 gezeigten Strukturen. In den beiden Kurven für rein verspannungsinduzierte Quantendrähte sind Strukturen mit einem Indiumgehalt von 15 und 20 % und in den drei Kurven für symmetrisch verspannte Quantendrähte Strukturen mit einem Indiumgehalt von 10, 15 und 20 % dargestellt.

verspannte T-förmige Quantendrähte (braun) weisen bei ähnlichen Einschlußenergien einen höheren Überlapp auf, allerdings vor allem im Bereich kleinerer Einschlußenergien und nähern sich für höhere Einschlußenergien den rein verspannungsinduzierten Quantendrähten an. Bei den asymmetrischen verspannten T-förmigen Quantendrähten (hellblau) ergibt sich ein weiter erhöhter Überlapp, allerdings lassen sich hiermit nur geringere Einschlußenergien erzielen.

Insgesamt läßt sich festhalten, daß es vom erforderlichen Überlapp der Wellenfunktionen abhängt, mit welchem Strukturkonzept sich die optimale Einschlußenergie finden läßt. Besonders vielversprechend erscheinen asymmetrische Quantenfilme mit Indium im überwachsenen Quantenfilm, die aber bisher offenbar noch nicht experimentell realisiert wurden. Sie weisen ein relativ hohes Einschlußpotential von bis zu 60 meV bei einem noch akzeptablen Überlapp der Wellenfunktionen von 57 % auf. Diese Struk-

turen sollten sich darüber hinaus aufgrund der geringen Breite des indiumhaltigen (110)-Quantenfilms einfacher herstellen lassen als die verspannten Quantendrähte mit wesentlich dickeren indiumhaltigen Schichten.

## 6.5 Quantenpunkte

CEO-Quantenpunkte entstehen an der Kreuzung von drei zueinander senkrechten Quantenfilmen. Entlang der Verbindungsleitung von jeweils zwei dieser Quantenfilme entstehen CEO-Quantendrähte. Die Einschlußenergie von Quantenpunkten ist nach Gleichung (2.44) durch die Differenz der Übergangsenergien des Quantenpunkts und des niedrigsten angrenzenden Quantendrahts gegeben.

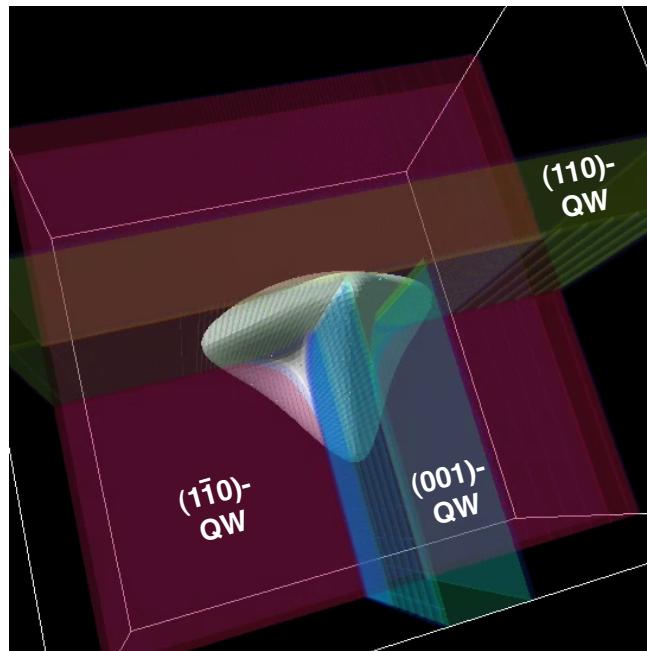
Bei der Simulation von Quantenpunkten wurden unter anderem verspannte Strukturen untersucht, bei denen die (001)- und (110)-Quantenfilme identisch zu den oben vorgestellten rein verspannungsinduzierten bzw. T-förmigen verspannten Quantendrähten sind und der ( $\bar{1}\bar{1}0$ )-Quantenfilm, der im dritten Wachstumsschritt entsteht, bezüglich Dicke und Zusammensetzung dem (110)-Quantenfilm entspricht. Für diese verspannten Quantenpunktstrukturen ergeben die Simulationen, daß zwar die Elektronen gebundene Zustände einnehmen, die Löcher jedoch ungebunden sind. Somit lassen sich auf diese Weise keine Einschlußenergien für Exzitonen ermitteln.

Es ist zu vermuten, daß bei vollständiger Berücksichtigung der Coulomb-Anziehung auch die Löcher durch die Wechselwirkung mit den Elektronen gebunden sind. Dies läßt sich jedoch mit der derzeit aktuellen Version der Simulationssoftware wie oben erwähnt nicht berechnen. Es ist allerdings davon auszugehen, daß sich aufgrund des fehlenden Einschlußpotentials im Valenzband in diesem Fall nur geringe Einschlußenergien für exzitonisch gebundene Elektron-Loch-Paare ergeben.

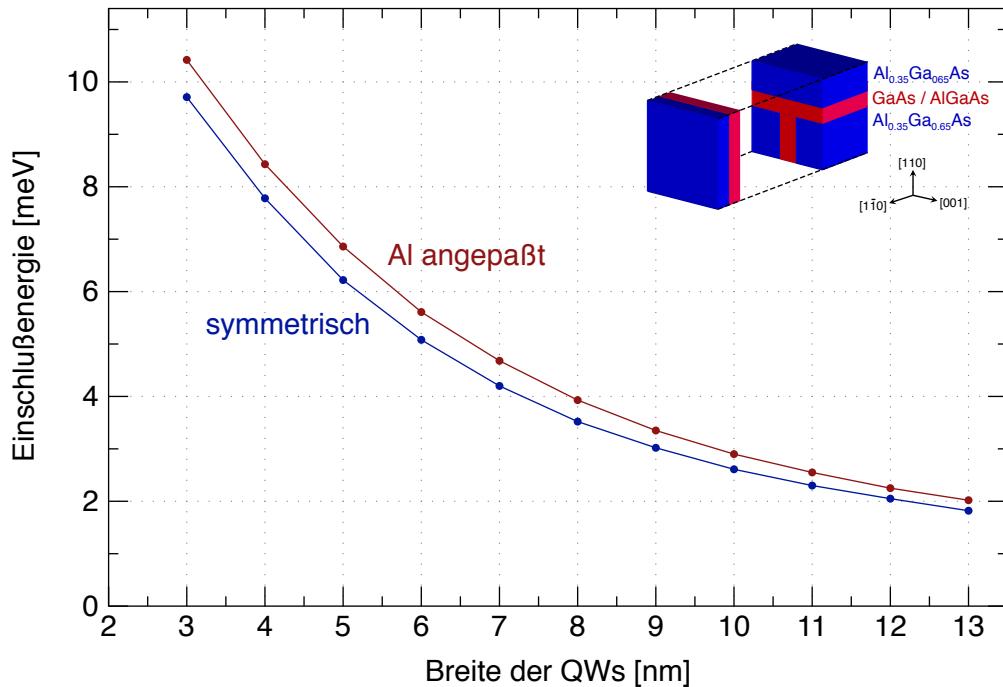
Darüber hinaus zeigen die Simulationen in Verbindung mit dem Optimierungsalgorithmus, daß auch andere Quantenpunktstrukturen mit Indium zu keiner Erhöhung der Einschlußenergie gegenüber unverspannten Strukturen führen. Daher werden im Folgenden nur unverspannte symmetrische und asymmetrische Quantenpunkte genauer betrachtet.

### Symmetrische Quantenpunkte

Symmetrische CEO-Quantenpunkte entstehen an der Kreuzung von drei GaAs-Quantenfilmen mit jeweils gleicher Dicke. Bild 6.22 zeigt die berechneten Einschlußenergien für symmetrische CEO-Quantenpunkte. Die räumliche Verteilung der Elektronenwellenfunktion ist in Bild 6.21 dargestellt. Ähnlich wie bei symmetrischen Quantendrähten



**Bild 6.21:** Simulierte Elektronen-Wellenfunktion (Äquipotentialfläche) in einem symmetrischen CEO-Quantenpunkt an der Kreuzung von drei 7 nm breiten GaAs-Quantenfilmen.



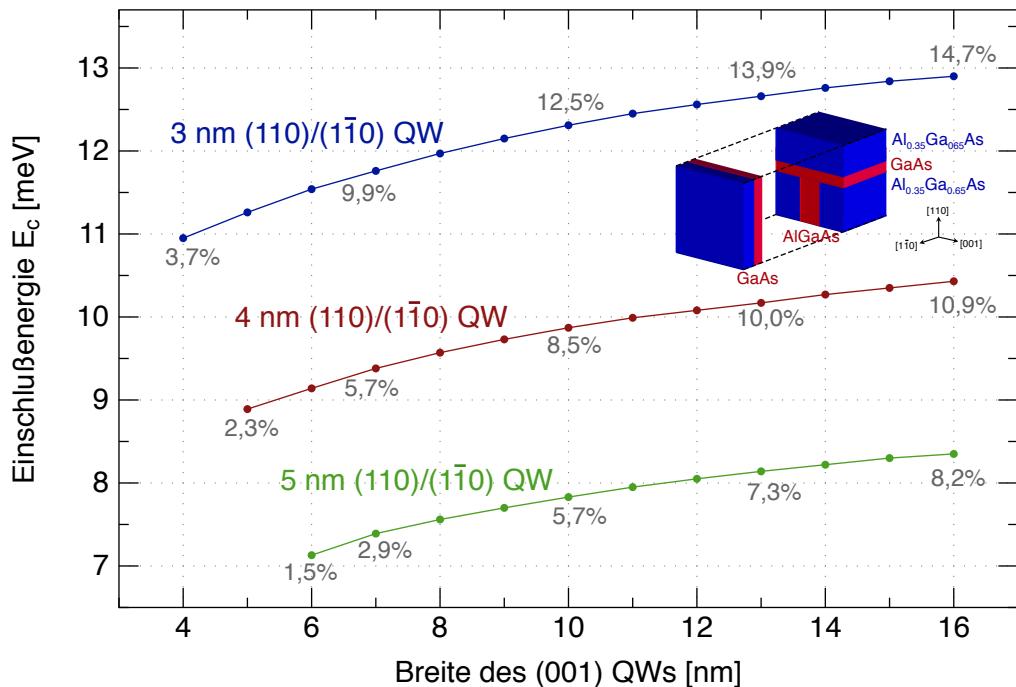
**Bild 6.22:** Einschlußenergie von symmetrischen GaAs-Quantenpunkten. Durch einen geringen Aluminium-Anteil in den beiden überwachsenen Quantenfilmen lassen sich die QWR-Energien angleichen und so das Einschlußpotential optimieren.

lassen sich auch hier die Einschlußenergien leicht erhöhen, indem man die Übergangsenergien der drei angrenzenden Quantendrähte durch einen geringen Aluminium-Anteil in den beiden überwachsenen Quantenfilmen einander angleicht.

Frühere Rechnungen von CEO-Quantenpunkten in [Gru97] ergaben um 40 bis 50 % größere Einschlußenergien. Allerdings wurden dort die Strukturen nur durch die Einband-Näherung mit isotropen Lochmassen und einem relativ groben und kleinen Gitter berechnet, so daß die hier vorgestellten Ergebnisse vermutlich genauer sind.

## Asymmetrische Quantenpunkte

Auch bei Quantenpunkten läßt sich die Einschlußenergie durch Verwendung von asymmetrischen Strukturen erhöhen. Hier weist der (001)-Quantenfilm gegenüber den beiden überwachsenen (110)- und ( $\bar{1}\bar{1}0$ )-Quantenfilmen eine erhöhte Breite auf. Zur Angleichung der Energien der angrenzenden Quantendrähte wird ein entsprechender Anteil AlAs in den (001)-Quantenfilm eingebracht. Die simulierten Einschlußenergien von entsprechenden Strukturen sind in Bild 6.23 zu sehen. Auch hier zeigt sich, daß die Einschlußenergie umso größer ist, je mehr sich die Dicken der Quantenfilme unterscheiden.



**Bild 6.23:** Einschlußenergie von asymmetrischen GaAs-Quantenpunkten. Für einige ausgewählte Strukturen bezeichnen die Prozentangaben den Aluminium-Anteil im (001)-Quantenfilm, mit dem die Übergangsenergien der angrenzenden Quantendrähte angeglichen werden.

den. Asymmetrische Quantenpunkte wurde bislang noch nicht experimentell realisiert, erscheinen jedoch aufgrund der erhöhten berechneten Einschlußenergien von bis zu 12,9 meV vielversprechend.

## 6.6 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden erstmals systematische Simulationen an allen bekannten CEO-Strukturkonzepten durchgeführt. Das eingesetzte Rechenverfahren der 8- bzw. 6-Band- $k \cdot p$ -Rechnung zusammen mit der Berücksichtigung von Exzitonen, Verspannungsfeldern, piezoelektrischen Effekten und einem besonders großen Simulationsgebiet führte dabei zu einer höheren Genauigkeit als bei bisherigen Rechnungen. Besonderes Augenmerk lag auf der Optimierung des Einschlußpotentials. Durch einen automatischen Optimierungsalgorithmus wurde für verschiedene Randbedingungen jeweils die optimale Struktur ermittelt. Darüber hinaus wurde der Überlapp der Wellenfunktionen, der die Effizienz der optischen Übergänge bestimmt, für verschiedene Strukturen berechnet und verglichen.

Es hat sich bestätigt, daß eine Erhöhung der Einschlußenergie in CEO-Quantendrähten sowohl durch asymmetrische Strukturen als auch durch den Einsatz von Ver- spannungen erreicht werden kann. Es ergab sich, daß sich asymmetrischen Strukturen nicht nur mit Aluminium im (001)-Quantenfilm, sondern auch mit Indium im (110)-Quantenfilm realisieren lassen. Diese bisher nicht realisierten Strukturen versprechen ein hohes Einschlußpotential von bis zu 60 meV bei gleichzeitig relativ gutem Überlapp der Wellenfunktionen (57 % oder mehr).

Bei verspannten Strukturen wurden zwei unterschiedliche Effekte identifiziert, die zum Ladungsträgereinschluß beitragen: zum einen die hydrostatische Verzerrung bei einer geringeren Indiumkonzentration bis etwa 10 % und zum anderen die piezoelektrischen Effekte bei einem höheren Indiumgehalt. Nur letztere führen zu einem brauchbaren Überlapp der Wellenfunktionen. Bei Quantendrähten mit Verspannungen hängt die erreichbare Einschlußenergie von der erreichbaren Qualität des Wachstums von indiumhaltigen Schichten ab. Mit einem 20 nm breiten  $\text{In}_{0.2}\text{Al}_{0.8}\text{As}$ -Quantenfilm ergibt die Simulation eine Einschlußenergie von 97 meV.

Neben rein verspannungsinduzierten Quantendrähten wurden auch verspannte T-förmige Quantendrähte untersucht. Eine erhoffte weitere Erhöhung der Einschlußenergie hat sich hier nicht bestätigt. Stattdessen ergibt sich für verspannte symmetrische und asymmetrische Quantendrähte ein etwas geringeres Einschlußpotential bei leicht verbessertem Überlapp der Wellenfunktionen.

Die genauere Untersuchung des Überlapps der Elektron- und Lochwellenfunktion in

den untersuchten Proben ergibt, daß sich nicht gleichzeitig eine hohe Einschlußenergie und ein großer Überlapp erreichen läßt, so daß CEO-Strukturen in dieser Hinsicht immer einen Kompromiß darstellen.

Die Simulationen von CEO-Quantenpunktstrukturen legen nahe, daß sich hier durch Verspannungen keine Erhöhung der Einschlußenergie für exzitonisch gebundene Elektron-Loch-Paare erreichen läßt. Für symmetrische Quantenpunkte ergeben sich Einschlußenergien von bis zu 10 meV und für asymmetrische bis zu 12,9 meV.

Wie sich bei der Diskussion der praktischen Umsetzung dieser Strukturen in Kapitel 8 zeigt, sind die bisher experimentell erreichten Einschlußenergien fast immer größer als die theoretischen Werte. Dies läßt vermuten, daß sich für die in diesem Kapitel simulierten Strukturen in der Praxis noch deutlich höheren Einschlußenergien ergeben können.

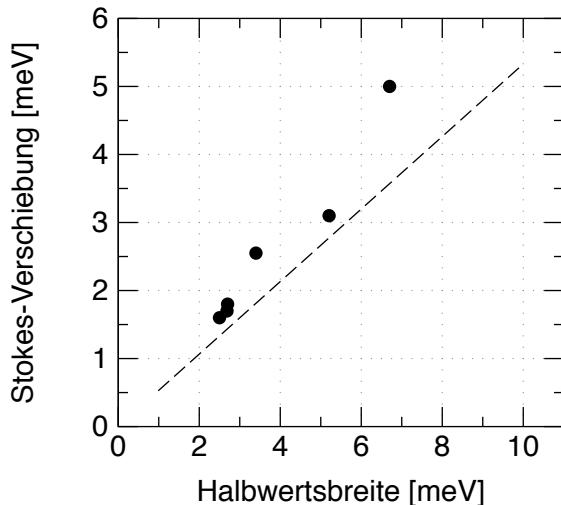
# Kapitel 7

## Optimierung des Wachstums von Quantenfilmen

Das Überwachsen von Spaltflächen ist ein relativ komplexes Verfahren mit vielen Einzelschritten, die jeweils beherrscht werden müssen, um erfolgreich Quantendrähte und -punkte herzustellen. Daher wurden entscheidende Teilschritte einzeln untersucht und optimiert. Dieses Kapitel konzentriert sich dabei auf das Wachstum von Quantenfilmen, das die Grundlage des CEO-Verfahrens darstellt.

Obwohl MBE-gewachsene Quantenfilme schon seit Jahrzehnten untersucht werden, bleibt die Herstellung von qualitativ hochwertigen Quantenfilmen mit schmalen Halbwertsbreiten weiterhin eine Herausforderung. Dies liegt zum einen daran, daß die optimalen Wachstumsparameter von der verwendeten MBE-Kammer abhängen und nicht ohne weiteres von einer Anlage zu einer anderen übertragbar sind. Zum anderen sind die atomaren Wachstumsprozesse zwar grundsätzlich gut verstanden, die quantitative Abhängigkeit der Wachstumsdynamik von den gewählten Parametern aber noch nicht mit zufriedenstellender Genauigkeit bekannt. Insbesondere für die Oberflächenmigration und -segregation gibt es noch nicht genügend experimentelle Ausgangswerte, um mit den bekannten Modellen das Wachstum hinreichend genau zu beschreiben.

Das MBE-Wachstum hängt von einer Vielzahl von Parametern ab, die sich nicht alle gut reproduzieren lassen, zum Beispiel wegen nur bedingt genauen Meßmethoden oder eines Drifts von Parametern während des Wachstums. Daher ist eine Vielzahl von Proben nötig, um über die Statistik brauchbare Aussagen über den Einfluß der Wachstumsparameter treffen zu können. Aus diesem Grund sind Veröffentlichungen, in denen Aussagen zu Wachstumsparametern aufgrund von wenigen gewachsenen Proben gemacht werden, allgemein mit Skepsis zu betrachten. Für die in diesem Kapitel vorgestellten Ergebnisse wurden insgesamt 169 Quantenfilme in 120 verschiedenen Proben untersucht.



**Bild 7.1:** Überprüfung des Zusammenhangs zwischen der Stokes-Verschiebung und der Linienbreite nach Gleichung (2.25) (gestrichelte Linie) anhand von fünf Proben, bei denen die Stokes-Verschiebung durch Vergleich von PL- und PLE-Messungen ermittelt wurde.

Um die Qualität von gewachsenen GaAs-Quantenfilmen zu beurteilen eignet sich besonders die Photolumineszenzspektroskopie. Aus dem Vergleich zwischen den gemessenen und den in Kapitel 6.3 simulierten Photonenergien lässt sich die Dicke und Materialzusammensetzung ableiten. Die spektrale Linienform ist ein Maß für die Grenzflächenrauigkeiten in der Probe (siehe Kapitel 2.5).

Wie in Kapitel 2.5 dargestellt, entsprechen die PL-Signale nicht direkt der mittleren Übergangsenergie der beteiligten Zustände, sondern liegen aufgrund der Stokes-Verschiebung  $\Delta E_{Stokes}$  bei kleineren Energien. Eine genauere Messung erlaubt die Photolumineszenz-Anregungsspektroskopie, die allerdings zeitaufwändiger ist. Andererseits gibt es nach Gleichung (2.25) einen universellen Zusammenhang zwischen der Stokes-Verschiebung  $\Delta E_{Stokes}$  und der Linienbreite  $\Gamma$ . Eigene Messungen (Bild 7.1) bestätigen diese Beziehung im Rahmen der Meßgenauigkeit. In diesem Kapitel wurden daher die in der PL gemessenen Übergangsenergien anhand der Linienbreite entsprechend korrigiert.

Die Verwendung von hochauflöster Mikrophotolumineszenzspektroskopie ermöglicht darüber hinaus eine genauere Untersuchung der Längenskalen der Grenzflächenrauigkeiten. Da die räumliche Auflösung etwa  $1\text{ }\mu\text{m}$  beträgt, führen alle kleineren Unebenheiten zu einer Linienverbreiterung der optischen Emission. Fluktuationen der Quantenfilmdicke in größerem Maßstab lassen sich hingegen durch Rastern über die Probenoberfläche direkt abbilden.

Die Messungen in dieser Arbeit wurden sofern nicht anders angegeben bei einer Kryostattemperatur von 5 bis 8 K durchgeführt. Eine Messung bei 4,2 K (also der Temperatur von flüssigem Helium) hätte bei dem verwendeten Durchflußkryostaten zu einem wesentlich höheren Heliumverbrauch geführt. Da die Bandlücke von GaAs in diesem Bereich nach Gleichung (3.32) kaum von der Temperatur abhängt, führt

diese gegenüber flüssigem Helium leicht erhöhte Temperatur zu keinen meßbaren Abweichungen. Dies konnte durch Kontrollmessungen bestätigt werden, die an der Probe D081017A von Stefanie Obermeier in einem Helium-Tauchbad durchgeführt wurden [Obe09].

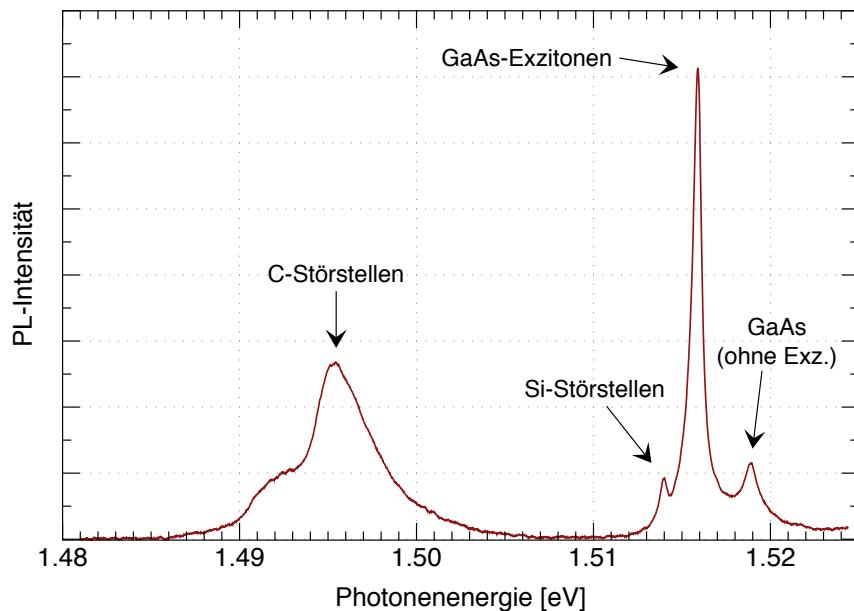
Es hat sich gezeigt, daß die Quantenfilme in (001)-Richtung als Ausgangsbasis des CEO-Verfahrens oft nicht in der gewünschten Qualität gewachsen sind. Dies äußerte sich bei optischen Messungen vor allem durch breite Peaks, die auf Grenzflächenrauhigkeiten hindeuten. Außerdem war die energetische Lage der Peaks durchweg deutlich höher als die theoretisch ermittelten Werte. Daher wurden umfangreiche Tests durchgeführt, um die Ursachen hierfür und die besten Wachstumsparameter zu ermitteln.

## 7.1 Eigenschaften von dicken GaAs-Schichten

Bei der Photolumineszenz von GaAs-basierten Proben ist in der Regel immer auch das Signal von reinem GaAs zu sehen wie beispielsweise in Bild 7.2. Es zeigen sich unter anderem zwei Peaks, dessen Photonenergien der GaAs-Bandkante bzw. der Bandkante vermindert um die Exzitonen-Bindungsenergie entsprechen. Sie lassen sich auf Elektron-Loch-Rekombinationen im Volumenkristall zurückführen. Diese beiden Peaks sind von Probe zu Probe unterschiedlich stark ausgeprägt. Bei den hier untersuchten Proben lagen diese Peaks bei  $1,5188 \text{ eV} \pm 0,8 \text{ meV}$  für Übergänge ohne Exzitonen und  $1,5153 \text{ eV} \pm 0,8 \text{ meV}$  für exzitonische Übergänge. Diese Werte stimmen gut mit den Literaturwerten von  $1,5189 \text{ eV}$  bzw.  $1,5152 \text{ eV}$  [Mad96] überein. Darüber hinaus führen Störstellen und Dotierungen je nach Konzentration zu weiteren Signalen mit Energien knapp unterhalb der Bandkante.

Diese GaAs-Signale können vom Substratmaterial oder von dickeren gewachsenen GaAs-Schichten ausgehen. Bei den in dieser Arbeit untersuchten Proben wird allgemein zuerst eine 300 nm dicke GaAs-Pufferschicht auf den rohen Wafer aufgewachsen, um die relative rauhe Waferoberfläche zu glätten. Untersucht man bei der Photolumineszenz die Proben auf der (001)-Oberfläche, absorbiert diese Schicht den größten Teil des Anregungslichts und dominiert somit das GaAs-Signal.

Auf diese Weise läßt sich neben anderen Meßverfahren ermitteln, welche Fremdatome in der MBE-Kammer vorhanden sind. Bei allen untersuchten Proben war immer auch ein deutliches Signal bei einer Energie zu sehen, die um  $27 \text{ meV}$  unterhalb der GaAs-Bandkante liegt. Dieses Signal sättigt bei höheren Anregungsleistungen und läßt sich auf Kohlenstoff-Störstellen zurückführen. Weitere Signale zeigen sich bei Energien von 5 bis  $7 \text{ meV}$  unterhalb der Bandkante und werden durch Silizium-Störstellen verursacht. Diese beiden Materialien werden in der verwendeten MBE-Kammer als



**Bild 7.2:** PL-Spektrum der Probe D081017A mit Signalen der 300 nm dicken GaAs-Pufferschicht.

Dotierstoffe verwendet und sind daher immer in Spuren vorhanden.

Eine in Garching hergestellte Probe<sup>1</sup> (M0040) zeigte im Vergleich zu zwei ähnlichen in der Regensburger D-Kammer gewachsenen Proben (D081017A, D081024C) ein um den Faktor 30 schwächeres Kohlenstoff-Signal. Dies liegt darin begründet, daß in dieser MBE-Anlage keine Kohlenstoff-Dotierzelle eingebaut ist und daher wesentlich weniger Verunreinigungen durch Kohlenstoff vorhanden sind.

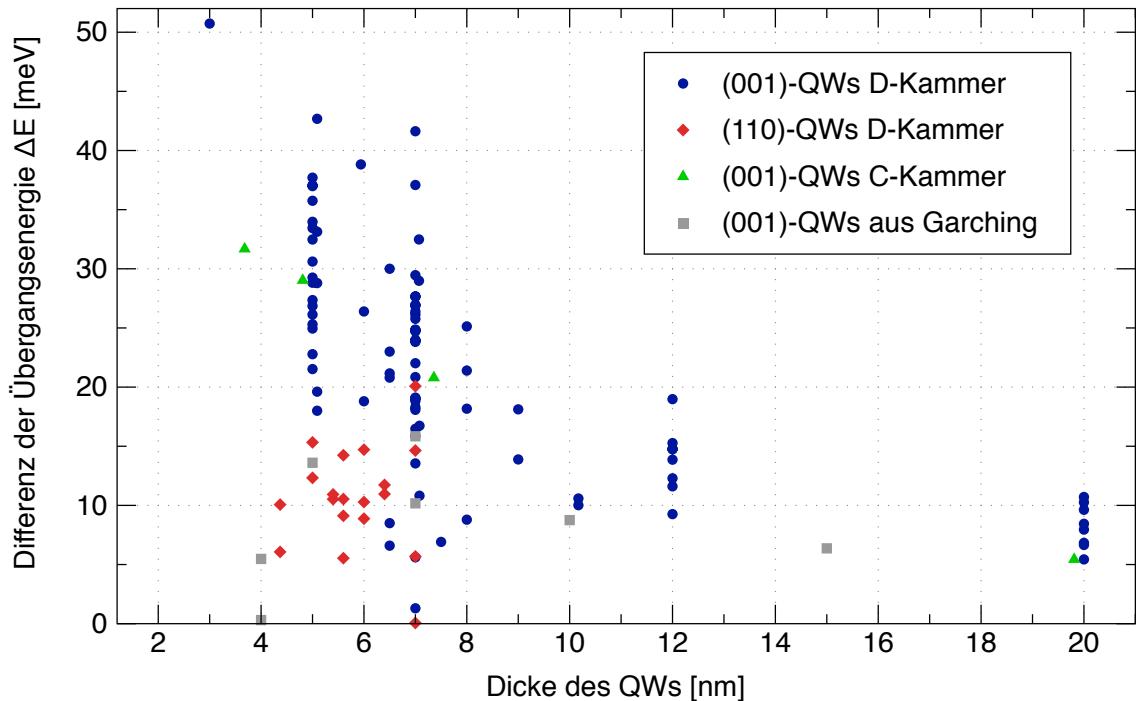
Für das GaAs-Exzitonen-Signal wurden Halbwertsbreiten zwischen 0,5 und 2 meV gemessen. Diese Schwankungen werden dadurch verursacht, daß das Signal oft von dem der Silizium-Störstellen überlagert wird. Die Halbwertsbreite des Exzitonen-Signals selbst beträgt also offensichtlich  $\Gamma_{bulk} = 0,5 \text{ meV}$  für den GaAs-Volumenkristall.

## 7.2 Übergangsenergien

Alle untersuchten Quantenfilm-Proben wurden wie in Kapitel 6.3 beschrieben auch theoretisch simuliert. Die Übergangsenergie wurde für die Rekombination eines Elektron-Schwerloch-Exzitons am  $\Gamma$ -Punkt berechnet, da dieser Prozeß das Emissionsspektrum dominiert. Dabei wurden neben der Dicke auch die Wachstumsrichtung und Materialzusammensetzung von Quantenfilm und Barriere berücksichtigt. Ein Vergleich zeigt, daß die gemessenen Übergangsenergien systematisch deutlich größer als die berechneten

<sup>1</sup>am Lehrstuhl von Prof. Amann im Walter-Schottky-Institut der Technischen Universität München

sind. In Bild 7.3 sind die Abweichungen der gemessenen Energien  $\Delta E = E_{exp} - E_{theor}$  über die Dicke des Quantenfilms für eine große Anzahl verschiedener Proben aufgetragen.



**Bild 7.3:** Differenz zwischen der gemessenen und der simulierten Übergangsenergie von (001)- und (110)-GaAs-Quantenfilmen in Abhängigkeit von der Dicke. Dabei wurden Proben aus der Regensburger C- und D-Kammer sowie beiden Garchinger MBE-Anlagen berücksichtigt. Bei den experimentellen Energien wurde die Stokes-Verschiebung berücksichtigt und bei den Simulationen der Aluminium-Gehalt in der Barriere.

Es zeigt sich, daß diese Blauverschiebung von der Dicke der Quantenfilme abhängt. Dies ist ein Indiz dafür, daß die Ursache der Energieerhöhung mit den Grenzflächen oder mit der Dicke der Quantenfilme zu tun hat, da bei schmaleren Quantenfilmen sowohl die Grenzflächen als auch die Dicke in stärkerem Maße einen Einfluß auf die Energie haben. Die Übergangsenergien von (110)-Quantenfilmen stimmen systematisch deutlich besser mit den Simulationen überein als die der (001)-Quantenfilme. Bei einer in der C-Kammer hergestellten Probe mit 4 Quantenfilmen (C051114A) zeigt die Blauverschiebung keine Abweichung zu den in der D-Kammer gewachsenen Proben. Darüber hinaus wurden einige Proben untersucht, die in den beiden Garchinger MBE-Anlagen<sup>2</sup> gewachsen wurden. Diese zeigen eine signifikant geringere Blauverschiebung.

<sup>2</sup>an den Lehrstühlen von Prof. Abstreiter und Prof. Amann im Walter-Schottky-Institut der Technischen Universität München

Für diese Energieverschiebung können verschiedene mögliche Ursachen ausgeschlossen werden. Inhomogenitäten des Molekularstrahls kommen als Ursache nicht in Frage, da die meisten hier gemessenen Probenstücke aus der Mitte des Wafers entnommen wurden, also der Stelle, an der auch die RHEED-Eichung der Wachstumsraten durchgeführt wird und die Rotation beim Wachstum keinen Einfluß hat. Störstellen lassen sich ebenso ausschließen, da diese nicht zu einer Blau- sondern nur zu einer Rotverschiebung führen können. Messungen mit einem in der MBE-Kammer installierten Massenspektrometer zeigen, daß sonstige Elemente in der Kammer nur in extrem geringen Mengen vorhanden sind. Durch PLE-Messungen konnte ausgeschlossen werden, daß es sich bei den hier gemessenen Signalen um Leichtlochübergänge handelt, da diese bei noch höheren Energien zu finden waren. Die einwandfreie Funktion der pneumatischen Shutter, durch die die Wachstumszeiten gesteuert werden, läßt sich leicht von außen kontrollieren. Die theoretisch simulierten Übergangsenergien scheinen ebenfalls korrekt zu sein, da sie mit anderen Rechnungen gut übereinstimmen. Auch systematische Fehler bei der Messung der Übergangsenergie können ausgeschlossen werden, da diese für den Volumenkristall sehr gut mit den Literaturwerten übereinstimmt (siehe oben).

## Oberflächensegregation

Eine verbleibende mögliche Ursache für die Blauverschiebung ist die Diffusion von Aluminium in den Quantenfilm während des Wachstums durch Oberflächensegregation wie in Kapitel 4.4 beschrieben. In [Leo00] wurde mit dem Modell aus [Ger92] für GaAs-Quantenfilme eine Erhöhung der Übergangsenergien durch Oberflächensegregation um etwa 10 meV berechnet und experimentell bestätigt. Da die dort verwendeten Ausgangsparameter nur relativ ungenau bekannt sind, kann dieser berechnete Wert nur als Anhaltspunkt dienen. Die meisten der gemessenen Abweichungen in Bild 7.3 sind allerdings deutlich größer, so daß es unwahrscheinlich erscheint, daß sie nur durch Oberflächensegregation verursacht sind.

## Wachstumsraten

Um zu untersuchen, ob ein systematischer Fehler bei der Bestimmung der Wachstumsraten vorliegt, wurden diese durch drei verschiedene Verfahren kontrolliert:

- An drei Proben wurde von Alois Schneider eine Röntgendiffraktometrie durchgeführt und so die tatsächlichen Wachstumsraten bestimmt. Dieses Verfahren ist in Kapitel 4.3 kurz beschrieben. Der statistische Fehler dieser Messung beträgt etwa 3 %.

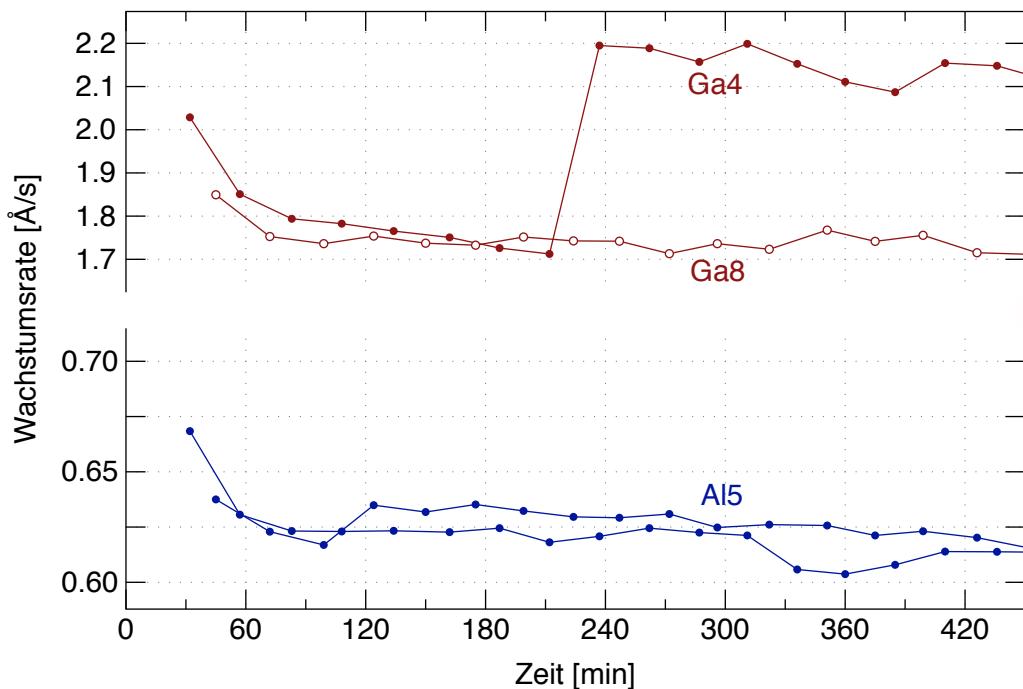
- Bei der Mikrophotolumineszenz kann der Abstand zwischen verschiedenen Quantenfilmen gemessen werden, wenn deren Abstand voneinander mindestens  $1\text{ }\mu\text{m}$  beträgt. Die Genauigkeit ist dabei vor allem durch den Piezo-Verschiebetisch gegeben und beträgt hier etwa  $0,1\text{ }\mu\text{m}$ . Der gemessene Abstand entspricht dabei der Dicke der jeweiligen  $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ -Barriere, in die die Ga-Rate zu etwa  $2/3$  und die Al-Rate zu  $1/3$  eingehen.
- Ebenso kann im Lichtmikroskop die Dicke der aufgewachsenen  $\text{AlGaAs}$ -Schicht gemessen werden. Spaltet man eine Probe so, daß man die aufgewachsenen Schichten im Profil sieht, ist ein sehr schwacher Kontrast zwischen dem  $\text{GaAs}$ -Substrat und den aufgewachsenen  $\text{AlGaAs}$ -Schichten sichtbar (wie beispielsweise in Bild 9.3). Mehrere Proben wurden so in einem handelsüblichen Lichtmikroskop mit einem  $100\times$  Objektiv und einer hochauflösenden CCD-Kamera photographiert und nach einer Kontrastverstärkung jeweils die Dicke der  $\text{AlGaAs}$ -Schicht gemessen. Die Genauigkeit beträgt in diesem Fall etwa  $0,15\text{ }\mu\text{m}$ . Die gemessene Dicke wird wiederum zu  $2/3$  von der Ga-Rate und zu  $1/3$  von der Al-Rate bestimmt.

| Probe    | Meßverfahren   | Meßwerte  | Abweichung |
|----------|----------------|---|------------|
| C050602A | Mikro-PL       | QW-Abstand: $4,40\text{ }\mu\text{m}$ statt $4,99\text{ }\mu\text{m}$ | 87,7 %     |
|          | Mikroskop      | Dicke: $9,60\text{ }\mu\text{m}$ statt $10,96\text{ }\mu\text{m}$     | 87,6 %     |
| D060313C | Mikroskop      | Dicke: $3,67\text{ }\mu\text{m}$ statt $4,53\text{ }\mu\text{m}$      | 80,9 %     |
| D060308C | Mikroskop      | Dicke: $1,95\text{ }\mu\text{m}$ statt $2,16\text{ }\mu\text{m}$      | 90,0 %     |
| D061204B | Mikroskop      | Dicke: $3,69\text{ }\mu\text{m}$ statt $3,92\text{ }\mu\text{m}$      | 94,4 %     |
| D070821B | Mikroskop      | Dicke: $3,16\text{ }\mu\text{m}$ statt $3,33\text{ }\mu\text{m}$      | 95,0 %     |
| D071121A | Mikroskop      | Dicke: $5,23\text{ }\mu\text{m}$ statt $6,05\text{ }\mu\text{m}$      | 86,4 %     |
| D080625C | Röntgenbeugung | Ga-Rate: $2.058\text{ \AA/s}$ statt $2.237\text{ \AA/s}$              | 92,0 %     |
|          |                | In-Rate: $0.257\text{ \AA/s}$ statt $0.40\text{ \AA/s}$               | 64,1 %     |
| D080830A | Röntgenbeugung | Ga-Rate: $2.308\text{ \AA/s}$ statt $2.699\text{ \AA/s}$              | 85,5 %     |
|          |                | Al-Rate: $0.899\text{ \AA/s}$ statt $0.945\text{ \AA/s}$              | 95,1 %     |
| D081103C | Röntgenbeugung | ÜG-Periode: $9,50\text{ nm}$ statt $10,0\text{ nm}$                   | 95 %       |
|          | Mikroskop      | Dicke: $2,66\text{ }\mu\text{m}$ statt $3,02\text{ }\mu\text{m}$      | 88,0 %     |
| D081110A | Mikroskop      | Dicke: $2,47\text{ }\mu\text{m}$ statt $2,17\text{ }\mu\text{m}$      | 113,6 %    |

**Tabelle 7.1:** Kontrolle der Wachstumsraten an mehreren Proben durch drei verschiedene Meßverfahren. Es zeigt sich, daß die tatsächlichen Wachstumsraten etwa 5 bis 20 % niedriger als die durch die RHEED-Eichung bestimmten Raten sind.

