# Ladungsträgertransport und Ladungsträgerrekombination in AlGaN-basierten DUV-LEDs

vorgelegt von

M. Sc.

## Anton Muhin

an der Fakultät II – Mathematik und Naturwissenschaften der Technischen Universität Berlin zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Naturwissenschaften

– Dr. rer. nat. –

genehmigte Dissertation

Promotionsausschuss:

Vorsitzender: Prof. Dr. Matthias Bickermann

Gutachter: Prof. Dr. Axel Hoffmann

Gutachter: Prof. Dr. Michael Kneissl

Gutachter: Prof. Dr. Ulrich Theodor Schwarz

Tag der wissenschaftlichen Aussprache: 1. März 2024

Berlin 2024

# Ladungsträgertransport und Ladungsträgerrekombination in AlGaN-basierten DUV-LEDs

#### Kurzzusammenfassung

Diese Arbeit befasst sich mit der Analyse der Rekombination sowie des Transports von Ladungsträgern in AlGaN-basierten lichtemittierenden Dioden (LEDs) mit Emissionswellenlängen ( $\lambda$ ) im tiefen ultravioletten (UV) Spektralbereich.

Im ersten Teil der Arbeit wurde die vertikale elektrische Leitfähigkeit ( $\sigma_V$ ) von Mgdotierten p-AlGaN-Schichten sowie von kurz-periodischen AlGaN:Mg-Übergittern (SPSL) mit hohem Al-Anteil untersucht. Es wurde festgestellt, dass  $\sigma_V$  sowohl in AlGaN:Mg-Schichten als auch in AlGaN:Mg-Übergittern eine stark ausgeprägte Abhängigkeit von der Temperatur (T) sowie der elektrischen Feldstärke (F) aufweist und durch die feldunterstützte thermische Ionisation von Akzeptoren, im Rahmen des 3D-Poole-Frenkel-Effekts (3D-PFE), beschrieben werden kann. Durch die Anpassung der gemessenen  $\sigma_V$ -F-T-Kennlinien mit einem 3D-PFE-Modell, konnten mehrere wichtige Materialparameter der untersuchten Strukturen, wie die Ionisierungsenergie und die Akzeptordichte, bestimmt werden. Anhand von Drift-Diffusions-Simulationen und Berechnungen mittels der Transfermatrixmethode, wurden weiterhin die Ionisation und der Transport von Ladungsträgern am Beispiel eines Mg-dotierten AlGaN-Übergitters, mit einem durchschnittlichen Al-Anteil von 68%, untersucht. Es wurde gezeigt, dass  $\sigma_V$  in diesen SPSLs, nur für äußerst hohe Hübe ( $\geq 20\%$ ) und Periodenlängen ( $\geq 12$  nm), die elektrische Leitfähigkeit einer Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Schicht überschreiten kann. Mit den Simulationen quantitativ übereinstimmend, wurde auch experimentell ein niedrigerer  $\sigma_V$ -Wert im Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL mit einer 2 nm Periode, im Vergleich zu einer Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Schicht, ermittelt. Schließlich wurde gezeigt, dass für die Auswahl der passenden Mg-Dotierkonzentration in AlGaN-Schichten, zum Erreichen einer möglichst hohen elektrischen Leitfähigkeit im realen LED-Betrieb, die Beachtung des 3D-PFE unerlässlich ist.

Im weiteren Verlauf der Arbeit wurde die Effizienz von 265 nm LEDs untersucht. Dabei wurden LEDs auf vier verschiedenen AlN/Saphir-Substraten mit unterschiedlichen Durchstoßversetzungsdichten (TDD) verglichen: planar, Hochtemperatur-behandeltes (HTA) AlN, epitaktisch lateral überwachsenes (ELO) AlN und HTA-ELO AlN. Die gemessene externe Quanteneffizienz jeder charakterisierten LED wurde durch die Kombination von einer auf dem ABC-Modell basierenden Methode und von kalibrierten Monte-Carlo Raytracing-Simulationen in die Ladungsträgerinjektionseffizienz ( $\eta_{CIE}$ ), die strahlende Rekombinationseffizienz ( $\eta_{RRE}$ ) und die Lichtextraktionseffizienz ( $\eta_{LEE}$ ) aufgeteilt. Es wurde festgestellt, dass LEDs mit Wachstum auf ELO- und HTA-ELO-Substraten eine maximale  $\eta_{RRE}$  ( $\eta_{RRE}^{max}$ ) von jeweils (57±5)% und (55±6)% aufweisen, während  $\eta_{RRE}^{max}$  für Bauelemente mit Wachstum auf HTA und dem planaren Substrat mit jeweils (45±5)% und (12±6)% geringer sind. Dies offenbarte, dass die TDD nicht der einzige ausschlaggebende Parameter, welcher für die Höhe von  $\eta_{RRE}$  in den untersuchten LEDs verantwortlich, ist. Denn Bauelemente mit Wachstum auf ELO-Substraten haben im Vergleich zu LEDs auf HTA-

ELO-Substraten (TDD = 0,95×10<sup>9</sup> cm<sup>-2</sup>) ein vergleichbares  $\eta_{RRE}^{max}$  bei viel höherer TDD (1,6×10<sup>9</sup> cm<sup>-2</sup>). Als Ursache für dieses Verhalten konnte die Ausbildung von Versetzungshalbringen ausgemacht werden, welche durch den Einbau einer kompressiven Verspannung in AlN-Schichten, im Zuge der Hochtemperatur-Behandlung bei den HTA- und HTA-ELO-Substraten, entstehen. Weiterhin konnte neben den Shockley-Read-Hall-Rekombinationskonstanten ( $A = (2\pm1)\times10^7 \text{ s}^{-1}$  auf ELO- und HTA-ELO-AlN/Saphir sowie  $A = (6\pm2)\times10^7 \text{ s}^{-1}$  auf HTA-AlN/Saphir) auch die Höhe des Auger-Koeffizienten (C) auf (4±2)×10<sup>-30</sup> cm<sup>6</sup>s<sup>-1</sup> bestimmt werden. Es wurde zusätzlich anhand von Simulationen demonstriert, dass die untersuchten LEDs, bei betriebsrelevanten Stromdichten, aufgrund des hohen *C*-Wertes, auch beim Wachstum auf äußerst TDD-armen AlN-Substraten, ein  $\eta_{RRE}^{max}$  von 100% nicht erreichen können. Weiterhin wurde gezeigt, dass für Bauelemente mit der untersuchten Heterostruktur eine Reduktion der TDD auf < 1,6×10<sup>9</sup> cm<sup>-2</sup> lediglich für niedrige Stromdichten (≤ 25 Acm<sup>-2</sup>) zu einer relevanten Erhöhung der  $\eta_{RRE}^{max}$ -Werte führen würde. Schließlich beträgt  $\eta_{CIE}$  der untersuchten LEDs, unabhängig vom Substrat, zwischen 40% und 55%.

Abschließend wurden auch  $\eta_{CIE} = (26\pm8)\%$ ,  $\eta_{RRE}^{max} = (43\pm7)\%$  und  $\eta_{LEE} = (8,8\pm0,8)\%$  von LEDs mit  $\lambda = 233$  nm bestimmt. Diese Ergebnisse deuten darauf hin, dass die Lichtextraktionseffizienz und die Ladungsträgerinjektionseffizienz ein großes Potenzial für die Optimierung von besonders kurzwelligen UV-LEDs bieten.

# Charge carrier transport and charge carrier recombination in AlGaN-based DUV-LEDs

#### Abstract

The present work analyses the recombination and the transport of charge carriers in AlGaNbased light-emitting diodes (LEDs) with emission wavelengths ( $\lambda$ ) in the deep UV spectral range.

In this context, the vertical electrical conductivity ( $\sigma_V$ ) of Mg-doped p-AlGaN layers and short-period AlGaN:Mg superlattices (SPSL) with high Al mole fraction was investigated. It was found that  $\sigma_V$  exhibits a strong temperature (T) and electric field strength (F) dependence in both AlGaN:Mg-layers and AlGaN:Mg-SPSLs. This behavior could be attributed to the field-assisted thermal ionization of Mg-acceptors described by the 3D Poole-Frenkel effect (3D-PFE). By fitting the measured  $\sigma_V$ -*F*-*T*-curves using a 3D-PFE model, several important material parameters of the investigated structures could be determined, i.e. the ionization energy and the acceptor density. Using drift-diffusion simulations and calculations based on the transfer matrix method the ionization and the transport of charge carriers in AlGaN:Mg-SPSLs were investigated on the example of a superlattice with an average Al mole fraction of 68%. The calculations show that  $\sigma_V$  in this SPSL can only exceed the electrical conductivity of an Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-layer for extremely high Al mole fraction differences between wells and barriers ( $\geq 20\%$ ) and extremely long period lengths ( $\geq$  12 nm). The measured  $\sigma_V$  of an Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL with a 2 nm period is lower than the vertical conductivity in a Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-layer, which is in quantitative agreement with the simulation results. Finally, it was shown that taking 3D-PFE into account is essential for proper selection of the Mg-doping concentration and maximization of the electrical conductivity in AlGaN:Mg-layers during LED operation.

Next, the efficiency of 265 nm LEDs was investigated. Here, LEDs on four different AlN/sapphire substrates, i.e. planar, high-temperature-annealed (HTA) AlN, epitaxial laterally overgrown (ELO) AlN and HTA-ELO AlN with different threading-dislocation densities (TDD), were analyzed. The measured external quantum efficiency of each characterized LED was separated into the carrier injection efficiency ( $\eta_{CIE}$ ), the radiative recombination efficiency ( $\eta_{RRE}$ ), and the light extraction efficiency ( $\eta_{LEE}$ ). This is achieved by combining an ABC-model based method and calibrated Monte Carlo ray tracing simulations. LEDs grown on ELO and on HTA-ELO substrates have a maximum  $\eta_{RRE}$  ( $\eta_{RRE}^{max}$ ) of (57±5)% and (55±6)%, respectively. The  $\eta_{RRE}^{max}$  for devices with growth on HTA  $((45\pm5)\%)$  and the planar  $((12\pm6)\%)$  substrates are lower. These results revealed that for the investigated devices the TDD is not the only parameter responsible for the quantity of the  $\eta_{RRE}$ , as LEDs on ELO substrate have a comparable  $\eta_{RRE}^{max}$  with a much higher TDD  $(1.6 \times 10^9 \text{ cm}^{-2})$  compared to LEDs on HTA-ELO substrate with lower TDD  $(0.95 \times 10^9 \text{ cm}^{-2})$ . The discovered discrepancy is attributed to the formation of dislocation half-loops (DHL). The DHLs are generated due to compressive strain in AlN layers and are induced during the high-temperature process of the HTA and HTA-ELO substrates. In addition, the Shockley-Read-Hall recombination constants ( $A = (2\pm 1) \times 10^7$  s<sup>-1</sup> on ELO and HTA-ELO-AlN/sapphire and  $A = (6\pm2)\times10^7 \text{ s}^{-1}$  on HTA-AlN/sapphire) are determined, as well as the Auger coefficient  $C = (4\pm2)\times10^{30} \text{ cm}^6\text{s}^{-1}$ . As it was theoretically demonstrated by simulations, at current densities which are relevant for applications the investigated LEDs cannot achieve a  $\eta_{RRE}^{max}$  of 100% due to the high C value even when grown on AlN substrates with extremely low TDD. Moreover, for the investigated heterostructure such a low TDD would only lead to a significant increase of  $\eta_{RRE}^{max}$  for relatively low current densities ( $\leq 25 \text{ Acm}^{-2}$ ). Additionally, it was shown that  $\eta_{CIE}$  of the investigated LEDs ranges from 40% to 55% regardless of the substrate.

Finally,  $\eta_{CIE} = (26\pm8)\%$ ,  $\eta_{RRE}^{max} = (43\pm7)\%$  and  $\eta_{LEE} = (8.8\pm0.8)\%$  of LEDs with  $\lambda = 233$  nm were determined. These results indicate that the light extraction efficiency and the carrier injection efficiency offer a great potential for optimization of UV LEDs with particularly short emission wavelengths.

# Inhaltsverzeichnis

1	Ein	leitung	1
2	The	eoretische und experimentelle Grundlagen	7
	2.1	Heterostruktur einer DUV-LED	7
	2.2	Effizienz von DUV-LEDs	
	2.3	Lichtextraktionseffizienz von DUV-LEDs	
	2.4	Strahlende Rekombinationseffizienz von DUV-LEDs und das ABC-Modell	14
	2.4.	1 Band-zu-Band-Rekombination	
	2.4.	2 Auger-Rekombination	
	2.4.	3 SRH-Rekombination	
	2.4.	4 Durchstoßversetzungen	
	2.4.	5 ABC-Modell	21
	2.5	Ladungsträgerinjektionseffizienz	24
	2.6	Elektrolumineszenz-Spektroskopie	26
3	Ver	tikale Leitfähigkeit von p-dotierten AlGaN:Mg-Schichtstrukturen	ı 29
	3.1	Heterostruktur der untersuchten DUV-LEDs	
	3.2	Bestimmung der vertikalen Leitfähigkeit in SPSLs und Bulk-Schichten	

	3.3	Ionisations- und Stromtransportmechanismen in AlGaN:Mg-Bulk-Schichten	42			
	3.3	1 Poole-Frenkel-Effekt	44			
	3.3	2 Hopping-Leitung	51			
	3.4	Fit des $\sigma V(F,T)$ -Verlaufs der Al <sub>0,68</sub> Ga <sub>0,32</sub> N:Mg-Bulk-Schicht	57			
	3.5	Vertikale Leitfähigkeit in AlGaN:Mg-Übergittern	63			
	3.5	1 Ionisation von Akzeptoren in Übergittern	63			
	3.5	2 Ladungsträgertransport in Übergittern	67			
	3.6	Fit des $\sigma V(F,T)$ -Verlaufs in AlGaN:Mg-SPSLs	73			
	3.7	Zusammenfassung	79			
4	La	lungsträgerrekombinationsmechanismen von 265 nm LEDs	85			
	4.1	Templates und Heterostruktur der 265 nm DUV-LEDs	89			
	4.2	Elektrooptische Charakterisierung der 265 nm LEDs	93			
	4.3	Titkov-Dai-Methode	96			
	4.4	Strahlende Rekombinationseffizienz von 265 nm LEDs	101			
	4.5	Bestimmung der Rekombinationskonstanten (A, B und C)	107			
	4.6	Einfluss der SRH-Rekombination auf die Effizienz von 265 nm LEDs	110			
	4.7	Ladungsträgerinjektionseffizienz von 265 nm LEDs	116			
	4.8	Zusammenfassung	117			
5	Eff	izienz von 233 nm LEDs	121			
	5.1	Heterostruktur von 233 nm LEDs	122			
	5.2	Teileffizienzen der externen Quanteneffizienz von 233 nm LEDs	123			
6	Zu	sammenfassung und Ausblick	129			
L	iterat	urverzeichnis	135			
-	,		100			
A A	Anhang A: Korrektur der <i>j-U</i> -Kennlinien von DUV-LEDs mit Al <sub>0.86</sub> Ga <sub>0.14</sub> N:Mg/Al <sub>0.65</sub> Ga <sub>0.35</sub> N:Mg-SPSLs					
A	Anhang B: Elektrische Leitfähigkeit von DPD-Schichten					
Anhang C: Probenverzeichnis						
						A
п	Danksagung					
$\boldsymbol{\nu}$			- 10			

# 1 Einleitung

Die effiziente Erzeugung von ultraviolettem (UV) Licht, vor allem im UVC-Spektralbereich (100 nm – 280 nm), rückt aufgrund der zahlreichen und vielversprechenden Anwendungsmöglichkeiten immer mehr in den Fokus der Wissenschaft. So kann das UVC-Licht durch Inaktivierung von Bakterien und Viren zur Desinfektion und Sterilisation von Oberflächen, Luft und Wasser verwendet werden. Dabei wird durch die Absorption der energiereichen UVC-Strahlung das zur Reproduktion notwendige Erbgut beschädigt, weshalb die bestrahlten Mikroorganismen sich nicht mehr vermehren können. So ist bei der Emissionswellenlänge ( $\lambda$ ) von 254 nm bereits eine Dosis von 10,4 mJ cm<sup>-2</sup> ausreichend, um 99,99% des im menschlichen Speichel gelösten SARS-CoV-2 (engl. severe acute respiratory syndrome coronavirus 2) zu inaktivieren [1]. Auf die gleiche Weise kann das UVC-Licht gegen die Ausbreitung von diversen anderen Viren und Bakterien wie beispielsweise Influenza [2] und Pseudomonas Aeruginosa<sup>1</sup> [3] eingesetzt werden, aber auch Multiresistente Erreger, die gegenüber herkömmlichen Antibiotika resistent sind, inaktivieren [4]. Damit eröffnet sich für das UVC-Licht eine Vielzahl an Anwendungsmöglichkeiten in Einrichtungen mit vulnerablen Personengruppen und an Orten mit einem erhöhten Risiko für Übertragung von Krankheitserregern. Dazu zählen zum Beispiel die Reinigung der Luft [5] und Oberflächen [6] in öffentlichen Transportmitteln (Bussen, Bahn, Flugzeugen...) und in öffentlichen (Krankenhäusern, Altersheimen, Einrichtungen Schulen, Veranstaltungsräumen, Flughäfen...). Zusätzlich stellt die Desinfektion und Aufbereitung

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Häufigster Erreger bei Lungenentzündungen.

von Trinkwasser [7] in Kläranlagen, in Wohnräumen, auf Schiffen und in Flugzeugen ein großes Anwendungsfeld dar.

Im Gegensatz zu der Fülle an Anwendungen sind die Möglichkeiten zur künstlichen Erzeugung des UVC-Lichts vergleichsweise rar. Eine der am häufigsten verwendeten konventionellen UVC-Lichtquellen ist die Quecksilberdampflampe mit einer Hauptemission bei 254 nm. Seit Anfang der 2000er Jahre [8] existieren auch lichtemittierende Dioden (LEDs) mit Emissionswellenlängen im UVC-Spektralbereich, die sogenannten DUV-LEDs (engl. deep UV) auf Basis von Aluminiumgalliumnitrid (AlGaN). Die Vorteile von DUV-LEDs im Vergleich zu Quecksilberdampflampen sind: schnellere Ein- und Ausschaltzeiten, geringere Größe, Robustheit, niedrigere Betriebsspannungen, leichtere Strahlformung, Hgfreie Herstellung und die Möglichkeit einer präzisen Einstellung der Emissionswellenlänge. Insbesondere die letzten beiden Aspekte sind zukunftsweisend. So wurde im Rahmen des Minamata-Abkommens [9], welches von Deutschland und 135 anderen Ländern<sup>1</sup> unterzeichnet wurde und bereits seit dem 1. Januar 2018 innerhalb der Europäischen Union in Kraft getreten ist, das Ziel festgehalten: "den Schutz der menschlichen Gesundheit und der Umwelt vor anthropogenen Emissionen und der Freisetzungen von Quecksilber und Quecksilberverbindungen in die Luft, das Wasser und den Boden zu sichern" [10]. Aus diesem Grund ist es absehbar, dass die umweltschädlichen Quecksilberdampflampen im Laufe der Zeit nach und nach durch Hg-freie Lichtquellen wie AlGaN-DUV-LEDs, ersetzt werden. Die Möglichkeit der gezielten Auswahl der AlGaN-Legierungszusammensetzung und der daraus resultierenden Änderung der Bandlückenenergie  $(E_a)$  erlaubt weiterhin die lückenlose Einstellung der Emissionswellenlänge von DUV-LEDs zwischen 210 nm [11] und 370 nm [12]. Im Gegensatz zu anderen UV-Quellen, mit diskreten Emissionslinien, ist damit eine optimale Abstimmung der Emissionswellenlänge auf die jeweilige Anwendung möglich. Ein zusätzliches Anwendungsfeld, welches durch die Emission der DUV-LEDs im fernen UVC-Spektralbereich erschlossen werden kann, ist die Detektion von Stickstoffdioxid Stickstoffmonoxid (NO) und  $(NO_2)$ bei 226 nm [13]. Das Hauptanwendungsfeld von DUV-LEDs mit kurzen Emissionswellenlängen ( $\leq 233$  nm) bleibt aber die Desinfektion. Dieses kurzwellige Licht wird bei Bestrahlung des menschlichen Körpers bereits in der Hornschicht (Stratum corneum) absorbiert [14] und verursacht keine irreparablen Schäden der Desoxyribonukleinsäure (DNS). Deshalb sind Bauelemente mit solch kurzen Emissionswellenlängen für Desinfektionsanwendungen in Räumlichkeiten mit menschlicher Anwesenheit besonders interessant.

Allerdings hindert neben der vergleichsweise kurzen Lebensdauer [15] vor allem die geringe Effizienz von DUV-LEDs den breitflächigen Einsatz dieser Bauelemente für die zahlreichen Anwendungen. Ein in der Wissenschaft oft genutztes Maß für den Wirkungsgrad einer LED ist die sogenannte externe Quanteneffizienz ( $\eta_{EQE}$ ). Die externe Quanteneffizienz gibt den Anteil der injizierten Ladungsträger an, welcher in Form von Photonen aus der LED emittiert wird. In Abbildung 1 ist eine Auswahl in der Literatur berichteter  $\eta_{EQE}$ -Werte von UV-LEDs grafisch dargestellt. Daraus lassen sich zwei wichtige Punkte in Bezug auf diese Bauelemente ableiten: Erstens, die externe Quanteneffizienz von

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Stand 06/2023.



Abbildung 1: Auswahl in der Literatur berichteter Werte für die externe Quanteneffizienz von UV-LEDs. Adaptierte Abbildung aus [17] mit offizieller Genehmigung zur Verwendung von "Springer Nature".

DUV-LEDs ist niedrig und liegt beispielsweise für Bauelemente mit  $\lambda = 254$  nm bei Zum Vergleich, lediglich  $\sim 5\%$ . der Wirkungsgrad von Niederdruck-Quecksilberdampflampen, bei der gleichen Emissionswellenlänge, liegt bei bis zu 35% [16]. Zweitens, die  $\eta_{EOE}$  von DUV-LEDs sinkt im UVC-Spektralbereich nahezu exponentiell für kürzere Emissionswellenlängen und liegt für Bauelemente mit  $\lambda < 230$  nm unter 1%. Um die Ursachen für die niedrige Effizienz von AlGaN-basierten DUV-LEDs zu verstehen und diese gezielt zu steigern, ist zunächst die Identifikation der Hauptverlustmechanismen der  $\eta_{EOE}$  notwendig. Einer dieser Verlustmechanismen ist die betriebsbedingte Aufheizung von DUV-LEDs. Wie stark die Effizienz dieser Bauelemente durch die Wärmeentwicklung während des Betriebs beeinträchtigt wird, ist anhand einer im Dauerstrich- (engl. continuous wave, cw) und im Pulsbetrieb vermessenen und zum Chip aufgebauten 233 nm LED<sup>1</sup> in Abbildung 2 gezeigt. Bei kleinen Stromstärken (I < 30 mA) ist die Effizienz der charakterisierten DUV-LED im cw- und Pulsbetrieb zunächst vergleichbar. Aufgrund der vergleichsweise niedrigen Wärmeleitfähigkeiten und der vergleichsweise hohen elektrischen Widerstände der einzelnen DUV-LED-Schichten, kann die Menge der generierten Wärme im cw-Betrieb, für höhere Stromstärken (I > 30 mA), nicht ausreichend schnell abgeführt werden. Trotz der Verwendung einer Al-Wärmesenke und des darunter montierten Peltier-Elements gehen die gepulst und cw gemessenen  $\eta_{EOE}$ -I-Kennlinien immer mehr auseinander. In der Folge beträgt der  $\eta_{EQE}$ -Unterscheid zwischen den beiden Messmodi bei I = 200 mA rund 50%. Bei den allermeisten Anwendungen werden die LEDs

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Die Charakterisierung erfolgte durch Martin Guttmann (Ferdinand-Braun-Institut, Leibniz-Institut für Höchstfrequenztechnik, FBH).



Abbildung 2: Vergleich der im gepulsten und cw-Modus gemessenen  $\eta_{EQE}$ -I-Kennlinien einer an der Technische Universität Berlin (TUB) gewachsenen und anschließend zum Chip aufgebauten DUV-LED mit  $\lambda$  = 233 nm.

im cw-Modus betrieben. Deshalb stellt neben der Erhöhung der Wärmeleitfähigkeit vor allem die Reduktion des elektrischen Widertandes der einzelnen AlGaN-Schichten der DUV-LED-Heterostruktur einen wichtigen Baustein auf dem Weg zum effizienten Betrieb dieser Bauelemente dar. Dabei sind p-dotierte AlGaN:Mg-Schichten besonders resistiv und beeinträchtigen neben der Betriebsspannung (U) auch die Effizienz von AlGaN-basierten LEDs [18]. Daneben werden p-dotierte AlGaN-Schichten mit hoher elektrischer Leitfähigkeit ( $\sigma$ ) für die Realisierung von DUV-LEDs mit nicht absorbierender *p*-Seite [19] sowie für DUV-Laserdioden (LD) auf Basis von AlGaN [20] benötigt. Deshalb widmet sich die vorliegende Arbeit, nach der Behandlung von Grundlagen und experimentellen Methoden in Kapitel 2, der Untersuchung der Leitfähigkeit, des Ladungsträgertransports und der Ionisation von Mg-Akzeptoren in p-AlGaN:Mg-Schichten mit hohem Al-Anteil (Kapitel 3). Dabei wird zusätzlich das Konzept der kurzperiodischen Übergitter (engl. shortperiod superlattice, SPSL), welches eine Erhöhung der elektrischen Leitfähigkeit gegenüber von AlGaN:Mg-Schichten durch die erleichterte Ionisation der Mg-Akzeptoren verspricht [21], analysiert. Zu diesem Zweck wird eine Methode für die experimentelle Quantifizierung beim Betrieb einer LED ausschlaggebenden vertikalen Leitfähigkeit ( $\sigma_V$ ) in *p*-AlGaN:Mg-Schichten und -Übergittern vorgestellt. Diese Methode wird zur Messung von in  $\sigma_V$ einem Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL, in einem Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL sowie in einer Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Schicht verwendet. Abschließend werden die einzelnen  $\sigma_V$ -Werte untereinander verglichen und deren Temperaturund Feldstärkeabhängigkeiten anhand von Transportund Ionisationsmodellen der Ladungsträger beschrieben.

Auf der Suche nach weiteren Hauptverlustmechanismen in DUV-LEDs ist die Unterteilung der externen Quanteneffizienz in drei Teileffizienzen: die Ladungsträgerinjektionseffizienz (engl. *charge carrier injection efficiency*,  $\eta_{CIE}$ ), die strahlende Rekombinationseffizienz (engl. radiative recombination efficiency,  $\eta_{RRE}$ ) und die Lichtextraktionseffizienz ( $\eta_{LEE}$ ) hilfreich. Dabei beschreibt  $\eta_{CIE}$  den Anteil der injizierten Ladungsträger, der die Quantentöpfe erreicht;  $\eta_{RRE}$  beschreibt den Anteil strahlend rekombinierender Ladungsträgerpaare in den Quantentöpfen;  $\eta_{LEE}$  beschreibt den Anteil an generierten Photonen, welcher aus der LED ausgekoppelt werden kann. Die direkte Messung der einzelnen Teileffizienzen der  $\eta_{EQE}$  in einer LED ist nicht einfach und im Falle der  $\eta_{CIE}$  noch nicht möglich. Aus diesem Grund existieren kaum Veröffentlichungen mit experimentell bestimmten Größen von allen drei Teileffizienzen der  $\eta_{EQE}$  einer einzigen DUV-LED. Genau diese Herausforderung ist eines der Hauptanliegen der vorliegenden Arbeit und wird in Kapitel 4 behandelt. Dabei werden alle drei Teileffizienzen der gemessenen  $\eta_{EQE}$  von DUV-LEDs mit einer Emissionswellenlänge von 265 nm, anhand des sogenannten Titkov-Dai-Verfahrens und anhand von kalibrierten Raytracing-Simulationen, bestimmt. Um zusätzlich den Einfluss der im AlGaN-Materialsystem prominenten Durchstoßversetzungen (engl. threading dislocation, TD), vor allem auf die strahlende Rekombinationseffizienz [22] der 265 nm LEDs, zu untersuchen, erfolgte das Wachstum der charakterisierten Bauelemente auf vier verschiedenen AlN/Saphir-Templates mit unterschiedlichen Durchstoßversetzungsdichten (TDD).

Schließlich wird in Kapitel 5 die Methodik zur Bestimmung der drei Teileffizienzen der  $\eta_{EQE}$ aus Kapitel 4 auf DUV-LEDs mit  $\lambda$  = 233 nm ausgeweitet. Dabei soll herausgefunden werden, wie stark die Teileffizienzen im Einzelnen die  $\eta_{EQE}$  von 233 nm LEDs beeinträchtigen. Diese Untersuchungen sollen zusätzlich zum Verständnis des nahezu exponentiellen  $\eta_{EQE}$ -Rückgangs von DUV-LEDs mit kurzen Emissionswellenlängen beitragen.

## 2 Theoretische und experimentelle Grundlagen

In diesem Kapitel werden die für das Verständnis und die Interpretation der folgenden Messergebnisse relevanten Grundlagen von AlGaN-basierten LEDs erläutert. Dabei wird in Kapitel 2.1 die typische Heterostruktur einer DUV-LED am Beispiel einer LED mit einer Emissionswellenlänge von 265 nm (im Folgenden als 265 nm LED bezeichnet) erklärt. In Kapitel 2.2 wird die Effizienz und in Kapitel 2.3 bis 2.5 die Rekombinationsmechanismen in AlGaN-LEDs diskutiert. Schließlich wird in Kapitel 2.6 auf die zentrale Messmethode für die Charakterisierung der Bauelemente in dieser Arbeit eingegangen - die temperaturabhängige Elektrolumineszenz-Spektroskopie (EL).

#### 2.1 Heterostruktur einer DUV-LED

Eine LED besteht aus einer Reihe von Halbleiterschichten mit einer spezifischen Zusammensetzung und Dotierung. Die Gesamtheit dieser Schichten wird als Heterostruktur bezeichnet. Das Wachstum der einzelnen Halbleiterschichten erfolgt dabei meistens mit Hilfe der Molekularstrahlepitaxie oder wie im vorliegenden Fall mittels der metallorganischen Gasphasenepitaxie (engl. *metal-organic vapor phase epitaxy*, MOVPE). Abstrakt kann eine LED in vier Bereiche eingeteilt werden: 1) Substrat beziehungsweise Template,



Abbildung 3: Schematische Darstellung der Heterostruktur einer 265 nm LED.

2) *n*-Seite, 3) Mehrfachquantentopf (engl. *multiple quantum well, MQW*) und 4) *p*-Seite. Der Zweck und die Anforderungen an die einzelnen Bereiche werden im Folgenden, am Beispiel einer 265 nm LED, die in Kapitel 4 analysiert wird, erläutert. Der schematische Aufbau der Heterostruktur dieser LED ist in Abbildung 3 dargestellt.

Das Substrat dient als Träger für die gesamte LED-Heterostruktur und sollte deshalb mechanisch stabil sein. Neben technologischen und kommerziellen Anforderungen muss das Substrat weiterhin eine hohe kristalline Qualität aufweisen, eine möglichst geringe Gitterfehlanpassung zu der restlichen Heterostruktur haben und, um das Licht durch das Substrat auskoppeln zu können, auch UV-transparent sein. Bedingt durch die geringe Größe, begrenzte Verfügbarkeit, den hohen Preis sowie die Absorption von UV-Licht durch Punktdefekte [23], werden heutzutage statt AlN-Substraten vor allem Fremdsubstrate zum Wachstum von AlGaN-LEDs verwendet. Dabei wird meistens der vergleichsweise preiswerte und aufgrund der hohen Bandlückenenergie (8,8 eV [24]) UV-transparente Saphir (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) eingesetzt. Das Wachstum von AlGaN-basierten DUV-LEDs erfolgt somit auf mit AlN überwachsenen Saphir-Substraten (hier auf der 0001-Ebene), welche als AlN/Saphir-Templates beziehungsweise kurz als Templates (engl. templates) bezeichnet werden. Für die 265 nm LEDs werden dabei Saphir-Substrate mit einer Dicke von 430 µm verwendet, welche durch eine 1,5 µm dicke AlN-Schicht überwachsen werden. Neben den vielen Vorteilen bringt das Wachstum von AlGaN-LEDs auf AlN/Saphir-Templates auch einen entscheidenden Nachteil mit sich - eine Gitterfehlanpassung zwischen Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> und AlN von etwa 13% [25]. Der dadurch aufgebaute Kristallstress wird teilweise durch die Bildung von Defekten an der Grenzfläche zwischen Saphir und AlN abgebaut. Wie aus der Abbildung 4 zu sehen ist, kommt es dabei vor allem zur Generation von Durchstoßversetzungen mit einer hohen Dichte im Bereich von  $10^{10}$  cm<sup>-2</sup> [26]. Aufgrund der Ausrichtung von TDs in Wachstumsrichtung (im vorliegenden Fall in c-Richtung, 0001), ist die kristalline Qualität



Saphir AIN

Abbildung 4: AlN-Saphir-Grenzfläche aufgenommen<sup>1</sup> mittels der Transmissionselektronenmikroskopie (TEM). Deutlich zu sehen ist die Ausbildung von Durchstoßversetzungen mit einer hohen Dichte, welche sich durch den hellen Kontrast gegenüber dem dunklen Halbleiter zeigen.

der AlN/Saphir-Templates ausschlaggebend für die Durchstoßversetzungsdichte von allen darauffolgenden Schichten, welche vollverspannt zu AlN gewachsen werden. Wie in Kapitel 2.4.4 im Detail beschrieben wird, können Durchstoßversetzungen als nichtstrahlende Rekombinationszentren agieren und somit die Emissionsleistung der Bauelemente erheblich senken. In den letzten Jahrzehnten wurden mehrere Verfahren entwickelt, um die TDD in AlN/Saphir-Templates zu reduzieren, einige davon werden in Kapitel 4.1 erläutert.

Um eine 265 nm LED herzustellen, werden die AlN/Saphir-Templates in einer MOVPE-Anlage von AlN-Pufferschichten (400 nm) und n-dotierten Schichten überwachsen. Die Elektronenleitfähigkeit von AlGaN-Schichten in der *n*-Seite wird meistens durch den Einbau von Siliziumatomen gewährleistet. Zwei n-Schichten sind dabei für den Betrieb der 265 nm LEDs besonders wichtig: die n-Stromspreizschicht und die darüber liegende n-Kontaktschicht. Die Aufgabe der *n*-Stromspreizschicht besteht in der möglichst homogenen Verteilung des durch den n-Kontakt injizierten Elektronenstromes, sowohl in die vertikale als auch in die laterale Richtung. Aus diesem Grund muss die *n*-Stromspreizschicht eine hohe elektrische Leitfähigkeit aufweisen und möglichst dick sein. Wie in Kapitel 3 gezeigt wird, sinkt die elektrische Leitfähigkeit sowohl von *n*- als auch von *p*-dotierten Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N-Schichten mit steigendem x. Folglich sollte der Al-Anteil in der n-Stromspreizschicht so gering wie möglich gewählt werden, um eine möglichst hohe elektrische Leitfähigkeit zu gewährleisten. Für Schichten mit einem geringen Al-Anteil sinkt allerdings die kritische Schichtdicke, ab der eine AlGaN-Schicht nicht mehr vollverspannt auf AlN wachsen kann und schließlich relaxiert [27]. Als Kompromiss zwischen der elektrischen Leitfähigkeit und der Schichtdicke wird für die 265 nm LEDs eine 900 nm dicke Al<sub>0,76</sub>Ga<sub>0,24</sub>N:Si-n-Stromspreizschicht verwendet. Die über der *n*-Stromspreizschicht liegende *n*-Kontaktschicht befindet sich direkt unterhalb des *n*-Kontaktes und wird mit der Absicht gewachsen den Kontaktwiderstand und damit die Betriebsspannung einer LED zu reduzieren. Um dies zu erreichen, sollte auch hier der Al-Anteil möglichst niedrig sein [28].

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Die TEM-Aufnahme erfolgte durch Leonardo Cancellara Leibniz-Institut für Kristallzüchtung (IKZ).

Gleichzeitig sollte aber der Al-Anteil in der *n*-Kontaktschicht hoch genug sein, damit die UV-Transparenz gewährleistet ist und die kritische Schichtdicke größer als die Mesa-Ätzgenauigkeit zum Freilegen der *n*-Seite bleibt. Als ein weiterer Kompromiss wird in den an der TU-Berlin gewachsenen 265 nm LEDs eine 200 nm dicke Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Si-*n*-Kontaktschicht verwendet. Es soll darauf hingewiesen werden, dass die Pufferschichten, die Stromspreizschicht sowie die *n*-Kontaktschicht durch Übergangsschichten mit graduell reduziertem Al-Gehalt verbunden sind.

Auf die *n*-Seite folgt von der Wachstumsreihenfolge der Mehrfachquantentopf. Die MQW-Region der in dieser Arbeit untersuchten Bauelemente besteht aus drei Quantentöpfen, welche von Si-deltadotierten<sup>1</sup> Quantenbarrieren begrenzt werden und so den Einschluss von injizierten Ladungsträgern erlauben. Über die Dicken und die Al-Anteile der einzelnen MQW-Schichten lässt sich die Emissionswellenlänge der LEDs einstellen. So werden zum Erreichen der angestrebten Emissionswellenlänge bei den 265 nm LEDs 5 nm dicke Al<sub>0,63</sub>Ga<sub>0,37</sub>N:Si-Barrieren und 1,4 nm dicke Al<sub>0,48</sub>Ga<sub>0,52</sub>N-Quantentöpfe verwendet.

Der letzte Teil der Heterostruktur einer typischen DUV-LED ist die p-Seite. An der Grenze zwischen der MQW-Region und der p-Seite wird zusätzlich eine nicht dotierte Elektronensperrschicht (engl. electron blocking layer, EBL) gewachsen. Die Aufgabe des EBL ist es, den in Kapitel 2.5 thematisierten Elektronenleckstom aus der MQW-Region in Richtung der *p*-Seite einzudämmen. Für diesen Zweck wird der Al-Anteil im Vergleich zu der letzten Barriere des MQW drastisch angehoben, was in 265 nm LEDs durch den Einsatz einer 10 nm dicken Al<sub>0.83</sub>Ga<sub>0.17</sub>N-Schicht erreicht wird. Da die Elektronensperrschicht nicht nur die Elektronen am Erreichen der *p*-Seite hindert, sondern auch eine Potenzialbarriere für den Lochtransport in die MQW-Region darstellt, wird oberhalb des EBLs eine Lochinjektionsschicht (engl. hole injection layer, HIL) gewachsen. Der HIL weist einen niedrigeren Al-Anteil im Vergleich zum EBL auf und ist mit Magnesium p-dotiert. Die Absicht hinter dem Einsatz des HILs ist, die zu überwindende EBL-Potenzialbarriere für die Injektion der Löcher von dem p-Kontakt in die MQW-Region nicht an einem Stück zu überwinden, sondern energetisch gesehen in mehreren Schritten. Hierfür wird bei den 265 nm LEDs ein 25 nm dicker Al<sub>0.75</sub>Ga<sub>0.25</sub>N:Mg-HIL verwendet. Die äußerst schwierige *p*-Kontaktierung von AlGaN:Mg, insbesondere für Schichten mit hohen Al-Anteil [29], bleibt nach wie vor eines der größten Hindernisse auf dem Weg zu hocheffizienten DUV-LEDs. Aus diesem Grund werden DUV-LEDs, deren Betrieb auf Langlebigkeit ausgelegt ist [30], mit einer aus GaN:Mg bestehenden p-Kontaktschicht überwachsen. Der Nachteil bei der Verwendung einer GaN:Mg-p-Kontaktschicht ist die niedrige Bandlückenenergie von GaN (3,4 eV [31]) und die damit verbundene Bandkantenabsorption von Licht mit  $\lambda \leq 365$  nm. Somit werden in einer DUV-LED, je nach Dicke und dem Grad der Koaleszenz der GaN:Mg-Kontaktschicht, bis zur Hälfte der generierten Photonen in der p-Kontaktschicht absorbiert. Damit das GaN:Mg koalesziert und eine zufriedenstellende p-Kontaktierung möglich ist, wird bei den 265 nm LEDs eine 200 nm dicke *p*-Kontaktschicht gewachsen. Aufgrund der hohen GaN:Mg-Schichtdicke kann bei diesen Bauelementen von einer nahezu vollständigen

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Deltadotierung bedeutet in diesem Fall, dass das mittlere Drittel jeder MQW-Barrie Si-dotiert ist und der Rest der Quantenbarrieren undotiert bleibt.

Absorption des in Richtung der *p*-Seite abgestrahlten Lichts ausgegangen werden [27]. Folglich muss das nicht absorbierte DUV-Licht durch die Seitenfacetten und vor allem durch die optisch transparente *n*-Seite sowie das Substrat extrahiert werden.

Im Anschluss an das Wachstum werden die Halbleiterschichten zu LEDs prozessiert. Während die *p*-Elektrode vergleichsweise einfach auf die GaN:Mg-Kontaktschicht abgeschieden werden kann, muss die *n*-Seite vor dem Aufbringen der *n*-Kontaktmetallisierung im Zuge der sogenannten Mesa-Ätzung freigelegt werden. Dafür muss die *p*-Seite, die MQW-Region und ein Teil der *n*-Kontaktschicht wegegätzt werden. Schließlich können die LEDs vereinzelt und zu Chips aufgebaut werden. Details hierzu sowie zu den einzelnen Prozessparametern werden in den zugehörigen Kapiteln erläutert.

#### 2.2 Effizienz von DUV-LEDs

Die Effizienz einer LED wird meistens in Form der externen Quanteneffizienz oder der Konversionseffizienz (engl. *wall plug efficiency*,  $\eta_{WPE}$ ) beschrieben. Für die Definition von  $\eta_{WPE}$ , welches das Verhältnis der optischen Ausgangsleistung ( $P_{out}$ ) zu der injizierten elektrischen Leistung ( $P_{el}$ ) einer LED beschreibt, gilt:

$$\eta_{WPE} = \frac{P_{out}}{P_{el}} = \frac{P_{out}}{I \cdot U} = \eta_{EQE} \cdot \frac{E_{ph}}{q \cdot U} = \eta_{EQE} \cdot \eta_{el}$$
 2.1

Hierbei entsprechen  $E_{ph}$  der Photonenenergie des emittierten Lichts, q der Elementarladung und  $\eta_{el}$  der elektrischen Effizienz einer LED. Während für den Endverbraucher meistens  $\eta_{WPE}$  von Bedeutung ist, wird in der Wissenschaft vor allem die externe Quanteneffizienz, die keine elektrischen Verluste berücksichtigt, angewandt. Es gilt der Zusammenhang:

$$\eta_{EQE} = \frac{P_{out} \cdot q \cdot \lambda}{I \cdot h \cdot c}$$
 2.2

Hierbei steht h für die Planck-Konstante und c für die Lichtgeschwindigkeit. Die externe Quanteneffizienz kann zusätzlich als das Produkt dreier Teileffizienzen: der Ladungsträgerinjektionseffizienz, der strahlenden Rekombinationseffizienz und der Lichtextraktionseffizienz aufgefasst werden:

$$\eta_{EQE} = \eta_{CIE} \cdot \eta_{RRE} \cdot \eta_{LEE} = \eta_{IQE} \cdot \eta_{LEE}$$
 2.3

Da  $\eta_{CIE}$  und der  $\eta_{RRE}$  experimentell schwer voneinander zu trennen sind, wird deren Produkt oft zu der internen Quanteneffizienz ( $\eta_{IQE}$ ) zusammengefasst.



Abbildung 5: Im gepulsten Modus in Abhängigkeit der Stromdichte aufgenommene Emissionsleistung und die externe Quanteneffizienz einer 265 nm LED. Die beiden gestrichelten Linien demonstrieren den theoretischen Fall, wenn die LED-Charakteristiken nicht von dem Droop beeinflusst wären. Für mehr Details in Bezug auf die Aufnahme der gezeigten Charakteristiken sowie die LED-Heterostruktur, siehe Kapitel 4.2 und die Abbildung 3.

Der Verlauf der  $\eta_{EQE}$  mit der Stromdichte (*j*) von AlGaN-Bauelementen unterscheidet sich von den Charakteristiken der LEDs auf Basis der meisten anderen Materialsysteme. In der Abbildung 5 ist der typische  $\eta_{EQE}$ - *j*-Verlauf einer AlGaN-LED am Beispiel einer 265 nm LED gezeigt. So steigt die Effizienz von AlGaN-Bauelementen<sup>1</sup> zunächst stark mit der Stromdichte an und erreicht bereits bei vergleichsweise geringen *j* (1 Acm<sup>-2</sup> bis 30 Acm<sup>-2</sup>) das Maximum [32, 33]. Für höhere Stromdichten sinkt  $\eta_{EOE}$  stetig ab. Dieses Phänomen wird als "Efficiency Droop" oder einfach "Droop" (deut. Absenkung) bezeichnet und ist nicht thermischer Natur [34]. Wird folglich eine höhere Ausgangsleistung benötigt, als bei der maximalen  $\eta_{EOE}$  emittiert wird, muss die LED im immer weniger effizienten Modus betrieben werden. So wird auch die Differenz zwischen der tatsächlich erreichten optischen Leistung und dem theoretischen Verlauf von Pout, ohne Droop, mit steigender Stromdichte immer größer. In der Literatur besteht ein weitgehender Konsens, dass die Lichtextraktionseffizienz nicht mit der Stromdichte skaliert [35] und folglich nicht die Ursache für den Droop sein kann. Somit liegt dem Droop ein Anstieg der nicht-strahlenden Rekombination bei hohen Stromdichten zugrunde. Im Wesentlichen existieren zwei Theorien, welche die Effizienzabnahme von AlGaN-Bauelementen bei hohen Stromdichten erklären: die sinkende  $\eta_{RRE}$  durch steigende Auger-Rekombination [32, 36] und die

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Diese Betrachtung ist unabhängig von der Emissionswellenlänge und gilt für Bauelemente die im Hinblick auf die Effizienz den Stand der aktuellen Technik entsprechen.

Abnahme der  $\eta_{CIE}$  durch zunehmenden Elektronenleckstrom in Richtung der *p*-Seite [33, 37]. Die Diskussion nach der Droop-Ursache ist immer noch nicht abschließend geklärt, weil die quantitative und direkte Messung der Auger-Rekombination sowie von  $\eta_{CIE}$  schwer bis nicht möglich ist. Auch die Unterscheidung der beiden Prozesse voneinander ist nicht ohne Weiteres möglich [38]. Allerdings verdichten sich in den letzten Jahren die Hinweise, dass die Auger-Rekombination die entscheidende Ursache für den Droop ist. So konnte die anregungsleistungabhängige Effizienzabnahme in optisch angeregten MQW-Strukturen nachgewiesen werden, wo die Ladungsträgerinjektionseffizienz keine Rolle spielt und folglich nicht die Ursache für den Droop darstellen kann [39]. Auch die vergleichsweise hohen experimentell bestimmten Auger-Koeffizienten, die anfangs nicht mit Hilfe direkter Auger-Rekombination erklärt werden konnten, stimmen nun durch die Berücksichtigung der indirekten Auger-Rekombination mit den theoretischen Berechnungen überein, für nähere Details vergleiche Kapitel 2.4.2.

In den nun folgenden Unterkapiteln erfolgt die Beschreibung der einzelnen Teileffizienzen, mit dem Fokus auf deren Größe und Einfluss auf die externen Quanteneffizienz.

### 2.3 Lichtextraktionseffizienz von DUV-LEDs

Die Lichtextraktionseffizienz gibt den Anteil der insgesamt in der MQW-Region generierten Photonen an, der aus der LED ausgekoppelt wird. Von den drei Teileffizienzen der externen Quanteneffizienz hat  $\eta_{LEE}$  der heutigen DUV-LEDs in den allermeisten Fällen den geringsten Wert [40]. So liegt beispielsweise die Lichtextraktionseffizienz von den in Kapitel 4 untersuchten vereinzelten und zu Chips aufgebauten DUV-LEDs mit einer Emissionswellenlänge von 265 nm und einer nicht UV-transparenten p-Seite bei lediglich  $\sim$ 9%. Um zu verstehen wieso die Lichtextraktionseffizienz von DUV-LEDs so niedrig ist, kann die MQW-Region vereinfacht als eine Punktquelle, die das Licht mit einer homogenen sphärischen Verteilung in alle Raumrichtungen ausstrahlt, betrachtet werden. Dabei wird bei DUV-LEDs mit nicht UV-transparenter p-Seite etwa die Hälfte der generierten Photonen von vorneherein in Mg-dotierten (Al)GaN-Schichten absorbiert. Die verbleibenden  $\sim$ 50% werden in Richtung der n-Seite ausgestrahlt und müssen die Saphir/Luft-Grenzfläche passieren, um ausgekoppelt zu werden. Das auszukoppelnde Licht wird dabei aufgrund der unterschiedlichen Brechungsindizes von Luft ( $n_{luft} = 1$ ) und der MQW-Region teilweise totalreflektiert. So beträgt der kritische Winkel ( $\varphi_c$ ) für die Emission aus einem Al<sub>0,5</sub>Ga<sub>0,5</sub>N-MQW<sup>1</sup> ( $n_{MQW}$  = 2,5 [41]), bei einer planaren Saphir/Luft-Grenzfläche, nach Snelliusschen Brechungsgesetz [42] lediglich ~22°. Für alle Einfallswinkel die größer sind als 22°, wird das Licht totalreflektiert. Welcher Anteil (a) des emittierten Lichts innerhalb des Fluchtkegels mit dem Öffnungswinkel  $\varphi_c$ , ohne Totalreflexion an der Saphir/Luft-Grenzfläche ausgekoppelt wird, kann mit Hilfe der Gleichung [43]:

 $<sup>^1</sup>$  Hierbei wurde die MQW-Region vereinfacht als eine homogene Al\_{0,5}Ga\_{0,5}N-Schicht angenommen. Dies entspricht ungefähr den Al-Anteil, welcher in den Quantentöpfen der hier untersuchten 265 nm LEDs verwendet wird.

$$a \approx \frac{1}{4} \varphi_c^2 \approx \frac{1}{4} \frac{n_{luft}^2}{n_{MQW}^2}$$
 2.4

berechnet werden und beträgt für den hier betrachteten Fall lediglich ~4%. Somit werden 46% von den insgesamt in der LED generierten Photonen an der Saphir/Luft-Grenzfläche zurück in die LED-Heterostruktur totalreflektiert. Ein Teil des zurückreflektierten Lichts wird dabei im Zuge weiterer Reflexionen ausgekoppelt, der Großteil wird allerdings in der MQW-Region, der *p*-Seite und in den Kontakten absorbiert [19]. Mit Hilfe von kalibrierten Stahlverfolgungssimulationen (engl. Raytracing) kann die Lichtextraktionseffizienz einer LED präzise bestimmt werden. Solch ein an der TU-Berlin entwickeltes und bereits kalibriertes Raytracing-Programm auf Basis der Monte-Carlo-Methode [30] wird auch für die Simulation der Lichtextraktionseffizienz der hier untersuchten Bauelemente verwendet. Die Lichtextraktionseffizienz wird dabei, wie während der elektrooptischen Charakterisierung der Bauelemente, in Relation zu der Größe des Photodetektors und dessen Entfernung vom Bauelement simuliert. Da allerdings die Charakterisierung von DUV-LEDs in unterschiedlichen Aufbaustadien die Benutzung unterschiedlicher Messplätze erfordert (Kapitel 2.6), wurden die Lichtextraktionseffizienzwerte zur besseren Vergleichbarkeit, auf die Abstrahlung in eine Sphäre, wie in einer Ulbricht-Kugel, hochgerechnet. Die zugehörigen externen Quanteneffizienzen und optischen Ausgangsleistungen der einzelnen LEDs wurden entsprechend skaliert.

### 2.4 Strahlende Rekombinationseffizienz von DUV-LEDs und das ABC-Modell

Für die Emissionsleistung einer LED ist die Rekombination der Ladungsträger innerhalb des MQWs entscheidend. Unter Rekombination wird die Relaxation eines angeregten Ladungsträgers in den energetisch günstigeren, zuvor nicht besetzten Zustand verstanden. Die Energiedifferenz zwischen Anfangs- und Endzustand der Relaxation wird dabei freigesetzt. Die Art des Übergangs vom Anfangs- in den Endzustand sowie die Art der dabei freigesetzten Energie erlaubt eine Klassifizierung der Rekombinationsprozesse. Die einzelnen Rekombinationsprozesse im MQW sind: die Band-zu-Band-, die Shockley-Read-Hall- (SRH) und die Auger-Rekombination.

Im Falle eines Band-zu-Band-Übergangs relaxiert ein Elektron strahlend vom Leitungsband  $(E_C)$  ins Valenzband  $(E_V)$  und emittiert Licht in Form eines Photons mit der Energie der Bandlücke<sup>1</sup>, vergleiche Abbildung 6 (a). Der Band-zu-Band-Übergang stellt den gewünschten Rekombinationsprozess in einer LED dar, wohingegen die SRH-Rekombination und die Auger-Rekombination zwei leistungslimitierende Rekombinationsprozesse sind. Bei der in Abbildung 6 (b) schematisch dargestellten SRH-

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Beim Einschluss der Ladungsträger in Quantentöpfen entspricht die Energie des emittierten Lichts dem Abstand zwischen den jeweiligen stationären Zuständen der QWs im Valenz- und Leitungsband.



Abbildung 6: Schematische Darstellung der einzelnen Rekombinationsmechanismen im MQW einer LED: (a) Band-zu-Band-Rekombination, (b) SRH-Rekombination und (c) direkte Auger-Rekombination (eeh-Prozess).

Rekombination erfolgt der Relaxationsprozess eines angeregten Ladungsträgers über einen Defektzustand. Dabei wird die Überschüssige Energie nicht-strahlend durch Phononen, in Form von Wärme, oder strahlend durch Photonen, in Form von einer langwelligen parasitären Lumineszenz, abgegeben. Bei der Auger-Rekombination relaxiert ein Elektron aus dem Leitungsband in einen Lochzustand im Valenzband nicht-strahlend, wobei die freigesetzte Energie<sup>1</sup> in kinetische Energie umgewandelt und an einen anderen Ladungsträger übertragen wird, vergleiche Abbildung 6 (c).

Zum Erreichen einer möglichst hohen strahlenden Rekombinationseffizienz in einer LED muss die Band-zu-Band-Rekombination maximiert und die SRH- sowie die Auger-Rekombination minimiert werden. Folglich kann  $\eta_{RRE}$  als das Verhältnis der strahlenden Band-zu-Band-Rekombinationsrate ( $R_{rad}$ ) zu der gesamten Rekombinationsrate innerhalb der MQW-Region aufgefasst werden:

$$\eta_{RRE} = \frac{R_{Rad}}{R_{Rad} + R_{SRH} + R_{Aug}}$$
 2.5

Dabei sind  $R_{SRH}$  und  $R_{Aug}$  jeweils die Rekombinationsraten der SRH- und der Auger-Übergänge. Die einzelnen Rekombinationsprozesse, inklusive der Höhe der zugehörigen Rekombinationsraten, werden in den Abschnitten 2.4.1 bis 2.4.4 erläutert. Bezugnehmend auf die einzelnen Rekombinationsprozesse folgt in Kapitel 2.4.5 die Beschreibung der  $\eta_{RRE}$ -Abhängigkeit von der Ladungsträgerdichte im Rahmen des ABC-Modells.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Für den Fall eines *eeh*-Auger-Übergangs, siehe Kapitel 2.4.2.



Abbildung 7: Schematische Darstellungen eines (a) direkten, eines (b) Phononen-assistierten indirekten und eines (c) Legierungsfluktuationen-assistierten indirekten eeh-Auger-Rekombinationsprozesses. Die blauen, braunen und weißen Kreise stellen jeweils Elektronen, Löcher und freie Zustände dar. Die x-Achsenbezeichnung – k steht hierbei für die Wellenzahl.

#### 2.4.1 Band-zu-Band-Rekombination

Die Band-zu-Band-Rekombination ist ein intrinsischer Rekombinationsprozess bei dem ein Elektron aus dem Leitungsband direkt in einen zuvor nicht besetzten Zustand im Valenzband relaxiert und die überschüssige Energie in Form eines Photons abgibt. Unter der Annahme gleicher Elektronen- (n) und Lochdichten (p) gilt für die strahlende Rekombinationsrate im Falle der spontanen Emission [44, 45]:

$$R_{Rad} = Bnp = Bn^2$$
 2.6

Die bimolekulare strahlende Rekombinationskonstante *B* hängt dabei vor allem von dem Überlapp der Elektronen- und Lochwellenfunktionen ab [46] und wird deshalb maßgeblich vom Design des MQWs bestimmt. Für MQWs mit optimiertem Design wird im AlGaN-Materialsystem meistens von *B*-Parametern in der Größenordnung von 10<sup>-11</sup>cm<sup>3</sup>s<sup>-1</sup> berichtet [47-50].

#### 2.4.2 Auger-Rekombination

Bei der direkten Auger-Rekombination handelt es sich wie bei der Band-zu-Band-Rekombination um einen intrinsischen Prozess bei dem ein Elektron aus dem Leitungsband in das Valenzband relaxiert. Im Gegensatz zu der Band-zu-Band-Rekombination wird die dabei freigesetzte Energie jedoch nicht-strahlend an einen weiteren Ladungsträger übertragen, welches seinerseits unter Abgabe von Wärme an das Kristallgitter relaxiert, Abbildung 7 (a). Die direkte Auger-Rekombination ist somit ein nicht-strahlender Drei-Teilchen-Stoßprozess und kann unter Beteiligung von zwei Elektronen und einem Loch (*eeh*-Prozess) oder eines Elektrons und zweier Löcher (*ehh*-Prozess) erfolgen. Für die Auger-Rekombinationsrate gilt:

$$R_{Aug} = C_{eeh}n^2p + C_{ehh}np^2$$
 2.7

Unter den Annahmen der gleichen Loch- und Elektronendichten im MQW sowie  $C_{eeh} \approx C_{ehh}$  kann die Gleichung 2.7 vereinfacht als

$$R_{Aug} = Cn^3$$
 2.8

ausgedrückt werden [32]. Somit spielt die zur dritten Potenz der Ladungsträgerdichte proportionale Auger-Rekombination, vor allem bei hohen Stromdichten, eine hemmende Rolle für die Effizienz von LEDs. Wie stark die Auger-Rekombination in AlGaN-Bauelementen ausgeprägt ist, bleibt allerdings aufgrund des nicht genau bekannten *C*-Koeffizienten umstritten.

Damit die aus der Band-zu-Band-Rekombination freiwerdende Energie im Verlauf eines direkten Auger-Übergangs auf einen weiteren Ladungsträger übertragen werden kann, ist die Existenz eines freien Zustandes, mit dem gleichen Energie- und Impulsunterschied zwischen Anfangs- und Endzustand, wie bei dem vorausgegangenen Band-zu-Band-Übergang notwendig. Da immer weniger solcher Zustände in Halbleitern mit einer breiten Bandlücke existieren, sollte der Auger-Koeffizient für ein linear steigendes  $E_q$  exponentiell sinken [36]. Aufgrund der relativ hohen Bandlückenenergie im AlGaN-Materialsystem, liegt der berechnete Wert von C in der Größenordnung von  $10^{-34}$  cm<sup>6</sup>s<sup>-1</sup> [47, 48]. Wie anhand von Drift-Diffusions-Simulationen demonstriert wurde [49, 50], hat die Auger-Rekombination für den Fall eines solch geringen Auger-Koeffizienten, keine relevanten Auswirkungen auf die Effizienz von UV-LEDs. Allerdings ist neben der direkten auch eine indirekte Auger-Rekombination möglich. Ein indirekter Auger-Übergang erfolgt unter Beteiligung von Phononen [48, 51, 52] oder Legierungsfluktuationen [48, 53] und rückt immer mehr in den Fokus der Forschung. Im Falle indirekter und Phononen-assistierter Auger-Rekombination, liefert ein Phonon einen zusätzlichen Impuls und ermöglicht so die Streuung der angeregten Ladungsträger in Zustände, welche beim direkten Auger-Übergang, aufgrund der Impulserhaltung, nicht möglich wären (Abbildung 7 (b)). Bei Legierungsfluktuationenassistierten indirekten Auger-Übergängen, werden durch das Vorhandensein von Fluktuationen in der AlGaN-Zusammensetzung zusätzliche Bänder, mit höherer Energie als das Leitungsband beziehungsweise mit niedrigerer Energie als das Valenzband, berücksichtigt. Dabei spielt neben der reduzierten Bandlückenenergie in Ga-reichen-Clustern auch die zur Änderung des Banddiagramms führende Streuung an den Legierungsatomen eine Rolle [48, 51]. Die damit verbundene Aufweichung der Impulserhaltung erlaubt das Streuen der angeregten Ladungsträger in zusätzliche Zustände, die in einem perfekten Kristall nicht existieren würden, Abbildung 7 (c). Beide Phänomene des indirekten Auger-Übergangs tragen folglich dazu bei, dass der totale Auger-Koeffizient ansteigt und die Größenordnung der theoretisch berechneten C-Werte im Bereich von 10-31 bis 10-30 cm6s-1 [48, 53] liegt. Diese Werte decken sich auch mit den experimentell ermittelten Auger-Koeffizienten [39, 53] und sind hoch genug um den  $\eta_{EQE}$ -Droop in AlGaN-LEDs zu erklären [49, 50]. Wie hoch der Auger-Koeffizient in DUV-LEDs mit einer Emissionswellenlänge von 265 nm ist und welche Rolle die Auger-Rekombination für die Effizienz dieser Bauelemente spielt, wird in Kapitel 4.5 untersucht.



Abbildung 8: Schematische Darstellung der einzelnen Prozesse während der SRH-Rekombination (a) unbesetzte tiefe Störstelle, (b) Elektroneneinfang und (c) Locheinfang. Die blauen und braunen Kreise stellen jeweils Elektronen und Löcher dar, die weißen Rechtecke repräsentieren tiefe Störstellen.

