Einfluss der Lichtextraktion auf die Effizienz AlGaN-basierter Leuchtdioden im tiefen ultravioletten Spektralbereich

vorgelegt von

Master of Science

Martin Guttmann

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. Michael LehmannGutachter: Prof. Dr. Michael KneisslGutachter: Prof. Dr. Ulrich Theodor Schwarz

Tag der wissenschaftlichen Aussprache:

31. Juli 2020

Berlin 2020

Einfluss der Lichtextraktion auf die Effizienz AlGaN-basierter Leuchtdioden im tiefen ultravioletten Spektralbereich

Kurzzusammenfassung

In dieser Arbeit wird die Lichtextraktion AlGaN-basierter Leuchtdioden (LEDs), welche im tiefen ultravioletten (UV) Spektralbereich emittieren, untersucht. Mithilfe von Raytracing-Simulationen soll die Lichtextraktionseffizienz (LEE) von UV-LEDs bestimmt und die gemessene externe Quanteneffizienz (EQE) bezüglich der internen Quanteneffizienz (IQE) und LEE quantifiziert werden. Im ersten Teil der Arbeit wurde auf Basis von Reflexions-, Transmissions- und Fernfeld- (FF) Messungen ein Raytracing-Simulationsmodell für AlGaN-basierte UV-LEDs entwickelt, welches insbesondere den Reflexionsgrad eines formierten n-Kontakts, eine raue Saphirrückseite und eine strukturierte AlN/Saphir-Grenzfläche hinsichtlich der LEE und des FF berücksichtigt. Die Ergebnisse im mittleren Teil der Arbeit zeigten, dass die starke Abnahme der EQE zu kürzeren Emissionswellenlängen (von 263 nm nach 218 nm) einer um drei Größenordnungen sinkenden IQE sowie einer um 65 % sinkenden LEE aufgrund des Lichtpolarisationswechsels von transversal-elektrisch nach transversal-magnetisch zugeschrieben werden kann. Außerdem hatte der Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-Barrieren von LEDs mit einer Emissionswellenlänge um 268 nm einen größeren Einfluss auf die IQE als auf die LEE. Elektrolumineszenz- (EL) Messungen zeigten eine maximale EQE für LEDs mit Al_{0,53}Ga_{0,47}N-Quantentöpfen (QWs) und Al_{0,67}Ga_{0,33}N-Barrieren. Dies konnte mit Drift-Diffusions-Simulationen bestätigt werden und wurde vorrangig der steigenden Ladungsträgerdichte in den QWs und den steigenden Elektronenleckströmen mit steigendem Al-Stoffmengenanteil in den Barrieren zugeschrieben. Durch das Ersetzen der UV-absorbierenden p-Seite von UV-LEDs durch eine UV-transparente p-Seite in Kombination mit einem hochreflektierenden *p*-Kontakt zeigten Raytracing-Simulationen eine Steigerung der LEE um 150 %. EL-Messungen an LEDs mit einer Emissionswellenlänge von 263 nm, unterschiedlichem Al-Stoffmengenanteil x im p-AlGaN sowie p-Kontakten mit verschiedenen UV-Reflektionsgraden R zeigten eine Zunahme der EQE von 0,6 % für x = 0.33 auf 1.5 % (R = 24 %) bzw. 3.0 % (R = 87 %) für x = 0.68. Die zusätzliche Steigerung der EQE gegenüber der simulierten LEE ist möglicherweise auf eine Zunahme der IQE mit steigendem Al-Stoffmengenanteil in der p-AlGaN-Seite zurückgeführt. Im letzten Teil der Arbeit wurde die Lichtextraktion an aufgebauten UV-LED untersucht. Durch den Vergleich von gemessenen und simulierten FFs von LED-Chips konnte ein Lichtextraktionsmodell gefunden und eine Strahlendatei generiert werden, die insbesondere die rauen Saphirrück- und -seitenflächen berücksichtigt. Diese Strahlendatei konnte zur Entwicklung eines neuartigen Gehäuses mit Reflektor und Fresnel-Linse mit einer gerichteten Lichtabstrahlung verwendet werden. FF-Messungen an diesem Gehäuse konnten für kleine Emissionswinkel eine Verdreifachung der Strahlungsstärke gegenüber einem flachen Gehäuse aus den Simulationen bestätigen, während die Gesamtemissionsleistung um 18 % sank.

Influence of light extraction on the efficiency of AlGaN-based light emitting diodes in the deep ultraviolet spectral range

Abstract

In this work, the light extraction from AlGaN-based light emitting diodes (LEDs) emitting in the deep ultraviolet (UV) spectral range is investigated. Using ray tracing simulations, the light extraction efficiency (LEE) of UV-LEDs is determined and the measured external quantum efficiency (EQE) of UV-LEDs is quantified in terms of the internal quantum efficiency (IQE) and LEE. In the first part of this thesis, reflection, transmission and far field measurements were used to develop a ray tracing simulation model for AlGaN-based UV-LEDs considering the reflectivity of annealed *n*-contacts, a rough sapphire backside and a patterned AlN/sapphire interface. The results in the main part of this thesis show that the strong reduction in EQE for shorter emission wavelengths (from 263 nm to 218 nm) is attributed to a reduction in IQE of three order of magnitudes and to a reduction in LEE of 65 % due to the change of the dominant optical polarization of the emitted light from transverse-electric to transverse-magnetic. In addition, for UV-LEDs with an emission wavelength around 268 nm, a stronger impact on IQE than on LEE was observed when changing the Al mole fraction in the AlGaN barrier of the AlGaN active region. Electroluminescence (EL) measurements showed a maximal EQE for LEDs with Al_{0,53}Ga_{0,47}N quantum wells and Al_{0,67}Ga_{0,33}N barriers. This was confirmed by drift-diffusion simulations and attributed to an increasing charge carrier density in the quantum wells and to a rising electron leakage current with increasing Al mole fraction in the barriers. By replacing the UV-absorbing *p*-side of UV-LEDs with a UV-transparent *p*-side together with a highly reflective *p*-contact ray tracing simulations predict a 150 % increase in the LEE. EL measurements on UV-LEDs emitting at 263 nm with an Al mole fractions in the *p*-AlGaN-side between x = 33% and x = 68% and featuring *p*-contacts with different UV-reflectivity R showed an increase in the EQE from 0.6% for x = 33% and all *p*-contacts to 1.5 % for x = 68% and R = 24% as well as up to 3.0 % for x = 68% and R = 87%. The additional improvement in EQE compared to simulated LEE for LEDs with a UV-transparent *p*-side was possibly attributed to an increasing IQE with increasing Al mole fraction in the *p*-AlGaN-side. In the last part of this thesis, the light extraction from flip-chip mounted UV-LED was investigated. By comparing simulated and measured far fields of UV-LEDs chips, a light extraction simulation model was found and a ray file was generated, considering the roughened sapphire sidewalls and backside. The ray file was used to develop a novel LED package with reflector and Fresnel lens with a directional radiation pattern. For a small emission angle, a tripling of the radiant intensity compared to a planar package and predicted by the simulation could be confirmed by far field measurements, while the decrease in total emission power was 18%.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung 1 1 Grundlagen zu den Simulationsmodellen 5 5 1.1 Simulation der Lichtextraktion: Monte-Carlo-Raytracing 7 Strahlerzeugung und Abstrahlcharakteristik der aktiven Zone 1.1.1 1.1.2 Strahlverfolgung durch die Schichten der LED 9 12 1.1.3 Implementierung von rauen Oberflächen 1.1.4 Bestimmung der Lichtextraktionseffizienz, des Nah- und Fernfelds 14 15 1.2 Simulation der Bandstruktur und Ladungsträgerinjektion 15 1.2.1 Berechnung der Valenzbandstruktur mittels k·p-Theorie 1.2.2 17 Bestimmung des Potentials und der Ladungsträgerverteilung 1.2.3 Berechnung der Drift-Diffusion-Ströme und Rekombinationsraten 18 1.3 Zusammenfassung 19 21 2 **Experimentelle Methoden** 21 2.1 Elektrolumineszenzspektroskopie an UV-LEDs 21 2.1.1Messung des Spektrums und der Emissionsleistung 2.1.2 Messung der optischen Polarisation aus der Mesa-Kante 23 24 2.1.3 Fernfeldmessung und Bestimmung der Strahlungsstärke 2.2 Messung des Reflexionsgrads von Metallen 25 Einflussfaktoren der Lichtextraktion von AlGaN-basierten UV-LEDs 27 3 Strahlverfolgung in einer UV-LED 28 3.1 3.1.1 29 Typische Lichtpfade in der LED 3.1.2 Absorptionsverluste innerhalb einer LED 30 3.2 Bestimmung des Reflexionsgrads eines formierten n-Kontakts 33 Einfluss der rauen Saphirrückseite auf das Fernfeld 35 3.3 3.3.1 Charakterisierung des Höhenprofils der Saphirrückseite 35 Streufernfeld der rauen Saphirrückseite 38 3.3.2 3.4 Einfluss der ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche auf das Fernfeld und die LEE 40 3.4.1 Charakterisierung der ELO-Voids und der Saphirrückseite 41