Die Ergebnisse sind in Tabelle 7.1 zusammengefaßt. Mit einer Ausnahme weisen alle Proben eine Dicke auf, die nur etwa 80 bis 95 % der nominellen Dicke entspricht.

Also sind die tatsächlichen Wachstumsraten systematisch um 5 bis 20 % niedriger als bei der RHEED-Eichung gemessen. Diese Abweichung zeigt sich bei Proben aus beiden Wachstumskammern. Die Röntgenbeugung zeigt für die Indium-Rate eine besonders große Abweichung, die in Abschnitt 7.4 speziell diskutiert wird. Bei den in der Tabelle aufgeführten Proben aus der D-Kammer wurden als Effusionszellen für Gallium und Aluminium teilweise die Sumo-Zellen und teilweise die Standardzellen verwendet. Die Abweichung der Wachstumsrate zeigt sich also bei allen in der D-Kammer vorhandenen Effusionszellen. Ein systematischer Fehler bei der Dickenmessung im Lichtmikroskop kann dadurch ausgeschlossen werden, daß bei der ersten Probe die Messungen durch Mikrophotolumineszenz und Lichtmikroskopie zum gleichen Ergebnis kommen. Die Messungen durch Röntgenbeugung zeigen, daß diese Abweichungen nicht nur bei dicken, sondern auch bei dünnen Schichten im Bereich von wenigen nm auftreten. Ein kontinuierlicher Drift der Wachstumsraten während des gesamten Wachstums liegt offenbar auch nicht vor, da bei der ersten Probe insgesamt fünf Quantenfilme über einen Zeitraum von etwa 20 Stunden aufgewachsen wurden und die einzelnen Abstände im Rahmen der Meßgenauigkeit identisch sind.



**Bild 7.4:** Zeitlicher Verlauf der Wachstumsraten nach dem Hochheizen der Zellen. Die Punkte wurden durch RHEED gemessen und dazwischen jeweils für 15 min ein Übergitter auf die RHEED-Probe aufgewachsen. Es zeigt sich ein deutlicher Abfall in den ersten 60 Minuten. Spätere Schwankungen sind bei der Ga4-Sumo-Zelle deutlich stärker als bei der Standardzelle Ga8.

Als wahrscheinlichste Ursache wurde eine Verringerung der Wachstumsraten zwischen der RHEED-Eichung und dem eigentlichen Wachstums ermittelt. Hierzu wurden von Christian Reichl nach dem Hochheizen der Effusionszellen die Flußraten etwa alle 25 Minuten durch RHEED gemessen (Bild 7.4). Es zeigt sich, daß die Flußraten kurze Zeit nach dem Aufheizen der Zellen deutlich sinken. Dies läßt sich dadurch erklären, daß sich beim vorigen Abkühlen der Zelle Material an den Wänden niedergeschlagen hat, das nach dem erneuten Aufheizen der Zelle verdampft und so für etwa 60 Minuten zu einer höheren Wachstumsrate führt. Da die RHEED-Eichung in der Regel kurz nach dem Aufheizen der Zellen durchgeführt wird, werden somit die tatsächlichen Wachstumsraten überschätzt. Mit den in Bild 7.4 dargestellten Verläufen läßt sich die oben beschriebene Reduzierung der Wachstumsraten um etwa 5 bis 20 % gut erklären.

Auch die erhöhte Wachstumsrate bei der letzten Probe D081110A in Tabelle 7.1 wird damit plausibel, da diese Probe mit beiden Gallium-Zellen gewachsen wurde, die Ga8-Zelle dabei jedoch zwischendurch immer wieder etwas abgekühlt und wieder aufgeheizt wurde, um Material zu sparen. Offenbar beginnt beim erneuten Aufheizen der Zelle der in Bild 7.4 dargestellte zeitliche Verlauf von neuem, so daß sich zu Beginn wesentlich höhere Wachstumsrate ergeben. Dieser Effekt tritt in anderer Form auch bei der Probe C050602A auf, bei der ebenso eine Zellentemperatur während des Wachstums mehrfach geändert wurde (siehe Abschnitt 7.4).

Zusammenfassend läßt sich also sagen, daß es für präzise Wachstumsraten beim MBE-Wachstum nötig ist, sowohl nach dem ersten Aufheizen der Zellen als auch nach späteren Temperaturänderungen jeweils 30 bis 60 Minuten zu warten, bis sich die Flußraten auf einen konstanten Wert eingependelt haben.

Zu sehen ist ferner, daß die Wachstumsraten auch später noch schwanken. Bei der Ga4-Sumo-Zelle zeigt sich bei dieser Messung eine besonders starke Änderung nach etwa zwei Stunden. Dies ist vermutlich darauf zurückzuführen, daß sich kondensierte Galliumtröpfchen, die die Zellenöffnung teilweise verdeckt haben, zu diesem Zeitpunkt gelöst haben und so mehr Material die Zelle verlassen kann. Wenn genaue Wachstumsraten entscheidend sind, sollte diese Zelle also möglichst nicht verwendet werden.

Für einen 7 nm breiten (001)-GaAs-Quantenfilm führt eine Verringerung der Breite um 5 bis 20 % zu einer Erhöhung der Übergangsenergie von 5 bis 23 meV. Addiert man dazu die erwarteten 10 meV Energieerhöhung durch Oberflächensegregation (siehe oben), ergibt sich mit erstaunlich guter Übereinstimmung der Bereich, in dem in Bild 7.3 der Großteil der in Regensburg hergestellten 7 nm breiten (001)-Quantenfilme liegt. Es läßt sich also festhalten, daß die beobachtete Blauverschiebung sehr wahrscheinlich durch eine Kombination aus Oberflächensegregation und verringerten Wachstumsraten verursacht wird.

Auf diese Weise wird auch die systematisch kleinere Blauverschiebung bei (110)-Quantenfilmen plausibel. Beim Wachstum in der [110]-Richtung wird eine niedrigere Temperatur und ein höherer Arsen-Partialdruck eingestellt (siehe Kapitel 4.5). Außerdem sind die Ionenbindungen in der (110)-Ebene stärker. Diese Faktoren führen zu einer geringeren Beweglichkeit der Atome an der Oberfläche und so zu einer reduzierten Oberflächensegregation. Auch die Reduzierung der Wachstumsraten tritt möglicherweise beim [110]-Wachstum in geringerem Umfang auf, da hier die Zellentemperaturen und Wachstumsraten geringer sind. Dies muß jedoch noch durch weitere Messungen genauer untersucht werden.

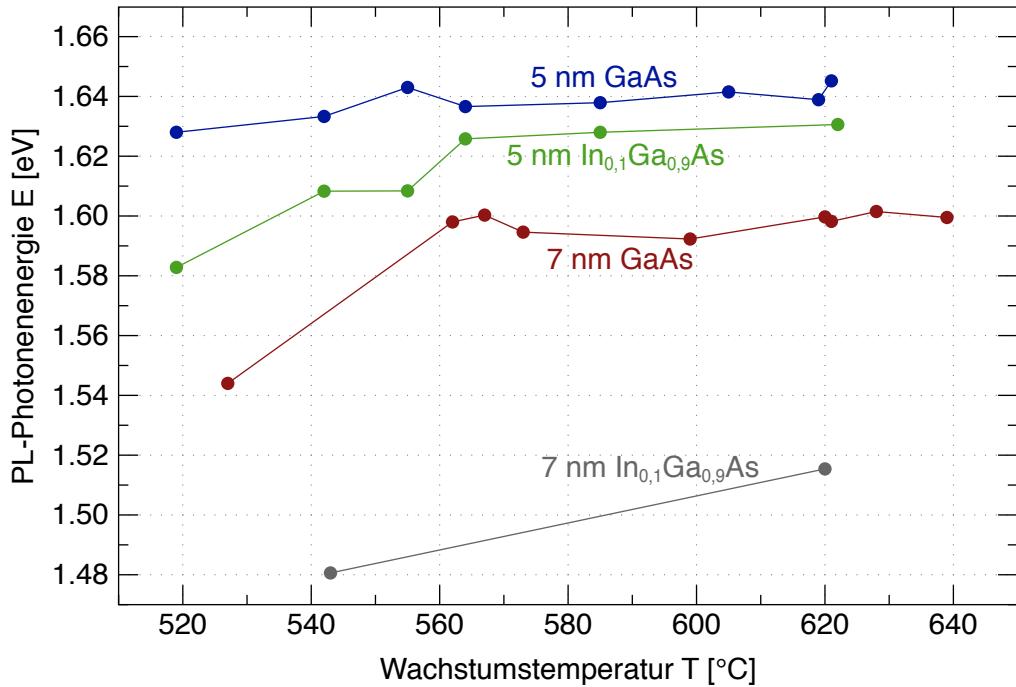
Die untersuchten Proben, die in Garching hergestellt wurden, zeigen eine deutlich geringere Blauverschiebung von etwa 10 meV, die sich allein durch Oberflächensegregation erklären läßt. Nach Aussage von Dieter Schuh wird in den Garchinger MBE-Anlagen nach dem Hochheizen der Zellen im Gegensatz zu Regensburg in der Regel eine halbe Stunde gewartet, bevor mit der RHEED-Eichung begonnen wird. Offensichtlich haben sich die Wachstumsraten nach dieser Zeit stabilisiert, so daß die gemessenen Raten mit den tatsächlichen beim Wachstum übereinstimmen. Die oben beschriebenen Untersuchungen zeigen, daß dieses Vorgehen allgemein auch in Regensburg angewendet werden sollte, um präzise Wachstumsraten zu erreichen.

## Wachstumsparameter

Um die Blauverschiebung der Quantenfilme genauer zu untersuchen, wurde in verschiedenen Probenserien untersucht, wie sie von den verwendeten Wachstumsparametern abhängt. Die Ergebnisse sind im Folgenden für (001)-Quantenfilme dargestellt.

In Bild 7.5 finden sich Messungen der Übergangsenergie in Abhängigkeit von der Wachstumstemperatur. Es zeigt sich, daß eine niedrigere Wachstumstemperatur zu einer verringerten Übergangsenergie führt. Diese Abhängigkeit ist allerdings nur bei Temperaturen unterhalb von 560 °C klar zu erkennen. Hierdurch wird die obige Vermutung unterstützt, daß die Blauverschiebung bei niedrigeren Wachstumstemperaturen geringer wird. Somit könnte es sich als sinnvoll erweisen, statt den üblichen 600 bis 640 °C zu einer niedrigeren Wachstumstemperatur überzugehen. Allerdings nimmt die Blauverschiebung erst bei Temperaturen unterhalb von 560 °C signifikant ab und bei weniger als 540 °C wird andererseits die Wachstumskinetik deutlich schlechter, was sich in einem starken Anstieg der Linienbreite zeigt (siehe Bild 7.8).

Eine Probenserie, die bei unterschiedlichen Arsen-Partialdrücken gewachsen wurde, gibt Hinweise darauf, daß sich die Blauverschiebung verringern läßt, indem der Arsen-Druck von den üblichen 6 bis  $7 \cdot 10^{-6}$  Torr auf 8 erhöht wird. Dies führt allerdings andererseits zu einer leichten Linienverbreiterung. Auf diese Ergebnisse wird genauer



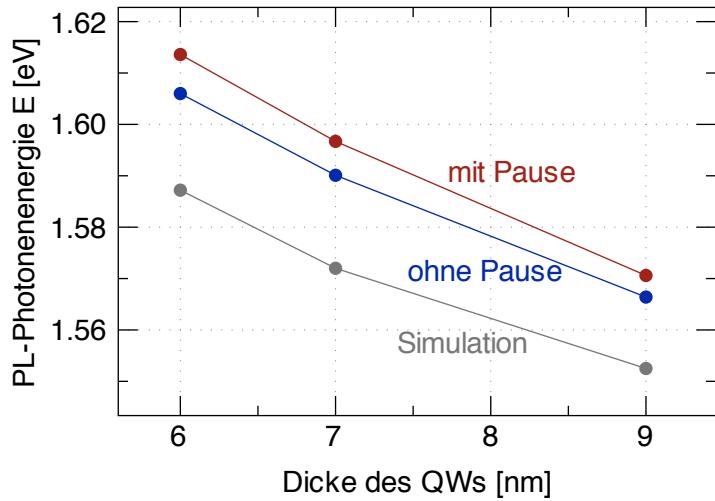
**Bild 7.5:** Abhängigkeit der gemessenen Übergangsenergien von verschiedenartigen (001)-Quantenfilmen von der Wachstumstemperatur (Proben D080527A/B, D080603B, D080610A/B, D080617A-D, D080625A).

im folgenden Abschnitt eingegangen.

In Bild 7.6 sind Messungen des Einflusses von einminütigen Wachstumspausen an den Grenzflächen der Quantenfilme dargestellt. Es zeigt sich, daß Wachstumspausen hier zu einer höheren Übergangsenergie führen. Eine naheliegene Erklärung ist, daß die Atome dann mehr Zeit zur Oberflächensegregation haben. Allerdings basieren diese Messungen auf nur jeweils einer Probe mit und ohne Wachstumspause, so daß sich hieraus keine sichere Aussage ableiten läßt.

### 7.3 Linienbreiten

Beim Wachstum von Halbleiternanostrukturen sind kleine optische Linienbreiten wichtig, da sie auf eine hohe strukturelle Qualität der gewachsenen Proben hinweisen und zu guten optischen Eigenschaften führen. Die Spektrallinien können einerseits durch Prozesse im Volumenkristall und andererseits durch Rauigkeiten der Grenzflächen verbreitert werden (siehe Gleichung (2.24) in Kapitel 2.5). Die Oberflächensegregation beim Wachstum führt wie in Kapitel 4.4 beschrieben nicht nur zu einer Blauverschiebung, sondern auch zu einer Erhöhung der Grenzflächenrauigkeiten und damit zu einer



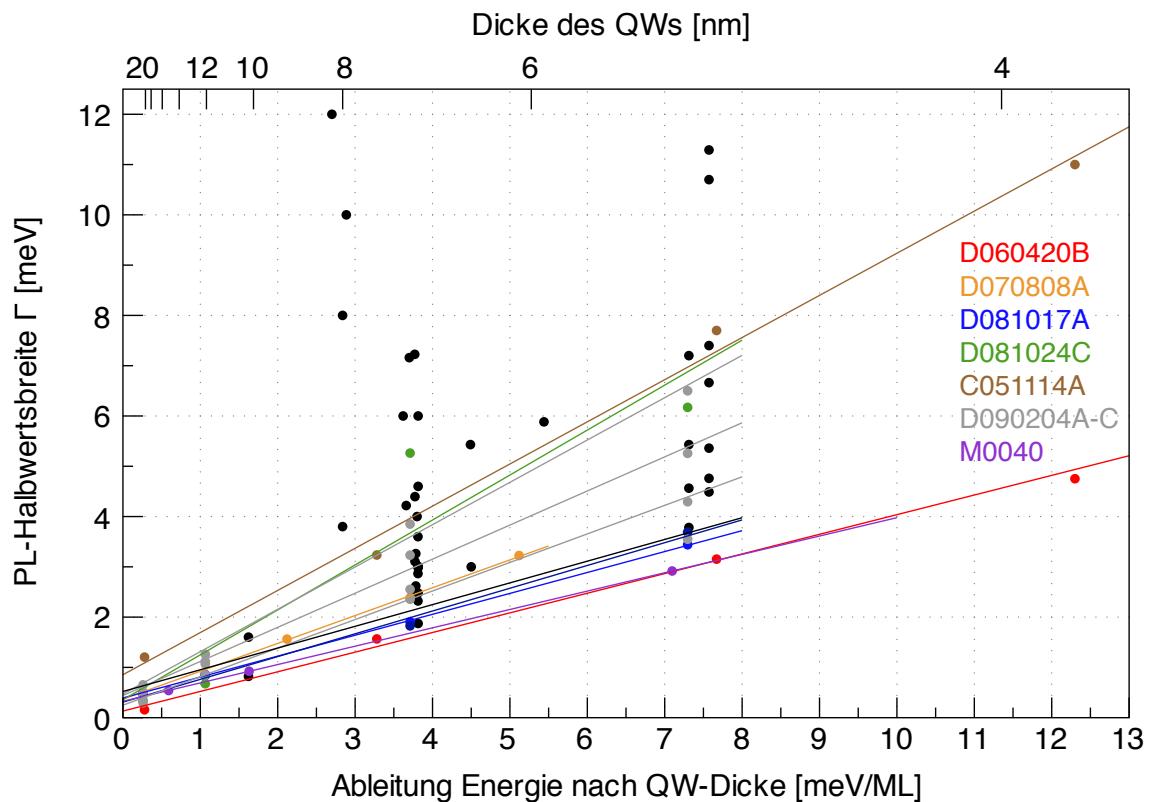
**Bild 7.6:** Übergangsenergien von Quantenfilmen, die mit und ohne einminütige Wachstumspause an den Grenzflächen hergestellt wurden (Proben D070808A und B). Zum Vergleich sind die theoretisch simulierten Übergangsenergien eingezeichnet.

größeren Linienbreite.

Zuerst soll die Abhängigkeit der Linienbreiten von der Quantenfilmdicke untersucht werden, um danach Quantenfilme verschiedener Dicken miteinander vergleichen zu können. Nach Gleichung (2.24) ist eine lineare Abhängigkeit der Linienbreite  $\Gamma$  von der Ableitung der Übergangsenergie nach der Quantenfilmdicke  $\frac{\partial E_{PL}}{\partial d}$  zu erwarten. Um dies zu überprüfen, wurden die gemessenen Linienbreiten von einer Vielzahl gemessener Quantenfilme in Bild 7.7 entsprechend über  $\frac{\partial E_{PL}}{\partial d}$  aufgetragen. Die Ableitung wurde dabei aus den theoretischen Simulationen ermittelt. Im Bild sind die Quantenfilme, die in derselben Probe unter gleichen Bedingungen hergestellt wurden, durch gleiche Farben gekennzeichnet. Die erwartete lineare Abhängigkeit findet sich innerhalb der einzelnen Proben gut bestätigt. Die Geradensteigung entspricht dabei der mittleren Fluktuation der Quantenfilmdicke durch Grenzflächenrauigkeiten  $\Delta d$  und der y-Achsenabschnitt gemäß Gleichung (2.24) etwa der Hälfte der homogenen Linienbreite des Volumenkristalls  $\Gamma_{bulk}$ .

Im Bild fällt auf, daß die Streuung der Linienbreiten nach unten relativ scharf begrenzt ist, nach oben jedoch eher offen. Dies deutet darauf hin, daß die untersten Punkte, insbesondere die Proben D060420B, D081017A und die Garchinger Probe M0040 das Optimum der minimal erreichbaren Linienbreiten darstellen. Für die Linienbreite des Volumenkristalls  $\Gamma_{bulk}$  ergeben sich Werte zwischen 0,5 und 1 meV, die gut mit den PL-Messungen des GaAs-Signals in Abschnitt 7.1 übereinstimmen.

Im Folgenden wird die Abhängigkeit der Linienbreiten von einzelnen Wachstumsparametern systematisch untersucht. Zur besseren Vergleichbarkeit werden die Linienbreiten dabei in die Dickenfluktuation  $\Delta d$  umgerechnet, da diese, wie sich hier gezeigt hat, unabhängig von der Quantenfilmdicke ist. Dabei wird von einer Linienbreite des Volumenkristalls von  $\Gamma_{bulk} = 0,7$  meV ausgegangen.



**Bild 7.7:** Gemessene Linienbreiten verschiedener Quantenfilme über die Ableitung der Energie nach der Dicke aufgetragen. Zur Orientierung sind am oberen Rand die entsprechenden Quantenfilmdicken angegeben. Quantenfilme, die in derselben Proben unter identischen Bedingungen hergestellt wurden, sind jeweils durch gleiche Farben markiert und ihre Werte durch lineare Funktionen gefüttet. Auf der rechten Seite sind die zugehörigen Probennummern angegeben. Schwarze Punkte kennzeichnen Proben mit jeweils nur einem Quantenfilm.

## Wachstum der Barriere

Um kleine Linienbreiten zu erzielen, muß nicht nur das Wachstum der Quantenfilme selbst, sondern auch das der umgebenden AlGaAs-Barriere mit möglichst glatten Grenzflächen und wenig Gitterfehlern verlaufen. Vor allem das Wachstum der unteren Barrieren ist dabei entscheidend. Das Wachstum der obersten Barriere, die zuletzt gewachsen wird, ist hingegen allgemein unkritisch, da es keine Auswirkungen auf die darunter liegenden Quantenfilme hat.

Wie in Kapitel 4.5 erwähnt sind für CEO-Proben relativ dicke Barrieren von  $1 \mu\text{m}$  Dicke oder mehr notwendig. Bei der MBE gibt es grundsätzlich drei verschiedene Möglichkeiten, Schichten aus ternären Halbleitern wie insbesondere AlGaAs herzustellen:

1. Man wächst die Schicht ganz normal, indem Gallium und Aluminium gleichzeitig aufgebracht werden. Das Legierungsverhältnis ergibt sich dann aus dem Verhältnis der vorher eingestellten Flußraten. Hier ist zu beachten, daß Aluminium eine deutlich geringere Oberflächenbeweglichkeit aufweist als Gallium. Dadurch können Oberflächenrauigkeiten und Gitterfehler entstehen, die sich im Laufe des Wachstums der Schicht anhäufen.
2. Um dieses Problem zu umgehen, werden dickere AlGaAs-Schichten auch als Übergitter gewachsen. Dabei wird zum Beispiel nach dem Wachstum von jeweils 8 nm AlGaAs eine reine GaAs-Schicht mit einer Dicke von 2 nm eingeschoben, um die Oberfläche wieder zu glätten. Stellt man Barrieren für Quantenfilme auf diese Weise her, erhält man zwar im Mittel eine geringere Aluminium-Konzentration, die Eigenschaften der Quantenfilme ändern sich dadurch jedoch nicht, wenn die eingefügten GaAs-Schichten stets mindestens 8 nm entfernt sind. Dies konnte durch Simulationen einer derartigen Struktur bestätigt werden.
3. Eine dritte Möglichkeit ist das Wachstum der ternären Halbleiterschicht als Digitale Legierung (engl.: *digital alloy*). Dabei werden abwechselnd sehr dünne Schichten aus etwa 1 nm GaAs und AlAs aufgewachsen. Ist die Dicke dieser Schichten klein gegenüber dem Exzitonen-Bohradius, verhalten sich die Ladungsträger in dieser Struktur ähnlich wie in einer homogenen AlGaAs-Schicht mit dem gleichen mittleren Aluminiumgehalt. Das Legierungsverhältnis wird in diesem Fall also durch das Verhältnis der Schichtdicken bestimmt. Ein Vorteil dieses Verfahren ist, daß sich unabhängig von den eingestellten Flußraten beliebige Legierungsverhältnisse erzeugen lassen. Auch hier können Oberflächenfehler beim Wachstum von AlAs durch die folgende GaAs-Schicht wieder ausgeglichen werden. Auch dieses Verfahren wurde durch theoretische Simulationen untersucht. Dabei wurde ein 5,7 nm dicker GaAs-Quantenfilm eingebettet in eine Digitale Legierung mit einer Periodenlänge von 2 nm und einem mittleren Al-Gehalt von 35 % berechnet. Es ergab sich im Vergleich mit einer normalen Barriere eine um 6,5 meV größere Übergangsenergie, das entspricht in diesem Fall einem 5 % schmäleren Quantenfilm. Es zeigt sich also eine Auswirkung auf die elektronische Struktur, die aber für die meisten Anwendungen akzeptabel wäre.

Um zu ermitteln, welches Verfahren die besten Ergebnisse bringt, wurden Quantenfilmproben mit den verschiedenen Barrierentypen hergestellt und deren Linienbreiten verglichen. Bei drei Proben wurde die Barriere als digitale Legierung gewachsen (D060313C, D070702B und C070709C). Diese Proben zeigten sehr große Halbwertsbreiten und inhomogenes Wachstum. Daher wurde dieser Barrierentyp nicht weiter

eingesetzt.

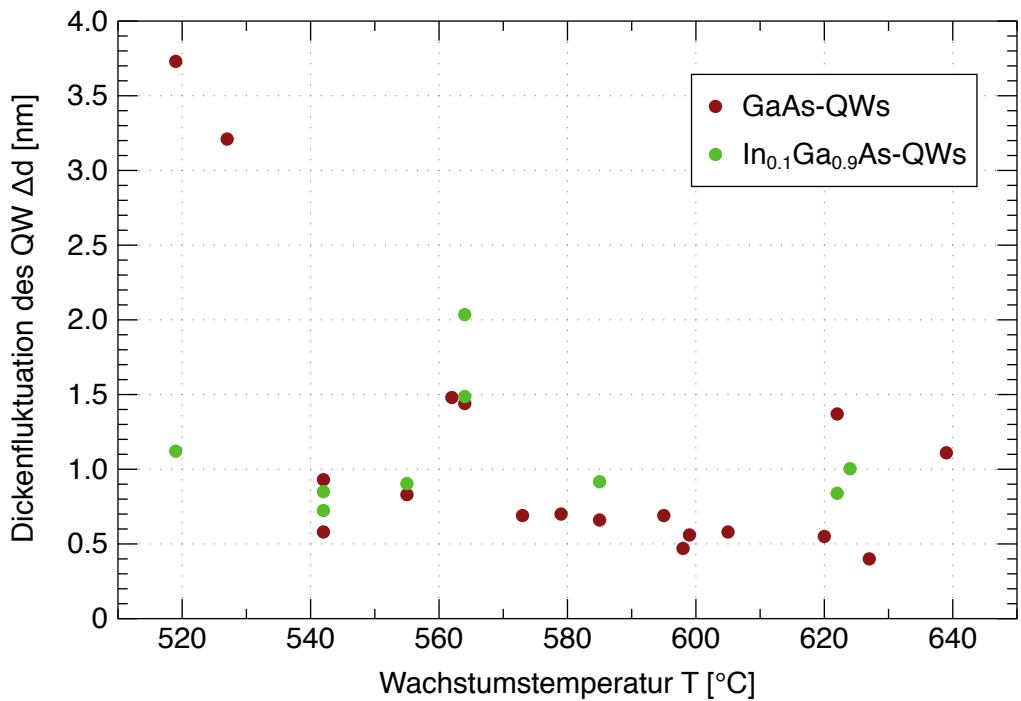
Im direkten Vergleich zeigte eine Probe mit Übergitter-Barriere gegenüber einer Probe mit normaler Barriere eine um 20 % reduzierte Linienbreite (D070821A/B). Allerdings wurden auch bei Proben mit normaler Barriere sehr schmale Linienbreiten gemessen (zum Beispiel D060420B, in Bild 7.7 rot dargestellt), so daß sich insgesamt keine klare Aussage ergibt. Im Rahmen dieser Arbeit wurden die meisten Proben mit einer Übergitter-Barriere hergestellt. Bei der Untersuchung von Proben mit unterschiedlichen Barrierendicken konnte keine signifikante Abhängigkeit der Linienbreite festgestellt werden.

Für die Barriere bietet sich allgemein ein Aluminium-Gehalt von 35 % an, da einerseits ein kleinerer Anteil zu geringeren Einschlußenergien führen würde, andererseits aber auch AlGaAs ab etwa 40 % zu einem indirekten Halbleiter mit schlechteren optischen Eigenschaften wird (siehe Kapitel 2.2). Bei den meisten im Rahmen dieser Arbeit hergestellten Proben besteht daher die Barriere aus  $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ . Bei genauerer Untersuchung der Linienbreiten der Proben, die in Bild 7.7 dargestellt sind, fällt allerdings auf, daß die Proben mit den kleinsten Linienbreiten wie beispielsweise D060420B (rot), D081017A (blau) oder M0040 (violett) mit einem etwas kleineren Aluminium-Anteil von 30 bis 32 % in der Barriere hergestellt wurden. Offenbar führt dieser geringe Unterschied im Aluminium-Gehalt zu glatteren Grenzflächen. Dies ist insofern erstaunlich, als sich auch mit Barrieren aus reinem AlAs noch CEO-Strukturen mit passablen optischen Eigenschaften herstellen lassen [Som96].

## Wachstumstemperatur

Die Substrattemperatur hat entscheidenden Einfluß auf die Oberflächendynamik und -diffusion während des Wachstums. Leider liefert die Temperaturmessung mit dem Pyrometer wie in Kapitel 4.2 beschrieben zwar brauchbare relative Meßwerte, aber nur weniger verlässliche absolute Temperaturen. Daher können gute Wachstumstemperaturen nicht einfach von einer MBE-Anlage zu einer anderen übertragen werden, sondern müssen individuell ermittelt werden.

Zu diesem Zweck wurde eine Serie von GaAs- und  $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ -Quantenfilmproben bei unterschiedlichen Wachstumstemperaturen hergestellt. Die für die unterschiedlichen Temperaturen ermittelten Dickenfluktuationen, die sich aus den Linienbreiten ergeben, sind in Bild 7.8 dargestellt. Die Rauigkeiten sind hier vermutlich hauptsächlich durch das Wachstum der Barriere verursacht, da AlGaAs allgemein schlechter wächst als GaAs. Es zeigt sich, daß sich gute Linienbreiten in den Temperaturbereichen von etwa 540 bis 555 °C und von etwa 570 bis 610 °C ergeben. Das Optimum scheint für GaAs-Quantenfilme bei einer Temperatur von etwa 600 °C zu liegen. Unterhalb von



**Bild 7.8:** Dickenfluktuationen von GaAs- und  $In_{0.1}Ga_{0.9}As$ -Quantenfilmen in Abhängigkeit von der Wachstumstemperatur. Die Dickenfluktuation ist ein aus der Halbwertsbreite ermitteltes Maß für die Grenzflächenrauigkeiten. Den Werten liegen Messungen an den gleichen Proben wie in Bild 7.5 zugrunde. Die Temperaturen wurden mit dem Pyrometer gemessen.

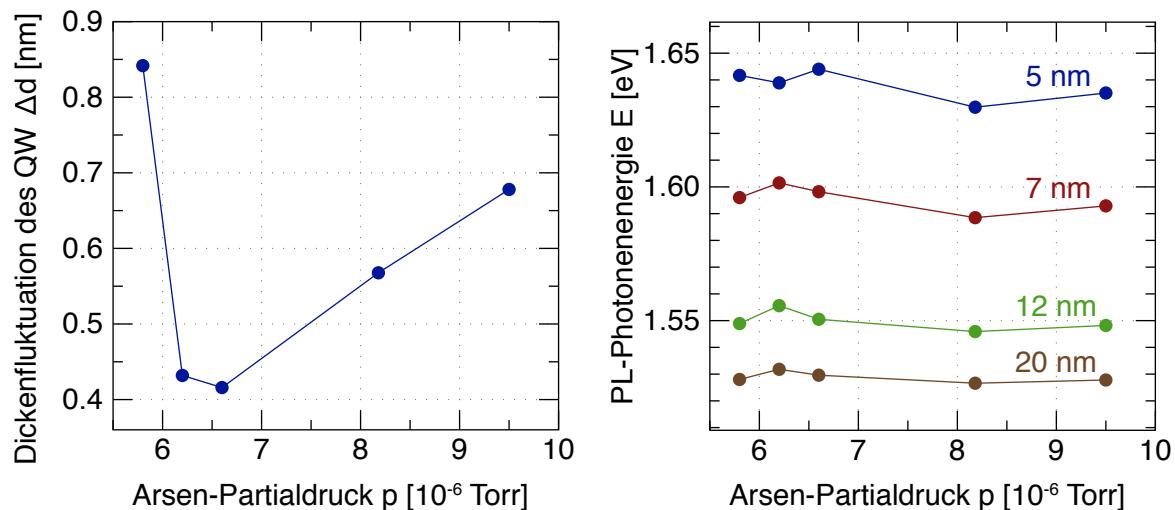
540 °C nehmen die Grenzflächenrauigkeiten massiv zu, da bei niedrigeren Temperaturen die Oberflächenbeweglichkeit der Atome abnimmt und Unebenheiten nicht mehr durch Oberflächenmigration ausgefüllt werden können. Darüber hinaus zeigt sich eine Zunahme der Grenzflächenrauigkeiten bei Temperaturen über 610 °C. Der Grund hierfür konnte noch nicht eindeutig geklärt werden. Eine mögliche Ursache ist eine erhöhte Oberflächensegregation bei hohen Temperaturen.

Auffallend ist, daß Proben bei 565 °C wesentlich schlechter wachsen als bei etwas höheren oder niedrigeren Temperaturen. Vermutlich läßt sich dies auf Oberflächenprozesse zurückführen. An einer Kristalloberfläche finden sich stets ungesättigte Bindungen (engl.: *dangling bonds*), die temporäre schwache Bindungen miteinander eingehen. Hierbei gibt es verschiedene Möglichkeiten, die bei niedrigeren Temperaturen zu einer 4x4-Rekonstruktion und bei höheren zu einer 2x4-Rekonstruktion der Gallium-Oberfläche führen. Eine mögliche Erklärung für das schlechte Wachstum bei 565 °C ist, daß hier gerade der Übergangsbereich zwischen diesem beiden Fällen liegt und eine ungeordnete zufällige Oberflächenrekonstruktion zur Folge hat, die sich nachteilig auf das weitere Überwachsen auswirkt.

## Arsen-Partialdruck

Das MBE-Wachstum in der [001]-Richtung findet normalerweise bei einem Arsen-Partialdruck von  $6$  bis  $7 \cdot 10^{-6}$  Torr statt, so daß nur ein geringer Überfluß von Arsen gegenüber den Gruppe-III-Elementen vorliegt. Dieses fast stöchiometrische Wachstum ist besonders bei Proben mit hoher Ladungsträgerbeweglichkeit wichtig. Allgemein ist bei einer höheren Wachstumstemperatur auch ein größerer As-Partialdruck nötig, da Arsen bei höheren Temperaturen weniger gut an der Substratoberfläche haftet.

Der Arsen-Partialdruck in der MBE-Kammer wird durch eine Ionisationsmeßröhre gemessen, die auf dem hinteren Ende des Manipulators angebracht ist und bei Bedarf in den Arsen-Molekularstrahl geschwenkt wird. Für genaue Messungen ist zu beachten, daß der Meßwert sich in der Regel erst nach etwa 20 Minuten stabilisiert hat.



**Bild 7.9:** Dickenfluktuationen und Übergangsenergie von GaAs-Quantenfilmen in Abhängigkeit vom Arsen-Partialdruck beim Wachstum (Proben D081017A und D090204A-C). Die mit dem Pyrometer gemessenen Wachstumstemperaturen lagen zwischen 619 und 625 °C.

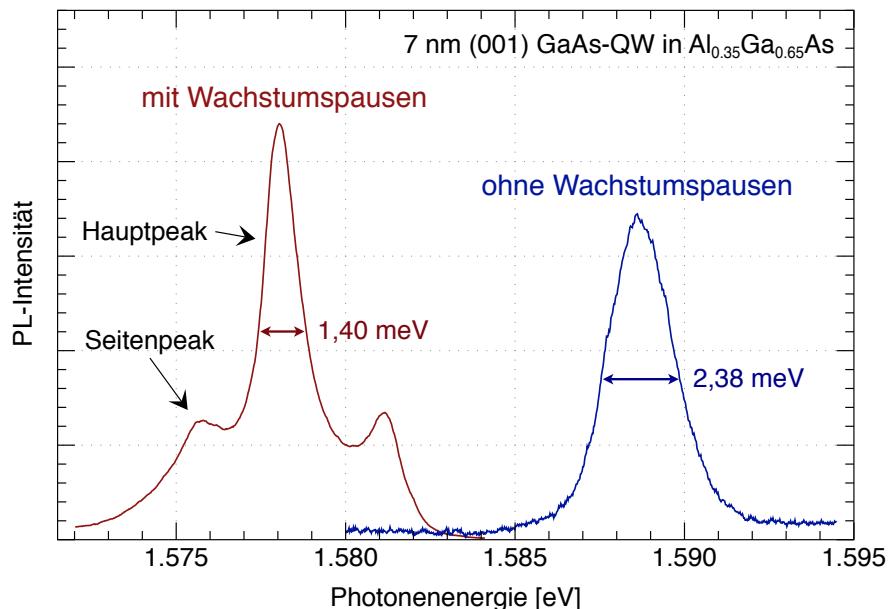
Um den Einfluß des Arsendrucks auf die Linienbreite zu untersuchen, wurde wiederum eine Serie von GaAs-Quantenfilmproben hergestellt. In Bild 7.9 links sind deren Dickenfluktuationen als Funktion des Arsendrucks gezeigt. Es ist zu sehen, daß der bisher verwendete Druck von  $6$  bis  $7 \cdot 10^{-6}$  Torr schon das Optimum bezüglich der Liniendichten darstellt. Die Blauverschiebung der Übergangsenergien rechts im Bild zeigt allerdings ein Minimum bei einem höheren Druck von etwa  $8 \cdot 10^{-6}$  Torr. Dies läßt sich dadurch erklären, daß durch den Einlagerung von Arsenatomen die Kristallstruktur abgeschlossen und weitere Oberflächenmigration und -segregation verhindert wird. Bei einem höheren Angebot an Arsen wird dieser Zustand eher erreicht, so daß eine geringere Oberflächensegregation zu einer kleineren Blauverschiebung der Übergangsenergie

führt, gleichzeitig aber auch die Oberflächenmigration reduziert und so die Oberfläche weniger geglättet wird. Da die Blauverschiebung im Vergleich zu einer größeren Linienbreite in der Regel das kleinere Problem darstellt, ist es sinnvoll, die Proben weiterhin bei dem üblichen Arsendruck von 6 bis  $7 \cdot 10^{-6}$  Torr zu wachsen.

## Wachstumspausen an Grenzflächen

Wachstumspausen begünstigen allgemein die Entstehung von glatteren Grenzflächen, da den Atomen so mehr Zeit zur Oberflächenmigration bleibt (siehe Kapitel 4.4). Wie in Kapitel 2.5 beschrieben spaltet das PL-Signal dabei oft in mehrere schmalere Signale auf. Im Rahmen dieser Arbeit wurden Proben verglichen, die mit und ohne Wachstumspausen an den Grenzflächen hergestellt wurden.