#### 2.4.3 SRH-Rekombination

Innerhalb einer LED existieren neben den beiden bereits beschriebenen intrinsischen Rekombinationsarten, auch extrinsische Rekombinationsprozesse. So können Fremdatome und Kristallfehler ortsfeste Defektzustände mit der Energie  $E_T$  innerhalb der Bandlücke erzeugen. Die Defektzustände sind je nach energetischer Position innerhalb der Bandlücke akzeptorartig ( $E_T$  nahe  $E_V$ ) oder donatorartig ( $E_T$  nahe  $E_C$ ). Im Falle  $E_T \sim E_a/2$  spricht man von tiefen Störstellen. Die statistische Beschreibung der Rekombination an Defektzuständen erfolgt meistens über das Shockley-Read-Hall-Modell [54, 55]. Betrachtet man eine tiefe Störstelle, dann ist diese neutral im unbesetzten Zustand, Abbildung 8 (a). Wird diese durch ein Elektron besetzt, dann wird die überschüssige Energie  $(E_C - E_T)$  an das Kristallgitter, in Form von Kristallschwingungen beziehungsweise Wärme, freigesetzt und die tiefe Störstelle wird negativ geladen. Dieser Prozess wird als Elektroneneinfang bezeichnet, Abbildung 8 (b). Im nächsten Schritt relaxiert das Elektron aus der tiefen Störstelle in einen energetisch günstigeren, zuvor unbesetzten Lochzustand im Valenzband, unter Annihilation beider Ladungsträgertypen. Dabei werden ein oder mehrere Phononen mit der Energie  $E_T - E_V$  generiert, man spricht von einem Locheinfang, Abbildung 8 (c). Schließlich wird der Defektzustand wieder neutral und steht für weitere SRH-Rekombinationsprozesse zur Verfügung. Es soll bemerkt werden, dass bei der Relaxation in den beziehungsweise aus dem Defektzustand freiwerdende Energie, neben der Emission eines Phonons, auch unter Abstrahlung eines Photons, in Form einer Defektlumineszenz, erfolgen kann. Die SRH-Rekombinationsrate direkt-proportional ist zur Ladungsträgerdichte, es gilt [56]:

$$R_{SRH} = An 2.9$$

Dabei ist *A* die sogenannte SRH-Rekombinationskonstante und wird auch als *A*-Parameter bezeichnet. Die Höhe von *A* variiert mit der kristallinen Qualität und der Defektdichte in den AlGaN-Schichten zwischen 10<sup>5</sup> s<sup>-1</sup> und 10<sup>9</sup> s<sup>-1</sup> [57, 58]. Da der *A*-Parameter eine lineare Abhängigkeit von der Ladungsträgerdichte aufweist, wird die strahlende Rekombinationseffizienz vor allem bei niedrigen Stromdichten von der SRH-Rekombination beeinträchtigt.

#### 2.4.4 Durchstoßversetzungen

Die Tatsache, dass Versetzungen elektrisch aktiv sein können und damit die Halbleitereigenschaften beeinträchtigen, ist seit den frühen 1950er Jahren [59, 60] bekannt. Wie im Abschnitt 2.1 bereits erläutert wurde, treten Durchstoßversetzungen in auf Saphir gewachsenen AlN-Schichten mit einer hohen Dichte auf und setzen sich in der restlichen LED-Heterostruktur fort. Folglich werden die TDs meistens als Hauptquelle der nichtstrahlenden SRH-Rekombination in MQWs von AlGaN-LEDs gesehen [61, 62]. Die Ursache für die nicht-strahlende Rekombination der Ladungsträger an TDs ist mit den nicht abgesättigten Bindungen (engl. dangling bonds) entlang der TDs verbunden. Diese entstehen aufgrund der dichteren Atompackung von Saphir im Vergleich zu AlN, weshalb während des Wachstums nicht alle Atome Bindungspartner an der Nukleationsschicht beziehungsweise an den Korngrenzen der Nukleationskeime finden [25]. Die so entstehenden ungesättigten Bindungen erzeugen akzeptorartige Defektzustände, tief in der AlGaN-Bandlücke [63, 64]. Da die TDs auch in die MQW-Region der LEDs propagieren können (siehe hierzu Abschnitt 4.4), beeinträchtigt die nicht-strahlende SRH-Rekombination der Ladungsträger an den Defektzuständen die strahlende Rekombinationseffizienz. Die Abhängigkeit der  $\eta_{RRE}$  von der TDD wurde in [62] phänomenologisch beschrieben. Allerdings ist diese Beschreibung lückenhaft und soll aufgrund der unmittelbaren Relevanz für die Interpretation der später gezeigten Messergebnisse hier zusammengefasst werden.

Ausgehend von einer hexagonalen Anordnung der TDs, gilt für den Abstand (y) zwischen zwei benachbarten Durchstoßversetzungen:

$$2y = (\pi \cdot TDD)^{-1/2}$$
 2.10

Entlang der einzelnen TDs befinden sich akzeptorartige Zustände, die aufgrund ihrer Position in der Bandlücke als Elektronenfallen fungieren. Somit bildet sich in der Folge des Elektroneneinfangs die experimentell bereits mehrmals nachgewiesene negative Ladung entlang der TDs aus [65, 66]. Um das thermodynamische Gelichgewicht zu erreichen, wird diese Ladung vom Kristall nach außen hin abgeschirmt. Die Abschirmung erfolgt innerhalb eines zylindrischen Volumens, welches die einzelnen Durchstoßversetzungen umgibt und einen der Debye-Länge ( $\lambda_D$ ) entsprechenden Radius aufweist:

$$\lambda_D = (\epsilon_0 \epsilon_r k_B T / (q^2 n))^{1/2}$$
 2.11



Abbildung 9: Schematische Darstellung der SRH-Rekombination an TDs (schwarz). In Gelb dargestellt sind durch akzeptorartige Defektzustände eingefangene Elektronen. In Blau gezeichnet sind die freien Löcher, welche innerhalb eines zylindrischen Volumens mit dem Radius  $\lambda_D$  (rot) von dem sich in Richtung des TD-Zentrums ausbildendem elektrischen Feld angezogen werden und schließlich mit den eingefangenen Elektronen rekombinieren.

Hierbei sind  $\epsilon_0$  und  $\epsilon_r$  jeweils die Dielektrizitätskonstante des Vakuums und die relative Dielektrizitätskonstante. Da innerhalb des Abschirmvolumens ein Ladungsgradient vorliegt, entsteht ein zum Zentrum der TDs gerichtetes elektrisches Feld. Das elektrische Feld wirkt attraktiv für die freien Löcher, welche mit den ortsfesten und entlang der TDs eingefangenen Elektronen nicht-strahlend rekombinieren können. Dieser Vorgang ist exemplarisch in Abbildung 9 dargestellt. Somit wird die mittlere freie Weglänge und damit die nicht-strahlende Rekombinationszeit maßgeblich von der Debye Länge sowie von dem Abstand zwischen den TDs beziehungsweise von der TDD beeinflusst. Aus diesem Grund erfolgt die strahlende Rekombination in einer LED im Rahmen einer eindimensionalen Betrachtung überwiegend auf der Länge:

$$L_f = 2y - 2\lambda_D \qquad 2.12$$

Auf den oben erwähnten Überlegungen basierend, wurde das Karpov-Makarov-Modell [61] entwickelt, welches die nicht-gleichgewichts Ladungsträgerdichten während des Betriebs einer LED berücksichtigt und eine quantitative Berechnung der  $\eta_{RRE}$ -TDD-Abhängigkeit erlaubt. Dabei ist neben *y* und  $\lambda_D$  vor allem die Beweglichkeit der Löcher (Minoritätsladungsträger im MQW)  $\mu_h$  wichtig. So sinkt für niedrige  $\mu_h$  die Diffusionslänge der Löcher  $L_d \propto \sqrt{\mu_h}$  [61] und die nicht-strahlende Rekombination wird unwahrscheinlicher, während die Wahrscheinlichkeit für die strahlende Rekombination gleichzeitig steigt. In der Abbildung 10 ist die simulierte  $\eta_{RRE}$  als Funktion der TDD für eine 265 nm LED gezeigt. Die Simulation erfolgte mit Hilfe der kommerziellen Simulationssoftware SiLENSe [67] unter Annahme von  $\mu_h = 5$  cm<sup>2</sup>/Vs. Ist die TDD sehr



Abbildung 10:  $\eta_{RRE}$ -TDD-Abhängigkeit für eine 265 nm LED. Die Simulation erfolgte mit Hilfe von SiLENSe. Um den Einfluss der SRH-Rekombination auf  $\eta_{RRE}$  zu demonstrieren, wurde die Auger-Rekombination durch die Annahme C = 0 vernachlässigt.

gering (< 10<sup>6</sup> cm<sup>-2</sup>), wie es beispielsweise für eine homoepitaktisch gewachsene AlN-Schicht auf einem AlN-Substrat der Fall ist [68], gilt  $L_f \gg L_d$  und die strahlende Rekombinationseffizienz wird kaum von den Durchstoßversetzungen beeinflusst. Für eine steigende Durchstoßversetzungsdichte bleibt  $\eta_{RRE}$  zunächst nahezu konstant bei etwa 100%. Für noch höhere TDD im Bereich zwischen 10<sup>8</sup> cm<sup>-2</sup> und 5×10<sup>9</sup> cm<sup>-2</sup>, dort wo  $L_p$  und  $L_d$  etwa in der gleichen Größenordnung sind, sinkt  $\eta_{RRE}$  rapide ab. Für TDD > 10<sup>10</sup> cm<sup>-2</sup> ist  $\eta_{RRE} < 5\%$  und es gilt  $L_f \ll L_d$ . Eine Zunahme der Durchstoßversetzungsdichte in diesem Bereich ändert das Verhältnis zwischen  $L_f$  und  $L_d$  nur wenig, weshalb in diesem Bereich die Änderung der strahlenden Rekombinationseffizienz mit der TDD vergleichsweise schwach ausgeprägt ist.

Die an dieser Stelle beispielhaft dargestellte  $\eta_{RRE}$ -TDD-Abhängigkeit wird in Kapitel 4 anhand von 265 nm LEDs mit unterschiedlichen TDDs in der MQW-Region explizit untersucht.

#### 2.4.5 ABC-Modell

Die Abhängigkeit der strahlenden Rekombinationseffizienz einer LED von der Ladungsträgerdichte kann mit Hilfe des sogenannten ABC-Modells beschrieben werden [69]. Hierfür werden die einzelnen Rekombinationsraten aus den Gleichungen 2.6, 2.8 und 2.9 in die Gleichung 2.5 eingesetzt:

$$\eta_{RRE} = \frac{Bn^2}{An + Bn^2 + Cn^3}$$
 2.13



Abbildung 11: Nach Gleichung 2.13 berechnete Effizienzen der einzelnen Rekombinationsprozesse im MQW einer 265 nm LED (Kapitel 2.1) unter Annahme typischer Werte für die Rekombinationskonstanten in AlGaN. Mit Hilfe der gestrichelten Linien sind die Dominanzbereiche der SRH-Rekombination ( $n < 8,5 \times 10^{17}$  cm<sup>-3</sup>), der strahlenden Rekombination ( $n = 8,5 \times 10^{17}$  bis  $n = 6 \times 10^{18}$  cm<sup>-3</sup>) und der Auger-Rekombination ( $n > 6 \times 10^{18}$  cm<sup>-3</sup>) gekennzeichnet.

Ähnlich können die SRH- und die Auger-Rekombinationseffizienzen mit jeweils  $An/(An + Bn^2 + Cn^3)$  und  $Cn^3/(An + Bn^2 + Cn^3)$  berechnet werden. Unter Annahme typischer Werte für die Rekombinationskonstanten ( $A = 2 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ ,  $B = 2,4 \cdot 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ ,  $C = 4 \times 10^{-30} \text{ cm}^3 \text{s}^{-1}$  in AlGaN, können auch die Dominanzbereiche der einzelnen Rekombinationsprozesse bestimmt werden. Abbildung 11. Für geringe Ladungsträgerdichten, bis 8,5×10<sup>17</sup> cm<sup>-3</sup>, ist die SRH-Rekombination der dominierende Rekombinationsprozess. Dagegen stellt für hohe Ladungsträgerdichten, ab 6×10<sup>18</sup> cm<sup>-3</sup>, die Auger-Rekombination den dominierenden Rekombinationsprozess dar. Lediglich in dem Bereich dazwischen ( $n = 8.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  bis  $n = 6 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ), wo die Defektrekombination eine Sättigung erfährt und die Ladungsträgerdichte noch nicht hoch genug ist, um einen hohen Beitrag der Auger-Rekombination zu erreichen, wird die Gesamtrekombination von der strahlenden Rekombination dominiert. Dadurch entsteht der typische  $\eta_{RRE}$ - n-Verlauf der AlGaN-LEDs, welcher auch bei der optischen Anregung zu beobachten ist [39, 70]. Je nach Höhe der Rekombinationskonstanten können die einzelnen Dominanzbereiche sich entsprechend verschieben. Aufgrund der Einfachheit hat das ABC-Modell weite Verbreitung gefunden und wird oft zur Interpretation von LED-Charakteristiken angewandt, auch in dieser Arbeit.

Allerdings geht das ABC-Modell von relativ strikten Annahmen aus, deren Gültigkeit in der Literatur immer wieder debattiert werden [32, 71]. Die kritischsten Annahmen des ABC- Modells und deren Haltbarkeit für die vor allem in Kapiteln 4 und 5 durchgeführten Untersuchungen sind im Folgenden erläutert:

- Annahme 1: Abgesehen von der Auger- und der Shockley-Read-Hall-Rekombination existieren keine weiteren Verlustmechanismen der Ladungsträger in einer LED. Das ABC-Modell wurde nicht explizit für AlGaN-LEDs entwickelt. In anderen Materialsystemen, kann aufgrund der hohen Gesamteffizienz der Bauelemente, die Annahme  $\eta_{CIE} \sim 100\%$  [51] und das daraus folgende Gleichnis  $\eta_{IOE} \sim \eta_{RRE}$ angenommen werden. Diese Annahme wird auch oft bei der Anwendung des ABC-Modells AlGaN-LEDs getroffen [68]. Allerdings ist in die Ladungsträgerinjektionseffizienz von AlGaN-Bauelementen, vor allem aufgrund des Elektronenleckstroms aus der MQW-Region in Richtung der *p*-Seite, kleiner als 100%. Dieser Sachverhalt wird in Kapitel 2.5 ausführlich erläutert. Um die Gültigkeit des ABC-Modells für die später aufgeführten Untersuchungen zu gewährleisten, wurde im Laufe der vorliegenden Arbeit von  $\eta_{CIE} < 100\%$ ausgegangen.
- <u>Annahme 2</u>: Die Dichte der Elektronen und der Löcher in den Quantentöpfen ist gleich.

Um die Effizienz von AlGaN-LEDs zu steigern, werden die Barrieren in der MQW-Region meist mit Si-dotiert [72, 73]. Auch die Hintergrunddotierung durch Verunreinigungen im undotierten AlGaN ist *n*-artig [74]. Aus diesem Grund sind in den Quantentöpfen bereits ohne eine angelegte Betriebsspannung Elektronen vorhanden, während die Löcher aus der *p*-Seite ihren Weg in die MQW-Region erstfinden müssen. Dieses Phänomen spielt insbesondere bei niedrigen Stromdichten eine wichtige Rolle. Durch den hohen Spannungsabfall in der hoch resistiven *p*-Seite und aufgrund des Elektronenleckstroms aus den Quantentöpfen, gleichen sich allerdings die Dichten der beiden Ladungsträgerarten im MQW mit zunehmender Nähe zum  $\eta_{EOE}$ -Maximum an.

Um eine möglichst vergleichbare Dichte von Elektronen und Löchern in der MQW-Region zu gewährleisten, wird die Anwendung des ABC-Modells auf den Peak-Bereich der gemessenen externen Quanteneffizienz beschränkt, siehe hierzu Kapitel 4. Abweichungen von der Annahme der vergleichbaren Elektronen- und Lochdichten in der MQW-Region der untersuchten Bauelemente in der Nähe des  $\eta_{EQE}$ -Maximums werden durch den Anstieg der Fitfehler<sup>1</sup> berücksichtigt.

• <u>Annahme 3:</u> Die Rekombinationskonstanten sind unabhängig von der Ladungsträgerdichte.

Diese Annahme betrifft vor allem die strahlende Rekombinationskonstante. Denn der hierfür ausschlaggebende Überlapp der Elektronen- und der Lochwellenfunktionen in den Quantentöpfen hängt von der Ladungsträgerdichte

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Siehe hierzu Kapitel 4.3.

ab. Mit zunehmender Ladungsträgerdichte werden die internen Polarisationsfelder von AlGaN abgeschirmt und damit die Separation der Elektronen- und der Lochwellenfunktionen abgeschwächt [70]. Dies resultiert in einem stärkeren Überlapp der Elektronen- und der Lochwellenfunktionen und folglich in einem Anstieg der strahlenden Rekombination mit der Ladungsträgerdichte.

Wie auch bei Annahme 2, kann auch hier auf die Anwendung des ABC-Modells lediglich auf die Peak-Region der gemessenen externen Quanteneffizienz verwiesen werden. Die Beschränkung auf einen vergleichsweise schmalen Ladungsträgerdichtebereich stellt eine geringfügige Änderung des *B*-Parameters sicher. Des Weiteren sei erwähnt, dass die  $\eta_{EQE}$  von AlGaN-LEDs mit Hilfe des ABC-Modells unter der Annahme B(n) = konstant über mehrere Größenordnungen gefittet werden kann [75, 76] und wie im Verlauf von Kapitel 4 und 5 gezeigt wird, auch für die in dieser Arbeit charakterisierten Bauelemente angenommen werden kann.

## 2.5 Ladungsträgerinjektionseffizienz

Die Ladungsträgerinjektionseffizienz gibt den Anteil der insgesamt in eine LED injizierten Ladungsträger an, der die MQW-Region erreicht. Ladungsträger die auf dem Weg in die MQW-Region rekombinieren, stehen nicht für die strahlende Rekombination in den Quantentöpfen zur Verfügung, weshalb jegliche Rekombination außerhalb der MQW-Region unerwünscht ist. Dabei existieren für die Rekombination der Ladungsträger außerhalb der **MQW-Region** zwei wesentliche Rekombinationsszenarien: die Rekombination an Kristalldefekten und/oder Verunreinigungen sowie die Rekombination der injizierten Ladungsträger untereinander. Die Rekombination der Ladungsträger an Kristalldefekten und/oder Verunreinigungen ist vor allem an Orten wo die Ladungsträger während des LED-Betriebs akkumuliert werden relevant. Solch eine Ansammlung an Ladungsträgern entsteht beispielsweise durch die Potenzialbarriere der Elektronensperrschicht, beim Transport der Löcher im Valenzband, Abbildung 12. Die sich hier stauenden Löcher können aufgrund der vergleichsweise langen Verweildauer und der hohen Ladungsträgerdichte mit Kristalldefekten und/oder mit Verunreinigungen rekombinieren und so die Anzahl der Ladungsträger für die Rekombination in der MQW-Region reduzieren. Der zweite Rekombinationspfad außerhalb der MQW-Region rührt hauptsächlich aus dem Ungleichgewicht zwischen den freien Elektronen- und Lochdichten in der MQW-Region sowie der unterschiedlichen effektiven Massen dieser beiden Ladungsträgerarten. So stehen aus Si-dotierten Quantenbarrieren ionisierte Elektronen, auch ohne eine extern angelegte Spannung, für die Rekombination in den Quantentöpfen zur Verfügung. Dagegen müssen die Löcher erst durch das Anlegen eines externen Feldes vom *p*-Kontakt in die MQW-Region transportiert werden, wobei ein Teil der injizierten Löcher bereits auf den Weg dorthin rekombiniert. Da die Elektronen im AlGaN eine



Abbildung 12: Schematische Darstellung des Leitungs- und Valenzbandverlaufs in UV-LEDs, wobei die Emissionswellenlänge in (a) länger ist als in (b). Mit den Pfeilen und eingekreisten Zahlen sind die einzelnen Transportpfade beziehungsweise Rekombinationspfade von Ladungsträgern in den jeweiligen Bauelementen gekennzeichnet: Relaxation von Elektronen in den QW (1). Ballistische Elektronen (2). Aus dem QW entweichende Elektronen (3). Parasitäre Rekombination von Elektronen und Löchern in der p-Seite (4) und am p-Kontakt (5). Am EBL akkumulierte Löcher (6). Relaxation von Löchern in den QW (7).

niedrigere effektive Masse als die Löcher aufweisen [77], werden sie auch stärker durch die angelegte Spannung beschleunigt [78] und sind zusätzlich weniger stark innerhalb der Quantentöpfe lokalisiert [79]. Folglich können die in Überschuss vorhandenen Elektronen aufgrund mangelnder Rekombinationspartner, in Form der Löcher, die MQW-Region in Richtung der *p*-Seite verlassen [80]. Zusätzlich stellen ballistische Elektronen, welche beim Transport durch die MQW-Region nicht in einem der Quantentöpfe relaxieren und sich direkt in Richtung des p-Kontakts bewegen, einen weiteren, nicht erwünschten Rekombinationspfad von freien Ladungsträgern außerhalb der MQW-Region dar. Der gesamte parasitäre Fluss an Elektronen aus der *n*-Seite und der MQW-Region in Richtung der *p*-Seite, wird als Elektronenleckstrom bezeichnet und stellt durch die anschließende Rekombination mit den freien Löchern den Hauptverlustmechanismus von freien Ladungsträgern außerhalb der MQW-Region dar [78]. Eine partielle Lösung dieser Problematik ist die Erhöhung des Al-Anteils in der Elektronensperrschicht, die aufgrund der breiteren Bandlückenenergie im Vergleich zu den benachbarten Schichten eine höhere Potenzialbarriere für den Elektronenleckstrom im Leitungsband darstellt, Abbildung 12 (a). Allerdings bildet der EBL auch eine Potenzialbarriere für die Injektion der Löcher in die MQW-Region und erfordert die Einführung einer Lochinjektionsschicht. Die Anpassung der Al-Anteile und der Dotierung im EBL und im HIL ist ein integraler Bestandteil der Heterostruktur einer DUV-LED und ist ausschlaggebend für die Höhe von  $\eta_{CIE}$  [81].

Bei blauen InAlGaN-LEDs werden Effizienzen von über 85% [82] erreicht, weshalb die Ladungsträgerinjektionseffizienz in diesen Bauelementen nahe von 100% liegen muss. Es ist intuitiv klar, dass in Bauelementen mit kürzeren Emissionswellenlängen, aufgrund des steigenden Al-Anteils in der Heterostruktur, die Elektronensperrschicht, dessen Bandlückenenergie im AlGaN-Materialsystem auf  $E_g$  von AlN begrenzt ist, immer weniger effizient den Elektronenleckstrom in Richtung der *p*-Seite unterdrücken kann, Abbildung 12 (b). In der Folge sollte die Ladungsträgerinjektionseffizienz für Bauelemente mit kurzen Emissionswellenlängen sinken. Da allerdings bisher keine Methode existiert um  $\eta_{CIE}$  direkt

zu messen, bleibt auch offen wie stark die Ladungsträgerinjektionseffizienz die Gesamteffizienz von AlGaN-LEDs mit unterschiedlichen Emissionswellenlängen einschränkt. Es existieren nur einige wenige Veröffentlichungen, welche die Höhe von  $\eta_{CIE}$ in AlGaN-DUV-LEDs auf indirekten Wegen experimentell untersucht haben. So berichten [68, 83] für DUV-LEDs mit Emissionswellenlängen um 265 nm von einer Ladungsträgerinjektionseffizienz von etwa 50%. Ausgehend von diesem Wert, würde nur die Hälfte in die DUV-LEDs injizierten Ladungsträger die MQW-Region erreichen, um dort strahlend zu rekombinieren. Folglich könnte die Erhöhung der potentiell Ladungsträgerinjektionseffizienz ein hohes Potenzial für die Erhöhung der Gesamteffizienz von DUV-LEDs bergen. Ob  $\eta_{CIE}$  in den intern produzierten DUV-LEDs auch bei etwa 50% liegt oder aufgrund der abweichenden Emissionswellenlänge und der abweichenden Heterostruktur eine höhere oder gar niedrigere Ladungsträgerinjektionseffizienz aufweist, muss noch herausgefunden werden. Aus diesem Grund ist die indirekte experimentelle Bestimmung der Ladungsträgerinjektionseffizienz in DUV-LED ein zentraler Aspekt der vorliegenden Arbeit und wird in Kapiteln 2.5 und 5.2 behandelt.

### 2.6 Elektrolumineszenz-Spektroskopie

Die temperaturabhängige Elektrolumineszenz-Spektroskopie ist die grundlegende Methode für die elektro-optische Charakterisierung von DUV-LEDs in dieser Arbeit. Mit Hilfe dieser Messmethode wurden folgende Charakteristiken von DUV-LEDs direkt vermessenen: die Betriebsspannung, der Betriebsstrom, die optische Ausgangsleistung und die spektrale Verteilung der Emissionsleistung in Abhängigkeit von der Emissionswellenlänge (Spektrum). Dabei kamen insgesamt zwei Messaufbauten zum Einsatz: ein sogenannter Top- und ein sogenannter Bottom-Emitter-Messaufbau. Der Unterschied zwischen den beiden Messplätzen resultiert aus der unterschiedlichen Abstrahlrichtung der einzelnen Bauelemente. So wurden am Bottom-Emitter-Messaufbau nach unten durch das Substrat abstrahlende, prozessierte Bauelemente auf Waferebene charakterisiert, während am Top-Emitter-Messaufbau vereinzelte und zu Chips verarbeitete DUV-LEDs, die nach der Wendemontage nach oben abstrahlen, vermessen wurden. Mit Ausnahme der Messaufbaugeometrie sind die beiden EL-Aufbauten gleich und verwenden für die Charakterisierung dieselben Messgeräte. Dabei werden an Mikromanipulatoren befestigte hochleitfähige Pd-Ag-Nadeln für die Kontaktierung der Bauelemente verwendet. Die Injektion der Ladungsträger für den Betrieb der DUV-LEDs erfolgt durch das Anlegen einer elektrischen Spannung an den Kontakten. Für die Erzeugung und die Aufnahme der Betriebsspannung im cw-Betrieb, wird eine Agilent 6614C Spannungsquelle verwendet. Für die Messung des Stromflusses durch die DUV-LEDs im cw-Betrieb wird ein Keithley 2000 Mikroamperemeter eingesetzt. Die Aufnahme der I-U-Kennlinien der Bauelemente im gepulsten Betrieb wird durch die Verwendung eines Pulsgenerators (Avtech, AV-1010-B) in Kombination mit einem Oszilloskop (Tektronix, TDS 2024B) und einer Stromsonde gestaltet. Dabei werden für die
gepulste EL-Charakterisierung der Bauelemente stets die gleichen Pulseinstellungen (Pulslänge  $t_{puls} = 5 \mu s$ , Tastgrad 1%) verwendet, die ein Kompromiss zwischen der Pulslänge und Pulsqualität (möglichst rechteckige Form) darstellen. Das aus den DUV-LEDs emittiert Licht wird mittels eines Si-Photodetektors (Hamamatsu S2281) eingefangen und in Form einer Stromstärke mit Hilfe eines Keithley 6487 Pikoamperemeters ausgelesen. Die spektrale Analyse des emittierten Lichts erfolgt mit dem Ocean Optics Flame Kompakt-Spektrometer. Für die Einstellung der Messtemperatur (*T*) wird unterhalb der DUV-LEDs je nach Untersuchung eine Heizplatte (RS Pro) oder ein Peltier-Element platziert.

# 3 Vertikale Leitfähigkeit von *p*-dotierten AlGaN:Mg-Schichtstrukturen

Bereits am Anfang der Forschungsarbeiten zu GaN-basierten Leuchtdioden in den 1960er Jahren stellte die *p*-Dotierung eins der fundamentalsten Hindernisse für die Entwicklung dieser Bauelemente dar [84]. Während der letzten Jahrzehnte wurde eine Reihe von Entdeckungen auf dem Weg zur effizienten p-Dotierung von AlGaN-Schichten gemacht. Dazu gehören vor allem: die Benutzung von Magnesiumatomen als Akzeptoren [84], die Erkenntnis über die Passivierung von Mg durch den wachstumsbedingten Einbau von Wasserstoff [85, 86] und schließlich, dass mit Hilfe des Temperns von Mg-dotierten AlGaN-Schichten in einer inerten Atmosphäre Mg-H-Bindungen aufgebrochen werden können, um so Wasserstoff aus dem Halbleiterkristall entweichen zu lassen [87]. Trotz dieser Errungenschaften bleibt die elektrische Leitfähigkeit von Mg-dotierten AlGaN-Schichten auch heutzutage niedrig [88] und führt zu einem Anstieg der Betriebsspannung von DUV-LEDs. Eine zusätzliche Folge der niedrigen elektrischen Leitfähigkeit in AlGaN:Mg-Schichten ist die Erwärmung von DUV-LEDs während des Betriebs. Die mit steigender Stromdichte zunehmende Erwärmung der Bauelemente führt zu einer Absenkung der optischen Ausgangsleistung [89, 90] und folglich auch zu einer Absenkung der Gesamteffizienz der DUV-LEDs. Dabei sinkt die elektrische Leitfähigkeit von Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N:Mg-Schichten für hohe x-Werte mit zunehmenden Al-Anteil und ist deshalb vor allem für Bauelemente bei denen vergleichsweise dicke p-dotierte Schichten mit hohem Al-Anteil benötigt werden ein leistungs- und betriebsspannungslimitierendes Phänomen. Zu solchen Bauelementen



Abbildung 13: Ionisierungsenergien der Mg-Akzeptoren in AlGaN-Schichten [100-110]. Mit gestrichelten Linien ist die mögliche Streuung der  $E_A$ -Werte von Mg-Akzeptoren im AlGaN:Mg-Materialsystem gekennzeichnet.

zählen neben DUV-LEDs mit für die QW-Emission transparenter p-Seite [19] und DUV-LEDs auch DUV-Laserdioden mit Al-reichen angepassten HIL (Kapitel 2.5) mit Mantelschichten [91]. Die Gründe für die niedrige elektrische Leitfähigkeit von Al-reichen AlGaN:Mg-Schichten sind zum einem die zunehmend erschwerte Löslichkeit von Mg in AlGaN [92, 93] und zum anderem die ebenfalls zunehmende Selbstkompensation der Mg-Dotierung [97-99]. Daneben ist aber vor allem der starke und nahezu lineare Anstieg der Ionisierungsenergie  $(E_A)$  von Mg mit steigendem Al-Anteil in AlGaN:Mg für die geringe elektrische p-Leitfähigkeit dieser Schichten verantwortlich. In Abbildung 13 befindet sich ein Auszug der berichteten Ionisierungsenergien von Mg in AlGaN-Schichten. Die Literaturwerte unterliegen einer Streuung, welche vor allem mit der Verwendung unterschiedlicher Wachstumsbedingungen, Messmethoden und Dotierkonzentrationen zusammenhängt. Dabei sind die niedrigsten berichteten Werte für GaN:Mg  $E_A \sim 170$  meV und für AlN:Mg  $E_A \sim 500$  meV. Ausgehend von einer thermischen Ionisation der Mg-Akzeptoren kann die für den Stromtransport zur Verfügung stehende freie Lochdichte in einem unkompensierten Halbleiter nach [79]:

$$p = \sqrt{\frac{N_V N_A}{2}} \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{2k_B T}\right)$$
 3.1

berechnet werden [79]. Dabei ist  $N_V$  die effektive Zustandsdichte nahe des Valenzbandmaximums und  $N_A$  die Akzeptordichte beziehungsweise für den vorliegenden Fall die Mg-Dotierkonzentration. Demnach beträgt für eine übliches  $N_A$  von 1×10<sup>19</sup> cm<sup>-3</sup> der der ionisierten Akzeptoren bei Raumtemperatur (RT) ~ 3,5% Anteil GaN:Mg ( $p = 4 \times 10^{17}$  cm<sup>-3</sup>) und lediglich ~ 0,01% für AlN:Mg ( $p = 1 \times 10^{15}$  cm<sup>-3</sup>)<sup>1</sup>. Diese Betrachtung ist eine obere Abschätzung der freien Lochdichte und berücksichtigt keine Kompensationseffekte durch donatorartige Verunreinigungen, zum Beispiel durch Sauerstoff oder durch Stickstoff-Vakanzen. Es ist bekannt, dass bei der Mg-Dotierung von AlGaN-Schichten neben einem vergleichsweise flachen Akzeptor-Niveau, ein tiefes Donator-Niveau entsteht, dessen Besetzung mit steigender Mg-Dotierkonzentration zunimmt [94, 95]. Zusammen mit der sogenannten Selbstkompensation führt dies zu einem sinkenden p für  $N_A > 2 \times 10^{19}$  cm<sup>-3</sup> [96]. Die für die Ionisation ausschlaggebende Fermi-Energie ( $E_F$ ) entfernt sich dabei immer weiter von der Valenzbandkante. Dadurch ist die Formel 3.1, bei der von einem E<sub>F</sub> in der Mitte zwischen der Valenzbandkante und dem Akzeptor-Niveau ausgegangen wird und deshalb  $p \propto \exp(-E_A/2) = \exp(-|E_V - E_F|)$  gilt, nicht mehr anwendbar. Für einen (teilweise) kompensierten *p*-Halbleiter gilt deshalb [97]:

$$p = \sqrt{\frac{N_V N_A}{2} \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{k_B T}\right)}$$
3.2

Der Anteil der ionisierten Akzeptoren für das obere Beispiel sinkt folglich in einem kompensierten Halbleiter auf lediglich 0,13% in GaN:Mg ( $p = 4 \times 10^{16}$  cm<sup>-3</sup>) und auf  $8 \times 10^{-7}$ % für AlN:Mg ( $p = 1 \times 10^{11}$  cm<sup>-3</sup>). Unabhängig davon, ob die AlGaN:Mg-Schichten in einer DUV-LED kompensiert oder unkompensiert sind, ist die Dichte der freien Elektronen für eine Si-dotierte *n*-AlGaN-Schicht stets um mindestens eine Größenordnung höher als in *p*-AlGaN-Schichten mit derselben Zusammensetzung<sup>2</sup>. Deshalb spielt die *n*-Dotierung von AlGaN für die Betriebsspannung, die Effizienz und damit die Entwicklung von DUV-LEDs eine untergeordnete Rolle im Vergleich zu der *p*-Dotierung.

Ein aussichtsreiches Konzept für die Steigerung der elektrischen Leitfähigkeit in AlGaN:Mg-Schichten sind Mg-dotierte kurzperiodische Übergitter. Das SPSL stellt in alternierender Abfolge in Wachstumsrichtung angeordnete Well- ( $Al_xGa_{1-x}N$ ) und Barriere-Schichten ( $Al_yGa_{1-y}N$ ) mit unterschiedlichen Al-Anteilen (x < y) dar. Die räumliche periodische Änderung des Al-Anteils führt zu einer Modulation des Valenzbandes<sup>3</sup> relativ zur Fermi-Energie. Dabei befindet sich  $E_F$  in der Barrieren-Region des Übergitters weiter weg von der

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Die effektive Zustandsdichte wurde am Valenzbandmaximum unter der Annahme parabolischer Bänder berechnet:  $N_V = \left(\frac{2\pi m_h^* k_B T}{h^2}\right)^{3/2}$ . Die Werte für die effektiven Massen der Löcher  $m_h^*$  wurden mit 0,8 $m_e$  in GaN:Mg und  $2m_e$  in AlN:Mg angenommen.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Mit  $E_A^{GaN:Si} = 25$  meV [11] und  $E_A^{AlN:Si} = 250$  meV [12] sowie  $m_{GaN:Si}^* = 0,23m_e$  [13] und  $m_{AlN:Si}^* = 0,45m_e$  [14].

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Durch die Verwendung von SPSLs wird neben dem Valenzband auch das Leitungsband energetisch moduliert. Da sich allerdings das vorliegende Kapitel mit der *p*-Dotierung beschäftigt, wird bei der Beschreibung der Übersicht halber lediglich auf die Änderungen im Valenzband eingegangen.



Abbildung 14: Schematische Darstellung des Valenzbandverlaufs eines AlGaN:Mg-SPSL. Mit grünen Pfeilen ist der Transport der gelb dargestellten freien Löcher in die laterale Richtung (x) gekennzeichnet. Die roten Pfeile demostieren die in einer LED für die QW-Injektion relevante Richtung des Lochtransports in die Wachstumsrichtung.

Valenzbandkante als es in den Wells der Fall ist. Dadurch werden die Akzeptoren vermehrt in den Barrieren-Regionen ionisiert und relaxieren in die energetisch niedrigeren Well-Regionen, Abbildung 14. Die freie Lochkonzentration wird dabei im Vergleich zu Bulk-Schichten<sup>1</sup> nicht einfach zwischen den Well- und den Barriere-Regionen aufteilt, sondern die durchschnittliche Dichte der freien Löcher ( $p_{\phi}$ ) ist in einem Übergitter immer höher als im Bulk-Material mit durchschnittlicher Legierungszusammensetzung des SPSL [79]. Der absolute Wert von  $p_{\phi}$  in einem SPSL hängt dabei von den Dicken sowie den Al-Anteilen in den einzelnen Well- und Barriere-Schichten ab und wird in Kapitel 3.5.1 gesondert diskutiert. Somit können in einem Übergitter bei gleicher Temperatur mehr Akzeptoren ionisiert werden als im Bulk-Material, weshalb die Ionisierungsenergie der Mg-Akzeptoren in einem AlGaN:Mg-SPSL stets niedriger sein sollte als  $E_A$  in einer AlGaN:Mg-Bulk-Schicht mit der durchschnittlichen Legierungszusammensetzung des Übergitters. Die Auswirkungen der erleichterten Ionisation von Mg-Akzeptoren in AlGaN:Mg-Übergittern sind vor allem anhand von aus den Literaturberichten gesammelten experimentellen  $E_A$ -Werten erkennbar, Abbildung 15. Vor allem bei Al-reichen AlGaN:Mg-Bulk-Schichten liegen die Ionisierungsenergien von Mg deutlich über den E<sub>A</sub>-Werten der AlGaN:Mg-SPSLs. Trotz der Verwendung von Schichten mit niedrigen Al-Anteil in den Well-Regionen verspricht der Einsatz von AlGaN:Mg-Übergittern eine gleichbleibende optische UV-Transparenz im Vergleich zu AlGaN:Mg-Bulk-Schichten mit dem durchschnittlichen Al-Anteil der SPSLs [79, 98, 99]. Deshalb gilt dieses Konzept vor allem für die Anwendung in DUV-LEDs mit für die QW-Emission transparenter *p*-Seite als vielversprechend.

Allerdings wurde bisher kein experimenteller Beweis dafür erbracht, dass die für die Betriebsspannung von DUV-LEDs ausschlaggebende vertikale elektrische Leitfähigkeit, in Wachstumsrichtung der AlGaN:Mg-Übergitter, bedeutend niedriger ist als die von

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Die Begriffe "Bulk-Schicht" und "Bulk-Material" werden in dieser Arbeit benutzt um nominell homogene, nicht modulierte AlGaN-Schichten zu bezeichnen. Diese Bezeichnungen wurden eingeführt um den Unterschied zwischen einer Schicht und einem Übergitter, welches aus einer Schichtfolge besteht, hervorzuheben.



Abbildung 15: Ionisierungsenergien der Mg-Akzeptoren in AlGaN:Mg-SPSLs [33-36]. Die grauen Kreise stellen die Ionisierungsenergien von Mg-Akzeptoren in Bulk-AlGaN:Mg aus Abbildung 13 dar.

AlGaN:Mg-Bulk-Schichten. Im Gegensatz zu dem lateralen Transport, müssen die ionisierten Löcher beim vertikalen Transport durch oder über die Potenziale der SPSL-Barrieren transportiert werden, weshalb sich  $\sigma_V$  von der lateralen Leitfähigkeit ( $\sigma_L$ ) stark unterscheiden kann [21, 100], Abbildung 14. Auch im Vergleich zum Transport in Bulk-Schichten treten beim vertikalen Transport in SPSLs neben der Notwendigkeit der Überwindung von Potenzialbarrieren mehrere zusätzliche Streumechanismen für die Ladungsträger auf. Dazu zählen die Streuung der Löcher an Legierungsfluktuationen und an Schichtgrenzflächen sowie die Streuung an den ionisierten Akzeptoren in den Barriere-Regionen [21, 100]. Es ist bislang weder theoretisch noch experimentell ausreichend erforscht wie stark sich die Streuzeit ( $\tau$ ) der Löcher in Übergittern im Vergleich zu Bulk-Schichten ändert. Es kann allerdings aufgrund der zusätzlichen Streuprozesse von einer niedrigeren Loch-Beweglichkeit<sup>1</sup>:

$$\mu_h = q\tau/m_h^* \tag{3.3}$$

in die vertikale Richtung von Übergittern im Vergleich zu Bulk-Schichten ausgegangen werden.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Wenn nicht explizit anders erwähnt wird, dann ist im Folgenden bei dem Begriff Loch-Beweglichkeit in einem Übergitter immer die vertikale Loch-Beweglichkeit in Wachstumsrichtung gemeint.

Sowohl  $\mu_h$  als auch p sind direkt-proportional zu der elektrischen Leitfähigkeit

### $\sigma = q\mu_h p \qquad \qquad 3.4$

Deshalb kann die Konzentration der freien Löcher in einem Mg-dotierten AlGaN-SPSL aufgrund der niedrigeren Ionisierungsenergie im Vergleich zu AlGaN:Mg-Bulk-Schichten zwar höher werden, muss aber aufgrund der möglicherweise niedrigeren Beweglichkeit der Löcher in die vertikale Richtung nicht zwangsläufig zu einem Anstieg in  $\sigma_V$  führen. Bis heute existieren nur eine Handvoll Berichte über die experimentell bestimmten Werte der vertikalen Leitfähigkeit in AlGaN:Mg-SPSLs [101, 102]. Meistens wird hierfür die modifizierte Transferlängenmethode (MTLM) [101] verwendet. Allerdings erfordert die Bestimmung von  $\sigma_V$  mittels MTLM eine äußerst präzise Ätzprozedur sowie die genaue Kenntnis von meist unbekannten Parametern wie die Dimensionen und Eigenschaften von mehreren Teilen der Heterostruktur. Das Fehlen einfacher und robuster Methoden für die Bestimmung der vertikalen Leitfähigkeit von Übergittern hindert somit die Optimierung von AlGaN:Mg-SPSLs und damit auch die Entwicklung der DUV-LEDs.

Mit dieser Motivation wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit eine vergleichsweise robuste und einfache Methode für die experimentelle Bestimmung von  $\sigma_V$  in SPSLs entwickelt und angewandt. Die Methode basiert auf der elektrischen Charakterisierung von DUV-LEDs mit variierter AlGaN:Mg-SPSL-Dicke, wobei die vertikale Leitfähigkeit bei einem konstanten Strom aus dem Spannungsabfall an den einzelnen Bauelementen bestimmt wird. Dabei wird die vertikale Leitfähigkeit von zwei AlGaN:Mg-SPSLs (Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg und Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg) in Abhängigkeit von der Temperatur und der elektrischen Feldstärke (F) bestimmt sowie mit den elektrischen Eigenschaften von Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schichten verglichen. Schließlich werden die gemessenen  $\sigma_V$ -F-T-Verläufe sowohl von AlGaN:Mg-SPSLs als auch von AlGaN:Mg-Bulk-Schichten im Hinblick auf die Ionisationsund Stromtransportmechanismen theoretisch untersucht.

Das folgende Kapitel ist wie folgt gegliedert: Zuerst wird in Kapitel 3.1 die Heterostruktur der untersuchten DUV-LEDs erläutert. Es folgt die Beschreibung der angewandten Methode zur Bestimmung der vertikalen Leitfähigkeit in Abhängigkeit von der elektrischen Feldstärke am Beispiel eines Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSLs in Kapitel 3.2. Im Anschluss werden in Kapitel 3.3 mögliche Ionisations- und Stromtransportmechanismen in Bulk-AlGaN:Mg-Schichten diskutiert, welche den gemessenen  $\sigma_V$ -*F*-Verlauf erklären könnten. Die Bestimmung der Temperaturabhängigkeit des  $\sigma_V$ -*F*-Verlaufs in Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Schichten sowie dessen Beschreibung mittels des 3D-Poole-Frenkel-Effekts (3D-PFE) und der Hopping-Leitung erfolgt in Kapitel 3.4. In Kapitel 3.5 wird zunächst die Ionisation von Mg-Akzeptoren in AlGaN:Mg-Übergittern sowie der vertikale Transport von freien Löchern theoretisch beschrieben und simuliert. Anschließend wird in Kapitel 3.6 die  $\sigma_V$ -Abhängigkeit von *F* und *T* in dem Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg- sowie in dem Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter gemessen und in Relation zu den theoretisch berechneten Werten gesetzt. Schließlich werden die Ergebnisse in Kapitel 3.7 zusammengefasst.

# 3.1 Heterostruktur der untersuchten DUV-LEDs

Eine isolierte elektrische Charakterisierung von AlGaN:Mg-SPSLs ist nicht ohne Weiteres möglich. Es benötigt zusätzlicher Strukturen, welche das Wachstum, die mechanische Stabilität und die elektrische Kontaktierung der zu untersuchenden Übergitter ermöglichen. Um sicherzustellen, dass Defektdichten, Bandverbiegungen sowie Verspannungszustände innerhalb der Übergitter vergleichbar zu denen in realen Bauelementen sind, wurden die  $\sigma_V$ -Untersuchungen in dieser Arbeit an vollständigen LED-Heterostrukturen mit variierter Dicke des jeweiligen Übergitters durchgeführt. Zu diesem Zweck wurden insgesamt drei Probenserien gewachsen und prozessiert. Dabei wurden die Übergitterkonfigurationen anhand von zum Zeitpunkt der Untersuchungen intern verwendeten Legierungszusammensetzungen, Dotierkonzentrationen sowie Dicken der Wells und der Barrieren ausgewählt. Für die Messung der vertikalen Leitfähigkeit eines Al<sub>0.71</sub>Ga<sub>0.29</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N:Mg-Übergitters wurde die erste Serie von DUV-LEDs mit insgesamt vier Proben gewachsen<sup>1</sup>. Die Emissionswellenlänge der Bauelemente wurde dabei auf 265 nm eingestellt. Das Wachstum der LED-Heterostrukturen erfolgte auf epitaktisch lateral überwachsenen (engl. epitaxially laterally overgrown, ELO) AlN/Saphir-Templates mit einer durchschnittlichen Versetzungsdichte von etwa  $2 \times 10^9$  cm<sup>-2</sup>. Auf die einzelnen Pufferschichten folgte eine Si-dotierte Al<sub>0,76</sub>Ga<sub>0,24</sub>N:Si-Stromspreizschicht und eine Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Si-*n*-Kontaktschicht sowie eine 40 nm dicke erste Al<sub>0,63</sub>Ga<sub>0,37</sub>N:Si-Barriere. Das anschließend gewachsene dreifach-MQW besteht aus 1,4 nm dicken Al<sub>0,48</sub>Ga<sub>0,52</sub>N-Quantentöpfen, welche durch 5 nm dicke und mit Si delta-dotierte Al<sub>0.63</sub>Ga<sub>0.37</sub>N-Barrieren voneinander getrennt sind. Die Elektronensperrschicht wurde durch eine 10 nm dicke intrinsische Al<sub>0,85</sub>Ga<sub>0,15</sub>N-Schicht realisiert, während die Lochinjektion durch einen 25 nm dicken Al<sub>0,75</sub>Ga<sub>0,25</sub>N:Mg-HIL gewährleistet wurde. Auf den HIL wurde anschließend das zu untersuchende Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter mit variierter Dicke  $(d_{SPSL})^2$  gewachsen. Mittels der in-situ Reflektometrie<sup>3</sup> wurden die  $d_{SPSL}$ -Werte der einzelnen Übergitter auf jeweils 46 nm, 93 nm, 140 nm und 180 nm bestimmt. Die Übergitterperiode wurde dabei auf 2 nm eingestellt, mit jeweils 1 nm dicken Barrieren und 1 nm dicken Wells. Die einheitliche Mg-Dotierung im gesamten Übergitter erfolgte durch die Einstellung eines kontinuierlichen Cp<sub>2</sub>Mg/III-Flusses während des Wachstums auf 1,5%. Die Heterostruktur wurde durch eine 230 nm dicke und aus GaN:Mg bestehende p-Kontaktschicht abgeschlossen. Eine schematische Darstellung der untersuchten Probenserie mit variierter Dicke des Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitters ist in Abbildung 16 dargestellt.

Mit dem Ziel die elektrischen Eigenschaften des Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL mit einer Bulk-Schicht mit der durchschnittlichen Legierungszusammensetzung dieses Übergitters zu vergleichen, wurde eine zweite Serie aus drei zusätzlichen Proben

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Das MOVPE-Wachstum der ersten sowie der zweiten Serie erfolgte durch Norman Susilo (TUB).

 $<sup>^2</sup>$  Zum Zwecke der Übersichtlichkeit wird im Folgenden der Ausdruck  $d_{\it SPSL}$  auch für die Dicke der untersuchten Bulk-Schicht verwendet.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Die Auswertung der in-situ Reflektometrie-Messungen, in allen Serien, erfolgte gemeinsam mit Norman Susilo (TUB).



Abbildung 16: Schematische Darstellung der untersuchten DUV-LED-Serie mit variierter Dicke des  $Al_{0,71}Ga_{0,29}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg-Übergitters.$ 

gewachsen. Hierbei wurde in die ansonsten identische Heterostruktur der DUV-LEDs aus der ersten Serie anstelle des Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL eine Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht implementiert. In den drei Proben der zweiten Serie wurde die Dicke der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht variiert. Die mittels der in-situ Reflektometrie bestimmt Dicken der einzelnen Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schichten sind 44 nm, 97 nm und 138 nm. Zusätzlich wurde eine Probe als Referenz für die ersten beiden Serien, ohne das Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter und ohne das Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht, gewachsen.

Für die Messung der vertikalen Leitfähigkeit eines Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitters wurde eine dritte Serie aus DUV-LEDs mit einer Emissionswellenlänge von ebenfalls 265 nm verwendet<sup>1</sup>, allerdings mit einer leicht abweichenden Heterostruktur im Vergleich zu den ersten beiden Probenserien. Auch hier erfolgte das Wachstum auf ELO-AlN/Saphir-Templates. Im Gegensatz zu der Heterostruktur der ersten beiden Probenserien folgt allerdings auf die Pufferschichten und die Al<sub>0,78</sub>Ga<sub>0,22</sub>N:Si-n-Stromspreizschicht keine *n*-Kontaktschicht, sondern die erste Barriere aus Al<sub>0,63</sub>Ga<sub>0,37</sub>N:Si. Das Fehlen einer *n*-Kontaktschicht mit einer Legierungszusammensetzung um die  $Al_{0.65}Ga_{0.35}N$ , welches die Herstellung von ohmschen *n*-Kontakten erlaubt (siehe hierzu Kapitel 2.1), wird im Kapitelverlauf noch relevant werden. Bei dem anschließend gewachsenen dreifach-MQW sind die Barrieren wie in den ersten beiden Serien 5 nm dick, Si-Deltadotiert und bestehen ebenfalls aus Al<sub>0,63</sub>Ga<sub>0,37</sub>N:Si. Die Quantentöpfe haben dagegen einen abweichenden Al-Anteil (Al<sub>0,55</sub>Ga<sub>0,45</sub>N) und sind, um die Emissionswellenlänge von 265 nm zu erreichen, mit jeweils 2,2 nm breiter als in den ersten beiden Serien. Auch das undotierte EBL unterscheidet sich stark zu den ersten beiden Serien, dieses ist mit 5 nm schmaler, hat aber einen höheren Al-Anteil von Al<sub>0.95</sub>Ga<sub>0.05</sub>N. Auf das EBL folgt anschließend das zu untersuchende Al<sub>0.86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter, welches gleichzeitig die

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Das MOVPE-Wachstum der dritten Serie erfolgte durch Christian Kuhn (TUB).

Funktion des HIL erfüllt. Die Dotierung in den 0,9 nm dicken Wells und den ebenfalls 0,9 nm dicken Barrieren des  $Al_{0,86}Ga_{0,14}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg-SPSL:Mg$  wurde durch die Einstellung des Cp<sub>2</sub>Mg/III-Flusses während des Wachstums auf 1% erreicht. Insgesamt wurden vier Proben mit jeweils variierender Dicke (62 nm, 112 nm, 217 nm, 432 nm) des  $Al_{0,86}Ga_{0,14}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg-Übergitters$  hergestellt. Die einzelnen Heterostrukturen wurden mit einer 40 nm dünnen *p*-Kontaktschicht abgeschlossen.

Die strukturellen Eigenschaften der einzelnen Schichten wurden mittels der hochauflösenden Röntgendiffraktometrie<sup>1</sup> (engl. high resolution X-ray diffraction, HR-XRD), untersucht. Für alle Serien wurden die anvisierten Al-Anteile sowie das pseudomorphe Wachstum der Heterostruktur, mit Ausnahme der GaN:Mg-Schicht, bestätigt. Nach dem Wachstum wurden die Mg-Akzeptoren durch das Tempern der einzelnen Proben bei 600°C in einer Sauerstoffatmosphäre aktiviert. Abschließend wurden die Proben der ersten beiden Serien gleichzeitig und die der dritten Serie<sup>2</sup> separat unter Verwendung von standard-photolithographischen Techniken zu LEDs prozessiert. Als n-Kontakt wurde eine V/Al/Ni/Au-Metallisierung verwendet und nach Abscheidung der in einer Stickstoffatmosphäre getempert. Als p-Kontakt kam ein Pd-basierter Metallstapel zum Einsatz.

Es soll an dieser Stelle darauf hingewiesen werden, dass die *n*-Kontakte der Bauelemente in der dritten Probenserie aufgrund der Abwesenheit einer *n*-Kontaktschicht und einer zum Prozesszeitpunkt nicht optimierten *n*-Kontaktherstellung im Gegensatz zu den ersten beiden Probenserien nicht-ohmsch und innerhalb der Probenserie nicht vergleichbar sind. Um dennoch die elektrischen Charakteristiken der einzelnen Bauelemente untereinander vergleichen zu können, wurde die im Anhang A: Korrektur der *j*-*U*-Kennlinien von DUV-LEDs mit Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSLs beschriebene Korrektur unter Berücksichtigung der jeweiligen *n*-Kontakteigenschaften eingeführt.

Eine Zusammenfassung aller relevanten Parameter der drei Serien befinden sich in der Tabelle 1.

Serien- nummer	Al-Anteil Barrieren/Wells (%)	Dicke Barrieren/Wells (nm)	Cp2Mg/III- Verhältnis (%)	Dicke Bulk/SPSL (nm)
1	71/65	1/1	1,5	46, 93, 140, 180
2	68	-	1,5	0, 44, 97, 138
3	86/65	0,9/0,9	1	62, 112, 217, 432

Tabelle 1: Zusammenfassung aller wichtigen Parameter der drei untersuchten Probenserien.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> HR-XRD-Messungen und -Auswertungen durch für die ersten beiden Serien erfolgten durch Norman Susilo (TUB), für die dritte Serie durch Christian Kuhn (TUB).

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Die dritte Serie wurde durch Luca Sulmoni (TUB) prozessiert.

# 3.2 Bestimmung der vertikalen Leitfähigkeit in SPSLs und Bulk-Schichten

Aufgrund der identischen Heterostruktur aller Bauelementen, mit Ausnahme der gezielten Dickenvariation der untersuchten Übergitter beziehungsweise der Bulk-Schicht, können jegliche Änderungen in den elektrischen Betriebscharakteristiken der einzelnen DUV-LEDs in den jeweiligen Probenserien auf die Änderung von  $d_{SPSL}$  zurückgeführt werden. Bedingt durch die verwendete und in Abbildung 16 dargestellte Kontakt- und Heterostrukturkonfiguration der Bauelemente verläuft der Stromfluss durch deren *p*-Seiten überwiegend in Wachstumsrichtung beziehungsweise in die vertikale Richtung. Somit wird die absolute Änderung der Betriebsspannung ( $\Delta U$ ) der einzelnen DUV-LEDs mit dem jeweiligen  $d_{SPSL}$  durch die vertikale Leitfähigkeit der untersuchten AlGaN:Mg-SPSLs bezeigungsweise der untersuchten AlGaN:Mg-Bulk-Schichten bestimmt. Folglich kann die Berechnung von  $\sigma_V$  anhand von gemessenen *j*-*U*-Kennlinien der Leuchtdioden innerhalb der einzelnen Probenserien mit Hilfe des ohmschen Gesetzes

$$\sigma_V = j/F \tag{3.5}$$

erfolgen. Hierbei ist *F* die Stärke des elektrischen Feldes, welches am zu untersuchenden Übergitter beziehungsweise an der zu untersuchenden Bulk-Schicht anliegt. Die elektrische Feldstärke kann dabei durch das Verhältnis der Änderung der LED-Betriebsspannung zu der Dickenänderung der untersuchten Struktur berechnet werden

$$F = \Delta U / \Delta d_{\rm SPSL}$$
 3.6

Die für Ermittlung von *j* und *F* erforderliche elektrische Charakterisierung<sup>1</sup> in Form der Aufnahme von *I-U*-Kennlinien der Bauelemente erfolgte für *j* < 1,25 Acm<sup>-2</sup> durch Messungen im Dauerstrich-Betrieb mittels eines Pikoamperemeters. Um die Aufheizung der Bauelemente während der Messung zu reduzieren, wurden für höhere Stromdichten (*j* > 1,25 Acm<sup>-2</sup>) gepulste Messungen durchgeführt. Die Messtemperatur der Proben wurde aktiv eingestellt. Dabei wurde bei der Charakterisierung der ersten beiden Serien eine Heizplatte verwendet, wohingegen bei der Untersuchung der dritten Serie ein Peltier-Element zum Einsatz kam.

In Abbildung 17 sind die gemessenen *j*-*U*-Abhängigkeiten<sup>2</sup> der repräsentativen DUV-LEDs aus allen drei Probenserien dargestellt. Die Betriebsspannung der Bauelemente aus allen drei Serien skaliert deutlich mit  $d_{SPSL}$ . Um den Einfluss der Mg-dotierten AlGaN-Strukturen auf die Betriebsspannung zu demonstrieren, sind in Abbildung 17 (a) die *j*-*U*-Kennlinien von DUV-LEDs aus der ersten Serie und der Referenzprobe (ohne ein Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL und ohne eine Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht)

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Die elektrische Charakterisierung der Bauelemente für die ersten beiden Serie erfolgte in Zusammenarbeit mit Emil Mickein (TUB) und Verena Montag (TUB), die der dritten Serie in Zusammenarbeit mit Jesus Aparici (TUB).

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Für die Umrechnung der Stromstärke in die Stromdichte wurde die Mesa-Fläche der charakterisierten Kontaktgeometrie von 0,153×10<sup>-6</sup> m<sup>2</sup> verwendet.



Abbildung 17: Gemessene j-U-Charakteristiken von DUV-LEDs mit unterschiedlicher Dicken des implementierten  $Al_{0,71}Ga_{0,29}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg-Übergitters$  (a) lineare und (b) logarithmische Darstellungen. In (c) und (d) sind jeweils j-U-Kurven von DUV-LEDs mit variierter Dicke der  $Al_{0,68}Ga_{0,32}N:Mg$ -Bulk-Schicht und des  $Al_{0,86}Ga_{0,14}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg$ -Übergitters abgebildet.

gegenübergestellt. Während die Betriebsspannung der Bauelemente auf der Referenzprobe bei  $j = 10 \text{ Acm}^{-2}$  etwa 5,5 V beträgt, steigt dieser Wert für DUV-LEDs mit einem 180 nm dicken Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter auf mehr als das Dreifache (U = 17,5 V). Der durchschnittliche Anstieg der Betriebsspannung der Bauelemente für  $j = 10 \text{ Acm}^{-2}$ beträgt somit ~7,5 V pro 100 nm des eingesetzten Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitters, Abbildung 17 (b). Auffällig ist, dass auch die Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht zu einem ähnlichen Spannungsabfall (Abbildung 17 (c)) führt und somit auf eine vergleichbare vertikale Leitfähigkeit der beiden Strukturen hindeutet. Für DUV-LEDs mit dem Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter ist der Spannungsabfall pro 100 nm noch höher und beträgt bei  $j = 10 \text{ Acm}^{-2}$  etwa 9 V, Abbildung 17 (d).



Abbildung 18: Ein Beispiel anhand der in Abbildung 17 (a) und (b) dargestellten j-U-Kennlinien für die Ermittlung des über den  $Al_{0,71}Ga_{0,29}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg-Übergitter$ anliegenden elektrischen Feldes bei einer Stromdichte von 10 Acm<sup>-2</sup>.

Um die vertikale Leitfähigkeit der beiden untersuchten AlGaN:Mg-Übergitter sowie der untersuchten AlGaN:Mg-Bulk-Schicht nach Gleichung 3.6 berechnen zu können, wurden die Betriebsspannungen der DUV-LEDs bei einer konstanten Stromdichte über  $d_{SPSL}$ dargestellt und die einzelnen Messpunkte anschließend mit Hilfe von Geraden gefittet. Aus dem Anstieg der Fitgeraden konnte die Stärke des an den untersuchten Strukturen anliegenden elektrischen Feldes bei der ausgewählten Stromdichte abgeleitet werden. Ein Beispiel für die Berechnung von F, anhand der ersten Serie mit variierter Dicke des  $Al_{0,71}Ga_{0,29}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg-Übergitters$ , bei *j* = 10 Acm<sup>-2</sup>, ist in der Abbildung 18 gezeigt. Die Betriebsspannung steigt dabei linear mit  $d_{SPSL}$  an und führt bei j = 10 Acm<sup>-2</sup> zu F = 0.73 MVcm<sup>-1</sup>. Durch die Durchführung der oben beschriebenen Prozedur für alle gemessenen Stromdichten, konnte  $\sigma_V$  als Funktion der berechneten elektrischen Feldstärke bestimmt werden. Es soll an dieser Stelle darauf hingewiesen werden, dass die Referenzprobe für die ersten beiden Serien ( $d_{SPSL} = 0$  nm) nicht für die Berechnung von  $\sigma_V$ berücksichtigt wurde. Der Grund hierfür ist, dass die Ausdehnung der Raumladungszone in die p-Seite der Referenzprobe bei niedrigen Stromdichten bis in die p-Kontaktschicht reichen und so zu einem Abweichenden j-U-Verhalten gegenüber von Proben mit  $d_{SPSL} > 0$  nm führen könnte.

Die berechnete vertikale Leitfähigkeit als Funktion der elektrischen Feldstärke für alle drei untersuchten Strukturen ist in Abbildung 19 dargestellt. Dabei variiert  $\sigma_V$  innerhalb des Messbereichs über mehrere Größenordnungen und zeigt eine ausgeprägte Feldstärkeabhängigkeit. Für das Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter beträgt  $\sigma_V$  bei  $T = 25^{\circ}$ C (5±1,5)×10<sup>-7</sup> (Ωcm)<sup>-1</sup> bei  $F \sim 50$  kVcm<sup>-1</sup> und steigt auf  $\sigma_V = (2\pm0,3)\times10^{-5}$  (Ωcm)<sup>-1</sup> bei F = 0,8 MVcm<sup>-1</sup>. Im Vergleich dazu ist die vertikale Leitfähigkeit der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-

Bulk-Schicht bei niedrigen Feldstärken etwas höher ( $\sigma_V = (8\pm 2) \times 10^{-7} (\Omega \text{cm})^{-1}$  bei  $F \sim 50 \text{ kVcm}^{-1}$ ) und steigt bei höheren F-Werten zusätzlich schneller an ( $\sigma_V = (5,5\pm 1) \times 10^{-5} (\Omega \text{cm})^{-1}$  bei  $F = 0,8 \text{ MVcm}^{-1}$ ). Von den drei Serien am niedrigsten ist  $\sigma_V$  in dem Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter ( $\sigma_V = (2\pm 0,4) \times 10^{-8} (\Omega \text{cm})^{-1}$  bei  $F \sim 50 \text{ kVcm}^{-1}$ ), was zum Teil mit der im Vergleich zu den anderen beiden Serien um 5 K ( $T = 20^{\circ}$ C) niedrigeren Messtemperatur zusammenhängt. Trotz der insgesamt niedrigsten vertikalen Leitfähigkeit von den drei untersuchten Strukturen verzeichnet  $\sigma_V$  des Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitters den stärksten Anstieg mit der elektrischen Feldstärke und nähert sich bei hohen elektrischen Feldern zunehmend den Werten der ersten beiden Serien an ( $\sigma_V = (8,5\pm1,5) \times 10^{-6} (\Omega \text{cm})^{-1}$  bei  $F = 0,8 \text{ MVcm}^{-1}$ ).