		3.4.2	Vergleich der Lichtemission von UVC-LEDs mit rauer und		
			polierter Saphirrückseite	44	
		3.4.3	Einfluss der Geometrie und Rauheit der ELO-Voids auf die		
			Lichtextraktion und das Fernfeld	47	
	3.5	Zusan	ımenfassung	52	
4	Einf	luss de	r aktiven Zone von UVC-LEDs auf die Emissionsleistung	53	
	4.1	Ursache der Effizienzabnahme von LEDs mit Emissionswellenlängen			
		unter	265 nm	54	
		4.1.1	Messung der Emissionswellenlänge und -leistung	55	
		4.1.2	Simulation und Messung der optischen Polarisation	56	
		4.1.3	Simulation der Lichtextraktionseffizienz	59	
		4.1.4	Aufteilung der EQE in LEE, RRE und CIE	62	
	4.2	Einflu	ss der Barrierenhöhe der AlGaN-Quantentöpfe auf die IQE und LEE	64	
		4.2.1	Messung und Simulation der Emissionswellenlänge	65	
		4.2.2	Bestimmung der optische Polarisation und Simulation der		
			Lichtextraktionseffizienz	67	
		4.2.3	Einfluss der Barrierenhöhe auf die Betriebsspannung und		
			die Emissionsleistung	69	
		4.2.4	Bestimmung der IQE aus Drift-Diffusions-Simulationen	70	
	4.3	Zusan	ımenfassung	73	
5	Red	uzierur	ng der UV-Absorption in UVC-LEDs	75	
	5.1	Simula	ation der Lichtextraktion und Entwicklung einer		
		UV-transparenten UVC-LED			
		5.1.1	Einfluss der Absorption im <i>p</i> -AlGaN und des Reflexionsgrads des		
			<i>p</i> -Kontakts auf die Lichtextraktion	76	
		5.1.2	Bestimmung des Al-Stoffmengenanteils und des		
			Absorptionskoeffizienten im <i>p</i> -AlGaN-Übergitter	79	
		5.1.3	Vergleich verschiedener <i>p</i> -Kontaktmetallisierungen	81	
	5.2	Messu	ing der elektro-optischen Eigenschaften von		
		UV-tra	ansparenten UVC-LEDs	83	
		5.2.1	Einfluss des Al-Stoffmengenanteils im <i>p</i> -AlGaN-Übergitter und		
			des <i>p</i> -Kontaktmetalls auf die Spannung und Emissionsleistung	84	
		5.2.2	Aufteilung der EQE in LEE und IQE	87	
	5.3	Zusan	ımenfassung	89	
6	Abst	trahlch	arakteristik von aufgebauten UVB-LEDs	91	
	6.1	Entwi	cklung einer Strahlendatei für UVB-LED-Chips	92	

	6.1.1	Einfluss der Vereinzelung und des Aufbaus von UVB-LEDs	
		auf das Fernfeld	93
	6.1.2	Einfluss der Oberflächenrauheit auf das simulierte Fernfeld	95
	6.1.3	Strahlendatei typischer UVB-LED-Chips	97
6.2	Steige	rung der Strahlungsstärke durch ein Gehäuse mit Reflektor und	
	Fresne	el-Linse	99
	6.2.1	Simulation des Fernfelds und der Lichtextraktionseffizienz	100
	6.2.2	Emissionsleistungen und Fernfelder der verschiedenen	
		Aufbaustadien des Gehäuses	103
6.3	Zusam	menfassung	107
Zusamme	enfassı	ing und Ausblick	109
Literatur	verzei	chnis	113
Anhang A	\ :	Ergänzungen zur Raytracing-Simulation	125
A.1	Herlei	tung der vektoriellen Form des Snelliusschen Brechungsgesetzes	125
1 0	Herleitung der vektoriellen Form der Fresnelschen Formeln		126
A.Z	merier	8	
A.2 A.3	Herlei	tung des Amplitudenvektors des reflektierten und	
A.2 A.3	Herlei	tung des Amplitudenvektors des reflektierten und nittierten Strahls	127
A.2 A.3 A.4	Herlei transn Einträ	tung des Amplitudenvektors des reflektierten und nittierten Strahls ge der Rotationsmatrix für raue Oberflächen	127 128
A.2 A.3 A.4 A.5	Herlei transn Einträ Brech	tung des Amplitudenvektors des reflektierten und nittierten Strahls ge der Rotationsmatrix für raue Oberflächen 1ngsindex von AlGaN – Literaturvergleich	127 128 129
A.2 A.3 A.4 A.5 Anhang F	Herlei transn Einträ Brecht	tung des Amplitudenvektors des reflektierten und nittierten Strahls ge der Rotationsmatrix für raue Oberflächen Ingsindex von AlGaN – Literaturvergleich Probenverzeichnis	127 128 129 131
A.2 A.3 A.4 A.5 Anhang F Anhang C	Herlei transn Einträ Brechu 3:	tung des Amplitudenvektors des reflektierten und nittierten Strahls ge der Rotationsmatrix für raue Oberflächen ungsindex von AlGaN – Literaturvergleich Probenverzeichnis Publikationen	127 128 129 131 133
A.2 A.3 A.4 A.5 Anhang E Anhang C Anhang I	Herlei transn Einträ Brech 3: C:	tung des Amplitudenvektors des reflektierten und hittierten Strahls ge der Rotationsmatrix für raue Oberflächen ungsindex von AlGaN – Literaturvergleich Probenverzeichnis Publikationen Abkürzungsverzeichnis	127 128 129 131 133 133