In Bild 7.6 wurden bereits Messungen an Quantenfilmproben vorgestellt, die mit und ohne Wachstumspausen an den Grenzflächen unter ansonsten gleichen nominellen Bedingungen gewachsen wurden. Bei beiden Proben war keine Aufspaltung des PL-Signals zu erkennen. Eine mögliche Erklärung hierfür ist, daß bei der Probe mit Wachstumspausen die abgespaltenen Peaks in den Seiten des Hauptpeaks untergehen. Ein Hinweis darauf ist, daß bei dieser Probe die Halbwertsbreiten größer und die Linienformen sichtbar breiter als bei einer Gaußkurve sind.



**Bild 7.10:** Vergleich zweier Spektren von 7 nm dicken Quantenfilmen, die mit (D080317A) und ohne (D070808A) Wachstumspausen an den Grenzflächen hergestellt wurden. Die Intensitäten beider Signale sind nicht vergleichbar.

Bei einer anderen Probe mit mehreren Quantenfilmen und Wachstumspausen an den Grenzflächen (D080317A) zeigen sich andererseits die erwarteten Mehrfach-Peaks im Spektrum und eine relativ geringe Blauverschiebung der Energie von weniger als 10 meV. In Bild 7.10 ist das Spektrum von einem dieser Quantenfilme zusammen mit einem Spektrum eines Quantenfilms ohne Wachstumspause dargestellt. Der mittlere Peak ist am stärksten ausgeprägt und weist eine sehr geringe Linienbreite auf (Dickefluktuation  $\Delta d = 0,28$ ). Der Abstand der Seitenpeaks entspricht etwa 70 % einer Monolage, was mit vergleichbaren Messungen in früheren Veröffentlichungen übereinstimmt [War90]. Allerdings ließ sich diese Probe in mehrfachen Versuchen mit gleichen nominellen Wachstumsparametern nicht reproduzieren. Statt dem Aufspalten des PL-Signals in drei einzelne Peaks ergaben sich bei diesen Versuchen nur breite einfache Peaks oder sich überlagernde Mehrfach-Peaks mit großen Linienbreiten.

Die Ergebnisse geben also leider kein einheitliches Bild. Mit Wachstumspausen an den Grenzflächen wurden sowohl deutlich bessere als auch deutlich schlechtere Proben gewachsen. Daher werden in dieser Arbeit Wachstumspausen an den Grenzflächen nicht weiter eingesetzt.

## Effusionszellen

In der hier verwendeten MBE-Kammer sind als Effusionszellen für Gallium und Aluminium jeweils eine Standardzelle und eine Sumo-Zelle eingebaut. Allgemein neigen Sumo-Zellen aufgrund von Tröpfchenkondensation an der engeren Öffnung der Zelle zu einem inhomogeneren Molekularstrahl und zu Wachstumsdefekten durch Auftreffen dieser Tröpfchen auf die Waferoberfläche. Außerdem können bei Sumo-Zellen wie oben beschrieben deutliche Sprünge der Wachstumsraten während des Wachstums auftreten. Im Rahmen dieser Arbeit waren die Dichte der Gallium- und Aluminium-Tröpfchen auf der Oberfläche sehr gering, so daß dies kein Problem darstellte. Für die Indium-Zelle wird die Tröpfchenbildung in Abschnitt 7.4 diskutiert. Der Einfluß der durch die engere Zellenöffnung verursachten Inhomogenität wird im folgenden Abschnitt dargestellt.

Darüber hinaus ergaben sich bei der Verwendung der Al7-Standardzelle zeitweise Probleme. Proben, die im Laufe des Jahres 2007 mit dieser Zelle gewachsen wurden, wiesen eine relativ schlechte Qualität auf. Dies zeigte sich in großen Linienbreiten und teilweise matten Probenoberflächen. Erst der Wechsel auf die Al5-Sumo-Zelle brachte eine signifikante Verbesserung. Eine Ursache für dieses Verhalten konnte nicht gefunden werden, zumal beide Aluminiumzellen ursprünglich mit dem gleichen Material gefüllt wurden. Im Dezember 2007 wurden beide Aluminiumzellen neu gefüllt und seitdem ist nur die Al5-Zelle in Betrieb.

## Dicke des Quantenfilms

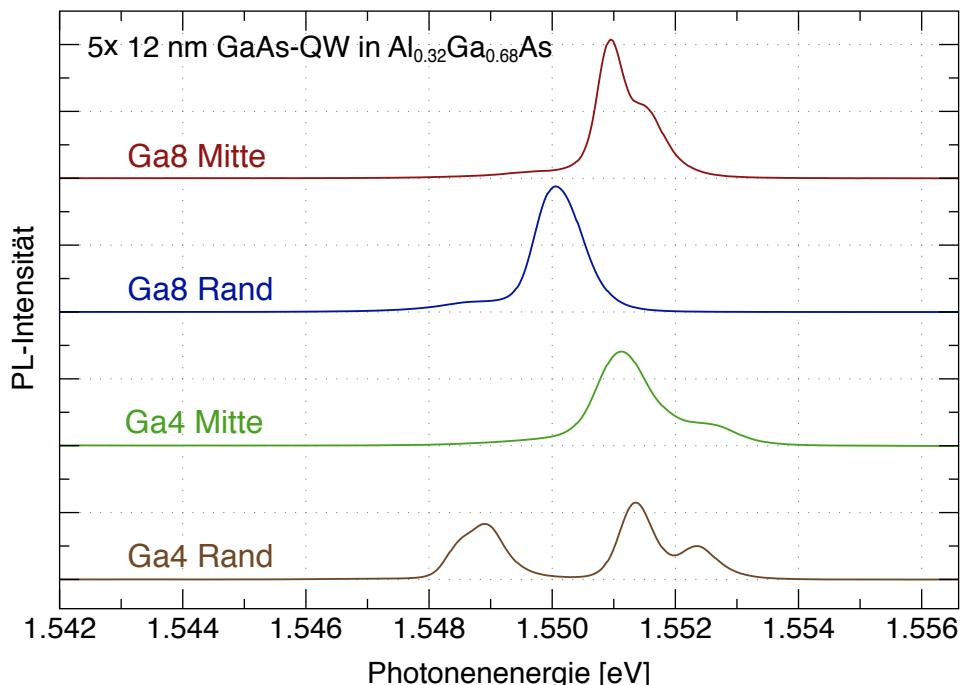
Auch die Dicke der Quantenfilme kann einen Einfluß auf die Qualität der gewachsenen Probe haben. Gelegentlich wird beim MBE-Wachstum die Dicke der Schichten auf ganze Vielfache der Monolagendicke gerundet, um glattere Grenzflächen zu erhalten. Idealerweise würde man genau dann mit dem Wachstum des Quantenfilms beginnen und enden, wenn die gerade gewachsene Monolagenschicht möglichst abgeschlossen ist, da dann die Oberfläche am glattesten ist. Tatsächlich weiß man jedoch im allgemeinen nicht, zu welchem Zeitpunkt eine Monolage abgeschlossen ist, außer man beobachtet das Wachstum mit dem RHEED-Verfahren. Hinzu kommt, daß die Waferoberfläche sowieso nicht perfekt parallel zur (001)-Kristallebene ausgerichtet ist, so daß dieser Fall niemals auf der gesamten Probe gleichzeitig eintritt. Somit ist durch ein Runden der Schichtdicken auf ganze Vielfache der Monolagendicke im allgemeinen keine Verbesserung der Grenzflächen zu erwarten.

Anders ist es beim Überwachsen von Spaltflächen. Durch das atomlagengenaue Spalten entlang der (110)-Ebene fängt das darauf folgende Wachstum des Quantenfilms immer auf einer abgeschlossenen Kristallebene an. Daher empfiehlt es sich in diesem Fall, den Quantenfilm als ganze Anzahl von Monolagen zu wachsen. Hinzu kommt, daß sich bei der Untersuchung des Annealing-Verfahrens gezeigt hat [Yos02], daß die obere Grenzfläche des überwachsenen Quantenfilms durch Annealing besonders glatt wird, wenn hier eine Monolage gerade abgeschlossen ist (Bild 4.15 rechts). In der [110]-Richtung ist darüber hinaus die Dicke einer Monolagen kleiner (Tabelle 4.1), so daß mit ganzen Vielfachen einer Monolage hier eine feinere Abstufung als in der [001]-Richtung möglich ist.

## Rotation der Probe

Beim MBE-Wachstum treffen die Molekularstrahlen schräg auf das Substrat auf. Dies führt zu einem Wachstumsgradienten über die Probenoberfläche. Beispielsweise zeigt sich bei einem 7 nm dicken (110)-GaAs-Quantenfilm, der unrotiert gewachsen wurde, aus diesem Grund ein Unterschied der Übergangsenergie von etwa 30 meV zwischen zwei gegenüberliegenden Rändern der Probe. Um diese Inhomogenität auszugleichen, wird die Probe in der Regel mit einer Geschwindigkeit von 7 U/min rotiert. Für dicke Halbleiterschichten funktioniert dies auch einwandfrei. Für dünne Schichten wird die Inhomogenität des Molekularstrahls allerdings nur dann vollständig ausgeglichen, wenn das Substrat während des Wachstums dieser Schicht eine ganze Anzahl von Umdrehungen rotiert wird. Vollführt die Probe hingegen beispielsweise nur 3,5 Umdrehungen, so führt dies dazu, daß die Schicht doch wieder einen Dickengradient aufweist.

Dies ist vor allem dann ein Problem, wenn mehrere identische Quantenfilme auf ein Substrat aufgewachsen werden sollen. Da das Wachstum der Quantenfilme nicht immer bei dem gleichen Rotationswinkel beginnt, sind diese Dickengradienten der einzelnen Quantenfilme gegeneinander verdreht. Dies führt dazu, daß die (nominell identischen) Quantenfilme an allen Orten der Probe außer in der Mitte unterschiedliche Dicken und damit unterschiedliche Übergangsenergien aufweisen. In der PL werden hierdurch entweder die Linienbreiten größer oder das Signal zerfällt in mehrere Peaks. Wie stark dieser Effekt auftritt, hängt auch von der Homogenität des Molekularstrahls ab.



**Bild 7.11:** Vergleich der gemessenen Spektren von zwei Fünffach-Quantenfilm-Proben, die mit der Ga4-Sumo-Zellen und der Ga8-Standardzellen gewachsen wurden (D081024C bzw. D081017A). Es wurde jeweils ein Stück aus der Mitte des Wafers und ein Stück, das etwa 1 cm vom Rand entfernt war, gemessen. Beide Proben sind ansonsten nominell identisch. Der Abstand der Quantenfilme beträgt jeweils 150 nm.

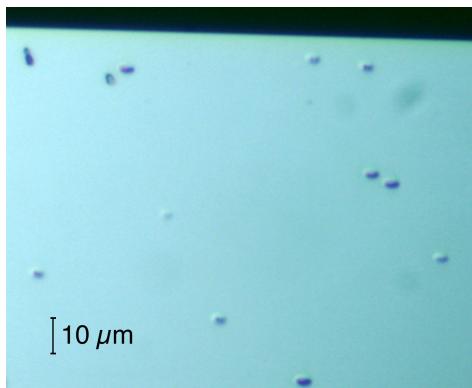
In Bild 7.11 ist ein Beispiel von zwei Proben mit jeweils fünf nominell identischen Quantenfilmen zu sehen, die mit unterschiedlichen Zellentypen für Gallium hergestellt wurden. Es ist zu erkennen, daß bei der Probe, die mit der Ga8-Standardzelle gewachsen wurde, die Energien der einzelnen Quantenfilme sich nur wenig voneinander unterscheiden, was sich in schmalen Spektrallinien äußert. Die andere Probe, bei der die Ga4-Sumo-Zelle verwendet wurde, zeigt in der Mitte des Wafers ähnlich gute Linienbreiten, allerdings zerfällt das Signal zum Rand der Probe hin in mehrere separate

Peaks, deren Energien deutlich unterschiedlich sind. Dies deutet auf eine große Inhomogenität des Molekularstrahls aus der Sumo-Zelle hin. Erklären lässt sich dies dadurch, daß die relativ enge Öffnung dieser Zelle durch kondensierte Gallium-Tröpfchen teilweise verdeckt wird und so signifikant von der idealen Kreisform abweicht.

Dieses Phänomen tritt verstärkt beim Wachstum von Digitalen Legierungen auf, da diese aus vielen sehr dünnen Schichten bestehen und stellt ein Problem beim Wachstum von aluminiumhaltigen Quantenfilmen dar. Beim normalen Wachstum von AlGaAs ist das Legierungsverhältnis durch das Verhältnis der Flußraten gegeben, die vor dem Wachstum bei der RHEED-Eichung eingestellt werden. Zum Wachstum von aluminiumhaltigen Quantenfilmen, die einen anderen Aluminiumanteil als die AlGaAs-Barriere benötigen, würde man idealerweise eine zweite Aluminum-Zelle verwenden, deren Flußrate dann auf den geforderten Wert eingestellt werden kann. Zur Zeit ist in der Regensburger D-Kammer jedoch nur eine von beiden Aluminium-Zellen in Verwendung. Der Grund liegt darin, daß dies zu weniger Verunreinigungen beim Wachstum führt, was insbesondere bei Proben mit hoher Ladungsträgerbeweglichkeit entscheidend ist. Um mit nur einer Aluminium-Zelle Strukturen mit unterschiedlichem Aluminium-Gehalt im Quantenfilm und in der Barriere zu wachsen, gibt es folgende Möglichkeiten:

1. Man wächst die Barriere als normale Schicht (bzw. Übergitter) und den Quantenfilm als Digitale Legierung, bei der sich der Al-Anteil sich durch das Verhältnis der einzelnen Schichtdicken wie oben beschrieben beliebig einstellen läßt.
2. Man wächst den Quantenfilm als normale Schicht und die Barriere als Digitale Legierung. In diesem Fall dauert das gesamte Probenwachstum allerdings sehr lange, da die Barriere aufgrund der niedrigen Aluminium-Flußrate nur sehr langsam gewachsen wird. Eine Möglichkeit, dies zu umgehen, besteht darin, nur in der Nähe des Quantenfilms die Barriere mit dem geforderten Aluminiumgehalt zu wachsen und in weiterer Entfernung einen geringeren Aluminium-Anteil zu verwenden.
3. Man verwendet zwei Gallium-Zellen mit unterschiedlichen Flußraten, so daß sich auch mit nur einer Aluminium-Zelle zwei verschiedene Legierungsverhältnisse einstellen lassen. Nachteilig sind hier wiederum eine vergleichsweise lange Wachstumsdauer sowie ein höherer Materialverbrauch.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden drei Proben mit AlGaAs-Quantenfilmen als Digitale Legierung hergestellt (1. Methode). Alle drei Proben zeigen relativ hohe Liniенbreiten und eine starke Streuung der Übergangsenergie über die Waferoberfläche. Bei einer Probe mit 10 Quantenfilmen zerfällt das Signal in 5 separate Peaks. Diese schlechtere Probenqualität läßt sich auf das beschriebene Problem zurückführen, daß



**Bild 7.12:** Lichtmikroskopische Aufnahme der indiumhaltigen Probe D080307C mit starker Tröpfchenbildung. Die Tröpfchen entstehen durch Kondensation der Materialien an der schmalen Öffnung einer Sumo-Zelle und gelangen beim Wachstum auf die Probenoberfläche.

bei nicht ganzzahligen Umdrehungen der Proben während des Wachstums der einzelnen Schichten die Inhomogenität des Molekularstrahls nicht vollständig ausgeglichen wird.

Die beste Lösung für dieses Problem wäre, die Rotationsgeschwindigkeit der Proben beim Wachstum entsprechend an die Schichtdicken anzupassen. Bei verschiedenen dicken Schichten müßte dabei die Rotationsgeschwindigkeit während des Wachstums variiert werden, was in Regensburg mit der zur Zeit verwendeten Manipulatorsteuerung nicht möglich ist. Ein kleiner Trost ist, daß das beschriebene Problem in der Mitte des Wafer, wo das Wachstum unabhängig von der Rotation verläuft, nicht auftritt.

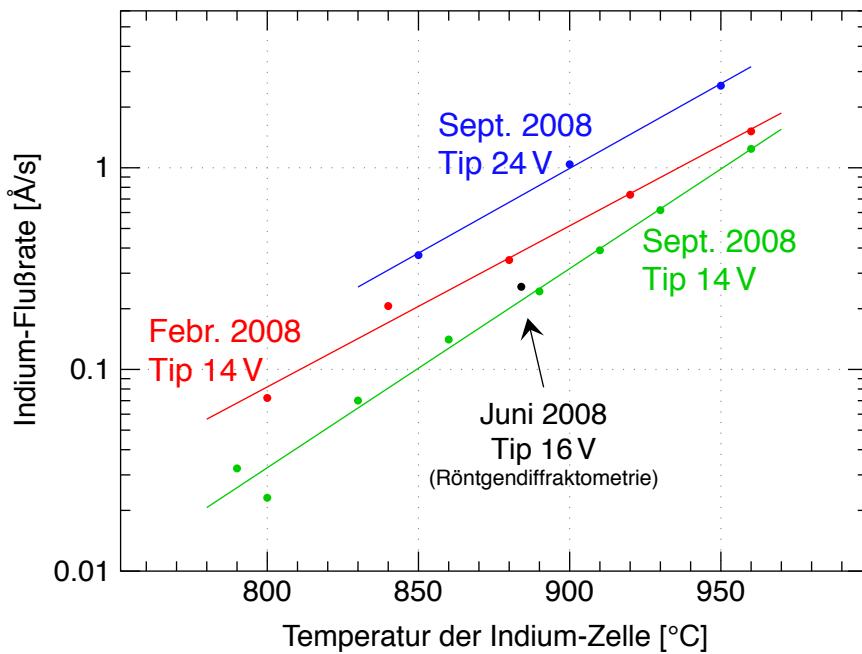
## 7.4 Indiumhaltige Schichten

Beim Wachstum von indiumhaltigen Quantenfilmen ergeben sich aufgrund der in Kapitel 4.3 beschriebenen Besonderheiten weitere Herausforderungen. Hierzu gehören die verstärkte Tröpfchenbildung, die aufwändiger Eichung der Flußrate, das Wachstum mit Verspannungen und die stärkere Oberflächensegregation.

Da es sich bei der verwendeten Indium-Effusionszelle um eine nach unten gerichtete Sumo-Zelle handelt, tritt das Problem der Tröpfchenbildung hier in verstärktem Maße auf. In Bild 7.12 ist die Oberfläche einer indiumhaltigen Probe mit einer relativ hohen Tröpfchendichte abgebildet. Als Abhilfe gelten allgemein eine höhere Temperatur des Zellenhalses („Tip-Heizung“) und das gelegentliche Freiheizen der Zellenöffnung. Im Rahmen dieser Arbeit wurden insgesamt 30 indiumhaltige Proben mit unterschiedlichen Tip-Heizungen von 14, 16 und 24 V hergestellt. Es ergab sich eine deutliche Streuung der Tröpfchendichte, jedoch keine signifikante Abhängigkeit von der Tip-Heizung. Allerdings wurden in dieser Hinsicht keine systematischen Untersuchungen durchgeführt.

Die Eichung der Indium-Flußrate ist wie in Kapitel 4.3 dargestellt relativ aufwändig. Sie wird daher in der Regel nur im Abstand von einigen Monaten durchgeführt. Da der

Füllstand und damit die Flußrate der Indium-Zelle bei jedem Wachstum etwas geringer wird, ist diese Flußrate meistens nur mit einer geringeren Genauigkeit bekannt.



**Bild 7.13:** Eichkurven für die Indium-Flußrate in Abhängigkeit von der Zellentemperatur. Man beachte die logarithmische Auftragung. Es zeigt sich, daß die Flußrate mit der Zeit abnimmt. Außerdem hat die Tip-Temperatur der Zellenöffnung einen großen Einfluß.

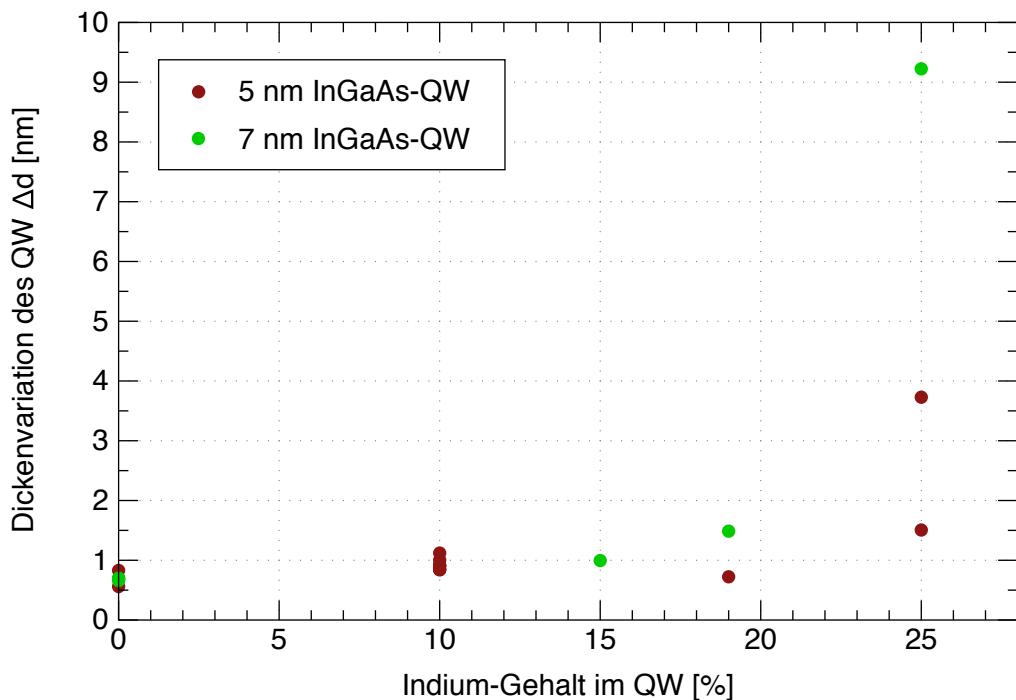
In Bild 7.13 sind drei Eichkurven für die Indium-Flußrate dargestellt, die von Marika Kubova durch InAlAs-RHEED-Eichung ermittelt wurden. Man erkennt, daß die Flußrate innerhalb eines halben Jahres auf etwa die Hälfte gesunken ist. Dies läßt sich auf den abnehmenden Füllstand der Zelle zurückführen. In dieser Zeit wurden insgesamt 41 indiumhaltige Proben hergestellt. Da dabei zur Einstellung der Flußrate stets die frühere Eichkurve vom Februar 2008 verwendet wurde, waren die tatsächlichen Indium-Wachstumsraten teilweise deutlich kleiner als die nominellen Raten. Dies ist konsistent mit den in Tabelle 7.1 dargestellten Ergebnissen der Röntgendiffraktometrie. Bei einer indiumhaltigen Probe, die zwischen den beiden Indium-Eichungen hergestellt wurde (als 31. von den erwähnten 41 Proben), ergab diese Messung nur 64 % des nominellen Indium-Anteils. Für ein genaues Probenwachstum ist es also in Zukunft erforderlich, daß die Eichungen der Indium-Flußrate wesentlich häufiger durchgeführt werden.

Außerdem ist in Bild 7.13 zu sehen, daß eine stärkere Heizung des Zellenhalses (Tip) eine wesentlich höhere Flußrate bewirkt. Als möglicher Grund hierfür kommt einerseits eine durch die stärkere Tip-Heizung insgesamt erhöhte Zellentemperatur in Frage. Andererseits ist zu erwarten, daß die Zellenöffnung dann weniger durch kon-

densierte Tröpfchen verengt ist. Somit muß die Indium-Eichung bei der jeweils für das Wachstum verwendeten Tip-Temperatur durchgeführt werden.

## Ternäre verspannte Quantenfilme

Im Rahmen dieser Arbeit wurden InGaAs-Quantenfilme mit unterschiedlichen Dicken und Indiumkonzentrationen untersucht. Die Übergangsenergien dieser Proben sind um 30 bis 130 meV gegenüber den entsprechenden theoretisch berechneten Werten blauverschoben und damit viel stärker als bei GaAs-Quantenfilmen. Die Gründe hierfür liegen offenbar einerseits in einer bei Indium wesentlich stärkeren Oberflächensegregation [Jen99] und andererseits in der im vorigen Abschnitt beschriebenen teilweise deutlich niedrigeren tatsächlichen Indium-Flußrate, die sowohl zu einer größeren Bandlücke als auch zu einer kleineren Quantenfilmdicke führt.



**Bild 7.14:** Grenzflächenrauigkeiten von  $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ -Quantenfilmen in Abhängigkeit vom nominellen Indium-Gehalt  $y$ .

In Bild 7.14 ist zu sehen, daß bei einem Indiumgehalt von weniger als 20 % keine signifikante Abhängigkeit der Grenzflächenrauigkeiten von der Indiumkonzentration festzustellen ist und die Qualität der Grenzflächen nur geringfügig schlechter als die von GaAs-Quantenfilmen ist (siehe auch Bild 7.8). Bei einem Indiumgehalt von 25 % hingegen nehmen die Grenzflächenrauigkeiten für 5 und 7 nm dicke InGaAs-Quantenfilme

stark zu. Anders ausgedrückt bedeutet dies, daß bei diesen Proben bei einem Indiumgehalt von 25 % die kritische Schichtdicke kleiner als 5 nm ist. Allerdings ist hier wiederum zu beachten, daß die angegebenen Indiumkonzentrationen und Quantenfilmdicken die nominellen Werte darstellen und die tatsächlichen Werte vermutlich kleiner sind.

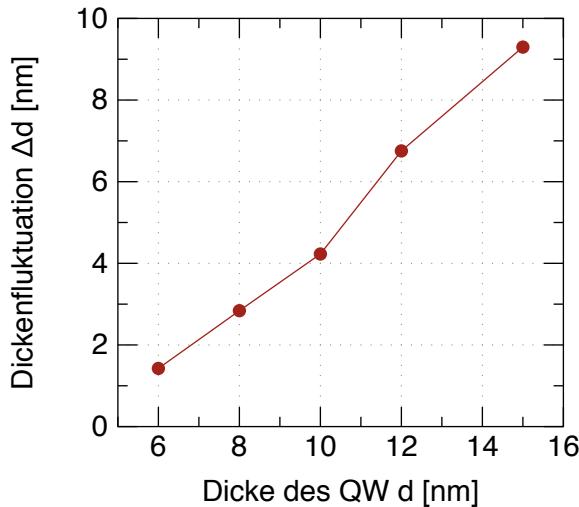
## Quaternäre verspannte Quantenfilme

Um die in Kapitel 6.4 theoretisch untersuchten neuartigen verspannten T-förmigen Quantendrähte experimentell realisieren zu können, wurden verschiedene Quantenfilme aus dem quaternären Halbleiter  $\text{In}_{0.16}\text{Al}_{0.14}\text{Ga}_{0.70}\text{As}$  hergestellt. Insgesamt wurden im Rahmen dieser Arbeit 7 Proben mit InAlGaAs-Quantenfilmen gewachsen. Wie bei AlGaAs-Quantenfilmen ergab sich auch hier die oben beschriebene Problematik beim Wachstum von Schichten mit unterschiedlichem Aluminium-Gehalt mit nur einer Aluminium-Zelle. Daher wurden bei verschiedenen Proben die drei oben dargestellten Verfahren zum Wachstum von aluminiumhaltigen Quantenfilmen eingesetzt und miteinander verglichen.

Bei der Probe C050602A wurden sowohl die Quantenfilme als auch die Barrieren als normale Schichten gewachsen. Dabei kamen beide Gallium-Zellen mit unterschiedlichen Flußraten zum Einsatz. Da die gesamte Wachstumsrate durch die hier relativ geringe Aluminium-Flußrate bestimmt ist, benötigte das Wachstum dieser Probe etwa die doppelte Zeit im Vergleich zu normalen Proben.

Diese Probe besteht nominell aus 5  $\text{In}_{0.16}\text{Al}_{0.14}\text{Ga}_{0.70}\text{As}$ -Quantenfilmen mit unterschiedlichen Dicken. Verglichen mit den übrigen InAlGaAs-Proben weist diese Probe die beste Qualität auf, was sich in relativ schmalen Linienbreiten und einer homogenen Verteilung des PL-Spektrums über die Waferoberfläche äußert. Die Übergangsenergien sind allerdings hier nicht wie bei allen anderen Proben größer, sondern um 4 bis 33 meV kleiner als die theoretisch berechneten Werte. Eine mögliche Abweichung der Indium-Flußrate reicht nicht aus, um dies zu erklären, zumal diese Rate am Tag zuvor geeicht wurde. Die Gesamtdicke der Probe, die hauptsächlich durch die mit der Ga5-Zelle gewachsenen Barrieren bestimmt wird, ist mit 87,6 % der nominellen Dicke im üblichen Rahmen (siehe Tabelle 7.1). Als wahrscheinlichste Ursache für die zu niedrigen Übergangsenergien kommt somit eine zu große Flussrate der Ga4-Zelle, mit der die Quantenfilme gewachsen wurden, in Frage. Um Material zu sparen, wurde die Temperatur dieser Zelle während des Wachstums der Barrieren reduziert. Beim Wiederaufheizen der Zelle begann offenbar der in Bild 7.4 dargestellte zeitliche Verlauf von neuem, was zu erhöhten Flussraten führte.

In Bild 7.15 sind die Grenzflächenrauigkeiten der Quantenfilme in dieser Probe in



**Bild 7.15:** Dickenfluktuationen von  $\text{In}_{0.16}\text{Al}_{0.14}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  in Abhängigkeit von der QW-Dicke (Probe C050602A). Im Gegensatz zu GaAs-Quantenfilmen nehmen die Grenzflächenrauigkeiten mit zunehmender Dicke zu.

Abhängigkeit von deren Dicke dargestellt. Im Gegensatz zu GaAs-Quantenfilmen sind die Dickenfluktuationen nicht unabhängig von der Quantenfilmdicke, sondern nehmen mit steigender Dicke annähernd linear zu. Eine mögliche Erklärung hierfür ist, daß sich durch Oberflächensegregation bei dickeren indiumhaltigen Schichten ein größerer Anteil Indium beim Wachstum an der Oberfläche ansammelt, der dann aufgrund der Verspannungen zu einer größeren Rauigkeit der Grenzfläche führt. Allerdings tritt nach Berechnungen in [Jen99] beim Wachstum von  $\text{In}_{0.16}\text{Al}_{0.14}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  ab einer Schichtdicke von etwa 4 nm eine Sättigung der Oberflächensegregation ein, so daß diese bei dickeren Schichten nicht mehr von der Schichtdicke abhängen sollte. Eine alternative Erklärung von Bild 7.15 ist, daß sich beim Wachstum von indiumhaltigen Schichten durch die Verspannungen Gitterfehler bilden, die sich beim weiteren Wachstum dieser Schicht nach oben fortpflanzen und somit an der Oberfläche, die danach zur Grenzfläche wird, anhäufen. Möglicherweise pflanzen sich diese Gitterfehler auch durch die breite AlGaAs-Übergitter-Barriere hindurch fort, so daß bei dieser Probe dickere Quantenfilme, die später gewachsen wurden, diese Fehlstellen von vorher gewachsenen dünnen Quantenfilmen übernehmen.

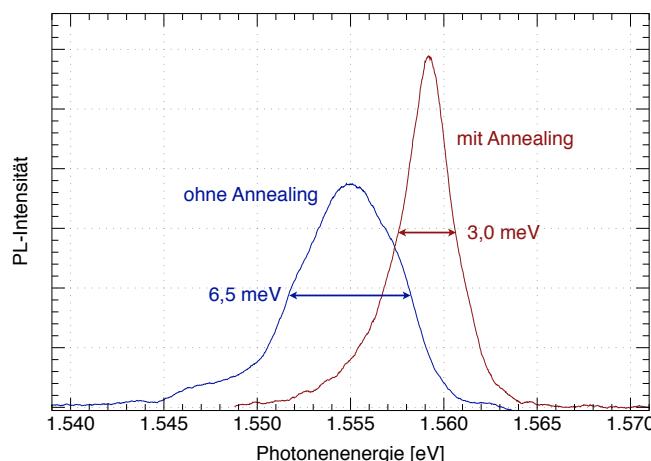
Bei den übrigen Proben mit quaternären Quantenfilmen wurde entweder die Barriere oder der Quantenfilm als Digitale Legierung gewachsen. Allgemein verlief das Wachstum hier deutlich schlechter. Die Linienbreiten waren in der Regel größer und es traten oft starke Fluktuationen der Übergangsenergie von bis zu 30 meV auf einer Größenskala im  $\mu\text{m}$ -Bereich auf. Bei einigen Proben waren auch gar keine Spektrallinien zu erkennen. Offenbar ist die Ursache hierfür das oben beschriebene Problem der Rotation der Probe beim Wachstum von Digitalen Legierungen.

Eine Probe (D060313C) erwies sich als gerade noch brauchbar. Bei dieser Probe stimmten beim Wachstum zufällig die Rotationsdauer und die Periode der Digitalen

Legierung relativ gut überein. Auch diese Probe weist Fluktuationen der Energie und größere Linienbreiten auf, diese sind stellenweise jedoch noch klein genug, um die Probe für das CEO-Verfahren verwenden zu können.

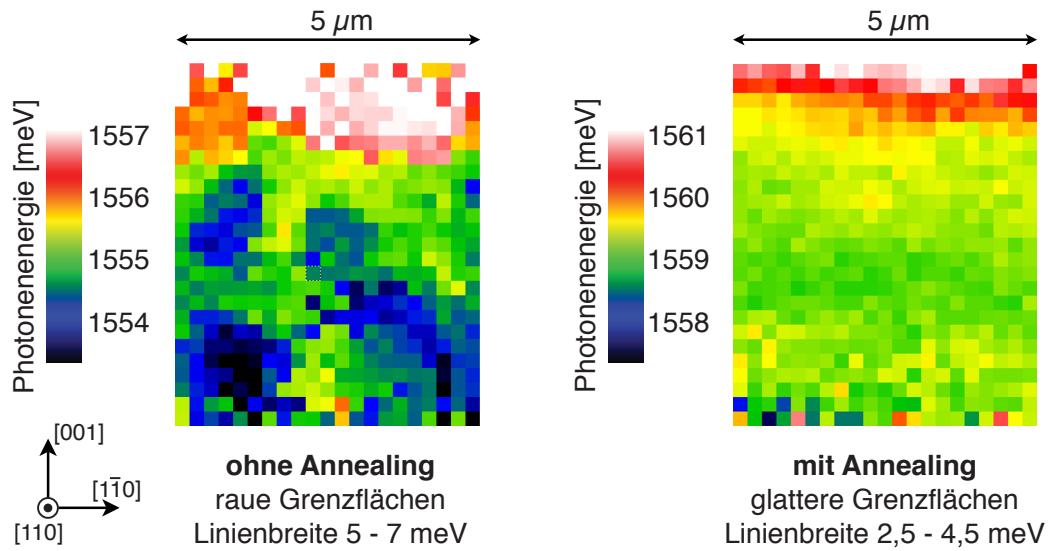
## 7.5 Annealing

Das Annealing-Verfahren führt wie in Kapitel 4.6 beschrieben zu großflächigen atomar glatten Bereichen auf der Oberfläche des überwachsenen Quantenfilms. Beim Überwachsen mit dem Barrierenmaterial ist zu erwarten, daß die Rauigkeit durch Oberflächensegregation wieder etwas zunimmt, da die Segregation bei der für das (110)-Wachstum benötigten niedrigeren Wachstumstemperatur zwar auch geringer, aber nicht vollkommen unterdrückt ist.



**Bild 7.16:** Spektren von 7 nm breiten (110)-GaAs-Quantenfilmen, die mit und ohne Annealing hergestellt wurden (Proben D050225A/B).

Um die Auswirkungen auf die entstehende Grenzfläche zwischen Quantenfilm und Barriere zu untersuchen, wurden Mikrophotolumineszenz-Messungen an (110)-Quantenfilmen durchgeführt, die mit und ohne Annealing auf Spaltflächen gewachsen wurden. Dabei wurde im ersten Wachstumsschritt zunächst eine  $6 \mu\text{m}$  breite  $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ -Barriere gewachsen. Im zweiten Schritt wurden mehrere Probenstücke *in situ* gespalten und die Spaltfläche mit einem 7 nm breiten GaAs-Quantenfilm überwachsen. Danach wurde auf der Oberfläche wie in Kapitel 4.6 beschrieben das Annealing-Verfahren für 10 Minuten bei  $600^\circ\text{C}$  angewendet. Anschließend wurde noch eine obere Barriere aus 300 nm  $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$  aufgebracht. Um den Einfluß des Annealings bestimmen zu können, wurde außerdem eine Referenzprobe hergestellt, bei der das Annealing übersprungen wurde.



**Bild 7.17:** PL-Rasterungen über die (110)-Oberfläche von Proben mit 7 nm breiten GaAs-Quantenfilmen, die mit und ohne Annealing hergestellt wurden (Proben D050225A/B). Dargestellt sind die für jeden Punkt aus den PL-Spektren ermittelten Übergangsenergien. Das Annealing-Verfahren führt zu deutlich geringeren Fluktuationen der Energie.

In Bild 7.16 sind PL-Spektren beider Proben dargestellt und Bild 7.17 zeigt Rasterungen über die (110)-Spaltfläche. Es ist zu erkennen, daß die Linienbreite durch das Annealing-Verfahren in diesem Fall mehr als halbiert wird. Bei der Probe ohne Annealing scheint das Signal eine Überlagerung aus drei Peaks zu sein, was auf Fluktuationen der Quantenfilmdicke hindeutet. Dies wird durch die räumliche Verteilung der Übergangsenergien in Bild 7.17 bestätigt. Ohne Annealing sind die Grenzflächen relativ rau. In der dargestellten Größenordnung von wenigen  $\mu\text{m}$  zeigen sich viele kleine Bereiche, deren Energien sich um bis zu 3,5 meV voneinander unterscheiden, was sich auf Fluktuationen im Bereich einer Monolagendicke zurückführen lässt. Bei Anwendung des Annealing-Verfahrens hingegen ergeben sich deutlich kleinere Schwankungen.

Wie in Bild 4.15 anhand von Rasterkraftmikroskop-Aufnahmen gezeigt wurde, hängt die Wirksamkeit des Annealing-Verfahrens davon ab, ob die Schicht eine ganzzahlige oder gebrochene Anzahl von Monolagen dick ist. In der Regel lässt sich ein geringer Dickengradient beim Wachstum nicht vollständig vermeiden. In Bild 7.17 rechts ist ein Ort der Probe abgebildet, bei der das Annealing-Verfahren aufgrund einer ganzzahligen Dicke des Quantenfilms zu besonders glatten Grenzflächen geführt hat. An anderen Stellen der Probe sind die Grenzflächen etwas rauer, aber immer noch deutlich besser als bei der Referenzprobe ohne Annealing.

Darüber hinaus zeigen sich bei kleineren Anregungsleistungen im PL-Spektrum der Probe ohne Annealing eine Vielzahl von scharfen Spitzen, die durch natürliche

Quantenpunkte verursacht werden und wiederum auf rauen Grenzflächen hindeuten. Bei der Probe mit Annealing hingegen zeigen auch bei kleineren Anregungsleistungen die PL-Spektren einen vergleichsweise glatten Verlauf.

Beim MBE-Wachstum sind längere Wachstumspausen allgemein möglichst zu vermeiden, da sich während dieser Zeit Verunreinigungen auf der Probenoberfläche ansammeln können. Um die Probe möglichst schnell auf die erforderliche Annealing-Temperatur aufzuheizen und danach wieder auf die Wachstumstemperatur abzukühlen, empfiehlt es sich, zuerst für etwa 30 bis 45 Sekunden eine deutlich höhere bzw. niedrigere Heizleistung zu wählen, um eine schnelle Temperaturänderung zu bewirken. Danach sollte die Heizleistung auf den für die gewünschte Solltemperatur notwendigen Endwert eingestellt werden. Da die Wärmeleitung zwischen Probenheizung und Substrat bei jedem Wachstum leicht variiert, empfiehlt es sich, den Temperaturverlauf für das Annealing für jede Proben manuell zu justieren.