Diese Resultate lassen bereits erste Schlussfolgerungen über die elektrischen Eigenschaften der untersuchten Strukturen zu. Die erste Erkenntnis ist die hohe Resistivität der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht sowie der beiden untersuchten AlGaN:Mg-Übergitter. Auch andere Gruppen berichten von ähnlich niedrigen elektrischen Leitfähigkeiten in Mgdotierten AlGaN-Schichten mit hohem Al-Anteil, allerdings ohne die Angaben über die zugehörigen elektrischen Feldstärken. Aus diesem Grund ist der direkte Vergleich mit den Literaturwerten schwierig. Als Beispiel kann dennoch die in [103] für ein Übergitter mit einer durchschnittlichen Legierungszusammensetzung von Al<sub>0.6</sub>Ga<sub>0.4</sub>N:Mg bestimmte vertikale Leitfähigkeit von 6,6×10<sup>-5</sup> (Ωcm)<sup>-1</sup> genannt werden. Auch für die in [104] charakterisierte Al<sub>0,7</sub>Ga<sub>0,3</sub>N:Mg-Bulk-Schicht liegt die elektrische Leitfähigkeit in der Größenordnung von 10<sup>-5</sup> (Ωcm)<sup>-1</sup>. Zum Vergleich, die elektrische Leitfähigkeit von Sidotierten AlGaN-Schichten mit einem ähnlichen Al-Anteil ist mindestens fünf Größenordnungen höher [105, 106]. Aus diesem Grund wird der Serienwiderstand der untersuchten DUV-LEDs durch die *p*-dotierten Schichten mit hohem Al-Anteil dominiert. Eine weitere wichtige Schlussfolgerung aus der Auswertung der ersten beiden Serien ist die vor allem bei hohen elektrischen Feldstärken höhere elektrische Leitfähigkeit der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht im Vergleich zum  $\sigma_V$  des Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL. Dies kann laut der Formel 3.4 zum einen daran liegen, dass in dem untersuchten Übergitter im Vergleich zu der Bulk-Schicht weniger freie Löcher vorhanden sind und/oder zum anderen an der möglicherweise niedrigeren Loch-Beweglichkeit im Übergitter.

Schließlich ist die letzte aber gleichzeitig wichtigste Schlussfolgerung, dass es in allen untersuchten Strukturen eine stark ausgeprägte und annähernd exponentielle Feldstärkeabhängigkeit von  $\sigma_V$  gibt. Es ist zunächst unklar welches physikalische Phänomen für dieses Verhalten verantwortlich ist und soll in den nächsten Unterkapiteln detailliert betrachtet werden.



Abbildung 19: Die ermittelte vertikale Leitfähigkeit von den drei untersuchten Mg-dotierten AlGaN-Strukturen als Funktion der elektrischen Feldstärke.

# 3.3 Ionisations- und Stromtransportmechanismen in AlGaN:Mg-Bulk-Schichten

Beim klassischen Bandtransport in *p*-dotierten Halbleiterschichten werden freie Löcher durch die Zufuhr thermischer Energie aus den Akzeptor-Niveaus ins Valenzband gehoben und dort durch  $\mu_h$  bestimmte Geschwindigkeit in Feldrichtung bewegt. Dabei ist  $\sigma(F)$  für nicht zu *hohe* Felder konstant beziehungsweise ohmsch [122-124]. Die in den untersuchten Strukturen gemessene vertikale Leitfähigkeit skaliert exponentiell mit der elektrischen Feldstärke und entspricht damit nicht dem ohmschen Verhalten für den Fall des Bandtransports der Ladungsträger. Der Anstieg der vertikalen Leitfähigkeit mit der elektrischen Feldstärke bei Raumtemperatur in AlGaN:Mg wurde bereits in [103] beobachtet<sup>1</sup>, aber nicht weiter untersucht. Schaut man sich die Formel für die elektrische Leitfähigkeit ( $\sigma = q\mu_h p$ ) an, so kann die gemessene  $\sigma_V$ -*F*-Abhängigkeit entweder durch einen exponentiellen Anstieg der Loch-Beweglichkeit und/oder durch einen exponentiellen Anstieg der freien Lochdichte mit der elektrischen Feldstärke erklärt werden. Bei Übergittern können zusätzliche, strukturbedingte Effekte die Leitfähigkeit beeinflussen,

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Die Abhängigkeit der vertikalen Leitfähigkeit von *F* wurde dabei indirekt über die Änderung von  $\sigma_V$  mit *j* beobachtet. Allerdings wie von den Autoren angegeben, könnte eine Aufheizung der Bauelemente während der Messung beobachtet werden und zumindest teilweise die gemessene Skalierung von  $\sigma_V$  mit *j* erklären.

weshalb das  $\sigma_V$ -*F*-Verhalten von SPSLs gesondert in Kapiteln 3.5.1 und 3.5.2 behandelt wird. In den nun folgenden Überlegungen wird der Fokus auf AlGaN:Mg-Bulk-Schichten gelegt. Die Feldstärkeabhängigkeit der Ladungsträger-Beweglichkeit  $\mu_h(F) = q\tau(F)/dr$  $m_h^*(F)$  in Halbleiterschichten ist ein bekanntes Phänomen [122-124]. Dabei ändert sich die zur Beweglichkeit direkt-proportionale Streuzeit bei hohen elektrischen Feldstärken, wenn die Driftgeschwindigkeit der Ladungsträger die Größenordnung von deren thermischen Geschwindigkeit erreicht. Zusätzlich können die freien Löcher in Folge der hohen elektrischen Feldstärke in ein lokales Valenzbandminimum befördert werden, wo sich dessen effektive Masse abrupt ändern würde und was aufgrund der inversen Proportionalität von  $m_h^*$  zu  $\mu_h$  auch die Beweglichkeit beeinflussen würde. Allerdings führt das erste und in der Regel auch das zweite Phänomen zu einer Reduktion der Beweglichkeit und nicht zu einem Anstieg von  $\mu_h$  mit F [122-124]. Des Weiteren würde sich dabei die Beweglichkeit im Gegensatz zu den hier experimentell ermittelten  $\sigma_V$ -*F*-Verläufen in beiden Fällen nicht stetig ändern, sondern für geringe Feldstärken konstant bleiben und ab einem bestimmten Schwellwert im ersten Fall graduell [107, 108] und im zweiten Fall abrupt ändern [109]. Eine weitere, bereits erwähnte potentielle Ursache für den gemessenen Anstieg der vertikalen Leitfähigkeit mit der elektrischen Feldstärke in den untersuchten Strukturen ist der exponentielle Anstieg von p mit F. Nach dem Betrachten der Formel 3.2

für die freie Lochdichte  $p = \sqrt{\frac{N_V N_A}{2}} \cdot \exp(-E_A/k_BT)$ , liegt die Vermutung nahe, dass eine Reduktion der Ionisierungsenergie der Akzeptoren mit steigender elektrischer Feldstärke zu dem beobachteten exponentiellen Anstieg von  $\sigma_V$  führen könnte. Allerdings wird beim klassischen Bandtransport von einer thermischen Ionisation der Ladungsträger ausgegangen, weshalb lediglich eine  $E_A$ -Abhängigkeit von der Temperatur und nicht vom elektrischen Feld vorliegen sollte. Somit ist klar, dass ein anderer, von dem klassischen Bandtransport abweichender Mechanismus, für die Leitfähigkeit der Ladungsträger in den untersuchten Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schichten verantwortlich sein muss.

Die Leitfähigkeit von nicht Grenzflächen-limitierten<sup>1</sup> Halbleiter- und Dielektrika-Schichten lässt sich in sechs verschiedene Mechanismen unterteilen [110]: 1) Korngrenzen-limitierte Leitung (engl. grain-boundary-limited conduction, GBL), 2) Ionische Leitung. 3) Raumladungs-limitierte Leitung (engl. space-charge limited conduction, SCL), 4) Ohmsche Leitung beziehungsweise der klassische Bandtransport, 5) Hopping-Leitung (engl. variable-range hopping, VRH) und 6) PFE-Leitung. Da die epitaktisch gewachsenen Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schichten nicht polykristallin sind und deshalb keine Korngrenzen aufweisen, kann GBL als möglicher Leitungsmechanismus in den untersuchten Schichten ausgeschlossen werden. Auch die Dominanz der Ionen-Leitung ist äußerst unwahrscheinlich. Denn die Existenz von mobilen positiv geladenen Ionen, in ausreichend hoher Konzentration, ist in AlGaN:Mg-Schichten nicht bekannt. Bei der Raumladungslimitierten Leitung besteht eine umgekehrte Proportionalität der elektrischen Leitfähigkeit

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Aufgrund des stetigen Anstiegs der LED-Betriebsspannung mit  $d_{SPSL}$  (siehe Abbildung 18), steht fest, dass die elektrische Leitfähigkeit in den untersuchten Strukturen nicht durch Grenzflächeneffekte dominiert wird, sondern durch den Schichtdicken bedingten elektrischen Widerstand der untersuchten AlGaN:Mg-Strukturen.



Abbildung 20: Schematische Darstellung des Energiepotentials einer neutralen Störstelle (a) isoliertet (b) in Umgebung anderer Störstellen und (c) in Umgebung anderer Störstellen unter Einfluss eines elektrischen Feldes.

zur dritten Potenz der Schichtdicke [110, 111]. In den untersuchten Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schichten besteht dagegen ein linearer Zusammenhang zwischen der Betriebsspannung und  $d_{SPSL}$  bei einer konstanten Stromdichte (vergleiche Abbildung 18) und führt neben der Schlussfolgerung  $\sigma_V(d_{SPSL})$  = konstant zum Ausschluss der SCL-Leitung. Da die ohmsche Leitung bereits ausgeschlossen wurde, können somit die ersten vier von den oben aufgelisteten sechs möglichen Leitungsmechanismen die elektrische Leitfähigkeit in den charakterisierten Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schichten nicht dominieren. Dagegen liegt bei den letzten beiden möglichen Leitungsmechanismen (Hopping- und PFE-Leitung) eine exponentielle Abhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit von der elektrischen Feldstärke vor und entspricht den bereits diskutierten experimentell beobachteten Verhalten. Die nächsten beiden Unterkapitel widmen sich deshalb der Beschreibung dieser beiden Leitungsmechanismen und dem Vergleich zwischen dem durch die Hopping- und die PFE-Leitungen vorausgesagten und dem gemessenen  $\sigma_V(F)$ -Verlauf der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schichten.

#### 3.3.1 Poole-Frenkel-Effekt

Der Poole-Frenkel-Effekt beschreibt die Feld-unterstützte thermische Emission von Ladungsträgern in Halbleitern und Isolatoren [112]. Dabei wird die thermische Ionisierungsenergie mit steigender elektrischer Feldstärke um den Term ( $\Delta E_A$ ) zunehmend

reduziert und führt so zu einer exponentiellen Erhöhung der elektrischen Leitfähigkeit. Die PFE-Leitung wurde bereits in diversen Materialsystemen beobachtet [131-134], so auch in InAlGaN [135-137], dessen Dominanz in Mg-dotierten AlGaN-Schichten wurde allerdings noch nicht experimentell nachgewiesen. Dagegen ist die PFE-Leitung in theoretischen Arbeiten zu InAlGaN:Mg, Gegenstand der aktuellen Forschung [113, 114].

Wie bei der thermischen Ionisation von Ladungsträgern in dotierten Halbleiterschichten stellt auch beim PFE eine neutrale Störstelle (engl. trap) den Ausgangspunkt der Beschreibung dieses Phänomens dar. Für die untersuchten Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg:Mg-Bulk-Schichten wird die neutrale Störstelle durch ein nicht ionisiertes und folglich nach außen hin neutrales Mg-Akzeptoratom repräsentiert. Das zu ionisierendes Loch befindet sich dabei in einem gebundenen Zustand des Coulomb-artigen Potenzials des Mg-Akzeptors. Die Energie, die notwendig ist, damit das gebundene Loch aus dem Coulomb-Potential mit Hilfe der thermischen Energie für F = 0 ionisiert beziehungsweise emittiert werden kann, beträgt  $E_{A,0}^*$ , Abbildung 20 (a). Werden mehrere Mg-Akzeptoren betrachtet, so überlappen sich deren Coulomb-Potenziale, was insgesamt zu einer Reduktion von  $E_{A,0}^*$  um den Betrag  $\Delta E_{A,0}^*$ führt, Abbildung 20 (b). Wie hoch die sogenannte Nullfeld-Ionisierungsenergie  $E_{A,0} = E_{A,0}^* - \Delta E_{A,0}^*$  ist, hängt von den intrinsischen Eigenschaften des Halbleiters und der Dotierkonzentration beziehungsweise den Abstand der Akzeptoren (s) ab. Das Anlegen eines elektrischen Feldes verzerrt das Coulomb-Potenzial aus Abbildung 20 (b). EA.0 wird dabei in Feldrichtung um den Betrag  $\Delta E_{A,F}$  abgesenkt und entgegen der Feldrichtung Abbildung 20 (c). Mit steigender elektrischer Feldstärke wird die erhöht. Ionisierungsenergie in Feldrichtung immer weiter abgesenkt, was nach Formel 3.2 zu einem exponentiellen Anstieg der Ladungsträgerdichte und damit zu einem exponentiellen Anstieg der elektrischen Leitfähigkeit mit F führt. Qualitativ kann also der hier in einer Dimension beschriebene Poole-Frenkel-Effekt den Beobachteten  $\sigma_V(F)$ -Verlauf in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg:Mg-Bulk-Schicht Abbildung 19 erklären, für einen quantitativen Vergleich zwischen Theorie und Experiment erfordert es jedoch eine realistischere, dreidimensionale Betrachtung des PFE (3D-PFE).

Die nun folgende Beschreibung des 3D-PFE richtet sich vor allem nach [140-143]. In der dreidimensionalen Betrachtung des PFE wird von einer Coulomb-artigen Störstelle ausgegangen, welche sich bei r = 0 befindet und das zu ionisierende Loch enthält. Diese Falle ist von anderen Coulomb-artigen Störstelle im Abstand r = s umgeben. In Kugelkoordinaten kann das so entstehende Potential ( $\Phi$ ) unter Einfluss des elektrischen Feldes und unter Berücksichtigung von lediglich zwei wechselwirkenden Störstellen durch den folgenden Ausdruck beschrieben werden

$$\Phi(r,\theta,F) = qFrcos(\theta) + \frac{\beta^2}{4q} \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{(s-r)}\right) - \frac{\beta^2}{qs}$$
 3.7

mit

$$\beta = \sqrt{\frac{q^3}{\pi\epsilon\epsilon_0}}$$
 3.8

wobei  $\epsilon$  die Dielektrizitätskonstante repräsentiert. Um die Emission der Ladungsträger in alle Raumrichtungen zu berücksichtigen, wird hierbei der sogenannte Emissionswinkel  $\theta$ eingeführt, welcher den Winkel zwischen der Emissionsrichtung ( $\vec{r}$ ) und der Richtung des elektrischen Feldes ( $\vec{F}$ ) beschreibt, es folgt  $\vec{F} \times \vec{r} = Frcos(\theta)$ . Die Feld-induzierte Änderung der Ionisierungsenergie  $\Delta E_{A,F}(\theta,F)$  für die einzelnen Emissionswinkel und Feldstärken können im nächsten Schritt mit Hilfe der numerischen Suche nach dem Maximum des Potenzials aus Gleichung 3.7 bestimmt werden:  $\Delta E_{A,F}(\theta,F) = Max_r\{\Phi(r,\theta,F)\}$ . Die Dichte der ionisierten Akzeptoren kann somit durch die Subtraktion zwischen  $\Delta E_{A,F}(\theta,F)$  und  $E_{A,0}$ im Exponenten sowie der anschließenden Integration über alle Emissionswinkel von 0 bis  $\pi$  wie folgt berechnet werden:

$$p(F,T) = \frac{K}{4\pi} \int_0^{\pi} \exp\left(-\frac{E_{A,0} - \Delta E_{A,F}(\theta,F)}{k_B T}\right) 2\pi \sin(\theta) d\theta \qquad 3.9$$

*K* ist hierbei eine Proportionalitätskonstante. Schließlich kann unter der Annahme, dass die Löcher nach der Ionisation aus den jeweiligen Störstellen direkt ins Valenzband befördert werden und da zum Ladungsträgertransport mit durch  $\mu_h$  bestimmten Geschwidigkeit beitragen, die elektrische Leitfähigkeit von *p*-dotierten Halbleitern unter der Berücksichtigung des 3D-PFE durch

$$\sigma(F,T) = q\mu_h p(F,T) = q\mu_h \frac{K}{4\pi} \int_0^{\pi} \exp\left(-\frac{E_{A,0} - \Delta E_{A,F}(\theta,F)}{k_B T}\right) 2\pi \sin(\theta) d\theta \qquad 3.10$$

Berechnet werden. Die Gleichung 3.10 enthält insgesamt fünf materialspezifische Parameter: *s*,  $E_{A,0}$ ,  $\mu_h$ , K und  $\epsilon$ . Die Beweglichkeit von Löchern wird dabei als Feldunabhängig angenommen. Der Grund hierfür ist, dass die in den untersuchten Strukturen gemessenen  $\sigma_V$ -*F*-Kennlinien keine erkennbare Sättigung aufweisen (Abbildung 19). Folglich setzt die in Kapitel 3.3 beschriebene und bei hohen elektrischen Feldstärken erwartete Reduktion der Loch-Beweglichkeit entweder bei Feldstärken die außerhalb des Messbereichs liegen ein oder die Reduktion von  $\mu_h$  bei hohen *F* wird durch ein anderes, stärker feldabhängiges Phänomen überdeckt. Unabhängig davon welche von den beiden Theorien die realen Verhältnisse in den Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg:Mg-Schichten widerspiegelt, kann die Reduktion der Loch-Beweglichkeit auch bei hohen elektrischen Feldstärken aufgrund des nicht ersichtlichen Einflusses auf den Verlauf der aufgenommenen  $\sigma_V$ -*F*-Kennlinien vernachlässigt werden. Da sowohl  $\mu_h$  als auch *K* Proportionalitätskonstanten in Gleichung 3.11 sind, wird deren Produkt der Einfachheit halber als ein feldunabhängiger Materialparameter ( $K \times \mu_h$ ) gehandhabt.

Es soll darauf hingewiesen werden, dass der Term  $\beta^2/qs$  in Gleichung 3.7 die den Überlapp der Coulomb-Potenziale der einzelnen Störstellen bedingte Reduktion der Ionisierungsenergie zu berücksichtigen und damit sicherzustellen, dass  $E_{A,0}$  mit experimentellen Werten vergleichbar ist sowie  $\Delta E_{A,F}(\theta, F) = 0$  für F = 0 gilt.



Abbildung 21: Abhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit von der elektrischen Feldstärke unter der Berücksichtigung des 3D-PFE für einen ausgewählten Materialparametersatz. Der nahezu ohmsche Bereich und der Bereich in dem die Leitfähigkeit exponentiell mit der Feldstärke zunimmt sind jeweils mit I und II gekennzeichnet.

Ein typischer Verlauf der elektrischen Leitfähigkeit unter Berücksichtigung des 3D-PFE in Abhängigkeit von der elektrischen Feldstärke ist in Abbildung 21 dargestellt. Dabei sind zwei Bereiche zu erkennen: ein nahezu feldunabhängiger beziehungsweise ohmsche Bereich für niedrige elektrische Feldstärken (für den ausgewählten Parametersatz für  $F \lesssim 80 \text{ kV cm}^{-1}$ ) und ein zweiter Bereich, wo die Leitfähigkeit exponentiell mit der elektrischen Feldstärke zunimmt. Der ohmsche Bereich bei niedrigen elektrischen Feldstärken ist dabei ein direktes Resultat der 3D-Betrachtung des Poole-Frenkel-Effekts. Denn im Gegensatz zu der eindimensionalen Betrachtung des Poole-Frenkel-Effekts, wird beim 3D-PFE auch die Emission der Ladungsträger entgegen der Feldrichtung berücksichtigt. Bei niedrigen elektrischen Feldstärken wird das Coulomb-Potenzial aus Gleichung 3.7 nur geringfügig verzerrt, weshalb die zunächst überwiegend thermische Emission der ionisierten Ladungsträger sowohl in die Hemisphäre in Feldrichtung als auch in die Hemisphäre entgegen der Feldrichtung für den Wert von  $\sigma$  relevant ist. So steigt die Ionisierungsenergie für niedrige F-Werte für die Emission der Ladungsträger in die Hemisphäre entgegen der Feldrichtung und sinkt für dessen Emission in die Hemisphäre in Feldrichtung, vergleiche Abbildung 20. Beide Effekte gleichen sich aus, sodass in der 3D-Betrachtung des PFE  $\Delta E_{A,F}(\theta, F)$  und deshalb auch  $\sigma(F)$  für niedrige *F*-Werte nahezu konstant bleiben.

Erst ab einer Feldstärke bei der die Emission der Ladungsträger entgegen der Feldrichtung vernachlässigbar klein wird, sinkt  $\Delta E_{A,F}(\theta, F)$  zunehmend und die Leitfähigkeit steigt

exponentiell mit der elektrischen Feldstärke an. Der soeben beschriebene nahezu ohmsche Bereich bei niedrigen Feldstärken ist bei der gemessenen vertikalen Leitfähigkeit der Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht nicht eindeutig erkennbar (Abbildung 19). Dies muss aber nicht zwangsläufig die Abwesenheit des 3D-PFE in den untersuchten Strukturen bedeuten. Denn die Unterschiede in den Betriebsspannungen der Bauelemente mit variierter Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schichtdicke sind für niedrige Stromdichten äußerst gering und können nur schwer aufgelöst werden, Abbildung 17. Zusätzliche Fehlerquellen, die vor allem bei niedrigen Stromdichten beziehungsweise Feldstärken eine Rolle spielen, sind prozessund wachstumsbedingte Schwankungen in der Dotierung, Legierungszusammensetzung und Kontaktierung der einzelnen Proben. Somit kann der von 3D-PFE vorausgesagte nahezu ohmsche Bereich auch bei der  $\sigma_V$ -*F*-Kennlinie der Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schichten existieren, aber mit Hilfe der benutzten Messapparatur sowie der benutzten Messmethode nicht aufgelöst werden. Dagegen passt der von 3D-PFE vorausgesagte exponentielle Anstieg der Leitfähigkeit mit der elektrischen Feldstärke qualitativ sehr gut zu der gemessenen vertikalen Leitfähigkeit der Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht, vergleiche hierzu Abbildung 19 und Abbildung 21.

Im nächsten Schritt soll der gemessene  $\sigma_V$ -*F*-Verlauf der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht bei T = 25°C unter Berücksichtigung des 3D-PFE auch quantitativ durch die Variation der materialspezifischen Parameter in der Gleichung 3.10 angepasst werden. So wird beispielsweise durch die Änderung des  $K \times \mu_h$ -Produktes der absolute Wert der elektrischen Leitfähigkeit beeinflusst. Die Größe des  $K \times \mu_h$ -Produktes in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht kann anhand von Literaturangaben abgeschätzt werden. Dabei ist *K* beim Bandtransport der Löcher proportional zu der effektiven Zustandsdichte im Valenzband [115].  $N_v$  hängt lediglich von einem materialspezifischen Parameter ( $m_h^*$ ) ab und soll als Richtwert für *K* dienen:

$$K \propto N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_e m_h^* k_B T}{h^2}\right)^{3/2} \tag{3.11}$$

Die mögliche Wertespanne der effektiven Zustandsdichte in der Nähe des Valenzbandmaximums beziehungsweise der ersten Näherung von *K*, kann somit für die Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht anhand der Interpolation zwischen den in der Literatur berichteten Werten für die effektiven Massen der Löcher im GaN:Mg ( $m_h^*$  zwischen 0,5 [116] und 1,2 [117]) und im AlN:Mg ( $m_h^*$  zwischen 0,8 [118] und 2,7 [97]) auf (5±3)×10<sup>19</sup> cm<sup>-3</sup> geschätzt werden.

Der Wertebereich für die Loch-Beweglichkeit in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht kann ebenfalls durch die Interpolation zwischen  $\mu_h$  in GaN:Mg und  $\mu_h$  in AlN:Mg bestimmt werden. Allerdings hängt die Beweglichkeit von Löchern auch mit der Materialqualität sowie der Dotierkonzentration zusammen und kann deshalb für die gleiche AlGaN:Mg-Zusammensetzung stark variieren. Vor allem für  $\mu_h$  im AlN:Mg streuen die Literaturwerte deshalb stark und liegen zwischen 2 cm<sup>2</sup>/Vs [11] und 10 cm<sup>2</sup>/Vs [97], wogegen  $\mu_h$  für übliche Dotierkonzentrationen in GaN:Mg einen vergleichsweise stabilen Wert von etwa 10 cm<sup>2</sup>/Vs aufweist [87, 119]. Aus diesen Überlegungen folgt, dass die Beweglichkeit der Löcher in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht bei (7,5±2,5) cm<sup>2</sup>/Vs liegen müsste.



Abbildung 22: Anhand der Gleichung 3.10 und des 3D-PFE-Modells demonstrierte Änderung des  $\sigma_V$ -F-Verlaufs in Abhängigkeit von der Größe von materialspezifischen Parametern: a)  $K \times \mu_h$ , b)  $E_{A,0}$ , c) s und d)  $\epsilon$  innerhalb der jeweiligen erwarteten Wertebereiche. Die gemessene Leitfähigkeit der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht ist als Funktion der elektrischen Feldstärke mit blau-weißen Kreissymbolen dargestellt.

Aus den Unsicherheiten der beiden Parameter ergibt sich schließlich für das Produkt  $K \times \mu_h$ in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht ein Wert von  $(4,5\pm4)\times10^{22}$  (mVs)<sup>-1</sup>. Wie aus der Abbildung 22 (a) und der Gleichung 3.10 zu sehen ist, steigt die Leitfähigkeit direktproportional zu dem  $K \times \mu_h$ -Produkt, die Feldabhängigkeit von  $\sigma$  ändert sich dabei nicht. Als nächstes kann der Rahmen für die Werte der Nullfeld-Ionisierungsenergie in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht, anhand der in der Abbildung 13 zusammengetragen Literaturangaben, gefasst werden. Danach sollte  $E_{A,0}$  im Bereich von (500±110) meV liegen. Es soll darauf hingewiesen werden, dass durch den Überlapp der Coulomb-Potenziale der einzelnen Störstellen hervorgerufene Reduktion der Ionisierungsenergie in der Gleichung 3.7 bereits durch den  $\beta^2/qs$ -Term berücksichtigt wird. Dieser Term stellt weiterhin sicher, dass  $E_{A,0}$  mit experimentell ermittelten Werten vergleichbar ist sowie  $\Delta E_{A,F}(\theta, F) = 0$  für F = 0 gilt. Die relative  $\sigma$ -F-Abhängigkeit bleibt bei einer Änderung von  $E_{A,0}$  (für T = konstant) gleich, Abbildung 22 (b). Dagegen führt eine lineare Änderung der Nullfeld-Ionisierungsenergie zu einem exponentiellen Anstieg der elektrischen Leitfähigkeit.

Der vierte Parameter in der Gleichung 3.10, der durchschnittliche Abstand der Akzeptoren, hängt in AlGaN:Mg in erster Linie von der Mg-Dotierkonzentration ( $N_{Mg}$ ) und der Dichte des Akzeptor-passivierenden Wasserstoffs ( $N_H$ ) ab. Beide Werte können nicht direkt aus den eingestellten Cp<sub>2</sub>Mg/III-Fluss (1,5%) während des Wachstums der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schichten von bestimmt werden. Allerdings kann die Differenz zwischen  $N_{Mg}$  und  $N_H$ anhand von den intern gewachsenen Kalibrierschichten, die bereits mit Hilfe von Sekundärionen-Massenspektrometrie (engl. *secondary-ion mass spectrometry*, SIMS) untersucht wurden, auf 1×10<sup>19</sup> cm<sup>-3</sup> bis 6×10<sup>19</sup> cm<sup>-3</sup> geschätzt werden [120]. Mit diesen Werten kann der erwartete mittlere Abstand zwischen Mg-Akzeptoren in den Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schichten nach [121] berechnet werden

$$s = \frac{4}{\Gamma(2/3)} \left(\frac{4\pi (N_{Mg} - N_H)}{3}\right)^{-1/3}$$
 3.12

und beträgt (6,5±2) nm. Da  $E_{A,0}$  in dem hier verwendeten 3D-PFE-Modell die Absenkung der Ionisierungsenergie durch den Überlapp der Coulomb-Potenziale der einzelnen Störstellen bereits beinhaltet (siehe Gleichung 3.7), ist der Wert der elektrischen Leitfähigkeit für F = 0 und ein konstantes  $E_{A,0}$  unabhängig von s, Abbildung 22 (c). Allerdings beeinflusst s die Änderung der elektrischen Leitfähigkeit in Abhängigkeit von der elektrischen Feldstärke. Dabei gilt – je größer s, desto stärker steigt  $\sigma$  mit F. Das spiegelt sich auch bei der Ausdehnung des ohmschen Bereichs wider, dieser wird umso breiter je niedriger s ist. Für den ausgewählten Materialparametersatz reicht der ohmschen Bereich aus der Abbildung 22 (c) bis etwa F = 50 kVcm<sup>-1</sup> für s = 8,5 nm ( $N_A = 1 \times 10^{19}$  cm<sup>-3</sup>) und bis etwa F = 100 kVcm<sup>-1</sup> für s = 4,5 nm ( $N_A = 6 \times 10^{19}$  cm<sup>-3</sup>).

Der Wert des letzten Parameters im verwendeten 3D-PFE-Modell, die Dielektrizitätskonstante, hat einen vergleichbaren Einfluss auf den  $\sigma$ -*F*-Verlauf wie *s*. Dabei wird der Anstieg der Leitfähigkeit mit der Feldstärke umso weniger ausgeprägt, je höher  $\epsilon$  ist. Die Leitfähigkeit für *F* = 0, sowie die Ausdehnung des ohmschen Bereiches sind dagegen unabhängig von  $\epsilon$ , Abbildung 22 (d). Es soll bemerkt werden, dass die Frage ob die relative ( $\epsilon_r$ ) oder die hochfrequente, optische Dielektrizitätskonstante ( $\epsilon_{opt}$ ) bei der Beschreibung des PFE verwendet werden soll, in der Literatur umstritten ist [110, 115, 122]. Der Grund für die Verwendung von  $\epsilon_{opt}$  statt  $\epsilon_r$  ist die Annahme, dass die Zeit innerhalb der die Ionisation der Ladungsträger aus den gebundenen Zuständen der Akzeptoren ins Valenzband erfolgt, kürzer ist, als die dielektrische Relaxationszeit [112]. Da die Ionisationszeit für AlGaN:Mg-Schichten nicht bekannt ist, bleibt auch die Frage offen ob  $\epsilon_{opt}$  oder  $\epsilon_r$  für die Beschreibung des 3D-PFE verwendet werden soll. Folglich kann  $\epsilon$  in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht den Wert von  $\epsilon_{opt}$  = 4,65 [123, 124] oder von  $\epsilon_r$  = 9,5 [123, 124] annehmen<sup>1</sup>.

Somit kann festgehalten werden, dass die gemessene vertikale Leitfähigkeit der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht in Abhängigkeit von der elektrischen Feldstärke durch die Anpassung der materialspezifischer Parameter innerhalb des erwarteten Wertebereichs mit Hilfe des 3D-PFE auch quantitativ gut gefittet werden kann, Abbildung 22. Da allerdings mehrere Parameter einen ähnlichen Einfluss auf den  $\sigma$ -*F*-Verlauf haben, existieren mehrere Materialparametersätze, welche dieselbe Abhängigkeit der Leitfähigkeit von der elektrischen Feldstärke voraussagen. Um die Anzahl der infrage kommenden Kombinationen für die fünf materialspezifische Parameter (s,  $E_{A,0}$ ,  $\mu_h$ , K und  $\epsilon$ ) in Gleichung 3.10 einzuschränken, werden in Kapitel 3.4 temperaturabhängige Messungen der vertikalen Leitfähigkeit der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht durchgeführt und die so erhaltenen  $\sigma(T)$ -*F*-Kennlinien anschließend mit den 3D-PFE-Modell angepasst.

### 3.3.2 Hopping-Leitung

Bei dem klassischen Bandtransport in p-dotierten Halbleitern werden die Löcher thermisch aus den Potenzialen der Mg-Akzeptoren ionisiert und können im Valenzband mit der zugehörigen Beweglichkeit transportiert werden. Daneben kann mit steigender elektrischer Feldstärke die in Kapitel 3.3.1 beschriebene Feld-unterstützte thermische Ionisation der Ladungsträger durch den Poole-Frenkel-Effekt eine zunehmend große Rolle spielen. Allerdings nimmt mit abnehmender Temperatur die für die Ionisation der Ladungsträger zur Verfügung stehende thermische Energie ab, weshalb sowohl die rein thermische als auch die feld-unterstütze thermische Ionisation der Ladungsträger zunehmend unwahrscheinlicher wird. Bei niedrigen Temperaturen kann deshalb die sogenannte Hopping-Leitung zu einem immer mehr ausgeprägten und schließlich dominanten Leitungsmechanismus in Halbleiterschichten werden. So wurde bei Temperaturen weit unterhalb der Raumtemperatur (*T* < 170K) die Dominanz der Hopping-Leitung beim Stromtransport im undotierten [125], Si-dotierten [126] und Mg-dotierten GaN-Schichten [127] bereits nachgewiesen. Im vorliegenden Fall wurde die elektrische Leitfähigkeit der einzelnen Strukturen dagegen bei vergleichsweise hohen Temperaturen, nahe der Raumtemperatur, bestimmt. Da allerdings die Ionisierungsenergie in GaN:Mg-Schichten viel niedriger ausfallen dürfte als in der untersuchten Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht (Abbildung 13), so konnte auch die Dominanz der Hopping-Leitung, im Falle der letzteren, bereits bei Raumtemperatur einsetzen. Aus diesem Grund soll auch die Hopping-Leitung als mögliche Erklärung für die gemessene Feldstärke-Abhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht adressiert werden.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Die genauen Werte von  $\epsilon_{opt}$  und  $\epsilon_r$  für GaN und AlN sind in der Literatur gut bekannt und haben im Vergleich zu den anderen vier Parameter des 3D-PFE-Fits einen vernachlässigbar kleinen Fehler. Die angegebenen Werte wurden anhand der Interpolation der einzelnen Dielektrizitätskonstanten von GaN und AlN berechnet.



Abbildung 23: (a) Schematische Darstellung der Hopping-Leitung durch Zustände im Mg-Defektband. Die blauen Pfeile zeigen einen möglichen Perkolationspfad für den Transport der Löcher. (b) Schematische Darstellung des Hopping-Transports von einem besetzten Zustand i mit der Energie  $E_i$  in einen unbesetzten Zustand v mit der Energie  $E_v(< E_i)$ , mit einem räumlichen Abstand zwischen den beiden Zuständen  $R_{iv}$ . Beide Abbildungen sind für den Fall vernachlässigbar kleiner elektrischer Feldstärke dargestellt.

Ähnlich wie beim PFE wird bei der Hopping-Leitung zunächst von Dotieratomen, Verunreinigungen, Störstellen oder Vakanzen ausgegangen, welche Coulomb-artige Störstellen für die zu ionisierenden Ladungsträger darstellen. Im Gegensatz zum PFE werden die Ladungsträger dabei nicht Feld-unterstützt thermisch ionisiert und im Valenzband transportiert, sondern tunneln quantenmechanisch über Perkolationspfade von einer Störstelle zur anderen.

Die nun folgende Betrachtung der Hopping-Leitung richtet sich nach [155-158], wobei der Fokus auf einen *p*-Halbleiter liegt, wo die Mg-Akzeptoren als Störstellen dienen und die zu ionisierenden Löcher in Coulomb-Potenzialen beherbergen. Die einzelnen Akzeptoren sind dabei zufällig mit der Konzentration  $N_A$  in der Bandlücke des Halbleiters in ausreichender Menge verteilt, um ein Defektband zu formen. Dabei befindet sich die Fermi-Energie innerhalb des Defektbandes (Abbildung 23 (a)). Jede einzelne Störstelle ist entweder durch ein Loch besetzt (Zustand i) oder im Falle eines bereits ionisierten Akzeptors unbesetzt sein (Zustand v). Damit ein Ladungsträger die Potenzialbarriere zwischen dem Zustand i mit der Energie des stationären Zustandes  $E_i$  in den Zustand v mit der Energie  $E_v$  durch den quantenmechanischen Tunnelprozess überwinden kann, müssen i und v vergleichsweise nah beieinander sein, sodass ein endlicher Überlapp zwischen den einzelnen Wellenfunktionen ( $\psi$ ) der stationären Zuständen vorliegt. Die Wellenfunktion innerhalb einer Potenzialbarriere zwischen den Störstelle klingt exponentiell ab  $\psi \propto exp(-\alpha r)$ , wobei für den Fall einer eindimensionalen Betrachtung und eines rechteckigen Potenzials für den sogenannten Lokalisationsparameter  $\alpha = \sqrt{2m_h^*(E_i - E_v)/\hbar}$  gilt. Dabei ist  $\hbar$  die reduzierte Planck-Konstante. Die Wahrscheinlichkeit eines erfolgreichen Übergangs beziehungsweise Hüpfens vom Zustand i in den Zustand v im dreidimensionalen Ortsraum ist folglich durch  $|\langle \psi_i | \psi_v \rangle|^2 \approx exp(-2\alpha R_{iv})$  mit  $R_{iv}$  als Abstand zwischen den beiden Störstellen gegeben. Zusätzlich muss noch neben den drei Raumdimensionen, eine vierte, die Energiedimension beachtet werden. Der Erfolg des Hüpfens im Energieraum ist exponentiell von der Energiedifferenz zwischen den beiden Zuständen abhängig und ist durch den Ausdruck  $exp[-(E_v - E_i)/k_BT]$  für  $E_v < E_i$  gegeben, Abbildung 23 (b). Es benötigt folglich die Absorption eines oder mehrerer im Kristall bereits vorhanden Phononen mit der passenden Energie um den Übergang zwischen den beiden Zuständen zu ermöglichen. Für den entgegengesetzten Fall  $(E_v > E_i)$  wird ein Phonon emittiert, weshalb das *Hüpfen* nicht an die Energie, sondern lediglich den Abstand geknüpft ist. Schließlich muss noch die Komponente des elektrischen Feldes betrachtet werden, dieses Verändert die Energiedifferenz zwischen den beiden Zuständen um den Betrag  $qFR_{iv}$ .

Folglich gilt für die Übergangswahrscheinlichkeit  $P_{iv}$  um von einem besetzten Zustand *i* mit der Energie  $E_i$  in einen unbesetzten Zustand *j* mit der Energie  $E_v$  erfolgreich zu hüpfen

$$P_{ij} \approx \begin{cases} exp\left[-2\alpha R_{iv} - \frac{(E_v - E_i - qFR_{iv})}{k_BT}\right] & \text{für } E_v > E_i, |E_v - E_i| \le qFR_{iv} \\ exp[-2\alpha R_{iv}] & \text{für } E_v < E_i \text{und } |E_v - E_i| \ge qFR_{iv} \end{cases}$$

$$3.13$$

Somit hängt das *Hüpfen* der Ladungsträger in einem Halbleiter sowohl von den internen, materialspezifischen Gegebenheiten ab: die Form der Potenzialbarriere  $\alpha$ , den in Abwesenheit eines elektrischen Feldes durchschnittlichen räumlichen *Hüpfabstand* zwischen den Zuständen  $\emptyset R_{iv} \triangleq l$  sowie den durchschnittlichen energetischen Abstand der Zustände ( $\emptyset | E_v - E_i | \triangleq W$ ), als auch von externen Gegebenheiten: nämlich der Temperatur und der elektrischen Feldstärke.

Nun kann bei einer Betrachtung des Hüpfens im vierdimensionalen Raum und bei Berücksichtigung der Fermi-Dirac-Verteilung sowie der charakteristischen Frequenz  $\vartheta$ (Anzahl der *Versuche* pro Zeiteinheit von einen in den anderen Zustand überzugehen) mit Hilfe der Formel 3.13 auch die Leitfähigkeit des Hopping-Prozesses durch Perkolationspfade abgeleitet werden<sup>1</sup>. Da das elektrische Feld sowohl die *Form* der zu überwindende Tunnelbarriere modifizieren kann, als auch die für das erfolgreiche *Hüpfen* notwendige Energiedifferenz zwischen den Zuständen kompensieren kann, hat dieses einen maßgeblichen Einfluss auf die Hopping-Leitung. In Abhängigkeit von der Höhe der elektrischen Feldstärke wird deshalb zwischen der Hopping-Leitung bei niedrigen, moderaten und hohen elektrischen Feldern unterschieden.

Für den Fall niedriger elektrischer Felder ( $qFl \ll k_BT$  und  $\ll W$ ), welches als Hüpfen mit variabler Länge oder auch als der Mott-Bereich bekannt ist, gilt der Zusammenhang [128]:

$$\sigma_{hopping}^{Mott}(T) = \sigma_0 \exp(-T_0/T)^{1/4}$$
3.14

mit  $T_0 = \frac{24\alpha^3}{\pi k_B N_{\mu}}$ , wobei  $N_{\mu}$  die Dichte der Störstellen in der Nähe der Fermi-Energie angibt. Bei  $\sigma_0$  handelt es sich um eine Proportionalitätskonstante die vor allem durch  $\vartheta$  und  $N_{\mu}$  bestimmt wird. In diesem Regime hat F aufgrund der niedrigen Feldstärke keinen

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Aus Platzgründen wird an dieser Stelle auf eine ausführliche Herleitung verzichtet.

relevanten Einfluss auf  $\sigma_{hopping}^{Mott}$ , welches in diesem Feldstärkebereich durch die materialspezifischen Parameter und vor allem die Temperatur beeinflusst wird. Wie beim 3D-PFE gilt auch hier ein zunächst ohmschen beziehungsweise ein nahezu *F*-unabhängiger Zusammenhang zwischen der elektrischen Feldstärke und der Leitfähigkeit vor.

Steigt die elektrische Feldstärke im System an und stellt den Ladungsträgern mehr Energie für den Übergang als die thermische Energie zur Verfügung, so hat dies nicht nur einen zu berücksichtigenden Einfluss auf  $\alpha$ , sondern auch auf die bevorzugte Hopping-Richtung. Für diesen Bereich der moderaten Feldstärken ( $W \ge qFl \ge k_BT$ ) beziehungsweise für den sogenannten Pollak-Riess-Bereich [129, 130, 131] gilt:

$$\sigma_{hopping}^{PR}(F,T) = \sigma_1(T) \exp\left(\frac{0.17qFl(T)}{k_BT}\right)$$
 3.15

mit  $\sigma_1$ als eine Proportionalitätskonstante, welche im Kapitelverlauf noch näher betrachtet wird.

Für hohe elektrische Feldstärken ( $qFl \ge W \gg k_BT$ ) ist die durchschnittliche Energiedifferenz zwischen zwei Zuständen durch das elektrische Feld vollständig kompensiert. Eine Erhöhung oder Absenkung der Temperatur hat folglich in den sogenannten Shklovskii-Bereich keinen Einfluss auf die Hopping-Wahrscheinlichkeit, die Leitfähigkeit wird temperaturunabhängig [132]:

$$\sigma_{hopping}^{Shkl}(F) = \sigma_2 \exp(-F_0/F)^{1/4}$$
 3.16

Dabei gilt  $F_0 = \frac{81\alpha^4}{16\pi q N_{\mu}}$ , wobei  $\sigma_2$  eine Proportionalitätskonstante darstellt. In der Abbildung 24 sind die unterschiedlichen Hopping-Bereiche mit der gemessenen elektrischen Leitfähigkeit der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht in Abhängigkeit von der elektrischen Feldstärke gegenübergestellt. Wie bereits in Kapitel 3.3.1 diskutiert wurde, kann durch die verwendete Messmethode die Leitfähigkeit bei niedrigen Feldstärken nicht aufgelöst werden, was allerdings die Existenz eines Feld-unabhängigen, ohmschen Bereichs nicht ausschließt. Unter der Annahme, dass die Werte für die Leitfähigkeit der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht unterhalb der Auflösungsgrenze von 50 kVcm<sup>-1</sup> sich nicht ändern, gilt im Falle der Hopping-Leitung in den untersuchten Schichten  $\sigma_{hopping}^{Mott} = (7\pm3) \times 10^{-7} (\Omega \text{cm})^{-1}$ , Abbildung 24 (a). Mit steigenden *F*-Werten geht der Mott-Bereich der niedrigen Feldstärken in den Pollak-Riess-Bereich der moderaten Feldstärken über. In den  $log(\sigma)$ -F-Darstellungen steigt die Hopping-Leitfähigkeit im Pollak-Riess-Bereich linear mit der elektrischen Feldstärke an. Dabei dominiert  $\sigma_1$  den Wert von  $\sigma_{hopping}^{PR}$ für niedrige F, während der Anstieg der Leitfähigkeit für höhere elektrische Feldstärken durch *l* bestimmt ist. Der experimentell bestimmte  $\sigma(F)$ -Verlauf der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht lässt sich anhand der Formel 3.15 fast über den ganzen Messbereich von etwa 50 kVcm<sup>-1</sup> bis über 800 kVcm<sup>-1</sup> mit hohe Güte anpassen, Abbildung 24 (b). Da allerdings weder  $\sigma_1$ , noch *l* genau bekannt sind, ist diese Anpassung durch unendlich viele Kombinationen der  $\sigma_1$ -*l*-Wertepaare möglich. Nichtsdestotrotz kann unter der Annahme,



Abbildung 24: Die Anpassung der experimentell ermittelten  $\sigma_V$ -F-Abhängigkeit der  $Al_{0,68}Ga_{0,32}N:Mg$ -Bulk-Schicht (dunkel-/hellblaue Kreissymbole) durch die Hopping-Leitung im a) Mott-Bereich der vernachlässigbar kleinen elektrischen Feldstärken, b) Pollak-Riess-Bereich der moderaten Feldstärken und c) Shklovskii-Bereich der hohen elektrischen Feldstärken. In d) ist der beste Fit der experimentellen Daten durch eine Kombination der Hopping-Leitung im Mott- und Pollak-Riess-Bereich dargestellt.

Bis zu welcher Feldstärke die Gleichung 3.15 gültig bleibt, kann anhand des Übergangs des Pollak-Riess-Bereichs in den Temperatur-unabhängigen Shklovskii-Bereich der hohen elektrischen Feldstärken abgeschätzt werden. Der Pollak-Riess-Bereich dehnt sich aus bis der Ausdruck  $\frac{qFa_{Bohr}}{2k_BT} < 1$  seine Gültigkeit behält [129], wobei  $a_{Bohr} = \frac{4\pi\epsilon_0\epsilon_r\hbar^2}{m_em_h^*q^2}$  den Bohrschen-Radius darstellt. Demnach sollte im Falle der Hopping-Leitung in der untersuchten Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht erst ab einer Feldstärke von etwa 1,7 MVcm<sup>-1</sup> in



Abbildung 25: Die experimentell bestimmte Änderung der Leitfähigkeit in der  $Al_{0,68}Ga_{0,32}N$ :Mg-Bulk-Schicht in Abhängigkeit von der elektrischen Feldstärke und der Temperatur.

den Shklovskii-Bereich übergehen<sup>1</sup>, was deutlich außerhalb des Messbereichs liegt. Dies deckt sich auch durch den Vergleich zwischen dem theoretisch vorausgesagten  $\sigma(F)$ -Verlauf im Hoch-Feld-Bereich der Hopping-Leitung (Gleichung 3.16) und dem experimentell bestimmten  $\sigma(F)$ -Verlauf in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht, Abbildung 24 (c). Denn die Leitfähigkeit im Shklovskii-Bereich sättigt mit steigender elektrischer Feldstärke, dies wurde bei der gemessenen  $\sigma(F)$ -Kennlinie der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht nicht beobachtet.

Zusammengefasst lässt sich sagen, dass neben der 3D-PFE-Leitung auch die Hopping-Leitung den gemessenen Verlauf der elektrischen Leitfähigkeit der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht mit der elektrischen Feldstärke über den gesamten Messbereich erklären kann. Dabei kann von der Hopping-Leitung bei niedrigen Feldstärken im Mott-Bereich und bei moderaten Feldstärken im Pollak-Riess-Bereich ausgegangen werden. Der beste Fit des experimentell ermittelten  $\sigma(F)$ -Verlaufs der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht bei  $T = 25^{\circ}$ C, kann anhand von folgenden Parametern erzielt werden:  $\sigma_{hopping}^{Mott} = 8 \times 10^{-7} (\Omega \text{ cm})^{-1}$  im Mott-Bereich, bis zu einer Feldstärke von etwa 70 kVcm<sup>-1</sup> und  $\sigma_1 = 5,5 \times 10^{-7} (\Omega \text{ cm})^{-1}$  sowie l = 9 nm im Pollak-Riess-Regime für  $F \ge 70$  kVcm<sup>-1</sup>, Abbildung 24 (d).

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Für die Berechnung des Bohrschen-Radius wurde  $m_h^* = 0,8$  und  $\epsilon_r = 8,9$  für GaN:Mg sowie  $m_h^* = 2$  und  $\epsilon_r = 9,1$  für AlN:Mg angenommen. Die Werte für die Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht wurden entsprechend linear interpoliert.



Abbildung 26: Anhand der Abbildung 25 ermittelten Werte für die Temperaturabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit der  $Al_{0,68}Ga_{0,32}N$ :Mg-Bulk-Schicht bei  $F \approx 25$  kVcm<sup>-1</sup>, in einer  $ln(\sigma)$ -T<sup>-1/4</sup>-Darstellung.

### 3.4 Fit des $\sigma_V(F, T)$ -Verlaufs der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht

Wie in den Abschnitten 3.3.1 und 3.3.2 gezeigt wurde, kann der gemessene  $\sigma(F)$ -Verlauf in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht bei einer konstanten Temperatur von 25°C sowohl mit Hilfe des 3D-PFE als auch mit Hilfe der Hopping-Leitung über den gesamten Messbereich angepasst werden. Da allerdings bei beiden Mechanismen die Ionisierung und der Transport von Löchern prinzipiell unterschiedlich erfolgt, sagen beide auch eine unterschiedliche Temperaturabhängigkeit von  $\sigma(F)$  voraus. Um herauszufinden, ob 3D-PFE oder die Hopping-Leitung die elektrische Leitfähigkeit in den untersuchten Schichten dominiert, wurden die DUV-LEDs mit variierter Dicke der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht deshalb temperaturabhängig charakterisiert, wobei die Probentemperatur auf 25°C, 40°C, 60°C, 80°C und 100°C aktiv mit Hilfe einer Heizplatte eingestellt wurde. Durch die in Kapitel 3.2 beschriebene Vorgehensweise wurde so die elektrische Leitfähigkeit der Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht in Abhängigkeit von der elektrischen Feldstärke und der Temperatur bestimmt. Die Ergebnisse sind in der Abbildung 25 dargestellt. Die Leitfähigkeit der Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht steigt dabei für niedrige Feldstärken ( $F \approx 25 \text{ kV cm}^{-1}$ ) stetig um etwa Faktor drei je 20 K an und erreicht bei  $T = 100^{\circ}$ C einen Wert von  $(5\pm 2)\times 10^{-5}$  ( $\Omega$ cm)<sup>-1</sup>. Für höhere elektrische Feldstärken steigt die Leitfähigkeit weiter exponentiell an und scheint für alle Temperaturen eine vergleichbare Steigung zu haben, ohne Sättigungsanzeichen. Dieser Anstieg der Leitfähigkeit mit der Temperatur offenbart einen nicht nur Feld-getriebenen, sondern auch einen ausgeprägt thermischen Transportbeziehungsweise Ionisationsprozess der Löcher in den untersuchten Strukturen. Auf den



Abbildung 27: (a) Natürlicher Logarithmus der gemessenen elektrischen Leitfähigkeit der  $Al_{0,68}Ga_{0,32}N:Mg$ -Bulk-Schicht dargestellt über F/T. (b) aus (a) anhand der Schnittpunkte mit der y-Achse bestimmte Werte von  $ln(\sigma_1)$ , dargestellt über  $T^{-1/4}$ . Die in (b) eingebettete Abbildung stellt die durchschnittliche Hopping-Distanz in Abhängigkeit von  $T^{-1/4}$  dar.

ersten Blick spricht diese Beobachtung eher für den 3D-PFE, welcher die Feld-assistierte thermische Ionisation der Ladungsträger beschreibt.

Allerdings ist auch die Hopping-Leitung im Mott-Bereich temperaturabhängig und im Pollak-Riess-Bereich temperatur- und feldstärkeabhängig, vergleiche hierzu Kapitel 3.3.2. Folgt man der Gleichung 3.14, so sollte sich im Falle der Hopping-Leitung bei niedrigen elektrischen Feldstärken im Mott-Bereich ein linearer Zusammenhang<sup>1</sup> zwischen  $\ln(\sigma)$  und  $T^{-1/4}$  ergeben. Für die niedrigsten gemessenen Feldstärken von etwa 25 kVcm<sup>-1</sup> ist die Abhängigkeit des natürlichen Logarithmus der elektrischen Leitfähigkeit der  $Al_{0,68}Ga_{0,32}N:Mg-Bulk-Schicht von T^{-1/4}$  eindeutig nicht linear, Abbildung 26. Da allerdings Mott-Bereich für niedrigere Feldstärken unterhalb der experimentellen der Auflösungsgrenze gelten könnte, kann anhand der fehlenden Korrelation zwischen Theorie und Experiment für *F*~ 25 kVcm<sup>-1</sup> die Hopping-Leitung als dominanter Leitungsmechanismus für Löcher in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht nicht eindeutig ausgeschlossen werden.

Für höhere elektrische Feldstärken geht die Hopping-Leitung in den Pollak-Riess-Bereich über, hier gilt  $\ln(\sigma) \propto F/T$ , Gleichung 3.15. Folglich muss sich im Falle der Hopping-Leitung in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht für moderate Feldstärken ein linearer Zusammenhang der experimentell ermittelten Daten in einer  $\ln(\sigma)$ -F/T-Darstellung ergeben. Solch eine Darstellung befindet sich in Abbildung 27 (a) und zeigt einen annähernd linearen Verlauf für alle Messtemperaturen. Um allerdings eindeutig die Hopping-Leitung in den untersuchten Strukturen zu belegen, muss auch die Temperaturabhängigkeit der beiden feldunabhängigen Parameter in Gleichung 3.15:  $\sigma_1$  und l überprüft werden. So kann  $\sigma_1(T)$ aus den y-Achsen-Schnittpunkten in Abbildung 27 (a) bestimmt werden, während l(T) aus

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Dabei wird von einer vernachlässigbaren  $\sigma_0$ -Abhängigkeit von der Temperatur ausgegangen [67].



Abbildung 28: Die Anpassung der experimentell bestimmten Änderung der elektrischen Leitfähigkeit der  $Al_{0,68}Ga_{0,32}N:Mg$ -Bulk-Schicht in Abhängigkeit von der elektrischen Feldstärke und der Temperatur mittels des 3D-PFE-Modells. Für die Dielektrizitätskonstante wurde dabei in (a)  $\epsilon_{opt}$  (4,65) und in (b)  $\epsilon_r$  (9,5) angenommen. Mit den gestrichelten orangenen Linien ist die Änderung der Ionisierungsenergie bei konstanten Werten für die elektrische Feldstärke gekennzeichnet.

dem Anstieg der Messwerte bei den einzelnen Temperaturen berechnet werden kann. Für  $\sigma_1$  wird dabei eine Temperaturabhängigkeit in Form von  $\sigma_1 = \sigma_0 \exp(-T_0/T)^{1/4}$  erwartet [129, 130, 133]. Folglich muss auch hier ein linearer Zusammenhang zwischen  $\ln(\sigma_1)$  und  $T^{-1/4}$  gelten. Wie anhand der Abbildung 27 (b) erkennbar ist, ist der  $\ln(\sigma_1)$ - $T^{-1/4}$ -Verlauf auch unter Berücksichtigung der Fehlerbalken nicht linear, was folglich gegen die Hopping-Leitung in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht spricht. Die Temperaturabhängigkeit des zweiten feldunabhängigen Parameters, der durchschnittliche Hüpfdistanz, kann dem eingebetteten Bild der Abbildung 27 (b) entnommen werden. Es wird erwartet, dass *l* mit sinkender Temperatur steigt, da in der Nähe von dem Anfangszustand immer weniger andere potenzielle Endzustände mit thermisch überwindbarer Energiedifferenz existieren. Dabei soll auch l(T) einer Temperaturabhängigkeit in Form der Proportionalität zu  $T^{-1/4}$  folgen [134]. Allerdings ist anhand der Werte in Abbildung 27 (b), aufgrund der großen Fehlerbalken, keine eindeutige Aussage über den Verlauf der Temperaturabhängigkeit der durchschnittlichen Hüpfdistanz möglich.

Somit ist die Hopping-Leitung von Löchern in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht als unwahrscheinlich einzustufen, da weder  $\sigma_0$  noch  $\sigma_1$  dem erwarteten Temperaturtrend folgen und der Temperaturverlauf von *l* nicht eindeutig bewertet werden kann. Um die Hopping-Leitung in den untersuchten Schichten allerdings vollständig als Leitungsmechanismus auszuschließen, benötigt es einer Erweiterung des Messbereichs im Hinblick auf die Temperatur sowie eine präzisere Bestimmung der elektrischen Leitfähigkeit und der elektrischen Feldstärke.

Um die Möglichkeit der Feld-unterstützten thermischen Ionisation von Akzeptoren anhand des 3D-PFE zu verifizieren, wird nun die gemessene  $\sigma$ -*F*-*T*-Abhängigkeit der

Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht mit Hilfe der Gleichung 3.10 angepasst. Wie in Kapitel 3.3.1 gezeigt wurde, kann der experimentell bestimmte  $\sigma(F)$ -Verlauf bei einer konstanten Temperatur von 25°C durch die Anpassung von fünf materialspezifischen Parametern (s,  $E_{A,0}$ ,  $\mu_{\rm h}$ , K und  $\epsilon$ ) innerhalb des erwarteten Wertebereichs mit der Gleichung 3.10 und innerhalb des gesamten Messbereichs angenähert werden. Die experimentell bestimmte Temperaturabhängigkeit schränkt den möglichen Fit-Parameterraum weiter ein. Nach 3D-PFe spielen für geringe elektrische Feldstärken nur das  $K \times \mu_h$ -Produkt und  $E_{A,0}$  eine Rolle für die Temperaturabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit (Kapitel 3.3.1). So müssen die Nullfeld-Ionisierungsenergie und das  $K \times \mu_h$ -Produkt jeweils die Werte in Höhe von  $(510\pm20)$  meV und  $(2\pm0,5)\times10^{23}$  (mVs)<sup>-1</sup> annehmen, um dem gemessenen  $\sigma(F,T)$ -Verlauf der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht innerhalb der Fehlerbalken für  $F \approx 0$  zu entsprechen, Abbildung 28. Zusätzlich soll bemerkt werden, dass das  $K \times \mu_h$ -Produkt beim Fit der  $\sigma(0, T)$ -Kennlinien der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht als temperaturunabhängig gehandelt wird, da *K* und  $\mu_{\rm h}$  eine inverse Proportionalität zur Temperatur von jeweils  $T^{3/2}$  (Gleichung 3.11) und  $T^{-3/2}$  [104] aufweisen. Wird die elektrische Feldstärke höher, so werden auch die anderen beiden Materialparamter (s und  $\epsilon$ ) aus Gleichung 3.10 für den  $\sigma(F, T)$ -Verlauf nach 3D-PFE zunehmend relevant. Während der durchschnittliche Abstand der Mg-Akzeptoren in Abhängigkeit von der Dotierkonzentration jeden beliebigen Wert zwischen 4,5 nm und 8,5 nm einnehmen (Kapitel 3.3.1) kann, ist der Wert für  $\epsilon$  für eine vorgegebene Legierungszusammensetzung fest vorgegeben. Allerdings ist die Antwort auf die Frage nach der Benutzung der optischen oder der relativen Dielektrizitätskonstanten für  $\epsilon$  in der Literatur umstritten, vergleiche hierzu Kapitel 3.3.1. Deshalb ist die Anpassung des gemessenen  $\sigma(F,T)$ -Verlaufs in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht für konstante Werte von  $E_{A,0} = 510 \text{ meV} \quad \text{für} \quad F > 0$  $K \times \mu_{\rm h} = 2 \times 10^{23} \, ({\rm mVs})^{-1}$ mit insgesamt zwei und Parameterkombinationen durchgeführt worden. Unter der Annahme  $\epsilon \triangleq \epsilon_{opt} = 4,65$  ergibt sich ein durchschnittlicher Abstand der Mg-Akzeptoren von (5,8±0,4) nm, Abbildung 28 (a). Dagegen führt die Annahme  $\epsilon \triangleq \epsilon_r = 9,5$  zu einem *s* von  $(7,5\pm0,5)$  nm, Abbildung 28 (b). Beide Parametersätze beschreiben die gemessene  $\sigma$ -*F*-*T*-Abhängigkeit der Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht mit einer hohen Güte. Der weniger als zwei Nanometer betragende und deshalb zunächst gering erscheinende Unterscheid in den durchschnittlichen Abständen der Mg-Akzeptoren für die beiden Parametersätze hat einen vergleichsweisen großen Einfluss auf die tatsächliche Akzeptordichte. Folgt man der Gleichung 3.12, so sollte die Akzeptordichte in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht  $(3,2\pm0,6)\times10^{19}$  cm<sup>-3</sup> für den Fall  $s = (5,8\pm0,4)$  nm und  $\epsilon \triangleq \epsilon_{opt}$  betragen, wohingegen  $N_A$ für *s* = (7,5±0,5) nm und  $\epsilon \triangleq \epsilon_r$  mit (1,5±0,3)×10<sup>19</sup> cm<sup>-3</sup> um etwa Faktor zwei geringer ist. Um herauszufinden ob einer dieser Werte der Realität entspricht, wurden SIMS-Messungen an der Probe mit den 138 nm dicken Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schichten durchgeführt. Wie aus der Abbildung 29 erkennbar ist, beträgt die detektierte Mg-Konzentration  $(6\pm0,5)\times10^{19}$  cm<sup>-3</sup>, während sich die Konzentration des passivierenden Wasserstoffs auf  $(1,9\pm0,1)\times10^{19}$  cm<sup>-3</sup> beläuft. Die Differenz  $N_{Mg} - N_H$  von  $(4,1\pm0,6)\times10^{19}$  cm<sup>-3</sup> gibt somit die durch Wasserstoff nicht passivierte Akzeptordichte an. Dieser Wert ist die obere Abschätzung für N<sub>A</sub>, da nicht nur Wasserstoff, sondern auch andere Verunreinigungen und



Abbildung 29: Mittels SIMS bestimmter Al-Anteil (x) sowie die Dichten von Magnesium und Wasserstoff in der Probe mit einer Dicke der  $Al_{0,68}Ga_{0,32}N:Mg$ -Bulk-Schicht von 138 nm. Die Zahlen auf der oberen Abszisse kennzeichnen die einzelnen Bereiche der Heterostruktur: (1) GaN:Mg-Kontaktschicht, (2)  $Al_{0,68}Ga_{0,32}N:Mg$ -Bulk-Schicht, (3) EBL, (4) MQW und (5) n-Seite.