Einleitung

Die künstliche Erzeugung von ultraviolettem (UV) Licht ermöglicht eine Vielzahl von Anwendungsmöglichkeiten in den Bereichen der Produktion, Medizin, Desinfektion, Sensorik und der Pflanzenaufzucht [1]. Eine Auswahl von Anwendungen ist illustrativ in Abbildung 1 in Abhängigkeit der Emissionswellenlänge dargestellt. Beispielsweise kann Licht im UVB-Spektralbereich (280 nm bis 325 nm) die sekundären Metaboliten in Nutzpflanzen erhöhen [2] oder zur Behandlung von Hautkrankheiten dienen [3]. Licht im UVC-Spektralbereich (200 nm bis 280 nm) kann zur Desinfektion von Oberflächen oder Wasser genutzt werden [4]. Hierbei wird ausgenutzt, dass das Wirkungsmaximum für die Inaktivierung von Zellen bei etwa 270 nm liegt [5]. Außerdem kann sehr kurzwelliges UVC-Licht (< 230 nm) insbesondere für die Detektion von Gasen wie NO oder NO2 anhand deren schmaler Absorptionslinien genutzt werden [6, 7], ohne Querempfindlichkeiten mit anderen Gasen zu haben. UV-Strahlung wird aktuell vor allem mit Nieder- und Mitteldruck-Quecksilberdampflampen erzeugt, da diese eine hohe Ausgangsleistung bei einem Wirkungsgrad von bis zu 35 % erreichen [8]. Nachteile bei diesen Quellen sind jedoch die lange Aufwärmphase vor dem Betrieb, die hohe Umweltbelastung aufgrund des Quecksilbers und die begrenzte Anzahl an Emissionslinien des Spektrums. Hier bieten auf Aluminiumgalliumnitrid (AlGaN) basierende lichtemittierende Dioden (LEDs) eine umweltfreundliche Alternative [9].



Abbildung 1: Auswahl an Anwendungsbereichen von LEDs mit einer Emissionswellenlänge im tiefen UV-Spektralbereich. (Gestaltung nach Referenz [1])

Das AlGaN-Materialsystem besitzt eine Bandlücke zwischen GaN mit 3,4 eV [10] und AlN mit 6,0 eV [11] und könnte somit den Spektralbereich zwischen 207 nm und 360 nm abdecken. Gegenüber herkömmlichen künstlichen UV-Quellen besitzen LEDs den Vorteil einer kurzen oder gepulsten Schaltzeit, einer individuell einstellbaren Emissionswellenlänge und



einer geringen Betriebsspannung sowie das Potential einer hohen Leistungseffizienz [9]. Auf Basis dieser Vorteile wurde in den letzten Jahren und wird auch heute noch sowohl auf Forschungsseite als auch auf industrieller Seite aktiv an der Weiterentwicklung von UVBund UVC-LEDs gearbeitet [12]. Ein mögliches Maß für die Effizienz einer LED ist die externe Quanteneffizienz (EQE) – das Verhältnis aus emittierten Photonen und injizierten Ladungsträgern. Die EQE ist das Produkt aus folgenden drei Teileffizienzen (Gleichung 1) [13]: Die Ladungsträgerinjektionseffizienz (engl. *charge carrier injection efficiency*, CIE) gibt das Verhältnis zwischen denen im Quantenfilm rekombinierenden Ladungsträgern zu allen injizierten Ladungsträgern an. Die strahlende Rekombinationseffizienz (engl. *radiative recombination efficiency*, RRE) gibt das Verhältnis aus strahlenden und allen Ladungsträgerrekombinationen im Quantenfilm an. Die Lichtextraktionseffizienz (LEE) gibt das Verhältnis zwischen aus der LED emittierten Photonen und im Quantenfilm erzeugten Photonen an. Die CIE und die RRE werden oft auch als interne Quanteneffizienz (IQE) zusammengefasst.

$$EQE = CIE \cdot RRE \cdot LEE = IQE \cdot LEE \tag{1}$$

Abbildung 2 zeigt eine Auswahl der in der Literatur maximal erreichten EQEs von LEDs in Abhängigkeit ihrer Emissionswellenlänge [14–28]. Speziell soll hier der Fokus auf die LEE gelegt werden, indem zwischen der Aufbauform der LED und, ob die *p*-Seite UV-transparent oder UV-absorbierend ist, unterschieden wird. Aktuell können EQEs von bis zu 0,2 % bei 226 nm [14] oder bis zu 5,8 % bei 310 nm [23] bis hin zu 20 % bei 270 nm [20] nachgewiesen werden. Während viele Referenzen LEDs mit einer UV-absorbierenden *p*-Seite und ohne zusätzliche Komponenten zur Erhöhung der LEE demonstrieren, werden die höchsten Werte nur unter Verwendung einer UV-transparenten *p*-Seite und/oder zusätzlicher Verkapselung [20, 23] bzw. eines strukturierten Substrats erreicht [18, 19]. Außerdem ist eine tendenzielle Abnahme der EQE mit kürzer werdender Emissionswellenlänge zu erkennen [16]. Für ein besseres Verständnis und zur Steigerung der EQE ist es nötig, tiefere Einblicke in alle drei Teileffizienzen (CIE, RRE und LEE) zu erlangen. Während die RRE experimentell mittels temperatur- und anregungsleistungsdichteabhängiger Photolumineszenz an Quantenfilmen abgeschätzt [29] und die CIE durch den Vergleich von Photolumineszenz und Elektrolumineszenz von LEDs bei gleicher Anregungsleistung bzw. Stromdichte ermittelt werden kann [30], gibt es für die LEE keine derartige direkte Messmethode. Allerdings kann die LEE mithilfe von optischen Simulationen bestimmt werden. Schwerpunkt dieser Arbeit ist es, mithilfe eines entwickelten Simulationsmodells die LEE und die Lichtabstrahlung von AlGaN-basierten LEDs im tiefen UV-Spektralbereich quantitativ zu bestimmen. Außerdem soll gezeigt werden, wie das entwickelte Lichtextraktionsmodell zur Optimierung der Lichtabstrahlung von aufgebauten UV-LEDs genutzt werden kann.