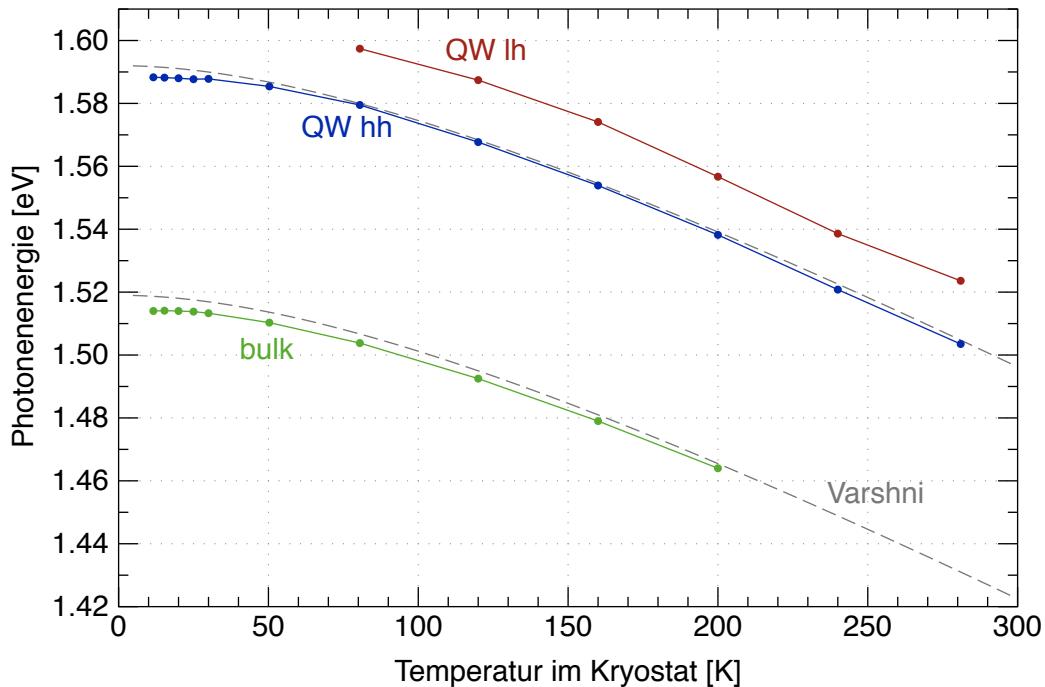
Bei den in Bild 7.17 gezeigten Messungen führt das Annealing-Verfahren zu einer Verringerung der Dickenfluktuationen von 1,91 ML auf 0,82 ML. In [Aki03] wird eine Probe mit einem 6 nm breiten (110)-Quantenfilm beschrieben, bei der mit Annealing eine Linienbreite von 1,5 meV, also eine Dickenfluktuation von nur 0,24 ML erreicht wurde. Dies weist darauf hin, dass sich das Annealing-Verfahren noch weiter optimieren lässt.

Da auch weitere Vergleichsmessungen eine deutliche Verbesserung der Probenqualität durch Annealing zeigten, wurde bei allen in dieser Arbeit vorgestellten CEO-Proben das Annealing-Verfahren zur Glättung der (110)-Grenzflächen eingesetzt.

Bei der Untersuchung von CEO-Quantenpunktproben zeigten sich beim Einsatz des Annealing-Verfahrens langreichweitige Dickenfluktuationen, die vermutlich auf zu kurze Zeiten für das Annealing oder das darauf folgende Abkühlen der Probe zurückzuführen sind. Diese Problematik wird ausführlicher in Kapitel 8.4 diskutiert.

## 7.6 Weitere Messungen an Quantenfilmen

Im Folgenden werden Messungen der Temperatur- und Polarisationsabhängigkeit sowie PLE-Messungen an Quantenfilmen vorgestellt. Sie dienen zum einen dazu, den Versuchsaufbau zur Mikrophotolumineszenz zu charakterisieren und zum anderen als Basis für die Auswertung weiterer Messungen an CEO-Proben, die in Kapitel 8 und 9 vorgestellt werden.



**Bild 7.18:** Gemessene Übergangsenergien eines 7 nm GaAs-Quantenfilms und des GaAs-Volumenkristalls (bulk). Für den Quantenfilm ist die Rekombination mit leichten (lh) und schweren (hh) Löchern dargestellt. Die gestrichelte Linien geben den Verlauf der Varshni-Formel wieder. Für den Volumenkristall wurden dabei als Parameter die Literaturwerte aus [Vur01] ohne Berücksichtigung von Exzitonen verwendet. Für den Quantenfilm wurde die Energie  $E_{g,0}$  entsprechend verschoben. (Probe D061002A)

## Temperaturabhängigkeit

In Bild 7.18 ist die gemessene Temperaturabhängigkeit der Übergangsenergien eines Quantenfilms und des GaAs-Volumenkristalls dargestellt. Der Verlauf der Varshni-Formel (Gleichung 3.32) mit den entsprechenden Parametern ist als gestrichelte Linien eingezeichnet. Die experimentell gemessene Kurve weicht davon für tiefe Temperaturen um bis zu 4 meV ab. Dies lässt sich dadurch erklären, daß bei tiefen Temperaturen die Rekombination aus gebundenen Exzitonen dominiert, wodurch die Übergangsenergie um die Bindungsenergie der Exzitonen vermindert wird. Bei höheren Temperaturen sind aufgrund von thermischer Anregung weniger Exzitonen gebunden und die Kurven nähern sich daher einander an<sup>3</sup>.

Für die Übergangsenergien des Quantenfilms ergibt sich für leichte und schwere

<sup>3</sup>Da bei höheren Temperaturen die Rekombination sowohl aus Exzitonen als auch aus ungebundenen Elektron-Loch-Paaren stattfindet, sollten sich hier eigentlich zwei separate Signale zeigen. Es nimmt jedoch gleichzeitig die Linienbreite so weit zu, daß diese sich nicht mehr trennen lassen.

re Löcher eine vergleichbare Temperaturabhängigkeit. Für den Quantenfilm wurde der Verlauf der Varshni-Formel im Bild so zu höheren Energien verschoben, daß die Werte bei Zimmertemperatur übereinstimmen. Es zeigt sich dann bei tiefen Temperaturen eine geringere Abweichung als beim Volumenkristall, obwohl die Exzitonen-Bindungsenergie hier etwa dreimal so groß ist. Dies ist ein Hinweis darauf, daß die Parameter  $\alpha$  und  $\beta$  in der Varshni-Formel für niederdimensionale Strukturen von den entsprechenden Werten für den Volumenkristall abweichen und nicht einfach übernommen werden können. Zur genaueren Bestimmung dieser Parameter wären temperaturabhängige PLE-Messungen nötig, aus denen sich unter anderem die Größe der Bandlücke ohne exzitonische Effekte ermitteln läßt.

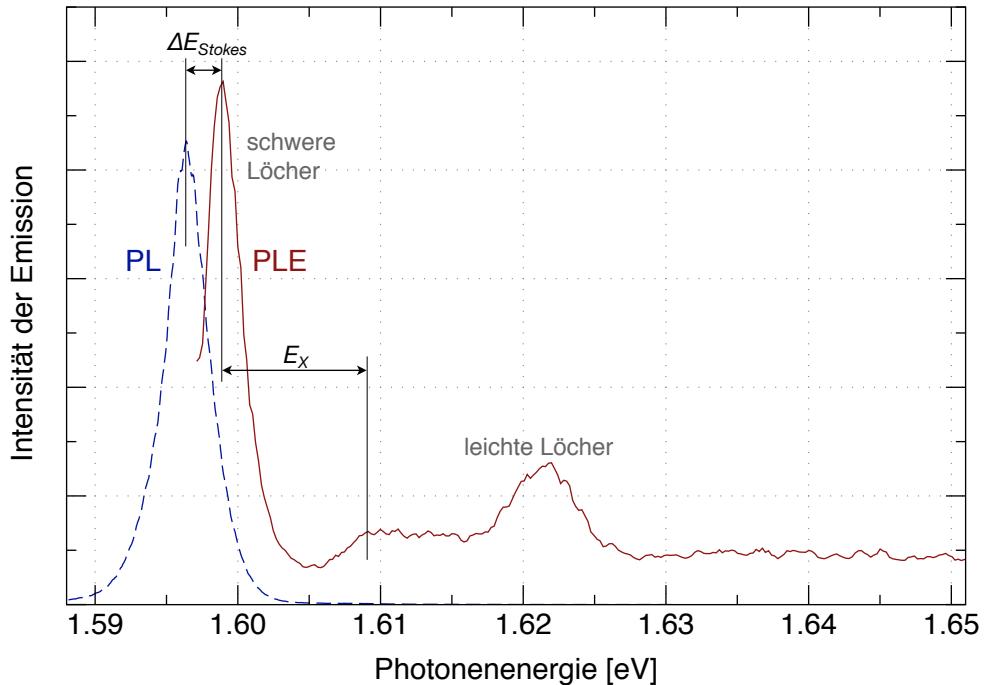
## Photolumineszenz-Anregungsspektroskopie

Durch die Photolumineszenz-Anregungsspektroskopie können weitere charakteristische Eigenschaften der Strukturen ermittelt werden wie beispielsweise die Stokes-Verschiebung, die Exzitonen-Bindungsenergie und die Energien von leichten Löchern sowie angeregten Zuständen. Da man bei der PLE gezielt in bestimmte Zustände anregt und die resultierende Emission aus bestimmten anderen Zuständen mißt, können so auch Diffusionsmechanismen von Ladungsträgern untersucht werden.

Eine typische PLE-Messung an einem Quantenfilm ist in Bild 7.19 dargestellt (rote Linie). Man erkennt die resonante Absorption in exzitonische Zustände mit leichten und schweren Löchern sowie ein kontinuierliches Absorptionsband ab 1,609 eV, das der Bildung von freien Elektronen und Löchern entspricht. Das Signal des Elektron-Leichtloch-Übergangs weist eine um 23 meV höhere Übergangsenergie als das des Elektron-Schwerloch-Übergangs auf. Dies stimmt gut mit dem theoretischen Wert von 20,5 meV (siehe Bild 6.1) überein. Aus dem Abstand des Elektron-Schwerloch-Übergangs zur unteren Kante des kontinuierlichen Absorptionsbandes ergibt sich eine Exzitonen-Bindungsenergie  $E_X$  von 10,3 meV. Auch diese stimmt gut mit dem theoretischen Wert von 10,84 meV (siehe Bild 6.6) überein. Die Differenz zwischen dem PL- und dem PLE-Signal entspricht einer Stokes-Verschiebung  $\Delta E_{Stokes}$  von 2,55 meV. Die Korrelation zwischen  $\Delta E_{Stokes}$  und der Linienbreite wird bereits in Bild 7.1 mit dem theoretisch erwarteten Zusammenhang verglichen.

## Polarisationsabhängigkeit

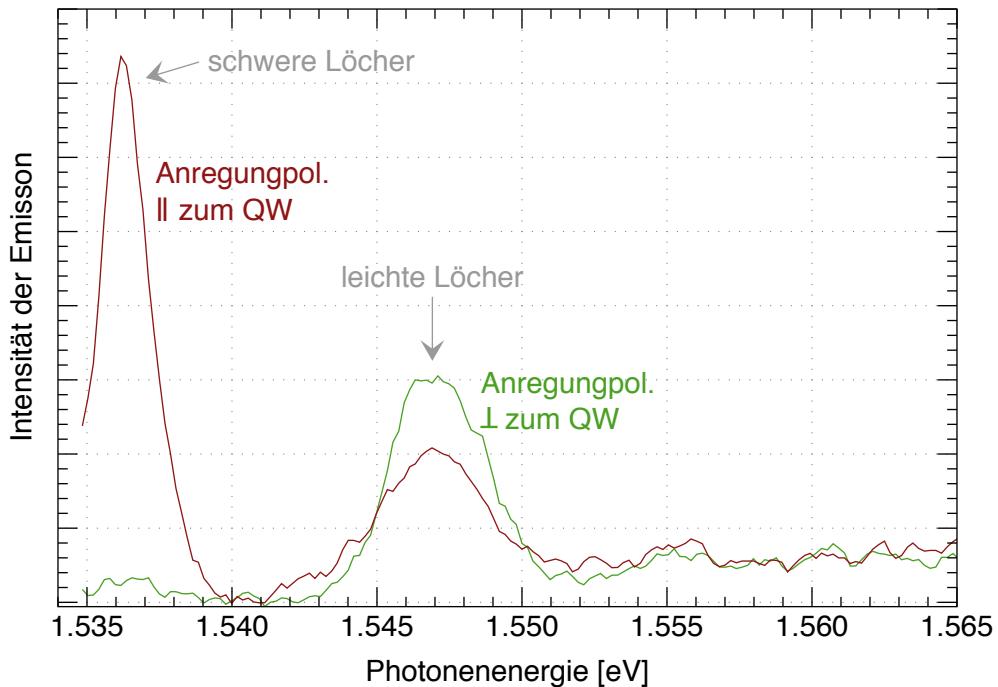
Bei polarisationsabhängigen Messungen wurde zunächst an mehreren Quantenfilmproben die Emission aus der Rekombination von Elektron-Schwerloch-Exzitonen untersucht. Bei der Emission senkrecht zur Quantenfilmebene zeigt sich kein Richtungs-



**Bild 7.19:** PLE-Messung eines 7 nm breiten (001)-GaAs-Quantenfilms (Probe D071121B). Die Detektionsenergie liegt bei 1,596 eV. Zum Vergleich ist eine PL-Messung an der gleichen Probe gestrichelt eingezeichnet.

abhängigkeit der Polarisation, was aus Symmetriegründen auch zu erwarten ist. Die Emission parallel zur Quantenfilmoberfläche weist dagegen eine ausgeprägte lineare Polarisation parallel zu den Quantenfilmen auf. Dies entspricht den in Tabelle 2.1 dargestellten theoretischen Auswahlregeln. Eine Emission mit einer Polarisationsrichtung senkrecht zum Quantenfilm ist in diesem Fall eigentlich verboten, wird aber dennoch als schwaches Signal gemessen. Es ergibt sich so ein mittleres Intensitätsverhältnis der beiden Polarisationsrichtungen von 22,2 : 1 und ein Polarisationsgrad von  $\Pi_{lin} = 91,4\%$  statt 100 %. Diese Abweichung lässt sich in erster Linie auf die begrenzte Positioniergenauigkeit der verwendeten Polarisationsdreher und -filter zurückführen. Hinzu kommt eine leichte Anisotropie des Strahlengangs, da der Versuchsaufbau nicht auf polarisationsabhängige Messungen optimiert wurde.

Bei höheren Anregungsleistungen ist darüber hinaus auch in der PL der exzitonische Elektron-Leichtloch-Übergang in beiden Polarisationsrichtungen zu sehen. Bei linearer Polarisation parallel zur Quantenfilmoberfläche liegt das Signal allerdings in der Flanke des sehr viel stärkeren Schwerloch-Übergangs, so daß die Messung in dieser Polarisationsrichtung relativ ungenau ist. Dennoch konnten die Auswahlregeln aus Tabelle 2.1 auch für leichte Löcher in der PL qualitativ bestätigt werden. Bei der Probe D071121B



**Bild 7.20:** Polarisationsabhängige PLE-Messung an einem 10 nm breiten (110)-GaAs-Quantenfilm (Probe D060607A). Die Richtung der Absorption und Emission ist hier parallel zum Quantenfilm. Die Detektionswellenlänge liegt bei 1,5348 eV.

ergab sich ein Intensitätsverhältnis der beiden Polarisationsrichtungen von 1:2,8 statt des theoretischen Wertes von 1:4.

Bei der PL zeigt sich allgemein keine Abhängigkeit von der Polarisationsrichtung der Anregung. Dies wurde auch in anderen Arbeiten beobachtet [Sch05, Sch99] und dort teilweise durch Lichtstreuung in der Barriere erklärt. Da beim MBE-Wachstum jedoch eine sehr gute Gitterstruktur erzeugt wird, ist nicht klar, wie diese Streuung verursacht werden soll. Eine plausible Erklärung ist, daß man bei der PL bei der Anregung Elektron-Loch-Paare in höher angeregten Zuständen jenseits des  $\Gamma$ -Punkts erzeugt, wie in Bild 2.10 illustriert ist. Hier kommt es zur Mischung der Bänder, so daß die in den Tabellen 2.1 und 2.2 angegebenen Auswahlregeln nicht mehr gültig sind.

Diese Erklärung wird dadurch bestätigt, daß sich bei resonanter Anregung in die entsprechenden Zustände am  $\Gamma$ -Punkt die erwartete Polarisationsabhängigkeit zeigt. Eine entsprechende polarisationsabhängige PLE-Messung eines Quantenfilms ist in Bild 7.20 dargestellt. Es zeigt sich, daß Exzitonen mit schweren Löchern fast nur durch parallel zum Quantenfilm polarisiertes Licht erzeugt werden können. Bei leichten Löchern führt die Anregung mit senkrecht polarisiertem Licht zu einer im Verhältnis 1,4:1 höheren Intensität. Dies stimmt im Rahmen der Meßgenauigkeit mit den theoretischen

Auswahlregeln überein. Das kontinuierliche Absorptionsband, das einer Erzeugung von ungebundenen Elektronen und Löchern in angeregten Zuständen entspricht, zeigt hingegen keine Abhängigkeit von der Polarisationsrichtung der Anregung.

Es wurden ferner polarisationsabhängige PL- und PLE-Messungen an verspannten  $\text{In}_{0.16}\text{Al}_{0.14}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ -Quantenfilmen durchgeführt. Diese zeigten die gleiche Polarisationscharakteristik wie unverspannte GaAs-Quantenfilme.

Die polarisationsabhängigen Messungen an Quantenfilmen bestätigen also die theoretisch berechneten Auswahlregeln. Die ermittelte Polarisationsabhängigkeit wurde unter anderem bei den im folgenden Kapitel vorgestellten Messungen angewendet, um bei CEO-Proben mit komplexeren Strukturen die Herkunft der einzelnen PL-Signale genauer bestimmen zu können.

## 7.7 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde an einer großen Anzahl von gewachsenen Proben untersucht, wie das MBE-Wachstum von Quantenfilmen von verschiedenen Parametern abhängt und welche Kombination von Wachstumsparametern zu guten Quantenfilmen mit möglichst glatten Grenzflächen führt.

Bei den gewachsenen (001)-Quantenfilmen fällt eine deutliche Blauverschiebung der Übergangsenergien von 10 bis 40 meV gegenüber den entsprechenden Simulationen auf. Diese lässt sich auf eine Kombination aus Oberflächensegregation (etwa 10 meV) und verminderten Wachstumsraten (etwa 5 bis 23 meV) zurückführen. Letztere wurde dadurch verursacht, daß die Flußraten der Effusionszellen zwischen der RHEED-Eichung und dem Wachstum gesunken sind. Daher ist es für ein präzises Wachstum in Zukunft nötig, nach dem Aufheizen der Zellen 30 bis 60 Minuten zu warten, bevor die RHEED-Eichung durchgeführt wird. Außerdem sollten möglichst keine Sumo-Zellen verwendet werden, da sich bei diesem Zellentyp aufgrund der schmalen Öffnung die Flußrate während des Wachstums sprunghaft ändern kann.

Weiter wurde untersucht, welche Faktoren einen Einfluß auf die Linienbreiten und damit die strukturelle Qualität der gewachsenen Quantenfilme ausüben. Die verwendete Wachstumstemperatur ist in weiten Bereichen unkritisch (außer 565 °C) und der bisher verwendete Arsen-Partialdruck von 6 bis  $7 \cdot 10^{-6}$  Torr bereits optimal. Der Einfluß von Wachstumspausen ist bei den hier untersuchten Proben unklar. Die Barrieren sollten idealerweise als Übergitter gewachsen werden. Erstaunlicherweise legen die untersuchten Proben den Schluß nahe, daß bereits eine kleine Reduzierung des Aluminium-Anteils in der Barriere von 35 % auf 32 % zu deutlich schmäleren Linienbreiten führt.

Darüber hinaus können deutliche Dickengradienten über die Probe hinweg dadurch

entstehen, daß die Rotation der Probe beim Wachstum nicht mit den einzelnen Schichten synchronisiert ist. Dies führt bei Mehrfach-Quantenfilmen und Digitalen Legierungen außerhalb der Mitte des Wafers zu großen Linienbreiten und aufgespaltenen PL-Signalen.

Beim Wachstum von indiumhaltigen Schichten treten weitere Schwierigkeiten auf. Für ein präzises Probenwachstum hat es sich als nötig herausgestellt, die Indium-Flußrate häufiger (etwa alle 5 Proben) als bisher zu kontrollieren. Versuche zur kritischen Schichtdicke beim Indium-Wachstum ergaben, daß sich bis zu 7 nm breite Quantenfilme mit einer Indiumkonzentration von bis zu 20 % in guter Qualität herstellen lassen. Ab 25 % nehmen die Oberflächenrauigkeiten jedoch deutlich zu.

Das Annealing-Verfahren wurde erfolgreich eingesetzt, um die obere Grenzfläche von (110)-Quantenfilmen zu glätten und führt hier zu einer Reduzierung der Linienbreiten von ursprünglich 5 - 7 meV auf 2,5 - 4,5 meV. Weitere Ergebnisse bezüglich des zeitlichen Verlaufs des Annealings finden sich im folgenden Kapitel.

# Kapitel 8

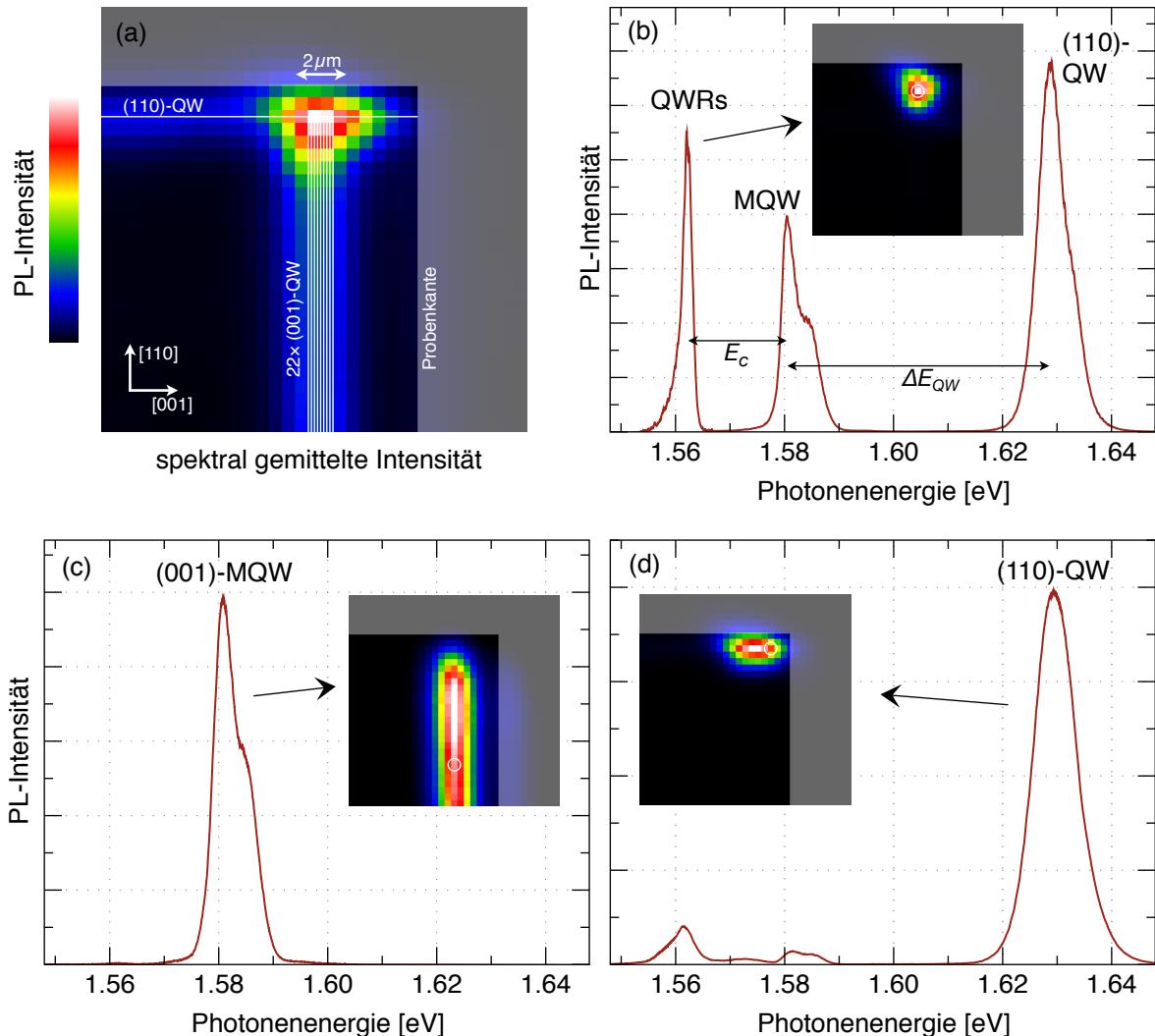
## Messungen an Quantendraht- und Quantenpunkt-Proben

In diesem Kapitel wird die experimentelle Realisierung und Charakterisierung von einigen der in Kapitel 6 theoretisch simulierten Strukturen vorgestellt. Dabei wird insbesondere der Frage nachgegangen, wie die Einschlußenergien in der Praxis von den verwendeten Wachstumsparametern abhängen und wie sich die strukturelle Qualität von CEO-Proben beim MBE-Wachstum optimieren lässt. Die Ergebnisse des vorigen Kapitels zum Wachstum von Quantenfilmen haben sich teilweise erst gegen Ende dieser Arbeit ergeben und konnten daher nicht immer für das Wachstum der in diesem Kapitel vorgestellten Proben eingesetzt werden.

### 8.1 Symmetrische Quantendrähte

Symmetrische Quantendrähte wurden im Rahmen dieser Arbeit experimentell als aktives Medium für Quantendrahlaser und im Zusammenhang mit CEO-Quantenpunkten untersucht. Bild 8.1 zeigt eine Mikrophotolumineszenz-Messung an einer Quantendrahlaserprobe. Diese besteht aus 22 parallel im Abstand von 38 nm angeordneten CEO-Quantendrähten, die jeweils aus einer Kreuzung aus zwei 7 nm dicken GaAs-Quantenfilmen bestehen und in einen optischen Wellenleiter eingebettet sind. Der genaue Aufbau der Probe ist in Bild 9.1 in Kapitel 9.1 dargestellt.

In Bild 8.1 ist eine Mikrophotolumineszenz-Messung dieser Probe gezeigt. Das Übersichtsbild (a) zeigt die Verteilung der mittleren Intensität der Emission über die abgerasterte (110)-Probenoberfläche. Dabei wird die T-förmige Struktur deutlich. Bei der Messung wurde für jeden Punkt dieser Fläche ein Spektrum aufgenommen. Die weiteren Teilbilder zeigen in drei dieser Spektren die Signale des Quantendrahts (b), des (001)-Mehrfach-Quantenfilms (MQW) (c) und des überwachsenen Quantenfilms (d).



**Bild 8.1:** Mikrophotolumineszenz-Messung der Quantendrahlaserprobe D060831B-18. Das Teilbild (a) zeigt einen Überblick über die gerasterte Probenoberfläche. Die farbcodierte Darstellung zeigt die spektral gemittelte Intensität der Emission. Die Struktur der Probe ist durch weiße Linien schematisch eingezeichnet. Die weiteren Teilbilder zeigen Spektren von einzelnen Punkten auf der Probenoberfläche. Die darin eingebetteten Flächenbilder zeigen jeweils die räumliche Intensitätsverteilung dieser Signale. Der Ort, an dem die Spektren aufgenommen wurden, ist im jeweiligen Flächenbild durch einen weißen Kreis markiert. Die schwarzen Pfeile drücken aus, welcher Peak als Intensitätsverteilung im Flächenbild dargestellt ist.

Die kleineren Flächenbilder in (b) bis (d) zeigen die räumliche Verteilung der entsprechenden Strukturen und stimmen mit der nominellen Strukturgeometrie überein. Wie in Kapitel 4.5 anhand von Bild 4.9 erläutert wurde, stellt die überwachsene (110)-Schicht nur dort einen Quantenfilm dar, wo sie von beiden Seiten von einer AlGaAs-Barriere umgeben ist. Daher beschränkt sich die Ausdehnung des (110)-Quantenfilms in Teilbild (d) auf die Breite der insgesamt in der (001)-Richtung gewachsenen Barriere.

Aus dem Spektrum in Bild 8.1b ergibt sich eine Einschlußenergie von  $E_c = 19,8 \text{ meV}$ , die etwa doppelt so groß ist wie der theoretisch berechnete Wert von 10,3 meV (aus Bild 6.5). Bei der Bestimmung der Einschlußenergie von Quantendrähten wurde die Stokes-Verschiebung allgemein nicht berücksichtigt, da die Linienbreite und somit die Stokes-Verschiebung der Quantenfilm- und Quantendraht-Signale hier annähernd gleich ist und sich daher bei der Differenzbildung ausgleicht.

Frühere Messungen an vergleichbaren Proben zeigen zwar auch Einschlußenergien von 17 meV [Weg93], aber in diesem Fall ist der Wert besonders erstaunlich, da die Energien der beiden angrenzenden Quantenfilme sich um  $\Delta E_{QW} = 50 \text{ meV}$  unterscheiden und somit die Struktur weit vom Optimum der angepaßten Übergangsenergien entfernt ist. Die gemessene Übergangsenergie des überwachsenen Quantenfilms ist auffallend hoch und deutet darauf hin, daß dessen Breite eher im Bereich von 4 nm liegt.

Weitere symmetrische Quantendrähte wurden im Rahmen von CEO-Quantenpunktproben untersucht. Diese Quantenpunkte entstehen an der Kreuzung von drei GaAs-Quantenfilmen. Dort, wo in diesen Proben zwei Quantenfilme aufeinander treffen, entstehen immer auch Quantendrähte (siehe Bild 2.9).

| Probe       | (001)-QW | (110)-QW | QWR-Einschlußenergie |
|-------------|----------|----------|----------------------|
| D070724B-17 | 7 nm     | 6,4 nm   | 12,0 meV             |
| D070916B-24 | 7 nm     | 5,4 nm   | 15,3 meV             |
| D070924A-01 | 7 nm     | 5 nm     | 14,1 meV             |
| D070924A-02 | 7 nm     | 5 nm     | 15,0 meV             |
| D070924A-30 | 7 nm     | 5 nm     | 7,1 meV              |
| D071203A-7  | 7,07 nm  | 5,6 nm   | 10,5 meV             |
| D071203B-6  | 7,07 nm  | 5,6 nm   | 12,7 meV             |

**Tabelle 8.1:** Experimentell gemessene Einschlußenergien von Quantendrähten in Quantenpunkt-Proben.

In Tabelle 8.1 sind für einige dieser Proben die jeweiligen Dicken der Quantenfilme und die gemessenen Einschlußenergien der Quantendrähte angegeben. Bei diesen Proben wurde nach dem ersten Wachstumsschritt die Blauverschiebung der Übergangsenergie gemessen und die Dicke der überwachsenen Quantenfilme reduziert, um die

Energien anzugeleichen. Es zeigt sich eine große Streuung der Einschlußenergien im Bereich von 7,1 bis 15,3 meV. Dies liegt vermutlich in der schlechten Qualität des (110)-Wachstums begründet, das in Abschnitt 8.4 noch genauer beschrieben wird. Nichtsdestotrotz sind die experimentellen Einschlußenergien bis auf eine Ausnahme stets größer als der theoretische Wert von 10,3 meV für symmetrische  $7 \times 7 \text{ nm}^2$  Quantendrähte.

Allgemein fällt auf, daß nahezu alle bisher veröffentlichten experimentell gemessenen Einschlußenergien von CEO-Quantendrähten größer als die theoretisch simulierten Werte sind (zum Beispiel [Weg93, Lan96, Szy01, Aki03, Sch05]). Die in Kapitel 7.2 vorgestellten Untersuchungen legen nahe, daß der Effekt der Oberflächensegregation allgemein bei MBE-gewachsenen CEO-Proben aufgetreten. Vermutlich weisen dadurch die gewachsenen Quantenfilme eine geringere tatsächliche Breite auf, was nach Bild 6.5 bzw. 6.8 zu höheren Einschlußenergien der Quantendrähte führt. Die hohe Einschlußenergie der Quantendrahtlaserprobe in Bild 8.1, die trotz schlechter Anpassung der Quantenfilmenergien etwas doppelt so groß wie der theoretische Wert ist, kann hierdurch allerdings nicht vollständig erklärt werden.

Polarisationsabhängige Messungen der Quantendraht-Emission bei einer Ausbreitungsrichtung senkrecht zum Quantendraht zeigen eine lineare Polarisation parallel zum Quantendraht mit einem linearen Polarisationsgrad von  $P_{lin} = 50\%$ . In [Aki96] veröffentlichte Messungen zeigen vergleichbare Werte. Diese Polarisationsabhängigkeit steht im Gegensatz zu den in Tabelle 2.2 angegebenen Auswahlregeln. Allerdings sind diese theoretischen Werte für Quantendrähte mit kreisförmigem Querschnitt berechnet.

Auch bei einer Ausbreitungsrichtung parallel zu den Quantendrähten ergibt die Messung der Polarisationsabhängigkeit kein klares Bild. Bei den unten vorgestellten asymmetrischen CEO-Quantendrähten weist die Emission eine lineare Polarisation von  $P_{lin} = 86\%$  und bei den verspannten Quantendrähten in Abschnitt 8.3 von 6% in [001]-Richtung auf. In [Sch05] hingegen wird eine lineare Polarisation in [110]-Richtung von 82% für unverspannte und 50% für rein verspannungsinduzierte Quantendrähte gemessen. In [Ito03] werden polarisationsabhängige Messungen an CEO-Quantendrähten vorgestellt, aber die entscheidende Frage nach der Polarisationsabhängigkeit der Absorption und Emission wird übergangen. Die dort dargestellten Spektren zeigt eine schwach ausgeprägte lineare Polarisation, die allerdings bei Absorption (PLE) und Emission (PL) in unterschiedliche Richtungen zeigt.

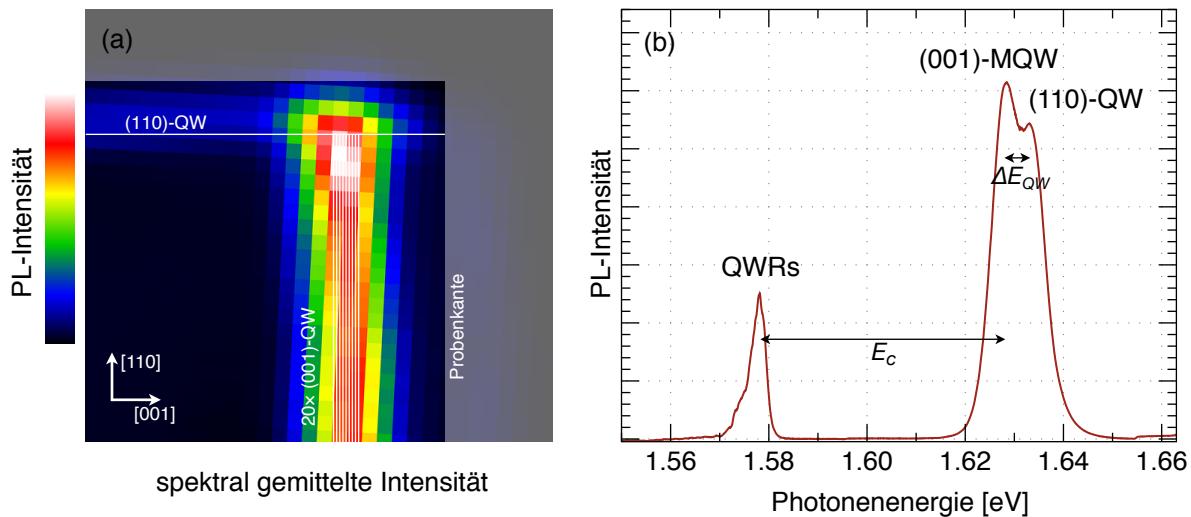
Insgesamt ergibt sich, daß die Polarisationsabhängigkeit der Absorption und Emission von CEO-Quantendrähten bei verschiedenen Proben stark unterschiedlich ist und sich nicht einfach beschreiben läßt. Dies liegt vermutlich in der komplexen Valenzbandstruktur und einer empfindlichen Abhängigkeit von der komplizierteren Probengeometrie begründet. Außerdem ist noch unklar, ob die Wellenleiterstruktur bei den hier

untersuchten Quantendrahtlaserproben einen Einfluß auf die polarisationsabhängigen Messungen hat.

Temperaturabhängige Messungen der Quantendrahtlaserprobe werden im folgenden Abschnitt vorgestellt. Weitere Messungen an den Quantenpunktproben finden sich in Abschnitt 8.4 und an den Quantendrahtlasern in Kapitel 9.

## 8.2 Asymmetrische Quantendrähte

Im Rahmen der Untersuchungen an Quantendrahtlasern wurde auch eine Struktur mit asymmetrischen Quantendrähten als aktives Medium hergestellt. Diese besteht aus 20 parallel im Abstand von 42 nm angeordneten CEO-Quantendrähten, die je aus einer Kreuzung von einem 14 nm breiten  $\text{Al}_{0.07}\text{Ga}_{0.93}\text{As}$ -(001)-Quantenfilm mit einem 6 nm breiten GaAs-(110)-Quantenfilm bestehen und in einen optischen Wellenleiter eingebettet sind. Bild 9.2 in Kapitel 9.1 zeigt den genauen Aufbau dieser Probe.

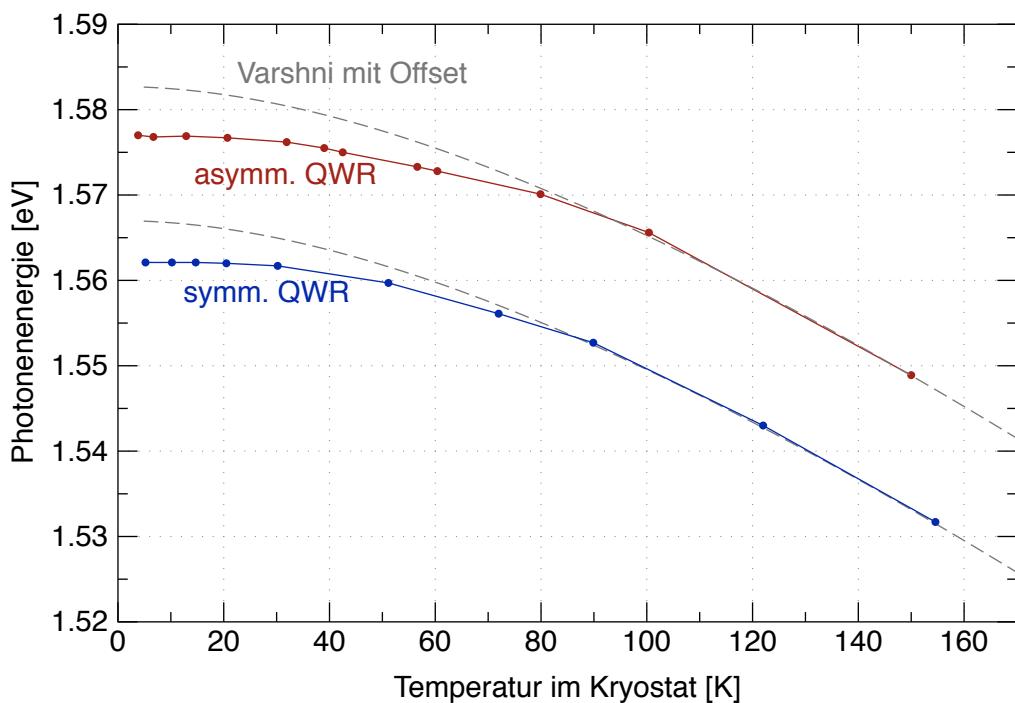


**Bild 8.2:** Mikrophotolumineszenz-Messung der Quantendrahtlaserprobe D060831A-27. Die linke Seite zeigt die Verteilung der mittleren Intensität über die gerasterte Probenoberfläche. Die Struktur der Probe ist durch weiße Linien schematisch eingezeichnet. Die rechte Seite zeigt ein Spektrum vom Ort der T-förmigen Kreuzung.