Vakanzen die Mg-Akzeptoren passivieren können (Kapitel 3, Einleitung). Damit ist klar, dass 3D-PFE zwar durch zwei Materialparametersätze die experimentell ermittelte  $\sigma$ -*F*-*T*-Abhängigkeit in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht beschreiben kann, aber nur der Parametersatz, welcher von  $\epsilon \triangleq \epsilon_{opt}$  ausgeht, auch die anhand von SIMS-Messungen ermittelte Akzeptordichte voraussagt. So muss auch die Ionisation von Akzeptoren in den untersuchten Schichten wie in der ursprünglichen Arbeit von Frenkel [112] vorausgesagt auf einer Zeitskala, die kürzer ist als die dielektrische Relaxationszeit ( $\leq$  ps [135]), erfolgen. Mit dem Wissen, welcher der Parametersätze der richtige ist, können auch weitere Eigenschaften der Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht abgeleitet werden, so zum Beispiel die freie Lochdichte oder der Wert von K. Unter der Annahme des bereits diskutierten (Kapitel 3.3.1) Wertes für die Beweglichkeit der Löcher in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht von  $(7,5\pm2,5)$  cm<sup>2</sup>/Vs liegt K für T = 25°C bei  $(2,75\pm0,25) \times 10^{20}$  cm<sup>-3</sup>. Da K somit etwa um einen Faktor fünf größer ist als der theoretische Wert der effektiven Zustandsdichte in der Nähe des Valenzbandmaximums von  $(5\pm3)\times10^{19}$  cm<sup>-3</sup> (Kapitel 3.3.1), kann N<sub>v</sub> als ein Richtwert für die Größe von K bei den zukünftigen 3D-PFE-Anpassungen der experimentellen  $\sigma(F, T)$ -Verläufe in anderen AlGaN:Mg-Schichten dienen. Als nächstes kann die Änderung der freien Lochdichte durch die Absenkung der effektiven Ionisierungsenergie unter Einfluss von elektrischen Feldern abgeleitet werden. Die Abschätzung der Ionisierungsenergie erfolgte dabei durch die Arrhenius-Darstellung der Messdaten ( $ln(\sigma)$ - $T^{-1}$ ) unter Zuhilfenahme von



Abbildung 30: Gemessene elektrische Leitfähigkeit der  $Al_{0,68}Ga_{0,32}N:Mg$ -Bulk-Schicht für unterschiedliche elektrische Feldstärken in der Arrhenius-Darstellung ( $ln(\sigma_V)$ -1/T) mit dem Ziel die Ionisierungsenergie für die einzelnen F-Werte zu extrahieren.

Gleichung 3.2<sup>1</sup>, Abbildung 30. Demnach beträgt  $E_A$  in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht (510±20) meV für  $F \approx 50$  kVcm<sup>-1</sup> und führt über  $\sigma = q\mu_h p$  zu  $p = (6\pm3) \times 10^{11}$  cm<sup>-3</sup> bei  $T = 25^{\circ}$ C. Steigt die elektrische Feldstärke auf  $F \sim 0.5$  MVcm<sup>-1</sup> an, wird  $E_A$  auf (460±30) meV abgesenkt, was bei gleich bleibender Temperatur zu einer Erhöhung der freien Lochdichte um mehr als eine Größenordnung ( $p = (8 \pm 1) \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ) führt. Es soll beachtet werden, dass es sich bei den angegebenen *p*-Werten bereits um die endgültig kompensierten freien Lochdichten handelt, bei denen beispielsweise bereits an donatorartigen Störstellen rekombinierte Löcher berücksichtigt sind. Extrapoliert man die Ergebnisse aus der Abbildung 25, so steigt die freie Lochdichte mit der elektrischen Feldstärke immer schneller an und erreicht bei F = 1 MVcm<sup>-1</sup> eine freie Lochdichte von ~2×10<sup>14</sup> cm<sup>-3</sup> ( $E_A \sim 350$  meV). Wie in Kapitel 4.6 diskutiert wird, werden DUV-LEDs üblicherweise bei etwa  $j \sim 60$  Acm<sup>-2</sup> betrieben. Konsultiert man die Abbildung 17, dann wird klar, dass über der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schichten (unabhängig von der Dicke) eine elektrische Feldstärke von etwa 0,8 MVcm<sup>-1</sup> anliegen muss, um diese Stromdichte in den untersuchten Bauelementen zu erreichen. Diese Betrachtung untermauert die Notwendigkeit der Beachtung des Poole-Frenkel-Effekts für das Verständnis der Funktionsweise von DUV-LEDs aber vor allem für Laserdioden Bauelemente wie Superlumineszenzdioden (SLED) und mit Betriebsstromdichten von einigen tausend Acm<sup>-2</sup> [91, 136]. Die elektrischen Felder über den Mg-dotierten AlGaN-Schichten von SLEDs und LDen werden folglich weitaus höher sein als

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Da die mittels SIMS bestimmte Mg-Dichte in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht mit  $(6\pm0,5)\times10^{19}$  cm<sup>-3</sup> bedeutend größer ist, als die Schwelle zum nicht kompensierten AlGaN:Mg von  $2\times10^{19}$  cm<sup>-3</sup> (Kapitel 3, Einleitung), wurde hierbei von einem (teilweise) kompensierten Halbleiter ausgegangen.
die hier betrachteten  $\leq 1$  MVcm<sup>-1</sup>, weshalb beim Design, der Auswertung und der Simulation dieser Bauelemente, ohne Berücksichtigung des 3D-PFE, eine Fehleinschätzung der freien Lochdichte um mehrere Größenordnungen vorliegen kann.

Insgesamt kann geschlussfolgert werden, dass das hier benutzte 3D-PFE-Modell die Leitfähigkeit der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schichten in Abhängigkeit von der Temperatur und der elektrischen Feldstärke mit einem sinnvollen Materialparametersatz innerhalb des gesamten Messbereichs beschreibt. Dies ist zwar kein eindeutiger Beweis für die Feldunterstützte thermische Ionisation der Mg-Akzeptoren in diesen Schichten, aber zumindest ein geeignetes Modell, um den experimentell ermittelten  $\sigma(F,T)$ -Verlauf in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht zu erklären. Weitere Messungen an Schichten mit anderen Mg-Konzentrationen und Legierungszusammensetzungen sollten zur Untersuchung des 3D-PFE in Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N:Mg durchgeführt werden. Die Erkenntnisse aus diesen Studien können direkt in die Simulationssoftware als Modelle und Eingangsparameter einfließen und so zur Optimierung von optischen Bauelementen auf AlGaN:Mg-Basis sowie einem besseren Verständnis der Ladungsträgerdynamik beitragen.

# 3.5 Vertikale Leitfähigkeit in AlGaN:Mg-Übergittern

Nach dem die gemessene Abhängigkeit der Leitfähigkeit in den Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schichten von der elektrischen Feldstärke und der Temperatur mit Hilfe des 3D-PFE erklärt werden konnte, sollen nun auch die experimentell bestimmten  $\sigma_V$ -*F*-Abhängigkeiten des Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg- sowie des Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitters vom theoretischen Standpunkt aus, relativ zu Bulk-Schichten, untersucht werden. Der Grund für die separate Betrachtung gegenüber Bulk-Schichten liegt in der periodischen Schichtanordnung der SPSLs. Durch den alternierenden Wechsel zwischen Well- Barriere-Schichten in Übergittern sind sowohl die Ionisation von Akzeptoren und damit die freie Lochdichte, als auch der Transport von Ladungsträgern und folglich die Beweglichkeit von Löchern anders als in Bulk-Schichten. Um beide Effekte zu erfassen und deren Einfluss vor allem auf die vertikale Leitfähigkeit in SPSLs zu untersuchen, wird zunächst in Kapitel 3.5.1 die Ionisation von Akzeptoren in SPSLs diskutiert und im Anschluss (Kapitel 3.5.2) der Ladungsträgertransport in Übergittern betrachtet.

#### 3.5.1 Ionisation von Akzeptoren in Übergittern

Das Konzept der im Vergleich zu Bulk-Schichten erleichterten Mg-Ionisation in Übergittern kann am besten anhand der Bandprofile beider Strukturen veranschaulicht werden. Zu diesem Zweck wurden Drift-Diffusions-Simulationen der LED-Heterostruktur (Abschnitt 3.1) mit Hilfe von SiLENSe durchgeführt. Für die exemplarische Betrachtung wurde die bereits charakterisierte Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht mit dem ebenfalls bereits experimentell untersuchten Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL und einem fiktiven



Abbildung 31: (a) Energiebänder und (b) die zugehörigen freien Lochdichten in Bulk-Schichten und in Übergittern mit unterschiedlichen Legierungszusammensetzungen, Periodenlängen und internen Polarisationsfeldstärken.

 $Al_{0,78}Ga_{0,22}N:Mg/Al_{0,58}Ga_{0,42}N:Mg$  verglichen. Das fiktive Übergitter hat wie das  $Al_{0,71}Ga_{0,29}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg$ -SPSL einen durchschnittlichen Al-Anteil von 68%, aber einen größeren Unterschied in der Legierungszusammensetzung zwischen Wells und Barrieren, dem sogenannten Hub ( $\Delta Al$ ).

In der Abbildung 31 (a) ist der Verlauf des Valenzbandes, der Fermi-Energie sowie der Ionisierungsenergie der Magnesiumakzeptoren für eine Dotierkonzentration von 5×10<sup>19</sup> cm<sup>-3</sup> in den jeweiligen Strukturen dargestellt. Für die Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht wurde die Mg-Ionisierungsenergie anhand der Erkenntnisse aus Kapitel 3.4 von 510 meV ausgewählt und führt zu einer freien Lochkonzentration von  $6 \times 10^{11}$  cm<sup>-3</sup>, Abbildung 31 (b). Die freie Lochkonzentration in Übergittern ist dagegen nicht konstant. So variiert p in dem Al<sub>0.78</sub>Ga<sub>0.22</sub>N:Mg/Al<sub>0.58</sub>Ga<sub>0.42</sub>N:Mg-SPSL<sup>1</sup> mit 5 nm dicken Wells und Barrieren zwischen den  $(p = 4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3})$  und Barriere-Regionen  $(p = 5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3})$  um etwa drei Well-Größenordnungen, Abbildung 31 (b). Der Grund für solch ausgeprägte Unterscheide in p ist Akzeptor-Energieniveau, welches im Abstand  $E_A$ der ieweiligen das Legierungszusammensetzung dem Valenzbandverlauf des SPSLs folgt und ebenfalls ein Stufenpotenzial bildet. Da das Fermi-Niveau in der gesamten Struktur im

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Als Eingangsparameter für die Werte der Ionisierungsenergien von AlGaN:Mg-Schichten in SiLENSe wurde zwischen 170 meV für GaN:Mg (Einleitung von Kapitel 3) und 510 meV für Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg (Kapitel 3.4) linear inter- und extrapoliert.



Abbildung 32: Mit Hilfe von SiLENSe simulierte mittlere freie Lochdichte in Mg-dotierten Übergittern in Abhängigkeit von (a) der Periodenlänge (Übergitter mit gleich dicken Wellund Barriere-Schichten) und (b) von dem Übergitter-Hub bei einem durchschnittlichen Al-Anteil von 68%.

thermodynamischen Gleichgewicht konstant sein muss, befindet sich das Valenzband in den Barriere-Regionen des Übergitters weiter weg von  $E_F$  als es in den Wells der Fall ist,

Abbildung 31 (a). Folglich werden die Akzeptoren in den Barrieren vermehrt ionisiert und relaxieren in die energetisch niedriger gelegenen Well-Regionen. Dabei ist die durchschnittliche Dichte der freien Löcher ( $p_{\phi}$ ) in einem Übergitter immer höher ist als im Bulk-Material mit vergleichbarer Legierungszusammensetzung. So liegt  $p_{\phi}$  für das Al<sub>0.78</sub>Ga<sub>0.22</sub>N:Mg/Al<sub>0.58</sub>Ga<sub>0.42</sub>N:Mg-SPSL mit 5 nm dicken Wells und Barrieren bei 2×10<sup>13</sup> cm<sup>-3</sup> und ist damit mehr als eine Größenordnung höher als in einer Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht, Abbildung 31 (b). Werden interne Polarisationsfelder in der Simulation berücksichtigt, dann wird das Valenzbandpotenzial des Übergitters nicht mehr rechteckig, sondern sägezahnförmig verzerrt, Abbildung 31 (a). Die damit verbundene zusätzliche Modulation des Valenzbandes sowie des Akzeptor-Niveaus im Übergitter führt zu einer weiteren Steigerung von  $p_{\phi}$  auf 1×10<sup>15</sup> cm<sup>-3</sup> und damit um mehr als einen Faktor von 1500 im Vergleich zu dem p der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht, Abbildung 31 (b). Dabei befindet sich das Akzeptor-Niveau in Grenzflächennähe der Barriere-Regionen des Übergitters teilweise unterhalb der Fermi-Energie, weshalb in diesen Bereichen nahezu alle Akzeptoren ionisiert sind. Bei einer konstanten Dotierkonzentration ändert sich die freie Lochdichte in einem SPSL in Abhängigkeit von der Legierungszusammensetzung und den Dicken der einzelnen Wells und Barrieren. Hierbei steigt  $p_{\phi}$  mit länger werdender Periodenlänge<sup>1</sup> ( $L_p$ ) im Übergitter exponentiell an, Abbildung 32 (a). Da die internen Polarisationsfelder eine große Rolle bei der Ionisation der Ladungsträger in SPSLs spielen, fällt auch der Anstieg von  $p_{\phi}$ mit  $L_p$  umso stärker aus, je größer der Hub und die daraus resultierende Verzerrung der Energiebänder im Übergitter ist, Abbildung 32 (b). Nach oben hin sättigt  $p_{\emptyset}$  ab einer

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Es wird hierbei von gleich dicken Wells und Barrieren im Übergitter ausgegangen.

gewissen Periodenlänge, da die Raumladung die Polarisationsfelder abschirmt. Für kurze Periodenlängen können selbst in SPSLs mit hohen Hüben vergleichsweise wenige Akzeptoren ionisiert werden. Der Grund hierfür ist die immer weniger ausgeprägte Bandverzerrung in den dünnen Schichten. Deshalb nähert sich  $p_{\phi}$  in SPSLs mit kurzen  $L_{p}$ zunehmend der freien Lochdichte in einer Bulk-Schicht mit der durchschnittlichen Zusammensetzung des Übergitters an, Abbildung 32. So würde eine Änderung der Periodenlänge im Al<sub>0,78</sub>Ga<sub>0,22</sub>N:Mg/Al<sub>0,58</sub>Ga<sub>0,42</sub>N:Mg-SPSL von 10 nm auf 2 nm (wie im untersuchten Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL) zu einer  $p_{\emptyset}$ -Änderung von 1×10<sup>15</sup> cm<sup>-3</sup> auf 3×10<sup>12</sup> cm<sup>-3</sup> führen, Abbildung 31 (b). Auch die Reduktion des Hubs im Übergitter führt zu einer Reduktion von  $p_{\phi}$ . Für das Al<sub>0,78</sub>Ga<sub>0,22</sub>N:Mg/Al<sub>0,58</sub>Ga<sub>0,42</sub>N:Mg-SPSL mit  $L_p$  = 10 nm auf führt die  $\Delta Al$ -Absenkung von 20% 6% (wie im untersuchten Al<sub>0.71</sub>Ga<sub>0.29</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N:Mg-SPSL) zu einer Reduktion der freien Lochdichte von 1×10<sup>15</sup> cm<sup>-3</sup> auf 2×10<sup>12</sup> cm<sup>-3</sup>, Abbildung 31 (b). Führt man die Simulation des experimentell untersuchten Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL ( $\Delta Al = 6\%$ ,  $L_p = 2$  nm) durch, so oszilliert die simulierte freie Lochdichte nur geringfügig um den Wert der Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht, wobei sich  $p_{\emptyset}$  mit 6×10<sup>11</sup> cm<sup>-3</sup> in der Bulk-Schicht und 8×10<sup>11</sup> cm<sup>-3</sup> im SPSL kaum unterscheiden, Abbildung 31 (b). Um abzuschätzen wie stark sich die effektive Ionisierungsenergie des Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL im Vergleich zu der  $Al_{0.68}Ga_{0.32}N:Mg-Bulk-Schicht ändert, wurde E_A bei SiLENSe-Simulationen<sup>1</sup> in der$ Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht angepasst, um die freie Lochdichte von 6×10<sup>11</sup> cm<sup>-3</sup> auf 8×10<sup>11</sup> cm<sup>-3</sup> zu erhöhen. Die dafür notwendige Änderung der Ionisierungsenergie beträgt lediglich etwa 5 meV. Bei der in Kapitel 3.4 bestimmten Ionisierungsenergie von 510 meV in der Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk betrug der Messfehler  $\pm 20$  meV, weshalb eine  $E_A$ -Reduktion im Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL von 5 meV durch die vorliegende Messmethode nicht/kaum aufgelöst werden kann. Somit wird von der theoretischen Seite erwartet, dass aufgrund der geringen Periodenlänge sowie des geringen Hubs die freie Lochdichte und folglich auch die Ionisierungsenergie der Mg-Akzeptoren im  $Al_{0,68}Ga_{0,32}N:Mg-Bulk-Schichten$ und Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSLs in experimentell nicht unterscheidbar sind. Auch eine von Bulk-Schichten abweichende Feldstärke-Abhängigkeit von p in Übergittern ist nicht antizipiert, da die internen Polarisationsfelder, welche zu der erleichterten Ionisation von Akzeptoren in Übergittern führen, statischer Natur sind und sich nicht mit der elektrischen Feldstärke ändern.

Bei dem zweiten experimentell betrachteten Übergitter (Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg), beträgt  $L_p$  lediglich 1,8 nm. Allerdings ist die simulierte durchschnittliche freie Lochdichte mit 2×10<sup>12</sup> cm<sup>-3</sup> aufgrund des vergleichsweise hohen  $\Delta Al$  (21%) im Übergitter um etwas mehr als einen Faktor drei größer als die in einer Bulk-Schicht mit der durchschnittlichen Legierungszusammensetzung des Übergitters (Al<sub>0,76</sub>Ga<sub>0,24</sub>N:Mg,  $p = 6 \times 10^{11}$  cm<sup>-3</sup>). Wie auch oben wurden auch hier zusätzliche SiLENSe-Simulationen<sup>2</sup> durchgeführt, um abschätzen zu können wie stark sich die Ionisierungsenergie im Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter im Vergleich zu Al<sub>0,76</sub>Ga<sub>0,24</sub>N:Mg-Bulk-Schicht reduziert werden muss, um diese

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Hier nicht gezeigt.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Hier nicht gezeigt.

 $p_{\phi}$ -Änderung zu erreichen. Diese offenbaren, dass eine Änderung der Ionisierungsenergie von etwa 15 meV bereits ausreicht um die freie Lochdichte in der Al<sub>0,76</sub>Ga<sub>0,24</sub>N:Mg-Bulk-Schicht von 6×10<sup>11</sup> cm<sup>-3</sup> auf 2×10<sup>12</sup> cm<sup>-3</sup> zu erhöhen. Folglich wird antizipiert, dass die Ionisierungsenergie des Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitters sich in den  $E_A$ -x-Trend für Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N:Mg-Bulk-Schichten aus der Literatur (Abbildung 13) einreihen wird. Schließlich soll bemerkt werden, dass im Gegensatz zu den simulierten Übergittern die realen Übergitter nicht perfekt sind. Denn sowohl die Legierungszusammensetzung, als auch die Schichtdicken in den einzelnen Regionen der realen Übergitter fluktuieren während des Wachstums. Statt eines rechteckigen beziehungsweise sägezahnförmigen Verlaufs des Valenzbandes eines idealen Übergitters, wird in realen SPSLs ein eher wellenförmiger Valenzbandverlauf erwartet. Dies führt zu einer Abschwächung der Ionisation in Übergittern, vor allem für die Übergitter mit niedrigen Periodenlängen [79]. Folglich sollten die durchschnittlichen freien Lochdichten sowie die Ionisierungsenergien in den untersuchten Übergittern und Bulk-Schichten noch näher beieinander liegen, als es von den idealisierten Simulationsannahmen vorausgesagt wird.

#### 3.5.2 Ladungsträgertransport in Übergittern

Die elektrische Leitfähigkeit innerhalb von Übergitterstrukturen ist asymmetrisch. Dabei profitiert die laterale Leitfähigkeit (senkrecht zur Wachstumsrichtung) von der erleichterten Akzeptor-Ionisation in Übergittern. Wie im letzten Kapitel gezeigt wurde, steigt die freie Lochdichte und damit  $\sigma_L$  mit steigender Periodenlänge sowie steigendem Hub im SPSL an. Dieser Zusammenhang wurde auch experimentell beobachtet [99]. Für den Transport der ionisierten Löcher in die MQW-Region ist allerdings die vertikale Leitfähigkeit (parallel zur Wachstumsrichtung) des Übergitters verantwortlich. Da die Akzeptoren überwiegend in den Barrieren ionisiert werden und anschließend in die energetisch günstigeren Well-Regionen relaxieren, müssen die Löcher beim vertikalen Bandtransport stets das Barrieren-Potenzial überwinden, um zum Ladungsträgertransport beitragen zu können. Haben die SPSL-Barrieren eine Schichtdicke und/oder Legierungszusammensetzung, welche kein relevantes quantenmechanisches Tunneln aus den Well-Regionen ermöglicht, müssen die ionisierten Löcher das Barriere-Potenzial thermisch überwinden, um sich in Feldrichtung bewegen zu können. So kann antizipiert werden, dass für solch eine Art der SPSL-Konfiguration die Loch-Beweglichkeit in die vertikale Richtung des Übergitters viel geringer ausfallen wird als in die laterale SPSL-Richtung, aber auch geringer sein wird als in Bulk-Schichten mit durchschnittlicher Legierungszusammensetzung des Übergitters. Ist dagegen das quantenmechanische Tunneln durch die SPSL-Barrieren möglich, so bilden sich sogenannte Minibänder aus [137]. Die Mini-Bänder werden dabei durch den endlichen Überlapp der Loch-Wellenfunktionen der einzelnen stationären QW-Zustände geformt. Für ein perfekt rechteckiges Übergitterpotenzial mit unendlich vielen Perioden ist die Transmission der Ladungsträger mit der Energie der Mini-Bänder durch das Übergitterpotenzial gleich Eins und gleicht dem Transport in Bulk-Schichten. Dagegen ist die Transmission der



Abbildung 33: Mittels selbstkonsistenter Lösung der Schrödinger-Poisson-Gleichungen bestimmte Valenzbandverlauf und mit Hilfe der Transfermatrixmethode berechnete Transmissionswahrscheinlichkeit durch das Potenzial des (a)  $Al_{0,78}Ga_{0,22}N/Al_{0,58}Ga_{0,42}N:Mg-$ Übergitters ( $L_p = 10 \text{ nm}$ ) sowie des (b)  $Al_{0,71}Ga_{0,29}N/Al_{0,65}Ga_{0,35}N-SPSLs$  ( $L_p = 2 \text{ nm}$ ). Zusätzlich wurden in beiden Abbildungen die Fermi-Dirac-Verteilungen eingezeichnet. Der gelb dargestellte Bereich markiert Energien die höher sind als die Fermi-Energie.

Ladungsträger mit der Energie zwischen den Mini-Bändern gleich Null, weshalb durch diese, sogenannten verbotenen Bereiche, kein Ladungsträgertransport möglich ist. Für Übergitter mit einem nicht rechteckigen Potenzial und einer endlichen Periodenanzahl sind die Transmissionsbänder nicht binär und weichen insbesondere an den Übergängen zwischen den einzelnen Mini-Bändern und den einzelnen verbotenen Bereichen auf. Es soll dabei bemerkt werden, dass sich die Ausbildung sowohl von Mini-Bändern als auch von den verbotenen Bereichen auch oberhalb des Valenzbandpotenzials der SPSL-Barrieren fortsetzt. Aus diesem Grund ist der Ladungsträgertransport auch für Löcher mit der Energie oberhalb des Potenzials der SPSL-Barrieren im Vergleich zu Bulk-Schichten eingeschränkt. Die quantitative Berechnung des Ladungsträgertransports durch Übergitter ist nicht einfach sowie umstritten [137, 138]. Dagegen ist die qualitative Betrachtung, ohne die Berücksichtigung von Streueffekten und ähnlich wie diese in [139] durchgeführt wurde, vergleichsweise einfach umsetzbar. Dabei wird die Wahrscheinlichkeit für einen Ladungsträger mit einer bestimmten Energie durch ein beliebiges Übergitterpotenzial quantenmechanisch hindurch zu tunneln als Transmissionswahrscheinlichkeit ( $\Theta$ ) bezeichnet und kann mit Hilfe der sogenannten Transfermatrixmethode [137] berechnet werden. Die Transfermatrixmethode wurde bereits im Rahmen der Vorarbeit [140] inklusive eines Algorithmus zum Lösen von Schrödinger-Poisson-Gleichungen für die Berechnung des Valenzbandpotenzials in Wolfram Mathematica [141] implementiert. Auf beide Aspekte soll aus Platzgründen nicht näher eingegangen werden. Ein Beispiel für das berechnete Transmissionsspektrum anhand  $\Theta(E)$ des fiktiven Al<sub>0.78</sub>Ga<sub>0.22</sub>N:Mg/Al<sub>0.58</sub>Ga<sub>0.42</sub>N:Mg-SPSLs aus Kapitel 3.5.1 mit 5 nm dicken Wells und Barrieren ist in der Abbildung 33 (a) dargestellt. Aufgrund der relativ dicken Barriere-Schichten besteht kein relevanter Überlapp der Lochwellenfunktionen zwischen den einzelnen Wells des Übergitters, weshalb die Transmissionswahrscheinlichkeit durch die Barrieren-Potenziale bei etwa Null liegt. Erst für vergleichsweise hohe Energien, bei denen sich die Spitzen der nahezu dreieckigen Barrieren-Potenziale befinden, wird das Tunneln der Löcher durch immer noch energetisch schmale Transmissionskanäle möglich. Für Ladungsträger mit Energien oberhalb der Barrieren-Potenziale wird der Transport immer weniger eingeschränkt, wobei auch hier die Transmissionswahrscheinlichkeit meistens unter Eins liegt und in vereinzelt auftretenden verbotenen Bereichen nahezu Null beträgt. Aufgrund der dünnen Barrieren (1 nm) bildet sich dagegen im Transmissionsspektrum des experimentell betrachteten Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSLs ein vergleichsweise breites (~50 meV) Mini-Band inmitten des Barrieren-Potenzials aus, gefolgt von einem ebenfalls etwa 50 meV breiten verbotenen Band und wird schließlich für Löcher mit noch höheren Energien fast vollständig transparent, Abbildung 33 (b). Da die Besetzungswahrscheinlichkeit von Fermionen (hier Löchern) im Energiespektrum nicht konstant ist, sondern mit zunehmender Entfernung von der Fermi-Energie immer geringer wird, hat eine hohe Transmissionswahrscheinlichkeit bei niedrigen Energien, beispielsweise unterhalb des Barrieren-Potenzials im Übergitter, eine höhere Relevanz für den Ladungsträgertransport als eine hohe Transmissionswahrscheinlichkeit bei hohen Energien, beispielsweise oberhalb des Barrieren-Potenzials im Übergitter. Um herauszufinden welchen Einfluss die Unterschiede in den einzelnen Transmissionsspektren auf den Transport von Löchern durch die jeweiligen Übergitterpotenziale haben, können die einzelnen  $\Theta(E)$ -Verläufe mit Hilfe der Fermi-Dirac-Verteilung gewichtet werden. Die Fermi-Dirac-Verteilung  $f(E,T) = \left[1 + Exp\left(\frac{E-E_F}{k_BT}\right)\right]^{-1}$  gibt die Wahrscheinlichkeit der Besetzung eines Zustandes durch ein Fermion mit der Energie E bei der Temperatur T an. Anhand des Überlapps zwischen  $\Theta(E)$  und f(E,T) sowie der anschließenden Integration über alle Energien, kann der sogenannte Transmissionsfaktor

$$\eta_t(E,T) = \frac{\int_0^\infty \Theta(E) f(E,T) \, dE}{\eta_t^{bulk}}$$
3.17

berechnet werden.  $\eta_t$  beschreibt dabei wie einfach ein Ladungsträger durch das Potenzial einer oder im Falle des Übergitters mehrerer Halbleiterschichten transportiert werden kann. Der Wert von  $\eta_t$  ist hier auf den Transmissionsfaktor ( $\eta_t^{bulk}$ ) einer Bulk-Schicht mit der durchschnittlichen Legierungszusammensetzung des jeweiligen Übergitters normiert. Da der Lochtransport bei einer Bulkschicht durch keine Potenzialbarrieren eingeschränkt wird, wird hierbei der maximale  $\eta_t$ -Wert von Eins erreicht. Mit abnehmendem  $\eta_t$ -Wert in einer Struktur kann von einer immer geringer werdenden Loch-Beweglichkeit in die vertikale beziehungsweise in die *c*-Richtung im Vergleich zu einer Bulkschicht ausgegangen werden. Um zu untersuchen wie stark  $\eta_t$  durch das Potenzial von Übergittern mit unterschiedlichen Konfigurationen beeinträchtigt wird, wurden entsprechende Simulationen unter Variation der Periodenlänge sowie des Hubs für ein AlGaN:Mg-Übergitter mit einem durchschnittlichen Al-Anteil von 68% durchgeführt<sup>1</sup>.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Dabei wurden Übergitter mit gleich dicken Well- und der Barriere-Schichten simuliert.



Abbildung 34: Dargestellt sind die mit Hilfe von SiLENSe simulierten mittleren freien Lochdichten sowie der mittels selbstkonsistenter Lösung der Schrödinger-Poisson-Gleichungen und der Transfermatrixmethode berechneten Transmissionsfaktoren für AlGaN:Mg-Übergitter mit einem durchschnittlichen Al-Anteil von 68% in Abhängigkeit von (a) des Hubes und (c) der Periodenlänge. Weiterhin ist das Produkt der Transmissionsfaktoren und der Verhältnisse der freien Lochdichten in den simulierten Übergittern mit einem durchschnittlichen Al-Anteil von 68% zu der freien Lochdichte in einer Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht in Abhängigkeit von (b)  $\Delta$ Al und (d) L<sub>p</sub> gezeigt.

Wie anhand der Simulationsergebnisse in Abbildung 34 (a) erkennbar ist, sinkt der Transmissionsfaktor für Übergitter mit vergleichsweise hohen Periodenlängen ( $L_p = 10$  nm) exponentiell mit linear ansteigendem Hub im Übergitter. Für niedrigere Periodenlängen ( $L_p = 2$  nm) wird der Transmissionsfaktor weniger stark von Änderungen in  $\Delta Al$  beeinträchtigt und sättigt sogar zu höheren Hub-Werten hin. Diese Sättigung hängt mit dem Umstand zusammen, dass in schmalen Barrieren beziehungsweise bei niedrigen  $L_p$ -Werten die zu Dreiecken verzerrten Potenziale mit steigendem  $\Delta Al$  zwar zunehmend spitzer werden, aber aufgrund der geringen Dicken den Tunnelprozess kaum beeinflussen. Die Sättigung des Transmissionsfaktors für hohe  $\Delta Al$  kann auch für Übergitter mit dickeren Barriere-Schichten erwartet werden, sollte aber bei höheren Hub-Werten einsetzen. Um zusätzlich einzuschätzen zu können wie sich die Änderungen des Transmissionsfaktors und der freien Lochdichte auf die vertikale Leitfähigkeit von Übergittern mit unterschiedlichen Konfigurationen im Vergleich zum  $\sigma_V$  in Bulk-Schichten auswirken, wurde das  $\eta_p \times \eta_t$ -Produkt berechnet, Abbildung 34 (b). Dabei gibt  $\eta_p$  das Verhältnis der freien Lochdichte im jeweils simulierten Übergitter zu der freien Lochdichte in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht an. Es wird weiterhin vereinfacht von  $\eta_t \propto \mu_h$  ausgegangen. Für Hub-Werte kleiner als 10% sinkt das  $\eta_p \times \eta_t$ -Produkt und damit auch die vertikale Leitfähigkeit der simulierten AlGaN:Mg-Übergitter mit einem durchschnittlichen Al-Anteil von 68%. Für  $\Delta Al > 10\%$ steigt  $\eta_p \times \eta_t$  wieder an, erreicht aber erst ab Hub-Werten von mehr als 20% ( $L_p = 10$  nm) eine ähnlich hohe vertikale Leitfähigkeit wie die Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht. Folglich muss ein Übergitter, für den hier betrachteten durchschnittlichen Al-Anteil von 68%, einen Hub von mehr als 20% aufweisen, um theoretisch eine höhere vertikale Leitfähigkeit als die Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht aufzuweisen. Dies gilt zumindest für die beiden simulierten Periodenlängen von 2 nm und 10 nm.

Im nächsten Schritt wurden AlGaN:Mg-Übergitter mit einem durchschnittlichen Al-Anteil von 68% mit konstanten Hub-Werten von 6% und 20% unter Variation der Periodenlänge simuliert, Abbildung 34 (c). Da die Barrieren mit steigenden  $L_p$  immer dicker werden und so das Tunneln erschweren, sinkt der Transmissionsfaktor stetig mit größer werdender Periodenlänge. Diese Entwicklung ist für Übergitter mit größerem Hub stärker ausgeprägt, da das Tunneln durch hohe Potenziale schwieriger ist als durch niedrige Potenziale. Dabei sinkt der Transmissionsfaktor für  $L_p < 5$  nm relativ schnell, wohingegen für höhere Periodenlängen  $\eta_t$  einer Sättigung unterliegt. Die Ursache hierfür sind die Mini-Bänder mit Energien unterhalb der Barrieren-Potenziale, welche mit steigendem  $L_p$  immer schmaler werden. Ab einer Barrierendicke von etwa 2,5 nm ( $L_p = 5$  nm) sind die Mini-Bänder mit Energien unterhalb der Barrieren-Potenziale (fast) vollständig geschlossen und die Transmission der Ladungsträger findet überwiegend oberhalb der Barrieren-Potenziale beziehungsweise durch die Spitzen der Barrieren-Potenziale statt, vergleich zum Beispiel Abbildung 33 (a). Folglich ändert sich  $\eta_t(L_p)$  für  $L_p > 5$  nm nur langsam. Interessant ist hierbei, dass die Absenkung von  $\eta_t$  zu höheren Periodenlängen hin schneller eine Sättigung erfährt als die Steigung von  $\eta_p$ , Abbildung 34 (c). Somit ist für ein Übergitter mit einem durchschnittlichen Al-Anteil von 68% und einem ausreichend hohem Hub ( $\geq 20\%$ ), zumindest theoretisch eine Steigerung der vertikalen Leitfähigkeit im Vergleich zu der möglich, Abbildung Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht 34 (d). So liegt für ein Al<sub>0,78</sub>Ga<sub>0,22</sub>N:Mg/Al<sub>0,58</sub>Ga<sub>0,42</sub>N:Mg-SPSL mit 7 nm dicken Wells und Barrieren das  $\eta_p \times \eta_t$ -Produkt um einen Faktor 5 höher als in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht und steigt sogar auf einen um 37-fach höheren Wert bei einem  $L_p$  von 20 nm. Ob Übergitter mit solch hohen Periodenlängen praktisch umsetzbar sind und tatsächlich eine höhere vertikale Leitfähigkeit aufweisen als **Bulk-Schichten** mit der durchschnittlichen Legierungszusammensetzung des SPSL, muss allerdings noch experimentell untersucht werden. Denn aufgrund der hier nicht beachteten und in SPSLs zusätzlich zu den in Bulk-



Abbildung 35: (a) Die Anpassung der experimentell bestimmten Änderung der vertikalen Leitfähigkeit des  $Al_{0,71}Ga_{0,29}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg-SPSLs$  in Abhängigkeit von der elektrischen Feldstärke und der Temperatur mittels des 3D-PFE-Modells. (b) Vergleich der der gemessenen vertikalen Leitfähigkeiten der  $Al_{0,68}Ga_{0,32}N:Mg-Bulk-Schicht$  und des  $Al_{0,71}Ga_{0,29}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg-SPSLs$ .

Schichten potenziell auftretenden Streueffekten (siehe Einleitung von Kapitel 3), könnte  $\sigma_V$  von Übergitterkonfigurationen mit einem  $\eta_p \times \eta_t$ -Produkt von über Eins niedriger ausfallen als in zugehörigen Bulk-Schichten.

Für Übergitter mit einem geringen Hub fällt die Änderung der Ladungsträgerdichte im Vergleich zu einer Bulkschicht relativ gering aus. Gleichzeitig wird aber der vergleichsweise Ladungsträgertransport stark durch das Übergitterpotenzial eingeschränkt. Folglich bleibt das  $\eta_p \times \eta_t$ -Produkt und damit auch die vertikale Leitfähigkeit für die betrachteten Übergitter mit einem Hub  $\leq$  6%, auch für eine Periodenlänge von 25 nm, immer geringer als in einer Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht. Dies trifft auch auf das experimentell betrachtete Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter zu. Hier liegt der Transmissionsfaktor bei 0,46 und das  $\eta_p$  bei 136%. Weiterhin vereinfacht von der Annahme ausgehend, dass  $\eta_t$  direkt-proportional zu der Loch-Beweglichkeit in die vertikale Richtung ist, sollte  $\sigma_V$  im Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter folglich um etwa 37% niedriger sein als in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht. Dies deckt sich auch mit den experimentell bestimmten Werten für die vertikale Leitfähigkeit bei niedrigen elektrischen Feldstärken und bei  $T = 25^{\circ}$ C der beiden Schichten, wo der Unterschied bei rund 30% liegt, vergleiche Abbildung 19. Somit scheint die Berechnung der freien Lochdichte in Übergittern mittels SiLENSe und der Annahme, dass der mittels der Transfermatrixmethode bestimmte Transmissionsfaktor sich direkt-proportional zu der Loch-Beweglichkeit verhält, zumindest für den vorliegenden Fall, die realen Verhältnisse gut widerzuspiegeln.

## 3.6 Fit des $\sigma_V(F, T)$ -Verlaufs in AlGaN:Mg-SPSLs

Im letzten Abschnitt des Kapitels werden nun auch die temperaturabhängigen Messungen der vertikalen Leitfähigkeiten des Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSLs sowie des Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitters ausgewertet. Dabei wird anhand der Untersuchungen aus Kapitel 3.5.1 und Kapitel 3.5.2 erwartet, dass die Ionisierungsenergie im Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL vergleichbar oder etwas niedriger (~ 5 meV) ist als in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht, wohingegen die Loch-Beweglichkeit in der Bulk-Schicht höher sein sollte. Des Weiteren wird ebenfalls erwartet, dass die Feldstärkeabhängigkeit der vertikalen Leitfähigkeit in beiden Strukturen ähnlich ist und die periodischen Änderungen in den untersuchten Übergittern, aufgrund vom geringen  $L_p$  und einem geringen  $\Delta Al$ , keine Rolle spielen.

In der Abbildung 35 (a) ist die gemessene vertikale Leitfähigkeit des Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL als Funktion der Temperatur und der elektrischen Feldstärke dargestellt. Es fällt auf, dass bei niedrigen elektrischen Feldstärken  $(F \le 50 \text{ kVcm}^{-1}) \sigma_V \text{ der Al}_{0,68}\text{Ga}_{0,32}\text{N:Mg-Bulk-Schicht, unabhängig von der Messtemperatur,}$ um etwa 30% höher ist als im Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL. Dies stützt die Vermutung, dass die Ionisierungsenergien in den beiden Strukturen vergleichbar sind und die Unterscheide in  $\sigma_V$  bei geringen elektrischen Feldstärken aus Unterschieden in  $\mu_h$ resultieren. Denn im Falle einer stark abweichenden Nullfeld-Ionisierungsenergie im Al<sub>0.71</sub>Ga<sub>0.29</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N:Mg-SPSL im Vergleich zu der Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht wären die Abstände zwischen den  $\sigma_V$ -Werten (für  $F \sim 0$ ) der einzelnen Strukturen für die jeweiligen Mestemperaturen stets größer oder kleiner, aber nicht konstant. Um die Nullfeld-Ionisierungsenergie quantitativ zu erfassen, wurde die gemessene vertikale Leitfähigkeit des Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSLs bei  $F \sim 50$  kVcm<sup>-1</sup> in der Arrhenius-Darstellung über den reziproken Wert der Messtemperatur ausgewertet, Abbildung 36 (a). Wie in den Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schichten liegt  $E_{A,0}$  des Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSLs ebenfalls bei  $(510\pm30)$  meV. Da der theoretisch berechnete Unterscheid von ~ 5 meV in der Ionisierungsenergie der beiden Strukturen mit der vorliegenden Messmethode nicht aufgelöst werden kann, kann auch nicht abschließend geklärt werden, ob in dem untersuchten Übergitter überhaupt eine Änderung der Ionisierungsenergie beziehungsweise der freien Lochdichte im Vergleich zu der Bulk-Schicht vorliegt oder nicht. Allerdings passt der anhand von Simulationen (Kapitel 3.5.2) vorausgesagte Unterschied von 30% in  $\sigma_V$  (für  $F \sim 0$ ) zwischen dem Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL und der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht als kombinierter Effekt der erhöhten freien Lochdichte und der niedrigeren Loch-Beweglichkeit im Übergitter ziemlich genau zu den Berechnungen aus dem letzten Kapitel. Da die Loch-Beweglichkeit im Gegensatz zu der Ionisierungsenergie direkt-proportional zu  $\sigma_V$  ist, deutet der im Experiment beobachtete und nahezu temperaturunabhängige 30%-Unterschied zwischen  $\sigma_V$  (für  $F \sim 0$ ) auf eine reduzierte Loch-Beweglichkeit in der Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL als Ursache der niedrigeren vertikalen Leitfähigkeit im Vergleich zu der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht hin. Dies wird auch aus dem **3D-PFE-Fit** deutlich, denn das  $K \times \mu_h$ -Produkt im



Abbildung 36: (a) Gemessene vertikale Leitfähigkeit des  $Al_{0,71}Ga_{0,29}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg$ -SPSLs für unterschiedliche elektrische Feldstärken in der Arrhenius-Darstellung ( $ln(\sigma_V)$ -1000/T). (b) Vergleich zwischen den SIMS-Profilen in den Proben mit einem  $Al_{0,71}Ga_{0,29}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg$ -SPSL und einer  $Al_{0,68}Ga_{0,32}N:Mg$ -Bulk-Schicht. Die Zahlen auf der oberen Abszisse in (b) kennzeichnen die einzelnen Bereiche der Heterostruktur: (1) GaN:Mg-Kontaktschicht, (2)  $Al_{0,68}Ga_{0,32}N:Mg$ -Bulk-Schicht beziehungsweise  $Al_{0,71}Ga_{0,29}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg$ -SPSL, (3) EBL, (4) MQW und (5) n-Seite.

 $Al_{0,71}Ga_{0,29}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg-SPSL$  ist mit  $(1,2\pm0,4)\times10^{23}$  (mVs)<sup>-1</sup> niedriger als in der  $Al_{0,68}Ga_{0,32}N:Mg-Bulk-Schicht$  ( $(2\pm0,5)\times10^{23}$  (mVs)<sup>-1</sup>).

Während sich die vertikale Leitfähigkeit in den beiden Strukturen bei niedrigen elektrischen Feldstärken lediglich um  $\sim$  30% unterscheidet, steigt dieser Unterschied mit F an und beträgt bei 0,8 MVcm<sup>-1</sup> und  $T = 25^{\circ}$ C bereits ~300%, Abbildung 35 (a). Um zu verstehen wie die unterschiedliche Feldstärkeabhängigkeit in den beiden Strukturen zustande kommt, erfolgt im nächsten Schritt die Anpassung des gemessenen  $\sigma_V(F,T)$ -Verlaufs im Al<sub>0.71</sub>Ga<sub>0.29</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N:Mg-SPSL mit dem 3D-PFE-Modell. Wie in Kapitel 3.3.1 diskutiert wurde, ändert sich der Wert von  $\epsilon_{opt}$  nur schwach zwischen GaN und AlN, weshalb für das vorliegende Übergitter mit einem  $\Delta Al$  von lediglich 6%, von einer vergleichbaren optischen Dielektrizitätskonstante (4,65) wie in der Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht ausgegangen wird. Es wird zusätzlich angenommen, dass sich die Feldstärkeabhängigkeit der Ionisation sowie des Transports von Ladungsträgern im Al<sub>0.71</sub>Ga<sub>0.29</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N:Mg-SPSL aufgrund der geringen Periodenlänge (2 nm) und eines geringen Hubs (6%) wie in einer Bulk-Schicht verhält und folglich durch den 3D-PFE dominiert werden sollte. In der Tat, der experimentell beschriebene  $\sigma_V(F, T)$ -Verlauf des Al<sub>0.71</sub>Ga<sub>0.29</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N:Mg-SPSLs kann innerhalb des Messbereichs gut mit Hilfe des 3D-PFE angepasst werden, Abbildung 35 (b). Dabei fällt auf, dass der durchschnittliche Akzeptorabstand mit  $(5,1\pm0,2)$  nm im Al<sub>0.71</sub>Ga<sub>0.29</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N:Mg-SPSLs niedriger ist als der in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht mit (5,8±0,4) nm. Dies spiegelt sich auch in der unterschiedlichen und von s abhängigen Breite des ohmschen Bereichs zwischen der  $Al_{0,68}Ga_{0,32}N:Mg-Bulk-Schicht$  (bis ~ 50 kVcm<sup>-1</sup>) und dem  $Al_{0,71}Ga_{0,29}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg-Bulk-Schicht$  (bis ~ 50 kVcm<sup>-1</sup>) und dem  $Al_{0,71}Ga_{0,29}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg-Bulk-Schicht$ Abbildung SPSLs (bis ~ 100 kVcm<sup>-1</sup>) wider, 35 (a). Auch die schwächere Feldstärkeabhängigkeit der vertikalen Leitfähigkeit im Al<sub>0.71</sub>Ga<sub>0.29</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N:MgSPSLs im Vergleich zu der Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht ist ein Hinweis auf einen kürzeren mittleren Akzeptorabstand im untersuchten Übergitter, vergleiche hierzu Kapitel 3.3.1. Mit Hilfe der Formel 3.12 kann aus s die Akzeptordichte berechnet werden. Diese liegt für das  $Al_{0.71}Ga_{0.29}N:Mg/Al_{0.65}Ga_{0.35}N:Mg-SPSL$  bei  $(4,7\pm0.8)\times10^{19}$  cm<sup>-3</sup> und ist damit um rund  $(1,5\pm1,0)\times10^{19}$  cm<sup>-3</sup> höher als in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht mit  $(3,2\pm0,6)\times10^{19}$  cm<sup>-3</sup>. Um dies zu überprüfen, wurden für die Probe mit einem 140 nm dicken  $Al_{0,71}Ga_{0,29}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg-SPSL$ SIMS-Untersuchungen durchgeführt. In der Abbildung 36 (b) sind die SIMS-Profile der bereits untersuchten Probe mit einer Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht und des Al<sub>0.71</sub>Ga<sub>0.29</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N:Mg-SPSLs gegenübergestellt. Während die Dichte des Akzeptor-kompensierenden Wasserstoffs in beiden Proben mit  $(1,9\pm0,1)\times10^{19}$  cm<sup>-3</sup> vergleichbar ist, beträgt die detektierte Mg-Konzentration im  $Al_{0,71}Ga_{0,29}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg-SPSL$  (8±0,5)×10<sup>19</sup> cm<sup>-3</sup> und liegt damit ähnlich wie durch die 3D-PFE-Anpassung vorausgesagt um  $(2\pm1)\times10^{19}$  cm<sup>-3</sup> höher als in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht. Auch die experimentell bestimmte, obere Abschätzung für die nicht kompensierte Akzeptordichte  $(N_{Mg} - N_H)$  im Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL passt mit  $(6\pm0,6)\times10^{19}$  cm<sup>-3</sup> im Rahmen der Fehlergrenzen zum berechneten  $((4,7\pm0,8)\times10^{19} \text{ cm}^{-3})$  aus dem 3D-PFE-Fit. Dies bestätigt ein weiteres Mal, dass die Auswahl von  $\epsilon_{opt}$  und nicht  $\epsilon_r$  für den Wert der Dielektrizitätskonstante im 3D-PFE-Modell, zumindest für die untersuchten Strukturen, die richtige Wahl ist. Da der Cp<sub>2</sub>Mg/III-Fluss während des Wachstums der einzelnen Strukturen für alle Proben auf 1,5% eingestellt wurde, ist die höhere Mg-Dotierkonzentration im Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL im Vergleich zur Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht nicht von vorneherein erwartet. Es kann aber spekuliert werden, dass die Abhängigkeit der Löslichkeit von Mg von der Legierungszusammensetzung [92, 93] für die unterschiedliche Dotierkonzentration im Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL und im Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht verantwortlich ist.

Neben der Feldstärkeabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit und der Breite des ohmschen Bereichs wird auch die Ionisierungsenergie von der Akzeptordichte beeinflusst. Anhand des Terms  $\beta^2/qs$  in Gleichung 3.7 kann abgeschätzt werden um welchen Betrag die Ionisierungsenergie im Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL durch den höheren  $N_A$ -Wert gegenüber der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht sinken sollte. Unter Berücksichtigung der Fehlergrenzen von den einzelnen *s*-Werten beträgt die berechnete und durch die unterschiedliche Akzeptordichte bedingte Reduktion der Ionisierungsenergie im Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL im Vergleich zu der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht (25±25) meV. Aufgrund des hohen Fehlers dieses Wertes als auch des hohen Fehlers bei der Bestimmung von  $E_{A,0}$  im Experiment kann nicht abschließend geschlussfolgert werden, ob und in welchem Ausmaß dieser Effekt für die Ionisation der Ladungsträger eine Rolle spielt.



Abbildung 37: Der gemessene  $\sigma_V(F,T)$ -Verlauf und der zugehörige 3D-PFE-Fit des  $Al_{0,86}Ga_{0,14}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg$ -SPSL.

Schließlich sollen gemessenen  $\sigma_V(F,T)$ -Kennlinien die des Al<sub>0.86</sub>Ga<sub>0.14</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N:Mg-Übergitters (Abbildung 37) diskutiert und mittels des 3D-PFE angepasst werden. Auch in diesem Fall beschreibt der 3D-PFE den Verlauf der vertikalen Leitfähigkeit in Abhängigkeit von der elektrischen Feldstärke und Temperatur mit hoher Güte. Die starke Temperaturabhängigkeit von  $\sigma_V$  (für  $F \sim 0$ ), mit einer Änderung um etwa zwei Größenordnungen zwischen 20°C und 80°C, spiegelt sich auch in der mit (620±30) meV um mehr als 100 meV höheren Ionisierungsenergie im Vergleich zum Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL und der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht wider. Extrapoliert man zwischen der Ionisierungsenergie von GaN:Mg (170 meV, Abbildung 13) und der Ionisierungsenergie für die  $Al_{0.68}Ga_{0.32}N:Mg-Bulk-Schicht von (510\pm20) meV$ , so ergibt sich für den durchschnittlichen Al-Anteil von 76% im Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL ein  $E_A$  von (550±20) meV. Somit ist der aus der für die Ionisierungsenergie Extrapolation erwartete Wert des Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitters um ganze 70 meV niedriger als der experimentell bestimmte. Die Ursache hierfür könnte in der unterschiedlichen Dotierkonzentration der einzelnen Schichten liegen. Denn beim Wachstum des Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitters wurde ein Cp<sub>2</sub>Mg/III-Fluss von rund 1% verwendet, Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht wohingegen die sowie das Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL mit 1,5% gewachsen wurden. Im Vergleich zu den anderen beiden untersuchten Strukturen sollte die Dotierkonzentration im Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter, aufgrund der bereits thematisierten zunehmend erschwerten Mg-Löslichkeit und der stärkeren Akzeptor-Kompensation in AlGaN-Schichten mit hohen Al-Anteil, in der Praxis noch weiter sinken. In der Tat ist der anhand des 3D-PFE-Fits bestimmte durchschnittliche Abstand der Mg-Akzeptoren mit  $(8\pm0,4)$  nm im Al<sub>0.86</sub>Ga<sub>0.14</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N:Mg-Übergitter vergleichsweise groß. So ist auch die nach Formel 3.12 berechnete Akzeptordichte von  $(1,2\pm0,2)\times10^{19}$  cm<sup>-3</sup> um etwa einen Faktor drei niedriger als in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht und um etwa einen Faktor vier niedriger als im Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter. Anhand des Terms  $\beta^2/qs$  in der Gleichung 3.7 kann mit diesen Informationen die Änderung der Nullfeld-Ionisierungsenergie im Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter für den Fall einer höheren Akzeptorkonzentration von  $(3,2\pm0,6)\times10^{19}$ , wie in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht, berechnet werden. Die  $E_{A,0}$ -Änderung beträgt demnach (60±20) meV. Dies stimmt gut mit der Diskrepanz von 70 meV, zwischen den experimentell bestimmten  $E_{A,0}$ -Wert für die Nullfeld-Ionisierungsenergie im Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter und den anhand der Extrapolation zwischen den Nullfeld-Ionisierungsenergien von GaN:Mg-Bulk-Schichten und von Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schichten erwarteten  $E_{A,0}$ -Wert, überein.

Neben der hohen Ionisierungsenergie fällt auch das hohe *K*×µ<sub>h</sub>-Produkt von  $(7,8\pm1)\times10^{23}$  (mVs)<sup>-1</sup> beim Al<sub>0.86</sub>Ga<sub>0.14</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N:Mg-Übergitter auf, welches etwa viermal höher ist als in der Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht und etwa sechsfach höher als im Al<sub>0.71</sub>Ga<sub>0.29</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N:Mg-SPSL. Nimmt man an, dass aufgrund der kurzen Periodenlänge der beiden Übergitter die Zustandsdichte in SPSLs ähnlich wie in Bulk-Schichten nach Formel 3.11 beschrieben werden kann, dann trägt das zur Zustandsdichte proportionale K, bedingt durch die unterschiedlichen effektiven Massen, lediglich 10% zum höheren  $K \times \mu_h$ -Produkt im Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter im Vergleich zu den anderen beiden Strukturen bei. Daraus lässt sich ableiten, dass die Loch-Beweglichkeit im Al<sub>0.86</sub>Ga<sub>0.14</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N:Mg-Übergitter, trotz des höheren Al-Anteils, um ein Vielfaches höher ist als in den anderen beiden Strukturen mit einem durchschnittlichen Al-Anteil von 68%. Auch dafür niedrigere Akzeptorkonzentration ist die im Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter die wahrscheinlichste Ursache. Die vergleichsweise niedrige Akzeptorkonzentration beziehungsweise der hohe s-Wert im Al<sub>0.86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL ist auch der Grund für den von den drei untersuchten Strukturen stärksten Anstieg der vertikalen Leitfähigkeit mit der elektrischen Feldstärke. Besonders eindrucksvoll ist der direkte Vergleich der vertikalen Leitfähigkeit zwischen dem hoch dotierten Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL und dem vergleichsweise niedrig dotierten  $Al_{0,86}Ga_{0,14}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg-Übergitter.$ Dabei ist die Nullfeld-Ionisierungsenergie ( $F \sim 0$ ) im Al<sub>0.71</sub>Ga<sub>0.29</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N:Mg-SPSL aufgrund der relativ hohen Dotierung und des niedrigeren Al-Anteils, niedriger und führt bei T nahe Raumtemperatur zu einer um Faktor 25 höheren vertikalen Leitfähigkeit im Vergleich zu dem Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter<sup>1</sup>, Abbildung 19. Da allerdings die Feldunterstützte thermische Ionisation im Zuge des 3D-PFE bei gleicher elektrischer Feldstärke die Ionisierungsenergie in einem Material mit hohem Abstand der Akzeptoren stärker reduziert als in einem Material mit niedrigem Akzeptorabstand (Kapitel 3.3.1), unterscheidet sich  $\sigma_v$  bei 0,8 MVcm<sup>-1</sup> zwischen den beiden Strukturen lediglich um einen Faktor 2,5. Dieses Beispiel zeigt wie wichtig die Berücksichtigung des 3D-PFE für die

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Mangels der Messungen bei der selben Temperatur, wurden für den Vergleich der elektrischen Leitfähigkeiten für das Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL  $\sigma_V$ -Werte bei 25°C verwendet und beim Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter die  $\sigma_V$ -Werte bei 20°C.



Abbildung 38: Aus Literaturwerten [100-110] gesammelten Ionisierungsenergien der Mg-Akzeptoren in AlGaN:Mg-Bulk-Schichten, ergänzt durch die in dieser Arbeit bestimmten  $E_{A,0}$ -Werte.

Auswahl der *passenden* Dotierkonzentration zum Erreichen einer möglichst hohen elektrischen Leitfähigkeit von AlGaN:Mg-Schichten ist.

Wie im Kapitelverlauf gezeigt wurde, ist der Anstieg der freien Lochdichte durch den Einfluss der elektrischen Felder in den untersuchten Strukturen viel stärker ausgeprägt als die potenzielle Reduktion der Loch-Beweglichkeit mit F. Deshalb steigt die elektrische Leitfähigkeit in allen untersuchten Strukturen exponentiell mit der elektrischen Feldstärke an und weist keine Sättigung auf. Da im Rahmen des 3D-PFE die Reduktion der Ionisierungsenergie mit der elektrischen Feldstärke umso stärker ausfällt, je größer der mittlere Akzeptorabstand ist, ist auch der Anstieg von  $\sigma$  mit F umso steiler, je niedriger die Dotierkonzentration in der jeweiligen AlGaN:Mg-Schicht ist. Daneben ist die niedrige Dotierkonzentration auch von Vorteil für die Höhe der Loch-Beweglichkeit. Daraus lässt sich für die Praxis folgendes ableiten: Wenn die elektrische Leitfähigkeit zweier AlGaN:Mg-Schichten mit gleicher Legierungszusammensetzung aber unterschiedlicher Dotierkonzentration unter Verwendung von üblichen Messmethoden für die Quantifizierung von  $\sigma$  bei niedrigen elektrischen Feldstärken (Hall-Messungen oder die Transferlängen-Methode) ähnlich hoch ist, dann sollte in DUV-LED die Schicht mit der niedrigeren Dotierkonzentration implementiert werden. Denn im LED-Betrieb, wo vergleichsweise hohe elektrische Felder anliegen, wird die Schicht mit der niedrigeren Dotierkonzentration, aufgrund der stärkeren Absenkung der Ionisierungsenergie mit der F, eine insgesamt höhere elektrische Leitfähigkeit aufweisen als die Schicht mit der höheren Dotierkonzentration.

Schließlich können die aus den Literaturberichten gesammelten Werte für die Ionisierungsenergien von Mg-Akzeptoren in AlGaN:Mg-Bulk-Schichten mit unterschiedlichen Legierungszusammensetzungen um die im Rahmen dieser Arbeit bestimmten  $E_{A,0}$ -Werte erweitert werden, Abbildung 38. Da wie im Kapitelverlauf feststellt wurde sich die beiden untersuchten Übergitter vor allem aufgrund der niedrigen Periodenlänge, aber auch auf Grund des geringen Hubs, im Hinblick auf die elektrischen Eigenschaften lediglich geringfügig von Bulk-Schichten unterscheiden, wurde hierfür die Darstellung mit den Ionisierungsenergien in AlGaN:Mg-Bulk-Schichten ausgewählt. Die Ionisierungsenergien aus dieser Arbeit lassen sich dabei gut in den allgemeinen Verlauf eingliedern. Es soll darauf hingewiesen werden, dass neben der unterschiedlichen Materialqualität vor allem die unterschiedlichen und oft nicht genau bekannten Mg- und Wasserstoff-Konzentrationen sowie variierende Mess- und Auswertungsmethoden die Gründe für die starke Streuung der Ionisierungsenergien von Mg-Akzeptoren in AlGaN-Schichten darstellen.