Der Inhalt dieser Arbeit ist in sechs Kapitel unterteilt. In den ersten beiden Kapiteln werden die Grundlagen zu den in der Arbeit verwendeten Simulationsmodellen und experimentellen Methoden aufgeführt. Dabei werden das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Programm zur Simulation der Lichtextraktion mithilfe der Monte-Carlo-Raytracing-Technik beschrieben und die Methoden zur Simulation der Bandstruktur und Ladungsträgerinjektion in ihren Ansätzen dargelegt. In den experimentellen Methoden werden die Elektrolumineszenz-Messplätze zur Bestimmung der Strom-Spannungs-Charakteristik, der Emissionsleistung, der optischen Polarisation und des Fernfelds vorgestellt und es wird auch auf ihre Genauigkeit und Fehlerquellen eingegangen. Zusätzlich wird eine Methode zur Bestimmung des absoluten Reflexionsgrads von Metallen vorgestellt. Im dritten Kapitel werden an einem einfachen LED-Modell anhand von Lichtpfaden und Absorptionsverlusten die Herausforderungen der Lichtextraktion von AlGaN-basierten LEDs aufgezeigt. Anhand von Reflexionsmessungen an formierten n-Kontakten soll durch den Vergleich mit Transfermatrix-Rechnungen ein effektiver komplexer Brechungsindex für formierte *n*-Kontakte gefunden werden. Außerdem wird die Simulation um zwei wichtige Modelle erweitert: Anhand von experimentellen Untersuchungen der Lichtauskopplung an rauen Saphiroberflächen und strukturierten AlN/Saphir-Grenzflächen sowie dem Vergleich mit simulierten Ergebnissen werden hier geeignete Modelle zur Beschreibung dieser Flächen entwickelt und implementiert. Im vierten Kapitel wird der Einfluss der Heterostruktur der aktiven Zone von UVC-LEDs auf die Emissionsleistung untersucht. Hier soll im ersten Teil die Ursache der starken Abnahme der EQE zu kürzeren Emissionswellenlängen gefunden werden. Dazu sollen Messungen der optischen Polarisation und Lichtextraktionssimulationen an LEDs mit verschiedenen Al-Stoffmengenanteilen in der aktiven Zone aus AlGaN zeigen, welchen Beitrag die LEE an der sinkenden EQE hat. Im zweiten Teil wird der Einfluss des Al-Stoffmengenanteils in den AlGaN-Barrieren der AlGaN-Quantentöpfe auf die EQE untersucht. Dabei wird sowohl die Emissionsleistung als auch die optische Polarisation gemessen, um zusammen mit Simulationen zur Ladungsträgerinjektion und Lichtextraktion ein tieferes Verständnis von RRE, CIE und LEE zu erlangen. Im fünften Kapitel soll die Steigerung der EQE von UVC-LEDs durch Implementierung einer UV-transparenten p-Seite untersucht werden. Dazu wird der Al-Stoffmengenanteil in der *p*-AlGaN-Seite schrittweise erhöht, um so den Einfluss von Absorption und Ladungsträgertransport zu ermitteln. Durch die Verwendung von *p*-Kontaktmetallisierungen mit verschiedenen Reflexionsvermögen und deren Einfluss auf die EQE der LED kann das Simulationsmodell der Lichtextraktion validiert werden. Dies ermöglicht präzisere Rückschlüsse auf die IQE dieser LEDs. Im letzten Kapitel werden die Emissionseigenschaften von vereinzelten und aufgebauten UVB-LEDs untersucht. Hier soll im ersten Teil mithilfe von Fernfeldmessungen an einzelnen LED-Chips und dem Vergleich mit simulierten Fernfeldern ein Lichtextraktionsmodell für UVB-LED-Chips gefunden werden. Beispielhaft wird die aus diesem Modell generierte Strahendatei zur Entwicklung eines Gehäuses mit gerichteter Abstrahlcharakteristik verwendet, welches im zweiten Teil im Hinblick auf Emissionsleistung und Strahlungsstärke untersucht wird.

1 Grundlagen zu den Simulationsmodellen

Für die Vorhersagen und Diskussionen von experimentellen Ergebnissen sind physikalische Modelle und Simulationen dieser Experimente von entscheidender Bedeutung. Durch sie wird ein tieferer Einblick in die physikalischen Prozesse gewonnen und rückwirkend lassen sich die Modelle durch experimentelle Daten erweitern und optimieren. In diesem Kapitel sollen im ersten Abschnitt die Grundlagen, Modelle und Methoden des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Programms zur Simulation der Lichtextraktion von UV-LEDs vorgestellt werden. Dieses Programm wird später auch durch experimentelle Ergebnisse in den Kapiteln 3.3, 3.4 und 6.1 weiter angepasst. Im zweiten Abschnitt werden dann zwei weitere in dieser Arbeit verwendete Simulationsprogramme vorgestellt. Für die Simulation der Leitungs- und Valenzbandstruktur in der aktiven Zone wird ein von CHRISTOPH REICH, TUB, im Rahmen seiner Doktorarbeit geschriebenes Programm genutzt, welches auf dem von CHUANG und CHANG entwickelten *k-p*-Modell für verspannte Wurtzithalbleiter basiert [31]. Für die Simulation der Ladungsträgerinjektion wird das Programm "*SiLENSe*"¹ genutzt, welches unter anderem auf dem Drift-Diffusions-Modell basiert.

1.1 Simulation der Lichtextraktion: Monte-Carlo-Raytracing

Für die Untersuchung der Lichtextraktion von LEDs gibt es in der Physik zwei grundlegend verschiedene Ansätze, die Wellenoptik und die geometrische Optik. Ersterer verwendet die Maxwell-Gleichungen und wird vor allem bei Strukturgrößen verwendet, die kleiner oder im Bereich der betrachteten Wellenlänge sind. Hierbei wird häufig die Finite-Differenzen-Methode im Zeitbereich (engl. *finite difference time domain*, FDTD) verwendet [32–34]. Die Wellenoptik kann generell auch auf größere Strukturen angewendet werden, jedoch steigt dann die Berechnungszeit. Für Strukturen, deren Dimension weit größer ist als die Wellen-

5

¹ SiLENSe – software tool for light emitting diode (LED) bandgap engineering; Version 5.8 (2015) http://www.str-soft.com/products/SiLENSe/index.htm; STR Group, Inc.



Abbildung 1.1: Definition des *x-y-z*-Koordinatensystems, des Azimutwinkels φ und des Polarwinkels θ für die Raytracing-Simulationen in Relation zur *c*-Kristallachse der Wurtzit-Kristallstruktur (gelb).

länge, wird deshalb auf die geometrische Optik zurückgegriffen. Hierbei wird die sogenannte Strahlverfolgungstechnik, auch Raytracing genannt, verwendet [34, 35]. Einige kommerzielle Programme, die diese Technik verwenden, sind zum Beispiel "Zemax"¹ oder "RATRO"². Während diese kommerziell verfügbaren Simulationsprogramme den Vorteil haben, dass sie sofort zur Simulation von optischen Eigenschaften verwendet werden können, haben sie oft den Nachteil, nicht in allen Punkten in ihrer physikalischen Arbeitsweise offen dargelegt und auch nur schwer modifizierbar zu sein. Aus diesem Grund wurde sich relativ frühzeitig während der Anfertigung dieser Arbeit dafür entschieden, ein eigenes Raytracing-Simulationsprogramm zu entwickeln. Dadurch eröffnete sich die Möglichkeit, beliebig tief verschiedene Bereiche der Simulation individuell anzupassen. An dieser Stelle sei jedoch auch angemerkt, dass sich das Simulationsprogramm dadurch während des gesamten Zeitraums dieser Arbeit in der Weiterentwicklung befand und die Ergebnisse teilweise aus verschiedenen Entwicklungsstadien stammen. Das Raytracing selbst, also die iterative Verfolgung der Strahlen durch die Struktur, wurde dabei mit "Pure Basic"³ programmiert. Die Benutzeroberfläche wurde mit "Wolfram Mathematica"4 erstellt. In den nachfolgenden Abschnitten werden einige physikalisch und mathematisch relevante Elemente der im Rahmen dieser Doktorarbeit geschriebenen Raytracing-Simulation kommentiert, welche die Monte-Carlo-Simulationstechnik verwendet.

Die Simulation findet im dreidimensionalen Raum statt und bedient sich der analytischen Geometrie [36]. Die *c*-Kristallachse wird dabei auf die *z*-Koordinatenachse gelegt, der Polarwinkel $\theta \in [0^{\circ}, 180^{\circ}]$ zeigt für 0° in Richtung z = -1 bzw. für 180° in Richtung z = +1 und der Azimutwinkel $\varphi \in [0^{\circ}, 360^{\circ}]$ befindet sich in der *x*-*y*-Ebene (Abbildung 1.1). Ziel der Simulation ist es, den Weg eines Lichtstrahls von der Quelle (der aktiven Zone) durch die Kristallschichten nach außen zu verfolgen, um so die Lichtextraktionseffizienz sowie andere Informationen wie Fern- und Nahfeld zu erhalten. Alle Medien werden in dieser Simulation mit komplexen Brechungsindizes beschrieben.