In Bild 8.2 ist eine Mikrophotolumineszenz-Messung an dieser Probe dargestellt. Die Einschlußenergie der Quantendrähte beträgt hier  $E_c = 51,0 \text{ meV}$  und entspricht somit etwa den größten bisher erreichten Einschlußenergien in CEO-Quantendrähten [Lan96, Sch05]. Dieser hohe Wert kommt zum einen durch die asymmetrische Struktur zustande und zum anderen dadurch, daß die Übergangsenergien der Quantenfilme sehr gut aneinander angeglichen sind ( $\Delta E_{\text{QW}} = 6,3 \text{ meV}$ ). Bei einer ähnlichen Probe

(D060424B-2) mit einem 5,1 nm breiten (110)-Quantenfilm ergab sich ein Unterschied der Quantenfilmenergien von  $\Delta E_{QW} = 33,5$  meV und entsprechend eine kleinere Einschlußenergie von 30,5 meV.

Die Einschlußenergie von 51,0 meV bei der Probe D060831A-27 ist wiederum wesentlich größer als die theoretisch ermittelte Einschlußenergie von 21,9 meV (aus Bild 6.8). Diese große Differenz läßt sich nicht mit Abweichungen der tatsächlichen Dicke oder Zusammensetzung der Quantenfilme zufriedenstellend erklären. Hinzu kommt, daß sowohl die theoretischen als auch die experimentellen Werte mit früheren Veröffentlichungen anderer Arbeitsgruppen [Lan96, Szy01] vergleichbar sind. Somit ist zu vermuten, daß die quantenmechanischen Vorgänge an der T-förmigen CEO-Kreuzung immer noch nicht vollständig verstanden sind.



**Bild 8.3:** Abhängigkeit der gemessenen Übergangsenergien von der Temperatur für symmetrische (Probe D060831B-18) und asymmetrische Quantendrähte (Probe D060831A-27). Der Verlauf der Varshni-Formel ist jeweils gestrichelt mit einem entsprechenden Offset versehen eingezeichnet.

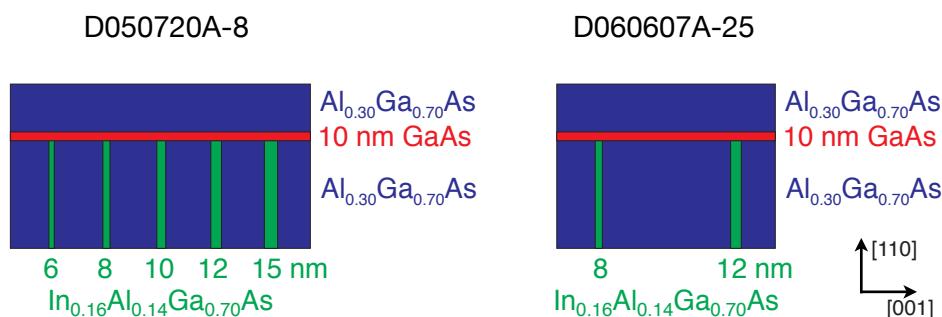
Temperaturabhängige Messungen der symmetrischen und asymmetrischen Quantendrahtlaserprobe sind in Bild 8.3 zu sehen. Zusätzlich ist zur Orientierung die Temperaturabhängigkeit der GaAs-Bandlücke nach der Varshni-Formel gestrichelt eingezeichnet. Diese wurde jeweils vertikal so verschoben, daß die Kurve für höhere Temperaturen mit den experimentellen Übergangsenergien übereinstimmt. Es zeigt sich ein ähnlicher

Verlauf wie beim GaAs-Volumenkristall (Bild 7.18), allerdings weichen die gemessenen Energien bei tiefen Temperaturen stärker von der Varshni-Formel ab. Dies lässt sich als Folge der in Quantendrähten größere Exzitonen-Bindungsenergie interpretieren, die vor allem bei niedrigen Temperaturen zu einer Verringerung der Übergangsenergie führt. In diesem Fall bedeutet der etwas größere Abstand zur gestrichelten Kurve bei der Probe mit asymmetrischen Quantendrähten, daß diese gegenüber den symmetrischen Quantendrähten eine größere Exzitonen-Bindungsenergie aufweisen, was mit entsprechenden Simulationen übereinstimmt. Für eine genauere Aussage hierzu wären temperaturabhängige PLE-Messungen nötig, aus denen sich die Größe der Bandlücke ohne exzitonische Effekte bestimmen lässt.

Leistungsabhängige Messungen an der asymmetrischen Quantendrahlaserprobe zeigen, daß die Einschlußenergie hier kaum von der Leistung abhängt, wie in Bild 8.7 im folgenden Abschnitt dargestellt ist. Weitere Messungen an dieser Probe finden sich in Kapitel 9.

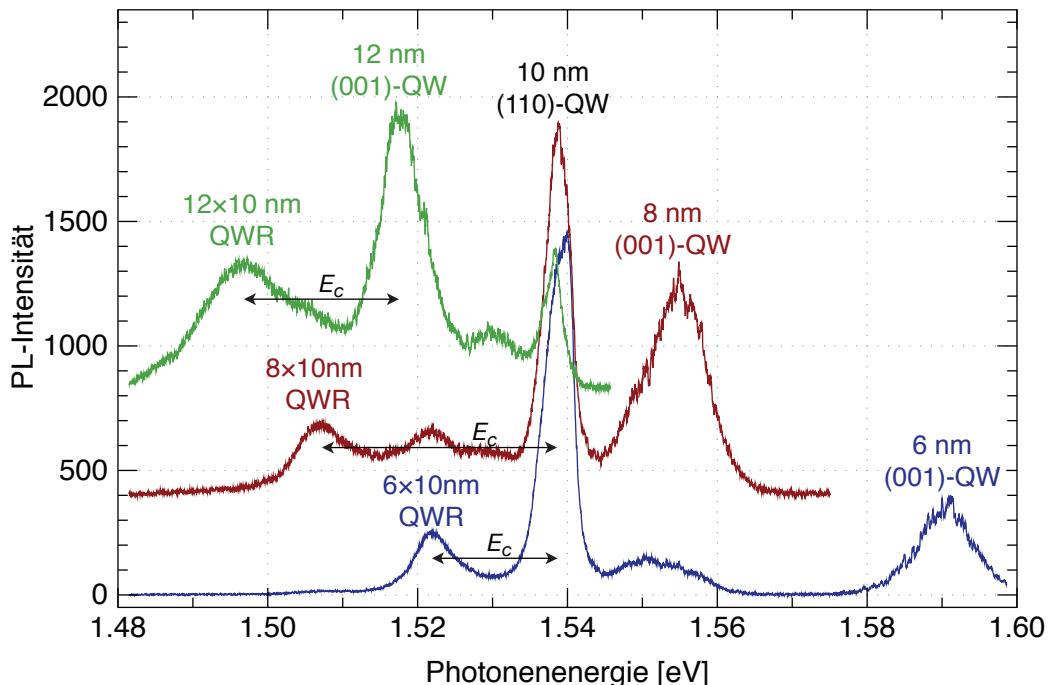
### 8.3 Verspannte T-förmige Quantendrähte

Wie in Kapitel 7.4 beschrieben wurden mehrere Proben mit verspannten quaternären InAlGaAs-Quantenfilmen hergestellt, von denen zwei gute optische Eigenschaften aufwiesen (Proben C050602A und D060313C). Diese beiden Proben wurden jeweils als Substrate für das CEO-Verfahren verwendet, um verspannte T-förmige Quantendrähte herzustellen (Proben D050720A-8 bzw. D060607A-25). Der Aufbau dieser Proben ist in Bild 8.4 schematisch dargestellt. Sie bestehen aus 5 bzw. 2 verschiedenen dicken  $\text{In}_{0.16}\text{Al}_{0.14}\text{Ga}_{0.70}\text{As}$ -Quantenfilmen, die durch einen 10 nm breiten GaAs-Quantenfilm überwachsen wurden und so 5 bzw. 2 CEO-Quantendrähte bilden. Es sei auch hier dar-



**Bild 8.4:** Schematischer Aufbau der beiden Proben mit verspannten T-förmigen Quantendrähten. Die Barrierendicken sind nicht maßstabsgetreu. Die Abstände zwischen den (001)-Quantenfilmen betragen bei der linken Probe 1,0  $\mu\text{m}$  und bei der rechten 2,5  $\mu\text{m}$ .

auf hingewiesen, daß dies die nominellen Werte sind und die tatsächliche Probengeometrie und Materialzusammensetzung aufgrund der in Kapitel 7 geschilderten Schwierigkeiten beim Wachstum davon abweichen können.

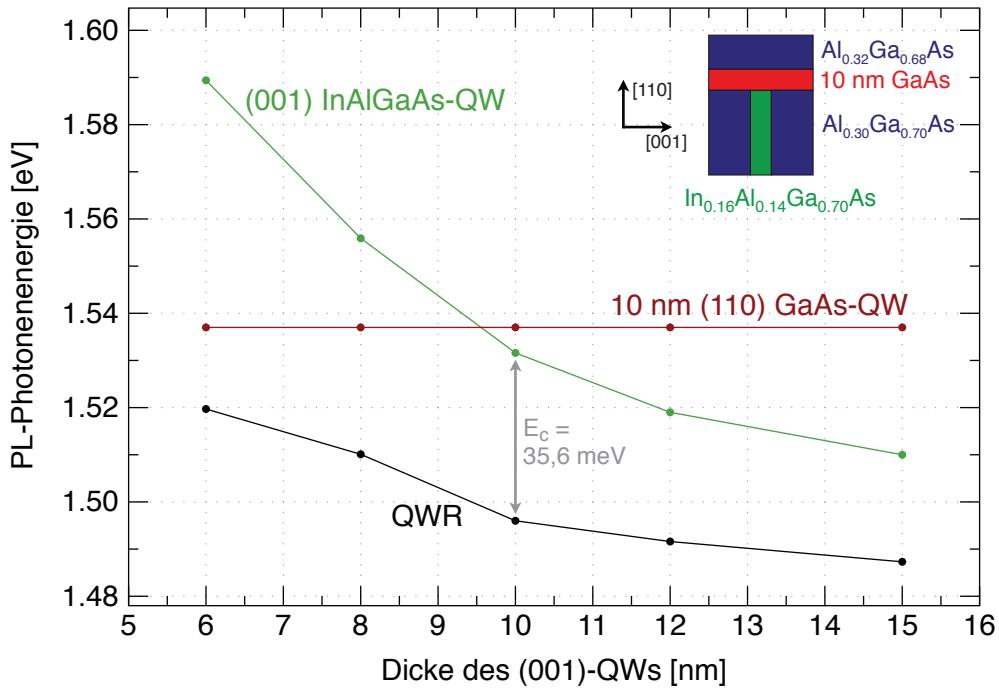


**Bild 8.5:** Gemessene Spektren von 3 der 5 Quantendrähte in der Probe D050720A-8. Die Spektren wurden durch Mikrophotolumineszenz am Ort der jeweiligen T-förmigen Kreuzung aufgenommen. Die Anregungsleistung betrug  $9,2 \mu\text{W}$ .

In Bild 8.5 sind gemessene Spektren von drei Quantendrähten der Probe D050720A-8 zusammen mit den jeweils angrenzenden Quantenfilmen dargestellt. Da der Abstand der Quantendrähte voneinander nur  $1 \mu\text{m}$  beträgt, finden sich in den Spektren auch kleinere Peaks, die von jeweils benachbarten Strukturen stammen. In diesem Fall erwies sich die Polarisationsabhängigkeit der Quantenfilme und Quantendrähte als hilfreich bei der Identifizierung und Unterscheidung der Signale.

Bei den beiden hier vorgestellten Proben führte die Verwendung des Annealing-Verfahrens zu einer deutlicheren Verringerung der Linienbreite des (110)-Quantenfilms auf 2 bis  $2,5 \text{ meV}$  im Vergleich zu einer ähnlichen Proben ohne Annealing mit einer Linienbreite von  $5,0 \text{ meV}$ .

Die gemessenen Übergangsenergien der Quantendrähte und -filme, also die Positionen der Peaks in den Spektren, sind in Bild 8.6 für alle 5 Quantendrähte dieser Probe aufgezeichnet. Diese Darstellung ist analog zur Abbildung der simulierten Übergangsenergien von unverspannten Quantendrähten in Bild 6.3 in Kapitel 6. Die jeweilige Ein-



**Bild 8.6:** Experimentell bestimmte Übergangsenergien von verspannten T-förmigen Quantendrähten und den angrenzenden Quantenfilmen (Probe D050720A-8). Die jeweilige Einschlußenergie entspricht der Differenz zwischen dem QWR- und dem jeweils niedrigeren QW-Signal. Diese Werte wurden bei einer Anregungsleistung von  $9,2 \mu\text{W}$  gemessen.

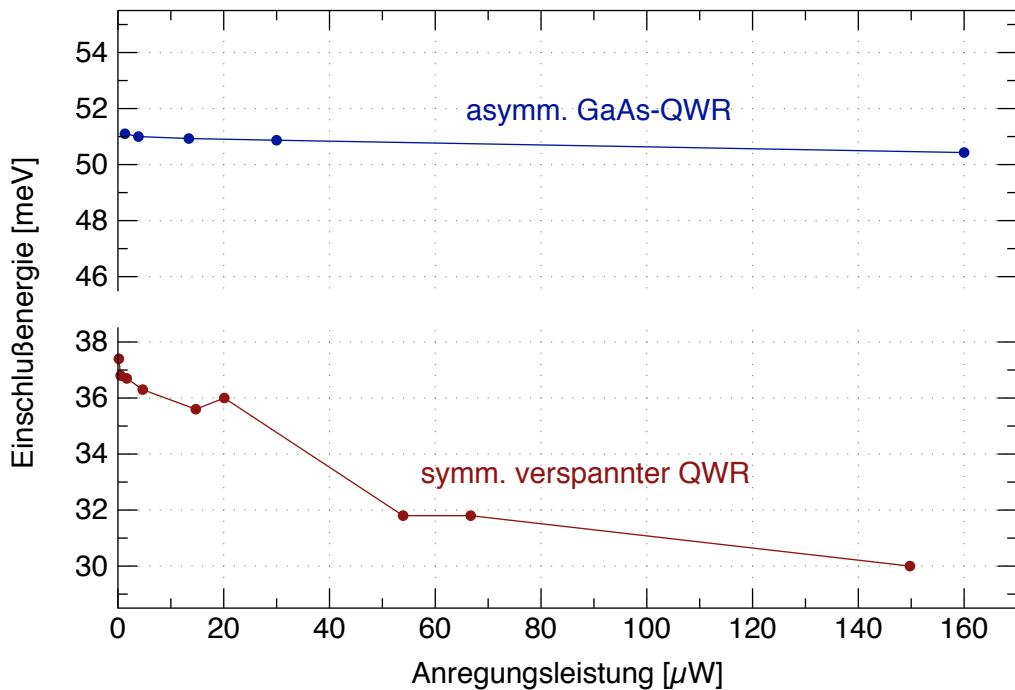
schlußenergie zeigt sich als Differenz zwischen der jeweils niedrigeren Quantenfilmenergie und der Energie des Quantendrahts. Das Maximum der Einschlußenergie beträgt bei dieser Probe  $35,6 \text{ meV}$  und ergibt sich für den  $10 \times 10 \text{ nm}^2$  Quantendraht, da dort die Übergangsenergien der Quantenfilme am Besten angeglichen sind ( $\Delta E_{QW} = 5,3 \text{ meV}$ ).

Diese gemessene Einschlußenergie stimmt sehr gut mit dem theoretisch ermittelten Wert von  $37,34 \text{ meV}$  überein und ist deutlich höher als bei gleich großen unverspannten Quantendrähten (theoretisch  $6,7$  bis  $9,7 \text{ meV}$  nach Bild 6.5). Die Verwendung von verspannten Strukturen bewirkt hier also eine erhebliche Erhöhung der Einschlußenergie.

Die zweite Probe D060607A-25 führte zu vergleichbaren Ergebnissen. Hier ergab sich eine optimale Einschlußenergie von  $36,3 \text{ meV}$  für einen  $12 \times 10 \text{ nm}^2$  Quantendraht ( $\Delta E_{QW} = 0,1 \text{ meV}$ ). Der Unterschied in der jeweils optimalen Geometrie liegt offenbar in Abweichungen der Strukturgrößen oder Legierungszusammensetzung begründet. Der andere  $8 \times 10 \text{ nm}^2$  Quantendraht in dieser Probe weist eine geringere Einschlußenergie von  $23,0 \text{ meV}$  auf. Diese Werte wurden bei einer Anregungsleistung von  $4,7 \mu\text{W}$  gemessen.

Im Gegensatz zu unverspannten Quantendrähten steigt bei verspannten Quan-

tendrähten die Einschlußenergie mit zunehmender Strukturgröße. Dies geht aus den Simulationen in Bild 6.18 hervor und konnte auch experimentell bestätigt werden. Bei einer vergleichbaren Probe (D090128C-19) mit einem kleineren nominell  $6 \times 6 \text{ nm}^2$  großen Quantendraht und einer guten Anpassung der Quantenfilmenergien ( $\Delta E_{QW} = 2,9 \text{ meV}$ ) ergab sich eine reduzierte Einschlußenergie von 17,4 meV, die etwas unterhalb des theoretisch simulierten Wertes von 25,24 meV liegt.



**Bild 8.7:** Gemessen Abhängigkeit der Einschlußenergie von der Anregungsleistung bei unverspannten und verspannten CEO-Quantendrähten (Probe D060831A-27 bzw. D060607A-25).

Im Gegensatz zu unverspannten Strukturen hängen bei den hier untersuchten Proben die Übergangssenergien der Quantendrahtzustände deutlich von der Anregungsleistung ab. Die sich daraus ergebenden Konsequenzen für die Einschlußenergie sind in Bild 8.7 dargestellt. Es zeigt sich, daß diese mit steigender Anregungsleistung abnimmt. Dies macht sich besonders bei Anregungsleistungen von mehr als  $20 \mu\text{W}$  bemerkbar. Die oben vorgestellten Messungen wurde daher mit kleineren Anregungsleistungen von weniger als  $10 \mu\text{W}$  durchgeführt. Messungen an rein verspannungsinduzierten Quantendrähten in [Sch05] zeigen eine vergleichbare Leistungsabhängigkeit. Dieses Verhalten kann dadurch erklärt werden, daß die piezoelektrischen Raumladungen in verspannten Quantendrähten bei höheren Anregungsleistungen durch bereits vorhandene räumlich getrennte Elektronen und Löcher abgeschirmt werden, so daß der Piezoeffekt effektiv verringert wird. Da die piezoelektrischen Effekte wie in Kapitel 6.4 gezeigt einen

entscheidenden Beitrag zum Ladungsträgereinschluß leisten, sinkt bei steigenden Anregungsleistungen auch die Einschlußenergie.

## 8.4 Quantenpunkte

Bei der praktischen Umsetzung des zweifachen Überwachsens von Spaltflächen zur Herstellung von Quantenpunkten offenbarten sich verschiedene Probleme und Herausforderungen. Einerseits funktionierte das Spalten der Proben anfangs nicht wie gewünscht und mußte erst optimiert werden (siehe Kapitel 4.5). Andererseits wiesen die Quantenfilme oft relativ große Grenzflächenfluktuationen auf oder waren zum Teil in der Photolumineszenz-Messung gar nicht zu erkennen. Die notwendige Optimierung des Wachstums von (001)-Quantenfilmen wurde bereits in Kapitel 7 beschrieben. Weitere Untersuchungen zu den Problemen beim (110)-Wachstum folgen am Ende dieses Kapitels.

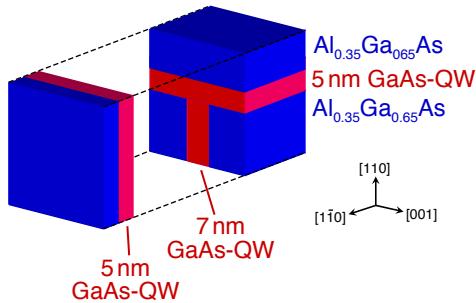
Trotz dieser Schwierigkeiten gelang es, zwei CEO-Quantenpunkt-Proben erfolgreich herzustellen und zu charakterisieren. Die Ergebnisse dieses Abschnitts sind in enger Zusammenarbeit mit Christian Neugirg entstanden [Neu08].

### Probe mit einem einzelnen (001)-Quantenfilm

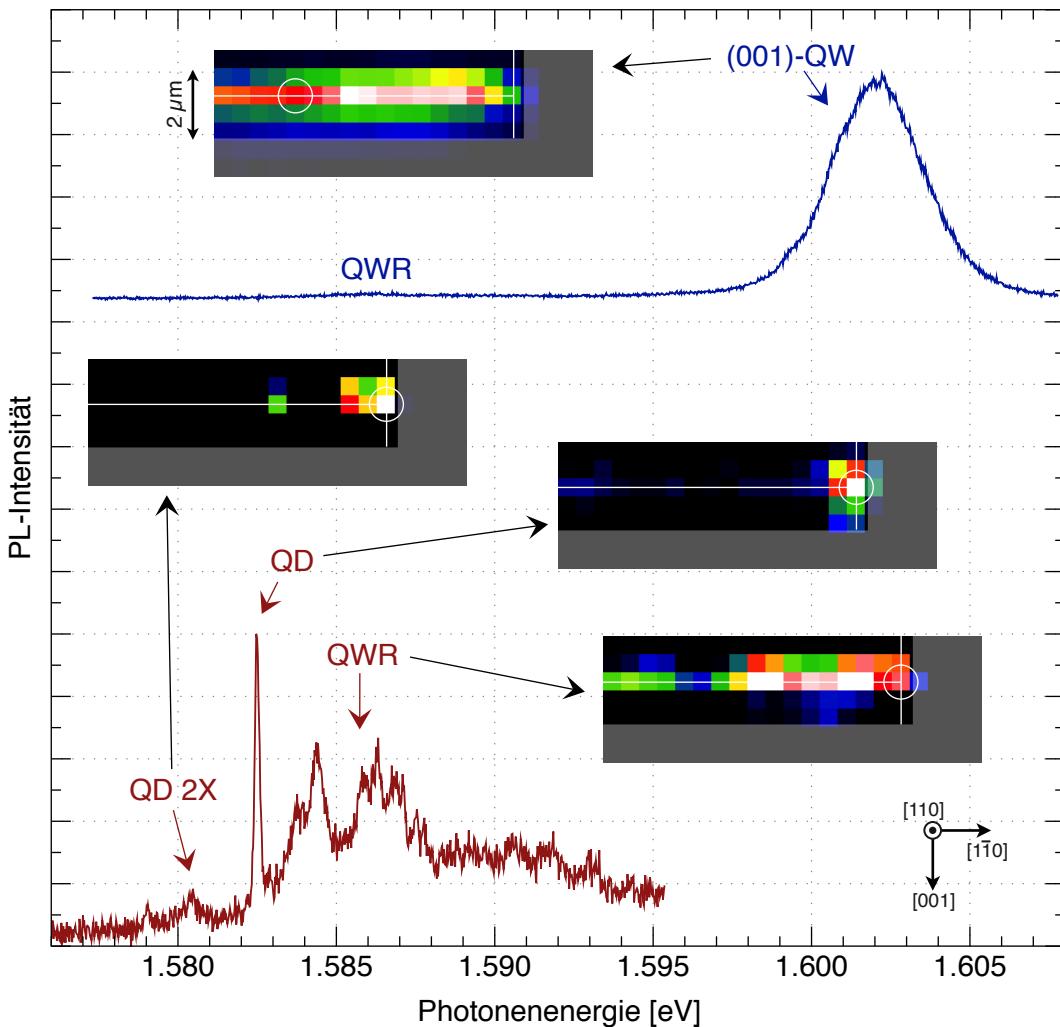
Zunächst soll die Probe D070924A-1 mit einem einzelnen Quantenpunkt vorgestellt werden. Der Aufbau dieser Probe ist in Bild 8.8 skizziert. Im ersten Wachstumsschritt (D070821B) wurde zunächst eine  $2,3\text{ }\mu\text{m}$  breite Barriere aus  $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,35}\text{As}$  aufgewachsen, dann ein  $7\text{ nm}$  breiter (001)-GaAs-Quantenfilm gefolgt von einer weiteren  $1\text{ }\mu\text{m}$  breiten Barriere. Im zweiten Wachstumsschritt wurde direkt nach dem Spalten auf die freigelegte (110)-Spaltfläche ein  $5\text{ nm}$  breiter (110)-GaAs-Quantenfilm gefolgt von einer ebenfalls  $1\text{ }\mu\text{m}$  breiten Barriere aufgewachsen. Um Quantenpunkte zu erhalten, wurde im dritten Wachstumsschritt nach dem zweiten Spalten erneut ein  $5\text{ nm}$  breiter ( $\bar{1}10$ )-GaAs-Quantenfilm gefolgt von einer  $0,2\text{ }\mu\text{m}$  breiten Barriere aufgewachsen. Die Breiten der überwachsenen Quantenfilme wurden gegenüber dem (001)-Quantenfilm etwas reduziert, um die Übergangsenergien der drei Quantenfilme anzugelichen. Die genaue Schichtstruktur ist in [Neu08] beschrieben.

Wie oben erwähnt bilden sich in einer CEO-Quantenpunktstruktur entlang der Schnittgeraden von jeweils zwei Quantenfilmen immer auch Quantendrähte. In diesem Kapitel werden Quantendrähte, die sich beispielsweise an der Kreuzung eines (001)- mit einem (110)-Quantenfilm bilden, als (001)-(110)-Quantendrähte bezeichnet.

Eine Mikrophotolumineszenz-Messung dieser Probe ist in Bild 8.9 gezeigt. Das obere Spektrum zeigt das Signal des (001)-Quantenfilms. Das zugehörige Flächenbild zeigt



**Bild 8.8:** Schematischer Aufbau der Quantenpunktprobe D070924A-1. Dargestellt ist nur der Bereich der T-förmigen Kreuzung der drei Quantenfilme.



**Bild 8.9:** Mikrophotolumineszenz-Messung der Probe D070924A-1 bei einer Anregungsleistung von  $0,9 \mu\text{W}$ . Dargestellt ist unten ein Spektrum vom Kreuzungspunkt der drei Quantenfilme und oben vom Ort des (001)-(110)-Quantendrahts in einiger Entfernung. Die Flächenscans der Probenoberfläche geben die räumliche Verteilung der jeweiligen Signale wieder. Die Stellen, an denen die Spektren aufgenommen wurden, sind durch einen weißen Kreis markiert. Der CEO-Quantenpunkt (QD) sticht durch ein räumlich und spektral sehr scharfes Signal hervor.

die räumliche Intensitätsverteilung dieses Peaks auf der (110)-Probenoberfläche. Die beiden überwachsenen Quantenfilme lassen sich bei dieser Messung weder spektral noch räumlich vom (001)-Quantenfilm unterscheiden, da sie eine sehr ähnliche Übergangsenergie aufweisen und nur in der Nähe der Kreuzung von beiden Seiten von einer Barriere umgeben sind. Im oberen Spektrum ist darüber hinaus sehr schwach das Signal des (001)-(110)-Quantendrahts zu sehen.

Das untere Spektrum stammt direkt vom Schnittpunkt der drei Quantenfilme. Zwischen 1,584 und 1,593 meV findet sich ein breites Signal, das durch viele schmalere Peaks überlagert wird. Das zugehörige Flächenbild zeigt, daß sich dieses Signal entlang des (001)-Quantenfilms erstreckt und somit vom (001)-(110)-Quantendraht stammt. Die schmaleren Peaks lassen sich auf natürliche Quantenpunkte, also an Grenzflächenfluktuationen lokalisierte Exzitonen (siehe Kapitel 2.5) zurückführen.

Im Spektrum sticht besonders ein scharfer Peak bei 1,5825 eV hervor, der offenbar das Signal eines CEO-Quantendrahtes dargestellt. Die folgenden Beobachtungen bestätigen diese Vermutung:

- Das Signal weist eine sehr kleine Halbwertsbreite von  $170 \mu\text{eV}$  auf. Derart schmale Linienbreiten sind nur durch diskrete Energieniveaus möglich, wie sie in null-dimensionalen Systemen auftreten. Das Signal ist hier durch die vergleichsweise hohe Anregungsleistung und das Auflösungsvermögen des Spektrometers verbreitert und in Wirklichkeit wesentlich schmäler (siehe folgender Abschnitt).
- Das QD-Signal geht genau vom Kreuzungspunkt der drei Quantenfilme aus, wie im entsprechenden Flächenbild zu sehen ist. In der untersuchten Umgebung ist kein weiteres vergleichbares Signal zu finden.
- Das Signal liegt energetisch deutlich unterhalb des Quantendrahtsignals. Diese Energiedifferenz ist die Einschlußenergie und wird im folgenden genauer diskutiert.
- Unterhalb des Quantenpunktsignals, das der Rekombination von Exzitonen entspricht, findet sich ein kleiner Peak, der als Elektron-Loch-Rekombination aus einem biexzitonischen Zustand identifiziert werden kann. Der energetische Abstand dieses biexzitonischen Signals liegt mit 2,1 meV im üblichen Bereich.
- Das Signal unterscheidet sich signifikant von den Signalen natürlicher Quantenpunkte (siehe Kapitel 2.5). Da diese zu ähnlich scharfen Peaks im Spektrum führen, ist es wichtig, sie von den CEO-Quantenpunktsignalen unterscheiden zu können. Auch in der hier betrachteten Probe finden sich Peaks von natürlichen Quantenpunkten knapp unterhalb der Quantendrahtsignale. Das Signal des CEO-Quantenpunkts ist jedoch im Unterschied zu diesen besonders stark, besonders

scharf, weist eine höhere Einschlußenergie auf und ist mit diesen Eigenschaften räumlich alleinstehend. Da dieses Signals zudem genau vom Ort der T-förmigen Kreuzung stammt, ist es sehr unwahrscheinlich, daß es sich hierbei um einen natürlichen Quantenpunkt handelt.

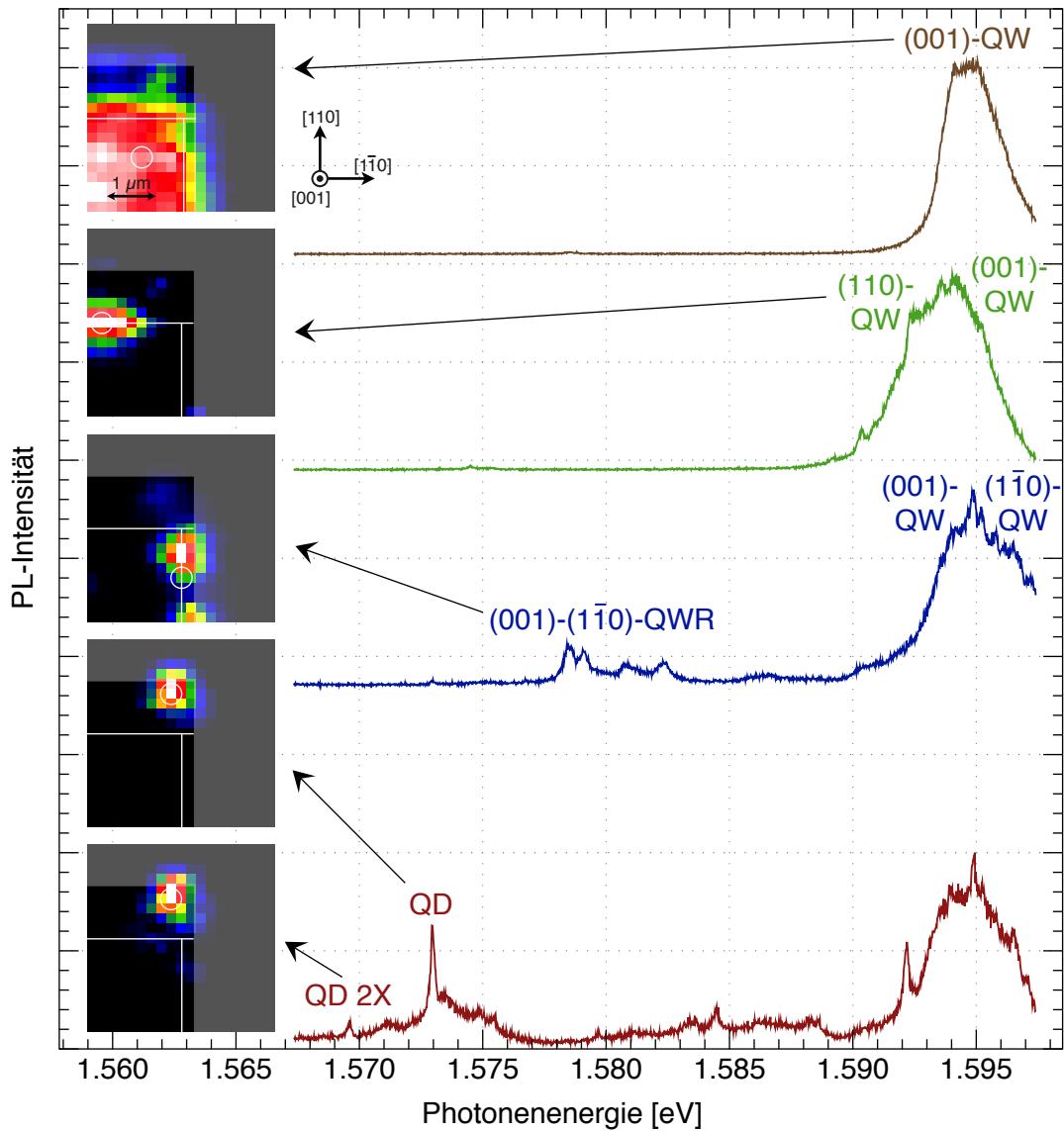
Zusammenfassend läßt sich also festhalten, daß es sich hier tatsächlich um das Signal eines CEO-Quantenpunkts handelt. Die Einschlußenergie läßt sich anhand der Messungen leider nicht genau bestimmten, da das Signal der angrenzenden Quantendrähte spektral stark fluktuiert und zudem von zahlreichen natürlichen Quantenpunkten überlagert ist. Der energetische Abstand zwischen dem Quantendraht- und Quantenpunktsignal liegt hier im Bereich von 2 bis 5,5 meV. Berücksichtigt man die Stokes-Verschiebung des Quantendrahtsignals, ergibt sich für den CEO-Quantenpunkt eine Einschlußenergie im Bereich von 3 bis 10 meV, was im Rahmen der begrenzten Meßgenauigkeit mit den Simulationen in Kapitel 6 und früheren Messungen in [Sch99] übereinstimmt.

## Probe mit mehreren (001)-Quantenfilmen

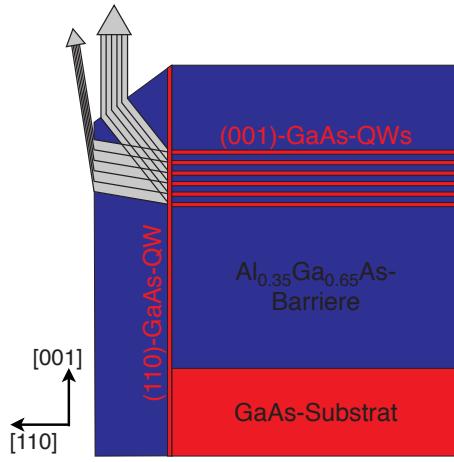
Desweiteren wurde eine Quantenpunktprobe (D071203B-12) erfolgreich hergestellt, bei der im ersten Wachstumsschritt (D071121A) nicht nur ein, sondern 22 gleichartige 7 nm breite Quantenfilme gewachsen wurden, die jeweils durch eine 30 nm dicke Barriere getrennt sind. Dadurch erhält man beim zweifachen Spalten und Überwachsen eine Kette aus 22 Quantenfilmen. Der Abstand von 30 nm ist hierbei groß genug, daß es zu keiner signifikanten Kopplung zwischen den Quantenpunkten kommt. Der Vorteil dieser Probenstruktur besteht in einem entsprechend stärkeren PL-Signal. Allerdings kann es bei Größenfluktuationen zu einer Verbreiterung oder Aufspaltung des Signals kommen.

Bei dieser Probe wurden im ersten Wachstumsschritt eine insgesamt 6  $\mu\text{m}$  dicke Barriere verwendet, um die später überwachsenen Quantenfilme in der PL auf einer größeren Fläche untersuchen zu können. Außerdem wurde die Dicke der überwachsenen Quantenfilme zur Anpassung der Energieniveaus auf 5,6 nm festgelegt. Ansonsten entspricht diese Probe der im vorigen Abschnitt vorgestellten Struktur. Der Aufbau der Probe ist wiederum detailliert in [Neu08] beschrieben.

Mikrophotolumineszenz-Messungen dieser Probe finden sich in Bild 8.10. Zu beachten ist, daß hier im Gegensatz zu Bild 8.9 die Sicht auf die (001)-Fläche dargestellt ist. Man erkennt, daß die Übergangsenergien alle drei Quantenfilme fast identisch sind. Auf dem zweiten und dritten Flächenbild ist zu sehen, daß die räumliche Verteilung der überwachsenen Quantenfilme und der entsprechenden Quantendrähte sehr unre-



**Bild 8.10:** Mikrophotolumineszenz-Messung der Quantenpunktprobe D071203B-12 bei einer Anregungsleistung von  $1,9 \mu\text{W}$ . Dargestellt sind vier Spektren von unterschiedlichen Orten der Probenoberfläche, in denen die Signale der Quantenfilme, der Quantendrähte und des Quantenpunkts deutlich werden. Die Flächenscans geben die räumliche Verteilung der jeweiligen Peaks wieder. Die Orte, an denen die Spektren aufgenommen wurden, sind durch einen weißen Kreis markiert. Durch Lichtbrechung an der schrägen Probenkante erscheinen die beiden Quantenpunkt-Signale gegenüber der T-Kreuzung um etwa  $1 \mu\text{m}$  versetzt.



**Bild 8.11:** Schematische Darstellung der Lichtbrechung an der Probenkante. Die überwachsene (110)-Schicht bildet an der Kante eine schräge Fläche. An dieser wird das Licht gebrochen, so daß die Quantenpunkte an einer anderen Position zu sein scheinen. Die strahlenoptische Beschreibung stellt in dieser Größenordnung nur ein vereinfachtes Modell dar.

gelmäßig ist. Dies deutet auf eine schlechte Wachstumsqualität hin und wird im folgenden Abschnitt genauer untersucht.

Das Quantenpunktssignal weist bei dieser Probe wiederum eine sehr geringe Halbwertsbreite von 0,18 meV sowie einen kleineren Biexzitonen-Peak im Abstand von etwa 3,5 meV auf. Die schmale Linienbreite ist hier erstaunlich, da eigentlich zu erwarten ist, daß die 22 Quantenpunkte sich aufgrund von Wachstumsfluktuationen leicht voneinander unterscheiden und so zu einer Verbreiterung des Signals führen, wie es beispielsweise bei früheren Messung an vergleichbaren Proben in [Sch99] beobachtet wurde. Die gemessene Linienbreite deutet darauf hin, daß die Probe entweder tatsächlich eine sehr gute Homogenität aufweist oder das Wachstum schlechter als erwartet verlaufen ist und nur einer oder wenige CEO-Quantenpunkte mit ausreichendem Einschlußpotential entstanden sind.

Darüber hinaus erstaunt zunächst, daß das Quantenpunktssignal sich nicht an der Position der T-förmigen Kreuzung befindet, sondern um etwa  $1\text{ }\mu\text{m}$  zum Rand der Probe hin versetzt ist. Dieses Verhalten läßt sich durch Lichtbrechung an der schrägen Probenkante erklären. Wie in den mikroskopischen Aufnahmen von CEO-Proben in Bild 2.8 und 9.3 zu sehen ist, wachsen die Schichten beim Überwachsen der Spaltfläche an den Kanten nicht parallel zur Wachstumsrichtung nach oben, sondern bilden einen Winkel von  $54^\circ$  zur Probenoberfläche. In Bild 8.11 ist eine solche Kante einer CEO-Probe schematisch dargestellt. An dieser abgeschrägten Kante kann das von den Quantenpunkten ausgehende Licht wie im Bild dargestellt gebrochen werden. Auf diese Weise scheint dieses Licht von einem anderen Ort auszugehen.