## 3.7 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde die elektrische Leitfähigkeit von Mg-dotierten AlGaN-Schichten mit hohem Al-Anteil untersucht. Dabei wurde eine Methode für die Messung der vertikalen Leitfähigkeit in Übergittern und Bulk-Schichten vorgestellt und anhand eines Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter, eines Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitters sowie einer Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht umgesetzt. Es wurde zunächst festgestellt, dass alle charakterisierten AlGaN:Mg-Strukturen hoch resistiv sind. So beträgt der Anstieg der Betriebsspannung von den untersuchten 265 nm LEDs bei einer Stromdichte von 10 Acm<sup>-2</sup> 7,5 V etwa 100 nm des eingesetzten pro Al<sub>0.71</sub>Ga<sub>0.29</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N:Mg-Übergitters. Der Spannungsabfall an der Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht ist vergleichbar mit dem am Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL. Der Spannungsabfall für das Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter ist dagegen höher und beträgt etwa 9 V pro 100 nm bei  $j = 10 \text{ Acm}^{-2}$ . Es wurde weiterhin festgestellt, dass die gemessene vertikale Leitfähigkeit in allen drei charakterisierten AlGaN:Mg-Strukturen stark temperatur- und feldstärkeabhängig ist. Bei  $T = 25^{\circ}$ C und  $F \sim 0$  beträgt die vertikale Leitfähigkeit des Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitters  $(5\pm 1,5) \times 10^{-7}$  ( $\Omega$ cm)<sup>-1</sup>. Dieser Wert steigt exponentiell mit der elektrischen Feldstärke an und beläuft sich auf  $\sigma_V = (2\pm0.3) \times 10^{-5} (\Omega \text{cm})^{-1}$  für F = 0.8 MVcm<sup>-1</sup>. Für einen Anstieg der Temperatur von 25°C auf 80°C steigt die vertikale Leitfähigkeit des Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL ebenfalls um fast zwei Größenordnungen an und liegt für  $F \sim 0$  und  $T = 80^{\circ}$ C bei  $\sigma_V = (3\pm0.4) \times 10^{-5} (\Omega \text{cm})^{-1}$ . Die Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht hat bei niedrigen Feldstärken eine etwas höhere elektrische Leitfähigkeit im Vergleich zum Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitter, zeigt aber bei einer ähnlichen Temperaturabhängigkeit eine mehr ausgeprägte Feldstärkeabhängigkeit. Das

Al<sub>0.86</sub>Ga<sub>0.14</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N:Mg-Übergitter hat die niedrigste vertikale Leitfähigkeit im Vergleich zu den anderen beiden untersuchten Strukturen, weist aber gleichzeitig die stärkste  $\sigma_V$ -Abhängigkeit von der Temperatur und von der elektrischen Feldstärke auf. Die einigen wenigen existierenden Veröffentlichungen zu  $\sigma$  von Mg-dotierten AlGaN-Schichten mit ähnlich hohen Al-Anteilen berichten über vergleichbar niedrige Leitfähigkeiten (für  $F \sim 0$ ). Auch die ausgeprägte Temperaturabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit in den untersuchten AlGaN:Mg-Strukturen kann anhand der hohen Ionisierungsenergie antizipiert werden. Allerdings gibt es bisher keine Berichte über den exponentiellen Anstieg der elektrischen Leitfähigkeit mit der elektrischen Feldstärke in AlGaN:Mg-Schichten. Dabei kann der beobachtete Anstieg der elektrischen Leitfähigkeit mit F, entweder durch den exponentiellen Anstieg einen freien Lochdichte oder durch eine entsprechende Erhöhung der Loch-Beweglichkeit mit der elektrischen Feldstärke, erfolgen. Diese beiden Phänomene können aber nicht mit Hilfe der rein thermischen Ionisation der Akzeptoren und dem klassischen Bandtransport erklärt werden. Unter mehreren in Frage kommenden Leitungsmechanismen beschreiben nur die Hopping-Leitung und die Poole-Frenkel-Ionisation eine exponentielle Abhängigkeit der Leitfähigkeit von der elektrischen Feldstärke. Aus diesen Grund wurde im nächsten Schritt der gemessene  $\sigma$ -*F*-*T*-Verlauf in der Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht mit Hilfe von der Hopping-Leitung und von dem 3D-PFE vorausgesagten  $\sigma$ -*F*-*T*-Abhängigkeiten gefittet. Sowohl die Hopping-Leitung, als auch der 3D-PFE beschreiben die gemessene Entwicklung der elektrischen Leitfähigkeit mit der elektrischen Feldstärke und der Temperatur in der Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht mit hoher Güte. Allerdings weisen bei der Hopping-Leitung zwei Fit-Parameter ( $\sigma_0$  und  $\sigma_1$ ) eine Temperaturabhängigkeit auf, die sich nicht mit der Theorie deckt, weshalb dieser Leitungsmechanismus in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht als unwahrscheinlich eingestuft wird. Dagegen liegen alle fünf materialspezifischem Parameter bei dem 3D-PFE-Fit im Rahmen des erwarteten Wertebereichs und liefern neue Erkenntnisse über die elektrischen Eigenschaften der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht: So den Wert für die Nullfeld-Ionisierungsenergie von (510±20) meV, die aufgrund des 3D-PFE mit steigender elektrischer Feldstärke immer weiter abgesenkt wird und so zu einem exponentiellen Anstieg von p mit F führt. Weiterhin lieferte der 3D-PFE-Fit der  $\sigma$ -F-T-Kennlinie der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht einen mit SIMS-Messungen konsistenten Wert für die Akzeptorkonzentration von  $(3,2\pm0,6)\times10^{19}$  cm<sup>-3</sup>. Auch die Frage nach dem zu benutzenden Wert für die Dielektrizitätskonstante bei der 3D-PFE-Beschreibung der Ionisation von Akzeptoren in AlGaN:Mg, wurde zugunsten von  $\epsilon_{opt}$  beantwortet. Folglich erfolgt die Ionisation von Mg-Akzeptoren in der untersuchten Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht auf einer Zeitskala, die kürzer ist als die dielektrische Relaxationszeit ( $\leq$  ps).

Im nächsten Schritt erfolgte eine theoretische Beschreibung der erleichterten Ionisation von Mg-Akzeptoren in AlGaN:Mg-Übergittern mit Hilfe von Drift-Diffusions-Simulationen und des anschließenden vertikalen Transports der ionisierten Löcher und mit Hilfe der Transfermatrixmethode. Dabei wurde festgestellt, dass aufgrund der kurzen Periodenlängen im Al<sub>0,78</sub>Ga<sub>0,22</sub>N:Mg/Al<sub>0,58</sub>Ga<sub>0,42</sub>N:Mg-SPSL ( $L_p = 1,8$  nm) und im Falle des Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL ( $L_p = 2$  nm) eines zusätzlich geringen Hubs ( $\Delta Al = 6\%$ ), eine ebenfalls geringe Änderung der freien Lochdichte im Vergleich zu

AlGaN:Mg-Bulk-Schichten mit der durchschnittlichen Legierungszusammensetzung der jeweiligen Übergitter vorliegen sollte. Dagegen wird der vertikale Transport der ionisierten Löcher durch die Potenziale von SPSL-Barrieren, im Vergleich zu Bulk-Schichten, merklich eingeschränkt. In Summe wurde anhand von Simulationen eine Reduktion der vertikalen Leitfähigkeit im Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL gegenüber der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht um rund 37% (für  $F \sim 0$ ) vorausgesagt und deckt sich gut mit dem experimentell bestimmten Wert von 30%. Weiterhin wurde gezeigt, dass für ein AlGaN:Mg-SPSL mit einem durchschnittlichen Al-Anteil von 68%, ein hoher Hub ( $\Delta Al \ge 20\%$ ) und eine hohe Periodenlänge ( $L_p \ge 12$  nm) erforderlich sind, um eine höhere vertikale Leitfähigkeit im Vergleich zu der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht zu erreichen. Für noch höhere Periodenlängen steigt die relative Änderung von  $\sigma_V$  schnell an und sollte für ein Übergitter mit einem durchschnittlichen Al-Anteil von 68% für  $\Delta Al = 20\%$  und  $L_p = 20$  nm eine 37-fach höhere vertikale Leitfähigkeit erreichen als eine Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht.

Durch den 3D-PFE-Fit der  $\sigma_V$ -*F*-*T*-Kennlinie des Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitters konnten weitere Schlussfolgerungen über die Materialeigenschaften in dieser Struktur abgeleitet werden. Dazu zählt die Nullfeld-Ionisierungsenergie von  $(510\pm30)$  meV, welche einen vergleichbaren Wert wie in den Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schichten aufweist. Dieses Ergebnis stimmt auch mit den Resultaten aus Drift-Diffusions-Simulationen überein, wonach die Absenkung der Ionisierungsenergie im Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL relativ zu der Ionisierungsenergie in der  $Al_{0,68}Ga_{0,32}N:Mg-Bulk-Schicht lediglich \sim 5 meV betragen sollte und deshalb anhand der$ verwendeten Messtechnik beziehungsweise anhand der verwendeten Messmethode nicht aufgelöst werden kann. Aus dem 3D-PFE-Fit der  $\sigma_V$ -*F*-*T*-Kennlinie von dem Al<sub>0.71</sub>Ga<sub>0.29</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N:Mg-SPSL wurde auch die Akzeptorkonzentration von  $(4,7\pm0,8)\times10^{19}$  cm<sup>-3</sup> extrahiert und durch SIMS bestätigt. Es wurde zusätzlich festgestellt, dass die niedrigere Dotierkonzentration in den Al<sub>0.68</sub>Ga<sub>0.32</sub>N:Mg-Bulk-Schichten, zu einer im Rahmen des 3D-PFE mehr ausgeprägten Feld-unterstützen thermischen Ionisation von Mg-Akzeptoren, im Vergleich zu dem relativ hoch dotierten Al<sub>0.71</sub>Ga<sub>0.29</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N:Mg-SPSL, führt. In der Folge ist der Anstieg der freien Lochdichte mit der elektrischen Feldstärke und damit auch der Anstieg von  $\sigma$  mit F in den Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schichten stärker als in den Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSLs.

Auch die des  $\sigma(F,T)$ -Verlaufs **3D-PFE-Anpassung** gemessenen vom Al<sub>0.78</sub>Ga<sub>0,22</sub>N:Mg/Al<sub>0.58</sub>Ga<sub>0,42</sub>N:Mg-SPSL lieferte neue Erkenntnisse. So liegt dessen Nullfeld-Ionisierungsenergie bei  $(620\pm30)$  meV und ist damit um ganze 70 meV höher als anhand der Extrapolation auf Basis der Ionisierungsenergie von GaN:Mg aus der Literatur und dem vorher bestimmten  $E_{A,0}$ -Wert der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht erwartete wurde. Diese Diskrepanz konnte auf die niedrigere Akzeptorkonzentration im  $Al_{0,78}Ga_{0,22}N:Mg/Al_{0,58}Ga_{0,42}N:Mg-Übergitter, im Vergleich zum N<sub>A</sub> in der Al_{0,68}Ga_{0,32}N:Mg-$ Bulk-Schicht, zurückgeführt werden. Die niedrigere Dotierkonzentration im Al<sub>0,78</sub>Ga<sub>0,22</sub>N:Mg/Al<sub>0,58</sub>Ga<sub>0,42</sub>N:Mg-Übergitter, welche durch die Einstellung eines niedrigeren Cp<sub>2</sub>Mg/III-Flusses während des Wachstums beabsichtigt war, führt zu einem größeren räumlichen Abstand zwischen den einzelnen Akzeptor-Atomen und resultiert in einem weniger starken Überlapp der Coulomb-Potenziale der einzelnen Mg-Atome und damit in

einer höheren Nullfeld-Ionisierungsenergie als erwartet. Anhand des Akzeptorabstandes aus dem 3D-PFE-Fit konnte auch die Reduktion der Nullfeld-Ionisierungsenergie im Al<sub>0,78</sub>Ga<sub>0,22</sub>N:Mg/Al<sub>0,58</sub>Ga<sub>0,42</sub>N:Mg-Übergitter für den Fall der gleichen Dotierkonzentration wie in der  $Al_{0,68}Ga_{0,32}N:Mg-Bulk-Schicht bestimmt werden. Mit (560±20) meV passt die$ berechnete Änderung von  $E_{A,0}$ , aufgrund der unterschiedlichen Dotierkonzentration in den beiden Strukturen, gut zu der Diskrepanz zwischen den extrapolierten und experimentellen bestimmten Werten für die Ionisierungsenergie im Al<sub>0.78</sub>Ga<sub>0.22</sub>N:Mg/Al<sub>0.58</sub>Ga<sub>0.42</sub>N:Mg-Übergitter. Ein weiterer Effekt der niedrigen Dotierung des Al<sub>0.78</sub>Ga<sub>0.22</sub>N:Mg/Al<sub>0.58</sub>Ga<sub>0.42</sub>N:Mg-Übergitters ist die trotz des höheren Al-Anteils um etwa Faktor vier bis sechs höhere Beweglichkeit der Löcher im Vergleich zu den beiden anderen untersuchten Strukturen mit einem durchschnittlichen Al-Anteil von 68%. Schließlich steigt die vertikale Leitfähigkeit im Al<sub>0.78</sub>Ga<sub>0.22</sub>N:Mg/Al<sub>0.58</sub>Ga<sub>0.42</sub>N:Mg-Übergitter aufgrund der niedrigen Dotierkonzentration schneller an als in den beiden anderen höher dotierten Strukturen. Alle relevanten Materialparameter der untersuchten Strukturen sind in der Tabelle 2 zusammengefasst.

Schließlich hat der hier erbrachte Nachweis der 3D-PFE-Ionisation von Mg-Akzeptoren in AlGaN:Mg-Strukturen einen direkten Bezug für die Auswahl der Dotierkonzentration in diesen Schichten. Eine hohe Akzeptorkonzentration führt dabei zu einer für die Höhe der elektrischen Leitfähigkeit unerwünschten, niedrigen Lochbeweglichkeit, hat aber gleichzeitig den positiven Effekt der niedrigen Null-Feld-Ionisierungsenergie. Allerdings bleibt  $\mu_h$  nahezu unabhängig von der elektrischen Feldstärke, während  $E_{A,0}$  mit F sinkt. Die Absenkung von  $E_{A,0}$  durch F ist dabei umso stärker, je niedriger die Akzeptorkonzentration in der jeweiligen AlGaN:Mg-Schicht ist und hat ebenfalls einen höheren Anstieg von p mit F Folge. Deshalb weisen AlGaN:Mg-Schichten mit einer relativ niedrigen zur Akzeptorkonzentration, im Vergleich zu höher dotierten AlGaN:Mg-Schichten, eine höhere Lochmobilität auf, bei gleichzeitig höheren freien Lochdichte bei betriebsrelevanten Strombeziehungsweise Feldstärken. Deshalb lässt sich für die Praxis folgendes ableiten: Ist die mit konventionellen Messmethoden gemessene elektrische Leitfähigkeit (für  $F \sim 0$ ) von zwei AlGaN:Mg-Schichten mit unterschiedlich hoher Dotierkonzentration vergleichbar, so ist für den Einsatz in den DUV-LEDs die Schicht mit der niedrigeren Dotierkonzentration zu bevorzugen. Denn im LED-Betrieb wird die niedriger dotierte AlGaN:Mg-Schicht, aufgrund des 3D-PFE, eine höhere elektrische Leitfähigkeit aufweisen. Neben DUV-LEDs sind diese Erkenntnisse vor allem für AlGaN-basierte UVC-Laserdioden wichtig. Denn für die Mantelschichten von UVC-LD werden mehrere hundert Nanometer dicke p-AlGaN-Schichten mit einem hohen Al-Anteil benötigt, in denen aufgrund der hohen Laserschwellen noch höhere elektrische Felder als über den AlGaN:Mg-Schichten in DUV-LEDs aufgebaut werden.

Abschließend soll noch darauf hingewiesen werden, dass es in den letzten Jahren bei einem zu der Mg-Dotierung alternativen Konzept der *p*-Dotierung von AlGaN-Schichten, den sogenannten DPD-Schichten (engl. *"distibuted polarization doping"*), große Fortschritte gegeben hat [20, 142]. Durch die graduelle Reduktion des Al-Anteils in Wachstumsrichtung, lässt sich durch die Ausnutzung der internen Polarisationsfelder in AlGaN eine *p*-Dotierung ohne die Verwendung von Dotieratomen umsetzen. Der Einsatz von *p*-DPD-Schichten trug

auch einen großen Teil zur Demonstration der ersten cw-betriebenen UVC-LDen bei [91]. Es existieren bisher keine Ergebnisse über die vertikale Leitfähigkeit von *p*-DPD-Schichten. Allerdings wurde in Zusammenarbeit mit dem Ferdinand-Braun-Institut anhand von 233 nm DUV-LEDs demonstriert [143], dass eine Erhöhung der DPD-Dicke um 60 nm auch für Strukturen mit einem durchschnittlichen Al-Anteil von über 80% zu keiner messbaren Erhöhung der Betriebsspannung der Bauelemente führt, siehe Anhang B: Elektrische Leitfähigkeit von DPD-Schichten. Damit sollte die vertikale Leitfähigkeit weitaus höher sein als in Mg-dotierten AlGaN-Schichten. Ob die hier vorgeschlagenen SPSL-Konfigurationen, die theoretisch eine höhere vertikale Leitfähigkeit als Bulk-AlGaN:Mg-Schichten versprechen, vergleichbare  $\sigma_V$ -Werte zu *p*-DPD-Schichten liefern können, bleibt abzuwarten. Unabhängig davon sind die hier gewonnen Erkenntnisse über die elektrischen Eigenschaften in AlGaN:Mg-Schichten weiterhin aktuell und tragen zum besseren Verständnis der Ladungsträgerdynamik in DUV-LEDs bei. Des Weiteren kann die ausgearbeitete Methode zur Bestimmung der vertikalen Leitfähigkeit in Übergittern auch in anderen Materialsystemen angewandt werden und so auch außerhalb des AlGaN-Materialsystems zur Verbesserung von Bauelementen beisteuern.

Serien- Nummer	Al-Anteil Barrieren/ Wells (%)	Cp2Mg/III- Verhältnis (%)	<i>E<sub>A,0</sub></i> (meV)	$N_A^{3D-PFE}$ (10 <sup>19</sup> cm <sup>-3</sup> )	$N_A^{SIMS}$ (10 <sup>19</sup> cm <sup>-3</sup> )
1	71/65	1,5	510 <u>+</u> 20	3,2 <u>±</u> 0,6	4,1 <u>±</u> 0,6
2	68	1,5	510 <u>+</u> 30	4,7 <u>±</u> 0,8	6±0,6
3	86/65	1	620 <u>+</u> 30	1,2±0,2	-

Tabelle 2: Zusammenfassung der relevanten Parameter von den drei untersuchten AlGaN:Mg-Strukturen. Hierbei sind  $N_A^{3D-PFE}$  und  $N_A^{SIMS}$  jeweils die Akzeptordichten bestimmt anhand des 3D-PFE-Fits und die Akzeptordichte bestimmt anhand von SIMS-Messungen.

# 4 Ladungsträgerrekombinationsmechanismen von 265 nm LEDs

Die Entwicklung von DUV-LEDs schreitet mit großen Schritten voran und erfolgt historisch gesehen bedeutend schneller als die Entwicklung von konventionellen Leuchtmitteln und sogar schneller als bei LEDs in manchen Teilen des sichtbaren Spektrums [38]. Da die Entwicklung dieser Bauelemente allerdings erst seit etwa 20 Jahren stattfindet [8], ist die Effizienz von DUV-LEDs gerade an der Schwelle, um deren großflächigen Einsatz für die zahlreichen Anwendungen zu ermöglichen. Um die effizienzlimitierenden Mechanismen in einer LED zu identifizieren und die Optimierung der Bauelemente gezielt zu gestalten, ist der externen Quanteneffizienz in drei Teileffizienzen: eine Aufteilung die Ladungsträgerinjektionseffizienz, die strahlende Rekombinationseffizienz und die Lichtextraktionseffizienz nützlich. Anhand von kalibrierten Raytracing-Simulationen kann die Lichtextraktionseffizienz einer LED vergleichsweise zuverlässig bestimmt werden (Kapitel 2.3). Mit Hilfe der Lichtextraktionseffizienz ist auch die Ermittlung der internen Quanteneffizienz, dem Produkt aus  $\eta_{RRE}$  und  $\eta_{CIE}$ , durch die direkte EL-Messung der externen Quanteneffizienz und das anschließende Dividieren durch den simulierten  $\eta_{LEE}$ -Wert vergleichsweise einfach. Zu welchen Anteilen  $\eta_{RRE}$  und  $\eta_{CIE}$  zur  $\eta_{IQE}$  und damit zur  $\eta_{EOE}$  von DUV-LEDs beitragen, ist dagegen bedeutend schwieriger herauszufinden. Dies hängt vor allem mit dem experimentell nicht leichten oder gar noch nicht möglichen Zugang zu den beiden Größen zusammen. Um dennoch den Einfluss von  $\eta_{RRE}$  und  $\eta_{CIE}$  auf die Gesamteffizienz der LEDs einzuschätzen, wird deshalb oft auf Simulationen zurückgegriffen.

Die strahlende Rekombinationseffizienz wird maßgeblich von der Art und der Dichte von elektrisch aktiven Defekten beeinflusst an denen Ladungsträger nicht-strahlend rekombinieren können. Im Vergleich zu LEDs auf Basis von GaAs und InP weisen auf Fremdsubstraten gewachsene AlGaN-LEDs eine äußerst hohe Dichte von Durchstoßversetzungen auf [144]. Um die vergleichsweise niedrige Effizienz von DUV-LEDs



Abbildung 39: Strahlende Rekombinationseffizienz als Funktion der TDD berechnet mit Hilfe der Simulationssoftware SiLENSe nach dem Karpov-Makarov-Modell für eine 265 nm LED. a) Einfluss der Lochmobilität in der MQW-Region auf die  $\eta_{RRE}$ -TDD-Abhängigkeit. b) Änderung der  $\eta_{RRE}$ -TDD-Abhängigkeit gegenüber der Referenz aus a), durch die Berücksichtigung einer zusätzlichen nicht strahlenden Rekombinationszeit (3×10<sup>-8</sup> s) an Punktdefekten (gelb) und durch die Berücksichtigung der indirekten Auger-Rekombination (C = 4×10<sup>-30</sup> cm<sup>6</sup> s<sup>-1</sup>), ohne den Einfluss der PD (blau).

zu erklären, wird deshalb oft von einer dominanten Rolle der TDs bei der nicht-strahlenden Rekombination in der MQW-Region von AlGaN-Bauelementen ausgegangen [145]. Dabei wird die Abhängigkeit der strahlenden Rekombinationseffizienz von der TDD meistens im Rahmen des Karpov-Makarov-Modells beschrieben, vergleiche Kapitel 2.4.4.

Der Verlauf der  $\eta_{RRE}$ -TDD-Abhängigkeit nach diesem Modell ist für eine 265 nm LED<sup>1</sup> in der Abbildung 39 (a) mit einer schwarzen Linie gezeigt. Lässt man alle anderen nichtstrahlenden Rekombinationsmechanismen außer Acht, erreicht die strahlende Rekombinationseffizienz von 265 nm LEDs für TDDs  $\leq 10^7$  cm<sup>-2</sup> einen Wert von etwa 100%. Solch niedrige Durchstoßversetzungsdichten können zum Beispiel beim Wachstum von AlN-Schichten auf AlN-Substraten beobachtet werden [146]. Für höhere TDDs wird der Abstand zwischen den einzelnen Durchstoßversetzungen immer geringer und erreicht schließlich die Höhe der Diffusionslänge von Minoritätsladungsträgern (Löchern). In diesem Bereich nimmt der  $\eta_{RRE}$ -Wert rapide ab. Für noch höhere Durchstoßversetzungsdichten ( $\geq 10^{10}$  cm<sup>-2</sup>), welche typischerweise beim Wachstum von AlGaN-LEDs auf Fremdsubstraten und ohne eine TD-Reduktion gegeben sind [26], liegt die strahlende Rekombinationseffizienz unter einem Prozent. Allerdings hängt der simulierte  $\eta_{RRE}$ -Verlauf stark von der Größe der verwendeten Parameter ab. So wird die Höhe der strahlenden Rekombinationseffizienz bei einer bestimmten TDD maßgeblich durch die Diffusionslänge beziehungsweise die Beweglichkeit der Minoritätsladungsträger in den AlGaN-Quantentöpfen beeinflusst<sup>2</sup>. Dabei sind die Werte der beiden Größen im AlGaN-

 $<sup>^1</sup>$  Die Heterostruktur der simulierten LED entspricht der im Kapitel 2.1 beschriebenen Heterostruktur. Dabei wird von  $B=2,4\times 10^{-11}\,{\rm cm^3s^{-1}}$ ausgegangen.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Eine ausführliche Betrachtung befindet sich in Kapitel 2.4.4.

Materialsystem nicht genau bekannt [147]. Im Falle einer niedrigeren Beweglichkeit der Löcher, im Vergleich zum vorher angenommenen Wert von  $\mu_h$  = 5 cm<sup>2</sup>(Vs)<sup>-1</sup>, wird die nichtstrahlende Rekombination der Löcher an TDs unwahrscheinlicher, weshalb  $\eta_{RRE}$  insgesamt steigt. Das umgekehrte, also eine wahrscheinlichere Rekombination der Löcher an TDs, gilt dagegen für höhere Loch-Beweglichkeiten,  $\eta_{RRE}$  sinkt. Wie in der Abbildung 39 (a) zu sehen ist, hat die Beweglichkeit der Löcher insbesondere in dem TDD-Bereich zwischen  $5 \times 10^7$  cm<sup>-2</sup> und  $5 \times 10^9$  cm<sup>-2</sup> einen starken Einfluss auf die  $\eta_{RRE}$ -Werte. Als Beispiel beträgt die strahlende Rekombinationseffizienz bei einer Durchstoßversersetzungsdichte von  $1 \times 10^9$  cm<sup>-2</sup> für  $\mu_h$  = 10 cm<sup>2</sup>(Vs)<sup>-1</sup> [97, 119] etwa 30%, steigt für  $\mu_h$  = 5 cm<sup>2</sup>(Vs)<sup>-1</sup> auf 38% und erreicht schließlich 54% für  $\mu_h$ = 2 cm<sup>2</sup>(Vs)<sup>-1</sup> [11]. Einen weiteren Unsicherheitsfaktor des simulierten  $\eta_{RRE}$ -TDD-Verlaufs stellt der umstrittene Wert des Auger-Koeffizienten (Kapitel 2.4.2) dar. Während bei der hier simulierten Stromdichte von 20 Acm<sup>-2</sup> die direkte Auger-Rekombination ( $C \sim 10^{-34} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$  [47, 48]) kaum einen Einfluss auf die strahlende Rekombinationseffizienz hat, sinkt der  $\eta_{RRE}$ -Wert erheblich ab, wenn auch die indirekte Auger-Rekombination ( $C = 4 \times 10^{-30}$  cm<sup>6</sup> s<sup>-1</sup>) berücksichtigt wird<sup>1</sup>, Abbildung 39 (b). Dabei liegt die strahlende Rekombinationseffizienz bei j = 20 Acm<sup>-2</sup> stets unter 100% und sättigt ab TDD  $< 10^8$  cm<sup>-2</sup> bei knapp über 50%. Für TDD  $> 2 \times 10^9$  cm<sup>-2</sup> hat die Augerder Rekombination, aufgrund hohen SRH-Rekombination, dagegen einen vernachlässigbaren Einfluss auf  $\eta_{RRE}$ . Der nächste Aspekt, welcher eine große Unsicherheit der simulierten  $\eta_{RRE}$ -TDD-Abhängigkeit mit sich bringt, sind Punktdefekte. Punktdefekte sind 0-dimensionale Defekte, die während des LED-Wachstums eingebaut werden können. Dabei kann es sich um Verunreinigungen in Form von Kohlenstoff, Silizium, Sauerstoff oder auch um Vakanzen sowie deren Komplexe handeln. Punktdefekte können wie Durchstoßversetzungen akzeptorartige Zustände tief in der Halbleiterbandlücke formen und so freie Ladungsträger über die SRH-Rekombination einfangen [148, 149]. Folgt man den Untersuchungen von [147, 150], so können PD vor allem bei niedrigen TDDs die nichtstrahlende Rekombination in AlGaN-Schichten dominieren. Da der genaue Einfluss der einzelnen PD auf die strahlende Rekombinationseffizienz in AlGaN-Schichten ebenfalls noch nicht genau erforscht ist, können die Auswirkungen des Vorhandenseins von Punktdefekten lediglich durch die Annahme einer zur TD-Rekombination zusätzlichen nicht-strahlenden Rekombinationszeit in den Quantentöpfen veranschaulicht werden. Für die in Abbildung 39 (b) ausgewählte nicht-strahlenden Rekombinationszeit an Punktdefekten von  $3 \times 10^{-8}$  s, wird die strahlende Rekombinationseffizienz für TDD  $< 2 \times 10^9$  cm<sup>-2</sup> insgesamt abgesenkt und sättigt bei etwa 82%.

Auch experimentell ist der Einfluss der einzelnen Defekte auf den Wert der strahlenden Rekombinationseffizienz nicht einfach zu bestimmen. Dies hängt einerseits mit der nicht trivialen, aufwendigen und mitunter ungenauer Bestimmung der Art sowie der Dichte von Defekten zusammen. Andererseits ist die Messung der strahlenden Rekombinationseffizienz selbst nicht einfach. Verschiedene Messmethoden wurden in der Literatur diskutiert [38], eine allgemein akzeptierte Methode die eine zuverlässige Bestimmung der  $\eta_{RRE}$ -Werte erlaubt, steht aber noch nicht zur Verfügung. Meistens kommt

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Eine ausführliche Diskussion zu den einzelnen Auger-Übergängen ist in Kapitel 2.4.2 zu finden.

für die Bestimmung von  $\eta_{RRE}$  die zeitaufgelöste Photolumineszenz-Spektroskopie (engl. *time-resolved photoluminescence spectroscopy*, TRPL) zum Einsatz. Allerdings werden dabei anstelle von LEDs, spezielle Proben ohne eine *p*-Seite verwendet und unter optischer und nicht elektrischer Anregung charakterisiert. Da dies nicht den realen Verhältnissen in einer LED entspricht, sind die mittels TRPL bestimmten  $\eta_{RRE}$ -Werte nicht zwingend auf die strahlende Rekombinationseffizienz in der MQW-Region von Bauelementen unter elektrischer Spannung übertragbar.

Die experimentelle Quantifizierung der Ladungsträgerinjektionseffizienz gestaltet sich noch schwieriger als die der strahlenden Rekombinationseffizienz. Denn bislang existiert keine Methode für die direkte Messung von  $\eta_{CIE}$ . In den meisten Arbeiten zur Ladungsträgerinjektionseffizienz von AlGaN-Bauelementen wird auf Drift-Diffusions-Simulationen zurückgegriffen oder es werden Bauelemente mit unterschiedlichen EBL-Konzepten und/oder unterschiedlichen *p*-Seiten relativ zueinander verglichen [151]. Es existieren nur einzelne Publikationen über absolute  $\eta_{CIE}$ -Werte von DUV-LEDs, welche experimentell, auf *indirektem* Wege, bestimmt wurden. Dabei wird für 265 nm LEDs von  $\eta_{CIE} \sim 50\%$  berichtet [68, 83]. Ausgehend von diesem Wert, wird die Gesamteffizienz von DUV-LEDs um etwa die Hälfte durch die Ladungsträgerinjektionseffizienz reduziert. Die Erfahrung mit Drift-Diffusions-Simulationen zeigt, dass  $\eta_{CIE}$  stark durch die Heterostruktur sowie die Materialeigenschaften der einzelnen LED-Schichten beeinflusst wird. Damit kann die Ladungsträgerinjektionseffizienz der Bauelemente mit abweichender Heterostruktur und Wachstumsbedingungen im Vergleich zu den in [68, 83], höher oder niedriger als 50% ausfallen und bedarf deshalb einer zuverlässigen Messung.

Ausgehend von der oben aufgeführten Diskussion werden für das aktuelle Kapitel folgende Ziele formuliert: die externe Quanteneffizienz von 265 nm LEDs mit vergleichbarer Punktdefektdichte aber unterschiedlicher Durchstoßversetzungsdichte zu analysieren und diese für jedes einzelne charakterisierte Bauelement in drei Teileffizienzen:  $\eta_{CIE}$ ,  $\eta_{RRE}$  und  $\eta_{LEE}$  aufzuteilen. Zusätzlich soll auch die Höhe des Auger-Koeffizienten sowie des A- und des B-Parameters in den untersuchten 265 nm LEDs bestimmt werden. Um dieses Ziel zu erreichen, wird ein auf dem ABC-Modell basierendes Verfahren angewandt, welches die Extraktion der maximalen strahlenden Rekombinationseffizienz aus der gemessenen Abhängigkeit der externen Quanteneffizienz von der Emissionsleistung, anhand von elektrisch charakterisierten LEDs, erlaubt. Die Ladungsträgerinjektionseffizienz wird aus der gemessenen externen Quanteneffizienz, der extrahierten strahlenden Rekombinationseffizienz und der simulierten Lichtextraktionseffizienz abgeleitet. Für die Berechnung der Lichtextraktionseffizienz wird eine auf der Monte-Carlo-Methode basierende Raytracing-Simulationssoftware verwendet. Die Untersuchungen werden anhand von DUV-LEDs durchgeführt, deren Wachstum gleichzeitig auf vier unterschiedlichen AlN/Saphir-Templates mit verschiedenen TDDs erfolgte.

Das Kapitel ist wie folgt gegliedert: in Kapitel 4.1 werden zunächst die verwendeten Template-Technologien vorgestellt. In Kapitel 4.2 werden die Ergebnisse der Elektrolumineszenz-Charakterisierung erläutert und in Bezug auf die TDD im MQW der einzelnen 265 nm LEDs eingeordnet. Anschließend wird in Kapitel 4.3 die verwendete Methode für die Extraktion der strahlenden Rekombinationseffizienz vorgestellt. Die  $\eta_{RRE}$ -

Werte der analysierten Probenserie sind in Kapitel 4.4 zu finden. Als nächstes wird neben der Abschätzung der drei Rekombinationskonstanten des ABC-Modells (Kapitel 4.5), auch der Frage nachgegangen, wie sich die Effizienz von 265 nm LEDs verändern würde, wenn denn deren Wachstum auf Substraten beziehungsweise Templates mit höheren oder niedrigen TDDs erfolgen würde (Kapitel 4.6). Schließlich wird in Kapitel 4.7 die Berechnung der Ladungsträgerinjektionseffizienz für die Bauelemente aus der untersuchten Probenserie durchgeführt. Die Ergebnisse werden in Kapitel 4.8 zusammengefasst.

## 4.1 Templates und Heterostruktur der 265 nm DUV-LEDs

Um Einfluss der Durchstoßversetzungsdichte den auf die strahlende Rekombinationseffizienz von 265 nm LEDs zu untersuchen, wurden die Bauelemente auf vier unterschiedlichen AlN-Saphir-Templates<sup>1</sup>, mit vier unterschiedlichen Ansätzen zur TDD-Reduktion gewachsen. Zum Einsatz kamen ein planares AlN/Saphir-Template, ein planares AlN/Saphir-Template, mit einem zusätzlichen Hochtemperatur-Schritt (engl. hightemperature annealed, HTA), ein ELO-AlN/Saphir-Template und ein ELO-Template, mit einem zusätzlichen HTA-Schritt (HTA-ELO). Das Wachstum<sup>2</sup> der LEDs auf den einzelnen Templates erfolgte simultan, was eine vergleichbare Punktdefektdichte in der MQW-Region sowie eine vergleichbare Heterostruktur für alle Bauelemente aus der untersuchten Serie sicherstellte. Die in Abbildung 3 dargestellte Heterostruktur der untersuchten Bauelemente wurde bereits als Beispiel für den Aufbau einer DUV-LED in Kapitel 2.1 detailliert erläutert und soll an dieser Stelle nicht wiederholt werden. Mehr Details in Bezug auf die Wachstumsbedingungen und die Heterostruktur können aus [22] entnommen werden.

Um die Defektdichte innerhalb der Quantentöpfe untersuchen zu können, wurden zusätzlich zu den LEDs auch die sogenannten MQW-Proben gewachsen. Diese haben, bis auf die ausgelassene *p*-Seite und eine dickere letzte MQW-Barriere (40 nm), nominell dieselbe Heterostruktur wie die untersuchten 265 nm LEDs. Für die Ermittlung der TDD in den einzelnen MQW-Proben kam die panchromatische Kathodolumineszenz (engl. *cathodoluminescence, CL*)<sup>3</sup> zum Einsatz. Um die Rekombination in Halbleiterschichten zu untersuchen, werden bei der Kathodolumineszenz Elektronen-Loch-Paare mittels eines Elektronenstrahls angeregt. Anschließend rekombinieren die angeregten Ladungsträger strahlend (untereinander) oder nicht strahlend (an Defekten). Das emittierte Licht, in Form von CL-Intensitätsaufnahmen, wird dabei ortsaufgelöst aufgezeichnet. Bereiche an den Stellen, wo die strahlende Rekombination reduziert ist, folglich Defekte zu finden sind, erscheinen dabei als dunkle Punkte (engl. *dark spot, DS*). Durchstoßversetzungen erstrecken sich in Wachstumsrichtung durch die gesamte Heterostruktur und weisen

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Die AlN/Saphir-Templates wurden von Sylvia Hagedorn (FBH) und Sebastian Walde (FBH) bereitgestellt.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Das Wachstum erfolgte durch Norman Susilo (TUB) und Eviathar Ziffer (TUB).

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Die CL-Untersuchungen erfolgten durch Carsten Netzel (FBH).

deshalb, im Gegensatz zu den nulldimensionalen Punktdefekten, einen ausgeprägten CL-Kontrast auf [147]. Durch die Auszählung von Dunkelpunkten in CL-Intensitätsaufnahmen der MQW-Proben wurde die Dunkelpunktdichte (engl. *dark spot density, DSD*) bestimmt und als Äquivalent zu der Dichte der TDs angenommen. Um das Verhältnis zwischen Signal und Rauschen im Vergleich zur Raumtemperatur zu erhöhen, wurden die CL-Messungen bei 80K durchgeführt. Es soll darauf hingewiesen werden, dass zusätzlich zu den CL-Untersuchungen auch andere Methoden zur Abschätzung der TDD anhand von MQW-Proben zum Einsatz kamen. Dabei wurde neben HR-XRD auch die hochauflösende Transmissionselektronenmikroskopie angewandt [27, 147]. Alle drei Messmethoden liefern vergleichbare Ergebnisse, weshalb die im Kapitelverlauf aufgeführten Werte aus den CL-Untersuchungen als eine verlässliche Abschätzung der jeweiligen TDD angenommen werden können.

Neben der TDD variiert auch die Lichtextraktionseffizienz der 265 nm LEDs mit Wachstum auf den unterschiedlichen Templates. Die Gründe hierfür sind die unterschiedliche Strukturierung, der Verspannungsgrad sowie die Ober- und Grenzflächenmorphologie der Templates. Durch Messungen der Oberflächenrauheit der Saphirrückseite, mittels der Atomkraftmikroskopie<sup>1</sup> (engl. *atomic force microscopy, AFM*), sowie des Polarisationsgrades, des aus der Mesa-Spaltfacette emittierten Lichts, konnte  $\eta_{LEE}$  der untersuchten Bauelemente mit Hilfe von Monte-Carlo Raytracing-Simulationen präzise bestimmt werden<sup>2</sup>.

Die verwendeten Template-Technologien, inklusive der ermittelten TDDs und der berechneten  $\eta_{LEE}$ -Werte, werden im Folgenden erläutert.

## **Planares Template**

Die einfachste Methode zur Reduktion von Durchstoßversetzungen in AlN/Saphir-Templates ist das Überwachsen eben dieser mit vergleichsweise dicken AlN-Schichten, Abbildung 40 (a). So kann die TDD durch das Abklingen einiger Durchstoßversetzungen auf dem Weg in die MQW-Region sowie durch gegenseitige Annihilation im Vergleich zur TDD in dünnen Schichten erheblich reduziert werden [27]. Im vorliegenden Fall wurde das planare Template mit einer etwa 1,5 µm dicken AlN-Schicht überwachsen. Wie anhand der CL-Aufnahme in Abbildung 41 (a) erkennbar ist, weist die MQW-Probe mit Wachstum auf dem planaren Template innerhalb der untersuchten Probenserie die höchste TDD von  $(4,0\pm0,3)\times10^9$  cm<sup>-2</sup> auf. Der simulierte Werte für die Lichtextraktionseffizienz von 265 nm LEDs auf dem planaren Template beträgt dabei  $(5,9\pm0,6)\%$ .

## **HTA-Template**

Eine relativ neue und gleichzeitig vielversprechende Technologie zur Reduktion der TDD in AlN/Saphir-Templates ist die Anwendung einer Hochtemperaturbehandlung. Dabei wird

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Die AFM-Aufnahmen wurden von Eviathar Ziffer (TUB) durchgeführt.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Die Messung des Polarisationsgrades und die anschließende Simulation von der Lichtextraktionseffizienz erfolgte durch Martin Guttmann (FBH).



Abbildung 40: Innerhalb der 265 nm LED-Probenserie verwendete Templates mit den zugehörigen Herstellungsschritten. (a) planares, (b) HTA-, (c) ELO- und (d) HTA-ELO-AlN/Saphir-Template.

das AlN/Saphir-Template über einen Zeitraum von einigen Stunden vergleichsweise hohen Temperaturen (> 1500°C) ausgesetzt, Abbildung 40 (b). Die zugeführte thermische Energie führt zur Ausheilung der Kristallstruktur und zu einer signifikanten Reduktion der TDD im Vergleich zum nicht getemperten AlN/Saphir [152, 153]. Bei dem hier untersuchten HTA-Template wurde das Saphirsubstrat mit einer 900 nm dicken AlN-Schicht überwachsen und anschließend bei 1700°C für fünf Stunden in einer Stickstoffatmosphäre getempert. Durch diese Maßnahme konnte die Durchstoßversetzungsdichte auf  $(1,1\pm0,05)\times10^9$  cm<sup>-2</sup> reduziert werden, Abbildung 41 (b).

Ein weiterer Effekt den der HTA-Schritt mit sich bringt, ist der veränderte Verspannungszustand der gesamten Heterostruktur. Denn der durch die Gitterfehlanpassung zwischen AlN und Saphir erzeugte Kristallstress (vergleiche Kapitel 2.4.3) kann aufgrund der reduzierten TDD weniger effektiv abgebaut werden. Deshalb weist das HTA-AlN beim Wachstum auf Saphir, im Vergleich zum nicht getemperten AlN, eine zusätzliche kompressive Verspannung auf. Da die LEDs vollverspannt zum Template gewachsen werden, sind auch alle darüber gewachsenen Schichten, inklusive der MQW-Region, kompressiv verspannt. Nähere Details hierzu sind in Kapitel 4.4 zu finden. Die erhöhte kompressive Verspannung in der MQW-Region führt zu einer Modifikation der Bandstruktur und der daraus resultierenden Änderung des Polarisationsgrades vom emittierten Licht. Die Emission wird dabei zunehmend transversal elektrisch (TE) polarisiert (senkrecht zur Wachstumsebene) und der transversal magnetisch (TM) polarisierte Lichtanteil (parallel zur Wachstumsebene) sinkt [154]. Die in dieser Arbeit untersuchten Bauelemente sind designt, um das Licht überwiegend durch das Saphir-Substrat (in Richtung der Wachstumsachse) auszukoppeln. Somit ist eine stärkere TE-Polarisation des in der MQW-Region generierten Lichts, von Vorteil für die Lichtextraktionseffizienz der Bauelemente [30]. Im Vergleich zu Bauelementen mit Wachstum auf dem planaren Template, steigt deshalb der  $\eta_{LEE}$ -Wert für mehr kompressiv verspannte 265 nm LEDs auf HTA-AlN/Saphir und beträgt  $(6,1\pm0,6)$ %.



Abbildung 41: Mittels panchromatischer Kathodolumineszenz aufgenommene Intensitätsaufnahmen von MQW-Proben mit Wachstum auf (a) planaren, (b) HTA- (c) ELOund (d) HTA-ELO-AlN/Saphir-Templates. Die ermittelten Werte der Dunkelpunktdichten sind in den jeweiligen Abbildungen vermerkt.

#### **ELO-Template**

Eine weitere Technik um die TDD von AlN/Saphir-Templates zu reduzieren, ist das epitaktische laterale Überwachsen von strukturiertem AlN [155]. Bei den in dieser Arbeit verwendeten ELO-Templates, wurde eine auf Saphir gewachsene und etwa 750 nm dicke AlN-Schicht mit Hilfe von photolithographischen Verfahren, durch das Trockenätzen, streifenförmig strukturiert, Abbildung 40 (c). Die geätzten Gräben haben eine Breite von etwa 1,5 µm und werden von ebenfalls etwa 1,5 µm breiten Stegen voneinander getrennt. Das resultierende periodische Streifenmuster wurde mit einer 5,5 µm dicken AlN-Schicht überwachsen und koalesziert bereits nach etwa 3 µm über den mit Luft gefüllten Hohlräumen (engl. Voids). Diese Voids sind aus zwei Gründen von Vorteil für die Effizienz der anschließend gewachsenen LEDs. Der erste Grund ist die unterbrochene Ausbreitung von TDs über den Hohlräumen. Dies führt zu einer periodischen Verteilung der TDD mit defektarmen Bereichen über den ELO-Voids (TDD =  $1 \times 10^9$  cm<sup>-2</sup>) und defektreichen Bereichen<sup>1</sup> (TDD =  $2 \times 10^9$  cm<sup>-2</sup>) zwischen den ELO-Voids, Abbildung 41 (c). Die mittlere Durchstoßversetzungsdichte in der MQW-Region auf ELO-AlN/Saphir gewachsener DUV-LEDs liegt somit bei (1,5±0,2)×10<sup>9</sup> cm<sup>-2</sup>. Der zweite Grund wieso die Voids für die Effizienz der anschließend gewachsenen Bauelemente von Vorteil sind, ist die zusätzliche optische Streuung. Dadurch sinkt der Anteil an der AlN-Saphir-Grenzfläche total reflektierter Strahlen [30] und die Lichtextraktionseffizienz steigt auf  $(6,8\pm0,7)\%$ .

Trotz der Vorteile, welche die ELO-Strukturierung mit sich bringt, bleibt die Herstellung von ELO-Templates technologisch aufwendig und teuer. Deshalb wird weiterhin nach alternativen Verfahren gesucht, welche eine Reduktion der TDD erlauben und weniger herstellungs- und kostenintensiv sind.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Es soll darauf hingewiesen werden, dass die Dichte der Durchstoßversetzungen in den defektreichen Bereichen auf dem ELO-Template (TDD =  $2 \times 10^9$  cm<sup>-2</sup>) etwa zweimal kleiner ist als die TDD auf dem planaren Template ( $4 \times 10^9$  cm<sup>-2</sup>). Dies liegt vermutlich an der höheren Gesamtdicke der AlN-Schicht von etwa 6,2 µm beim ELO-Template und lediglich 1,5 µm dicken AlN-Schicht auf dem planaren Template.

#### **HTA-ELO-Template**

Um die Vorteile der ELO- und der HTA-Techniken zusammenzuführen und so von der höheren Lichtextraktionseffizienz und der reduzierten TDD zu profitieren, kann das Wachstum von DUV-LEDs auf HTA-ELO-AlN/Saphir erfolgen [22]. Zu diesem Zweck wurde beim verwendeten HTA-ELO-Template zuerst eine 700 nm dicke AlN-Schicht auf dem Saphirsubstrat abgeschieden und für fünf Stunden bei 1700°C in einer Stickstoffatmosphäre getempert. Anschließend wurde das ELO-Streifenmuster in die HTA-AlN-Schicht reingeätzt und mit 5,4 µm AlN überwachsen, Abbildung 40 (d). Durch die Kombination der ELO- und der HTA-Verfahren konnte die Durchstoßversetzungsdichte auf  $(0,95\pm0,1)\times10^9$  cm<sup>-2</sup> abgesenkt werden, Abbildung 41 (d). Schließlich beträgt die Lichtextraktionseffizienz, der auf dem HTA-ELO-Template gewachsenen 265 nm LEDs,  $(6,7\pm0,7)\%$ .

Um eine verlässliche elektrooptische Untersuchung der hergestellten Proben zu erlauben, wurden diese im Anschluss an das Wachstum gleichzeitig und unter Verwendung von standard-photolithographischen Techniken zu LEDs prozessiert<sup>1</sup>. Dabei wurden zunächst die Mg-Akzeptoren in den *p*-dotierten Schichten thermisch, bei 600°C für 20 Minuten in einer Sauerstoffatmosphäre, aktiviert. Im nächsten Schritt wurde der *n*-Kontakt in Form eines V/Al/Ni/Au-Metallstapels (15/90/20/30 nm) aufgedampft und anschließend bei 700°C für 45 s in einer Stickstoffatmosphäre getempert. Schließlich wurde im letzten Prozess-Schritt eine Pd/Au-Metallsierung (50/350 nm) für den *p*-Kontakt abgeschieden. Alle relevanten Kenndaten für die untersuchte Probenserie sind in der Tabelle 3 zusammengefasst.

AlN/Saphir Template	TDD ×10 <sup>9</sup> (cm <sup>-2</sup> )	<i>P<sub>out</sub></i> (mW) bei 100 Acm <sup>-2</sup>	$\eta_{EQE}^{max}$ (%)	$\eta_{LEE}$ (%)	$\eta_{IQE}^{max}$ (%)
planar	4,0±0,3	2,9	0,4	5,9 <u>+</u> 0,6	5
HTA	1,1 <u>+</u> 0,05	9,2	1,4	6,1 <u>+</u> 0,6	23
ELO	1,6 <u>+</u> 0,2	11,6	1,8	6,8 <u>±</u> 0,7	25
HTA-ELO	0,95 <u>+</u> 0,1	12,3	1,9	6,7 <u>±</u> 0,7	27

Tabelle 3: Zusammenfassung von relevanten Kenndaten zu den untersuchten 265 nm LEDs mit Wachstum auf unterschiedlichen AlN/Saphir-Templates.

# 4.2 Elektrooptische Charakterisierung der 265 nm LEDs

Um herauszufinden wie das Wachstum auf unterschiedlichen AlN/Saphir-Templates die Effizienz von 265 nm LEDs beeinflusst, wurden auf den jeweiligen Wafern mehrere

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Die Prozessierung wurde von Luca Sulmoni (TUB) durchgeführt.



Abbildung 42: In Abhängigkeit von der Stromdichte gepulst aufgenommene optische Ausgangsleistung und externe Quanteneffizienz von 265 nm LEDs mit Wachstum auf unterschiedlichen AlN/Saphir-Templates. Die Messungen erfolgten auf Waferebene.

Bauelemente mittels EL-Messungen<sup>1</sup> elektrooptisch charakterisiert. Die Ergebnisse der EL-Charakterisierung sind in Form von repräsentativen  $P_{out}$ - $\eta_{EQE}$ -*j*-Kennlinien in der Abbildung 42 zusammengefasst. Dabei wird für Bauelemente mit Wachstum auf planaren, HTA-, ELO- und HTA-ELO-Templates jeweils eine optische Ausgangsleistung von 2,9 mW, 9,2 mW, 11,6 mW und 11,3 mW bei *j* = 100 Acm<sup>-2</sup> erreicht. Die zugehörigen maximalen externen Quanteneffizienzen ( $\eta_{EQE}^{max}$ ) liegen dabei bei 0,4% (planar), 1,4% (HTA), 1,8% (ELO) und 1,9% (HTA-ELO). Um die Effizienz der Bauelemente vom Einfluss der unterschiedlichen Lichtextraktionseffizienzen zu bereinigen, ist die Betrachtung der maximalen internen Quanteneffizienz:  $\eta_{IQE}^{max} = \eta_{EQE}^{max} / \eta_{LEE} = \eta_{RRE}^{max} \cdot \eta_{CIE}$  sinnvoll. Durch die Division der gemessenen  $\eta_{EQE}^{max}$  und der simulierten  $\eta_{LEE}$ , ergeben sich für die durchschnittlichen  $\eta_{IQE}^{max}$ -Werte der untersuchten 265 nm LEDs: 5% (planar), 23% (HTA), 25% (ELO) und schließlich 27% (HTA-ELO), Abbildung 43.

Die ermittelten  $\eta_{IQE}^{max}$ -Werte sind im Rahmen des ABC-Modells nicht ohne Weiteres anhand der Änderung von  $\eta_{RRE}$  durch die verschiedenen TDD der einzelnen Templates erklärbar. Zwar beinhaltet die maximale interne Quanteneffizienz auch einen  $\eta_{CIE}$ -Anteil und kann der strahlenden Rekombinationseffizienz nicht direkt gleichgesetzt werden, allerdings sollte die Ladungsträgerinjektionseffizienz in der untersuchten Probenserie aufgrund der identischen Heterostruktur aller Bauelemente vergleichbar bleiben. Unter Vorbehalt annehmend, dass der Wert von  $\eta_{CIE}$  nicht vom verwendeten Template abhängt, sollte die

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Die elektrooptische Charakterisierung der Bauelemente erfolgte auf der Waferebene in Zusammenarbeit mit Verena Montag (TUB) und Martin Guttmann (FBH).



Abbildung 43: Die maximale interne Quanteneffizienz von 265 nm LEDs mit Wachstum auf unterschiedlichen AlN/Saphir-Templates.

maximale strahlende Rekombinationseffizienz ( $\eta_{RRE}^{max}$ ) mit  $\eta_{IOE}^{max}$  skalieren und mit steigender TDD immer niedriger werden. Allerdings ist  $\eta_{IQE}^{max}$  und damit auch  $\eta_{RRE}^{max}$  für **ELO-Template**  $(\eta_{IOE}^{max} = 25\%)$ , Bauelemente mit Wachstum auf dem TDD =  $(1,5\pm0,2)\times10^9$  cm<sup>-2</sup>), trotz der höherer TDD, höher und nicht niedriger als bei Wachstum dem **HTA-Template**  $(\eta_{IOE}^{max} = 23\%)$ , 265 nm LEDs mit auf  $TDD = (1,1\pm0,05) \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ). Weiterhin von Template-unabhängigen einer Ladungsträgerinjektionseffizienz ausgehend, müssen die  $\eta_{RRE}^{max}$ -Werte der untersuchten 265 nm LEDs mit Wachstum auf ELO-AlN/Saphir und HTA-ELO-AlN/Saphir ( $\eta_{IOE}^{max}$  = 27%, TDD =  $(0.95\pm0.1)\times10^9$  cm<sup>-2</sup>), trotz des 70%-igen Unterschieds in der TDD, fast vergleichbar sein.

Wie in Abbildung 39 demonstriert wurde, kann die Präsenz von zusätzlichen Defekten in der MQW-Region (neben den Durchstoßversetzungen) und/oder ein hoher Auger-Koeffizient die nur schwach ausgeprägte Änderung der strahlenden Rekombinationseffizienz und der  $\eta_{IOE}^{max}$ -Werte mit TDD in der untersuchten Serie erklären. Tatsächlich weist der starke Rückgang der externen Quanteneffizienz der einzelnen Bauelemente für Stromdichten oberhalb von  $\eta_{EOE}^{max}$  auf einen hohen Auger-Koeffizienten hin, Abbildung 42. Allerdings bleibt die Frage offen - wieso die Effizienz von 265 nm LEDs mit Wachstum auf ELO-Templates, trotz der höheren TDD, vergleichbar oder gar höher ist als  $\eta_{IOE}^{max}$  von Bauelementen auf HTA- und HTA-ELO-AlN/Saphir mit deutlich niedrigeren Durchstoßversetzungsdichten. periodische Änderung Auch die der Durchstoßversetzungsdichte auf ELO-AlN/Saphir (Abbildung 41) kann die oben geschilderten Beobachtungen nicht erklären. Um eine vergleichbare strahlende Rekombinationseffizienz zu den Bauelementen auf HTA- und HTA-ELO- AlN/Saphir zu erreichen, müsste nahezu der gesamte Stromfluss in der MQW-Region der 265 nm LEDs mit Wachstum auf dem ELO-Template durch die defektarmen ELO-Bereiche verlaufen. Da allerdings die MQW-Region mit einer Mesa-Fläche von 152900  $\mu$ m<sup>2</sup> eine Vielzahl von den periodisch angeordneten und je 1,5  $\mu$ m breiten ELO-Streifen enthält, ist der Stromfluss durch lediglich einen Bereich äußerst unwahrscheinlich.

Aus diesem Grund kann die innerhalb der untersuchten Probenserie fehlende Skalierung der optischen Ausgangsleistung, der externen sowie der internen Quanteneffizienzen mit der Durchstoßversetzungsdichte auf zwei möglichen Wegen erklärt werden:

- 1) Die Ladungsträgerinjektionseffizienz ist trotz identischer Heterostruktur innerhalb der Probenserie nicht konstant. Um die Messergebnisse erklären zu können, müsste  $\eta_{CIE}$  für Bauelemente auf ELO-AlN/Saphir höher sein als für die 265 nm LEDs auf dem HTA- und dem HTA-ELO-Template.
- 2) In der MQW-Region der DUV-LEDs mit Wachstum auf HTA- und HTA-ELO-Templates existieren neben Durchstoßversetzungen andere, elektrisch aktive Defekte, welche die strahlende Rekombinationseffizienz dieser Bauelemente zusätzlich beeinträchtigen. Diese Defekte sind unter Umständen auch in der MQW-Region von Bauelementen auf ELO-AlN/Saphir vorhanden, allerdings in einer geringeren Konzentration.

Um herauszufinden, welche von den beiden Erklärungen in dem vorliegenden Fall die zutreffende ist, werden als nächstes sowohl die strahlende Rekombinationseffizienz als auch die Ladungsträgerinjektionseffizienz der einzelnen Bauelemente ermittelt. Zusätzlich werden SIMS- und TEM-Studien unternommen, um mögliche Auffälligkeiten in der Heterostruktur sowie bisher nicht beachtete Defekte aufzufinden.

# 4.3 Titkov-Dai-Methode

Um die strahlende Rekombinationseffizienz aus den Elektrolumineszenz-Charakteristiken der LEDs zu bestimmen, wurde eine auf dem ABC-Modell basierende und im Folgenden als Titkov-Dai genannte Methode nach [36, 71, 156, 157] durchgeführt. Eine Herleitung für die Auswertung nach der Titkov-Dai-Methode verwendeter Gleichungen ist in keiner der Quellen vollständig aufgeführt und soll für die bessere Nachvollzierbarkeit der Ergebnisse sowie der Grenzen der Methode an dieser Stelle erfolgen.

Um eine Gleichung herzuleiten, welche den Zugang zu der strahlenden Rekombinationseffizienz über EL-Observablen ermöglicht, wird zunächst das Extremum  $\left(\frac{d\eta_{RRE}(n)}{dn}=0\right)$  von dem bereits in Kapitel 2.4 (Gleichung 2.5) eingeführten Zusammenhang

$$\eta_{RRE} = \frac{Bn}{A + Bn + Cn^2}$$

aus dem ABC-Modell bestimmt. Dies führt über

zu

$$0 = \frac{d}{dn}\eta_{RRE} = \frac{B \cdot (A + Bn + Cn^2) - Bn \cdot (B + 2Cn)}{(A + Bn + Cn^2)^2} = \frac{A B - B C n^2}{(A + Bn + Cn^2)^2}$$
$$0 = A B - B C n^2 = A - Cn^2$$
$$n_{max} = \sqrt{A/C}$$
4.1

der Ladungsträgerkonzentration bei der  $\eta_{RRE}^{max}$  erreicht wird. Durch die Definition des sogenannten "Qualitätsfaktors"

$$Q = B/\sqrt{AC}$$
 4.2

kann durch das Einsetzen der Gleichungen 4.1 und 4.2 in die Gleichung 2.5

$$\eta_{RRE}^{max} = \frac{Bn_{max}}{A + Bn_{max} + Cn_{max}^2} = \frac{B\sqrt{A/C}}{A + B\sqrt{A/C} + C\sqrt{A/C}^2} = \frac{B/\sqrt{C}}{2\sqrt{A} + B/\sqrt{C}}$$

der einfache Ausdruck

$$\eta_{RRE}^{max} = Q/(Q+2) \tag{4.3}$$

hergeleitet werden.

Als Nächstes werden zwei neue Größen eingeführt:  $P_{out}^{max}$  die optische Ausgangsleistung bei  $\eta_{RRE}^{max}$  und  $\Pi$  die normierte optische Ausgangsleistung. Es gilt

$$\Pi = \frac{P_{out}}{P_{out}^{max}} = \frac{E_{ph}\eta_{LEE}V_R B n^2}{E_{ph}\eta_{LEE}V_R B n^2_{max}} = \frac{n^2}{n^2_{max}} = n^2 \frac{C}{A}$$
4.4

wobei  $V_R$  das totale Rekombinationsvolumen der MQW-Region darstellt. Durch einige Umformungsschritte und das Einsetzen der Gleichungen 4.2 und 4.4 in die Gleichung 2.5 gelangt man schließlich zu

$$\eta_{RRE} = \frac{n\sqrt{A \cdot C} Q}{A + n\sqrt{A \cdot C} Q + Cn^2} = \frac{Q}{\frac{\sqrt{A}}{n\sqrt{C}} + Q + \frac{n\sqrt{C}}{\sqrt{A}}} = \frac{Q}{Q + \Pi^{1/2} + \Pi^{-1/2}}$$

$$4.5$$

Durch die anschließende Verhältnisbildung der Maxima zu den jeweiligen Effizienzen, kann schließlich ein Ausdruck hergeleitet werden, welcher die Ermittlung der maximalen strahlenden Rekombinationseffizienz durch mit Hilfe der Elektrolumineszenz-Spektroskopie direkt messbaren  $\eta_{EQE}(P_{out})$ -Abhängigkeit einer LED erlaubt:

$$\frac{\eta_{EQE}^{max}}{\eta_{EQE}} = \frac{\eta_{RRE}^{max}}{\eta_{RRE}} = \eta_{RRE}^{max} + \frac{\Pi^{1/2} + \Pi^{-1/2}}{Q+2}$$
 4.6



Abbildung 44: (a) Ein Beispiel für die Ermittlung von  $\eta_{EQE}^{max}$  und  $P_{out}^{max}$  aus den gemessenen Elektrolumineszenz-Charakteristiken einer auf HTA-ELO-AlN/Saphir gewachsenen 265 nm LED. (b) Linearer Fit der in (a) hellblau hervorgehobenen Datenpunkte in der  $\eta_{EQE}^{max}/\eta_{EQE} - \Pi^{1/2} + \Pi^{-1/2}$ -Darstellung.

Werden nun die durch die EL-Charakterisierung der Bauelemente ermittelten Daten in Form von  $\eta_{EQE}^{max}/\eta_{EQE}$  über  $\Pi^{1/2} + \Pi^{-1/2}$  dargestellt und mit einer Geraden angepasst, so können aus dem Anstieg dieser Fitgeraden Q und  $\eta_{RRE}^{max}$  bestimmt werden. Eine weitere Möglichkeit  $\eta_{RRE}^{max}$  zu ermitteln ist die Bestimmung des Schnittpunktes der Fitgeraden mit der y-Achse ( $\eta_{EQE}^{max}/\eta_{EQE}$ ). Ferner kann mit dem extrahierten Q-Wert und der Gleichung 4.5 der gesamte  $\eta_{RRE}$ -p-Verlauf einer LED bestimmt werden.

Es muss an dieser Stelle erwähnt werden, dass die oberen Relationen lediglich im Falle einer von der optischen Ausgangsleistung unabhängigen Lichtextraktionsund Ladungsträgerinjektionseffizienz gelten.  $\eta_{LEE}$  kann in guter Näherung als unabhängig von der optischen Ausgangsleistung betrachtet werden [158]. Um auch der Bedingung eines konstanten  $\eta_{CIE}(P_{out})$  zu genügen, wurde das lineare Anpassen der Datenpunkte in den  $\eta_{EQE}^{max}/\eta_{EQE}$ - $\Pi^{1/2}$ + $\Pi^{-1/2}$ -Darstellungen lediglich im Bereich<sup>1</sup> um  $\eta_{EQE}^{max}$  durchgeführt. Jegliche Abweichungen in den Charakteristiken der LEDs von konstanten  $\eta_{LEE}(P_{out})$ - und  $\eta_{CIE}(P_{out})$ -Werten würden in einer nicht linearen Verteilung der Messwerte in den  $\eta_{EQE}^{max}/\eta_{EQE}$ - $\Pi^{1/2}$ + $\Pi^{-1/2}$ -Darstellungen resultieren und gehen als Fitfehler in  $\eta_{RRE}^{max}$  ein. Es soll zusätzlich darauf hingewiesen werden, dass für eine zuverlässige Auswertung nach der Titkov-Dai-Methode, zumindest bei hohen Stromdichten, gepulste Charakteristiken der LEDs benötigt werden. Hierdurch wird das betriebsbedingte Aufheizen der Bauelemente und die daraus resultierende Änderung der LED-Charakteristiken reduziert. Um technologisch bedingte Abweichungen der LED-Charakteristiken von dem im Rahmen des ABC-Modell erwarteten Betriebsverhalten der Bauelemente zu gewährleisten, sollte die Auswertung nach der Titkov-Dai-Methode lediglich bei guten LEDs, im möglichst

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Als Beispiel kann der Fitbereich für auf ELO- und HTA-ELO-AlN/Saphir gewachsenen 265 nm LEDs genannt werden, dieser wurde auf Stromdichten zwischen 0,6 Acm<sup>-2</sup> und 60 Acm<sup>-2</sup> eingeschränkt.