¹ Zemax OpicStudio; https://www.zemax.com/products/opticstudio; Zemax Europe, Ltd.

² RATRO – RAy-TRacing SimulatOr of Light Propagation;

http://www.str-soft.com/products/RATRO/index.htm; STR Group, Inc.

³ PureBasic 5.71 LTS (2019); https://www.purebasic.com/; Fantaisie Software

⁴ Wolfram Mathematica 10.0.2.0 (2014); https://www.wolfram.com/mathematica/; Wolfram Research, Inc.

1.1.1 Strahlerzeugung und Abstrahlcharakteristik der aktiven Zone

Für die Erzeugung eines Strahls wird der Ursprungsort \vec{p} , der optische Polarisationstyp – transversal-magnetisch (TM) oder transversal-elektrisch (TE) – $\mathcal{P} \in \{\text{TM}, \text{TE}\}$ und die Emissionsrichtung \vec{v} unter bestimmten Wahrscheinlichkeits-Verteilungsfunktionen zufällig gewählt. Hierbei sei $\mathcal{R}_i \in [0, 1]$ eine für verschiedene *i* unabhängige gleichverteilte reelle Zufallszahl. Für jede Simulation wird die aktive Zone mit dem Ort \vec{p}_{AZ} und der Ausdehnung \vec{l}_{AZ} in positiver Richtung definiert, sodass für den Ursprungsort \vec{p} eines zufälligen Strahls gilt:

$$\vec{p} = \vec{p}_{AZ} + \begin{pmatrix} \mathcal{R}_{\chi} & 0 & 0\\ 0 & \mathcal{R}_{\chi} & 0\\ 0 & 0 & \mathcal{R}_{z} \end{pmatrix} \vec{l}_{AZ}$$
(1.1)

Anhand des für die Simulation definierten Polarisationsgrads *P*, welcher zwischen -1 (TM) und +1 (TE) liegt, wird der Polarisationstyp des Strahls wie folgt gewählt:

$$\mathcal{P} = \begin{cases} \text{TM} & \text{, für } \mathcal{R}_P < \frac{1-P}{3+P} \\ \text{TE} & \text{, für } \mathcal{R}_P \ge \frac{1-P}{3+P} \end{cases}$$
(1.2)

Hierbei sei zu beachten, dass bei einem Polarisationsgrad von P = 0 das in der Ebene emittierte Licht zwar unpolarisiert ist, die emittierte Gesamtintensität von TE-polarisiertem Licht aber doppelt so hoch ist wie die von TM-polarisiertem Licht. Grund dafür sind die verschiedenen Abstrahlungsmuster für TE- bzw. TM-polarisiertes Licht. Diese werden über die Abstrahlung eines Hertzschen Dipols hergeleitet. Im AlGaN-Materialsystem gibt es drei Subvalenzbänder. Das abgespaltene Lochband hat p_z -Orbital-artige Zustände und emittiert daher TM-polarisiertes Licht [37], welches rotationsymmetrisch zur z-Achse ist. Wie das Abstrahlungsmuster in Abbildung 1.2a zeigt, ist die Strahlungsstärke von TM-polarisiertem Licht in der Quantenfilmebene maximal und in Richtung der *c*-Kristallachse null. Die auf das Kugeloberflächenintegral normierte Strahlungsstärke ist definiert als:

$$I_{\rm TM}(\theta) = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta \tag{1.3}$$

Das schwere Lochband und das leichte Lochband haben p_x - und p_y -Orbital-artige Zustände und emittieren daher TE-polarisiertes Licht [37]. Die Überlagerung beider Emissionen ist somit auch rotationssymmetrisch bezüglich der *z*-Achse. Wie das Abstrahlungsmuster in Abbildung 1.2b zeigt, ist die Strahlungsstärke in Richtung der *c*-Kristallachse maximal und auch in der Quantenfilmebene größer als null. Die normierte Strahlungsstärke ist dann definiert als:

$$I_{TE}(\theta) = \frac{3}{16\pi} (1 + \cos^2 \theta)$$
(1.4)



Abbildung 1.2: Schnitt durch das dreidimensionale Abstrahlungsmuster einer Quantenfilmebene, welche (a) nur TM-polarisiertes Licht oder (b) nur TE-polarisiertes Licht emittiert. Die abgestrahlte Gesamtintensität ist auf den Wert 1 normiert.

Aus den Abstrahlungsmustern für rein TE- und rein TM-polarisiertes Licht (Gleichung 1.3 und 1.4) ergeben sich durch Integration je nach Polarisationstyp folgende kumulierte Emissionsverteilungsfunktionen $W_{\mathcal{P}}(\theta) \in [0, 1]$:

$$W_{\mathcal{P}}(\theta) = \int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\vartheta=0}^{\theta} I_{\mathcal{P}}(\vartheta) \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varphi \tag{1.5}$$

$$W_{TM}(\theta) = (2 + \cos\theta)\sin^4\frac{\theta}{2}$$
(1.6)

$$W_{TE}(\theta) = \frac{1}{8} (4 - 3\cos\theta - \cos^3\theta)$$
(1.7)

Durch Auflösen von Gleichung 1.6 und 1.7 nach θ kann dann durch zufällige Wahl eines Funktionswerts für W_{TM} bzw. W_{TE} ein zufälliger Polarwinkel mit entsprechender Wahrscheinlichkeitsverteilung bestimmt werden. Um die Darstellung zu vereinfachen, wird hier für die umgestellte Gleichung die Umkehrfunktion $W_{\mathcal{P}}^{-1}$ geschrieben. Da beide Abstrahlungsmuster rotationssymmetrisch sind, kann der Azimutwinkel φ frei gewählt werden. Es gilt somit für φ , θ und die Emissionsrichung \vec{v} :

$$\varphi = 2\pi \,\mathcal{R}_{\varphi} \tag{1.8}$$

$$\theta = W_{\mathcal{P}}^{-1}(\mathcal{R}_{\theta}) \tag{1.9}$$

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} \cos\varphi\sin\theta\\ \sin\varphi\sin\theta\\ \cos\theta \end{pmatrix}$$
(1.10)

Neben der Emissionsrichtung ist auch die Orientierung des elektrischen Feldvektors (also der optischen Polarisation) von entscheidender Bedeutung. Hierbei sind zwei Bedingungen zu erfüllen: Das elektrische Feld steht immer orthogonal zur Emissionsrichtung. Des Weiteren stehen das magnetische Feld bei TM-polarisiertem Licht und das elektrische Feld bei TE-polarisiertem Licht immer orthogonal zur *z*-Achse. Somit gilt für die Amplitude \vec{E} je nach Polarisationstyp und den beiden Winkeln aus Gleichung 1.8 und 1.9:

$$\vec{E}_{TM} = \begin{pmatrix} -\cos\varphi\cos\theta \\ -\sin\varphi\cos\theta \\ \sin\theta \end{pmatrix}$$
(1.11)

$$\vec{E}_{TE} = \begin{pmatrix} -\sin\varphi\\\cos\varphi\\0 \end{pmatrix} \tag{1.12}$$

Die Intensität eines Strahls ergibt sich dann (vereinfacht) aus dem Betragsquadrat $|\vec{E}|^2$.