Diese Erklärung ist nur ein vereinfachtes Modell, da die Strahlenoptik bei derart kleinen Abmessungen an ihre Grenzen stößt. Eine genauere Beschreibung müßte die Verteilung des Wellenfeldes in der Probe berücksichtigen. Dennoch erscheint dieses

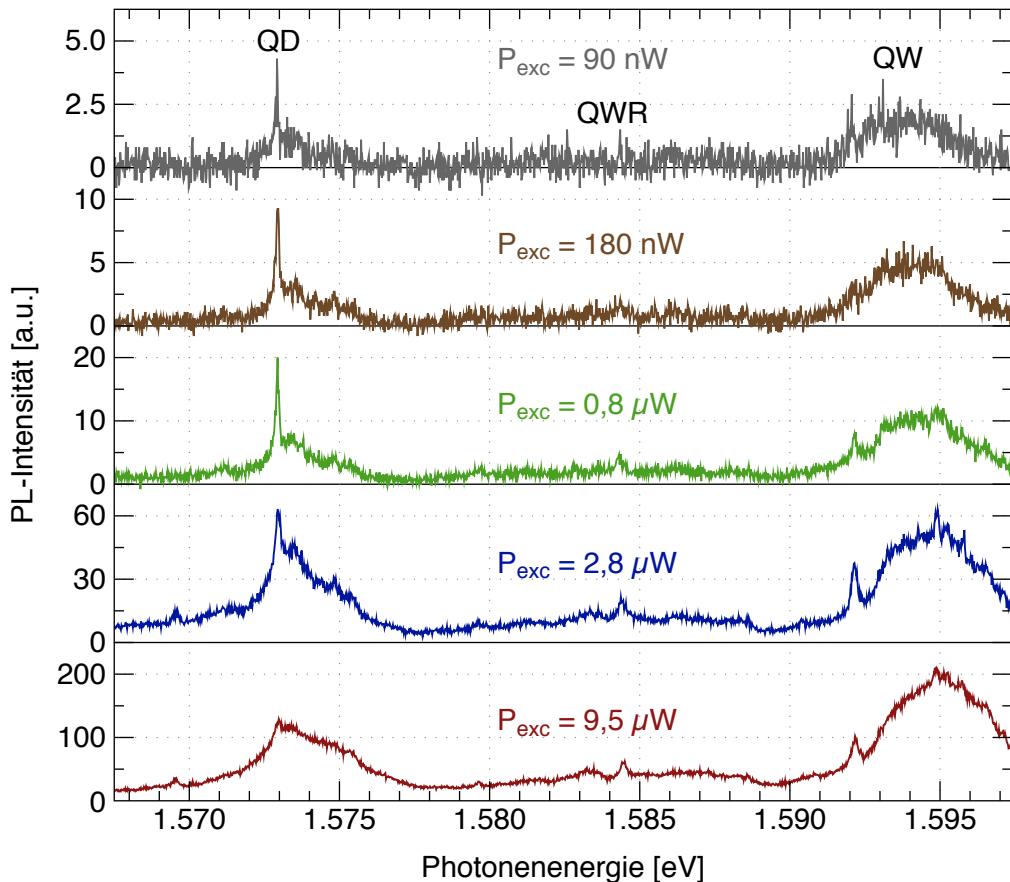
Modell als plausible Erklärung für die gemessene räumliche Verschiebung des Quantenpunktsignals. Auch bei weiteren Proben wurden ähnliche Verschiebungen oder verdoppelte Strukturen gemessen. Dieser Effekt tritt bei der Beobachtung der  $(1\bar{1}0)$ -Oberfläche wie beispielsweise im vorigen Abschnitt nicht auf, da beim CEO-Verfahren der zuletzt gewachsene  $(1\bar{1}0)$ -Quantenfilm in der Regel nur von einer relativ dünnen Barriere bedeckt wird.

Aus den gleichen Gründen wie im vorigen Abschnitt lässt sich auch bei dieser Probe schließen, daß es sich bei den identifizierten PL-Signalen tatsächlich um CEO-Quantenpunkte handelt. Die Einschlußenergie kann wiederum leider nicht genau bestimmt werden, da die angrenzenden Quantendrähte in der unmittelbaren Umgebung des Quantenpunkts im PL-Spektrum nicht klar zu identifizieren sind. Insbesondere der  $(110)$ - $(1\bar{1}0)$ -Quantendraht, der energetisch vermutlich dem Quantenpunktsignal am nächsten liegt, ist weder in Bild 8.10 noch in Messungen der anderen Probenoberflächen eindeutig zu erkennen. Die Gründe hierfür sind vermutlich in den bereits erwähnten Wachstumsfluktuationen zu finden. Die Einschlußenergie sollte auch bei dieser Probe zwischen 5 und 10 meV liegen.

Um die spezifischen Eigenschaften der nulldimensionalen Quantenpunkte weiter zu untersuchen, wurden leistungsabhängige Mikrophotolumineszenz-Messungen durchgeführt, die in Bild 8.12 gezeigt sind. Man erkennt, daß bei steigender Anregungsleistung die Emission aus den Quantenfilmen und Quantendrähten kontinuierlich zunimmt. Das Quantenpunktsignal nimmt anfänglich in gleichem Maße zu, sättigt dann jedoch ab etwa  $2 \mu\text{W}$  und geht ab  $10 \mu\text{W}$  in anderen Signalen unter. Dies ist darauf zurückzuführen, daß in den betrachteten Quantenpunkten die Anzahl der besetzbaren Zustände im Gegensatz zu höherdimensionalen Systemen auf 2 begrenzt ist, was der in Bild 2.4 skizzierten  $\delta$ -förmigen Zustandsdichte entspricht. Dieses Verhalten bestätigt also den nulldimensionalen Charakter der Quantenpunkte.

Etwa 3,5 meV unterhalb des Quantenpunktsignals findet sich ein kleinerer Peak, der erst bei Anregungsleistungen von mehr als  $2 \mu\text{W}$  hervortritt. Dieser lässt sich der Emission aus biexzitonischen Zuständen zuordnen, die allgemein eine quadratische Abhängigkeit von der Anregungsleistung aufweist und sich daher erst bei höheren Leistungen zeigt [Sch99].

Aus diesen Messungen läßt sich ferner entnehmen, daß die Halbwertsbreite des Quantendrahtsignals bei steigender Anregungsleistung kontinuierlich zunimmt. Bei 90 nW beträgt sie nur  $70 \mu\text{eV}$ , was dem Auflösungsvermögen des Spektrometers entspricht. Andererseits beträgt die Lebensdauer des exzitonischen QD-Grundzustands etwa 1 ns [Roe09] und somit die natürliche Linienbreite etwa  $1 \mu\text{eV}$ . Es ist also davon auszugehen, daß die tatsächliche Linienbreite hier noch deutlich schmäler als  $70 \mu\text{eV}$  ist.



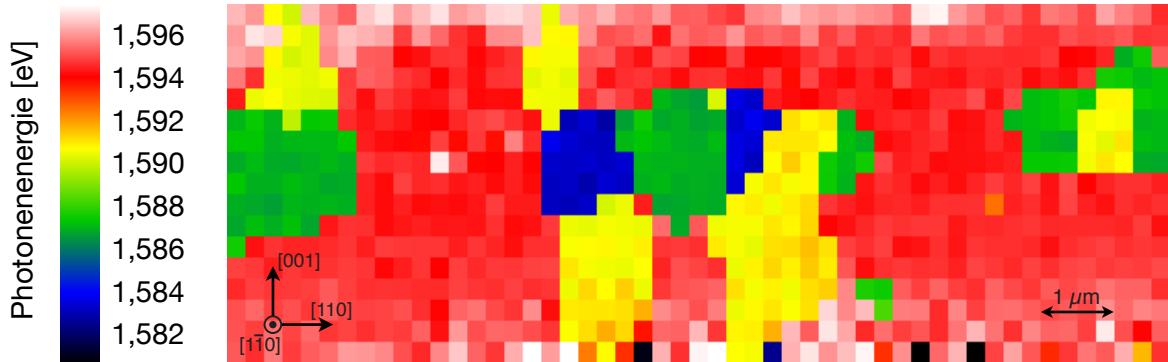
**Bild 8.12:** PL-Spektren der Quantenpunktprobe D071203B-12 bei verschiedenen Anregungsleistungen  $P_{exc}$ . Das Quantenpunktssignal (QD) sättigt bei steigender Anregungsleistung, während die Signale der Quantenfilme (QW) und Quantendrähte (QWR) kontinuierlich zunehmen.

### Fluktuationen beim (110)-Wachstum

Wie bereits erwähnt, zeigt sich bei dieser Probe eine sehr unregelmäßige räumliche Verteilung der überwachsenen Quantenfilme. Dies deutet auf Probleme beim MBE-Wachstum hin, zumal auch weitere Quantenpunktproben ähnliche Unregelmäßigkeiten aufweisen und nicht selten (110)- und (1 $\bar{1}$ 0)-Quantenfilme in der PL überhaupt nicht aufzufinden sind.

Um dies genauer zu untersuchen, wurde eine Mikrophotolumineszenz-Rasterung der (1 $\bar{1}$ 0)-Probenoberfläche durchgeführt. In Bild 8.13 ist diese Messung gezeigt. Für jeden Punkt dieser Fläche ist die jeweilige Position des Maximums im PL-Spektrum farblich dargestellt. Nach Bild 6.1 korreliert dies mit der Dicke des Quantenfilms am jeweiligen Ort.

Es zeigen sich deutliche Dickenfluktuationen des Quantenfilms. Diese bilden teras-



**Bild 8.13:** Grenzflächenfluktuationen des überwachsenen 5,6 nm (110)-GaAs-Quantenfilms der Quantenpunktprobe D071203B-12. Die Rasterung zeigt das Maximum des PL-Spektrum in Abhängigkeit vom Ort. Eine höhere Übergangsenergie entspricht einer kleineren Quantenfilmdicke an der jeweiligen Position.

senförmige Inseln mit einer lateralen Ausdehnung von einigen  $\mu\text{m}$ . Aus den Simulationen in Bild 6.1 ergibt sich, daß diese Inseln eine (gelb), zwei (grün) oder drei (blau) Monolagen dicker sind als der übrige Quantenfilm (rot). Die spektrale Linienbreite der PL-Signale beträgt nur 2,1 bis 2,5 meV und deutet darauf hin, daß die Grenzflächenfluktuationen innerhalb der einzelnen Bereiche sehr gering sind. Da diese glatten Grenzflächen durch das verwendete Annealing-Verfahren zustande kommen, liegt es nahe, daß auch die terassenförmigen Inseln eine Folge davon sind.

Für das Annealing-Verfahren muß die Probe auf 600 °C aufgeheizt werden, etwa 10 Minuten bei dieser Temperatur verbleiben und danach wieder auf die Wachstumstemperatur von unter 500 °C abgekühlt werden. Da längere Pausen beim Wachstum zu einem vermehrten Einschluß von Verunreinigungen führen, wurden diese Zeiten beim Wachstum der CEO-Quantenpunkte relativ knapp gewählt.

Beim nachträglichen Vergleich der Wachstumsparameter fiel auf, daß bei den oben vorgestellten Quantendrahtproben und bei der Probe zum Testen des Annealing-Verfahrens in Kapitel 7.5 diese Zeiten etwas großzügiger gewählt wurden. Dabei wurde zum einen das Annealing für 13 statt 10 Minuten durchgeführt und zum anderen nach dem Abkühlen beim Erreichen der Wachstumstemperatur weitere 5 Minuten gewartet, bevor die AlGaAs-Barriere aufgewachsen wurde. Bei diesen Proben waren in den PL-Messungen keine signifikanten Unregelmäßigkeiten der räumlichen Verteilung zu erkennen.

Es ist daher anzunehmen, daß die gemessenen Fluktuationen beim Wachstum der (110)- und (110)-Quantenfilme bei den Quantenpunktproben eine Folge von zu kurzen Zeiten beim Annealing-Verfahren sind. Beim zukünftigen Wachstum von CEO-Proben sollten daher die Zeiten für das Annealing und das danach folgende Abkühlen entspre-

chend größer gewählt werden.

## 8.5 Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden symmetrische, asymmetrische und verspannte T-förmige Quantendrähte sowie symmetrische Quantenpunkte hergestellt und charakterisiert.

Es ergaben sich experimentell ermittelte Übergangsenergien für symmetrische und asymmetrische Quantenfilme von bis zu 19,8 meV bzw. 51 meV. Diese Werte sind konsistent mit früheren Veröffentlichungen, allerdings wesentlich größer als entsprechende Simulationen. Diese Abweichungen lassen sich nur zum Teil durch verkleinerte Strukturgrößen aufgrund von Oberflächensegregation erklären und deuten darauf hin, daß die quantenmechanischen Vorgänge an der T-förmigen CEO-Kreuzung immer noch nicht vollständig verstanden sind.

Weiterhin wurden zwei Proben mit jeweils mehreren verspannten T-förmigen Quantendrähten erfolgreich hergestellt. Dabei ergaben sich Einschlußenergien von bis zu 36 meV, die zwar niedriger als bei den in [Sch05] vorgestellten rein spannungsinduzierten Quantendrähten sind, aber dennoch deutlich höher als bei vergleichbaren unverspannten Proben. Dies ist konsistent mit den entsprechenden Simulationen in Kapitel 6. Es wurde ferner bestätigt, daß bei verspannten Quantendrähten größere Strukturen zu höheren Einschlußenergien führen. Bei verspannten Quantendrähten sinkt die Einschlußenergie mit steigender Anregungsleistung, was durch die Abschirmung der piezoelektrischen Effekte bei höheren Ladungsträgerkonzentrationen erklärt werden kann.

Beim Wachstum von CEO-Quantenpunkten zeigten sich starke Fluktuationen der überwachsenen Quantenfilme, die, wie sich später ergab, vermutlich auf zu kurze Zeiten beim Annealing zurückzuführen sind. Dennoch konnten zwei symmetrische Quantenpunkt-Proben erfolgreich hergestellt werden. Es ergeben sich entsprechend scharfe Peaks im PL-Spektrum, deren Linienbreite dem Auflösungsvermögen des Spektrometers entspricht ( $70 \mu\text{eV}$ ) und die auf den nulldimensionalen Charakter der Quantenpunkte hinweisen. Die Einschlußenergie liegt in erwarteten Bereich, kann bei diesen Proben jedoch nicht genau bestimmt werden, da die PL-Signale der angrenzenden Quantendrähte nicht eindeutig zu identifizieren sind. Aufgrund der  $\delta$ -förmigen Zustandsdichte sättigen die Quantenpunkt-Signale bei Anregungsleistungen von mehr als  $2 \mu\text{W}$ . Anhand von weiteren charakteristischen Eigenschaften konnte ausgeschlossen werden, daß es sich bei den identifizierten Signalen um natürliche Quantenpunkte handelt.

# Kapitel 9

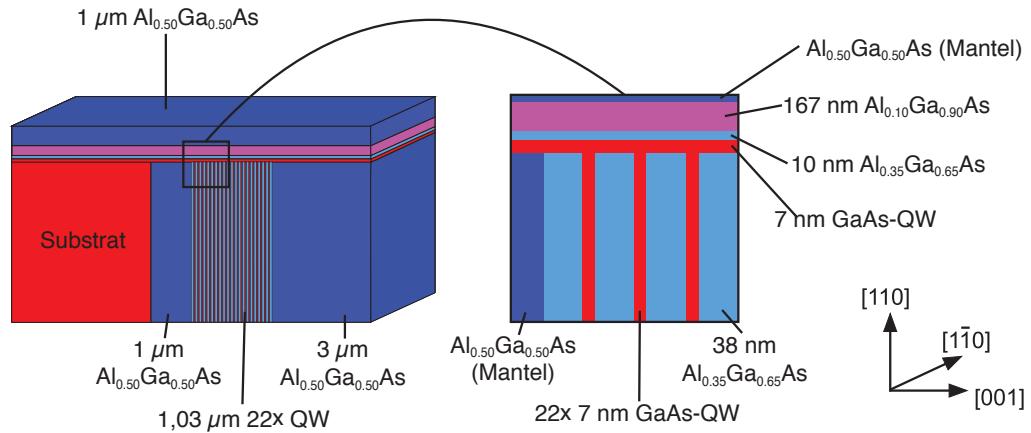
## Optisch gepumpte Quantendrahtlaser

In diesem Kapitel wird als konkrete Anwendung des CEO-Verfahrens die Realisierung von optisch gepumpten Quantendrahtlasern vorgestellt. Unter anderem wird durch einen Vergleich von zwei unterschiedlichen Proben gezeigt, wie sich eine höhere Einschlußenergie auf die Leistungsfähigkeit von Quantendrahtlasern auswirkt. Die Ergebnisse in diesem Kapitel sind in Zusammenarbeit mit Christoph Kamseder [Kam07] entstanden.

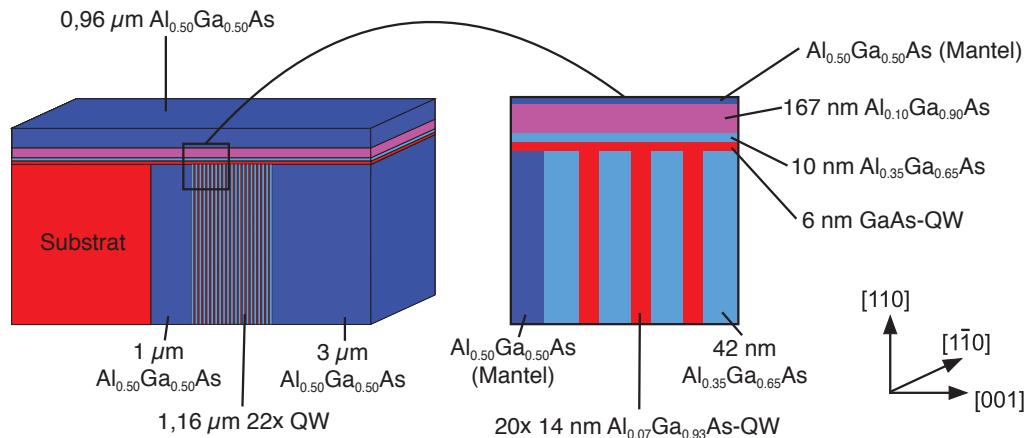
### 9.1 Quantendrahtlaser-Proben

Im Rahmen dieser Arbeit wurden zwei verschiedene Probenstrukturen hergestellt und miteinander verglichen. Die Probe D060831B-18 mit 22 symmetrischen  $7 \times 7 \text{ mm}^2$  Quantendrahten wurde entsprechend der Struktur in [Weg93] hergestellt und weist ein Einschlußpotential von  $E_c = 19,8 \text{ meV}$  auf. Die zweite Probe D060831A-27 wurde an die in [Aki03, Aki04] vorgestellte Struktur angelehnt. Sie besteht aus 20 asymmetrischen  $14 \times 6 \text{ mm}^2$  Quantendrahten, in denen die Energien durch 7 % Aluminium im (001)-Quantenfilm angeglichen wurden. Bei dieser Probe sind die Übergangsenergien von beiden Quantenfilmen praktisch gleich, so daß sich eine optimale Einschlußenergie von  $E_c = 51,0 \text{ meV}$  ergibt. In [Aki03, Aki04] ergab sich hingegen aufgrund schlechter Anpassung der Quantenfilmenergien nur eine Einschlußenergie von 21 meV. Im Folgenden wird die Probe D060831B-18 auch verkürzt als symmetrische Probe und die Probe D060831A-27 als asymmetrische Probe bezeichnet.

Der Aufbau der beiden Proben ist in Bild 9.1 und 9.2 schematisch dargestellt. Die T-förmigen Quantendrahte sind in eine ebenfalls T-förmige Wellenleiterstruktur eingebettet. Auf diese Weise können sowohl die Quantendrahte als auch der Wellenlei-



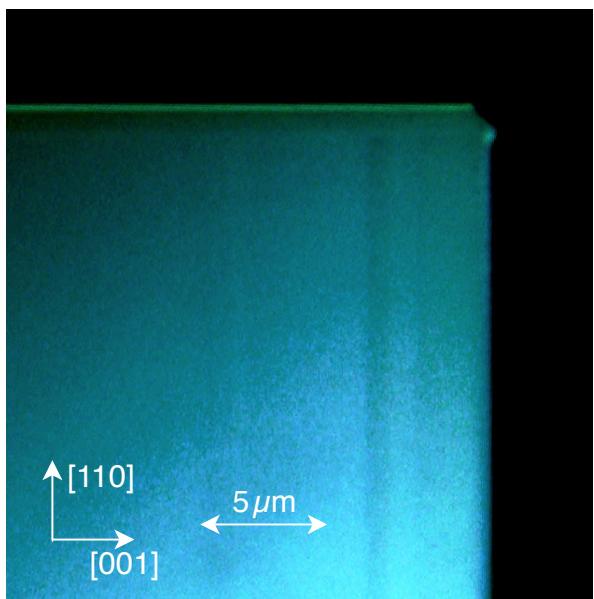
**Bild 9.1:** Schematischer Aufbau der symmetrischen Probe D060831B-18. Die GaAs-Quantenfilme sind rot dargestellt. Die hellblaue gekennzeichneten  $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ -Schichten stellen die Barrieren für die Ladungsträger dar. Sie bilden zusammen mit der violett dargestellten  $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ -Schicht den Wellenleiter. Der dunkelblaue Mantel des Wellenleiters besteht aus  $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ .



**Bild 9.2:** Schematischer Aufbau der asymmetrischen Probe D060831A-27. Die Wellenleiterstruktur ist im Wesentlichen identisch zur in Bild 9.1 gezeigten symmetrischen Probe.

ter durch das CEO-Verfahren in einem Arbeitsgang hergestellt werden. Die räumliche Verteilung der Wellenfunktion und der optischen Mode ist in Bild 2.17 schematisch dargestellt.

Nach dem Wachstum wurden die Probenstücke in schmale Streifen gespalten, so daß sich 0,6 mm lange Resonatoren ergeben. Die dabei freigelegten  $(1\bar{1}0)$ -Spaltflächen (hier auch Facetten genannt) liegen senkrecht zu den Quantendrähten und bilden die Endflächen des Resonators. Die Proben wurden zunächst mit unvergüteten Facetten untersucht und später mit Gold beschichtet.



**Bild 9.3:** Lichtmikroskopische Aufnahme der (110)-Facette der asymmetrischen Quantendrahtlaserprobe D060831A-27. Dieses Photo hat die gleiche Orientierung wie das entsprechende Probenschema in Bild 9.2. Der Kontrast des Bildes wurde verstärkt. Die aluminiumhaltigen Schichten oxidieren an der Luft und bilden daher einen schwachen Kontrast zum GaAs-Substrat. Bei Überwachsen der Spaltfläche wächst die Probe an den Kanten nicht parallel zu den Seitenflächen weiter, sondern es bildet sich eine schräge Kante. Diese ist an der Ecke der Probe mit einer ebenfalls typischen „Nase“ zu sehen.

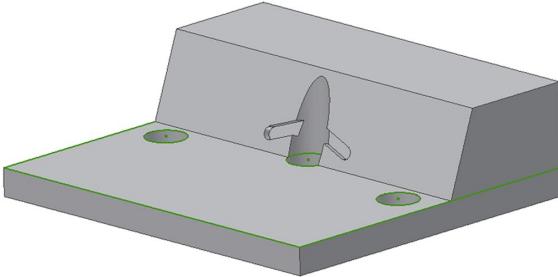
In Bild 9.3 ist ein Mikroskopaufnahme der (110)-Facette gezeigt. Die aluminiumhaltigen Schichten oxidieren an der Luft und erscheinen daher auf diesem Photo dunkler. Der in Bild 9.1 schematisch dargestellte Aufbau der Probe läßt sich hier schwach wiedererkennen.

## Vergütung der Endflächen

Die Endflächen des Resonators haben bei unvergüteten Proben eine Reflektivität von etwa 0,3. Nach Gleichung (2.46) läßt sich die Laserschwelle durch eine höhere Reflektivität deutlich reduzieren. Daher wurden beide untersuchten Proben an jeweils einer Endfläche vergütet. Dazu wurde in der lehrstuhleigenen Aufdampfanlage im Vakuum bei einem Druck von  $1,4 \cdot 10^{-6}$  Torr und einer Temperatur von 135 °C über einen Zeitraum von 2,5 Minuten eine dünne Schicht Gold auf diese Fläche aufgedampft, wodurch dessen Reflektivität auf etwa 98 % erhöht wurde.

Die jeweils andere Endfläche wurde zur Auskopplung der Laserstrahlung unvergütet gelassen. Eine Vergütung dieser Fläche wäre ebenso von Vorteil, jedoch müßte man hier darauf achten, daß die Transmission nicht zu klein und so der ausgekoppelte Strahl zu schwach wird. Da mit der hier verwendeten Anlage die Messung der Schichtdichte während des Aufdampfens nur optisch mit bloßem Auge möglich ist, wurde darauf verzichtet.

Da der Quantendrahtlaser durch optische Anregung auf die (110)-Spaltfläche gepumpt werden soll, ist es wichtig, daß beim Aufdampfen kein Gold auf diese Fläche gelangt. Daher wurden die Proben so von schräg hinten bedampft, daß das verdampfte Gold vor allem auf die Endfläche des Resonator trifft und ansonsten höchstens noch



**Bild 9.4:** Aufdampfhalter für das Beschichten der (110)-Facette mit Gold. In der Aufdampfanlage strömt das verdampfte Gold durch die Öffnung in der Mitte des Halters nach oben. Die Probenstücke werden in die schmalen Vertiefungen links und rechts davon gesetzt. Die Geometrie des Halters stellt sicher, daß kein Gold auf die (110)-Spaltfläche der Proben gelangt (aus [Kam07]).

auf die Rückseite des Substrats. Hierzu wurde ein spezieller Probenhalter mit der entsprechenden Geometrie für die Aufdampfanlage konstruiert (Bild 9.4).

## Meßverfahren

Photolumineszenz-Messungen beider Proben wurden bereits in Bild 8.1 und 8.2 vorgestellt. Die Proben waren im Kryostat stets so eingebaut, daß die Emission parallel zu den Quantendrähten, also in [110]-Richtung gemessen wurde. Erste Versuche, die Quantendrahtlaser durch optische Anregung in der gleichen Richtung zu pumpen, ergaben keine brauchbaren Ergebnisse (siehe Abschnitt 9.3). Daher wurde wie in Kapitel 5.2 beschrieben der Versuchsaufbau so modifiziert, daß die Quantendrähte von der Seite, also in [110]- oder [001]-Richtung angeregt werden. Dabei wird der Laserstrahl mithilfe einer Zylinderlinse auf einen schmalen Streifen abgebildet, so daß die Quantendrähte auf der gesamten Länge beleuchtet werden. Die Justage ist bei dieser Anordnung relativ schwierig, da nicht alle verwendeten mechanischen Teile die erforderliche Positioniergenauigkeit aufweisen. Daher ist auch die gemessene Emissionsleistung der Quantendrahtlaser zwischen verschiedenen Tagen wegen unterschiedlicher Justage nicht ohne weiteres vergleichbar.

Mit der verwendeten Anordnung läßt sich eine Anregungsleistung von bis zu 0,35 W auf der Probe erreichen. Aufgrund der starken Fokussierung entspricht dies einer Leistungsdichte von  $58 \text{ kW/cm}^2$ . Es ist daher davon auszugehen, daß durch eine kontinuierliche Anregung in dieser Größenordnung die Probe signifikant erwärmt wird. Diese Erwärmung ist jedoch nicht einfach zu messen. Wie bereits in Kapitel 5.1 erwähnt wurde, befindet sich der im Kryostat eingebaute Temperatursensor weiter unten im Kühlfinger und kann so die lokale Erwärmung in der Probe am oberen Ende kaum detektieren. Immerhin steigt die so gemessene Temperatur in Abhängigkeit von der Anregungsleistung um bis zu 0,9 K, was ein Hinweis darauf ist, daß die tatsächliche Erwärmung beträchtlich ist. Eine bessere Messung der Erwärmung ergibt sich aus der

Verschiebung der Emissionswellenlänge des QWR-Lasers, die sich mithilfe der Varshni-Formel (3.32) in eine Temperaturerhöhung umrechnen lässt. Dieses Verfahren ist allerdings relativ ungenau, da zum einen die Wellenlänge für tiefe Temperaturen nur wenig von der Temperatur abhängt (siehe Bild 7.18) und zum anderen die Emissionswellenlänge auch durch weitere Faktoren bestimmt ist, die einen Einfluß auf das Verstärkungsspektrum haben.

Die Erwärmung der Probe lässt sich durch Verwendung eines Lichtzerhackers (engl.: *chopper*) unterdrücken, der die Strahlung des Anregungslasers in kurze Pulse unterteilt. Ist die Dauer der einzelnen Pulse lang im Vergleich zur Einschwingzeit des QWR-Lasers (typ. 10 ns), zeigt dieser während eines Pulses praktisch das gleiche Emissionsverhalten wie bei kontinuierlicher Anregung. Ist andererseits das Tastverhältnis und damit die zeitlich gemittelte Anregungsleistung klein genug, lässt sich die Temperaturerhöhung durch die Anregung wirksam unterdrücken.

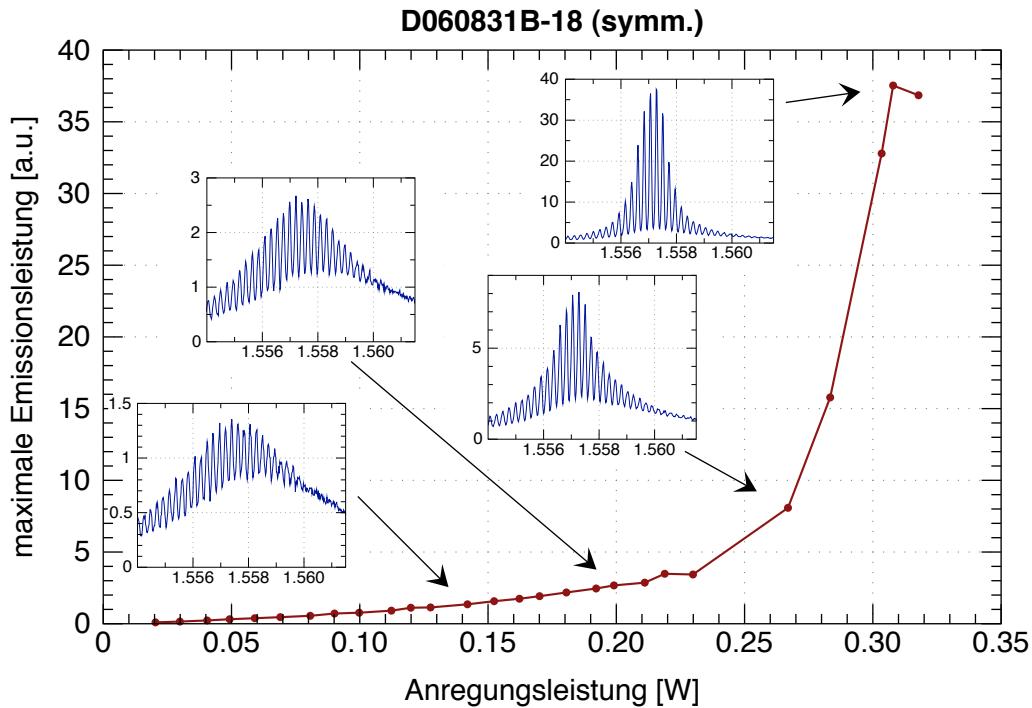
Im Folgenden wird zunächst die Lasertätigkeit der untersuchten Proben allgemein vorgestellt und danach die Abhängigkeit der Emission von verschiedenen Parametern untersucht. Bei den einzelnen Messungen sind jeweils die Anregungswellenlänge  $\lambda_{exc}$ , die Anregungsleistung  $P_{exc}$ , die nominelle Kryostattemperatur  $T$ , die Chopperfrequenz  $f_{Chp}$  und das Tastverhältnis des Choppers  $DC_{Chp}$  angegeben.

## 9.2 Lasertätigkeit

Bei beiden untersuchten Proben konnte Lichtverstärkung beobachtet werden, die Laserschwelle konnte jedoch nur bei der asymmetrischen Probe erreicht werden. Zum Überschreiten der Laserschwelle ist es notwendig, daß das Licht bei einem kompletten Umlauf durch den Resonator inklusive beider Endspiegel verstärkt wird. Lichtverstärkung hingegen tritt bereits dann ein, wenn die optische Welle bei einem Durchlauf durch das Lasermedium ohne Resonator verstärkt wird, also die modale Verstärkung  $g > 0$  ist. Die Hakki-Paoli-Methode nach Gleichung (2.47) ergibt für die hier betrachteten vergüteten Proben, daß Lichtverstärkung stattfindet, wenn das Kontrastverhältnis der Fabry-Perot-Modulation  $p_{max}/p_{min} > 11,35$  ist.

In Bild 9.5 und 9.6 ist für beide vergüteten Proben die gemessene Emissionsleistung in Abhängigkeit von der Anregungsleistung dargestellt. Außerdem sind für einige ausgewählte Leistungen die entsprechenden Emissionsspektren eingezeichnet.

Bei der symmetrischen Probe in Bild 9.5 weist das Emissionsspektrum auch bei der größten gemessenen Anregungsleistung noch viele spektrale Moden auf. Dies zeigt, daß die Laserschwelle noch nicht erreicht wird. Lichtverstärkung findet hier ab einer Anregungsleistung von etwa 0,30 W statt. Die Emissionsleistung weist auch darunter



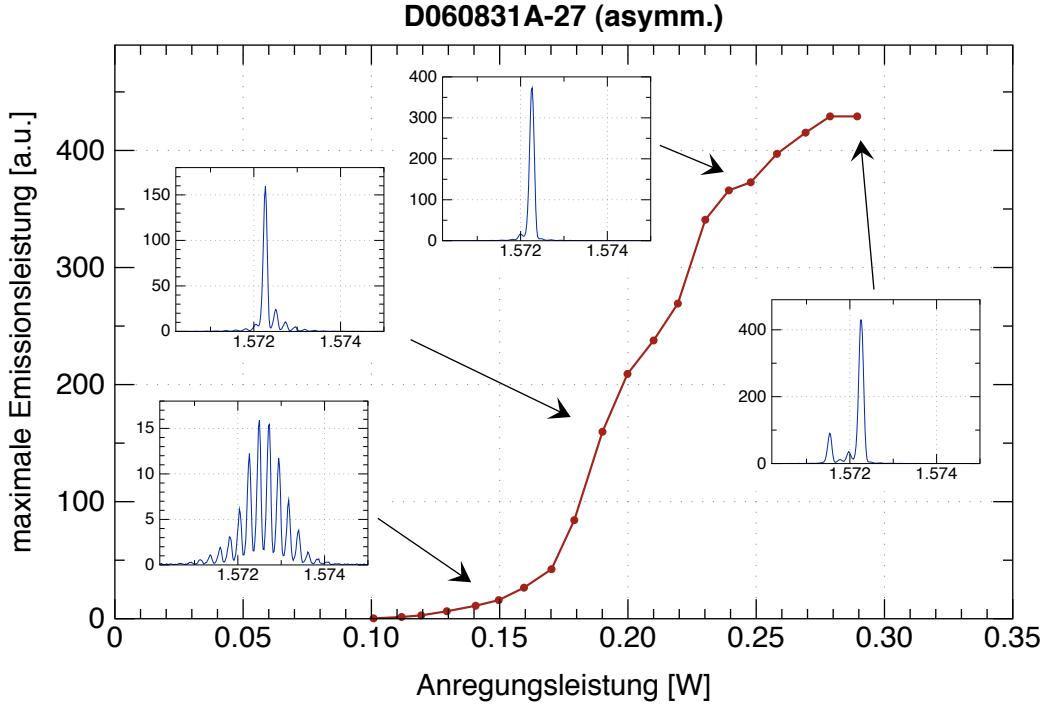
**Bild 9.5:** Maximale Emissionsleistung in Abhängigkeit von der Anregungsleistung für die vergütete symmetrische Probe mit Anregung in [110]-Richtung,  $\lambda_{exc} = 773 \text{ nm}$ ,  $T = 5, 3 \text{ K}$ ,  $f_{Chp} = 400 \text{ Hz}$  und  $DC_{Chp} = 4, 4 \%$ . Für einige Punkte sind die entsprechenden Emissionspektren dargestellt. Die Einheiten der Emissionsleistung sind nur innerhalb dieser Abbildung genau vergleichbar. Die Laserschwelle wird nicht erreicht.

den für stimuliertes Emission typischen superlinearen Anstieg auf.

Bei der asymmetrischen Probe setzt die Lichtverstärkung bei einer Anregungsleistung von 0,120 W und der Laserbetrieb bei 0,165 W ein. Bei weiterer Erhöhung der Anregungsleistung setzt sich schnell eine einzelne Mode gegenüber den anderen durch. Ab etwa 0,28 W verteilt sich die Laseremission auf zwei Moden.

Es zeigt sich also bei der asymmetrischen Probe gegenüber der symmetrischen eine deutlich kleinere Laserschwelle. Da fast alle Parameter der Geometrie und Zusammensetzung der Probe einen Einfluß auf die Laserschwelle haben, ist es schwierig, hierfür einen klaren Grund zu ermitteln. Als wahrscheinlichste Ursache kommt in Betracht, daß durch die größere Einschlußenergie und der damit verbundenen höheren Exzitonenbindungsenergie der räumliche Überlapp der Elektron- und Loch-Wellenfunktionen vergrößert wird, was nach Fermis Goldener Regel (2.15) zu effizienteren optischen Übergängen führt.

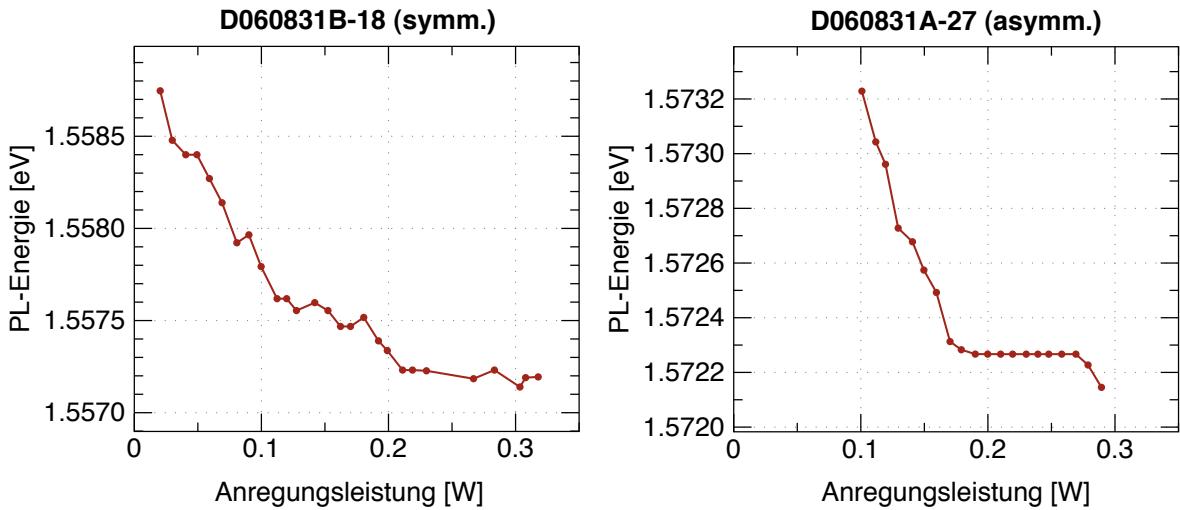
In Bild 9.7 ist für beide Proben die Abhängigkeit des Maximums im Emissionsspektrum von der Anregungswellenlänge dargestellt. Bei beiden Proben zeigt sich zunächst



**Bild 9.6:** Maximale Emissionsleistung in Abhängigkeit von der Anregungsleistung für die vergütete asymmetrische Probe mit Anregung in [110]-Richtung,  $\lambda_{exc} = 755$  nm,  $T = 8, 3$  K,  $f_{Chp} = 98$  Hz und  $DC_{Chp} = 17, 8\%$ . Für einige Punkte sind die entsprechenden Emissionspektren dargestellt. Die Einheiten der Emissionsleistung sind nur innerhalb dieser Abbildung genau vergleichbar. Die Laserschwelle liegt bei 0,165 W.

eine stetige Abnahme der Emissionsenergie. Bei der symmetrischen Probe scheint sich diese bei höheren Anregungsleistungen auf einen Wert zu stabilisieren, der etwa 4 meV unterhalb des Quantendraht-Signals der Photolumineszenzmessung (Bild 8.1) liegt. Bei der asymmetrischen Probe zeigt sich oberhalb der Laserschwelle in einem weiten Bereich ein stabiler Laserbetrieb auf einer einzelnen spektralen Mode. Die Photonenergie der Laseremission liegt hier ebenfalls 4 meV unterhalb des PL-Quantendraht-Signals (Bild 8.2).