Abbildung 45: (a) Anhand der Titkov-Dai-Methode ermittelte ABC-Fits mit dem Vergleich zu den experimentell bestimmten Abhängigkeiten der externen Quanteneffizienzen von den normierten optischen Ausgangsleistungen von 265 nm LEDs mit Wachstum auf HTA-ELO-AlN/Saphir in unterschiedlichen Aufbaustadien. Fotographien von (b) einer auf der Wafer-Ebene charakterisierten (markiert mit rotem Rechteck), (c) einer aufgebauten und (d) einer aufgebauten sowie verkapselten 265 nm LED auf HTA-ELO-AlN/Saphir.

ausgereiften Entwicklungsstadium, angewandt werden [193]. Die untersuchten LEDs sollten dabei im Idealfall keine beziehungsweise nur geringfügige Leckströme aufweisen und auch bei hohen Stromdichten ohne relevante Degradationserscheinungen betrieben werden können.

Ein Beispiel für die Anwendung der Titkov-Dai-Methode zur Ermittlung von  $\eta_{RRE}^{max}$  anhand einer auf HTA-ELO-AlN/Saphir gewachsenen 265 nm LED, kann der Abbildung 44 entnommen werden. Im Einklang mit dem ABC-Modell liegen alle Punkte aus den Elektrolumineszenz-Charakteristiken näherungsweise auf einer Geraden und erlauben eine robuste und zuverlässige Bestimmung von  $\eta_{RRE}^{max}$  ( $62\pm3\%$ ) sowie von Q ( $3.25\pm0,25$ )% durch einen linearen Fit. Dies trifft sowohl für Werte im Bereich des Maximums der strahlenden Rekombinationseffizienz zu, welche um  $\Pi^{1/2} + \Pi^{-1/2} = 2$  liegen, als auch für höhere und niedrigere  $\eta_{RRE}$ -Werte, welche bei  $\Pi^{1/2} + \Pi^{-1/2} > 2$  liegen. Um die Zuverlässigkeit des Fits zu demonstrieren, wurden zusätzlich zwei theoretische Linien (hell rot) in der Abbildung 44 (b) hinzugefügt. Diese zeigen einen potenziellen Verlauf der Messdaten im Falle einer niedrigeren ( $\eta_{RRE}^{max} = 50\%$ , Q = 2) und einer höheren ( $\eta_{RRE}^{max} = 72\%$ , Q = 5) maximalen strahlenden Rekombinationseffizienz und liegen abgesehen von einigen Ausreißern weit neben den experimentellen Werten. Mit dem extrahierten Q kann anhand der Gleichung 4.5 der gesamte  $\eta_{RRE}$ - $\Pi$ - und schließlich auch der  $\eta_{EQE}$ - $\Pi$ -Verlauf ermittelt werden. Wie in der

Abbildung 45 (a) gezeigt ist, stimmen der experimentelle und der anhand der Titkov-Dai-Methode berechnete theoretische Verlauf über mehrere Größenordnungen in  $\Pi$  überein. Solch eine exzellente Übereinstimmung validiert die Annahme der vernachlässigbaren Abhängigkeit der  $\eta_{LEE}$  und der  $\eta_{CIE}$  von der optischen Ausgangsleistung im Bereich des Peaks der externen Quanteneffizienz. Da bei den untersuchten Bauelementen der Überlapp theoretischen und der experimentellen Verläufe auch außerhalb des der Effizienzmaximums gegeben ist, kann weiterhin von der Gültigkeit der Annahme  $\eta_{LEE}(P_{out}, I) =$  konstant innerhalb des gesamten Messbereichs ausgegangen werden. Es soll auch erwähnt werden, dass die Extraktion der maximalen Rekombinationseffizienz mit Hilfe der Titkov-Dai-Methode lediglich auf Basis von relativen Größen ( $\eta_{EOE}^{max}/\eta_{EOE}$  und p) basiert und deshalb keinerlei Kenntnisse über den Messaufbau oder die Charakteristiken der LED, wie die Mesa-Fläche,  $\eta_{CIE}$  oder  $\eta_{LEE}$  erfordert. Um die Reproduzierbarkeit und die Robustheit dieser Methode zu überprüfen wurden LEDs mit identischer Heterostruktur und mit Wachstum auf dem selben Template in unterschiedlichen Aufbaustadien charakterisiert. Zu diesem Zweck wurden mehrere prozessierte Bauelemente mit Wachstum auf dem HTA-ELO Template (Abbildung 45 (b)) vereinzelt, mittels der Wende-Montage (engl. *flip-chip mounting*) auf ein keramisches AlN-Gehäuse montiert und anschließend auf eine Al-Leiterplatte aufgebaut<sup>1</sup>, Abbildung 45 (c). Neben der höheren Wärmeleitfähigkeit, haben die aufgebauten LEDs eine größere Mesa-Fläche  $(M = 5.7 \times 10^{-7} \text{ m}^2)$  und eine höhere Lichtextraktionseffizienz (9.2% $\pm 0.9\%$ ), im Vergleich zu den auf Wafer-Ebene charakterisierten Bauelementen  $(M = 1.5 \times 10^{-7} \text{ m}^2)$  $\eta_{LEE}$  = 6,7%±0,7%). Weiterhin muss für die Charakterisierung der aufgebauten DUV-LEDs ein anderer Messaufbau (Top-Emitter-Messaufbau), als bei nicht aufgebauten Bauelementen, verwendet werden (Bottom-Emitter-Messaufbau), vergleiche hierzu Kapitel 2.6. Trotz dieser Unterschiede liefert die auf relativen Größen basierende Titkov-Dai-Auswertungsmethode einen im Rahmen der Fehlerbalken vergleichbaren Wert für die maximale strahlende Rekombinationseffizienz der aufgebauten ( $\eta_{RRE}^{max}$  = 57%±5%) und der nicht aufgebauten ( $\eta_{RRE}^{max}$  = 60%±4%) LEDs. Des Weiteren wurde eine von den aufgebauten DUV-LEDs mit einem UV-transparenten Silikon "Deep UV200" [159] verkapselt<sup>2</sup>, Abbildung 45 (d). Dies führt zu einer weiteren Steigerung der Lichtextraktionseffizienz auf (12,8±1,3)%. Auch hier lassen sich die experimentellen Werte gut mit einem linearen Fit annähern und führen zu  $\eta_{RRE}^{max} = (60\pm 6)\%$ , einem vergleichbaren Wert zu den Bauelementen aus vorherigen Aufbaustadien. Diese Übereinstimmung unterstreicht die Anwendbarkeit der Titkov-Dai-Methode für die Ermittlung der maximalen strahlenden Rekombinationseffizienz der untersuchten Bauelemente.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Der Aufbau erfolgte durch Jens Raß (FBH) und Neysha Lobo-Ploch (FBH).

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Die Verkapselung erfolgte durch Shaojun Wu (TUB).



Abbildung 46: Maximale strahlende Rekombinationseffizienz von 265 nm LEDs mit Wachstum auf unterschiedlichen AlN/Saphir-Templates. Die einzelnen Werte wurden nach der Titkov-Dai-Methode ermittelt und sind über die maximale interne Quanteneffizienz  $(\eta_{IQE}^{max} = \eta_{EQE}^{max}/\eta_{LEE})$  dargestellt.

#### 4.4 Strahlende Rekombinationseffizienz von 265 nm LEDs

Um herauszufinden wie die strahlende Rekombinationseffizienz von 265 nm LEDs durch AlN/Saphir-Templates unterschiedlichen das Wachstum auf mit Durchstoßversetzungsdichten beeinflusst wird, soll die Titkov-Dai-Methode auf eine Reihe von prozessierten Bauelementen angewandt werden. Allerdings konnte diese Auswertungsprozedur zur Ermittlung von  $\eta_{RRE}^{max}$  aus EL-Charakteristiken nicht für Bauelemente auf dem planaren Template durchgeführt werden. Wie aus der Abbildung 42 erkennbar ist, weisen die LEDs auf planarem AlN/Saphir-Template ein vergleichsweise breites  $\eta_{EQE}$ -Maximum auf, welches bei relativ hohen Stromdichten ( $j > 100 \text{ Acm}^{-2}$ ) erreicht wird. Aus diesem Grund liegen die meisten Datenpunkte in den  $\eta_{EQE}^{max}/\eta_{EQE}$  -  $\Pi^{1/2}$  +  $\Pi^{-1/2}$ -Darstellungen<sup>1</sup> im Bereich von  $\Pi^{1/2} + \Pi^{-1/2} \sim 2$  und erlauben somit keinen verlässlichen linearen Fit zur Bestimmung von  $\eta_{RRE}^{max}$ . Dagegen konnte die maximale strahlende Rekombinationseffizienz für alle charakterisierten Bauelemente auf den anderen drei Templates ermittelten werden, die Ergebnisse sind in der Abbildung 46 zusammengefasst. Die  $\eta_{RRE}^{max}$ -Werte für 265 nm LEDs auf ELO- und HTA-ELO-AlN/Saphir sind vergleichbar und liegen im Mittel bei jeweils  $\eta_{RRE}^{max} = (55\pm 6)\%$  und  $\eta_{RRE}^{max} = (57\pm 5)\%$ . Die maximale

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Aus Platzgründen ist die Verteilung der EL-Datenpunkte für Bauelemente auf planarem Template in der  $\eta_{EQE}^{max}/\eta_{EQE}$  -  $\Pi^{1/2}$  +  $\Pi^{-1/2}$ -Darstellung nicht gezeigt.

strahlende Rekombinationseffizienz von Bauelementen auf HTA-AlN/Saphir, ist niedriger und beträgt  $\eta_{RRE}^{max}$  = (45±4)%. Zusätzlich wurden die EL-Charakteristiken von mehreren aufgebauten<sup>1</sup> 265 nm LEDs auf HTA-ELO-AlN/Saphir analysiert. Die maximale strahlende Rekombinationseffizienz der aufgebauten Bauelemente liegt bei  $(60\pm4)\%$  und deckt sich mit den höchsten  $\eta_{RRE}^{max}$ -Werten von nicht aufgebauten LEDs auf den selben HTA-ELO-Template. Dies entspricht den Erwartungen, da für den Aufbau lediglich LEDs mit der höchsten optischen Ausgangsleistung ausgesucht werden. Um die hier ermittelten  $\eta_{RRE}^{max}$ -Werte mit einem anderen unabhängigen Verfahren zu verifizieren, wurde die auf ELO-AlN/Saphir gewachsene MQW-Probe mittels resonanter TRPL untersucht [160]. Dabei wurde durch die resonante Anregung der QWs die Rekombination in den umliegenden Barriere-Schichten unterdrückt. Bei Raumtemperatur liegt die mittels TRPL bestimmte strahlende Rekombinationseffizienz von 265 nm LEDs mit Wachstum auf ELO-AlN/Saphir bei  $(60\pm10)\%$  [160] und stimmt gut mit dem anhand der Titkov-Dai-Methode ermittelten  $\eta_{RRE}^{max}$  = (55±6)% überein. Somit wurde die Reproduzierbarkeit in dieser Arbeit bestimmter  $\eta_{RRE}^{max}$ -Werte durch den Vergleich zwischen aufgebauten und nicht aufgebauten 265 nm LEDs demonstriert sowie die Verlässlichkeit der absoluten Werte durch TRPL-Untersuchungen bestätigt.

Nun kann der Einfluss der einzelnen AlN/Saphir-Templates auf die strahlende Rekombinationseffizienz von 265 nm LEDs diskutiert und in Relation zu den Erwartungen aus dem ABC-Modell gesetzt werden. Basierend auf der Tatsache, dass auf HTA- und HTA-ELO-Templates gewachsene LEDs, trotz geringerer TDD, ähnliche oder gar niedrigere  $\eta_{RRE}^{max}$ -Werte im Vergleich zu den Bauelementen auf ELO-AlN/Saphir aufweisen, liegt die Vermutung nahe, dass durch den HTA-Schritt zusätzliche, mittels CL nicht detektierte, nicht-strahlende Rekombinationszentren entstehen. Beim HTA-Schritt gibt es zwei kritische Einflussfaktoren, welche zur Ausbildung von zusätzlichen nicht-strahlenden Rekombinationszentren führen können: zum Einem der Einbau von Verunreinigungen und zum anderen die erhöhte kompressive Verspannung ( $\varepsilon$ ) von HTA-AlN.

Der durch den Hochtemperaturschritt bedingte und nicht gezielte Einbau von Verunreinigungen wie Sauerstoff, Stickstoff und Silizium in HTA-AlN-Schichten, ist ein bekanntes Phänomen [161, 162]. Um allerdings die strahlende Rekombinationseffizienz der LEDs zu beeinträchtigen, müssen diese Verunreinigungen aus dem HTA-AlN in die MQW-Region diffundieren. Um die Diffusion von Verunreinigungen aus dem HTA-AlN in die darüberliegenden Schichten quantitativ zu analysieren, wurde ein HTA-AlN/Saphir-Template mit einer MOVPE-AlN-Schicht überwachsen und mittels SIMS untersucht, Abbildung 47. Die gemessene Dichte der Verunreinigungen im HTA-AlN ist in der Tat vergleichsweise hoch und beträgt  $5 \times 10^{20}$  cm<sup>-3</sup> für Sauerstoff,  $4 \times 10^{18}$  cm<sup>-3</sup> für Kohlenstoff und  $9 \times 10^{16}$  cm<sup>-3</sup> für Silizium. Allerdings ist die Diffusion dieser Verunreinigungen aus HTA-AlN in die darüber liegende MOVPE-AlN-Schicht vergleichsweise gering und nach einigen hundert Nanometern nicht mehr detektierbar. Bei den untersuchten Bauelementen ist die MQW-Region durch insgesamt mehrere  $\mu$ m-dicke Schichten von der HTA-AlN eingebauten

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Details zum Aufbau der LEDs befinden sich in Kapitel 4.3.



Abbildung 47: Mittels SIMS<sup>1</sup> bestimmte Konzentration von Verunreinigungen im HTA-AlN und MOVPE-AlN.

Verunreinigungen nicht die Ursache für die potenzielle Existenz von zusätzlichen nichtstrahlende Rekombinationszentren in der MQW-Region von 265 nm LEDs auf HTA- und HTA-ELO-AlN/Saphir darstellen.

Die zweite, möglicherweise kritische Folge des HTA-Schritts, ist die kompressive Verspannung von HTA-AlN beim Wachstum auf Saphirsubstraten. Der Einbau von kompressiven Stress in die getemperten AlN-Schichten erfolgt durch die unterschiedlichen Wärmeausdehnungskoeffizienten von AlN und Saphir, während des Abkühlvorgangs des Templates auf Raumtemperatur [163, 164]. Um den Grad der Verspannung von AlN in den untersuchten Bauelementen zu quantifizieren, wurden vor der Prozessierung HR-XRD-Messungen<sup>2</sup> anhand der gewachsenen LEDs unternommen. Die a-Gitterkonstante ändert sich mit  $\varepsilon$  [165] und kann mit HR-XRD präzise bestimmt werden. Wird die gemessene a-Gitterkonstante in Relation zum Wert der Bulk-AlN a-Gitterkonstante aus der Literatur (0,3111 nm [166]) gesetzt, so kann anschließend der Verspannungsgrad der untersuchten AlN-Schicht ermittelt werden [165]. Demnach ist der Verspannungsgrad für das AlN des ELO-Templates vernachlässigbar klein und beträgt lediglich  $\varepsilon = -0.02\%$  (a = 0.31105 nm). Im Vergleich dazu steigt die kompressive Verspannung von AlN des HTA-ELO-Templates auf  $\varepsilon = -0.12\%$  (a = 0.31072 nm). Schließlich erreicht  $\varepsilon = -0.4\%$  (a = 0.30985 nm) für das AlN des HTA-Templates. Da das Wachstum der DUV-LEDs vollverspannt zum AlN erfolgt, beeinflusst der zusätzliche kompressive Stress auch alle darüber gewachsenen Schichten. Bereits ein geringfügiger Anstieg der kompressiven Verspannung, insbesondere für

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> SIMS-Daten wurden durch Sylvia Hagedorn (FBH) zur Verfügung gestellt.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> HR-XRD-Messungen wurden von Eviathar Ziffer (TUB) und Norman Susilo (TUB) durchgeführt.



Abbildung 48: (a) Schematische Darstellung eines Versetzungshalbrings. Misfit-Segmente (rot) werden an der Oberfläche geformt und verlaufen senkrecht zur Wachstumsrichtung. Die in schwarz dargestellten Durchstoßversetzungen befinden sich an beiden Enden des Misfit-Segments und breiten sich in Wachstumsrichtung aus. (b) Schematische Darstellung einer LED-Heterostruktur mit exemplarisch dargestellter nicht-strahlender Rekombination zwischen den Minoritätsladungsträgern (Löchern) und der negativen Ladung einer Durchstoßversetzung sowie der negativen Ladung eines DHL-Misfit-Segments.

Schichten mit niedriger Durchstoßversetzungsdichte, kann zur Ausbildung von neuen Relaxationspfaden führen [164, 167]. Je größer diese Verspannung wird, desto wahrscheinlicher ist es, dass der Kristall durch eine inelastische strukturelle Veränderung darauf reagiert.

Eine mögliche Folge der erhöhten kompressiven Verspannung ist die vermehrte Ausbildung von sogenannten Versetzungshalbringen (engl. dislocation half loops, DHL) in AlN- und AlGaN-Schichten [165, 167]. Ein DHL besteht aus einem Misfit-Segment (in der Ebene senkrecht zur Wachstumsrichtung) und zwei Durchstoßversetzungen (in c-Richtung) an den beiden Enden des jeweiligen Misfit-Segments, Abbildung 48 (a). Die einzelnen DHLs können innerhalb des Kristalls miteinander interagieren, wodurch die Misfit-Segmente unregelmäßige Formen ausbilden und sich, begleitet von der Annihilation der TD-Komponenten, über mehrere hundert Nanometer ausbreiten können [167]. Es kann davon ausgegangen werden, dass im Falle der Ausbildung von DHLs im MQW-Bereich, diese ähnlich wie die TDs als nicht-strahlende Rekombinationszentren für die Minoritätsladungsträger agieren [167]. Allerdings ist das nicht-strahlende Rekombinationsvolumen innerhalb der MQW-Region bei einem DHL viel größer im Vergleich zu dem nicht-strahlenden Rekombinationsvolumen einer TD. Der Grund hierfür ist die unterschiedliche Ausrichtung der Misfit-Segmente der DHLs und der TDs. Die in Wachstumsebene ausgerichteten Misfit-Segmente können sich auf der gesamten Länge in der MQW-Region ausbreiten und so über mehrere hundert Nanometer die Minoritätsladungsträger einfangen. Im Falle der TDs, welche stets in Wachstumsrichtung ausgerichtet sind, erfolgt der Einfang von Minoritätsladungsträgern lediglich auf einer Länge, die der Summe der einzelnen Quantentopfdicken (meist < 10 nm) entspricht. Deshalb ist im Vergleich zu den TDs, das Auftreten von DHLs in der MQW-Region von DUV-LEDs ein viel kritischerer Faktor für den Wert der strahlenden Rekombinationseffizienz.



Abbildung 49: TEM-Querschnittsaufnahmen<sup>1</sup> (engl. cross-section) der MQW-Proben auf (a) ELO-, (b) HTA-ELO- und (c) HTA-AlN/Saphir (**g** <1-100>). Das blaue Rechteck in (b) umrandet den vergrößerten Bildausschnitt mit zwei DHLs. Das rote Rechteck in (c) markiert die Fläche mit der hohen Defektdichte. Die Abkürzungen LB und FB stehen jeweils für letzte und erste Barriere.

Um die Ausbildung von DHLs in den untersuchten Bauelementen einzuschätzen, wurde auf die Transmissionselektronenmikroskopie zurückgegriffen. In der Abbildung 49 sind TEM-Querschnittsaufnahmen der MQW-Proben mit dem Beugungsvektor  $\mathbf{g}$  <1-100> gezeigt. In allen drei Proben ist die Ausbildung von DHLs klar erkennbar. Dabei dehnen sich die Misfit-Segmente der einzelnen Versetzungshalbringe bis hin zu einigen hundert Nanometern aus. Im Einklang mit den Erwartungen, anhand der höchsten kompressiven Verspannung innerhalb der untersuchten Serie, ist die Dichte der Versetzungshalbringe bei der auf HTA-AlN/Saphir gewachsenen MQW-Probe am höchsten. Die meisten DHLs sind dabei, wie auch in den anderen beiden Proben, in der *n*-Kontakt- und der *n*-Stromspreizschicht zu finden. Es fällt allerdings auf, dass lediglich einige wenige DHLs die MQW-Region der auf ELO-AlN/Saphir gewachsenen Probe durchdringen. Dagegen befindet sich in der MQW-Region der auf dem HTA-ELO-Template gewachsenen Probe, eine erhebliche Anzahl an Versetzungshalbringen und in der MQW-Region der Probe mit Wachstum auf HTA-AlN/Saphir, ist sogar eine Defektansammlung zu beobachten, markiert mit rotem Rechteck in Abbildung 49 (c).

Somit kann geschlussfolgert werden, dass der HTA-Schritt zwar einerseits die Dichte der Durchstoßversetzungen in AlN reduziert, dabei aber gleichzeitig dem Kristall die Möglichkeit nimmt durch unterschiedliche Gitterkonstanten von Saphir und AlN bedingten Stress abzubauen. In der Folge wird die LED-Heterostruktur kompressiv verspannt. Um dem entgegenzuwirken bilden sich im Kristall neue Defekte, in Form von Versetzungshalbringen aus, welche über die nicht-strahlende Rekombination mit den Minoritätsladungsträgern in der MQW-Region zusätzlich zu den TDs die Effizienz der 265 nm LEDs auf HTA- und HTA-ELO- AlN/Saphir beinträchtigen. Für eine quantitative Analyse über die Ausbildung von DHLs sind allerdings weitere Untersuchungen notwendig. Eine mögliche Lösung, um die kompressive Verspannung in Bauelementen auf HTA- und HTA-ELO zu reduzieren und so der Formation der DHLs entgegenzuwirken, ist der Einbau

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> TEM-Aufnahmen durch Leonardo Cancellara (IKZ).



Abbildung 50: CL-Spektrum<sup>1</sup> der MQW-Probe mit Wachstum auf dem HTA-ELO-Template. Aufgenommen bei T = 80K.

von Si in die AlN-Pufferschichten [167, 168]. Es sollte dabei allerdings beachtet werden, dass durch diese Maßnahme die kompressive Verspannung in der LED-Heterostruktur zwar reduziert werden kann, das emittierte Licht aber gleichzeitig mehr TM-polarisiert wird, was eine Reduktion der Lichtextraktionseffizienz nach sich zieht [169].

Als letztes soll noch die Frage geklärt werden, wieso die DHLs nicht in den CL-Aufnahmen (Abbildung 41) erkennbar sind. Wie anhand des CL-Spektrums in der Abbildung 50 erkennbar ist, mündet die strahlende Rekombination der angeregten Elektronen-Loch-Paare bei *T* = 80K in einer Emission bei  $\lambda$  = 248 nm aus den Barrieren und bei  $\lambda$  = 259 nm aus den Quantentöpfen. Für die Abbildung von DHLs in den MQW-Proben ist vor allem die CL-Intensitätsverteilung in den Quantentöpfen wichtig. Denn aufgrund des niedrigeren Al-Anteils ist die Wahrscheinlichkeit für die Ausbildung von DHLs in den Quantentöpfen höher als in den Barrieren. Allerdings wurde, in den in Abbildung 41 gezeigten CL-Aufnahmen, die Intensität über alle Emissionswellenlängen aufgenommen. Da der Elektronenstrahl bei der Beschleunigungsspannung von 5 kV die Probe auf eine Tiefe von etwa hundert Nanometern durchdringt, resultiert die Intensitätsverteilung in Abbildung 41 weiterhin nicht nur aus Barrieren und Quantentöpfen der MQW-Region, sondern zusätzlich auch aus der darüber und der darunter liegenden letzten Barriere liegenden ersten Barriere. Durchstoßversetzungen penetrieren alle Schichten der LED-Heterostruktur und Verlaufen in Richtung des Elektronenstrahls, deshalb erscheinen TDs als dunkle Punkte in CL-Aufnahmen. Im Gegensatz dazu verlaufen die Misfit-Segmente der DHLs senkrecht zum Elektronenstrahl. Deshalb kann die Rekombination in den Schichten ober und unterhalb der DHLs zur Intensität beitragen und die lokal reduzierte strahlende Rekombinationseffizienz

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Die Aufnahme des CL-Spektrums erfolgte durch Carsten Netzel (FBH).

um die eindimensionalen Misfit-Segmente der DHLs überstrahlen. Folglich können, durch die mittels der integrierten spektralen Intensität aufgenommenen CL-Spektren in Abbildung 41, lediglich Durchstoßversetzungen mit Ursprung aus der AlN/Saphir-Grenzfläche und/oder den Seitenarmen der DHLs detektiert werden. Um in den zukünftigen Untersuchungen DHLs mittels panchromatischer Kathodolumineszenz detektieren zu können, sollte die spektral aufgelöste CL-Intensitätsmessung bei der Emissionswellenlänge der Quantentöpfe erfolgen. Um zusätzlich die Überstrahlung des DHL-Signals aus benachbarten Quantentöpfen zu reduzieren, sollten für diese Untersuchungen lediglich Proben mit einem Quantentopf verwendet werden.

#### 4.5 Bestimmung der Rekombinationskonstanten (*A*, *B* und *C*)

Neben der Extraktion der strahlenden Rekombinationseffizienz, erlaubt die in Kapitel 4.3 beschriebene Titkov-Dai-Methode auch die Bestimmung der einzelnen Rekombinationskonstanten (*A*, *B* und *C*) des ABC-Modells. Hierfür sind zwei Größen von Bedeutung: *Q* aus Gleichung 4.2, welches wegen des direkten Bezugs zu  $\eta_{RRE}^{max}$  als "Qualitätsfaktor" bezeichnet wird

$$Q = B/\sqrt{AC}$$

und  $P_{out}^{max}$ , die optische Ausgangsleistung bei der  $\eta_{RRE}^{max}$  erreicht wird, nach der Umstellung der Gleichung 4.4:

$$P_{out}^{max} = \frac{\eta_{LEE} \cdot E_{ph} \cdot V_R \cdot A \cdot B}{C}$$

$$4.7$$

Sowohl Q als auch  $P_{out}^{max}$  sind für alle in Kapitel 4.4 untersuchten LEDs bekannt und stellen beide ein Nebenprodukt der Titkov-Dai-Auswertung dar. Allerdings ist eine eindeutige Bestimmung der drei Rekombinationskonstanten aus den beiden Größen nur dann eindeutig möglich, wenn die absolute Höhe einer der Rekombinationskonstanten bekannt ist. Um eine Abschätzung von A und C durchführen zu können, wird für die untersuchten 265 nm LEDs ein Wert für B von 2,4×10<sup>-11</sup> cm<sup>3</sup>s<sup>-1</sup> [170] angenommen. Dieser Wert wurde mit Hilfe von resonanten TRPL-Messungen anhand einer Probe ermittelt, die mit Ausnahme der MQW-Barrieren, welche aus reinem AlN statt aus Al<sub>0,63</sub>Ga<sub>0,37</sub>N bestehen, eine sehr geringfügig abweichende Heterostruktur zu den hier untersuchten Bauelementen aufweist.



Abbildung 51: Mit Hilfe von  $k \cdot p$ -Simulationen<sup>1</sup> berechneter Überlapp der Grundzustände von Elektronen- und Lochwellenfunktionen in einem QW. Der simulierte Quantentopf ist in (a) wie in der untersuchten Serie von  $Al_{0,63}Ga_{0,37}N$ -Barrieren umgeben und ist in (b) wie in [170] zwischen AlN-Barrieren platziert. Die Kreuze markieren den Wellenfunktionenüberlapp bei den jeweilig untersuchten Dicken und Legierungszusammensetzungen der QWs.

Die unterschiedliche Zusammensetzung in den MQW-Barrieren führt zu einer unterschiedlich stark ausgeprägten spontanen Polarisation an den Schichtgrenzflächen und beeinflusst so über den *"quantum-confined Stark effect"* (QCSE) [171] den Überlapp ( $\gamma$ ) des Grundzustandes der Elektronen- und der Lochwellenfunktionen in den Quantentöpfen und damit auch B, vergleiche hierzu Kapitel 2.4.1. Um die Annahme des gleichen Wertes für die strahlende Rekombinationskonstante in den hier untersuchten Proben<sup>2</sup> und in [170]<sup>3</sup> zu validieren, wurden k-p-Simulationen zur Einschätzung des Einflusses der unterschiedlichen AlGaN-Zusammensetzung im MQW auf  $\gamma$  durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 51 zu sehen. In beiden Fällen verändert sich der Überlapp des Grundzustandes von Elektronenund Lochwellenfunktionen kaum mit dem Al-Anteil in den Quantentöpfen. Dagegen nimmt  $\gamma$  für zunehmende QW-Dicken ab. Allerdings ist für dünne Quantentöpfe keine relevante Verschiebung der Wellenfunktionsmaxima der einzelnen Ladungsträgertypen in Folge des QCSE möglich, we shalb sich  $\gamma$  für QW-Dicken  $\leq$  1,75 nm, sowohl für Al<sub>0,63</sub>Ga<sub>0,37</sub>N-Barrieren als auch für AlN-Barrieren, überwiegend in dem schmalen Bereich zwischen 80 und 90% einstellt. Wie anhand der Markierungen in Abbildung 51 zu sehen ist, liegt der Überlapp des Grundzustandes von Elektronen- und Lochwellenfunktionen bei der untersuchten Heterostruktur mit 1,4 nm dicken Al<sub>0,48</sub>Ga<sub>0,52</sub>N-QWs und 5 nm dicken Al<sub>0,63</sub>Ga<sub>0,37</sub>N:Si-Barrieren bei 83%. Das  $\vartheta$  ist mit 84% für die Heterostruktur aus [170] mit 1,5 nm dicken Al<sub>0.45</sub>Ga<sub>0.55</sub>N-QWs und 4 nm dicken AlN-Barrieren ähnlich hoch. Folglich sollte auch der B-Parameter für die beiden Heterostrukturen vergleichbar sein. Zusätzlich soll darauf hingewiesen werden, dass ein *B*-Parameterwert im Bereich von  $2 \times 10^{-11}$  cm<sup>3</sup>s<sup>-1</sup> sehr häufig in der Literatur zu finden ist [47-50] und unabhängig von der Emissionswellenlänge eine

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> k·p-Simulationen wurden von Martin Guttmann (FBH) durchgeführt.

 $<sup>^2</sup>$  1,4 nm breite  $Al_{0,48}Ga_{0,52}N$  -Quantentöpfe umgeben von 5 nm breiten  $Al_{0,63}Ga_{0,37}N$  : Si-Barrieren.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> 1,5 nm breite Al<sub>0,45</sub>Ga<sub>0,55</sub>N-Quantentöpfe umgeben von 4 nm breiten AlN-Barrieren.

gute Abschätzung der Größe der strahlenden Rekombinationskonstante für eine optimierte AlGaN-MQW-Konfiguration darstellt.

Nun kann mit Hilfe des angenommenen Wertes für *B* auf die anderen beiden Rekombinationskonstanten (*A* und *C*) geschlossen werden. Die Formeln hierfür lassen sich aus der Umformung der Gleichungen 4.2 und 4.4 ableiten:

$$A = \left(\frac{B \cdot P_{max}^{out}}{Q^2 \cdot \eta_{LEE} \cdot E_{ph} \cdot V_R}\right)^{-0.5}$$

$$4.8$$

$$C = \frac{B^2}{Q^2 \cdot A} \tag{4.9}$$

Die einzige hier noch unbekannte Größe ist das Rekombinationsvolumen. Im Gegensatz zu InGaN-basierten LEDs, wo die strahlende Rekombination vermehrt in In-reichen Clustern stattfindet, spielt dieser Effekt bei den AlGaN-LEDs eine weniger relevante Rolle [17]. Aus diesem Grund kann  $V_R$  aus dem Produkt der Mesa-Fläche ( $M = 0,153 \times 10^{-6} \text{ m}^2$ ) und der aus der TEM-Aufnahmen bekannten Breite der Quantentöpfe (je 1,4 nm) berechnet werden und beträgt ( $6,4 \times 10^{-16} \text{ m}^3$ ). Es folgt als Ergebnis  $A = (2\pm1) \times 10^7 \text{ s}^{-1}$  für 265 nm LEDs mit Wachstum auf ELO- und auf HTA-ELO-AlN/Saphir sowie  $A = (6\pm1) \times 10^7 \text{ s}^{-1}$  für Bauelemente auf HTA-AlN/Saphir. Die Auger-Rekombinationskonstanten liegen unabhängig vom Template bei  $C = (4\pm2) \times 10^{-30} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$ .

Die ermittelten Werte können wertvolle Argumente in der Diskussion über die Größe und die Relevanz der einzelnen Rekombinationskonstanten bei AlGaN-Bauelementen liefern. So ist die Rolle der Auger-Rekombination für die strahlende Rekombinationseffizienz und den  $\eta_{EQE}$ -Droop immer noch Gegenstand der wissenschaftlichen Debatten, vergleiche hierzu Kapitel 2. Die Größe des hier extrahierten Wertes für *C* von  $(4\pm2)\times10^{-30}$  cm<sup>6</sup> s<sup>-1</sup> deutet klar in Richtung eines relevanten Beitrages der indirekten Auger-Rekombination zu der totalen Auger-Rekombination hin und stimmt gut mit den neusten theoretischen [48, 53] und experimentellen Werten [39, 53] überein. Für die hier im Rahmen des ABC-Modells untersuchten LEDs spielt somit die Auger-Rekombination eine zentrale Rolle und dominiert mit steigender Ladungsträgerdichte zunehmend die Rekombination im MQW.

Für die ermittelten TDDs liegen auch die Werte für die SRH-Rekombinationskonstanten der Bauelemente mit Wachstum auf HTA- und HTA-ELO-Templates im gleichen Bereich wie die Literaturwerte [170, 145]. Ob allerdings der Beitrag der TDs, PDs und DHLs zur SRH-Rekombination im vorliegenden Fall und in [170] und [145] gleich ist, kann noch nicht abschließend geklärt werden. Bei den 265 nm LEDs mit Wachstum auf HTA- und HTA-ELO-Templates liegen die TDDs mit jeweils  $(0,95\pm0,1)\times10^9$  cm<sup>-2</sup> und  $(1,1\pm0,05)\times10^9$  cm<sup>-2</sup> relativ nah beieinander. Im Gegensatz dazu unterscheiden sich die *A*-Parameter um den Faktor drei und  $\eta_{RRE}$  um mehr als 10 Prozentpunkte. Dies lässt für Bauelemente mit Wachstum auf dem HTA-Template den Schluss einer DHL-dominanten SRH-Rekombination zu. Im Falle der auf ELO-AlN/Saphir gewachsenen 265 nm LEDs wird die erhöhte TDD durch eine geringere Anzahl an DHLs in der MQW-Region kompensiert und mündet im



Abbildung 52: Strahlende Rekombinationseffizienz als Funktion der Durchstoßversetzungsdichte simuliert mit SiLENSe. Die einzelnen Punkte stellen die experimentell ermittelten  $\eta_{RRE}^{max}$ -Werte aus Kapitel 4.4 dar. Der Wert für  $\eta_{RRE}^{max}$  auf dem planaren Template wurde unter der Annahme einer Ladungsträgerinjektionseffizienz von 50% abgeleitet, vergleiche hierzu Kapitel 4.7. Mit unterschiedlich farbigen Linien ist die simulierte  $\eta_{REE}$ -TDD-Abhängigkeit für eine angenommene Loch-Beweglichkeit innerhalb der Quantentöpfe von  $\mu_h = 5 \text{ cm}^2/Vs$  gezeigt.

Vergleich zu den auf HTA-ELO-Template gewachsen Bauelementen in einer vergleichbaren SRH-Rekombinationsrate.

Die in diesem Kapitel berechneten Rekombinationskonstanten können als direkte Eingabeparameter für die realitätsgetreue Simulation von 265 nm LEDs verwendet werden. Solche Simulationen ermöglichen eine gezielte Heterostruktur-Optimierung und können so in Zukunft zum besseren Verständnis sowie zur Leistungssteigerung von DUV-LEDs entscheidend beitragen.

#### 4.6 Einfluss der SRH-Rekombination auf die Effizienz von 265 nm LEDs

Wie bereits am Anfang des Kapitels thematisiert wurde, ist die Reduktion der Durchstoßversetzungsdichte eines der Hauptschwerpunkte bei der Entwicklung und Erforschung von AlGaN-LEDs. Dabei kann durch das homoepitaktische Wachstum von AlN auf AlN-Substraten, im Vergleich zum heteroepitaktischen Wachstum auf Fremdsubstraten, eine Reduktion der TDD um mehrere Größenordnungen erreicht werden [172]. Mit Hilfe von Drift-Diffusions-Simulationen, des ABC-Modells und der bereits ermittelten Rekombinationskonstanten, wird in diesem Unterkapitel der Frage nachgegangen, wie sich die strahlende Rekombinationseffizienz der untersuchten 265 nm LEDs ändern würde, wenn deren Wachstum auf AlN-Substraten erfolgen würde.

Unter der Annahme einer identischen Heterostruktur, sollte die Höhe der strahlende Rekombinationskonstante sowie die Höhe der Auger-Rekombinationskonstante unabhängig vom verwendeten Template beziehungsweise Substrat sein, vergleiche hierzu Kapitel 2. Aus diesem Grund werden die im vorherigen Unterkapitel bestimmten Werte von  $B = 2,4 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{s}^{-1}$  und  $C = 4 \times 10^{-30} \text{ cm}^6 \text{s}^{-1}$  unverändert für die folgende Betrachtung verwendet. Dabei kann zunächst die  $\eta_{RRE}$ -TDD-Abhängigkeit der untersuchten 265 nm LEDs mit den nun bekannten Werten für die Rekombinationskonstanten, wie in Kapitel 2.4.4, simuliert werden. Die anhand von Drift-Diffusions-Simulationen mittels SiLENSe berechneten Ergebnisse befinden sich in der Abbildung 52. Dabei wird deutlich, dass die strahlende Rekombinationseffizienz, aufgrund des hohen Auger-Koeffizienten, auch bei geringen TDDs nicht 100% erreicht. Bei einer Stromdichte von 1 Acm<sup>-2</sup> sättigt die strahlende Rekombinationseffizienz bei knapp 75% für  $TDD < 10^7 \text{ cm}^{-2}$ . Bei höheren Stromdichten rekombinieren immer mehr Ladungsträger durch den Auger-Prozess und die strahlende Rekombinationseffizienz wird für alle TDDs geringer. Deshalb sättigt  $\eta_{RRE}$  für  $j = 60 \text{ Acm}^{-2}$  bereits bei ~55% für TDD < 10<sup>8</sup> cm<sup>-2</sup>. Dieser simulierte  $\eta_{RRE}$ -TDD-Verlauf entspricht qualitativ den realen Gegebenheiten in 265 nm LEDs, stimmt aber quantitativ nicht zwingend mit der Realität überein. Denn mehrere Simulationsparameter, inklusive der Loch-Beweglichkeit in den Quantentöpfen und der genauen Werte für die A-Parameter der einzelnen TDDs, sind nicht genau bekannt. Deshalb können sich die maximal erreichbare strahlende Rekombinationseffizienz, die TDD ab der die Sättigung von  $\eta_{RRE}$ eintritt sowie die Änderung dieser beiden Kenndaten mit der Stromdichte, in Abhängigkeit von den ausgewählten Simulationsparametern, ändern.

Um einen Einblick in die Rekombinationsprozesse zu bekommen, ist es sinnvoll das ABC-Modell mit den genauen Werten für die nicht-strahlenden Rekombinationsraten, anhand des *A*-Parameters, zu verwenden. Wie im letzten Unterkapitel gezeigt wurde, beträgt  $A = (2\pm1)\times10^7$  s<sup>-1</sup> beim Wachstum der 265 nm LEDs auf ELO- und HTA-ELO-AlN/Saphir. Da bei der untersuchten Probenserie keine LEDs mit Wachstum auf einem AlN-Substrat zur Verfügung standen, wird für die SRH-Rekombinationskonstante ein Wert<sup>1</sup> aus der Literatur verwendet:  $A = 7\times10^6$  s<sup>-1</sup> [68]. Mit diesen beiden *A*-Parametern sowie mit den oben aufgelisteten Werten für *B* und *C*, wurde anhand des ABC-Modells (Gleichung 2.13) die strahlende Rekombinationseffizienz von 265 nm LEDs mit Wachstum auf einem AlN-Substrat sowie auf einem ELO- beziehungsweise HTA-ELO-Template in Abhängigkeit von der Stromdichte berechnet (Abbildung 53). Dafür wurde die Ladungsträgerdichte mit Hilfe der folgenden Gleichung [36]:

$$j = qd_{QW} \cdot (An + Bn^2 + Cn^3)/\eta_{CIE}$$

$$4.10$$

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Aufgrund der niedrigen TDD (<  $10^6$  cm<sup>-2</sup>) bei den in [71] untersuchten Bauelementen, ist davon auszugehen, dass der Wert für die angegebene SRH-Rekombinationskonstante durch die Punktdefekte und nicht durch die Durchstoßversetzungen limitiert ist.



Abbildung 53: Unter Berücksichtigung unterschiedlicher SRH-Rekombinationsraten mit Hilfe des ABC-Modells berechnete Abhängigkeit der strahlenden Rekombinationseffizienz von der Stromdichte. Angenommene Rekombinationskonstanten:  $B = 2,4 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{s}^{-1}$  und  $C = 4 \times 10^{-30} \text{ cm}^6 \text{s}^{-1}$ . Bei der Umrechnung der Ladungsträgerdichte in die Stromdichte wurde von einer festen Ladungsträgerinjektionseffizienz von 50% ausgegangen.

in die direkt messbare Stromdichte<sup>1</sup> umgerechnet. Dabei ist  $d_{QW}$  die Gesamtdicke der Quantentöpfe (4,2 nm). Anhand dieser Berechnungen lässt sich festhalten, dass das Wachstum von 265 nm LEDs auf AlN-Substraten zu einer maximalen strahlenden Rekombinationseffizienz von etwa 71% führen würde. Dies ist in etwa um 14 Prozentpunkte höher im Vergleich zu  $\eta_{RRE}^{max}$  von Bauelementen mit Wachstum auf ELOund HTA-ELO-AlN/Saphir ( $\eta_{RRE}^{max} \sim 57\%$ ). Aufgrund der geringen SRH-Rekombinationsrate wird  $\eta_{RRE}^{max}$  für Bauelemente mit Wachstum auf AlN-Substraten, bereits bei einer Stromdichte von etwa 5 Acm<sup>-2</sup> erreicht. Dagegen liegt das  $\eta_{RRE}^{max}$  für 265 nm LEDs auf ELOund HTA-ELO-AlN/Saphir, aufgrund der höheren nicht-strahlende Rekombination, auch bei einer höheren Stromdichte, von etwa 25 Acm<sup>-2</sup>. Um ausreichend hohe optische Ausgangsleistungen zu erreichen, werden DUV-LEDs für gewöhnlich bei einer Stromdichte von um die 60 Acm<sup>-2</sup> betrieben [4]. Aufgrund der vergleichsweise hohen Auger-Rekombinationsrate beträgt die mit Hilfe des ABC-Modells berechnete Differenz der strahlenden Rekombinationseffizienzen ( $\Delta \eta_{RRE}$ ) für 265 nm LEDs mit Wachstum auf AlN-Substraten und für Bauelemente auf ELO- sowie HTA-ELO-Templates bei j = 60 Acm<sup>-2</sup>

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Es wurde eine Ladungsträgerinjektionseffizienz von 50% angenommen, siehe hierzu Kapitel 4.7.

lediglich ~5 Prozentpunkte. Für höhere Stromdichten wird  $\Delta \eta_{RRE}$  zunehmend geringer. Die daraus resultierende Schlussfolgerung ist: Die optische Ausgangsleistung der untersuchten 265 nm LEDs sollte sich bei betriebsrelevanten Stromdichten für TDD  $\leq 10^6$  cm<sup>-2</sup> (AlN-Substrat) und TDD = 1,6×10<sup>9</sup> cm<sup>-2</sup> (ELO-AlN/Saphir) kaum unterscheiden. Selbst wenn im Vergleich zu der vorher angenommenen SRH-Rekombinationsrate ( $A = 7 \times 10^6$  s<sup>-1</sup>) in 265 nm LEDs mit Wachstum auf AlN von einem deutlich niedrigen Wert ausgegangen wird ( $A = 1 \times 10^5$  s<sup>-1</sup>), bleibt die strahlende Rekombinationseffizienz der Bauelemente bei  $j \geq 60$  Acm<sup>-2</sup> nahezu unverändert, Abbildung 53.

Die charakterisierte LED-Serie beinhaltet keine Bauelemente mit Wachstum auf einem AlN-Substrat, deshalb kann die Überprüfung der oben getroffenen Aussage zunächst nicht direkt erfolgen. Allerdings kann diese Behauptung indirekt validiert werden. Denn der Zusammenhang, dass aufgrund des hohen Auger-Koeffizienten  $\Delta \eta_{RRE}$  von 265 nm LEDs mit unterschiedlichen Defektdichten mit zunehmender Stromdichte immer geringer wird, gilt sowohl für Bauelemente, die im Vergleich zu Bauelementen auf ELO- und HTA-ELO-AlN/Saphir eine niedrigere Defektdichte aufweisen, als auch für Bauelemente mit höheren Defektdichten. Sollte sich also die Höhe der hier ermittelten Rekombinationskonstanten als korrekt erweisen, so muss  $\Delta \eta_{RRE}$  von Bauelementen auf ELO- sowie HTA-ELO-AlN/Saphir  $(A = 2 \times 10^7 \text{ s}^{-1})$  und Bauelementen mit einer zum Beispiel etwa vierfach höheren SRH-Rekombinationsrate ( $A = 7 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ ) ab  $j > 25 \text{ Acm}^{-2}$  immer geringer werden und für  $j \sim 250 \text{ Acm}^{-2}$  im Bereich von lediglich 3 Prozentpunkten liegen, Abbildung 53. Dies wiederum kann direkt experimentell anhand des Vergleichs zwischen 265 nm LEDs auf ELO- und HTA-ELO-Templates vor und nach der Alterung untersucht werden. Denn es ist bekannt, dass in DUV-LEDs mit fortschreitender Betriebsdauer zusätzliche nicht-strahlende Rekombinationszentren aktiviert werden, welche den A-Parameter erhöhen und so die strahlende Rekombinationseffizienz der Bauelemente zunehmend beeinträchtigen [15, 173]. Für den Vergleich der Effizienzen von gealterten und nicht gealterten Bauelementen wurden mehrere 265 nm LEDs mit Wachstum auf ELO- und HTA-ELO-AlN/Saphir zu Chips mit Keramikgehäuse aus AlN sowie auf Leiterplatten aus Al, aufgebaut<sup>1</sup>. Um möglichst vergleichbare Bedingungen zu ermöglichen, wurden LEDs mit benachbarter Position auf den jeweiligen Wafern ausgesucht. Ein Teil (nicht gealtert) der aufgebauten Bauelemente wurde direkt nach dem Einbrennen charakterisiert, während der andere Teil (gealtert) erst nach 250h Betrieb<sup>2</sup> (bei  $i = 60 \text{ Acm}^{-2}$  und  $T = 20^{\circ}\text{C}$ ) vermessen wurde. Die Ergebnisse der elektrooptischen Charakterisierung der einzelnen Bauelemente sind in der Abbildung 54 (a) dargestellt. Da die Titkov-Dai-Methode bei den gealterten Bauelementen nicht eingesetzt werden konnte<sup>3</sup>, werden die zur  $\eta_{RRE}$  direkt proportionalen externen Quanteneffizienzen der gealterten und nicht gealterten LED-Chips untereinander

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Der Aufbau erfolgte durch Jan Ruschel (FBH) und Johannes Glaab (FBH).

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Die Alterung erfolgte durch Jan Ruschel (FBH).

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Die Titkov-Dai-Methode konnte bei den gealterten LED-Chips nicht angewandt werden. Der Grund hierfür ist, die hohe Stromdichte bei der  $\eta_{EQE}^{max}$  erreicht wird. Für eine zuverlässige Auswertung der gealterten LED-Chips wären Datenpunkte bis zu einer Stromdichte von etwa 1000 Acm<sup>-2</sup> notwendig. Für solch hohe *j* kann eine konstante Temperatur der Bauelemente, selbst bei gepulsten Messungen, nicht gewährleistet werden.



Abbildung 54: Vergleich der im gepulsten Modus gemessenen (a) externen Quanteneffizienz und der (b) optischen Ausgangsleistung von gealterten und nicht gealterten 265 nm LED-Chips.

verglichen<sup>1</sup>. Dabei erreichen die nicht gealterten Bauelemente eine höhere maximale externe Quanteneffizienz und das bei einer niedrigeren Stromdichte ( $\eta_{EQE}^{max} \sim 2,4\%$  bei etwa 20 Acm<sup>-2</sup>) als die gealterten LED-Chips ( $\eta_{EOE}^{max} \sim 1.9\%$  bei etwa 120 Acm<sup>-2</sup>). Anhand der Stromdichte bei der  $\eta_{EQE}^{max}$  erreicht wird, lässt sich der A-Parameter der gealterten Bauelemente bestimmen. Dieser entspricht dem in Abbildung 53 angenommenen Wert von  $A = (7\pm1) \times 10^7$  s<sup>-1</sup> für Bauelemente mit einer hohen Defektdichte im MQW. Somit sollten die gemessenen  $\eta_{EOE}$ -*j*-Abhängigkeiten der gealterten und der nicht gealterten Bauelemente aus Abbildung 54 (a), sich analog zu der in Abbildung 53 theoretisch vorausgesagten Entwicklung verhalten. In der Tat, wie es anhand des ABC-Modells und der berechneten A-Parameter vorausgesagt wurde, ist die Differenz der externen Quanteneffizienzen zwischen gealterten und nicht gealterten Bauelementen ( $\Delta \eta_{EOE}$ ) für *j* < 25 Acm<sup>-2</sup> sehr groß. Ebenfalls im Einklang mit den Berechnungen anhand des ABC-Modells sinkt allerdings  $\Delta \eta_{EOE}$  für *j* > 25 Acm<sup>-2</sup> zunehmend, bis bei etwa 250 Acm<sup>-2</sup> kein relevanter Unterschied zwischen der Effizienz von gealterten und nicht gealterten Bauelementen mehr erkennbar ist. Der  $\eta_{EOE}$ -Droop äußert sich auch in den optischen Ausgangsleistungen. Für hohe Stromdichten unterscheidet sich Pout von gealterten und nicht gealterten LED-Chips kaum, Abbildung 54 (b).

Somit kann anhand des Vergleichs zwischen gealterten und nicht gealterten 265 nm LED-Chips von der Korrektheit der berechneten Werte für die einzelnen *A-, B-* und *C-*Rekombinationskonstanten sowie der Anwendbarkeit des ABC-Modells für die untersuchten Bauelemente ausgegangen werden. Dies impliziert auch die Gültigkeit der

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Es wird in erster Näherung davon ausgegangen, dass die Lichtextraktionseffizienz sowie die Ladungsträgerinjektionseffizienz sich mit der Alterungsdauer, im Vergleich zu der strahlenden Rekombinationseffizienz, nur schwach verändern und einen geringfügigen Einfluss auf die  $\eta_{EQE}$ -*j*-Abhängigkeit haben.

experimentell zu überprüfenden Behauptung, dass aufgrund der hohen Auger-Rekombination in den hier untersuchten 265 nm LEDs eine Reduktion der TDD unterhalb von 1,6×10<sup>9</sup> cm<sup>-2</sup> (ELO-AlN/Saphir) lediglich für Stromdichten die kleiner als 25 Acm<sup>-2</sup> sind, eine relevante Steigerung der strahlenden Rekombinationseffizienz zu erwarten ist. Der Auger-Koeffizient ist ein intrinsischer Materialparameter und kann für eine gegebene AlGaN-Zusammensetzung nicht aktiv verändert werden (Kapitel 2.4.2). Folglich kann der bereits diskutierte  $\eta_{RRE}$ - beziehungsweise  $\eta_{EQE}$ -Droop beim Betrieb von AlGaN-Bauelementen bei hohen Ladungsträgerdichten nicht vermieden werden. Um für künftige Anwendungen eine bestimmte optische Ausgangsleistung zu erreichen und dabei dennoch von der hohen strahlenden Rekombinationseffizienz von Bauelementen mit Wachstum auf Substraten beziehungsweise Templates mit niedrigen Defektdichten zu profitieren, kann die LED-Heterostruktur und/oder das Chip-Design für einen Betrieb bei niedrigen Ladungsträgerdichten, in der Nähe von  $\eta_{EOE}^{max}$ , optimiert werden. Dies kann durch die Vergrößerung des Rekombinationsvolumens im MQW-Bereich erreicht werden. Denn für größere Rekombinationsvolumina können bei gleicher Ladungsträgerdichte insgesamt mehr Ladungsträger rekombinieren. So kann die benötigte optische Ausgangsleistung bei niedrigeren Ladungsträgerdichte erreicht werden, wo die strahlende einer Rekombinationseffizienz weniger stark von der Auger-Rekombination beeinträchtigt wird. Das Rekombinationsvolumen in der MQW-Region einer LED setzt sich aus dem Produkt der Mesa-Fläche und der Summe der Dicken der einzelnen QWs zusammen. So kann zum Beispiel die LED-Chip-Fläche vergrößert werden und damit ohne eine Änderung der Heterostruktur das Rekombinationsvolumen erweitert werden. Die Erhöhung des Rekombinationsvolumens durch die größere Gesamtdicke der QWs erfordert allerdings eine Änderung der Heterostruktur und kann durch die Verwendung einer höheren QW-Anzahl und/oder durch die Verwendung von dickeren QWs erreicht werden. Allerdings müssen bei künftigen Untersuchungen in Bezug auf die Vergrößerung des Rekombinationsvolumens in DUV-LEDs mehrere Faktoren beachtet werden. Um die einzelnen Quantentöpfe in einem vergleichbaren Maß mit Ladungsträgern zu besetzen, muss ein effizienter Ladungsträgertransport durch die MQW-Barrieren gewährleistet werden. Deshalb ist bei der Optimierung der Bauelemente mit einer erhöhten QW-Anzahl, auch eine Variation der Breite und der Legierungszusammensetzung der MQW-Barrieren von Interesse. Bei dem Ansatz der dickeren QWs muss der Überlapp der Elektronen- und Lochwellenfunktionen beziehungsweise der entsprechende Einfluss auf den B-Parameter im Blick behalten werden. Denn ein geringer B-Parameter verringert die strahlende Rekombinationseffizienz (Kapitel 2.4.5) und kann die Effizienzsteigerung durch die Reduktion der SRH-Rekombination beim Wachstum der LEDs auf Substraten beziehungsweise Templates mit einer niedrigen Defektdichte obsolet machen.

Schließlich soll noch bemerkt werden, dass bei einer Vergrößerung der Mesa-Fläche die Materialkosten für die Fertigung der einzelnen LED-Chips steigen werden. Auch bei einer Erhöhung der QW-Anzahl und einer Verbreiterung der einzelnen QWs steigt die Wachstumszeit der Bauelemente und damit auch die Produktionskosten. Schließlich muss bei der industriellen Fertigung ein optimales Design gefunden werden, welches den niedrigsten Preis pro Milliwatt der optischen Ausgangsleistung ermöglicht.

## 4.7 Ladungsträgerinjektionseffizienz von 265 nm LEDs

**Bisher** existiert keine Methode für die direkte Messung der Ladungsträgerinjektionseffizienz in LEDs. Deshalb kann  $\eta_{CLE}$  lediglich indirekt, aus anderen Größen, abgeleitet werden. So kann unter Benutzung der Gleichung  $\eta_{CIE} = \eta_{EQE}/$  $(\eta_{RRE}^{max} \cdot \eta_{LEE})$  und mit Hilfe von gemessenen  $\eta_{EQE}^{max}$ , mittels Raytracing-Simulationen bestimmten  $\eta_{LEE}$  und in Kapitel 4.4 ermittelten  $\eta_{RRE}^{max}$  die Ladungsträgerinjektionseffizienz der untersuchten 265 nm LEDs berechnet werden. Die Ergebnisse dieser Berechnung sind der Abbildung 55 zusammengefasst. Im Gegensatz zu der strahlenden in Rekombinationseffizienz sind die  $\eta_{CIE}$ -Werte aller charakterisierten Bauelemente untereinander vergleichbar und liegen unabhängig vom verwendeten Template zwischen 40% und 55%. Wie in Kapitel 2.5 detailliert geschildert wurde, hängt  $\eta_{CIE}$  in erster Linie von der Heterostruktur der LED ab. Da die Heterostruktur aller untersuchten LEDs nominell gleich ist, sind vergleichbare und vom verwendeten Template unabhängigen  $\eta_{CIE}$ -Werte erwartet. Anhand der berechneten Ladungsträgerinjektionseffizienz kann geschlussfolgert werden, dass bei den untersuchten 265 nm LEDs mindestens die Hälfte aller injizierten Ladungsträger außerhalb der Quantentöpfe rekombiniert und für den Beitrag zur optischen Ausgangsleistung nicht zur Verfügung steht. Dabei muss hinzugefügt werden, dass die vergleichsweise niedrigen  $\eta_{CIE}$ -Werte keine Folge der fehlenden Heterostruktur-Optimierung sind. Denn bei den hier untersuchten LEDs wurde eine Heterostruktur verwendet, welche durch eine systematische Variation der Breite und des Al-Anteils im HIL, im EBL sowie den Quantenbarrieren für die Maximierung der Ladungsträgerinjektionseffizienz gestaltet wurde. Die Gruppen von Hao et al. [68] und Ishii et al. [83] untersuchten ebenfalls die Ladungsträgerinjektionseffizienz von DUV-LEDs mit einer Emissionswellenlänge von 265 nm. Beide Gruppen wandten ein modifiziertes ABC-Modell auf EL-Charakteristika der untersuchten Bauelemente an und berichten ebenfalls von  $\eta_{CIE}$ -Werten im Bereich von 50%. Somit sinkt die Injektionseffizienz von nahe 100% für InAlGaN-LEDs mit Emissionswellenlängen im blauen Spektralbereich [174] etwa um die Hälfte für 265 nm LEDs. Der wahrscheinlichste Grund hierfür ist die Verwendung eines höheren Al-Anteils im MQW und damit in der gesamten LED-Heterostruktur. Dadurch wird zum einen die Potenzialbarriere für die Elektronen aus der MQW-Region in Richtung der p-Seite immer weiter reduziert und führt so zum Anstieg des Elektronenleckstroms. Zum Anderem erfordert dies die Nutzung eines EBLs mit einem hohen Al-Anteil und erschwert somit die Injektion der Löcher in die MQW-Region. All diese Faktoren führen zur Absenkung der Ladungsträgerinjektionseffizienz für kurzwellige UV-LED. Es ist zu erwarten, dass dieser Trend auch für Emissionswellenlängen < 265 nm besteht [81]. Des Weiteren wird hierdurch deutlich, dass die Erhöhung der Ladungsträgerinjektionseffizienz einen wichtigen Baustein auf dem Weg zu effizienten DUV-LEDs darstellt.

In den letzten Jahrzehnten wurden mehrere Konzepte zur Steigerung der  $\eta_{CIE}$  erarbeitet. Eines der vielversprechendsten davon ist die Polarisationsdotierung von *p*-dotierten Schichten [175], welche im Unterschied zu der Mg-Dotierung eine hohe Konzentration der Löcher, auch bei Schichten mit einem hohen Al-Anteil, gewährleistet. Des Weiteren kann die Benutzung der sogenannten "*graded last barrier*", mit einer stetigen Absenkung des Al-



Abbildung 55: Ladungsträgerinjektionseffizienz als Funktion der maximalen internen Quanteneffizienz von 265 nm LEDs mit Wachstum auf drei verschiedenen AlN/Saphir-Templates.

Anteils in der letzten MQW-Barriere [176], zu einer Erhöhung der Potenzialbarriere für die Elektronen in Richtung der *p*-Seite führen und gleichzeitig die Injektionsbarriere für die Löcher in Richtung der MQW-Region absenken. Schließlich kann durch das Ersetzen einer konventionellen Elektronensperrschicht durch Multiquantumbarrieren, über die Einstellung der Elektroneninterferenz über die Al-Anteile und Schichtdicken, eine zusätzliche, virtuelle Barriere für die Elektronen in Richtung der *p*-Seite erreicht werden [177, 178].

#### 4.8 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde die Effizienz von 265 nm LEDs mit Wachstum auf AlN/Saphir-Templates mit unterschiedlichen Durchstoßversetzungsdichten analysiert. Das MOVPE-Wachstum der untersuchten Bauelemente erfolgte gleichzeitigen auf vier unterschiedlichen Templates: planar, HTA-, ELO- und HTA-ELO-AlN/Saphir, mit den zugehörigen TDDs von  $(4,0\pm0,3)\times10^9$  cm<sup>-2</sup>,  $(1,1\pm0,05)\times10^9$  cm<sup>-2</sup>,  $(1,6\pm0,3)\times10^9$  cm<sup>-2</sup> ieweils und  $(0,95\pm0,1)\times10^9$  cm<sup>-2</sup>. Dabei wurde die externe Quanteneffizienz der LEDs mittels der Elektrolumineszenz-Spektroskopie gemessen und für jedes Bauelement in drei aufgeteilt: die Ladungsträgerinjektionseffizienz, Teileffizienzen die strahlende Rekombinationseffizienz und die Lichtextraktionseffizienz. Anhand des Karpov-Makarov-

Modells wurde eine Skalierung der strahlenden Rekombinationseffizienz und folglich der Gesamteffizienz der Bauelemente mit der TDD in der MQW-Region erwartet. Die Analyse der gemessenen externen Quanteneffizienz zeigte jedoch, dass Bauelemente auf dem ELO-Template ( $\eta_{EQE}^{max}$  = 1,8%), trotz deutlich höherer TDD, vergleichbare und teilweise sogar höhere  $\eta_{EQE}^{max}$ -Werte aufweisen als 265 nm LEDs mit Wachstum auf HTA-ELO-AlN/Saphir  $(\eta_{EOE}^{max} = 1,9\%)$  und HTA-AlN/Saphir  $(\eta_{EOE}^{max} = 1,4\%)$ . Um einen direkten Vergleich der strahlenden Rekombinationseffizienz der einzelnen Bauelemente zu ermöglichen, wurden deren EL-Charakteristiken nach dem Titkov-Dai-Verfahren ausgewertet. Für 265 nm LEDs mit Wachstum auf dem HTA-Template beträgt  $\eta_{RRE}^{max} = (45 \pm 4)\%$ . Die maximalen strahlenden Rekombinationseffizienzen von Bauelementen auf ELO- und HTA-ELO-AlN/Saphir sind höher und liegen bei jeweils  $\eta_{RRE}^{max}$  = (55±6)% und  $\eta_{RRE}^{max}$  = (57±5)%. Die Anwendbarkeit des Titkov-Dai-Verfahrens und des ABC-Modells für die hier untersuchten Bauelemente wurde anhand über mehrere Größenordnungen übereinstimmender theoretischer und experimenteller  $\eta_{EOE}$ - $\Pi$ -Verläufe von LEDs in unterschiedlichen Aufbaustadien validiert. Zusätzlich wurden die absoluten Werte für die strahlende Rekombination anhand von resonanten TRPL-Messungen bestätigt.