1.1.2 Strahlverfolgung durch die Schichten der LED

Innerhalb der Simulation gibt es eine Liste von definierten Oberflächen zwischen den Medien sowie Strahlen, welche sich in dieser Umgebung ausbreiten und mit den Oberflächen interagieren. Die vektorielle Form eines Strahls wird durch eine Geradengleichung mit dem Ursprung \vec{p} , der normierten Richtung \vec{v} und dem skalaren Parameter $d \in \mathbb{R}^+$ beschrieben:

$$\vec{x} = \vec{p} + d\vec{v} \tag{1.13}$$

Die vektorielle Form einer Oberfläche wird durch eine Ebenengleichung mit dem Ursprung \vec{o} , den beiden Spannvektoren \vec{u}_1 und \vec{u}_2 sowie den beiden skalaren Parametern $s_1 \in [0, 1]$ und $s_2 \in [0, 1]$ repräsentiert:

$$\vec{x} = \vec{o} + s_1 \vec{u}_1 + s_2 \vec{u}_2 \tag{1.14}$$

Durch Gleichsetzen von Gleichung 1.13 und 1.14 ergibt sich die Vorschrift (Schnittpunktsbedingung) für die drei skalaren Parameter d, s_1 und s_2 mit dem Vektorskalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$:

$$d = -\frac{\langle (\vec{p} - \vec{o}), \vec{v} \rangle}{\langle \vec{u}_1 \times \vec{u}_2, \vec{v} \rangle}$$
(1.15)

$$s_1 = \frac{\langle \vec{v} \times (\vec{p} - \vec{o}), \vec{u}_2 \rangle}{\langle \vec{u}_1 \times \vec{u}_2, \vec{v} \rangle}$$
(1.16)

$$s_2 = -\frac{\langle \vec{v} \times (\vec{p} - \vec{o}), \vec{u}_1 \rangle}{\langle \vec{u}_1 \times \vec{u}_2, \vec{v} \rangle}$$
(1.17)

Zu einem physikalisch relevanten Schnittpunkt von Strahl und Oberfläche kommt es jedoch nur, wenn die Lösungen für d, s_1 und s_2 innerhalb der jeweiligen Definitionsbereiche liegen (siehe oben). Gibt es mehr als eine Oberfläche, auf der ein Schnittpunkt existiert, ist nur die "zuerst getroffene" Oberfläche (kleinster Wert für d) für die weiteren Schritte von Bedeutung. Im Falle eines Schnittpunkts zwischen einem Strahl und einer Oberfläche kann die Lösung von Gleichung 1.15 direkt als Weglänge d des Strahls vom seinem Ursprung bis zur Oberfläche genutzt werden. Die Absorption im durchdrungenen Medium mit dem komplexen Brechungsindex n wird nach dem Lambert-Beerschen Gesetz bestimmt [38]. Für die Änderung des elektrischen Feldvektors \vec{E} gilt dann:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \cdot \exp\left(-d \cdot \Im(n) \cdot \frac{2\pi}{\lambda_0}\right)$$
(1.18)

Hierbei ist \vec{E}_0 der elektrische Feldvektor im Strahlursprung, $\Im(n)$ der Imaginärteil des komplexen Brechungsindexes und λ_0 die Wellenlänge des Lichts (Strahls) im Vakuum. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass eine mögliche Anisotropie des Brechungsindexes in der Simulation nicht berücksichtigt wird. Auch in der Literatur zu Lichtextraktionssimulationen gibt es keine Hinweise darauf, dass eine Anisotropie der Brechungsindizes berücksichtigt wird [32–34].

Liegt die verbleibende Strahlintensität unter dem in der Simulation festgelegten Grenzwert (z. B. 0,1%) oder wird die maximal Anzahl an Grenzflächeninteraktionen pro Strahl (z. B. 100) überschritten, wird die Verfolgung abgebrochen und die Restintensität als Fehler gewertet. Dies verhindert eine unendlich andauernde Strahlverfolgung bei schwach absorbierenden Medien im Falle von mehrfachen Totalreflexionen. Liegt die verbleibende Strahlintensität über dem in der Simulation festgelegten Grenzwert, wird die Brechung, Reflexion und Transmission des Strahls nach dem Snelliusschen Brechungsgesetz und den Fresnelschen Formeln berechnet [38]. Zu beachten ist hier, dass das Snelliussche Brechungsgesetz nur in nicht oder nur schwach absorbierenden Medien gilt, in denen der komplexe Anteil deutlich kleiner als der reale Anteil ist, und somit ignoriert werden kann. Anderenfalls wird der Brechungswinkel komplex und verliert zudem seine geometrische Anschauung. Um einen realen Winkel θ_2 für die weitere Ausbreitung des Strahls zu erhalten, wird hier der Betrag des Quotienten der Brechungsindizes verwendet [39]:

$$\sin\theta_2 = \left|\frac{n_1}{n_2}\right| \sin\theta_1 \tag{1.19}$$

Dieses geänderte Snelliussche Brechungsgesetz wird jedoch nur für die Beugungsrichtung des Strahls verwendet. Für die Fresnelschen Formeln wird hingegen das unveränderte Snelliussche Brechungsgesetz verwendet, um die korrekten Reflexionskoeffizienten zu erhalten.



Abbildung 1.3: Schematische Darstellung der Lichtbrechung mit der Einfallsrichtung \vec{v}_1 unter dem Winkel θ , der Reflexionsrichtung \vec{v}'_1 und der Transmissionsrichtung \vec{v}_2 unter dem Winkel θ_2 an einer Grenzfläche mit der Flächennormalen \vec{n} zwischen zwei Medien mit den komplexen Brechungsindizes n_1 und n_2 .

Die vektoriellen Gleichungen dieser Gesetze werden im Folgenden kurz aufgezählt. Gegeben sei eine Grenzfläche mit der normierten Flächennormalen \vec{n} zwischen zwei Medien mit den komplexen Brechungsindizes n_1 und n_2 (Abbildung 1.3). Ein einfallender Lichtstrahl mit dem normierten Richtungsvektor \vec{v}_1 wird unter dem Einfallswinkel θ_1 in Richtung \vec{v}'_1 reflektiert und in Richtung \vec{v}_2 unter dem Ausfallswinkel θ_2 gebrochen (transmittiert). Nach der im Anhang A.1 zu findenden Herleitung gilt dann für die Reflexions- und Transmissionsrichtung:

$$\vec{v}_1' = \vec{v}_1 - 2 \langle \vec{v}_1, \vec{n} \rangle \vec{n}$$
 (1.20)

$$\vec{v}_2 = (\vec{v}_1 - \vec{n} \langle \vec{v}_1, \vec{n} \rangle) \left| \frac{n_1}{n_2} \right| + \vec{n} \sqrt{1 - \left| \frac{n_1}{n_2} \right|^2 (1 - \langle \vec{v}_1, \vec{n} \rangle^2)}$$
(1.21)