Dieses Verhalten lässt sich wie in [Aki04] dadurch erklären, daß hierbei keine Rekombination von freien Exzitonen stattfindet, sondern der Laserübergang aufgrund der hohen Anregungsdichte eine Rekombination aus einem Elektron-Loch-Plasma darstellt. Offenbar wird hier die Mott-Dichte überschritten, so daß die Bandlücken-Renormalisierung nicht nur den Wegfall der Exzitonen-Bindungsenergie ausgleicht, sondern darüber hinaus zu einer weiteren Verringerung der Bandlücke (engl.: *band gap shrinkage*) führt. Diese Verringerung nimmt mit steigender Ladungsträgerkonzentration und so mit steigender Anregungsintensität zu. Oberhalb der Laserschwelle rekombinieren

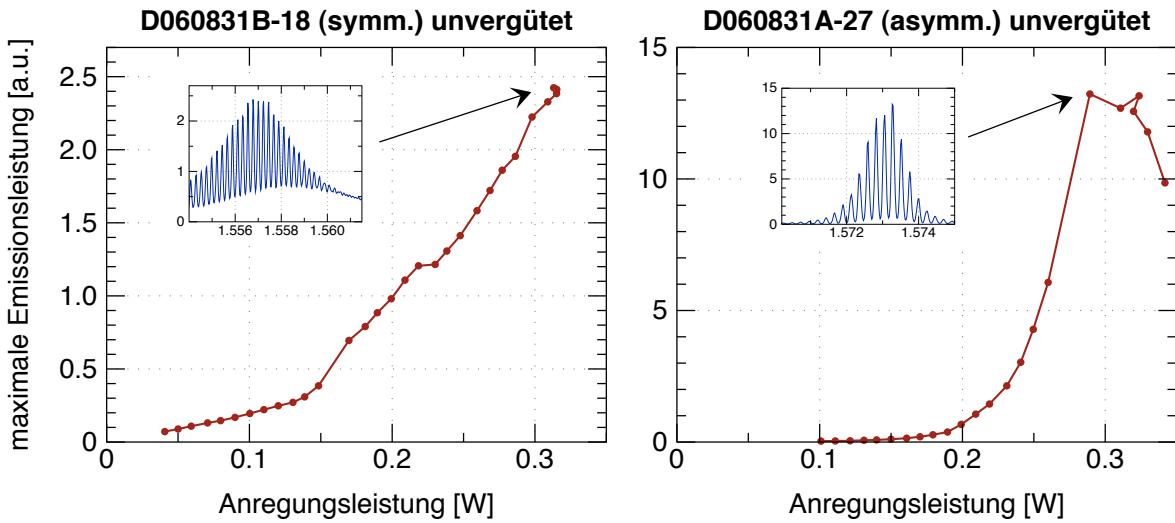


**Bild 9.7:** Photonenergie des Emissionsmaximums in Abhängigkeit von der Anregungsleistung für beide gemessenen Proben. Diese Graphen basieren auf den gleichen Messungen wie Bild 9.5 und 9.6.

allerdings die erzeugten Elektronen und Löcher wieder sehr schnell durch stimulierte Emission. Daher nimmt die Bandlücke bei steigender Anregungsleistung im Laserbetrieb kaum weiter ab und die emittierte Mode ist in weiten Bereichen stabil.

Die in [Aki04] beschriebene Probe weist eine vergleichbare Verschiebung der Emissionsenergie gegenüber der PL-Messung um 5 meV auf. Bei der in [Weg93] vorgestellten Probe hingegen stimmen die Energien der Laseremission und des Quantendraht-PL-Signals gut überein, was auf exzitonische Rekombination hinweist. Eine zufriedenstellende Erklärung für dieses unterschiedliche Verhalten konnte bislang nicht gefunden werden.

Als alternative Erklärung könnte diese Verschiebung der Emissionsenergie auch in einer Verringerung der Bandlücke begründet liegen, die durch eine Temperaturerhöhung infolge der starken optischen Anregung verursacht wird. Wie aus Bild 8.3 hervorgeht, ließe sich die gemessene Energieverschiebung von 4 meV durch eine Temperaturerhöhung von etwa 50 K erklären. Zwar wurden sowohl die Messungen in [Aki04] als auch in dieser Arbeit mit einem Chopper durchgeführt, um eine Erwärmung der Probe zu unterdrücken. Da jedoch die Wärmeleitung im Kryostat noch nicht ausreichend untersucht wurde, lässt nicht abschließend klären, welche Temperatur die Quantendrähte bei der Lasertätigkeit tatsächlich aufweisen. Der Einfluss des Choppers wird in Abschnitt 9.4 genauer untersucht. Mit dieser Hypothese ließe sich auch begründen, warum die Energieverschiebung bei der in [Weg93] beschriebenen Probe nicht auftritt: diese Probe befand sich im Gegensatz zu den anderen Proben während der Messungen



**Bild 9.8:** Maximale Emissionsleistung in Abhängigkeit von der Anregungsleistung für beide unvergüteten Proben mit Anregung in [110]-Richtung (D060831B-18:  $\lambda_{exc} = 773,6\text{ nm}$ ,  $T = 5,1\text{ K}$ ,  $f_{Chp} = 24\text{ Hz}$  und  $DC_{Chp} = 14\%$ , D060831A-27:  $\lambda_{exc} = 754\text{ nm}$ ,  $T = 6,4\text{ K}$ ,  $f_{Chp} = 300\text{ Hz}$  und  $DC_{Chp} = 14\%$ ). Für die jeweils höchste Emissionsleistung sind die entsprechenden Emissionsspektren eingezeichnet. Aufgrund unterschiedlicher Justage sind die Einheiten der Emissionsleistung gegenüber Bild 9.5 bzw. 9.6 nur grob vergleichbar.

in flüssigem Helium, wodurch eine wesentlich bessere Kühlwirkung erreicht und somit die Temperatur auch bei starker Einstrahlung nicht signifikant erhöht wird. Allerdings wird auf diese Weise nicht plausibel, warum die Emissionsenergie bei steigender Anregungsleistung erst stark abnimmt und sich dann oberhalb der Laserschwelle nur noch wenig ändert.

Die gemessene Rotverschiebung der Emissionsenergie könnte durchaus auch eine Kombination von beiden Erklärungsmöglichkeiten sein. Um die tatsächliche Ursache zu ermitteln, müßte man die Temperatur der Quantendrähte beim Laserbetrieb genauer bestimmen. Dies könnte experimentell durch eine hochauflösende Infrarot-Wärmebildkamera oder theoretisch durch Simulation des Wärmeflusses im Kryostaten geschehen.

## Einfluß der Vergütung

In Bild 9.8 sind Messungen der Emissionsleistung für beide Proben vor der Vergütung gezeigt. Da wie erwähnt die Justage des Anregungs- und Detektionsstrahls an unterschiedlichen Tagen nicht genau reproduzierbar war, sind die hier gemessenen Emissionsleistungen nur grob mit denen in Bild 9.5 bzw. 9.6 vergleichbar. Es zeigt sich bei den vergüteten Proben eine etwa 50- bis 100-fach höhere Leistung als bei den un-

vergüteten Proben. Ohne Vergütung bleibt die symmetrische Probe weit unterhalb der Laserschwelle. Die unvergütete asymmetrische Probe kommt der Laserschwelle bei einer Anregungsleistung von 290 mW sehr nahe, bei höheren Leistungen sinkt die Emission jedoch wieder ab. Insgesamt führt die Beschichtung einer Endfläche des Resonators also zu einer deutlichen Leistungssteigerung und Verringerung der Laserschwelle. Auf die modale Verstärkung  $g$  im Lasermedium hat die Vergütung der Endspiegel erwartungsgemäß keinen signifikanten Einfluß.

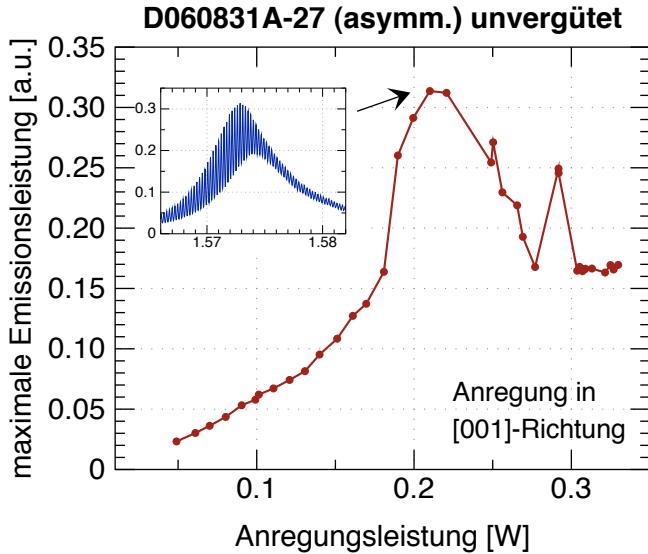
## 9.3 Variation der Anregungsparameter

Die optische Anregung von Quantendrahtlasern kann grundsätzlich in die Zustände der angrenzenden Quantenfilme oder in angeregte Zustände des Quantendrahts erfolgen. Die Anregung in den tiefsten Zustand des Quantendrahts ist hingegen nicht sinnvoll, da in einem Zwei-Niveau-System mit optischer Anregung allgemein keine Besetzungsinversion erzeugt werden kann. Aus den in Bild 2.11 schematisch dargestellten Absorptionsspektren geht hervor, daß der Absorptionskoeffizient für exzitonische Zustände am größten ist. Somit ist die Anregung des Quantendrahtlasers durch resonante Absorption in diese Zustände besonders effizient.

Grundsätzlich kann der Quantendrahlaser von vier verschiedenen Seiten angeregt werden: in der [001]-Richtung (auf die Waferoberfläche), in der [110]-Richtung (auf die Spaltfläche) oder in der [1̄10]- bzw. [1̄10]-Richtung (auf die Facette). Die Anregung auf die Facette wurde an einer älteren Probe untersucht, allerdings konnte dabei kein Laserbetrieb erreicht werden. Einerseits ist diese Richtung der Anregung offenbar weniger effizient, andererseits stand aber auch nicht genug Anregungsleistung zu Verfügung, da der verwendete Versuchsaufbau zur konfokalen Mikroskopie nicht auf hohe Leistungen optimiert ist. Daher wurde für alle folgenden Messungen die Anregung von der Seite wie in Kapitel 5.2 beschrieben verwendet. Auf diese Weise waren Anregungsleistungen von bis zu 0,35 W auf der Probe möglich (bei optimaler Justage des Titan-Saphir-Lasers in seltenen Fällen auch bis zu 0,5 W).

Bei den bisher vorgestellten Messungen wurde die Laserprobe in der [110]-Richtung angeregt. In Bild 9.9 ist zum Vergleich dazu eine Messung der Emissionsleistung bei Anregung in der [001]-Richtung zu sehen. Im Vergleich zu Bild 9.8 rechts ergibt sich bei dieser Anregungsrichtung eine etwa  $40\times$  schwächere Emissionsleistung und ein wesentlich breiteres Emissionsspektrum. Für alle weiteren Messungen wurde daher die Anregung in der [110]-Richtung gewählt.

Die Polarisationsrichtung der Anregungsstrahlung bestimmt, ob besser in exzitonische Zustände mit schweren oder leichten Löchern angeregt werden kann (siehe Aus-



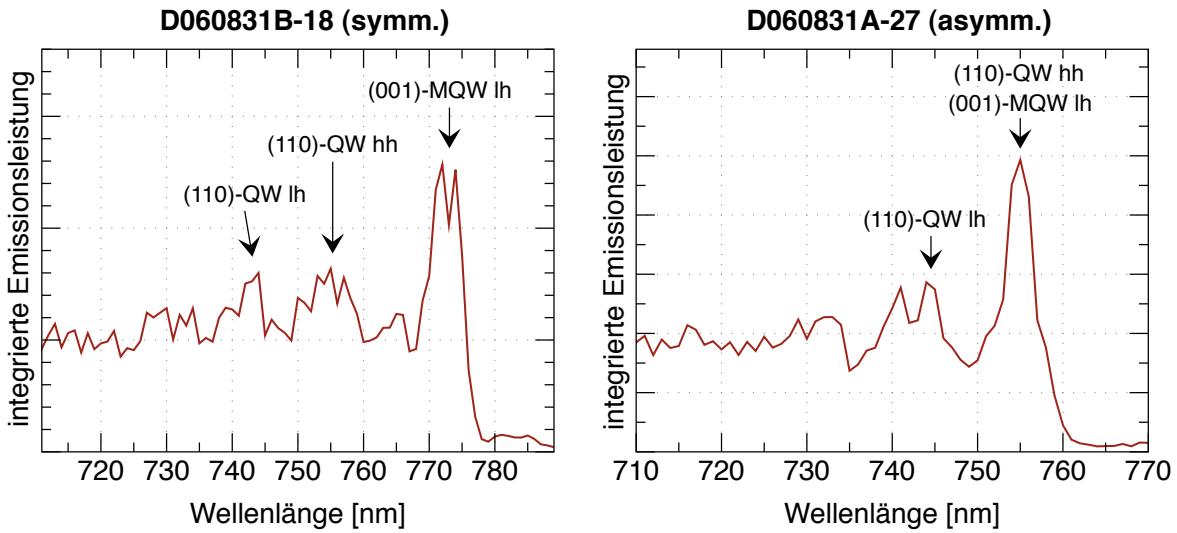
**Bild 9.9:** Maximale Emissionsleistung in Abhängigkeit von der Anregungsleistung bei Anregung in der [001]-Richtung für die asymmetrische unvergütete Probe mit  $\lambda_{exc} = 756 \text{ nm}$ ,  $T = 6, 7 \text{ K}$ ,  $f_{Chp} = 200 \text{ Hz}$  und  $DC_{Chp} = 14\%$ ). Für die größte erreichte Leistung ist das entsprechende Emissionsspektrum eingezeichnet. Aufgrund unterschiedlicher Justage sind die Einheiten der Emissionsleistung gegenüber Bild 9.8 rechts nur grob vergleichbar.

wahlregeln in Tabelle 2.1). Da diese unterschiedliche Übergangsenergien aufweisen, sind die zur Anregung der Quantendrahtlaser optimale Wellenlänge und Polarisationsrichtung miteinander verknüpft. Bei den hier vorgestellten Messungen wurde eine Polarisationsrichtung senkrecht zur (001)-Fläche der Probe gewählt. Dies entspricht bei dem verwendeten Versuchsaufbau der Polarisationsrichtung des Titan-Saphir-Lasers, so daß auf einen zusätzlichen Polarisationsdreher verzichtet werden kann, der sonst bis zu 20 % der Anregungsleistung schlucken würde.

In Bild 9.10 ist eine Messung der Emissionsleistung der Quantendrähte in Abhängigkeit von der Anregungswellenlänge für beide Proben dargestellt. Es zeigt sich, daß die beste Anregungswellenlänge bei 773 nm bzw. 755 nm liegt. Ein Vergleich mit PL-Messungen und Simulationen ergibt, daß diese Wellenlänge jeweils dem exzitonischen Elektron-Leichtloch-Übergang im (001)-Mehrfach-Quantenfilm entspricht. Da diese Messung ein Absorptionsspektrum darstellt, sind die Signale gegenüber den PL-Messungen um 2 bis 3 meV Stokes-verschoben. Bei einer Drehung der Polarisationsrichtung um 90° fällt dieses Signal auf etwa 25 % ab, was mit den Auswahlregeln für leichte Löcher übereinstimmt. Eine Anregung von schweren Löchern in diesem Quantenfilm ist mit der gewählten Polarisationsrichtung durch die Auswahlregeln verboten.

Eine Anregung in exzitonische Zustände des überwachsenen (110)-Quantenfilms ist weniger effizient und führt zu einer etwa halbierten Emissionsleistung. Dies läßt sich darauf zurückführen, daß in den untersuchten Proben 20 bzw. 22 (001)-Quantenfilme, aber jeweils nur ein (110)-Quantenfilm vorhanden sind.

Bei der asymmetrischen Probe fallen die Übergangsenergien für Exzitonen mit leichten Löchern im (001)-Quantenfilm und solche mit schweren Löchern im (110)-Quantenfilm zufälligerweise zusammen, da die Quantenfilme energetisch nahe beiein-

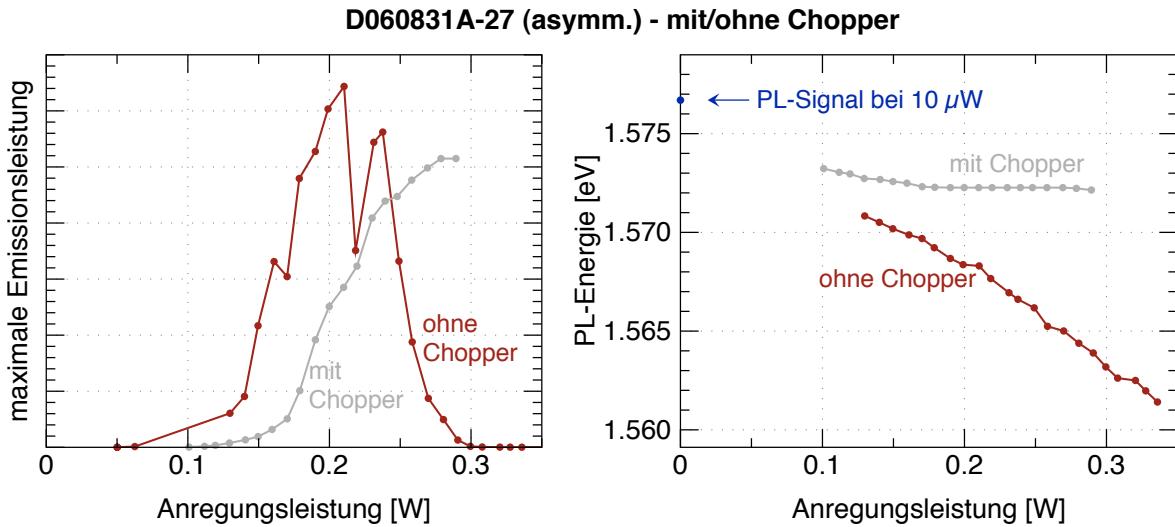


**Bild 9.10:** Integrierte Leistung der Quantendrahtemission in Abhängigkeit von der Anregungswellenlänge für beide untersuchten unvergüteten Proben bei Anregung in [110]-Richtung mit einer Polarisierung senkrecht zur (001)-Fläche,  $T = 6,5\text{ K}$ ,  $f_{Chp} = 200\text{ Hz}$  und  $DC_{Chp} = 14\%$ . Die Messungen wurden bei einer Anregungsleistung von  $P_{exc} = 200\text{ mW}$ , also unterhalb der Laserschwelle durchgeführt. Durch Vergleich mit den PL-Messungen in Bild 8.1 und 8.2 sowie Simulationen ergibt sich die eingezeichnete Zuordnung der Signale. Die Messungen weisen ein relativ starkes Rauschen auf, da die Ausgangsleistung des Titan-Saphir-Lasers aufgrund eines noch nicht optimierten Regelkreises bei Änderung der Wellenlänge um bis zu 7 % schwankte.

ander liegen (siehe PL-Messung in Bild 8.2). Dadurch ist bei einer Wellenlänge von 755 nm gleichzeitig die Anregung von beiden Zustände möglich, was eine besonders effektive Anregung des Quantendrahtlasers vermuten lässt.

## 9.4 Temperaturabhängigkeit

Um die Erwärmung der Probe durch die optische Anregung zu ermitteln, wurde zunächst der Einfluß des Choppers auf die Laseremission untersucht. In Bild 9.11 ist ein Vergleich der Emissionsleistung und -energie der asymmetrischen Probe mit und ohne Chopper dargestellt. Links im Bild ist zu erkennen, daß ohne Verwendung eines Choppers die Laseremission bei steigender Anregungsleistung schon früher einsetzt und stärker ansteigt, aber dann ab etwa 0,24 W schnell wieder abfällt. Allgemein zeigt sich, daß ohne Chopper die Laseremission deutlich weniger stabil gegenüber Änderungen der Anregungsparameter ist, was sich beispielsweise im Bild links durch den Einbruch bei 0,22 W äußert.

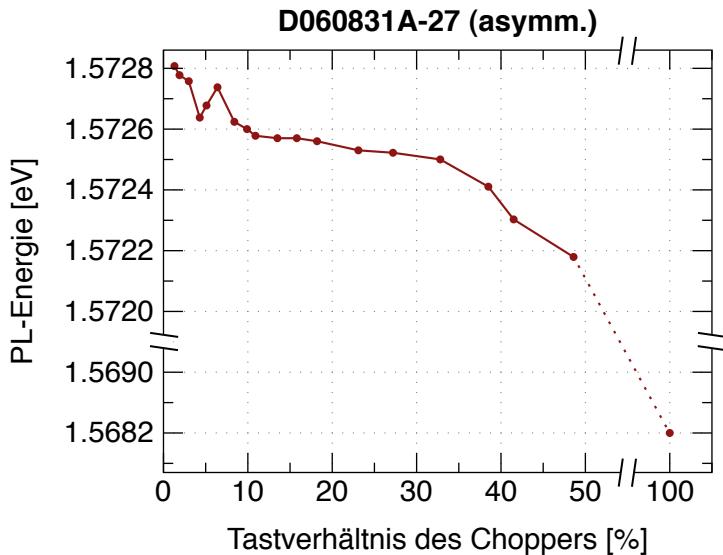


**Bild 9.11:** Leistung und Photonenergie der Laseremission in Abhängigkeit von der Anregungsleistung mit und ohne Verwendung eines Choppers ( $f_{Chp} = 98 \text{ Hz}$ ,  $DC_{Chp} = 17,8\%$ ) bei  $\lambda_{exc} = 755 \text{ nm}$  und einer nominellen Temperatur von  $T = 8,5 \text{ K}$ . Rechts ist zusätzlich die Position des QWR-PL-Signals bei  $10 \mu\text{W}$ , also einer vergleichsweise sehr kleinen Anregungsleistung eingezeichnet.

Der Verlauf der Emissionsleistung ohne Chopper scheint auf eine niedrigere Laserschwelle und eine unter Umständen höhere Emissionsleistung hinzuweisen. Dies bedeutet jedoch nicht, daß sich der Einsatz des Choppers nachteilig auswirkt. Tatsächlich läßt sich dieses Verhalten dadurch erklären, daß sich die Probe ohne Verwendung des Choppers signifikant erwärmt und bei erhöhten Temperaturen bessere Lasereigenschaften aufweist, wie unten anhand von Bild 9.13 gezeigt wird.

Die Photonenergie der Emission nimmt ohne Einsatz des Choppers mit steigender Anregungsleistung wesentlich stärker ab als mit Chopper. Dies läßt darauf schließen, daß sich die Probe ohne Chopper deutlich erwärmt, da eine Erwärmung der Probe zu einer Verringerung der Bandlücke führt. Im Prinzip läßt sich mit der Varshni-Formel (3.32) die Erwärmung aus der Energieverschiebung berechnen. Tatsächlich kann man allerdings bei der Laseremission nicht die Bandlücke direkt messen, sondern nur das Maximum des Verstärkungsspektrums, das jedoch noch von weiteren temperaturabhängigen Größen abhängt. Daher läßt sich die Erwärmung in der Praxis nur grob abschätzen. Durch einen Vergleich dieser Messungen mit den Bildern 8.3, 9.13 und 9.14 ergibt sich ohne Chopper eine zusätzliche Temperaturerhöhung von 35 K ( $\pm 12 \text{ K}$ ) bei 0,21 W und 56 K ( $\pm 13 \text{ K}$ ) bei 0,30 W.

Der Einfluß des Tastverhältnisses des Choppers ist in Bild 9.12 für eine Anregungsleistung von 200 mW gezeigt. Es ist zu erkennen, daß bereits ein Tastverhältnis von

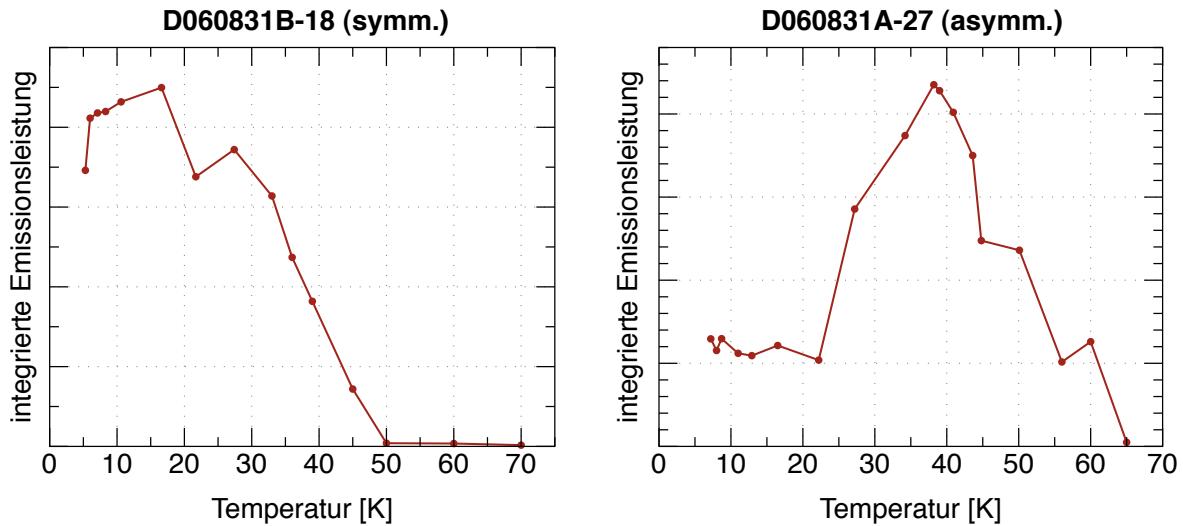


**Bild 9.12:** Variation des Tastverhältnisses des Choppers bei  $P_{exc} = 0,2\text{ W}$ ,  $f_{Chp} = 200\text{ Hz}$ ,  $\lambda_{exc} = 755\text{ nm}$  und  $T = 8,5\text{ K}$ . Man beachte die Teilung der Achsen.

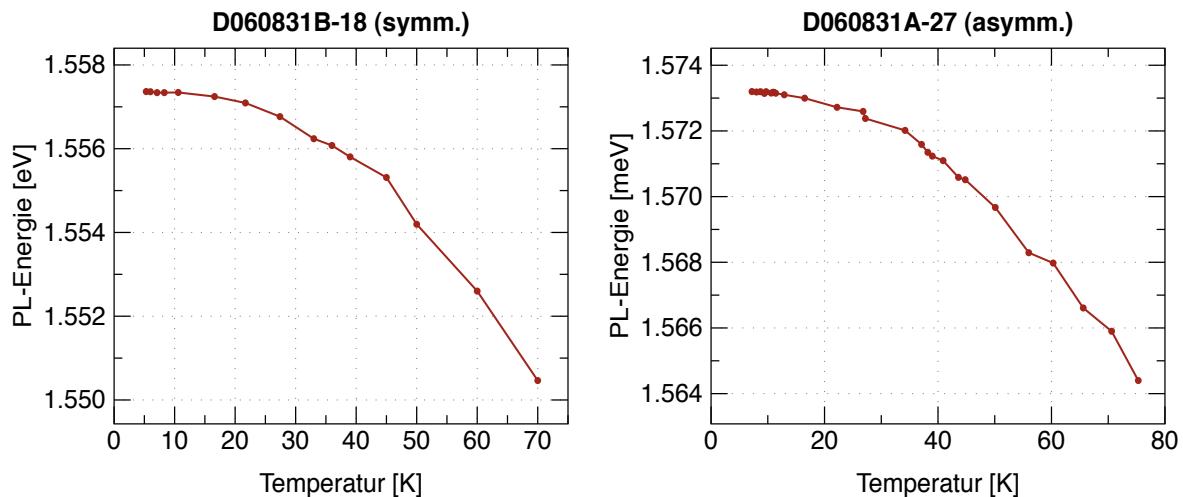
50 % gegenüber der Messung ohne Chopper (100 %) eine deutliche Erhöhung der Emissionsenergie um 4,0 meV bewirkt. Eine weitere Verringerung des Tastverhältnisses wirkt sich dann nur noch vergleichsweise geringfügig aus (bis zu 0,6 meV). Dieses Verhalten läßt sich verstehen, wenn man davon ausgeht, daß die Kühlleistung des Kältefingers im Kryostat etwa 100 mW beträgt. Bei kleineren mittleren Anregungsleistungen (also Tastverhältnissen von unter 50 %) kann die eingestrahlte Wärme effektiv abgeführt werden und die Probe wird nur geringfügig erwärmt. Bei größeren mittleren Leistungen kommt es zum Wärmestau in der Probe und somit zu deutlich höheren Temperaturen. Für die Messungen im Rahmen dieser Arbeit wurden daher Tastverhältnisse im Bereich von 2 bis 18 % verwendet.

Die Temperaturabhängigkeit des Laserverhaltens ist in den Bildern 9.13 und 9.14 für beide untersuchten Proben dargestellt. Wie oben erläutert ist damit zu rechnen, daß die Proben durch die Anregungsstrahlung erwärmt werden. Da die tatsächliche Probentemperatur schwierig zu messen ist, beziehen sich alle folgenden Aussagen auf die nominelle Temperatur, die wahrscheinlich geringer ist. Durch die Verwendung des Choppers ist diese Temperaturabweichung vermutlich im Bereich von weniger als 10 K, könnte jedoch wie in Abschnitt 9.2 beschrieben auch bis zu 50 K betragen.

Bei der symmetrischen Probe weist die Emissionsleistung ein Maximum bei etwa 16 K auf und fällt bei höheren Temperaturen ab. Oberhalb von 40 K findet bei dieser Probe keine Lichtverstärkung mehr statt. Bei der asymmetrischen Probe erreicht die Laseremission die maximale Leistung hingegen erst bei 38 K. Bei höheren Temperaturen fällt die Emissionsleistung bei dieser Probe ebenfalls ab, jedoch findet selbst bei 65 K noch Laserbetrieb statt. Die Temperaturabhängigkeit der Photonenergie der Emission zeigt bei beiden Proben einen der Varshni-Formel ähnlichen Verlauf, was auf



**Bild 9.13:** Temperaturabhängigkeit der Emissionsleistung für beide untersuchten vergüteten Proben (D060831B-18:  $\lambda_{exc} = 773$  nm,  $P_{exc} = 0,32$  mW,  $f_{Chp} = 405$  Hz und  $DC_{Chp} = 2,5\%$ , D060831A-27:  $\lambda_{exc} = 757$  nm,  $P_{exc} = 0,18$  mW,  $f_{Chp} = 15$  Hz und  $DC_{Chp} = 9,2\%$ ). Bei diesen Messungen war nach jeder Temperaturänderung aufgrund der Längenausdehnung eine Nachjustage nötig, was zu einer größeren Streuung der Meßwerte führt. Die tatsächliche Temperatur der Proben kann aufgrund der Anregungsleistung höher sein als die hier angegebene nominelle Temperatur.



**Bild 9.14:** Temperaturabhängigkeit der Photonenergie der Emission für beide untersuchten vergüteten Proben. Auch hier kann die tatsächliche Temperatur der Proben höher sein als die angegebene nominelle Temperatur. Die Graphen basieren auf den gleichen Messungen wie in Bild 9.13.

die thermisch bedingte Verringerung der Bandlücke hinweist.

Das Verschwinden der Lasertätigkeit bei höheren Temperaturen lässt sich darauf zurückführen, daß verstärkt Ladungsträger aus den Quantendrahtzuständen infolge von thermischer Aktivierung in die Quantenfilme emittiert werden und nicht mehr für den Laserübergang zur Verfügung stehen. Die asymmetrische Probe weist gegenüber der symmetrischen eine etwa 2,5-fach größere Einschlußenergie auf. Die Ladungsträger sind hier also entsprechend stärker gebunden, was dazu führt, daß sich bei dieser Probe auch bei deutlich höheren Temperaturen noch Laserbetrieb erreichen läßt.

Auffallend ist außerdem, daß bei der asymmetrischen Probe die emittierte Leistung bei 38 K etwa viermal so groß ist wie bei niedrigeren Temperaturen von weniger als 20 K. Eine mögliche Erklärung für dieses zunächst erstaunliche Verhalten ist die größere Diffusionslänge der Ladungsträger bei höheren Temperaturen. Wie oben beschrieben werden die Ladungsträger in Zuständen der angrenzenden Quantenfilme erzeugt und diffundieren dann in die Quantendrahte, in denen der Laserübergang stattfindet. Eine größere Diffusionslänge bei höheren Temperaturen erhöht somit die Effizienz der Anregung.

## 9.5 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde die experimentelle Realisierung von zwei Quantendrahlaser-Proben mit symmetrischen und asymmetrischen CEO-Quantendrahten vorgestellt. Bei beiden konnte Lichtverstärkung beobachtet werden, aber nur bei der asymmetrischen Probe wurde die Laserschwelle überschritten. Dies liegt offenbar in der 2,5-fach höheren Einschlußenergie dieser Probe begründet. Darüber hinaus wurde die Abhängigkeit der Emission von verschiedenen Anregungsparametern untersucht und verglichen.

Die gegenüber dem PL-Spektrum rotverschobene Laseremission deutet darauf hin, daß der Laserübergang hier der Rekombination aus einem Elektron-Loch-Plasma entspricht, bei dem die Bandlücke durch Renormalisierung verringert ist. Diese Rotverschiebung könnte allerdings auch durch eine Temperaturerhöhung infolge der hohen Anregungsleistung trotz Verwendung eines Choppers verursacht werden.

Bei höheren Temperaturen verschwindet die Lasertätigkeit, was sich auf thermisch aktivierte Emission der Ladungsträger aus den Quantendrahten zurückführen läßt. In der asymmetrischen Probe läßt sich aufgrund der höheren Einschlußenergie noch bis zu 65 K Laseremission auf einer einzelnen Mode erreichen. Auf der anderen Seite nimmt auch bei sehr kleinen Temperaturen die Ausgangsleistung ab. Die Ursache hierfür liegt wahrscheinlich in der schlechteren Diffusion der Ladungsträger von den Quantenfilmen in die Quantendrahte bei diesen Temperaturen.

# Kapitel 10

## Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden Quantenstrukturen, die durch das Überwachsen von Spaltflächen hergestellt werden, theoretisch simuliert, experimentell realisiert und durch Mikrophotolumineszenzspektroskopie charakterisiert. Im Mittelpunkt stand dabei die Optimierung der strukturellen Qualität der gewachsenen Proben und die Erhöhung der Einschlußenergie der Strukturen.

Zur theoretischen Optimierung der Probenstrukturen wurden erstmals systematische Simulationen an einer Vielzahl von unterschiedlichen Strukturen mit der Simulationssoftware nextnano3 durchgeführt. Unter anderem durch die Verwendung der k-p-Theorie wurde eine höhere Genauigkeit als bei bisherigen Rechnungen erreicht. Um die jeweils besten Strukturparameter zu ermitteln, wurde ein evolutionäres Optimierungsverfahren implementiert, bei dem eine Vielzahl von unterschiedlichen Strukturen auf einem PC-Cluster berechnet und verglichen wurden.

Anhand dieser Simulationen konnten bisherige Konzepte zur Erhöhung der Einschlußenergie bestätigt und neue optimierte Probenstrukturen ermittelt werden. Bei verspannten Strukturen wurden zwei unterschiedliche Effekte identifiziert und verglichen, die zum Ladungsträgereinschluß beitragen. Die Simulation von rein verspannungsinduzierten Quantendrähten ergab Einschlußenergien von bis zu 97 meV. Eine erhoffte weitere Erhöhung der Einschlußenergie in verspannten T-förmigen Quantendrähten konnte nicht bestätigt werden. Als besonders vielversprechende Strukturen stellten sich asymmetrische Quantendrähte mit Indium im überwachsenen (110)-Quantenfilm heraus. Diese erreichen mit einem vergleichsweise niedrigen Indiumgehalt hohe simulierte Einschlußenergien von bis zu 60 meV bei gleichzeitig gutem Überlapp der Wellenfunktionen. Für verspannte Quantenpunktstrukturen ergeben die Simulationen keine Erhöhung der Einschlußenergie gegenüber unverspannten Strukturen. Durch asymmetrische Quantenpunkte mit Aluminium im (001)-Quantenfilm hingegen lässt sich die theoretische Einschlußenergie auf bis zu 12,9 meV steigern.

Da das Überwachsen von Spaltflächen ein vergleichsweise komplexes Verfahren ist und sich die verwendeten Wachstumsparameter nicht ohne Anpassung von einer MBE-Anlage zu einer anderen übertragen lassen, mußten entscheidene Teilschritte einzeln untersucht und optimiert werden. Insbesondere wurde an 120 gewachsenen Proben untersucht, welche Kombination von Wachstumsparametern zu Quantenfilmen mit reproduzierbaren Übergangsenergien und möglichst glatten Grenzflächen führt. Eine deutliche Blauverschiebung der gemessenen Übergangsenergien gegenüber den theoretisch simulierten Werten im Bereich von 10 bis 40 meV konnte durch eine Kombination aus Oberflächensegregation und verminderten Wachstumsraten erklärt werden. Letztere sind auf ein Absinken der Flußraten nach dem Aufheizen der Effusionszellen zurückzuführen und lassen sich durch eine entsprechende Wartezeit verhindern. Die Oberflächensegregation hingegen, die zu einer effektiven Verringerung der Quantenfilmdicke und so zu einer Blauverschiebung von etwa 10 meV führt, tritt vermutlich generell beim Wachstum von Quantenfilmen auf.

Desweiteren wurde untersucht, welche Faktoren die optische Linienbreite und damit die Grenzflächenrauigkeit von Quantenfilmen bestimmen. Hier scheint bereits eine kleine Reduzierung des Aluminiumgehalts der Barriere von 35 % auf 32 % zu deutlich glatteren Grenzflächen zu führen. Darüberhinaus können starke Linienverbreiterungen und -aufspaltungen durch die fehlende Synchronisation des Schichtwachstums mit der Rotation der Probe verursacht werden. Andere untersuchte Wachstumsparameter zeigen nur einen geringen Einfluß auf die Linienbreite. Für indiumhaltige Schichten wurden darüber hinaus die besonderen Erfordernisse beim Wachstum und die kritische Schichtdicke untersucht. Die Grenzflächen von (110)-Quantenfilmen konnten durch den Einsatz des Annealing-Verfahrens deutlich geglättet werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden symmetrische, asymmetrische und verspannte Quantendrähte sowie symmetrische Quantenpunkte erstmals erfolgreich in der Regensburger MBE-Anlage hergestellt. Bei einer untersuchten asymmetrischen Quantendrahtprobe ergibt sich durch die Asymmetrie und die gute Angleichung der Quantenfilmenergien eine hohe Einschlußenergie von 51 meV. Es fällt auf, daß die experimentell ermittelten Einschlußenergien fast durchweg deutlich größer sind als die durch entsprechende Simulationen berechneten Werte. Diese Abweichungen zeigen sich auch bei nahezu allen bisher veröffentlichten theoretischen und experimentellen Untersuchungen. Die Unterschiede lassen sich nur teilweise durch Oberflächensegregation beim Wachstum erklären und deuten darauf hin, daß die quantenmechanischen Vorgänge beim Überwachsen von Spaltflächen allgemein immer noch nicht vollständig verstanden sind.