Um den Grund für die fehlende Skalierung zwischen der Durchstoßversetzungsdichte in der MQW-Region und  $\eta_{RRE}^{max}$  bei den analysierten 265 nm LED-Serie ausfindig zu machen, erfolgten im nächsten Schritt TEM- und HR-XRD-Untersuchungen. Dabei wurde gezeigt, dass das AlN, welches dem HTA-Schritt ausgesetzt wurde, eine zusätzliche kompressive Verspannung aufweist und was zu einer vermehrten Ausbildung von Versetzungshalbringen in der gesamten LED-Heterostruktur führt. Versetzungshalbringe können neben Durchstoßversetzungen und Punktdefekten als nicht-strahlende Rekombinationszentren in der MQW-Region agieren und sind der wahrscheinlichste Grund für die ähnlich hohe beziehungsweise niedrigere Effizienz von 265 nm LEDs mit Wachstum auf dem HTA-ELO- und dem HTA-Template, im Vergleich zu den Bauelementen auf dem ELO-Template. Um dennoch von der reduzierten TDD bei Bauelementen mit Wachstum auf HTA-ELO- und HTA-Templates zu profitieren und der Entstehung von DHLs entgegenzuwirken, kann der zusätzliche kompressive Stress durch die Si-Dotierung von AlN abgebaut werden.

Die Auswertung nach der Titkov-Dai-Methode ermöglichte weiterhin die Abschätzung der SRH- und der Auger-Rekombinationskonstanten. Für 265 nm LEDs auf ELO- und auf HTA-ELO-Templates liegt die SRH-Rekombinationskonstante bei  $A = (2\pm 1) \times 10^7 \text{ s}^{-1}$  und steigt auf  $A = (6\pm 2) \times 10^7 \,\text{s}^{-1}$  für Bauelemente auf HTA-AlN/Saphir. Der Wert der Auger-Rekombinationskonstanten ist für alle charakterisierten Bauelemente vergleichbar und beläuft sich auf  $C = (4\pm 2) \times 10^{-30}$  cm<sup>6</sup> s<sup>-1</sup>. Die Höhe des berechneten C-Parameters stimmt gut mit den neusten theoretischen und experimentellen Ergebnissen überein und lässt den Schluss eines signifikanten Beitrags der indirekten Auger-Rekombination zum  $\eta_{EOE}$ -Droop zu. Anhand von Drift-Diffusions-Simulationen und des ABC-Modells wurde weiterhin der Auger-Rekombination gezeigt, dass aufgrund starken die strahlende Rekombinationseffizienz der untersuchten Bauelemente sogar beim Wachstum auf AlN-Substraten mit einer äußerst geringen TDD stets unter 100% bleibt. Weiterhin zeigen die Simulationsergebnisse, dass die strahlende Rekombinationseffizienz der untersuchten

265 nm LEDs sich beim Wachstum auf Substraten beziehungsweise Templates mit TDD  $< 1,6 \times 10^9$  cm<sup>-2</sup> (ELO-AlN/Saphir) aufgrund der hohen Auger-Rekombinationsrate bei betriebsrelevanten Stromdichten (~60 Acm<sup>-2</sup>) kaum verändern würde. Es wurden dennoch Wege aufgezeigt, wie durch eine Vergrößerung des Rekombinationsvolumens ein effizienter Betrieb von DUV-LEDs mit niedrigen Defektdichten ermöglicht werden kann. Zusätzlich konnte aus der gemessenen externen Quanteneffizienz, der simulierten Lichtextraktionseffizienz und der ermittelten strahlenden Rekombinationseffizienz auch die Ladungsträgerinjektionseffizienz der untersuchten 265 nm LEDs berechnet werden. Unabhängig vom Template liegt  $\eta_{CIE}$  aller untersuchten Bauelemente zwischen 40% und 55%. Somit reduziert die Ladungsträgerinjektionseffizienz die externe Quanteneffizienz für verwendete Heterostruktur im vergleichbaren Maß wie die strahlende die Rekombinationseffizienz. Aus diesem Grund ist die Optimierung der oft überschätzten Ladungsträgerinjektionseffizienz, zum Beispiel anhand der im Kapitelverlauf vorgeschlagenen Konzepte, ein vielversprechenderer Ansatz zur Steigerung der Gesamteffizienz von DUV-LEDs.

Anschließend konnte unter der Annahme von  $\eta_{CIE} = 50\%$ , auch ein Richtwert für  $\eta_{RRE}^{max}$  von (12±3)% der 265 nm LEDs mit Wachstum auf dem planaren Template bestimmt werden.

Alle relevanten Werte in Bezug auf die untersuchte Serie sind in der Tabelle 4 zusammengefasst.

AlN/Saphir Template	Spezifikation	TDD ×10 <sup>9</sup> (cm <sup>-2</sup> )	$\eta^{max}_{EQE}$ (%)	η <sub>LEE</sub> (%)	$\eta_{IQE}^{max}$ (%)	$\eta_{RRE}^{max}$ (%)	η <sub>cie</sub> (%)
planar	on-wafer	4,0±0,3	0,4	5,9 <u>±</u> 0,6	5	12 <u>+</u> 3	501
HTA	on-wafer	1,1 <u>+</u> 0,05	1,8	6,1 <u>±</u> 0,6	23	45 <u>+</u> 4	51 <u>+</u> 7
ELO	on-wafer	1,6 <u>+</u> 0,2	1,4	6,8 <u>±</u> 0,7	25	55 <u>+</u> 6	45 <u>+</u> 6
HTA-ELO	on-wafer	0,95 <u>+</u> 0,1	1,9	6,7 <u>±</u> 0,7	27	57 <u>±</u> 5	46±7
HTA-ELO	aufgebaut	0,95 <u>+</u> 0,1	2,6	9,2 <u>±</u> 0,9	30	60±4	52±7
HTA-ELO	aufgebaut und verkapselt	0,95 <u>+</u> 0,1	4,7	12,8 <u>+</u> 1,3	35	60 <u>±</u> 6	58 <u>+</u> 7

Tabelle 4: Zusammenfassung von relevanten Charakteristiken der untersuchten 265 nm LEDs.

 $<sup>^1</sup>$  Angenommener Wert anhand der berechneten  $\eta_{CIE}$ -Werte aus Kapitel 4.7, in dem gezeigt wurde, dass die Ladungsträgerinjektionseffizienz der untersuchten 265 nm LEDs unabhängig vom Template zwischen 40% und 55% liegt.

## 5 Effizienz von 233 nm LEDs

Die externe Quanteneffizienz von DUV-LEDs im UVC-Spektralbereich ist äußerst niedrig und nimmt zu kürzeren Emissionswellenlängen hin nahezu exponentiell ab, Abbildung 1 (Kapitel 1). Die Gründe hierfür sind nicht endgültig erforscht. Die Abnahme der Lichtextraktionseffizienz, aufgrund der zunehmend dominanten transversal magnetischen Polarisation und der somit erschwerte Auskopplung der generierten Photonen in DUV-LEDs mit kurzen Emissionswellenlängen, spielt mit Sicherheit eine Schlüsselrolle für die niedrige Effizienz dieser Bauelemente [30]. Allerdings kann die Reduktion von  $\eta_{LEE}$  nicht vollständig die exponentielle  $\eta_{EQE}$ -  $\lambda$ -Abhängigkeit von DUV-LEDs im UVC-Spektralbereich erklären [40]. Für kurze Emissionswellenlängen von DUV-LEDs sinkt folglich neben der Lichtextraktionseffizienz auch die interne Quanteneffizienz, das Produkt aus  $\eta_{RRE}$  und  $\eta_{CIE}$ , dieser Bauelemente. Um einen Einblick in die Verteilung der einzelnen Teileffizienzen der  $\eta_{EOE}$  von DUV-LEDs mit besonders kurzen Emissionswellenlängen zu bekommen, werden in diesen Kapitel DUV-LEDs mit  $\lambda$  = 233 nm, anhand der in Kapitel 4.3 dargelegten Titkov-Dai-Methodik, analysiert. Bei den untersuchten DUV-LEDs handelt es sich zum Zeitpunkt der Veröffentlichung dieser Arbeit um Bauelemente mit weltweit einer der höchsten externen Quanteneffizienzen bei  $\lambda$  = 233 nm, mit  $\eta_{EQE}^{max} \sim 1\%$  im aufgebauten Zustand [143]. Folglich können die hier gewonnen Erkenntnisse helfen das größte Optimierungspotenzial für die Effizienz von heutigen DUV-LEDs mit besonders kurzen Emissionswellenlängen zu identifizieren und einen wichtigen Schritt zum Verständnis der global beobachteten exponentiellen  $\eta_{EQE}$ - $\lambda$ -Abhängigkeit von DUV-LEDs darstellen.



Abbildung 56: Schematische Darstellung der Heterostruktur der untersuchten DUV-LEDs mit  $\lambda = 233$  nm.

### 5.1 Heterostruktur von 233 nm LEDs

Im Gegensatz zu den in den Kapiteln 0 und 4 untersuchten Bauelementen wurden die in diesem Kapitel analysierten DUV-LEDs nicht an der TU-Berlin produziert, sondern am Ferdinand-Braun-Institut. Bei den charakterisierten **DUV-LEDs** mit einer Emissionswellenlänge von 233 nm (im Folgenden 233 nm LEDs genannt) wurde ein neuartiges DGA-AlN/Saphir-Template<sup>1</sup> (engl. double growth and double annealed) verwendet. Die Herstellung von DGA-Templates erfolgt zunächst ähnlich wie die Herstellung von HTA-Templates (Kapitel 4.1), es wird aber anschließend ein zweites Mal AlN abgeschieden und ebenfalls einem Hochtemperaturschritt ausgesetzt [169]. Im vorliegenden Fall wurde zunächst eine 400 nm dicke AlN-Schicht auf das Saphir-Substrat abgeschieden und anschließend für 3 Stunden bei 1720°C getempert. Diese Struktur wurde als nächstes in einer MOVPE-Anlage mit einer 1100 nm dicken AlN-Schicht überwachsen und für weitere 5 Stunden einer Temperatur von 1720°C ausgesetzt. Durch diese Vorgehensweise konnte die Durchstoßversetzungsdichte auf 2×10<sup>8</sup> cm<sup>-2</sup> [143] im AlN des DGA-AlN/Saphir-Templates reduziert werden. Zum Vergleich, die TDD in AlN auf den HTA-ELO-Templates aus Kapitel 4, ist mit  $(9,5\pm1)\times10^8$  cm<sup>-2</sup> um etwa das Fünffache höher. Das DGA-Template wurde anschließend mit der LED-Heterostruktur überwachsen<sup>2</sup>. Dabei wurde zunächst eine 500 nm dicke AlN-Pufferschicht abgeschieden, gefolgt von einer

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Das DGA-Template wurde von Silvia Hagedorn (FBH) hergestellt.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Das MOVPE-Wachstum der 233 nm LEDs erfolgte durch Tim Kolbe (FBH).

900 nm dicken Si-dotierten *n*-Al<sub>0,84</sub>Ga<sub>0,16</sub>N-Stromspreizschicht, einem dreifach MQW mit Al<sub>0,72</sub>Ga<sub>0,28</sub>N-Quantentöpfen und Al<sub>0,80</sub>Ga<sub>0,20</sub>N:Si-Quantenbarrieren. Anschließend wurde die *p*-Seite der Bauelemente gewachsen. Diese bestehet aus einem 2 nm dicken AlN-EBL, einem 100 nm dicken HIL, einer dünnen Übergangsschicht und einer hoch-dotierten und 20 nm dicken GaN:Mg-*p*-Kontaktschicht. Dabei handelt es sich sowohl bei dem HIL als auch bei der Übergangsschicht um undotierte DPDs, mit jeweiligen Gradienten von AlN zu Al<sub>0,82</sub>Ga<sub>0,18</sub>N auf GaN. Eine schematische Darstellung der LED-Heterostruktur befindet sich in Abbildung 56.

Nach dem MOVPE-Wachstum der LED-Heterostruktur wurden die einzelnen Wafer unter Verwendung von standard-photolithographischen Techniken zu LEDs prozessiert<sup>1</sup>. Dabei wurden zunächst die Mg-Akzeptoren in der *p*-Kontaktschicht in einem Gasgemisch aus Stickstoff (70%) und Sauerstoff (30%) durch eine Wärmebehandlung aktiviert. Als *n*-Kontakt wurde eine V/Al-basierte Metalllegierung verwendet, als *p*-Kontakt kam ein Pt-basierter Metallstapel zum Einsatz. Weitere Details Bezüglich der Wachstumsparameter, der Heterostruktur und der Prozessierung befinden sich in [143].

#### 5.2 Teileffizienzen der externen Quanteneffizienz von 233 nm LEDs

Die hergestellten DUV-LEDs wurden zunächst mit Hilfe der Elektrolumineszenz-Spektroskopie durch eine in Kapitel 2.6 beschriebene Kombination aus cw und gepulsten Messungen auf Wafer-Ebene charakterisiert<sup>2</sup>. Da die Effizienz von DUV-LEDs sich äußerst sensitiv gegenüber der Emissionswellenlänge vor allem im Wellenlängenbereich  $\leq 240$  nm verhält [179], wurden lediglich Bauelemente mit  $\lambda = (233\pm0.5)$  nm für die weitere Auswertung ausgewählt. Eine für DUV-LEDs aus der charakterisierten Serie repräsentative  $P_{out}$ - $\eta_{EQE}$ -*j*-Kennlinie, inklusive eines Emissionsspektrums, ist in der Abbildung 57 dargestellt. Die Bauelemente erreichen auf Wafer-Ebene im Durchschnitt eine optische Ausgangsleistung von 10 mW bei *j* = 100 Acm<sup>-2</sup>, wobei das Maximum der externen Quanteneffizienz bei einer Stromdichte von etwa 20 Acm<sup>-2</sup> liegt und im Durchschnitt 0,6% beträgt. Aufgrund der lediglich 20 nm dünnen GaN:Mg-*p*-Kontaktschicht sind die hier untersuchten 233 nm LEDs teiltransparent. Deshalb wird das in die *p*-Seiten-Hemisphäre emittierte Licht nicht vollständig absorbiert. Ein Teil davon wird am *p*-Kontakt reflektiert und kann dann in Richtung des Substrats zusätzlich ausgekoppelt werden. So beträgt die anhand von Polarisationsgradmessungen und Monte-Carlo Raytracing-Simulationen<sup>3</sup>

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Prozessierung und der anschließende Aufbau der DUV-LEDs zu Chips erfolgte durch Jens Rass (FBH) und Hyun Kyong Cho (FBH).

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Die EL-Charakterisierung der Bauelemente erfolgte gemeinsam mit Marcella Marggraf (TUB) und Fedir Bilchenko (TUB).

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Die Raytracing-Simulationen und Polarisationsgradmessungen wurden von Martin Guttmann (FBH) und Jakob Höfner (TUB) durchgeführt.



Abbildung 57: Repräsentative  $P_{out}$ - $\eta_{EQE}$ -j-Kennlinie einer auf Wafer-Ebene und bei Raumtemperatur gepulst charakterisierten DUV-LED mit  $\lambda = 233$  nm. Der eingebettete Graph zeigt das normierte Emissionsspektrum der DUV-LED, aufgenommen bei 5 Acm<sup>-2</sup>.

bestimmte Lichtextraktionseffizienz dieser Bauelemente  $(5,3\pm0,5)\%^1$ . Folglich liegt  $\eta_{IQE}^{max}$ bei den untersuchten 233 nm LEDs bei lediglich  $(11\pm1)\%$ . Zum Vergleich,  $\eta_{IQE}^{max}$  von 265 nm LEDs mit Wachstum auf HTA-ELO-AlN/Saphir aus Kapitel 4 beträgt rund 27% und ist damit um mehr als Faktor zwei höher. Um herauszufinden zu welchen Anteilen die Ladungsträgerinjektionseffizienz und die strahlende Rekombinationseffizienz zum  $\eta_{IQE}^{max}$ der 233 nm LEDs mit Wachstum auf DGA-AlN/Saphir beitragen, wurde die in Kapitel 4.3 beschriebene Titkov-Dai-Methode zur Bestimmung von  $\eta_{RRE}^{max}$  angewandt.

Die EL-Charakteristiken einer der analysierten 233 nm LEDs in der  $\eta_{EQE}^{max}/\eta_{EQE}$ - $\Pi^{1/2}+\Pi^{-1/2}$ -Darstellung, sind in der Abbildung 58 (a) gezeigt. Aus der Anpassung der experimentellen Daten mit Hilfe einer Fit-Geraden ergibt sich für diese LED ein aus Abbildung 58 (a) ein  $\eta_{RRE}^{max} = (43\pm7)\%$ , was auch den Durchschnitt auf dem charakterisierten Wafer darstellt. Dabei fällt auf, dass der ABC-Fit für hohe Emissionsleistungen beziehungsweise Stromdichten, trotz gepulster Messungen, nicht ganz präzise den gemessenen  $\eta_{EQE}$ -  $\Pi$ -Verlauf wiedergibt, Abbildung 58 (b). Der Grund hierfür ist vermutlich der Rückgang der Ladungsträgerinjektionseffizienz mit der Stromdichte oder/und die betriebsbedingte Aufheizung der Bauelemente aufgrund des hohen Al-Anteils und die damit verbundenen hohen Schichtwiderstände (Kapitel 3) innerhalb der Heterostruktur der 233 nm LEDs. Da die Abweichung allerdings außerhalb des  $\eta_{EQE}^{max}$  stattfindet, wurden diese in Abbildung 58 weiß markierten Messpunkte, entsprechend den

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Es soll darauf hingewiesen werden, dass die hier angegebenen Werte für die Lichtextraktionseffizienz und die Abstrahlung wie bei einer Charakterisierung in einer Ulbricht-Kugel in alle Raumrichtungen und nicht nur auf die Detektorgröße bezogen sind, vergleiche Kapitel 2.3.



Abbildung 58: (a) Fit der experimentell ermittelten EL-Charakteristiken von 233 nm LEDs in der  $\eta_{EQE}^{max}/\eta_{EQE}$  gegen  $\Pi^{1/2} + \Pi^{-1/2}$ -Darstellung. Die weiß-gefüllten Datenpunkte wurden bei dem Fit nicht berücksichtigt. Die magentafarbigen Linien dienen zur Fehlerabschätzung. (b) Vergleich der ABC-Fits mit der experimentell ermittelten Abhängigkeit der externen Quanteneffizienz von der normierten optischen Ausgangsleistung der untersuchten 233 nm LED aus (a).

Überlegungen in Kapitel 4.3, nicht für die Anpassung der  $\eta_{EQE}^{max}/\eta_{EQE}$ - $\Pi^{1/2}$ + $\Pi^{-1/2}$ -Kurven verwendet und haben demzufolge keine Auswirkungen auf den Wert von  $\eta_{RRE}^{max}$ .

Als nächstes kann aus den gemessenen  $\eta_{EQE}^{max}$ , dem simulierten  $\eta_{LEE}$  und den soeben bestimmten  $\eta_{RRE}^{max}$  auch die Ladungsträgerinjektionseffizienz der untersuchten 233 nm LEDs bestimmt werden und beträgt (26±8)%.

Somit kann geschlussfolgert werden, dass sich bei den untersuchten 233 nm LEDs die maximale externe Quanteneffizienz von etwa 0,6% wie folgt zusammensetzt: von den an den Kontakten der Bauelemente injizierten Ladungsträgern erreichen weniger als ein Drittel die MQW-Region, davon rekombiniert weniger als die Hälfte der Ladungsträger strahlend, wobei lediglich jedes zwanzigste generierte Photon die LED auch verlassen und detektiert werden kann. Dies gilt für auf Wafer-Ebene charakterisierte Bauelemente mit  $\eta_{LEE} = (5,3\pm0,5)$ %. Nach dem Vereinzeln und dem Aufbauen der DUV-LEDs zum Chip konnte die Lichtextraktionseffizienz gesteigert werden und beträgt etwa (8,8±0,8)%. Damit erreichen die 233 nm LED-Chips im cw-Betrieb ein  $\eta_{EQE}^{max}$  von etwa 1% [143] und ein  $P_{out}$  von etwa 7 mW bei j = 50 Acm<sup>-2</sup>, Abbildung 59.

Nichtsdestotrotz bleibt die Auskopplung der generierten Photonen aus den Bauelementen das größte Hindernis auf dem Weg zu effizienten DUV-LEDs mit  $\lambda$  = 233 nm. Für eine Erhöhung der  $\eta_{LEE}$  sind unter anderem Konzepte wie strukturierte Substrate [180], photonische Kristalle [181] und Bauelemente mit vollständig transparenter *p*-Seite [182] vielversprechend. Die zweitniedrigste Teileffizienz der  $\eta_{EQE}$  von den untersuchten 233 nm LEDs ist die Ladungsträgerinjektionseffizienz mit (26±8)%. Somit nimmt  $\eta_{CIE}$  um etwa einen Faktor zwei im Vergleich zu den 265 nm LEDs aus Kapitel 4 ab. Neuste Untersuchungen [81] zeigen, dass vor allem die Injektion der Löcher in die MQW-Region



Abbildung 59: Die in <u>cw</u> vermessene<sup>1</sup>  $P_{out}$ - $\eta_{EQE}$ -j-Kennlinie einer zum Chip aufgebauten und in der Ulbricht-Kugel 235 nm LED. Das Überrollen der Emissionsleistung hängt mit der Aufheizung des LED-Chips zusammen, welches im cw-Betrieb trotz der Wärmesenke, stark ausgeprägt ist.

mit kürzer werdender Emissionswellenlänge der DUV-LEDs zunehmend erschwert wird und so den Wert von  $\eta_{CIE}$  reduziert. Dabei wurden bereits eine Reihe von Möglichkeiten zur Steigerung von  $\eta_{CIE}$  in Kapitel 4.7 aufgezählt und können entsprechend auf die hier untersuchten LEDs übertragen werden.

Schließlich schränkt die strahlende Rekombinationseffizienz mit (43 $\pm$ 7)%, die  $\eta_{EOE}$  der untersuchten Bauelemente am wenigsten ein. Vergleicht man die maximale strahlende Rekombinationseffizienz von 233 nm LEDs mit Wachstum auf dem DGA-Template mit der von 265 nm LEDs auf dem HTA-ELO-Template aus Kapitel 4, so fällt auf, dass  $\eta_{RRE}^{max}$  der 233 nm LEDs, trotz der Vier- bis Fünffach niedrigeren TDD im AlN des Templates, um durchschnittlich 15 Prozentpunkte niedrigerer ist. Dies kann zum Teil anhand des abweichenden B-Parameters der einzelnen LED-Heterostrukturen erklärt werden. Allerdings sollte der Wert der strahlenden Rekombinationskonstanten, aufgrund des optimierten Designs der MQWs, in beiden Fällen ähnlich hoch sein. Die wahrscheinliste Ursache für die niedrige  $\eta_{RRE}^{max}$  der 233 nm LEDs, trotz der relativ geringen TDD, sind zusätzliche Punktdefekte. Wie in der Einleitung von Kapitel 4 thematisiert wurde, steigt der Einbau von Punktdefekten in AlGaN-Schichten mit hohem Al-Anteil. Da die MQW-Region zum Zwecke des Erreichens einer kürzeren Emissionswellenlänge bei den 233 nm LEDs mehr Al enthält als die MQW-Region der 265 nm LEDs, ist eine vermehrte nicht-strahlenden Rekombination der Ladungsträger an Punktdefekten im Falle der kurzwelligeren Bauelemente zu erwarten. Um den Punktdefekteinbau zu reduzieren, müssen die

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Die EL-Charakterisierung der zum Chip aufgebauten DUV-LED in der Ulbricht-Kugel, wurden von Jan Ruschel (FBH) durchgeführt.

Wachstumsbedingungen zum Beispiel in Form der Wachstumstemperatur, -atmosphäre sowie der Dotierung in der MQW-Region optimiert werden. Somit existiert für die vergleichsweise neuartigen DUV-LEDs mit  $\lambda$  = 233 nm ein enormes Steigerungspotenzial, welches anhand der vorgeschlagenen Anpassungen in zukünftigen Untersuchungen umgesetzt werden kann.

# 6 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden AlGaN-basierte DUV-LEDs mittels der temperaturabhängigen Elektrolumineszenz-Spektroskopie charakterisiert und anschließend, unter Zuhilfenahme von numerischen Simulationen und analytischen Verfahren, im Hinblick auf die Transportund Rekombinationsmechanismen von Ladungsträgern untersucht.

Im ersten Teil der vorliegenden Arbeit wurde der Ladungsträgertransport und die Ladungsträgerionisation in Al-reichen AlGaN:Mg-Schichten und AlGaN:Mg-SPSLs analysiert. Zu diesem Zweck wurde ein experimentelles Verfahren zur Quantisierung der vertikalen Leitfähigkeit in SPSLs und Bulk-Schichten vorgestellt. Das Verfahren basiert auf dem Vergleich der elektrischen Charakteristiken von LEDs mit variierten Dicken der zu untersuchenden Strukturen und kann auch außerhalb des AlGaN-Materialsystems eingesetzt werden. Auf Basis dieses Verfahrens konnte die vertikale Leitfähigkeit eines Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitters, Al<sub>0.86</sub>Ga<sub>0.14</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N:Mgeines Übergitters sowie einer Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht bestimmt werden. Es wurde gezeigt, dass die vertikale Leitfähigkeit bei Raumtemperatur und bei geringen elektrischen Feldstärken in allen drei untersuchten Strukturen mit 10-8 (Ωcm)-1 bis 10-6 (Ωcm)-1 äußerst niedrig ist. So führt beispielsweise der Einsatz des Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitters in der LED-Heterostruktur bei einer Stromdichte von 10 Acm-2 zu einem Anstieg der LED-Betriebsspannung um 7,5 V pro 100 nm. Weiterhin weist die gemessene vertikale Leitfähigkeit in den beiden untersuchten Übergittern sowie in der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Schicht, neben einer ausgeprägten Temperaturabhängigkeit, eine vorher in der Literatur in Bezug berichtete noch nicht nahezu auf AlGaN:Mg-Schichten und exponentielle Feldstärkeabhängigkeit auf. Diese Feldstärkeabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit kann nicht anhand des klassischen Bandtransports erklärt werden, konnte aber im Verlauf der Arbeit auf die feldunterstützte thermische Ionisation der Ladungsträger, den 3D-Poole-Frekel-Effekt, zurückgeführt werden. In den untersuchten Strukturen gemessene Verläufe von  $\sigma_V$ , in Abhängigkeit von der Temperatur und der elektrischen Feldstärke, konnten innerhalb des gesamten Messbereichs mit hoher Güte und mit jeweils einem einzigen Materialparametersatz, anhand der vom verwendeten 3D-PFE-Modell vorausgesagten *F*-und *T*-Abhängigkeiten, gefittet werden. Aus den verwendeten Materialparametersätzen konnten weiterhin die Eigenschaften der einzelnen Strukturen, wie die Nullfeld-Ionisierungsenergie und die Akzeptorkonzentration, bestimmt werden. Es wurde ebenfalls die in der Literatur lange umstrittene Frage nach dem zu benutzenden Wert für die Dielektrizitätskonstante bei der Beschreibung der 3D-PFE-Ionisation aus Coulomb-Potentialen der Akzeptoren, zumindest für die hier untersuchten Strukturen, zugunsten von  $\epsilon_{opt}$  beantwortet.

Im nächsten Schritt wurde die erleichterte Ionisation von Ladungsträgern und deren Transport in Übergittern, anhand von Drift-Diffusions-Simulationen und der Transfermatrixmethode, simuliert. Dabei wurde am Beispiel eines AlGaN:Mg-Übergitters mit einem durchschnittlichen Al-Anteil von 68% gezeigt, dass die vertikale Leitfähigkeit dieses SPSL nur für den Fall ausreichend hoher Hübe ( $\Delta Al \ge 20\%$ ) und Periodenlängen ( $L_p \ge 12$  nm) höher sein kann als die elektrische Leitfähigkeit einer Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht. Die Simulationsergebnisse sind quantitativ konsistent mit den Messungen, wobei die gemessene  $\sigma_V(F \sim 0)$  des Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL um rund 30% niedriger ist als  $\sigma_V(F \sim 0)$  der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht. Schließlich wurde demonstriert, dass die Berücksichtigung des 3D-PFE bei der Auswahl der *passenden* Mg-Dotierkonzentration zur Maximierung der elektrischen Leitfähigkeit von AlGaN:Mg-Schichten, während des Betriebs der Bauelemente unerlässlich ist.

Als Ausblick können weitere Experimente vorgeschlagen werden, die anhand der vorgestellten Messmethode die vertikale Leitfähigkeit von AlGaN:Mg-SPSLs durch eine systematische Änderung des Hubs und der Periodenlänge untersuchen. Vordergründig ist dabei die Fragestellung, ob  $\sigma_V$  in AlGaN:Mg-Übergittern, wie in den gezeigten Simulationen, ab einer bestimmten Hubhöhe und Periodenlänge den Wert der Leitfähigkeit in AlGaN:Mg-Bulk-Schichten mit der durchschnittlichen Legierungszusammensetzung des Übergitters überschreiten kann. Diese Experimente können dann zur Kalibrierung von Simulationen dienen und die Frage beantworten, ob die Verfolgung des SPSL:Mg-Konzepts in AlGaN-Bauelementen, in denen eine hohe vertikale *p*-Leitfähigkeit erforderlich ist, vor allem im Hinblick auf die bereits existierende Alternative in Form der DPD-Schichten, überhaupt lohnenswert ist.

Der zweite Teil der vorliegenden Arbeit beschäftigte sich mit dem Einfluss der AlN/Saphir-Templates (planar, ELO, HTA und HTA-ELO), mit unterschiedlichen Durchstoßversetzungsdichten, auf die Effizienz von **DUV-LEDs** mit einer Emissionswellenlänge von 265 nm. Das Ziel war es alle drei Teileffizienzen der externen **Ouanteneffizienz:** Ladungsträgerinjektionseffizienz, die die strahlende Rekombinationseffizienz sowie die Lichtextraktionseffizienz jedes charakterisierten Bauelements zu bestimmen. Zu diesem Zweck wurde der Wert der Lichtextraktionseffizienz der einzelnen Bauelemente auf den unterschiedlichen AlN/Saphir-Templates mit Hilfe von kalibrierten Raytracing-Simulationen ermittelt. Des Weiteren konnte durch die Implementierung der Titkov-Dai-Methode, anhand von aufgenommenen Pout-I-Kennlinien

von 265 nm LEDs, deren maximale strahlende Rekombinationseffizienz bestimmt werden. Anschließend wurde die Ladungsträgerinjektionseffizienz aus der Division von der gemessenen  $\eta_{EQE}$  und dem Produkt von  $\eta_{RRE}^{max}$  und  $\eta_{LEE}$  berechnet. Die mit Hilfe der Titkov-Dai-Methode ermittelten  $\eta_{RRE}^{max}$ -Werte wurden durch Referenzmessungen mittels resonanter, zeitaufgelöster Photolumineszenz-Spektroskopie und der Charakterisierung der 265 nm LEDs in unterschiedlichen Aufbaustadien validiert.

Beim Vergleich der Effizienz von 265 nm LEDs mit Wachstum auf verschiedenen AlN/Saphir-Templates wurde festgestellt, dass im Gegensatz zu Literaturberichten  $\eta_{RRE}^{max}$ nicht mit der TDD skaliert. So ist  $\eta_{RRE}^{max}$  von Bauelementen mit Wachstum auf HTA-ELO- und ELO-Templates, trotz der unterschiedlicher TDD von jeweils  $(0.95\pm0.1)\times10^9$  cm<sup>-2</sup> und  $(1,6\pm0,2)\times10^9$  cm<sup>-2</sup>, vergleichbar und liegt bei jeweils  $(57\pm5)\%$  und  $(55\pm6)\%$ . Die maximale strahlende Rekombinationseffizienz der 265 nm LEDs mit Wachstum auf dem HTA-Template ist mit  $(45\pm5)\%$  geringer, trotz der innerhalb der untersuchten Serie zweitniedrigsten TDD von  $(1,1\pm0,05)\times10^9$  cm<sup>-2</sup>. Die fehlende Korrelation zwischen TDD und  $\eta_{RRE}^{max}$ konnte auf die zusätzliche nicht-strahlende Rekombination an Versetzungshalbringen in der MQW-Region von Bauelementen mit Wachstum auf HTA- und HTA-ELO-AlN/Saphir-Templates zurückgeführt werden. Dabei sind die in TEM-Aufnahmen erkennbaren Versetzungshalbringe das Resultat der zusätzlichen kompressiven Verspannung in HTAund HTA-ELO-AlN/Saphir-Templates, welche mittels hochauflösender Röntgendiffraktometrie nachgewiesenen werden konnte.

Auf Basis der von k-p-Simulationen angenommenen strahlenden Rekombinationskonstante  $(B = 2,4 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{s}^{-1})$  und des sogenannten Qualitätsfaktors konnten weiterhin die SRHund die Auger-Rekombinationskonstanten der untersuchten 265 nm LEDs bestimmt werden. So beträgt A für Bauelemente mit Wachstum auf ELO- und HTA-ELO-AlN/Saphir  $(2\pm1)\times10^7$  s<sup>-1</sup> und steigt auf  $(6\pm2)\times10^7$  s<sup>-1</sup> für 265 nm LEDs, die auf HTA-Templates gewachsen wurden. Der berechnete Wert von C liegt bei allen charakterisierten Bauelementen bei  $(4\pm 2) \times 10^{-30}$  cm<sup>6</sup>s<sup>-1</sup> und ist gut mit den neusten Literaturberichten zur indirekten Auger-Rekombination vergleichbar. Es wurde weiterhin rechnerisch demonstriert, dass  $\eta_{RRE}$  und damit die Gesamteffizienz von DUV-LEDs aufgrund des hohen Auger-Koeffizienten einem starken Droop unterliegt und deshalb bei anwendungsnahen Stromdichten, auch für eine TDD-arme MQW-Region, nie 100% erreichen kann. Eine weitere Schlussfolgerung aus dieser Betrachtung ist, dass aufgrund der hohen Auger-Rekombinationsrate das Wachstum der untersuchten Bauelemente auf Substraten beziehungsweise Templates mit TDD  $< 1.6 \times 10^9$  cm<sup>-2</sup> (ELO-AlN/Saphir) lediglich bei relativ niedrigen Stromdichten ( $\leq 25 \text{ Acm}^{-2}$ ) zu einem relevanten Anstieg der strahlenden Rekombinationseffizienz führen sollte. Um bei den künftigen Anwendungen dennoch von der hohen strahlenden Rekombinationseffizienz der Bauelemente mit niedriger Defektdichte zu profitieren und möglichst effizient die benötigten optischen Ausgangsleistungen zu erreichen, kann das Rekombinationsvolumen der MQW-Region von DUV-LEDs erweitert werden.

Des Weiteren wurde auch die Ladungsträgerinjektionseffizienz der 265 nm LEDs bestimmt.  $\eta_{CIE}$  ist dabei im Gegensatz zu  $\eta_{RRE}^{max}$  unabhängig vom verwendeten AlN/Saphir-Template und beträgt innerhalb der untersuchten Serie 40% bis 55%. Sowohl  $\eta_{RRE}^{max}$  als auch  $\eta_{CIE}$  bieten damit ein großes Potenzial zur Steigerung der Gesamteffizienz der untersuchten 265 nm LEDs. Schließlich konnte unter der Annahme von  $\eta_{CIE} = 50\%$  ein Richtwert für  $\eta_{RRE}^{max}$  für DUV-LEDs auf planaren AlN/Saphir-Template mit TDD =  $(4\pm0,3)\times10^9$  cm<sup>-2</sup> bestimmt werden und beträgt (12±6)%.

Für zukünftige Optimierungen kann die Anwendung des kombinierten Verfahrens zur Bestimmung der Teileffizienzen der  $\eta_{EQE}$  bei DUV-LEDs mit Variationen der Emissionswellenlänge, der Heterostruktur, der Wachstumsparameter oder jeglicher Änderungen bei der Produktion und dem Betrieb der Bauelemente sehr hilfreich sein. So ist beispielsweise die Änderung der strahlenden Rekombinationseffizienz und der Ladungsträgerinjektionseffizienz mit der Betriebstemperatur für die Optimierung von DUV-LEDs für künftige Anwendungen vom großen Interesse. Weiterhin erfordert die hier theoretisch aufgestellte Behauptung, dass das Wachstum von den untersuchten 265 nm LEDs auf TDD-armen AlN-Substraten lediglich bei niedrigen Stromdichten zu einem relevanten Anstieg der Effizienz gegenüber von Bauelementen mit Wachstum auf ELO- oder HTA-ELO-Templates führt einer experimentellen Überprüfung und kann weitreichende Folgen für die Ausrichtung der Forschung von AlGaN-Bauelementen haben.

Im abschließenden Teil der vorliegenden Arbeit wurden DUV-LEDs mit einer Emissionswellenlänge von 233 nm im Hinblick auf die Teileffizienzen der  $\eta_{EOE}$ , mit der gleichen Vorgehensweise wie im zweiten Teil der Arbeit, untersucht. Die untersuchten 233 nm LEDs zählen zum Zeitpunkt der Veröffentlichung dieser Arbeit zu den weltweit effizientesten Bauelementen mit einer maximalen externen Quanteneffizienz von  $\sim 1\%$ . Die Lichtextraktionseffizienz dieser Bauelemente beträgt auf der Wafer-Ebene  $(5,3\pm0,5)\%$  und steigt auf  $(8,8\pm0,8)$ %, für vereinzelte und zu Chips aufgebaute LEDs. Die maximale strahlende Rekombinationseffizienz beträgt  $(43\pm7)\%$  und ist damit um durchschnittlich 15 Prozentpunkte niedrigerer im Vergleich zu den vorher untersuchten 265 nm LEDs mit Wachstum auf HTA-ELO-AlN/Saphir. Dieses Ergebnis wurde mit dem höheren Al-Anteil in der MQW-Region von 233 nm LEDs in Zusammenhang gebracht. Der höhere Al-Anteil begünstigt den Punktdefekteinbau und führt so zu einer höheren nicht-strahlenden Rekombination in den Quantentöpfen dieser Bauelemente. Schließlich wurde auch die Ladungsträgerinjektionseffizienz von den untersuchten 233 nm LEDs anhand der gemessenen  $\eta_{EQE}$ , der simulierten  $\eta_{LEE}$  sowie mittels der Titkov-Dai-Methode extrahierten  $\eta_{RRE}^{max}$  bestimmt. So liegt  $\eta_{CIE}$  bei lediglich (26±8)% und wird vermutlich durch die erschwerte Lochinjektion in die MQW-Region eingeschränkt.

Als Ausblick für die Arbeit an DUV-LEDs mit  $\lambda = 233$  nm wäre eine Variation der Wachstumsparameter in der MQW-Region, mit dem Ziel den Einbau von Punktdefekten zu reduzieren oder zu erhöhen, beim Verständnis der Rolle dieser Defekte für die nichtstrahlenden Rekombination hilfreich. Um einzuschätzen, ob und wie die Durchstoßversetzungen die Effizienz dieser Bauelemente beeinträchtigen, ist eine Variation der TDD im AlN der Templates ebenfalls von Interesse. Zusätzlich kann die Effizienz von den 233 nm LEDs im Laufe künftiger Optimierungen noch weiter gesteigert werden; unter anderem durch die Anpassung der Wachstumsbedingungen, der Substratbeschaffenheit und vor allem der p-Seite.
### Literaturverzeichnis

- R. Sesti-Costa, C. von Zuben Negrão, J. F. Shimizu, A. Nagai, R. S. N. Tavares,
   D. Adamoski, W. Costa, M. A. Fontoura, T. J. da Silva, A. de Barros und others, "UV 254 nm is more efficient than UV 222 nm in inactivating SARS-CoV-2 present in human saliva", *Photodiagnosis and Photodynamic Therapy* **39**, 103015 (2022).
- J. J. McDevitt, S. N. Rudnick und L. J. Radonovich, "Aerosol susceptibility of influenza virus to UV-C light", *Applied and environmental microbiology* 78, 1666–1669 (2012).
- [3] S. Rattanakul und K. Oguma, "Inactivation kinetics and efficiencies of UV-LEDs against Pseudomonas aeruginosa, Legionella pneumophila, and surrogate microorganisms", *Water research* 130, 31–37 (2018).
- [4] J. Glaab, N. Lobo-Ploch, H. K. Cho, T. Filler, H. Gundlach, M. Guttmann, S. Hagedorn, S. B. Lohan, F. Mehnke, J. Schleusener und others, "Skin tolerant inactivation of multiresistant pathogens using far-UVC LEDs", *Scientific reports* **11**, 14647 (2021).
- [5] E. Kujundzic, M. Hernandez und S. L. Miller, "Ultraviolet germicidal irradiation inactivation of airborne fungal spores and bacteria in upper-room air and HVAC induct configurations", *Journal of Environmental Engineering and Science* 6, 1–9 (2007).
- [6] D. J. Anderson, M. F. Gergen, E. Smathers, D. J. Sexton, L. F. Chen, D. J. Weber und W. A. Rutala, "Decontamination of targeted pathogens from patient rooms using an automated ultraviolet-C-emitting device", *Infection Control & Hospital Epidemiology* 34, 466–471 (2013).
- [7] W. A. M. Hijnen, E. F. Beerendonk und G. J. Medema, "Inactivation credit of UV radiation for viruses, bacteria and protozoan (oo) cysts in water: a review", *Water research* **40**, 3–22 (2006).
- [8] A. Yasan, R. McClintock, K. Mayes, S. R. Darvish, P. Kung und M. Razeghi, "Topemission ultraviolet light-emitting diodes with peak emission at 280 nm", *Applied physics letters* **81**, 801–802 (2002).
- [9] M. A. Coulter, "Minamata convention on mercury", *International Legal Materials* **55**, 582–616 (2016).
- [10] https://www.bmuv.de/themen/gesundheit-chemikalien/chemikalien/minamatauebereinkommen (Aufgerufen am 28.06.2023).

- [11] Y. Taniyasu, M. Kasu und T. Makimoto, "An aluminium nitride light-emitting diode with a wavelength of 210 nanometres", *nature* **441**, 325–328 (2006).
- [12] F. Calle, E. Monroy, F. J. Sánchez, E. Muñoz, B. Beaumont, S. Haffouz, M. Leroux und P. Gibart, "Analysis of the Visible and UV Electroluminescence in Homojunction GaN LED's", *Materials Research Society Internet Journal of Nitride Semiconductor Research* 3, e24 (1998).
- [13] J. Mellqvist, H. Axelsson und A. Rosén, "DOAS for flue gas monitoring—III. In-situ monitoring of sulfur dioxide, nitrogen monoxide and ammonia", *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 56, 225–240 (1996).
- P. Zwicker, J. Schleusener, S. B. Lohan, L. Busch, C. Sicher, S. Einfeldt, M. Kneissl,
   A. A. Kühl, C. M. Keck, C. Witzel und others, "Application of 233 nm far-UVC LEDs for eradication of MRSA and MSSA and risk assessment on skin models", *Scientific Reports* 12, 2587 (2022).
- [15] J. Ruschel, J. Glaab, N. Susilo, S. Hagedorn, S. Walde, E. Ziffer, H. K. Cho, N. L. Ploch, T. Wernicke, M. Weyers und others, "Reliability of UVC LEDs fabricated on AlN/sapphire templates with different threading dislocation densities", *Applied Physics Letters* **117**, 241104 (2020).
- [16] S. Schalk, V. Adam, E. Arnold, K. Brieden, A. Voronov und H.-D. Witzke, "UV-lamps for disinfection and advanced oxidation-lamp types, technologies and applications", *IUVA news* 8, 32–37 (2006).
- [17] M. Kneissl, T.-Y. Seong, J. Han und H. Amano, "The emergence and prospects of deep-ultraviolet light-emitting diode technologies", *nature photonics* 13, 233–244 (2019).
- [18] H. Amano, R. Collazo, C. De Santi, S. Einfeldt, M. Funato, J. Glaab, S. Hagedorn,
   A. Hirano, H. Hirayama, R. Ishii und others, "The 2020 UV emitter roadmap", *Journal of Physics D: Applied Physics* 53, 503001 (2020).
- [19] M. Guttmann, A. Susilo, L. Sulmoni, N. Susilo, E. Ziffer, T. Wernicke und M. Kneissl, "Light extraction efficiency and internal quantum efficiency of fully UVCtransparent AlGaN based LEDs", *Journal of Physics D: Applied Physics* 54, 335101 (2021).
- [20] Z. Zhang, M. Kushimoto, M. Horita, N. Sugiyama, L. J. Schowalter, C. Sasaoka und H. Amano, "Space charge profile study of AlGaN-based p-type distributed polarization doped claddings without impurity doping for UV-C laser diodes", *Applied Physics Letters* **117**, 152104 (2020).

- [21] I. D. Goepfert, E. F. Schubert, A. Osinsky, P. E. Norris und N. N. Faleev, "Experimental and theoretical study of acceptor activation and transport properties in p-type Al x Ga 1- x N/GaN superlattices", *Journal of Applied Physics* 88, 2030–2038 (2000).
- [22] N. Susilo, E. Ziffer, S. Hagedorn, L. Cancellara, C. Netzel, N. L. Ploch, S. Wu, J. Rass, S. Walde, L. Sulmoni und others, "Improved performance of UVC-LEDs by combination of high-temperature annealing and epitaxially laterally overgrown AlN/sapphire", *Photonics Research* 8, 589–594 (2020).
- [23] C. Hartmann, J. Wollweber, S. Sintonen, A. Dittmar, L. Kirste, S. Kollowa, K. Irmscher und M. Bickermann, "Preparation of deep UV transparent AlN substrates with high structural perfection for optoelectronic devices", *CrystEngComm* 18, 3488–3497 (2016).
- [24] R. Moser, N. Ojha, M. Kunzer und U. T. Schwarz, "Sub-surface channels in sapphire made by ultraviolet picosecond laser irradiation and selective etching", *Optics Express* 19, 24738–24745 (2011).
- [25] C. J. Sun, P. Kung, A. Saxler, H. Ohsato, K. Haritos und M. Razeghi, "A crystallographic model of (00·1) aluminum nitride epitaxial thin film growth on (00·1) sapphire substrate", *Journal of applied physics* **75**, 3964–3967 (1994).
- [26] X. J. Ning, F. R. Chien, P. Pirouz, J. W. Yang und M. A. Khan, "Growth defects in GaN films on sapphire: The probable origin of threading dislocations", *Journal of materials research* **11**, 580–592 (1996).
- [27] N. Susilo, "Heterostructure design and epitaxial growth of AlGaN-based light emitting diodes emitting in the UVC wavelength range, Doktorarbeit", Berlin: Technische Universität Berlin (2020).
- [28] L. Sulmoni, F. Mehnke, A. Mogilatenko, M. Guttmann, T. Wernicke und M. Kneissl, "Electrical properties and microstructure formation of V/Al-based n-contacts on high Al mole fraction n-AlGaN layers", *Photon. Res.* 8, 1381–1387 (2020).
- [29] G. Greco, F. Iucolano und F. Roccaforte, "Ohmic contacts to Gallium Nitride materials", *Applied Surface Science* **383**, 324–345 (2016).
- [30] M. Guttmann, "Einfluss der Lichtextraktion auf die Effizienz AlGaN-basierter Leuchtdioden im tiefen ultravioletten Spektralbereich, Doktorarbeit", Berlin: Technische Universität Berlin (2020).

- [31] B. Monemar, P. P. Paskov, J. P. Bergman, A. A. Toropov, T. V. Shubina, T. Malinauskas und A. Usui, "Recombination of free and bound excitons in GaN", *physica status solidi* (b) 245, 1723–1740 (2008).
- [32] A. David und M. J. Grundmann, "Droop in InGaN light-emitting diodes: A differential carrier lifetime analysis", *Applied Physics Letters* **96**, (2010).
- [33] M.-H. Kim, M. F. Schubert, Q. Dai, J. K. Kim, E. F. Schubert, J. Piprek und Y. Park, "Origin of efficiency droop in GaN-based light-emitting diodes", *Applied Physics Letters* 91, (2007).
- [34] M. Meneghini, C. De Santi, A. Tibaldi, M. Vallone, F. Bertazzi, G. Meneghesso,
   E. Zanoni und M. Goano, "Thermal droop in III-nitride based light-emitting diodes: Physical origin and perspectives", *Journal of applied Physics* 127, (2020).
- [35] L. Wang, J. Jin, C. Mi, Z. Hao, Y. Luo, C. Sun, Y. Han, B. Xiong, J. Wang und H. Li, "A review on experimental measurements for understanding efficiency droop in InGaN-based light-emitting diodes", *Materials* 10, 1233 (2017).
- [36] H.-Y. Ryu, H.-S. Kim und J.-I. Shim, "Rate equation analysis of efficiency droop in InGaN light-emitting diodes", *Applied Physics Letters* **95**, (2009).
- [37] K. J. Vampola, M. Iza, S. Keller, S. P. DenBaars und S. Nakamura, "Measurement of electron overflow in 450 nm InGaN light-emitting diode structures", *Applied Physics Letters* **94**, (2009).
- [38] C. Weisbuch, "On the search for efficient solid state light emitters: Past, present, future", *ECS Journal of Solid State Science and Technology* **9**, 016022 (2019).
- [39] Y. C. Shen, G. O. Mueller, S. Watanabe, N. F. Gardner, A. Munkholm und M. R. Krames, "Auger recombination in InGaN measured by photoluminescence", *Applied Physics Letters* **91**, (2007).
- [40] M. Guttmann, F. Mehnke, B. Belde, F. Wolf, C. Reich, L. Sulmoni, T. Wernicke und M. Kneissl, "Optical light polarization and light extraction efficiency of AlGaN-based LEDs emitting between 264 and 220 nm", *Japanese Journal of Applied Physics* 58, SCCB20 (2019).
- [41] T. S. T. Suzuki, H. Y. H. Yaguchi, H. O. H. Okumura, Y. I. Y. Ishida und S. Y. S. Yoshida, "Optical constants of cubic GaN, AlN, and AlGaN alloys", *Japanese Journal of Applied Physics* 39, L497 (2000).

- [42] M. C. T. Bahaa E.A. Saleh, "Fundumentols of Photonics S. 6", Hoboken, USA: *John Wiley & Sons Inc.* (2007).
- [43] S. E. F., "Light-Emitting Diodes, S.92", Cambridge: Cambridge University Press (2006).
- [44] S. Schulz, M. A. Caro, C. Coughlan und E. P. O'Reilly, "Atomistic analysis of the impact of alloy and well-width fluctuations on the electronic and optical properties of InGaN/GaN quantum wells", *Physical Review B* 91, 035439 (2015).
- [45] T. J. Badcock, M. Ali, T. Zhu, M. Pristovsek, R. A. Oliver und A. J. Shields, "Radiative recombination mechanisms in polar and non-polar InGaN/GaN quantum well LED structures", *Applied Physics Letters* **109**, (2016).
- [46] K. A. Bulashevich, O. V. Khokhlev, I. Y. Evstratov und S. Y. Karpov, "Simulation of light-emitting diodes for new physics understanding and device design," in *Light-Emitting Diodes: Materials, Devices, and Applications for Solid State Lighting XVI*, 8278, 152–163 (2012).
- [47] J. Hader, J. V. Moloney, B. Pasenow, S. W. Koch, M. Sabathil, N. Linder und S. Lutgen, "On the importance of radiative and Auger losses in GaN-based quantum wells", *Applied Physics Letters* 92, (2008).
- [48] E. Kioupakis, D. Steiauf, P. Rinke, K. T. Delaney und C. G. Van de Walle, "Firstprinciples calculations of indirect Auger recombination in nitride semiconductors", *Physical Review B* **92**, 035207 (2015).
- [49] S. Chiaria, E. Furno, M. Goano und E. Bellotti, "Design criteria for near-ultraviolet GaN-based light-emitting diodes", *IEEE transactions on electron devices* 57, 60–70 (2009).
- [50] J. Piprek, "Efficiency droop in nitride-based light-emitting diodes", *physica status solidi* (*a*) **207**, 2217–2225 (2010).
- [51] C. Weisbuch, S. Nakamura, Y.-R. Wu und J. S. Speck, "Disorder effects in nitride semiconductors: impact on fundamental and device properties", *Nanophotonics* 10, 3–21 (2020).
- [52] B. Pasenow, S. W. Koch, J. Hader, J. V. Moloney, M. Sabathil, N. Linder und S. Lutgen, "Auger losses in GaN-based quantum wells: Microscopic theory", *physica status solidi c* 6, S864–S868 (2009).

- [53] K. T. Delaney, P. Rinke und C. G. Van de Walle, "Auger recombination rates in nitrides from first principles", *Applied Physics Letters* **94**, (2009).
- [54] W. T. R. W. Shockley und W. T. Read Jr, "Statistics of the recombinations of holes and electrons", *Physical review* **87**, 835 (1952).
- [55] R. N. Hall, "Electron-hole recombination in germanium", *Physical review* 87, 387 (1952).
- [56] M. A. Hopkins, D. W. E. Allsopp, M. J. Kappers, R. A. Oliver und C. J. Humphreys, "The ABC model of recombination reinterpreted: Impact on understanding carrier transport and efficiency droop in InGaN/GaN light emitting diodes", *Journal of Applied Physics* **122**, (2017).
- [57] D. Schiavon, M. Binder, M. Peter, B. Galler, P. Drechsel und F. Scholz, "Wavelengthdependent determination of the recombination rate coefficients in single-quantumwell GaInN/GaN light emitting diodes", *physica status solidi (b)* 250, 283–290 (2013).
- [58] M. Pristovsek, A. Bao, R. A. Oliver, T. Badcock, M. Ali und A. Shields, "Effects of wavelength and defect density on the efficiency of (In, Ga) N-based light-emitting diodes", *Physical Review Applied* 7, 064007 (2017).
- [59] C. J. Gallagher, "Plastic deformation of germanium and silicon", *Physical Review* **88**, 721 (1952).
- [60] G. L. Pearson, W. T. Read Jr und F. J. Morin, "Dislocations in plastically deformed germanium", *Physical Review* **93**, 666 (1954).
- [61] S. Y. Karpov und Y. N. Makarov, "Dislocation effect on light emission efficiency in gallium nitride", *Applied Physics Letters* **81**, 4721–4723 (2002).
- [62] Z. Z. Bandić, P. M. Bridger, E. C. Piquette und T. C. McGill, "The values of minority carrier diffusion lengths and lifetimes in GaN and their implications for bipolar devices", *Solid-State Electronics* 44, 221–228 (2000).
- [63] U. Bangert, A. Gutierrez-Sosa, A. J. Harvey, C. J. Fall und R. Jones, "Electron energy loss studies of dislocations in GaN thin films", *Journal of applied physics* 93, 2728– 2735 (2003).
- [64] J.-L. Farvacque, Z. Bougrioua und I. Moerman, "Free-carrier mobility in GaN in the presence of dislocation walls", *Physical Review B* **63**, 115202 (2001).

- [65] D. Cherns und C. G. Jiao, "Electron holography studies of the charge on dislocations in GaN", *Physical review letters* **87**, 205504 (2001).
- [66] P. J. Hansen, Y. E. Strausser, A. N. Erickson, E. J. Tarsa, P. Kozodoy, E. G. Brazel, J. P. Ibbetson, U. Mishra, V. Narayanamurti, S. P. DenBaars und others, "Scanning capacitance microscopy imaging of threading dislocations in GaN films grown on (0001) sapphire by metalorganic chemical vapor deposition", *Applied Physics Letters* **72**, 2247–2249 (1998).
- [67] "https://str-soft.com/devices/silense/" (Aufgerufen am 16.11.2023).
- [68] G.-D. Hao, N. Tamari, T. Obata, T. Kinoshita und S.-i. Inoue, "Electrical determination of current injection and internal quantum efficiencies in AlGaN-based deepultraviolet light-emitting diodes", *Optics express* **25**, A639–A648 (2017).
- [69] N. F. Mott, "Recombination; a survey", *Solid-State Electronics* 21, 1275–1280 (1978).
- [70] A. David, N. G. Young, C. Lund und M. D. Craven, "The physics of recombinations in III-nitride emitters", *ECS Journal of Solid State Science and Technology* 9, 016021 (2019).
- [71] Q. Dai, Q. Shan, J. Cho, E. F. Schubert, M. H. Crawford, D. D. Koleske, M.-H. Kim und Y. Park, "On the symmetry of efficiency-versus-carrier-concentration curves in GaInN/GaN light-emitting diodes and relation to droop-causing mechanisms", *Applied Physics Letters* **98**, 033506 (2011).
- [72] A. V. Sampath, G. A. Garrett, E. D. Readinger, R. W. Enck, H. Shen, M. Wraback, J. R. Grandusky und L. J. Schowalter, "Characterization of nanometer scale compositionally inhomogeneous AlGaN active regions on bulk AlN substrates", *Solid-State Electronics* 54, 1130–1134 (2010).
- [73] H. Murotani, D. Akase, K. Anai, Y. Yamada, H. Miyake und K. Hiramatsu, "Dependence of internal quantum efficiency on doping region and Si concentration in Al-rich AlGaN quantum wells", *Applied Physics Letters* **101**, (2012).
- [74] C. G. Van de Walle, C. Stampfl, J. Neugebauer, M. D. McCluskey und N. M. Johnson, "Doping of AlGaN alloys", *Materials Research Society Internet Journal of Nitride Semiconductor Research* 4, 890–901 (1999).
- [75] M. E. Rudinsky und S. Y. Karpov, "Radiative and Auger recombination constants and internal quantum efficiency of (0001) AlGaN deep-UV light-emitting diode structures", *physica status solidi (a)* 217, 1900878 (2020).

- [76] F. Nippert, S. Y. Karpov, G. Callsen, B. Galler, T. Kure, C. Nenstiel, M. R. Wagner,
   M. Straßburg, H.-J. Lugauer und A. Hoffmann, "Temperature-dependent recombination coefficients in InGaN light-emitting diodes: Hole localization, Auger processes, and the green gap", *Applied Physics Letters* 109, (2016).
- [77] I. Vurgaftman und J. n. Meyer, "Band parameters for nitrogen-containing semiconductors", *Journal of Applied Physics* **94**, 3675–3696 (2003).
- [78] D. S. Meyaard, G.-B. Lin, J. Cho, E. Fred Schubert, H. Shim, S.-H. Han, M.-H. Kim, C. Sone und Y. Sun Kim, "Identifying the cause of the efficiency droop in GaInN lightemitting diodes by correlating the onset of high injection with the onset of the efficiency droop", *Applied Physics Letters* **102**, (2013).
- [79] E. F. Schubert, W. Grieshaber und I. D. Goepfert, "Enhancement of deep acceptor activation in semiconductors by superlattice doping", *Applied physics letters* 69, 3737–3739 (1996).
- [80] J. Piprek und S. Li, "Electron leakage effects on GaN-based light-emitting diodes", *Optical and quantum electronics* **42**, 89–95 (2010).
- [81] F. Bilchenko, "Untersuchung der Ladungsträgerinjektionseffizienz AlGaN-basierter UVC-LEDs in Abhängigkeit der Emissionswellenlänge", Berlin, Masterarbeit: Technische Universität Berlin (2023).
- [82] Y. Narukawa, M. Ichikawa, D. Sanga, M. Sano und T. Mukai, "White light emitting diodes with super-high luminous efficacy", *Journal of physics D: Applied physics* **43**, 354002 (2010).
- [83] R. Ishii, A. Yoshikawa, K. Nagase, M. Funato und Y. Kawakami, "Temperaturedependent electroluminescence study on 265-nm AlGaN-based deep-ultraviolet light-emitting diodes grown on AlN substrates", *AIP Advances* 10, 125014 (2020).
- [84] S. Nakamura, "Nobel Lecture: Background story of the invention of efficient blue InGaN light emitting diodes", *Reviews of Modern Physics* **87**, 1139 (2015).
- [85] S. Nakamura, N. Iwasa, M. S. M. Senoh und T. M. T. Mukai, "Hole compensation mechanism of p-type GaN films", *Japanese Journal of Applied Physics* **31**, 1258 (1992).
- [86] J. Neugebauer und C. G. Van de Walle, "Hydrogen in GaN: Novel aspects of a common impurity", *Physical review letters* **75**, 4452 (1995).

- [87] S. Nakamura, T. Mukai, M. S. M. Senoh und N. I. N. Iwasa, "Thermal annealing effects on p-type Mg-doped GaN films", *Japanese Journal of Applied Physics* **31**, L139 (1992).
- [88] M. Kneissl, J. Rass und others, "III-Nitride ultraviolet emitters", *Springer* (2016).
- [89] M. Shatalov, W. Sun, A. Lunev, X. Hu, A. Dobrinsky, Y. Bilenko, J. Yang, M. Shur,
   R. Gaska, C. Moe und others, "AlGaN deep-ultraviolet light-emitting diodes with external quantum efficiency above 10%", *Applied Physics Express* 5, 082101 (2012).
- [90] R. G. Banal, M. Funato und Y. Kawakami, "Extremely high internal quantum efficiencies from AlGaN/AlN quantum wells emitting in the deep ultraviolet spectral region", *Applied Physics Letters* **99**, 011902 (2011).
- [91] Z. Zhang, M. Kushimoto, T. Sakai, N. Sugiyama, L. J. Schowalter, C. Sasaoka und H. Amano, "A 271.8 nm deep-ultraviolet laser diode for room temperature operation", *Applied Physics Express* **12**, 124003 (2019).
- [92] T. Zheng, W. Lin, D. Cai, W. Yang, W. Jiang, H. Chen, J. Li, S. Li und J. Kang, "High Mg effective incorporation in Al-rich Al x Ga1-xN by periodic repetition of ultimate V/III ratio conditions", *Nanoscale research letters* 9, 1–7 (2014).
- [93] C. Zhang, K. Jiang, X. Sun und D. Li, "Recent Progress on AlGaN Based Deep Ultraviolet Light-Emitting Diodes below 250 nm", *Crystals* **12**, 1812 (2022).
- [94] U. Kaufmann, M. Kunzer, H. Obloh, M. Maier, C. Manz, A. Ramakrishnan und B. Santic, "Origin of defect-related photoluminescence bands in doped and nominally undoped GaN", *Physical Review B* 59, 5561 (1999).
- [95] M. A. Reshchikov, G.-C. Yi und B. W. Wessels, "Behavior of 2.8-and 3.2-eV photoluminescence bands in Mg-doped GaN at different temperatures and excitation densities", *Physical Review B* **59**, 13176 (1999).
- [96] U. Kaufmann, P. Schlotter, H. Obloh, K. Köhler und M. Maier, "Hole conductivity and compensation in epitaxial GaN: Mg layers", *Physical Review B* **62**, 10867 (2000).
- [97] K. B. Nam, M. L. Nakarmi, J. Li, J. Y. Lin und H. X. Jiang, "Mg acceptor level in AlN probed by deep ultraviolet photoluminescence", *Applied physics letters* 83, 878– 880 (2003).
- [98] A. Saxler, W. C. Mitchel, P. Kung und M. Razeghi, "Aluminum gallium nitride shortperiod superlattices doped with magnesium", *Applied Physics Letters* 74, 2023– 2025 (1999).