Hier sei darauf hingewiesen, dass die beiden Vektoren \vec{v}'_1 und \vec{v}_2 nach ihrer Berechnung noch normiert werden müssen. Unter der Bedingung, dass die transmittierte Intensität und die reflektierte Intensität gleich der Einfallsintensität sein müssen, genügt es, die Reflexionskoeffizienten der Fresnelschen Formeln in eine vektorielle Form zu bringen. Nach der im Anhang A.2 zu findenden Herleitung gilt dann für den senkrecht (r_{\perp}) und parallel (r_{\parallel}) polarisierten Reflexionskoeffizienten:

$$r_{\perp} = \frac{\langle \vec{v}_{1}, \vec{n} \rangle - \sqrt{\left(\frac{n_{2}}{n_{1}}\right)^{2} + \langle \vec{v}_{1}, \vec{n} \rangle^{2} - 1}}{\langle \vec{v}_{1}, \vec{n} \rangle + \sqrt{\left(\frac{n_{2}}{n_{1}}\right)^{2} + \langle \vec{v}_{1}, \vec{n} \rangle^{2} - 1}}$$
(1.22)

$$r_{\parallel} = \frac{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2 \langle \vec{v}_1, \vec{n} \rangle - \sqrt{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2 + \langle \vec{v}_1, \vec{n} \rangle^2 - 1}}{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2 \langle \vec{v}_1, \vec{n} \rangle + \sqrt{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2 + \langle \vec{v}_1, \vec{n} \rangle^2 - 1}}$$
(1.23)

Schlussendlich können nun aus den Richtungsvektoren \vec{v}_1' und \vec{v}_2 (Gleichung 1.20 und 1.21), den Reflexionsgraden $R_{\perp} = r_{\perp}r_{\perp}^*$ und $R_{\parallel} = r_{\parallel}r_{\parallel}^*$ sowie den Transmissionsgraden $T_{\perp} = 1 - R_{\perp}$ und $T_{\parallel} = 1 - R_{\parallel}$ die neuen Amplituden \vec{E}_r und \vec{E}_t des reflektierten und transmittierten Strahls berechnet werden (Herleitung im Anhang A.3). Dabei ist \vec{E} die Amplitude des einfallenden Strahls aus Gleichung 1.18 und $\vec{n}_i = \vec{v}_1 \times \vec{n}$ der Normalenvektor der Einfallsebene:

$$\vec{E}_{r} = \sqrt{R_{\perp}} \langle \vec{E}, \vec{n}_{i} \rangle \cdot \vec{n}_{i} + \sqrt{R_{\parallel}} \langle \vec{E}, \vec{v}_{1} \times \vec{n}_{i} \rangle \cdot (\vec{v}_{1}' \times \vec{n}_{i})$$
(1.24)

$$\vec{E}_t = \sqrt{T_\perp} \langle \vec{E}, \vec{n}_i \rangle \cdot \vec{n}_i + \sqrt{T_\parallel} \langle \vec{E}, \vec{v}_1 \times \vec{n}_i \rangle \cdot (\vec{v}_2 \times \vec{n}_i)$$
(1.25)

1.1.3 Implementierung von rauen Oberflächen

Im Allgemeinen sind alle Grenz- und Oberflächen innerhalb des Simulationsprogramms eindeutig durch eine Ebene und ihren Normalenvektor definiert und somit optisch glatt. Für eine realistische Simulation von LEDs mit teilweise rauen Grenz- und Oberflächen ist dieser idealisierte Fall jedoch ungenügend, wie sich in Kapitel 3 und Kapitel 6 zeigen wird. Zur Simulation rauer Grenzflächen könnte die gesamte Grenzfläche in unzählige Facettenfragmente zerlegt werden. Dazu müsste jedoch die gesamte Oberflächenstruktur bekannt sein und zudem würde es die Simulationszeit maßgeblich erhöhen. Das Simulationsprogramm enthält daher die Möglichkeit, sogenannte pseudo-raue Grenzflächen zu definieren. Trifft ein Stahl auf eine dieser Flächen, wird der eigentliche Normalenvektor (der die Ebene definiert) zufällig in eine beliebige Richtung geneigt. Dadurch ändert sich (einmalig) die Reflexions- und Transmissionsrichtung aus Gleichung 1.20 und 1.21 sowie die daraus resultierenden Amplituden für Transmission und Reflexion (Gleichung 1.24 und 1.25). Für weitere Strahlen wird der Normalenvektor erneut zufällig geneigt. Um diese zufällige Neigung zu kontrollieren, werden Histogramme der Oberflächenneigungswinkel verwendet, wie später anhand von zwei Beispielen gezeigt wird. Hierbei wird die Häufigkeit $h(\theta)$ von lokalen Oberflächenwinkeln θ ermittelt, wobei $\theta \in [0, 90^\circ]$ ist und das Integral von *h* über alle Winkel genau 1 ist. Durch Integration von h und Bilden der Umkehrfunktion, können dann zufällige Neigungswinkel θ erzeugt werden, die gerade der Verteilung von *h* entsprechen:

$$H(\theta) = \int_{0}^{\theta} h(\vartheta) \, d\vartheta \tag{1.26}$$

$$\theta = H^{-1}(\mathcal{R}_{\theta}) \tag{1.27}$$

$$\varphi = 2\pi \,\mathcal{R}_{\varphi} \tag{1.28}$$

Die Richtung der Neigung (der Azimutwinkel φ) ist dabei zufällig. Für den temporären Normalenvektor \vec{n}' der rauen Oberfläche gilt dann:

$$\vec{n}' = \vec{M}(\varphi, \theta) \,\vec{n} \tag{1.29}$$

Hierbei ist \vec{M} eine Rotationsmatrix, deren Einträge im Anhang A.4 zu finden sind.



(c) Simulierte Fernfelder für Reflexion und Transmission

Abbildung 1.4: Vergleich zwischen der Simulation einer realen Grenzfläche und einer pseudo-rauen Grenzfläche anhand von zwei Oberflächentypen (Typ I und Typ II). (a) Perspektivenansicht der Oberflächenmorphologie. (b) Die aus den Oberflächen resultierenden Histogramme der Oberflächenneigungswinkel. (c) Vergleich des Transmissions- und Reflexionsfernfelds der jeweiligen Simulationsmethoden.