Bei verspannten T-förmigen Quantendrähten ergeben sich Einschlußenergien von bis zu 36 meV in Übereinstimmung mit den Simulationen. Es wurde bestätigt, daß die

Verspannungen in diesen Proben tatsächlich zu einer Erhöhung der Einschlußenergie gegenüber vergleichbaren unverspannten Proben führen.

Bei den untersuchten Quantenpunktproben zeigten sich starke Dickenfluktuationen der überwachsenen Quantenfilme, die wahrscheinlich auf zu kurze Zeiten beim Annealing-Verfahren zurückzuführen sind. Dennoch konnten zwei symmetrische Quantenpunkt-Proben erfolgreich hergestellt und untersucht werden. Anhand von verschiedenen charakteristischen Merkmalen konnte eine Verwechslung mit natürlichen Quantenpunkten ausgeschlossen werden. Die Einschlußenergie liegt im erwarteten Bereich, kann jedoch wegen unklaren PL-Signalen der Quantendrähte nicht genau bestimmt werden.

Als praktische Anwendung des Überwachsens von Spaltflächen wurden darüber hinaus zwei optisch gepumpte Quantendrahlaser mit symmetrischen und asymmetrischen Quantendrähten hergestellt und charakterisiert. Bei der Probe mit asymmetrischen Quantendrähten ergab sich eine niedrigere Laserschwelle und ein Laserbetrieb in einem größeren Temperaturbereich, was offenbar auf die höhere Einschlußenergie von 51 meV zurückzuführen ist. Die gegenüber der Photolumineszenz rotverschobene Laseremission deutet auf die Rekombination aus einem Elektron-Loch-Plasma hin, könnte jedoch auch durch eine Temperaturerhöhung infolge der hohen Anregungsleistung verursacht worden sein.

Zusammenfassend läßt sich also festhalten, daß im Rahmen dieser Arbeit zum Überwachsen von Spaltflächen entscheidende neue Erkenntnisse gewonnen, verschiedene praktische Probleme gelöst und unterschiedliche Strukturkonzepte systematisch untersucht und verglichen wurden. In Zukunft sollte es damit auch in der Regensburger MBE-Anlage möglich sein, reproduzierbar qualitativ hochwertige CEO-Quantendrähte und -punkte mit hohen Einschlußenergien herzustellen. Dies eröffnet zahlreiche Möglichkeiten für weiterführende Experimente, von denen einige im Folgenden vorgestellt werden.

# Kapitel 11

## Ausblick

Die Simulationen in dieser Arbeit führten zu einigen vielversprechenden Probenstrukturen, deren experimentelle Realisierung jedoch noch aussteht. Zum einen ließe sich bei rein verspannungsinduzierten Quantendrähten das Einschlußpotential auf bis zu 97 meV erhöhen, wenn es gelingt, einen 20 nm breiten  $\text{In}_{0.2}\text{Al}_{0.8}\text{As}$ -Quantenfilm in guter Qualität herzustellen. Allerdings käme diese Struktur aufgrund des geringen Überlapps der Wellenfunktionen von nur 4 % kaum für optoelektronische Bauelemente in Frage. Zum anderen ergeben die Simulationen von asymmetrischen Quantendrähten mit Indium im überwachsenen Quantenfilm ein Einschlußpotential von bis zu 60 meV bei einem relativ guten Überlapp von 57 %. Diese Probe wäre außerdem leichter herzustellen, da die verspannte Schicht sehr schmal (3 - 6 nm) ist und einen geringeren Indium-Gehalt ( $\leq 16\%$ ) aufweist.

Allgemein hat sich gezeigt, daß die experimentell gemessenen Einschlußenergien von CEO-Proben in der Regel deutlich höher als die durch entsprechende Simulationen berechneten Werte sind. Dies läßt darauf hoffen, daß sich bei der Realisierung der simulierten Probenstrukturen eine entsprechend weiter erhöhte Einschlußenergie ergibt. Insbesondere bei Quantenpunkten sollte noch eine beträchtliche Steigerung der Einschlußenergie möglich sein, da einerseits bei neueren experimentellen Untersuchungen an symmetrischen Quantenpunkten bereits eine Einschlußenergie von 21 meV erreicht wurde [Roe09] und andererseits die Simulationen für asymmetrische Quantenpunkte eine Erhöhung der Einschlußenergie auf mehr als das Doppelte gegenüber diesen symmetrischen Proben erwarten lassen.

Durch Erweiterungen der Simulationssoftware nextnano3 könnte ferner die Genauigkeit der Simulationen weiter erhöht werden. Insbesondere die Berücksichtigung der Auswirkung der Coulomb-Anziehung auf die Wellenfunktionen bei Exzitonen würde zu einer genaueren Berechnung der Einschlußenergien und des Überlapps der Wellenfunktionen führen. Auch wäre es vorteilhaft, die Berechnung der Exzitonen-Bindungsenergie

ebenfalls mithilfe der 8-Band-k·p-Theorie durchzuführen. Die fortschreitende Entwicklung der Computertechnik schließlich sollte es bald erlauben, die Rechnungen auf einem noch feineren Gitter durchzuführen.

Für eine genauere Untersuchung der Quantendrahtlaser wäre es wünschenswert, die Temperatur der Probe genauer zu bestimmen. Hierzu könnte man die Temperatur experimentell durch eine hochauflösende Infrarot-Wärmebildkamera oder theoretisch durch eine Simulation des Wärmeflusses im Kryostaten ermitteln. Einfacher wäre es jedoch, die Messungen in einem Bad-Kryostaten in flüssigem Helium, Stickstoff oder anderen flüssigen Gasen durchzuführen. Für eine weitere Erhöhung der Einschlußenergie der Quantendrahtlaserproben kommt eine stärkere Asymmetrie sowie eine Angleichung der Quantenfilme mit Indium statt Aluminium in Frage. Verspannte Quantendrähte hingegen sind aufgrund des geringen Überlapps der Wellenfunktionen für den Einsatz als Lasermedium kaum geeignet. Weiterführende Versuche mit elektrisch gepumpten Quantendrahtlasern werden zur Zeit im Rahmen der Promotion von Dominik Scholz durchgeführt.

Da CEO-Quantendrähte und -punkte mit der weit verbreiteten Molekularstrahlepitaxie gewachsen werden, lassen sie sich gut mit weiteren Strukturen kombinieren, die ebenfalls mit diesem Verfahren hergestellt werden. Auf diese Weise eröffnet sich ein weites Feld zur Erforschung von weiteren Anwendungsmöglichkeiten von Halbleiter-Nanostrukturen. So ließen sich diese Strukturen beispielsweise mit zweidimensionalen Elektronen- oder Loch-Gasen koppeln oder durch manganhaltige Schichten spinpolarierte Ladungsträger injizieren, die dann zirkular polarisiertes Licht aussenden können. Quantenpunkte könnte man auf ähnliche Weise wie elektrisch gepumpte Quantendrahtlaser in eine pn-Diodenstruktur einbetten. Erste Versuche hierzu werden in [Roe09] beschrieben. Neben gekoppelten Quantenpunkten, die bereits in [Sch99] vorgestellt wurden, bietet sich auch die Untersuchung von gekoppelten eindimensionalen Quantendrähten an.

Ein weiteres vielversprechendes Forschungsgebiet ist die Untersuchung der Einsatzmöglichkeiten von CEO-Quantenpunkten in der Quanteninformationsverarbeitung. Dabei könnten Qubits durch spinpolarisierte Exzitonen repräsentiert werden. In einem ersten Schritt könnten diese spinpolarisierten Ladungen durch zirkular polarisiertes Licht erzeugt und detektiert sowie mittels zeitaufgelöster Spektroskopie die entsprechenden Spinlebensdauern ermittelt werden.

# Abkürzungsverzeichnis

|           |  |
|-----------|--|
| AFM       | Rasterkraftmikroskopie (engl.: <i>atomic force microscopy</i> )  |
| CEO       | Überwachsen von Spaltflächen (engl.: <i>cleaved edge overgrowth</i> )  |
| FWHM      | Halbwertsbreite (engl.: <i>full width at half maximum</i> )  |
| MBE       | Molekularstrahlepitaxie (engl.: <i>molecular beam epitaxy</i> )  |
| ML        | Monolage   |
| MOCVD     | Metallorganische Gasphasenepitaxie<br>(engl.: <i>metal-organic chemical vapor deposition</i> )                 |
| MQW       | Mehrfach-Quantenfilm (engl.: <i>multiple quantum well</i> )  |
| PL        | Photolumineszenzspektroskopie  |
| PLE       | Photolumineszenz-Anregungsspektroskopie  |
| $\mu$ PL  | Mikrophotolumineszenzspektroskopie   |
| $\mu$ PLE | Mikrophotolumineszenz-Anregungsspektroskopie   |
| QW        | Quantenfilm (engl.: <i>quantum well</i> )  |
| QWR       | Quantendraht (engl.: <i>quantum wire</i> )   |
| QD        | Quantenpunkt (engl.: <i>quantum dot</i> )  |
| RHEED     | Reflexionsbeugung hochenergetischer Elektronen<br>(engl.: <i>reflection high energy electron diffraction</i> ) |
| SL        | Übergitter (engl.: <i>superlattice</i> )   |
| UHV       | Ultrahochvakuum  |
| e         | Elektron   |
| hh        | Schwerloch (engl.: <i>heavy hole</i> )   |
| lh        | Leichtloch (engl.: <i>light hole</i> )   |
| so        | abgespaltenes Loch (engl.: <i>split-off hole</i> )   |

# Literaturverzeichnis

- [Aki96] Hidefumi Akiyama, Takao Someya und Hiroyuki Sakaki, *Optical anisotropy in 5-nm-scale T-shaped quantum wires fabricated by the cleaved-edge overgrowth method*, Physical Review B Condensed Matter **53** (1996), R4229.
- [Aki98] Hidefumi Akiyama, Takao Someya, Masahiro Yoshita, Takeaki Sasaki und Hiroyuki Sakaki, *Photoluminescence study of lateral confinement energy in T-shaped InGaAs quantum wires*, Physical Review B Condensed Matter **57** (1998), 3765.
- [Aki03] Hidefumi Akiyama, Loren N. Pfeiffer, Masahiro Yoshita, Aron Pinczuk, Peter B. Littlewood, Ken W. West, Manyalibo J. Matthews und James Wynn, *Coulomb-correlated electron-hole plasma and gain in a quantum-wire laser of high uniformity*, Physical Review B Condensed Matter **67** (2003), R041302.
- [Aki04] H. Akiyama, M. Yoshita, L.-N. Pfeiffer und K.-W. West, *One-dimensional excitonic states and lasing in highly uniform quantum wires formed by cleaved-edge overgrowth with growth-interrupt annealing*, Journal of Physics: Condensed Matter **16** (2004), S3549–66.
- [And04] Till Andlauer, *Discretization of multiband- $k\cdot p$ -Schrödinger equations for multidimensional semiconductor nanostructures*, Diplomarbeit, Technische Universität München, 2004.
- [Bah90] Thomas B. Bahder, *Eight-band  $kp$  model of strained zinc-blende crystals*, Physical Review B Condensed Matter **41** (1990), 11992–12001.
- [Bas81] Gerald Bastard, *Superlattice band structure in the envelope function approximation*, Physical Review B Condensed Matter **24** (1981), 5693.
- [Bas82] G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang und L. Esaki, *Exciton binding energy in quantum wells*, Physical Review B Condensed Matter **26** (1982), 1974.

- [Bas96] Gerald Bastard, *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*, Edition de physique, Les Ulis Cedex, 1996.
- [Bau04] J. Bauer, D. Schuh, E. Uccelli, R. Schulz, A. Kress, F. Hofbauer, J. J. Finley, und G. Abstreiter, *Long-range ordered self-assembled InAs quantum dots epitaxially grown on (110) GaAs*, Applied Physics Letters **85** (2004), 4750–4752.
- [Bau05] Heiko Bauke und Stephan Mertens, *Cluster Computing*, Springer Verlag, Berlin, 2005.
- [Beh04] E. Beham, M. Betz, S. Trumm, M. Kroutvar, Y. Ducommun, H.-J. Krenner, M. Bichler, A. Leitenstorfer, J.-J. Finley, A. Zrenner und G. Abstreiter, *Physics and applications of self-assembled quantum dots*, Physica Status Solidi C **8** (2004), 2131–59.
- [Ben00] Charles H. Bennett und David P. DiVincenz, *Quantum information and computation*, Nature **404** (2000), 247–255.
- [Bim99] D. Bimberg, M. Grundmann und N. N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures*, John Wiley & Sons., 1999.
- [Bir74] G. L. Bir und G. Pikus, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors*, Wiley, New York, 1974.
- [Bir09] Stefan Birner, *nextnano3 - next generation 3D nano device simulator*, <http://www.nextnano.de/nextnano3/>, 2009.
- [Bor05] Magnus T. Borgström, Valery Zwiller, Elisabeth Müller und Atac Imamoglu, *Optically Bright Quantum Dots in Single Optically Bright Quantum Dots in Single Nanowires*, Nano Letters **5** (2005), 1439–1443.
- [Bru94] K. Brunner, G. Abstreiter, G. Böhm, G. Tränkle und G. Weimann, *Sharp-line photoluminescence of excitons localized at GaAs/AlGaAs quantum well inhomogeneities*, Applied Physics Letters **64** (1994), 3320.
- [Bur92] M. G. Burt, *The justification for applying the effective-mass approximation to microstructures*, Journal of Physics: Condensed Matter **4** (1992), 6651.
- [Bur99] M.G. Burt, *Fundamentals of envelope function theory for electronic states and photonic modes in nanostructures*, Journal of Physics: Condensed Matter **11** (1999), R53–R83.

- [Cap87] Federico Capasso, *Band-Gap Engineering: From Physics and Materials to New Semiconductor Devices*, Science **235** (1987), 172–176.
- [Cha85] Y. C. Chang, L. L. Chang und L. Esaki, *A new one-dimensional quantum well structure*, Applied Physics Letters **47** (1985), 1324–1326.
- [Cor96] Timothy R. Corle und Gordon S. Kino, *Confocal Scanning Optical Microscopy and Related Imaging Systems*, Academic Press, San Diego, 1996.
- [Dav98] John H. Davies, *The Physics of Low-Dimensional Semiconductors*, Press Syndicate of the University of Cambridge, 1998.
- [Deh94] O. Dehaese, X. Wallart und F. Mollot, *Kinetic model of element III segregation during molecular beam epitaxy of III-III'-V semiconductor compounds*, Applied Physics Letters **66** (1994), 52.
- [Eic06] Jürgen Eichler und Hans Joachim Eichler, *Laser: Bauformen, Strahlführung, Anwendungen*, Springer Verlag, Berlin, 2006.
- [End95] P. Enders, A. Bärwolff, M. Woerner und D. Suisky, *kp theory of energy bands, wave functions, and optical selection rules in strained tetrahedral semiconductors*, Physical Review B Condensed Matter **51** (1995), 16695–16704.
- [Gam91] D. Gammon, B. V. Shanabrook und D. S. Katzer, *Excitons, Phonons and Interfaces in GaAs/AlAs Quantum-Well Structures*, Physical Review Letters **67** (1991), 1547.
- [Ger90] D. Gershoni, J. S. Weiner, S. N. H. Chu, G. A. Baraff, J. M. Vandenberg, L. N. Pfeiffer, K. West, R. A. Logan und T. Tanbun-Ek, *Optical Transitions in Quantum Wires with Strain-Induced Lateral Confinement*, Physical Review Letters **65** (1990), 1631.
- [Ger92] Jean-Michel Gerard und Jean-Yves Marzin, *Monolayer-scale optical investigation of segregation effects in semiconductor heterostructures*, Physical Review B Condensed Matter **45** (1992), 6313–6316.
- [Gis96] H. Gislason, W. Langbein und J. M. Hvam, *Asymmetric GaAs/AlGaAs T wires with large confinement energies*, Applied Physics Letters **69** (1996), 3248.
- [Gis02] Nicolas Gisin, Gregoire Ribordy, Wolfgang Tittel und Hugo Zbinden, *Quantum cryptography*, Reviews of Modern Physics, **74** (2002), 145–195.

- [Glu97] S. Glutsch, F. Bechstedt, W. Wegscheider und G. Schedelbeck, *Excitons in T-shaped quantum wires*, Physical Review B Condensed Matter **56** (1997), 4108–14.
- [Gme02] Nikolaus Gmeinwieser, *Aufbau eines konfokalen Meßplatzes zur Photolumineszenz- und Raman-Spektroskopie an Gruppe III-Nitriden*, Diplomarbeit, Universität Regensburg, 2002.
- [Gme06] Nikolaus Gmeinwieser, *Hochortsauflöste spektroskopische Untersuchungen an Galliumnitrid*, Dissertation, Universität Regensburg, 2006.
- [Gon92] A. R. Goni, L. Pfeiffer, K. West, A. Pinczuk, H. Baranger und H. Stormer, *Observation of quantum wire formation at intersecting quantum wells*, Applied Physics Letters **61** (1992), 1956–1958.
- [Gra96] N. Grandjean, J. Massies und M. Leroux, *Monte Carlo simulation of In surface segregation during the growth of InGaAs on GaAs(001)*, Physical Review B Condensed Matter **53** (1996), 998.
- [Gro94] Robert D. Grober, Timothy D. Harris, Jay K. Trautman, Eric Betzig, Werner Wegscheider, Loren Pfeiffer und Ken West, *Optical spectroscopy of a GaAs/AlGaAs quantum wire structure using near-field scanning optical microscopy*, Applied Physics Letters **64** (1994), 1421–1423.
- [Gru97] M. Grundmann und D. Bimberg, *Formation of quantum dots in twofold cleaved edge overgrowth*, Physical Review B Condensed Matter **55** (1997), 4054–6.
- [Gru98] M. Grundmann, O. Stier und D. Bimberg, *Electronic states in strained cleaved-edge-overgrowth quantum wires and quantum dots*, Physical Review B Condensed Matter **58** (1998), 10557–61.
- [Gru00] M. Grundmann, O. Stier, A. Schliwa und D. Bimberg, *Electronic structure of cleaved-edge-overgrowth strain-induced quantum wires*, Physical Review B Condensed Matter **61** (2000), 1744–7.
- [Hac02] Stefan Hackenbuchner, *Elektronische Struktur von Halbleiter-Nanobaulementen im thermodynamischen Nichtgleichgewicht*, Dissertation, Walter-Schottky-Institut TU München, 2002.
- [Haj03] Harald Hajak, *Photolumineszenz- und Photolumineszenzanregungsspektroskopie der niedrigdimensionalen GaAs-basierenden Halbleiterstrukturen*, Diplomarbeit, Universität Regensburg, 2003.

- [Hak75] B. W. Hakki und T. L. Paoli, *Gain spectra in GaAs double-heterostructure injection lasers*, Journal of Applied Physics **46** (1975), 1299–306.
- [Han07] R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha und L. M. K. Vandersypen, *Spins in few-electron quantum dots*, Reviews of Modern Physics **79** (2007), 1217.
- [Har97] A. Hartmann, L. Loubies, F. Reinhardt und E. Kapon, *Self-limiting growth of quantum dot heterostructures on nonplanar (111)B substrates*, Applied Physics Letters **71** (1997), 1314.
- [Har05] Paul Harrison, *Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures*, John Wiley & Sons, 2005.
- [Hay02] Yuhei Hayamizu, Masahiro Yoshita, Shinichi Watanabe und Hidefumi Akiyama, *Lasing from a single-quantum wire*, Applied Physics Letters **81** (2002), 4937.
- [Her91] M. A. Herman, D. Bimberg und J. Christen, *Heterointerfaces in quantum wells and epitaxial growth processes: Heterointerfaces in quantum wells and epitaxial growth processes: Evaluation by luminescence techniques*, Journal of Applied Physics **70** (1991), R1.
- [Her04] M. A. Herman, W. Richter und H. Sitter, *Epitaxy - Physical Principles and Technical Implementation*, Springer Verlag, Berlin, 2004.
- [Her07] Thomas Herrle, *Entwurf und Charakterisierung von Quantendrahtintersubbandlaserstrukturen*, Dissertation, Universität Regensburg, 2007.
- [Ish03] Akira Ishii, Tsuyoshi Aisaka, Ji-Won Oh, Masahiro Yoshita und Hidefumi Akiyama, *Low and anisotropic barrier energy for adatom migration on a GaAs (110) surface studied by first-principles calculations*, Applied Physics Letters **83** (2003), 4187.
- [Ito03] Hirotake Itoh, Yuhei Hayamizu, Masahiro Yoshita, Hidefumi Akiyama, Loren N. Pfeiffer, Ken W. West, Marzena H. Szymaska und Peter B. Littlewood, *Polarization-dependent photoluminescence-excitation spectra of one-dimensional exciton and continuum states in T-shaped quantum wires*, Applied Physics Letters **83** (2003), 2043.
- [Jen99] J. R. Jensen, J. M. Hvam und W. Langbein, *Optical properties of InAlGaAs quantum wells: Influence of segregation and band bowing*, Journal of Applied Physics **86** (1999), 2584–2589.

- [Kal96] H. Kalt, *Optical Properties of III-V Semiconductors*, Springer Verlag, Berlin, 1996.
- [Kam07] Christoph Kamseder, *Hochortsauflöste Spektroskopie an optisch gepumpten Quantendrahtlasern*, Diplomarbeit, Universität Regensburg, 2007.
- [Kap89] E. Kapon, D. M. Hwang und R. Bhat, *Stimulated emission in semiconductor quantum wire heterostructures*, Phys. Rev. Lett. **63** (1989), 430–433.
- [Kas92] M. A. Kastner, *The single-electron transistor*, Reviews of Modern Physics, **64** (1992), 849–859.
- [Kis96] A. A. Kiselev und U. Rössler, *Towards optimization of T-shaped quantum structures*, Semiconductor Science and Technology **11** (1996), 203–206.
- [Kit99] C. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik*, Oldenburg Verlag, 1999.
- [Kne99] F. K. Kneubühl und M. W. Sigrist, *Laser*, Teubner Studienbücher, 1999.
- [Kop91] R. F. Kopf, E. F. Schubert, T. D. Harris und R. S. Becker, *Photoluminescence of GaAs quantum wells grown by molecular beam epitaxy with growth interruptions*, Applied Physics Letters **58** (1991), 631.
- [Kop93] R. F. Kopf, E. F. Schubert, T. D. Harris, R. S. Becker und G. H. Gilmer, *Modification of GaAs/AlGaAs growth-interrupted interfaces through changes in ambient conditions during growth*, Journal of Applied Physics **74** (1993), 6139.
- [Lan70] L. Landau und E. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik VII - Elastizitätstheorie*, Akademie-Verlag Berlin, 1970.
- [Lan96] W. Langbein, H. Gislason und J.-M. Hvam, *Optimization of the confinement energy of quantum-wire states in T-shaped GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As structures*, Physical Review B Condensed Matter **54** (1996), 14595–603.
- [Leo00] K. Leosson, J. R. Jensen, W. Langbein und J. M. Hvam, *Exciton localization and interface roughness in growth-interrupted GaAs/AlAs quantum wells*, Physical Review B Condensed Matter **61** (2000), 10322.
- [Liu07] Shu Man Liu, Masahiro Yoshita, Makoto Okano, Toshiyuki Ihara, Hirotake Itoh, Hidefumi Akiyama, Loren N. Pfeiffer, Kenneth West und Kirk Baldwin, *Low-Threshold Current-Injection Single-Mode Lasing in T-shaped GaAs/AlGaAs Quantum Wires*, Japanese Journal of Applied Physics **46** (2007), L330.

- [Loe51] Per-Olov Löwdin, *A Note on the Quantum-Mechanical Perturbation Theory*, Journal of Chemical Physics **19** (1951), 1396.
- [Lut55] J. M. Luttinger und W. Kohn, *Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields*, Physical Review **97** (1955), 869–883.
- [Lut56] J. M. Luttinger, *Quantum Theory of Cyclotron Resonance in Semiconductors: General Theory*, Physical Review **102** (1956), 1030.
- [Mad96] Otfried Madelung (Hrsg.), *Semiconductors - Basic Data*, Springer Verlag, Berlin, 1996.
- [Mat74] J. W. Matthews und A. E. Blakeslee, *Defects in Epitaxial Multilayers*, Journal of Crystal Growth **27** (1974), 118–125.
- [Mat92] Henry Mathieu, Pierre Lefebvre und Philippe Christol, *Simple analytical method for calculating exciton binding energies in semiconductor quantum wells*, Physical Review B Condensed Matter **46** (1992), 4092.
- [Moi89] J. M. Moison, C. Guille, F. Houzay, F. Barthe und M. Van Rompay, *Surface segregation of third-column atoms in group III-V arsenide compounds: Ternary alloys and heterostructures*, Physical Review B Condensed Matter **40** (1989), 6149.
- [Mur92] K. Muraki, S. Fukatsu, Y. Shiraki und R. Ito, *Surface segregation of In atoms during molecular beam epitaxy and its influence on the energy levels in In-GaAs/GaAs quantum wells*, Applied Physics Letters **61** (1992), 557.
- [Neu08] Christian Neugirg, *Wachstum und Spektroskopie von Quantenpunkten hergestellt durch Überwachsen von Spaltflächen*, Diplomarbeit, Universität Regensburg, 2008.
- [Obe09] Stefanie Obermeier, *Optische Eigenschaften von Halbleiter-Quantumwells*, Diplomarbeit, Universität Regensburg, 2009.
- [Oga95] T. Ogawa und Y. Kanemitsu, *Optical properties of low-dimensional materials 1*, World Scientific, Singapur, 1995.
- [Oka07] Makoto Okano, Shu man Liu, Toshiyuki Ihara, Hirotake Itoh, Masahiro Yoshita, Hidefumi Akiyama, Loren N. Pfeiffer, Kenneth West und Oana Malis, *Temperature-dependent current injection and lasing in T-shaped quantum wire laser diodes with perpendicular p- and n-doping layers*, Applied Physics Letters **90** (2007), 091108.

- [Oli77] J.J. Olivero und R.L. Longbothum, *Empirical fits to the Voigt line width: A brief review*, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **17** (1977), 233 – 236.
- [Peo85] R. People und J. C. Bean, *Calculation of Critical Layer Thickness versus Lattice Mismatch for GeSi/Si Strained-Layer Heterostructures*, Applied Physics Letters **47** (1985), 322–324.
- [Pfe90] Loren Pfeiffer, K. W. West, H. L. Stormer, J. P. Eisenstein, K. W. Baldwin, D. Gershoni und J. Spector, *Formation of a high quality two-dimensional electron gas on cleaved GaAs*, Applied Physics Letters **56** (1990), 1697.
- [Pov04] Michael Povolotskyi, Aldo Di Carlo und Stefan Birner, *Electronic and optical properties of [N11] grown nanostructures*, Physica Status Solidi C **1** (2004), 1511–1521.
- [Reg99] D. V. Regelman und D. Gershoni, *Strain T-shaped quantum wires: A proposal for room temperature operating laser*, Proceedings of the 24th International Conference on the Physics of Semiconductors (World Scientific, Singapore, 1999), 1111.
- [Rei05] Matthias Reinwald, *Herstellung und Charakterisierung von ferromagnetischen GaMnAs auf der GaAs (001)- und (311)A-Oberfläche*, Dissertation, Universität Regensburg, 2005.
- [Rei09] Elisabeth Reinwald, *Magnetotransportmessungen an AFM-stруктуриerten zweidimensionalen Elektronengasen auf GaAs/AlGaAs-Spaltenkanten*, Dissertation, Universität Regensburg, 2009.
- [Roe09] Johanna Rössler, *Spatially resolved spectroscopy on semiconductor nanostructures*, Dissertation, Walter-Schottky-Institut TU München, 2009.
- [Sch97] Gert Schedelbeck, Werner Wegscheider, Max Bichler und Gerhard Abstreiter, *Coupled Quantum Dots Fabricated by Cleaved Edge Overgrowth: From Artificial Atoms to Molecules*, Science **278** (1997), 1792–1795.
- [Sch99] Gert Schedelbeck, *Optische Eigenschaften von Halbleiternanostrukturen hergestellt durch Überwachsen von Spaltflächen*, Dissertation, Technische Universität München, 1999.
- [Sch03a] Stefan Schmult, *Intersubbandelektrolumineszenz im Mittleren Infrarot von GaAs/AlGaAs-Quantendrahtkaskadenstrukturen hergestellt mittels Überwachsen von Spaltflächen*, Dissertation, Universität Regensburg, 2003.

- [Sch03b] U. T. Schwarz, E. Sturm, W. Wegscheider, V. Kümmeler, A. Lell und V. Härle, *Gain spectra and current-induced change of refractive index in (In/Al)GaN diode lasers*, Physica Status Solidi C **200** (2003), 143–146.
- [Sch04a] R. Schuster, H. Hajak, M. Reinwald, W. Wegscheider, D. Schuh, M. Bichler, und G. Abstreiter, *Strong charge carrier confinement in purely strain induced GaAs/InAlAs single quantum wires*, Applied Physics Letters **85** (2004), 3672–3674.
- [Sch04b] R. Schuster, H. Hajak, M. Reinwald, W. Wegscheider, G. Schedelbeck, S. Sedlmaier, M. Stopa, S. Birner, P. Vogl, J. Bauer, D. Schuh, M. Bichler, und G. Abstreiter, *Optical properties of low-dimensional semiconductor systems fabricated by cleaved edge overgrowth*, Physica Status Solidi C **8** (2004), 2028–55.
- [Sch05] Robert Schuster, *Hochortsaufgelöste optische Spektroskopie an niedrigdimensionalen Halbleiterstrukturen*, Dissertation, Universität Regensburg, 2005.
- [Sch06] M. Schowalter, A. Rosenauer und D. Gerthsen, *Influence of surface segregation on the optical properties of semiconductor quantum wells*, Applied Physics Letters **88** (2006), 111906.
- [Ser91] Peter C. Sercel und Kerry J. Vahala, *Polarization dependence of optical absorption and emission in quantum wires*, Physical Review B Condensed Matter **44** (1991), 5681.
- [Som96] T. Someya, H. Akiyama und H. Sakaki, *Enhanced binding energy of one-dimensional excitons in quantum wires*, Physical Review Letters **76** (1996), 2965–8.
- [Sri92] Vivek Srinivas, John Hryniewicz, Yung Jui Chen und Colin E. C. Wood, *Intrinsic linewidths and radiative lifetimes of free excitons in GaAs quantum wells*, Physical Review B Condensed Matter **46** (1992), 10193.
- [Szy01] M.-H. Szymanska, P.-B. Littlewood und R.-J. Needs, *Excitons in T-shaped quantum wires*, Physical Review B Condensed Matter **63** (2001), 205317/1–14.
- [Thi05] Christoph Thiel, *Stabilisierung eines Titan-Saphir Lasers*, Elitestudiengang-projekt, Universität Regensburg, 10 2005.

- [Tho90] D. B. Tran Thoai, R. Zimmermann, M. Grundmann und D. Bimberg, *Image charges in semiconductor quantum wells: Effect on exciton binding energy*, Physical Review B Condensed Matter **42** (1990), 5906.
- [Var67] Y. P. Varshni, *Temperature dependence of the energy gap in semiconductors*, Physica **34** (1967), 149.
- [Vet02] P. Vettiger, G. Cross, M. Despont, U. Drechsler, U. Durig, B. Gotsmann, W. Haberle, M. A. Lantz, H. E. Rothuizen, R. Stutz und G. K. Binnig, *The „millipede“ - Nanotechnology entering data storage*, IEEE Transactions on Nanotechnology **1** (2002), 39–55.
- [Vur01] I. Vurgaftman, J. R. Meyer und L. R. Ram-Mohan, *Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys*, Journal of Applied Physics **89** (2001), 5815–5875.
- [Wal97] S. N. Walck, T. L. Reinecke und P. A. Knipp, *Exciton binding energy in T-shaped semiconductor quantum wires*, Physical Review B Condensed Matter **56** (1997), 9235.
- [War90] C. A. Warwick, W. Y. Jan, A. Ourmazd und T. D. Harris, *Does luminescence show semiconductor interfaces to be atomically smooth?*, Applied Physics Letters **56** (1990), 2666.
- [War92] Colin A. Warwick und Rose F. Kopf, *Microscopic thickness variation of macroscopically uniform quantum wells*, Applied Physics Letters **60** (1992), 386–388.
- [Weg93] W. Wegscheider, L.-N. Pfeiffer, M.-M. Dignam, A. Pinczuk, K.-W. West, S.-L. McCall und R. Hull, *Lasing from excitons in quantum wires*, Physical Review Letters **71** (1993), 4071–4.
- [Weg94] Werner Wegscheider, Loren Pfeiffer, Marc Dignam, Aron Pinczuk, Kenneth West, und Robert Hull, *Lasing in lower-dimensional structures formed by cleaved edge overgrowth*, Semiconductor Science and Technology **9** (1994), 1933–1938.
- [Weg97] Werner Wegscheider, Gert Schedelbeck, Gerhard Abstreiter, Martin Rother und Max Bichler, *Atomically Precise GaAs/AlGaAs Quantum Dots Fabricated by Twofold Cleaved Edge Overgrowth*, Physical Review Letters **79** (1997), 1917–1920.

- [Wei91] Claude Weisbuch und Borge Vinter, *Quantum Semiconductor Structures*, Academic Press, San Diego, 1991.
- [Wei07] Karsten Weicker, *Evolutionäre Algorithmen*, Teubner Verlag, 2007.
- [Wol01] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnar, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova und D. M. Treger, *Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future*, Science **294** (2001), 1488–1495.
- [Wur08] Ursula Wurstbauer, *Herstellung und Charakterisierung von Mangan dotierten Herstellung und Charakterisierung von Mangan dotierten III-V Halbleiterheterostrukturen*, Dissertation, Universität Regensburg, 2008.
- [Yan93] Fang Yang, M. Wilkinson, E. J. Austin und K. P. O'Donnell, *Origin of the Stokes Shift: A Geometrical Model of Exciton Spectra in 2D Semiconductors*, Physical Review Letters **70** (1993), 323.
- [Yos98] Masahiro Yoshita, Hidefumi Akiyama, Takao Someya und Hiroyuki Sakaki, *Microphotoluminescence characterization of cleaved edge overgrowth T-shaped InGaAs quantum wires*, Journal of Applied Physics **83** (1998), 3777.
- [Yos02] Masahiro Yoshita, Hidefumi Akiyama, Loren N. Pfeiffer und Ken W. West, *Quantum wells with atomically smooth interfaces*, Applied Physics Letters **81** (2002), 49.
- [Yos07] Masahiro Yoshita, Hidefumi Akiyama, Loren Pfeiffer und Ken West, *Surface-morphology evolution during growth-interrupt *in situ* annealing on GaAs (110) epitaxial layers*, Journal of Applied Physics **101** (2007), 103541.
- [Yu96] P. Yu und M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors*, Springer Verlag, Berlin, 1996.
- [Zib07] Tobias Zibold, *Semiconductor based quantum information devices: Theory and simulation*, Dissertation, Technische Universität München, 2007.
- [Zre94] A. Zrenner, L. V. Butov, M. Hagn, G. Abstreiter, G. Böhm und G. Weimann, *Quantum Dots Formed by Interface Fluctuations in AlAs/GaAs Coupled Quantum Well Structures*, Physical Review Letters **72** (1994), 3382.

# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die durch ihre Mitarbeit die erfolgreiche Durchführung dieser Arbeit ermöglicht und zur angenehmen Atmosphäre am Lehrstuhl beigetragen haben.

Mein ganz besonderer Dank gilt Herrn PROF. DR. WERNER WEGSCHEIDER, der es mir ermöglicht hat, in seiner Arbeitsgruppe zu promovieren und dieses interessante und vielseitige Thema zu bearbeiten. Seine ständige Bereitschaft für Fragen und Diskussionen, die Freiräume für die Ausgestaltung der Arbeit, viele entscheidende Impulse und nicht zuletzt seine unkomplizierte freundliche Art waren die unverzichtbare Grundlage für diese Arbeit.

Ebenso danke ich Herrn DR. DIETER SCHUH sehr für die Einführung in die Geheimnisse des MBE-Wachstums, die Herstellung zahlreicher Proben, seine große Ausdauer bei der Beantwortung von vielen Fragen und Diskussionen und für den vielen Tee, den er mir angeboten hat, den ich als Kaffeetrinker jedoch stets abgelehnt habe.

Besonders dankbar bin ich für die Zusammenarbeit mit CHRISTIAN NEUGIRG im Rahmen seiner Diplomarbeit. Durch die vielen offenen, angeregten und kritischen Diskussionen, seine zielgerichtete Arbeitsweise und seine unermüdliche wissenschaftliche Neugier waren diese eineinhalb Jahren eine besonders produktive und spannende Zeit.

Ein großes Dankeschön auch an CHRISTOPH KAMSEDER, mit dem ich während seiner Diplomarbeit über Quantendrahlaser zusammenarbeiten durfte und der große Ausdauer bei langwierigen und teilweise frustrierenden Versuchen im Optiklabor gezeigt hat.

Meinem Vorgänger DR. ROBERT SCHUSTER danke ich besonders für die vielen theoretischen und experimentellen Grundlagen, die er in seiner Promotion erarbeitet hat und auf denen diese Arbeit aufbaut.

Herrn PROF. DR. SERGEY GANICHEV danke ich sehr für die Bereitschaft, meine Arbeit zu begutachten und dafür, daß er sich auch von dem etwas größeren Umfang nicht abschrecken läßt.

Ein großer Dank geht auch an Herrn PROF. DR. PETER VOGL und seiner Arbeitsgruppe an der TU München für die Entwicklung der leistungsfähigen Simulations-

software nextnano3. Besonders dankbar bin ich STEFAN BIRNER für seine großzügige, unermüdliche und oft minutenschnelle Unterstützung bei Fragen und Problemen zur Software. Vermutlich kann kein anderer theoretischer Physiker so gut wie er mit Experimentalphysikern reden.

Meiner einzigen Konkurrentin JOHANNA RÖSSLER bin ich sehr dankbar für die vielen interessanten Diskussionen und den Erfahrungsaustausch über unser gemeinsames Thema.

Mein herzlicher Dank gilt auch ELISABETH REIGER für viele fundierte fachliche Diskussionen, sonstige Plaudereien und das gründliche Korrekturlesen meiner Arbeit.

DOMINIK SCHOLZ danke ich für die Weiterführung der Forschung an Quantendrahtlasern, dem Korrekturlesen meiner Arbeit und übergebe gerne den  $\mu$ PL-Versuchsaufbau für die verbleibende Zeit in seine Obhut.

CHRISTIAN REICHL, ELISABETH REINWALD, MARIKA KUBOVA, MARTIN UTZ und ALOIS SCHNEIDER bin ich dankbar für eine Reihe von Messungen, die sich für die Interpretation der Ergebnisse meiner Arbeit als sehr nützlich erwiesen haben. ADRIAN MAIER danke ich für das gründliche Korrekturlesen des Kapitels zum MBE-Wachstum.

Den Mitarbeitern IMKE GRONWALD, SIEGFRIED HEIDER, MARTIN FURTHMEIER, PETER MÜLLER, CHRISTOPH ERMER und FRITZ WÜNSCH bin ich für ihre unermüdliche technische Hilfe sehr dankbar. Mein herzlicher Dank gilt auch ANNEMARIE DINKEL und RENATE CREUZBURG für ihre freundliche Unterstützung bei vielen organisatorischen Angelegenheiten.

Herrn PD DR. ULRICH SCHWARZ bin ich dankbar für die geduldige und fundierte Beantwortung meiner Fragen zur Optik. Den Mitgliedern seiner Arbeitsgruppe danke ich für die angenehme Zusammenarbeit im Labor und ihre bisweilen skurrile Art, die mich mehr als einmal sprachlos gemacht hat.

Allen Mitarbeitern des Lehrstuhls danke ich für unzählige Hilfestellungen, die freundliche entspannte Atmosphäre und den vielen Kuchen.

Mein herzlicher Dank gilt auch besonders meiner Frau HELLA HEISE, die meine Arbeit in vieler Hinsicht unterstützt und meine geistige Abwesenheit während der Schlußphase tapfer ertragen hat.

Diese Arbeit wurde durch den Sonderforschungsbereich 631 der Deutschen Forschungsgemeinschaft finanziell unterstützt.