- [99] P. Kozodoy, M. Hansen, S. P. DenBaars und U. K. Mishra, "Enhanced Mg doping efficiency in Al 0.2 Ga 0.8 N/GaN superlattices", *Applied physics letters* 74, 3681– 3683 (1999).
- [100] J.-Y. Duboz, "GaN/AlGaN superlattices for p contacts in LEDs", *Semiconductor Science and Technology* **29**, 035017 (2014).
- [101] E. L. Waldron, Y.-L. Li, E. F. Schubert, J. W. Graff und J. K. Sheu, "Experimental study of perpendicular transport in weakly coupled Al x Ga 1- x N/GaN superlattices", *Applied physics letters* 83, 4975–4977 (2003).
- [102] C. Y. Hu, Y. J. Wang, K. Xu, X. D. Hu, L. S. Yu, Z. J. Yang, B. Shen und G. Y. Zhang, "Vertical conductivity of p-AlxGa1- xN/GaN superlattices measured with modified transmission line model", *Journal of crystal growth* 298, 815–818 (2007).
- [103] B. Cheng, S. Choi, J. E. Northrup, Z. Yang, C. Knollenberg, M. Teepe, T. Wunderer, C. L. Chua und N. M. Johnson, "Enhanced vertical and lateral hole transport in high aluminum-containing AlGaN for deep ultraviolet light emitters", *Applied Physics Letters* **102**, 231106 (2013).
- [104] M. L. Nakarmi, K. H. Kim, M. Khizar, Z. Y. Fan, J. Y. Lin und H. X. Jiang, "Electrical and optical properties of Mg-doped Al 0.7 Ga 0.3 N alloys", *Applied Physics Letters* 86, 092108 (2005).
- [105] F. Mehnke, T. Wernicke, H. Pingel, C. Kuhn, C. Reich, V. Kueller, A. Knauer, M. Lapeyrade, M. Weyers und M. Kneissl, "Highly conductive n-Al x Ga1- x N layers with aluminum mole fractions above 80%", *Applied Physics Letters* **103**, 212109 (2013).
- [106] P. Pampili und P. J. Parbrook, "Doping of III-nitride materials", *Materials Science in Semiconductor Processing* **62**, 180–191 (2017).
- [107] T. Grasser, H. Kosina und S. Selberherr, "Consistent comparison of drift-diffusion and hydro-dynamic device simulations," in 1999 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices. SISPAD'99 (IEEE Cat. No. 99TH8387), 151–154 (1999).
- [108] S. Vitanov, V. Palankovski, S. Maroldt, R. Quay, S. Murad, T. Rodle und S. Selberherr, "Physics-based modeling of GaN HEMTs", *IEEE Transactions on Electron Devices* 59, 685–693 (2012).
- [109] V. O. Turin, "A modified transferred-electron high-field mobility model for GaN devices simulation", *Solid-state electronics* **49**, 1678–1682 (2005).

- [110] F.-C. Chiu, "A review on conduction mechanisms in dielectric films", *Advances in Materials Science and Engineering* **2014**, (2014).
- [111] S. A. Moiz, I. A. Khan, W. A. Younis und K. S. Karimov, "Space charge–limited current model for polymers", *Conducting Polymers* **5**, 91 (2016).
- [112] J. Frenkel, "On pre-breakdown phenomena in insulators and electronic semiconductors", *Physical Review* **54**, 647 (1938).
- [113] J. Piprek, "AlGaN polarization doping effects on the efficiency of blue LEDs," in *Gallium Nitride Materials and Devices VII*, **8262**, 62–72 (2012).
- [114] F. Römer und B. Witzigmann, "Acceptor activation model for III-nitride LEDs", Journal of Computational Electronics 14, 456–463 (2015).
- [115] M. Kaes, M. Le Gallo, A. Sebastian, M. Salinga und D. Krebs, "High-field electrical transport in amorphous phase-change materials", *Journal of Applied Physics* 118, 135707 (2015).
- [116] C. Merz, M. Kunzer, U. Kaufmann, I. Akasaki und H. Amano, "Free and bound excitons in thin wurtzite GaN layers on sapphire", *Semiconductor science and technology* **11**, 712 (1996).
- [117] K. Reimann, M. Steube, D. Fröhlich und S. J. Clarke, "Exciton binding energies and band gaps in GaN bulk crystals", *Journal of crystal growth* **189**, 652–655 (1998).
- [118] M. N. Yoder, "Semiconductors for the visible and ultraviolet," in *Integrated Optics and Optoelectronics: A Critical Review*, **10267**, 230–250 (1993).
- [119] P. Kozodoy, S. Keller, S. P. DenBaars und U. K. Mishra, "MOVPE growth and characterization of Mg-doped GaN", *Journal of crystal growth* 195, 265–269 (1998).
- [120] Die Werte beziehen sich auf eine private Mitteilung durch Norman Susilo (TUB).
- [121] W. Götz, R. S. Kern, C. H. Chen, H. Liu, D. A. Steigerwald und R. M. Fletcher, "Halleffect characterization of III–V nitride semiconductors for high efficiency light emitting diodes", *Materials Science and Engineering: B* 59, 211–217 (1999).
- [122] M. Le Gallo, M. Kaes, A. Sebastian und D. Krebs, "Subthreshold electrical transport in amorphous phase-change materials", *New Journal of Physics* 17, 093035 (2015).
- [123] M. Feneberg, S. Osterburg, K. Lange, C. Lidig, B. Garke, R. Goldhahn, E. Richter, C. Netzel, M. D. Neumann, N. Esser und others, "Band gap renormalization and"

Burstein-Moss effect in silicon-and germanium-doped wurtzite GaN up to 10 20 cm- 3", *Physical Review B* **90**, 075203 (2014).

- [124] M. Feneberg, M. F. Romero, M. Röppischer, C. Cobet, N. Esser, B. Neuschl, K. Thonke, M. Bickermann und R. Goldhahn, "Anisotropic absorption and emission of bulk (1 1<sup>-</sup> 00) AlN", *Physical Review B* 87, 235209 (2013).
- [125] D. C. Look, "Electrical transport properties of III-nitrides", *Materials Science and Engineering: B* **50**, 50–56 (1997).
- [126] P. Hacke, A. Maekawa, N. Koide, K. H. K. Hiramatsu und N. S. N. Sawaki, "Characterization of the shallow and deep levels in Si doped GaN grown by metalorganic vapor phase epitaxy", *Japanese journal of applied physics* 33, 6443 (1994).
- [127] Y. Kajikawa, "Hall factor for hopping conduction in n-and p-type GaN", *physica status solidi c* **14**, 1600129 (2017).
- [128] N. F. Mott, "Electrons in disordered structures", Advances in Physics 16, 49–144 (1967).
- [129] M. Pollak und I. Riess, "A percolation treatment of high-field hopping transport", *Journal of Physics C: Solid State Physics* 9, 2339 (1976).
- [130] C. Y. Cheah, C. Gómez-Navarro, L. C. Jaurigue und A. B. Kaiser, "Conductance of partially disordered graphene: crossover from temperature-dependent to fielddependent variable-range hopping", *Journal of Physics: Condensed Matter* 25, 465303 (2013).
- [131] A. N. Ionov und I. S. Shlimak, "Hopping Conduction in Heavily Doped Semiconductors", *Hopping Transport in Solids* **28**, 397 (1991).
- [132] A. L. Éfros und B. I. Shklovskii, "Coulomb gap and low temperature conductivity of disordered systems", *Journal of Physics C: Solid State Physics* **8**, L49 (1975).
- [133] C. Gang, H. D. Koppen, R. W. Van der Heijden, A. T. A. M. de Waele, H. M. Gijsman und F. P. B. Tielen, "Temperature and electric field dependence of hopping transport in ion-implanted Si: As", *Solid state communications* **72**, 173–176 (1989).
- [134] B. I. Shklovskii und A. L. Efros, "Electronic properties of doped semiconductors", Bd. 45, Springer Science & Business Media (2013).
- [135] N. I. Bochkareva, V. V. Voronenkov, R. I. Gorbunov, M. V. Virko, V. S. Kogotkov, A. A. Leonidov, P. N. Vorontsov-Velyaminov, I. A. Sheremet und Y. G. Shreter,

"Hopping conductivity and dielectric relaxation in Schottky barriers on GaN", *Semiconductors* **51**, 1186–1193 (2017).

- [136] S. Ali und M. Usman, "Performance enhancement of ultraviolet-C AlGaN laser diode", *The European Physical Journal Plus* 137, 771 (2022).
- [137] L. Esaki und R. Tsu, "Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors", *IBM Journal of Research and Development* **14**, 61–65 (1970).
- [138] J. Stein und C. Joachim, "Perturbation expansion of the transfer matrix for tunnelling problems", *Journal of Physics A: Mathematical and General* 20, 2849 (1987).
- [139] D. Martin Martens, "Optical gain and modal loss in AlGaN based deep UV lasers", Berlin, (2018).
- [140] A. M. Muhin, "Numerische Untersuchungen der Elektronenreflexion durch Multiquantumbarrieren in Gruppe III-Nitriden", Berlin, Masterarbeit, (2017).
- [141] W. M. 1. (2014), https://www.wolfram.com/mathematica/ und I. Wolfram Research.
- [142] O. V. Khokhlev, K. A. Bulashevich und S. Y. Karpov, "Polarization doping for IIInitride optoelectronics", *physica status solidi* (a) **210**, 1369–1376 (2013).
- [143] T. Kolbe, A. Knauer, J. Rass, H. K. Cho, S. Hagedorn, F. Bilchenko, A. Muhin, J. Ruschel, M. Kneissl, S. Einfeldt und others, "234 nm far-ultraviolet-C light-emitting diodes with polarization-doped hole injection layer", *Applied Physics Letters* **122**, (2023).
- [144] S. D. Lester, F. A. Ponce, M. G. Craford und D. A. Steigerwald, "High dislocation densities in high efficiency GaN-based light-emitting diodes", *Applied Physics Letters* 66, 1249–1251 (1995).
- [145] K. Ban, J.-i. Yamamoto, K. Takeda, K. Ide, M. Iwaya, T. Takeuchi, S. Kamiyama, I. Akasaki und H. Amano, "Internal quantum efficiency of whole-composition-range AlGaN multiquantum wells", *Applied physics express* 4, 052101 (2011).
- [146] X. Hu, J. Deng, N. Pala, R. Gaska, M. S. Shur, C. Q. Chen, J. Yang, G. Simin, M. A. Khan, J. C. Rojo und others, "AlGaN/GaN heterostructure field-effect transistors on singlecrystal bulk AlN", Applied Physics Letters 82, 1299–1301 (2003).

- [147] S. Ichikawa, M. Funato und Y. Kawakami, "Dominant Nonradiative Recombination Paths and Their Activation Processes in Al x Ga 1- x N-related Materials", *Physical Review Applied* 10, 064027 (2018).
- [148] K. Laaksonen, M. G. Ganchenkova und R. M. Nieminen, "Vacancies in wurtzite GaN and AlN", *Journal of Physics: Condensed Matter* **21**, 015803 (2008).
- [149] C. Stampfl und C. G. Van de Walle, "Theoretical investigation of native defects, impurities, and complexes in aluminum nitride", *Physical Review B* 65, 155212 (2002).
- [150] S. F. Chichibu, K. Hazu, T. Onuma und A. Uedono, "Collateral evidence for an excellent radiative performance of Al x Ga1- x N alloy films of high AlN mole fractions", *Applied Physics Letters* **99**, 051902 (2011).
- [151] Z. Ren, H. Yu, Z. Liu, D. Wang, C. Xing, H. Zhang, C. Huang, S. Long und H. Sun, "Band engineering of III-nitride-based deep-ultraviolet light-emitting diodes: a review", *Journal of Physics D: Applied Physics* 53, 073002 (2019).
- [152] H. Miyake, C.-H. Lin, K. Tokoro und K. Hiramatsu, "Preparation of high-quality AlN on sapphire by high-temperature face-to-face annealing", *Journal of Crystal Growth* 456, 155–159 (2016).
- [153] H. Miyake, G. Nishio, S. Suzuki, K. Hiramatsu, H. Fukuyama, J. Kaur und N. Kuwano, "Annealing of an AlN buffer layer in N2–CO for growth of a high-quality AlN film on sapphire", *Applied Physics Express* 9, 025501 (2016).
- [154] J. E. Northrup, C. L. Chua, Z. Yang, T. Wunderer, M. Kneissl, N. M. Johnson und T. Kolbe, "Effect of strain and barrier composition on the polarization of light emission from AlGaN/AlN quantum wells", *Applied Physics Letters* **100**, (2012).
- [155] V. Kueller, A. Knauer, C. Reich, A. Mogilatenko, M. Weyers, J. Stellmach, T. Wernicke, M. Kneissl, Z. Yang, C. L. Chua und others, "Modulated epitaxial lateral overgrowth of AlN for efficient UV LEDs", *IEEE Photonics Technology Letters* 24, 1603–1605 (2012).
- [156] Q. Dai, Q. Shan, J. Wang, S. Chhajed, J. Cho, E. F. Schubert, M. H. Crawford,
  D. D. Koleske, M.-H. Kim und Y. Park, "Carrier recombination mechanisms and efficiency droop in GaInN/GaN light-emitting diodes", *Applied Physics Letters* 97, 133507 (2010).
- [157] I. E. Titkov, S. Y. Karpov, A. Yadav, V. L. Zerova, M. Zulonas, B. Galler, M. Strassburg,I. Pietzonka, H.-J. Lugauer und E. U. Rafailov, "Temperature-Dependent Internal

Quantum Efficiency of Blue High-Brightness Light-Emitting Diodes", *IEEE Journal of Quantum Electronics* **50**, 911–920 (2014).

- [158] S. Karpov, "ABC-model for interpretation of internal quantum efficiency and its droop in III-nitride LEDs: a review", *Optical and Quantum Electronics* 47, 1293– 1303 (2015).
- [159] S. Wu, M. Guttmann, N. Lobo-Ploch, F. Gindele, N. Susilo, A. Knauer, T. Kolbe, J. Raß, S. Hagedorn, H. K. Cho und others, "Enhanced light extraction efficiency of UV LEDs by encapsulation with UV-transparent silicone resin", *Semiconductor Science and Technology* (2022).
- [160] S. Tanaka, R. Ishii, N. Susilo, T. Wernicke, M. Kneissl, M. FUNATO und Y. KAWAKAMI, "Picosecond-laser-excited photoluminescence study of AlGaN quantum wells on epitaxially laterally overgrown AlN/sapphire under selective and non-selective excitation conditions", Japanese Journal of Applied Physics (2022).
- [161] S. Hagedorn, T. Khan, C. Netzel, C. Hartmann, S. Walde und M. Weyers, "High-Temperature Annealing of AlGaN", *physica status solidi* (a) 217, 2000473 (2020).
- [162] C. Kai, H. Zang, J. Ben, K. Jiang, Z. Shi, Y. Jia, X. Cao, W. Lü, X. Sun und D. Li, "Origination and evolution of point defects in AlN film annealed at high temperature", *Journal of Luminescence* 235, 118032 (2021).
- [163] M. X. Wang, F. J. Xu, N. Xie, Y. H. Sun, B. Y. Liu, W. K. Ge, X. N. Kang, Z. X. Qin, X. L. Yang, X. Q. Wang und others, "High-temperature annealing induced evolution of strain in AlN epitaxial films grown on sapphire substrates", *Applied Physics Letters* **114**, 112105 (2019).
- [164] A. Knauer, A. Mogilatenko, J. Weinrich, S. Hagedorn, S. Walde, T. Kolbe, L. Cancellara und M. Weyers, "The Impact of AlN Templates on Strain Relaxation Mechanisms during the MOVPE Growth of UVB-LED Structures", *Crystal Research and Technology* 55, 1900215 (2020).
- [165] S. Hagedorn, A. Mogilatenko, S. Walde, D. Pacak, J. Weinrich, C. Hartmann und M. Weyers, "High-Temperature Annealing and Patterned AlN/Sapphire Interfaces", *physica status solidi (b)* 258, 2100187 (2021).
- [166] M. Tanaka, S. Nakahata, K. Sogabe, H. N. H. Nakata und M. T. M. Tobioka, "Morphology and X-ray diffraction peak widths of aluminum nitride single crystals prepared by the sublimation method", *Japanese journal of applied physics* 36, L1062 (1997).

- [167] A. Mogilatenko, S. Walde, S. Hagedorn, C. Netzel, C.-Y. Huang und M. Weyers, "Impact of Si doping on dislocation behavior in MOVPE-grown AlN on hightemperature annealed AlN buffer layers", *Journal of Applied Physics* 131, 045702 (2022).
- [168] C.-Y. Huang, S. Walde, C.-L. Tsai, C. Netzel, H.-H. Liu, S. Hagedorn, Y.-R. Wu, Y.-K. Fu und M. Weyers, "Overcoming the excessive compressive strain in AlGaN epitaxy by introducing high Si-doping in AlN templates", *Japanese journal of applied physics* 59, 070904 (2020).
- [169] A. Knauer, T. Kolbe, S. Hagedorn, J. Hoepfner, M. Guttmann, H. K. Cho, J. Rass, J. Ruschel, S. Einfeldt, M. Kneissl und others, "Strain induced power enhancement of far-UVC LEDs on high temperature annealed AlN templates", *Applied Physics Letters* **122**, (2023).
- [170] F. Nippert, M. Tollabi Mazraehno, M. J. Davies, M. P. Hoffmann, H.-J. Lugauer,
   T. Kure, M. Kneissl, A. Hoffmann und M. R. Wagner, "Auger recombination in AlGaN quantum wells for UV light-emitting diodes", *Applied Physics Letters* **113**, (2018).
- [171] T. D. T. Deguchi, K. S. K. Sekiguchi, A. N. A. Nakamura, T. S. T. Sota, R. M. R. Matsuo, S. C. S. Chichibu und S. N. S. Nakamura, "Quantum-confined stark effect in an AlGaN/GaN/AlGaN single quantum well structure", *Japanese journal of applied physics* 38, L914 (1999).
- [172] R. T. Bondokov, S. G. Mueller, K. E. Morgan, G. A. Slack, S. Schujman, M. C. Wood, J. A. Smart und L. J. Schowalter, "Large-area AlN substrates for electronic applications: An industrial perspective", *Journal of Crystal Growth* **310**, 4020–4026 (2008).
- [173] D. Monti, M. Meneghini, C. De Santi, G. Meneghesso, E. Zanoni, J. Glaab, J. Rass, S. Einfeldt, F. Mehnke, J. Enslin und others, "Defect-related degradation of AlGanbased UV-B LEDs", *IEEE Transactions on Electron Devices* 64, 200–205 (2016).
- [174] I. E. Titkov, D. A. Sannikov, Y.-M. Park und J.-K. Son, "Blue light emitting diode internal and injection efficiency", *AIP Advances* **2**, (2012).
- [175] J. Simon, V. Protasenko, C. Lian, H. Xing und D. Jena, "Polarization-induced hole doping in wide-band-gap uniaxial semiconductor heterostructures", *Science* 327, 60–64 (2010).
- [176] C. Chu, K. Tian, J. Che, H. Shao, J. Kou, Y. Zhang, Z.-H. Zhang und H.-C. Kuo, "On the impact of electron leakage on the efficiency droop for AlGaN based deep ultraviolet light emitting diodes", *IEEE Photonics Journal* 12, 1–7 (2020).

- [177] H. Fujii, K. Endo und H. Hotta, "Improvement of multiquantum-barrier effect by layer-thickness modulation", *Applied physics letters* **64**, 3479–3481 (1994).
- [178] H. Hirayama, Y. Tsukada, T. Maeda und N. Kamata, "Marked enhancement in the efficiency of deep-ultraviolet AlGaN light-emitting diodes by using a multiquantumbarrier electron blocking layer", *Applied Physics Express* 3, 031002 (2010).
- [179] M. Schilling, "Investigations on the defect luminescence in metalorganic vapor-phase epitaxy grown AlGaN layers with high Al mole fraction for deep UV LEDs", Berlin, Masterarbeit: Technische Universität Berlin (2020).
- [180] S. Walde, S. Hagedorn, P.-M. Coulon, A. Mogilatenko, C. Netzel, J. Weinrich, N. Susilo, E. Ziffer, L. Matiwe, C. Hartmann und others, "AlN overgrowth of nano-pillarpatterned sapphire with different offcut angle by metalorganic vapor phase epitaxy", *Journal of Crystal Growth* **531**, 125343 (2020).
- [181] J. Yun, Y. Kashima und H. Hirayama, "Reflectance of a reflective photonic crystal pcontact layer for improving the light-extraction efficiency of AlGaN-based deepultraviolet light-emitting diodes", AIP Advances 8, (2018).
- [182] N. Maeda und H. Hirayama, "Realization of high-efficiency deep-UV LEDs using transparent p-AlGaN contact layer", physica status solidi (c) 10, 1521–1524 (2013).
- [183] T. Tenzler, *"Elektrische Eigenschaften von Pt- und Pd-basierten Kontakten auf GaN:Mg"*, Berlin, Bachelorarbeit: *Technische Universität Berlin* (2020).
- [184] E. Mickein, "Temperatur- und feldabhängige Untersuchungen der vertikalen Leitfähigkeit und des 3D-Poole-Frenkel-Effekts in Al0,71Ga0,29N:Mg/Al0,65Ga0,35N:Mg kurzperiodischen Übergittern", Berlin, Bachelorarbeit: Technische Universität Berlin (2020).
- [185] J. R. Aparici, "Temperature-dependent determination of the electrical conductivity of p-Al0,86Ga0,14N:Mg/Al0,65Ga0,35N:Mg short period superlattices for UVC-LEDs", Berlin, Bachelorarbeit: Technische Universität Berlin (2019).
- [186] T. Schleifer, "Examining the electrical properties of Schottky contacts on Al0,87Ga0,13N:Si using modified nodal analysis", Berlin: Technische Universität Berlin (2022).
- [187] H.-x. Zhong, J.-j. Shi, M. Zhang, X.-h. Jiang, P. Huang und Y.-m. Ding, "Reducing Mg acceptor activation-energy in Al0. 83Ga0. 17N disorder alloy substituted by nanoscale (AlN) 5/(GaN) 1 superlattice using MgGa δ-doping: Mg local-structure effect", *Scientific Reports* 4, 1–6 (2014).

- [188] N. G. Zhdanova, M. S. Kagan, E. G. Landsberg, L. V. Levkin und V. V. Petrishchev, "Ionization of shallow impurities by the electric field in a random coulomb potential", *JETP LETTERS C/C OF PIS'MA V ZHURNAL EKSPERIMENTAL'NOI TEORETICHESKOI FIZIKI* 62, 119–119 (1995).
- [189] H. Yoshida, M. Kuwabara, Y. Yamashita, K. Uchiyama und H. Kan, "Radiative and nonradiative recombination in an ultraviolet GaN/AlGaN multiple-quantum-well laser diode", *Applied Physics Letters* **96**, (2010).
- [190] Q. Yan, A. Janotti, M. Scheffler und C. G. Van de Walle, "Role of nitrogen vacancies in the luminescence of Mg-doped GaN", *Applied Physics Letters* **100**, 142110 (2012).
- [191] Q. Yan, A. Janotti, M. Scheffler und C. G. Van de Walle, "Origins of optical absorption and emission lines in AlN", *Applied Physics Letters* **105**, 111104 (2014).
- [192] Y. J. Wang, R. Kaplan, H. K. Ng, K. Doverspike, D. K. Gaskill, T. Ikedo, I. Akasaki und H. Amono, "Magneto-optical studies of GaN and GaN/Al x Ga1- x N: Donor Zeeman spectroscopy and two dimensional electron gas cyclotron resonance", *Journal of applied physics* **79**, 8007–8010 (1996).
- [193] J. J. van Hapert, "Hopping conduction and chemical structure: a study on silicon suboxides", Ph.D. dissertation, (2002).
- [194] Y. Taniyasu, M. Kasu und T. Makimoto, "Electrical conduction properties of n-type Si-doped AlN with high electron mobility (> 100 cm 2 V- 1 s- 1)", *Applied Physics Letters* 85, 4672–4674 (2004).
- [195] S. M. Sze, Y. Li und K. K. Ng, "Physics of semiconductor devices", *John wiley & sons* (2021).
- [196] M. Suzuki, J. Nishio, M. Onomura und C. Hongo, "Doping characteristics and electrical properties of Mg-doped AlGaN grown by atmospheric-pressure MOCVD", *Journal of crystal growth* 189, 511–515 (1998).
- [197] E. Silveira, J. A. Freitas Jr, M. Kneissl, D. W. Treat, N. M. Johnson, G. A. Slack und L. J. Schowalter, "Near-bandedge cathodoluminescence of an AlN homoepitaxial film", *Applied physics letters* 84, 3501–3503 (2004).
- [198] M. P. Sarachik und P. Dai, "Variable-Range Hopping in Si: B: A Temperature-Independent Prefactor in Three Dimensions", *physica status solidi* (b) 230, 205–209 (2002).

- [199] D. Redfield, "Transport properties of electrons in energy band tails", *Advances in Physics* **24**, 463–487 (1975).
- [200] M. Nardone, M. Simon, I. V. Karpov und V. G. Karpov, "Electrical conduction in chalcogenide glasses of phase change memory", *Journal of Applied Physics* 112, 071101 (2012).
- [201] H. Nakayama, P. Hacke, M. R. H. Khan, T. Detchprohm, K. H. K. Hiramatsu und N. S. N. Sawaki, "Electrical transport properties of p-GaN", *Japanese journal of applied physics* 35, L282 (1996).
- [202] M. L. Nakarmi, N. Nepal, J. Y. Lin und H. X. Jiang, "Photoluminescence studies of impurity transitions in Mg-doped AlGaN alloys", *Applied Physics Letters* 94, 091903 (2009).
- [203] M. L. Nakarmi, N. Nepal, C. Ugolini, T. M. Altahtamouni, J. Y. Lin und H. X. Jiang, "Correlation between optical and electrical properties of Mg-doped AlN epilayers", *Applied physics letters* 89, 152120 (2006).
- [204] M. Morita, K. Tsubouchi und N. Mikoshiba, "Electronic conduction in epitaxial aluminum nitride films on silicon", *Japanese Journal of Applied Physics* 21, 728 (1982).
- [205] O. Mitrofanov und M. Manfra, "Poole-Frenkel electron emission from the traps in AlGaN/GaN transistors", *Journal of applied physics* **95**, 6414–6419 (2004).
- [206] F. Mireles und S. E. Ulloa, "Acceptor binding energies in GaN and AlN", *Physical Review B* **58**, 3879 (1998).
- [207] J. Li, K.-B. Nam, T. N. Oder, K. Kim, M. L. Nakarmi, J. Y. Lin und H. Jiang, "Timeresolved photoluminescence studies of Al-rich AlGaN alloys," in *Ultrafast Phenomena in Semiconductors VI*, 4643, 250–257 (2002).
- [208] J. Kim, J.-Y. Kim, Y. Tak, J. Kim, H.-G. Hong, M. Yang, S. Chae, J. Park, Y. Park und U.-I. Chung, "Investigation of reverse leakage characteristics of InGaN/GaN lightemitting diodes on silicon", *IEEE electron device letters* 33, 1741–1743 (2012).
- [209] T. W. Kenny, P. L. Richards, I. S. Park, E. E. Haller und J. W. Beeman, "Bias-induced nonlinearities in the dc I-V characteristics of neutron-transmutation-doped germanium at liquid- 4 He temperatures", *Physical Review B* 39, 8476 (1989).

- [210] A. N. Ionov, M. N. Matveev, I. S. Shlimak und R. Rentch, "Nonohmic hopping conductivity with variable-range hopping in crystalline silicon", *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters* 45, 310 (1987).
- [211] J. S. Im, A. Moritz, F. Steuber, V. Härle, F. Scholz und A. Hangleiter, "Radiative carrier lifetime, momentum matrix element, and hole effective mass in GaN", *Applied physics letters* 70, 631–633 (1997).
- [212] M. Ieda, G. Sawa und S. Kato, "A consideration of Poole-Frenkel effect on electric conduction in insulators", *Journal of Applied Physics* **42**, 3737–3740 (1971).
- [213] T. Hirai und O. Nakada, "Formation of thin polyacrylonitrile films and their electrical properties", *Japanese Journal of Applied Physics* **7**, 112 (1968).
- [214] R. M. Hill, "Poole-Frenkel conduction in amorphous solids", *Philosophical magazine* 23, 59–86 (1971).
- [215] J. L. Hartke, "The three-dimensional Poole-Frenkel effect", *Journal of Applied Physics* 39, 4871–4873 (1968).
- [216] M. Grundmann, "Physics of semiconductors", Bd. 11, Springer (2010).
- [217] R. Gross und A. Marx, "Festkörperphysik", Walter de Gruyter GmbH & Co KG (2018).
- [218] W. Götz, N. M. Johnson, J. Walker, D. P. Bour und R. A. Street, "Activation of acceptors in Mg-doped GaN grown by metalorganic chemical vapor deposition", *Applied Physics Letters* 68, 667–669 (1996).
- [219] A. Chakraborty, C. G. Moe, Y. Wu, T. Mates, S. Keller, J. S. Speck, S. P. DenBaars und U. K. Mishra, "Electrical and structural characterization of Mg-doped p-type Al 0.69 Ga 0.31 N films on SiC substrate", *Journal of Applied Physics* **101**, 053717 (2007).
- [220] B. Borisov, V. Kuryatkov, Y. Kudryavtsev, R. Asomoza, S. Nikishin, D. Y. Song,
   M. Holtz und H. Temkin, "Si-doped Al x Ga 1- x N (0.56≤×≤ 1) layers grown by
   molecular beam epitaxy with ammonia", *Applied physics letters* 87, 132106 (2005).

## Anhang A: Korrektur der *j-U*-Kennlinien von DUV-LEDs mit Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSLs

In Kapitel 3 wurde die vertikale Leitfähigkeit von unterschiedlichen Mg-dotierten AlGaN-Strukturen bestimmt. Die hierfür zugrunde liegende Methode basiert auf dem Vergleich von Stromdichte-Spannungs-Charakteristiken von LEDs mit variierten Dicken der zu untersuchenden AlGaN:Mg-Bulk-Schichten beziehungsweise der zu untersuchenden AlGaN:Mg-SPSLs. Da mit Ausnahme von  $d_{SPSL}$  die restliche Heterostruktur der LEDs unverändert bleibt, können alle Unterschiede in den gemessenen j-U-Kennlinien der einzelnen Bauelemente, auf die Änderung der elektrischen Widerstände dieser Strukturen zurückgeführt werden. Schließlich können die Differenzen zwischen den Betriebsspannungen der einzelnen LEDs, bei konstanten Stromdichte-Werten, ausgewertet werden und so, anhand der in Kapitel 3.2 beschriebenen Vorgehensweise, auf die vertikale Leitfähigkeit der AlGaN:Mg-Strukturen geschlussfolgert werden.

Damit die oben beschriebene Methode anwendbar ist, müssen die elektrischen Leitfähigkeiten der einzelnen Schichten der LED-Heterostruktur, innerhalb der jeweiligen Serien, vergleichbar sein. Um dies zu überprüfen, wurden für jede der drei untersuchten Serien aus Kapitel 3 die *p*- und *n*-Kontaktwiderstände sowie die Schichtwiderstände der GaN:Mg-*p*-Kontaktschichten und der *n*-Kontaktschichten beziehungsweise der *n*-Stromspreizschichten der einzelnen Proben mittels der Transferlängenmethode<sup>1</sup> (TLM) ausgewertet. Dabei wurde festgestellt, dass die elektrischen Eigenschaften der *p*- und *n*-Kontakte sowie der jeweils kontaktierten Schichten, bei den einzelnen Proben mit variierten Dicken des Al<sub>0,71</sub>Ga<sub>0,29</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-Übergitters (Serie 1) sowie der Al<sub>0,68</sub>Ga<sub>0,32</sub>N:Mg-Bulk-Schicht (Serie 2), vergleichbar sind<sup>2</sup>. Deshalb ist die Anwendung der verwendeten Methode zur Ermittlung der vertikalen Leitfähigkeit in diesen beiden Probenserien legitim.

Bei der dritten Serie, bei der die vertikale Leitfähigkeit des Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSLs untersucht wurde, sind die *p*-Kontaktwiderstände sowie die GaN:Mg-*p*-Kontaktschichtwiderstände zwar vergleichbar<sup>3</sup>, jedoch unterliegen die elektrischen Eigenschaften der *n*-Kontakte einer nicht vernachlässigbaren Streuung. Um die elektrischen Eigenschaften der Kontakte einschätzen zu können und die TLM-Methode anwendbar zu machen, befinden sich auf allen Proben sogenannte TLM-Strukturen. Dabei handelt es sich um rechteckige Kontaktstreifen (200 µm × 100 µm), die im vorliegenden Fall der *n*-TLMs gleichzeitig mit den *n*-Kontakten der LEDs auf die Al<sub>0,78</sub>Ga<sub>0,22</sub>N:Si-*n*-Stromspreizschichten der einzelnen Proben, in unterschiedlichen Abständen voneinander, aufgedampft wurden. In Abbildung 60 (b) sind repräsentative *j*-*U*-Kennlinien zwischen zwei *n*-TLM-Kontakten, im Abstand von 5 µm, für die Proben der dritten Serie aufgetragen. Bei *j* = 1 Acm<sup>-2</sup> beträgt

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Die Transferlängenmethode wird an dieser Stelle aus Platzgründen nicht beschrieben. Für mehr Details zu der TLM-Auswertung, siehe [213].

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Hier nicht gezeigt, siehe hierfür [214].

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Hier nicht gezeigt, siehe hierfür [215].



Abbildung 60: Repräsentative, bei  $T = 20^{\circ}C$  und im cw-Modus gemessenen j-U-Charakteristiken (a) zwischen zwei n-TLM-Kontakten (5 µm Abstand) sowie (b) von DUV-LEDs mit unterschiedlichen Dicken des  $Al_{0,86}Ga_{0,14}N:Mg/Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg-SPSLs$ , mit und ohne Korrektur der unterschiedlichen n-Kontakte.

der Spannungsabfall für die Proben mit den Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL-Dicken von 62 nm, 112 nm, 217 nm und 432 nm jeweils 5 V, 7 V, 0,5 V und 1,5 V. Somit ist klar, dass die *n*-Kontaktwiderstände und/oder die *n*-Stromspreizschichtwiderstände der einzelnen Proben unterschiedlich hoch sind. Allerdings kann anhand der nahezu gleichbleibenden Spannungen, unabhängig vom Abstand der TLM-Kontakte (5 µm bis 30 µm)<sup>1</sup>, angenommen werden, dass vor allem die Abweichungen in den n-Kontaktwiderständen und nicht in den n-Stromspreizschichtwiderständen die Ursache für die unterschiedlichen Kontakteigenschaften sind. Da die Betriebsspannungen der einzelnen LEDs einen klaren Trend mit der Dicke des Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSLs zeigen, kann weiterhin werden, dass der Einfluss der unterschiedlichen davon ausgegangen n-Kontakteigenschaften auf U der LEDs geringer ist als der Einfluss von  $d_{SPSL}$ . Dennoch müssen die Unterschiede in den n-Kontakteigenschaften der einzelnen Proben für die korrekte Ermittlung der vertikalen Leitfähigkeit des Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL berücksichtigt werden. Da allerdings die j-U-Kennlinien der einzelnen n-Kontakte Schottky-artig sind, kann die TLM-Auswertung, welche die Bestimmung der Kontakt- und Schichtwiderstände bei ohmschen Kontakten erlaubt, an dieser Stelle nicht angewandt werden. Aus diesem Grund musste eine alternative Korrektur der einzelnen LED-Betriebsspannungen, welche die unterschiedlichen n-Kontakteigenschaften berücksichtigt, überlegt werden.

Da die verwendete Methode zur Ermittlung der vertikalen Leitfähigkeit auf der relativen Änderung der LED-Betriebsspannungen mit  $d_{SPSL}$  basiert, sind die absoluten Änderungen in U der LEDs, solange diese alle Proben betreffen, für den Wert von  $\sigma_V$  irrelevant. Deshalb ist die naheliegendste Lösung – Die *j*-*U*-Kennlinie der *n*-TLMs einer der Proben aus Abbildung 60 (a) als Referenz festzulegen, zum Beispiel die Probe mit dem 217 nm dicken

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Hier nicht gezeigt, siehe hierfür [215].



Abbildung 61: Vergleich der vertikalen Leitfähigkeit des Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL (a) mit und (b) ohne der Korrektur der unterschiedlichen n-Kontakteigenschaften.

Al<sub>0.86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0.65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL, dann die Spannungsunterschiede zwischen der Referenz und den n-TLMs der anderen Proben zu bestimmen, um anschließend die berechneten Korrekturspannungen  $(U_{kor})$  mit den *j*-*U*-Kennlinien der jeweiligen LEDs zu verrechnen. Allerdings ist der Stromfluss durch zwei Kontakte einer TLM-Struktur anders als bei einer in Durchlassrichtung betriebenen LED. Während bei einer in Durchlassrichtung betriebenen LED der Stromfluss vom Metall in den Halbleiter erfolgt, fließt der Strom zwischen zwei TLM-Kontakten vom Metall in den Halbleiter und dann wieder vom Halbleiter in das Metall. Aufgrund des Schottky-Verhaltens der untersuchten n-Kontakte dominiert der Metall-Halbleiter-Übergang die elektrischen Charakteristiken zwischen zwei *n*-TLM-Kontakten und kann als eine in Sperrrichtung geschaltete Diode gesehen werden [186]. Dagegen stellt der Halbleiter-Metall-Übergang einen relativ geringen elektrischen Widerstand für den Stromfluss in Schottky-Kontakten dar und kann als eine in Durchlassrichtung geschaltete Diode angenommen werden [186]. Dieser, bei einer in Durchlassrichtung betriebenen LED nicht existierende Übergang, muss bei der oben beschriebenen Korrektur berücksichtigt werden. Würden beide Übergänge (Metall-Halbleiter und Halbleiter-Metall) gleichermaßen die *j*-*U*-Kennlinien zwischen zwei *n*-TLM-Kontakten beeinflussen, müsste  $U_{kor}$  aus den oberen Überlegungen mit dem Faktor 0,5 skaliert werden. Da allerdings der Metall-Halbleiter-Übergang dominanter ist als der Halbleiter-Metall-Übergang, wurde  $U_{kor}$  mit einem Faktor 0,85 skaliert. Somit wird davon ausgegangen, dass sich die innerhalb der dritten Serie ermittelten Spannungsunterschiede zwischen zwei *n*-TLM-Kontakten im 5  $\mu$ m Abstand mit einem Anteil von 85% auf die *j*-U-Kennlinien der jeweiligen LEDs auswirken. Entsprechend wurde die Betriebsspannung der LEDs mit  $U_{kor} \times 0.85$ , für alle Stromdichten, verrechnet. Der Vergleich zwischen korrigierten und nicht korrigierten j-U-Kennlinien der einzelnen LEDs aus der dritten Serie befindet sich in Abbildung 60 (b). Für eine ausführlichere Auseinandersetzung mit der Korrektur, welche die unterschiedlichen n-Kontakteigenschaften der dritten Serie behandelt, siehe [185].

Vergleicht man nun die ermittelte  $\sigma_V$ -Abhängigkeit von F im Al<sub>0,86</sub>Ga<sub>0,14</sub>N:Mg/Al<sub>0,65</sub>Ga<sub>0,35</sub>N:Mg-SPSL mit (Abbildung 61 (a)) und ohne die oben beschriebene Korrektur (Abbildung 61 (b))), dann wird klar, dass die Korrektur vor allem die Höhe der Fehlerbalken reduziert und folglich zu zuverlässigeren Ergebnissen führt. Dabei bleiben die Werte für  $E_{A,0}$  und s in beiden Fällen vergleichbar.

### Anhang B: Elektrische Leitfähigkeit von DPD-Schichten

Die Erhöhung der Betriebsspannung von DUV-LED durch den Einsatz von Mg-dotierten AlGaN-Schichten mit hohem Al-Anteil ist enorm. So steigt die Betriebsspannung einer 265 nm LED um etwa 7,5 V pro 100 nm der eingesetzten  $Al_{0,68}Ga_{0,32}N:Mg$ -Bulk-Schicht bei j = 10 Acm<sup>-2</sup> (Kapitel 3.2). Dagegen scheint die vertikale Leitfähigkeit von AlGaN-DPD-Schichten, ohne Mg-Dotierung, einen vernachlässigbar geringen Einfluss auf die Betriebsspannung von DUV-LEDs zu haben. Um dies zu demonstrieren, wurden drei 233 nm LED-Proben untersucht. Die einzelnen Proben haben eine Heterostruktur aus Abbildung 56 und HILs in Form von DPD-Schichten (Gradient von AlN zu  $Al_{0,82}Ga_{0,18}N$ ) mit den jeweiligen Dicken von 40 nm, 80 nm und 100 nm. Wie aus der Abbildung 62 zu sehen ist, sind die Betriebsspannungen der einzelnen Bauelemente vergleichbar und es existiert kein erkennbarer Trend der Betriebsspannung mit der DPD-Dicke<sup>1</sup>. Folglich ist der elektrische Widerstand der DPD-Schichten so niedrig, dass dieser im Vergleich zu den anderen Schicht-und Kontaktwiderständen der 233 nm LEDs vernachlässigbar klein ist. Somit kann auch für Schichten mit hohem Al-Anteil von einer vielfach höheren vertikalen Leitfähigkeit von AlGaN-DPD-Schichten gegenüber von Mg-dotierten AlGaN-Schichten ausgegangen werden.



Abbildung 62: Im gepulsten Modus vermessenen I-U-Kennlinien von 233 nm LEDs mit unterschiedlichen DPD-Dicken.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> EL-Charakterisierung der Bauelemente gemeinsam mit Marcella Marggraf (TUB) und Fedir Bilchenko (TUB).

# Anhang C: Probenverzeichnis

Abbildung 2:	TS5899
Abbildung 5:	TS5194-2V
Abbildung 17:	(a) und (b) TS5417, TS5413, TS5409, TS5415 und TS5411
	(c) TS5426, TS5419 und TS5423
	(d) TS4127, TS4122, TS4099 und TS4126
Abbildung 18:	TS5417, TS5413, TS5409, TS5415 und TS5411
Abbildung 19:	TS5417, TS5413, TS5409, TS5415 und TS5411
	TS5426, TS5419 und TS5423
	TS4127, TS4122, TS4099 und TS4126
Abbildung 22:	TS5426, TS5419 und TS5423
Abbildung 24:	TS5426, TS5419 und TS5423
Abbildung 25:	TS5426, TS5419 und TS5423
Abbildung 27:	TS5426, TS5419 und TS5423
Abbildung 28:	TS5426, TS5419 und TS5423
Abbildung 29:	TS5423
Abbildung 30:	TS5426, TS5419 und TS5423
Abbildung 35:	(a) TS5417, TS5413, TS5409, TS5415, TS5411, TS5426, TS5419 und TS5423
	(b) TS5417, TS5413, TS5409, TS5415 und TS5411
Abbildung 36:	(a) TS5417, TS5413, TS5409, TS5415 und TS5411
	(b) TS5423 und TS5415
Abbildung 37:	TS5417, TS5413, TS5409, TS5415 und TS5411
Abbildung 38:	TS5417, TS5413, TS5409, TS5415, TS5411, TS5426, TS5419 und TS5423
Abbildung 41:	(a) TS5180-1R, (b) TS5180-1H, (c) TS5180-2H und (d) TS5180-2V
Abbildung 42:	TS5194-1R, TS5194-1H, TS5194-2H und TS5194-2V
Abbildung 43:	TS5194-1R, TS5194-1H, TS5194-2H und TS5194-2V
Abbildung 44:	TS5194-2V
Abbildung 45:	TS5194-2V
Abbildung 46:	TS5194-1H, TS5194-2H und TS5194-2V
Abbildung 49:	(a) TS5180-1H, (b) TS5180-2H und (c) TS5180-2V
Abbildung 50:	TS5180-2V
Abbildung 54:	TS5308-1 und TS5316-3
Abbildung 55:	(a) TS5180-1H, (b) TS5180-2H und (c) TS5180-2V
Abbildung 57:	P2770
Abbildung 58:	P2770
Abbildung 59:	P2774
Abbildung 60:	TS4127, TS4122, TS4099 und TS4126
Abbildung 61:	TS4127, TS4122, TS4099 und TS4126
Abbildung 62:	P2768, P2770, P2774

## Anhang D: Veröffentlichungen

#### Teile dieser Arbeit wurden bereits in Zeitschriften mit *Peer-Review* veröffentlicht:

1. <u>A. Muhin</u>, M. Guttmann, C. Kuhn, E. Mickein, J.R. Aparici, E. Ziffer, N. Susilo, L. Sulmoni, T. Wernicke und M. Kneissl, "Vertical conductivity and Poole–Frenkel-ionization of Mg acceptors in AlGaN short-period superlattices with high Al mole fraction", *Applied Physics Letters* **117**, 252101 (2020).

2. <u>A. Muhin</u>, M. Guttmann, V. Montag, N. Susilo, E. Ziffer, L. Sulmoni, S. Hagedorn, N. Lobo-Ploch, J. Rass, L. Cancellara, S. Wu, T. Wernicke und M. Kneissl, "Radiative Recombination and Carrier Injection Efficiencies in 265 nm Deep Ultraviolet Light-Emitting Diodes Grown on AlN/Sapphire Templates with Different Defect Densities", *physica status solidi (a)* **16**, 2200458 (2022).

3. T. Kolbe, A. Knauer, J. Rass, H. Kyong Cho, S. Hagedorn, F. Bilchenko, <u>A. Muhin</u>, J. Ruschel, M. Kneissl, S. Einfeldt und M. Weyers, "234 nm far-ultraviolet-C light-emitting diodes with polarization-doped hole injection layer", *Applied Physics Letters* **19**, 122 (2023).

#### Veröffentlichungen in Zeitschriften mit Peer-Review, die nicht Teil dieser Arbeit sind:

1. L. Redaelli, <u>A. Muhin</u>, S. Einfeldt, P. Wolter, L. Weixelbaum und M. Kneissl, "Ohmic contacts on N-face N-type GaN after low temperature annealing", *IEEE Photonics Technology Letters* **13**, 1278 (2013).

2. M. Lapeyrade, <u>A. Muhin</u>, S. Einfeldt, U. Zeimer, A. Mogilatenko, M. Weyers und M. Kneissl, "Electrical properties and microstructure of vanadium-based contacts on ICP plasma etched n-type AlGaN: Si and GaN: Si surfaces", *Semiconductor science and technology* **12**, 125015 (2013).

3. H. Foronda, D. A. Hunter, M. Pietsch, L. Sulmoni, <u>A. Muhin</u>, S. Graupeter, N. Susilo, M. Schilling, J. Enslin, K. Irmscher, R. W. Martin, T. Wernicke und Michael Kneissl, "Electrical properties of (11-22) Si: AlGaN layers at high Al contents grown by metal-organic vapor phase epitaxy", *Applied Physics Letters* **117** (2020).

4. N. Roccato, F. Piva, C. De Santi, M. Buffolo, M. Fregolent, M. Pilati, N. Susilo, D. Hauer Vidal, <u>A. Muhin</u>, L. Sulmoni, T. Wernicke, M. Kneissl, G. Meneghesso, E. Zanoni und M. Meneghini, "Modeling the electrical degradation of AlGaN-based UV-C LEDs by combined deep-level optical spectroscopy and TCAD simulations", *Applied Physics Letters* **16** (2023).

5. F. Piva, M. Pilati, M. Buffolo, N. Roccato, N. Susilo, D. Hauer Vidal, <u>A. Muhin</u>, L. Sulmoni, T. Wernicke, M. Kneissl, C. De Santi, G. Meneghesso, E. Zanoni, M. Meneghini, "Degradation of AlGaN-based UV-C SQW LEDs analyzed by means of capacitance deep-level transient spectroscopy and numerical simulations", *Applied Physics Letters* **18** (2023).

# Anhang E: Abkürzungsverzeichnis

3D-PFE	Dreidimensionaler Poole-Frenkel-Effekt
а	Anteil des emittierten Lichts, welcher ohne Totalreflexion ausgekoppelt wird
Α	Shockley-Read-Hall-Rekombinationskonstante
a <sub>Bohr</sub>	Bohrscher Radius
AFM	Atomkraftmikroskopie (atomic force microscopy)
Ag	Silber
$\Delta Al$	Hub
$Al_2O_3$	Saphir
AlGaN	Aluminiumgalliumnitrid
AlN	Aluminiumnitrid
Au	Gold
В	Strahlende Rekombinationskonstante
С	Lichtgeschwindigkeit
С	Auge-Rekombinationskonstante
$C_{eeh}$	Auger-Rekombinationskonstante für einen Übergang mit zwei Elektronen und einem Loch
$C_{ehh}$	Auger-Rekombinationskonstante für einen Übergang zwei Löchern und einem Elektron
CL	Kathodolumineszenz (cathodoluminescence)
$Cp_2Mg$	Di(cyclopentadienyl)magnesium
CW	Continous wave
DGA	Double growth and double annealed
DHL	Versetzungshalbringe (dislocation half loops)
DNS	Desoxyribonukleinsäure
DPD	Distributed polarization doping
DS	Dunkelpunkt ( <i>dark spot</i> )
DSD	Dunkelpunktdichte (dark spot density)
$d_{QW}$	Gesamtdicke der Quantentöpfe
$d_{SPSL}$	Dicke eines Übergitters oder die Dicke einer Bulk-Schicht
$\Delta d_{SPSL}$	Änderung der Dicke eines Übergitters oder der Dicke einer Bulk-Schicht
DUV	Tiefes Ultraviolett (deep ultraviolet)

$E_A$	Ionisierungsenergie der Akzeptoren
<i>E</i> <sub><i>A</i>,0</sub>	Ionisierungsenergie der Akzeptoren ohne Einfluss von elektrischen Feldern, reduziert durch den Überlapp der Akzeptor-Potenziale
$E_{A,0}^*$	lonisierungsenergie eines isolierten Akzeptors ohne Einfluss von elektrischen Feldern
$\Delta E_A$	Änderung der Ionisierungsenergie der Akzeptoren
$\Delta E_{A,F}$	Änderung der Ionisierungsenergie der Akzeptoren durch ein elektrisches Feld
$\Delta E^*_{A,0}$	Anderung der Ionisierungsenergie der Akzeptoren durch den Uberlapp der Akzeptor-Potenziale
EBL	Elektronensperrschicht (electron blocking layer)
E <sub>C</sub>	Energie im Leitungsband
eeh	Auger-Rekombination unter Beteiligung von zwei Elektronen und einem Loch
$E_F$	Fermi-Energie
$E_g$	Bandlückenenergie
ehh	Auger-Rekombination unter Beteiligung von zwei Löchern und einem Elektron
$E_i$	Energie eines unbesetzten Zustandes
EL	Elektrolumineszenz-Spektroskopie
ELO	Epitaktisch lateral überwachsen (epitaxially laterally overgrown)
engl	Englisch
$E_{Ph}$	Photonenergie
$E_T$	Energie eines Defektzustandes
$E_v$	Energie eines besetzten Zustandes
$E_V$	Energie im Valenzband
f	Fermi-Dirac-Verteilung
F	Elektrische Feldstärke
$\vec{F}$	Vektor der elektrischen Feldstärke
FBH	Ferdinand-Braun-Institut, Leibniz-Institut für Höchstfrequenztechnik
g	Beugungsvektor
GaN	Galliumnitrid
GBL	Korngrenzen-limitierte Leitung (grain-boundary-limited conduction)
h	Planck-Konstante
ħ	Reduzierte Planck-Konstante
Н	Wasserstoff

Hg	Quecksilber
HIL	Lochinjektionsschicht (hole injection layer)
HR-XRD	Hochauflösende Röntgendiffraktometrie (high resolution X-ray diffraction)
HTA	Hochtemperatur erhitzt (high-temperature annealed)
i	Unbesetzter Zustand
Ι	Stromstärke
IKZ	Leibniz-Institut für Kristallzüchtung
j	Betriebsstromdichte
k	Wellenzahl
K	Proportionalitätskonstante
$k_B$	Boltzmann-Konstante
l	Durchschnittlicher räumlicher Abstand zwischen zwei Zuständen
LD	Laserdiode
$L_d$	Diffusionslänge
LED	Lichtemittierende Diode
$L_f$	Abstand zwischen zwei Durchstoßversetzungen in dem der überwiegende Anteil der strahlenden Rekombination erfolgt
$L_p$	Periodenlänge
М	Mesa-Fläche
$m_e$	Elektronenmasse
$m_h^*$	Effektive Lochmasse
Mg	Magnesium
MOVPE	Metall-organische Gasphasenepitaxie (metal-organic vapor phase epitaxy)
MQW	Mehrfachquantentopf (multiple quantum well)
MTLM	Modifizierte Transferlängenmethode
n	Ladungsträgerdichte
Ν	Stickstoff
$N_A$	Akzeptordichte
$N_A^{3D-PFE}$	Akzeptordichte bestimmt anhand des 3D-PFE-Fits
$N_A^{SIMS}$	Akzeptordichte bestimmt anhand von SIMS-Messungen
$N_H$	Wasserstoffdichte
Ni	Nickel
n <sub>luft</sub>	Brechungsindex von Luft

n <sub>max</sub>	Ladungsträgerdichte bei der das Maximum der strahlenden Rekombinationseffizienz erreicht wird
$N_{Mg}$	Magnesiumkonzentration
n <sub>MQW</sub>	Brechungsindex von Luft des Mehrfachquantentopfs
NO	Stickstoffmonoxid
$NO_2$	Stickstoffdioxid
$N_V$	Effektive Zustandsdichte in der Nähe des Valenzbandmaximums
$N_{\mu}$	Dichte der Störstellen in der Nähe der Fermi-Energie
0	Sauerstoff
p	Freie Lochdichte
$p_{\emptyset}$	Durchschnittliche freie Lochdichte
Pd	Palladium
$P_{el}$	Elektrische Leistung
PFE	Poole-Frenkel-Effekt
$P_{iv}$	Übergangswahrscheinlichkeit zwischen zwei Zuständen
Pout	Optische Ausgangsleistung
$P_{out}^{max}$	Optische Ausgangsleistung bei der das Maximum der strahlenden Rekombinationseffizienz erreicht wird
q	Elementarladung
Q	Qualitätsfaktor
QCSE	Quantum-confined Stark effect
TEM	Transmissionselektronenmikroskopie
r	Ortskoordinate
$\vec{r}$	Emissionsrichtung
$R_{Aug}$	Auger- Rekombinationsrate
$R_{iv}$	Räumlicher Abstand zwischen besetzten und unbesetzten Zuständen
R <sub>rad</sub>	Strahlende Rekombinationsrate
R <sub>SRH</sub>	Shockley-Read-Hall-Rekombinationsrate
RT	Raumtemperatur
S	Räumlicher Abstand der Akzeptoren
SARS- CoV-2	Severe acute respiratory syndrome coronavirus 2
SCL	Raumladungs-limitierte Leitung (space-charge limited conduction)
Si	Silizium

SIMS	Sekundärionen-Massenspektroskopie (secondary-ion mass spectrometry)
SPSL	Kurz-periodisches Übergitter (short-period superlattice)
SRH	Shockley-Read-Hall
Т	Temperatur
TE	Transversal elektrisch
TD	Durchstoßversetzung (threading dislocation)
TDD	Durchstoßversetzungsdichte (threading dislocation density)
TLM	Transferlängenmethode
ТМ	Transversal magnetisch
t <sub>puls</sub>	Pulslänge
TRPL	Photolumineszenz-Spektroskopie ( <i>time-resolved photoluminescence spectroscopy</i> )
TUB	Technische Universität Berlin
U	Betriebsspannung
$\Delta U$	Absolute Änderung der Betriebsspannung
$U_{kor}$	Korrekturspannung
UV	Ultraviolett
UVC	C-Bereich des ultravioletten Spektrums (100 nm bis 280 nm)
v	Besetzter Zustand
V	Vanadium
VRH	Hopping-Leitung (variable-range hopping)
W	Durchschnittlicher energetischer Abstand zwischen besetzten und unbesetzten Zuständen
x	Al-Anteil einer Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> N-Schicht
у	Abstand zwischen zwei benachbarten Durchstoßversetzungen
α	Lokalisationsparameter
γ	Uberlapp des Grundzustandes der Elektronen- und der Lochwellenfunktionen
Е	Verspannungsgrad
$\epsilon$	Dielektrizitätskonstante
$\epsilon_{opt}$	Optische Dielektrizitätskonstante
$\epsilon_r$	Relative Dielektrizitätskonstante
$\eta_{CIE}$	Ladungsträgerinjektionseffizienz (charge carrier injection efficiency)
$\eta_{EQE}$	Externe Quanteneffizienz

- $\Delta \eta_{EQE}$  Differenz der externen Quanteneffizienzen
- $\eta_{EQE}^{max}$  Maximale externe Quanteneffizienz
- $\eta_{el}$  Elektrische Effizienz einer LED
- $\eta_{IQE}$  Interne Quanteneffizienz
- $\eta_{IQE}^{max}$  Maximale interne Quanteneffizienz
- $\eta_{LEE}$  Lichtextraktionseffizienz
- Relative Änderung der freien Lochdichte in einem Übergitter, im Verhältnis zu<br/>der freien Lochdichte in einer Bulk-Schicht mit der durchschnittlichen<br/>Legierungszusammensetzung des SPSLs
- $\eta_{RRE}$  Strahlende Rekombinationseffizienz (*radiative recombination efficiency*)
- $\Delta \eta_{RRE}$  Differenz der strahlende Rekombinationseffizienzen
- $\eta_{RRE}^{max}$  Maximale strahlende Rekombinationseffizienz
- $\eta_t$  Transmissionsfaktor
- $\eta_t^{bulk}$  Transmissionsfaktor einer Bulk-Schicht
- $\eta_{WPE}$  Konversionseffizienz (*wall plug efficiency*)
  - $\theta$  Emissionswinkel
  - Θ Transmissionswahrscheinlichkeit
  - $\lambda$  Emissionswellenlänge
  - $\lambda_d$  Debye-Länge
  - $\mu_e$  Beweglichkeit der Elektronen
  - μ<sub>h</sub> Beweglichkeit der Löcher
  - Π Normierte optische Ausgangsleistung
  - $\sigma$  Elektrische Leitfähigkeit
  - $\sigma_0$  Hopping-Proportionalitätskonstante im Mott-Bereich
  - $\sigma_1$  Hopping-Proportionalitätskonstante im Pollak-Riess -Bereich
  - $\sigma_2$  Hopping-Proportionalitätskonstante im Shklovskii-Bereich
- $\sigma_L$  Laterale elektrische Leitfähigkeit
- $\sigma^{Mott}_{hopping}$  Elektrische Hopping-Leitfähigkeit im Mott-Bereich
- $\sigma_{hopping}^{PR}$  Elektrische Hopping-Leitfähigkeit im Pollak-Riess-Bereich
- $\sigma^{Shkl}_{hopping}$  Elektrische Hopping-Leitfähigkeit im Shklovskii-Bereich
  - $\sigma_V$  Vertikale elektrische Leitfähigkeit
  - *τ* Streuzeit
  - $\vartheta$  Charakteristische Frequenz
- Φ Potenzial
- $\varphi_c$  Kritischer Winkel
- $\psi$  Wellenfunktion
- $\psi_i$  Wellenfunktion eines unbesetzten Zustandes
- $\psi_{v}$  Wellenfunktion eines besetzten Zustandes

## Danksagung

Die Zeit als Doktorand war sehr ereignisreich, spannend, aber auch herausfordernd. Deshalb möchte ich mich bei allen bedanken, die mich bei der Durchführung und Anfertigung dieser Arbeit unterstützt haben.

Zunächst möchte ich mich bei Prof. Dr. Michael Kneissl für die Möglichkeit diese Dissertation anzufertigen, für die zahlreichen wissenschaftlichen Diskussionen und die stets ermutigende sowie konstruktive Sichtweise auf die Ergebnisse bedanken. Prof. Dr. Ulrich Theodor Schwarz möchte ich für die Übernahme des Zweitgutachtens danken. Danke an Prof. Dr. Axel Hoffmann für die Übernahme des Drittgutachtens. Prof. Dr. Matthias Bickermann bin ich für die Übernahme des Prüfungsvorsitzes dankbar. Ein großer Dank gilt Dr. Tim Wernicke, der mit seiner Erfahrung, seiner unkonventionell erscheinenden Art wissenschaftliche Hindernisse zu meistern und der Fähigkeit komplexe Zusammenhänge möglichst elegant zu lösen integral zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen hat. Ein besonderer Dank gilt Dr. Martin Guttmann für seine stets positive Einstellung und die Bereitschaft Lösungen und Erklärungen für wissenschaftliche Herausforderungen sowohl praktischer als auch theoretischer Natur zu suchen und zu finden. Vielen Dank, dass du auch nach deiner Zeit an der TU stets bereit warst die komplexesten Sachverhalte zu diskutieren und diese Arbeit zusätzlich vollständig zu überprüfen. Bei Dr. Tim Kolbe, Dr. Christian Kuhn und Dr. Norman Susilo möchte ich mich für das MOVPE-Wachstum der Proben, die Erläuterungen und die Diskussionen in Bezug auf die Epitaxie und die anschließenden Untersuchungen der Proben bedanken. Vielen Dank an Dr. Hyun Kyong Cho, Dr. Jens Rass und Dr. Luca Sulmoni für die Prozessierung der LEDs. Ein besonderer Dank gilt Dr. Luca Sulmoni für die Einführung in die LED-Prozessierung. Vielen Dank an Dr. Silvia Hagedorn und Dr. Sebastian Walde für die Herstellung und die Bereitstellung von AlN/Saphir-Templates. Danke an Dr. Johannes Glaab und Dr. Jan Ruschel für die Durchführung der Alterungsprozesse an LEDs sowie für die zahlreichen Diskussionen über die Ursachen und die treibenden Mechanismen der Alterung in DUV-LED. Danke an Dr. Leonardo Cancellara für die TEM-Aufnahmen und die zugehörigen Erläuterungen. Bei Verena Montag und Marcella Marggraf möchte ich mich für die Unterstützung bei der EL-Charakterisierung der LEDs bedanken. Vielen Dank an meine Bachelor- und Masterstudenten Jesus Aparici, Fedir Bilchenko, Emil Mickein und Thomas Tenzler für die Zusammenarbeit an den einzelnen Projekten. Frederik Boster, Florian Eberspach und Dr. Humberto Foronda bin ich für die grammatikalische Überprüfung dieser Arbeit sehr dankbar. Danke auch an Giulia Cardinali, Dr. Johannes Enslin, Massimo Grigoletto, Jakob Höpfner, Marcell Schilling und Dr. Shaojun Wu für die Erläuterung der Hintergründe zu ihren Spezialgebieten.

Ein ganz besonderer Dank gilt natürlich meiner Familie und Freunden, die mich stets unterstützt haben und an mich glaubten.