Um einen Eindruck dieses Rauheitsmodells, dessen Stärken und Limitierungen zu bekommen, wird in Abbildung 1.4 anhand von zwei Oberflächentypen (Typ I und Typ II) ein Vergleich zwischen der realen Grenzfläche, bei der die Morphologie in der Simulation wirklich existiert, und der pseudo-rauen Grenzfläche gezeigt. Typ I ist eine gaußverteilte Variation der Oberflächenhöhe und Typ II eine zufällig generierte Oberfläche mit steilen Oberflächenfacetten. Abbildung 1.4a zeigt die Perspektivenansicht der jeweiligen Oberflächenmorphologie. Das Histogramm der Oberflächenneigungswinkel (Abbildung 1.4b) wird aus der Verteilung der lokalen Steigungen erzeugt. Beim Vergleich beider Histogramme fällt auf, dass Typ I eine maximale Häufigkeit bei 15° hat und die Häufigkeit dann exponentiell zu höheren Winkeln abnimmt. Typ II zeigt stattdessen ein sehr breites Maximum der Häufigkeit zwischen 40° und 60°, welches vor allem durch die relativ großen geneigten Facetten entsteht. Für den Vergleich von Reflexion und Transmission wird eine Saphir/Luft-Grenzfläche des Typs I oder Typs II erzeugt, welche aus dem Saphir mit senkrecht einfallendem Licht bestrahlt wird. Das Transmissions- und Reflexionsfernfeld für die real-raue Grenzfläche und die pseudo-raue Grenzfläche ist in Abbildung 1.4c dargestellt. Bei der wenig zerklüfteten Grenzfläche (Typ I) gibt es eine hohe Übereinstimmung zwischen beiden Simulationsmethoden. Sowohl das breite Maximum zwischen -15° und 15° im Transmissionsfernfeld als auch die Ausbildung von zwei schmalen Maxima bei -70° und 70° im Reflexionsfernfeld sind auch bei einer pseudo-rauen Grenzfläche zu erkennen. Das Modell mit pseudo-rauer Grenzfläche kann hier eine real existierende Struktur gut nachbilden. Bei der stark zerklüfteten Grenzfläche (Typ II) stimmen die Fernfelder in der Transmission überein, in der Reflexion hingegen nicht. Hier wird die Limitierung des Modells aufgezeigt. Aufgrund der sehr steilen Facetten kann es zu mehrfachen Totalreflexionen zwischen mehreren Facetten kommen, ähnlich wie bei Rückstrahlern ("Katzenaugenreflektoren"). Da es im pseudo-rauen Modell keine eigentliche Höhe mehr gibt, gibt es für flach reflektierte Strahlen keinen weiteren Kontakt. Das führt im Reflexionsfernfeld einer pseudo-rauen Grenzfläche zu hohen Intensitäten um ±80°. Bei einer realen Grenzfläche trifft ein flach reflektierter Strahl hingegen mit hoher Wahrscheinlichkeit eine weitere Facette, von der er wieder in eine andere Richtung totalreflektiert wird. Das führt im Reflexionsfernfeld der real-rauen Grenzfläche zu geringeren Intensitäten bei Winkeln um ±80° und zu höheren Intensitäten um 0°. Wie es sich später in Kapitel 3.3 zeigen wird, ist zum Beispiel die Saphirrückseite von LED-Chips ähnlich zu Typ I und kann damit sehr gut vom Modell erfasst werden.

1.1.4 Bestimmung der Lichtextraktionseffizienz, des Nah- und Fernfelds

Im einfachsten Fall werden alle Strahlen, die mit keiner weiteren Grenzfläche mehr kollidieren, als frei angesehen und somit ihre (Rest-)Intensität zur extrahierten Intensität addiert. Die Lichtextraktionseffizienz (LEE), die so simuliert werden kann, ist dann das Verhältnis aus der extrahierten Intensität und der in der aktiven Zone erzeugten Intensität. Diese so bestimmte LEE eignet sich jedoch nicht für den Vergleich von Messungen der Emissionsleistung, welche mit einer realen Photodiode durchgeführt wurden. Diese Photodiode hat einen definierten Durchmesser und eine bestimmte Entfernung zur LED (Vergleich Kapitel 2.1.1), wodurch nur ein Bruchteil der extrahierten Strahlen detektiert werden kann. Im Simulationsprogramm kann eine solche Photodiode definiert werden. Die sogenannte Detektor-LEE enthält dann nur die Strahlen, die auch mit der virtuellen Photodiode einen Schnittpunkt besitzen. Neben der LEE ist ebenso das Nah- und Fernfeld von entscheidender Bedeutung, wenn es um die Charakterisierung von LED-Chips geht¹. Alle extrahierten Strahlen sind eindeutig durch einen Ort und eine Richtung definiert. Daraus können sogenannte Strahlendateien (engl. *ray files*) generiert werden, die zum Beispiel in anderen Simulationsprogrammen wie *"Zemax"* als Strahlenquelle dienen können. Außerdem lässt sich aus ihnen das Nah- und Fernfeld berechnen. Für das Nahfeld wird ein Histogramm über alle Orte, an denen Strahlen austreten, mit einer gewissen örtlichen Auflösung erstellt. Für das Fernfeld wird ein Histogramm über alle Raumwinkel, in die die Strahlen zeigen, mit einer gewissen räumlichen Winkelauflösung erstellt. Durch die Monte-Carlo-Simulationsmethode ist es unvermeidlich, dass die statistische Verteilung der Strahlen bei einer unzureichend großen Strahlenanzahl zu einer hohen Varianz der Intensität benachbarter Orte (Nahfeld) bzw. Winkel (Fernfeld) führt. Je feiner die Orts- bzw. Winkelauflösung gewählt wird, desto höher ist die Varianz in den Daten, welche dann nur mit einer Erhöhung der Gesamtstrahlen, die simuliert werden, kompensiert werden kann. Üblicherweise werden in dieser Arbeit eine Ortsauflösung von 10 µm und eine Winkelauflösung von 1° bis 6° verwendet.

1.2 Simulation der Bandstruktur und Ladungsträgerinjektion

1.2.1 Berechnung der Valenzbandstruktur mittels *k*·*p*-Theorie

Zur Bestimmung der optischen Polarisation der Quantentopfemission ist es von entscheidender Bedeutung, die genaue energetische Position des Leistungsbands und der verschiedenen Valenzbänder sowie die Oszillatorstärken der Band-zu-Band-Übergänge zu kennen. Bei InN, GaN und AlN in der Wurtzitkristallstruktur liegt eine direkte Bandlücke am Γ -Punkt, zwischen dem Leitungsband und dem Valenzband, vor. Letzteres spaltet sich aufgrund des Kristallfelds und der Spin-Bahn-Wechselwirkung in die Subvalenzbänder Γ_9 , Γ_{7+} und Γ_{7-} auf [40]. Das Simulationsprogramm von REICH verwendet zur Berechnung der Valenzbandenergien und Oszillatorstärken den Hamiltonian nach CHUANG und CHANG [31] in Form einer (6 × 6)-Matrix mit Einträgen für die drei Valenzbänder mit je zwei Spin-Zuständen:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} F + V & -K^* & -H^* & 0 & 0 & 0 \\ -K & G + V & H & 0 & 0 & \sqrt{2} \Delta_3 \\ -H & H^* & \lambda + V & 0 & \sqrt{2} \Delta_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & F + V & -K & H \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \Delta_3 & -K^* & G + V & -H^* \\ 0 & \sqrt{2} \Delta_3 & 0 & H^* & -H & \lambda + V \end{pmatrix} \begin{vmatrix} u_1 \rangle \\ |u_2 \rangle \\ |u_3 \rangle \\ |u_4 \rangle \\ |u_5 \rangle \\ |u_6 \rangle \end{cases}$$
(1.30)

¹ Im Rahmen der Raytracing-Simulation ist das Nahfeld die Verteilung der Strahlungsflussdichte auf den LED-Chip-Oberflächen. Das Fernfeld entspricht der radialen Verteilung der Strahlungsstärke im Unendlichen.

Gegenüber Referenz [31] wird in Gleichung 1.30 noch explizit das Potential *V* auf der Diagonalen addiert. Für *V* = 0 repräsentieren die Eigenwerte und Eigenvektoren die relative Position der jeweiligen Bänder und deren Oszillatorstärken [41]. Die Basis ist hier definiert als gemischte Zustände $|u_1\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}}|(X + iY)_{\uparrow}\rangle$, $|u_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|(X - iY)_{\uparrow}\rangle$, $|u_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|(X - iY)_{\downarrow}\rangle$ und $|u_5\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}}|(X + iY)_{\downarrow}\rangle$ mit TE-polarisierten Übergängen und $|u_1\rangle = |Z_{\uparrow}\rangle$ und $|u_1\rangle = |Z_{\downarrow}\rangle$ mit TM-polarisierten Übergängen. Die Einträge dieser Matrix sind wie folgt definiert [31]:

$$F = \Delta_1 + \Delta_2 + \lambda + \theta \tag{1.31}$$

$$G = \Delta_1 - \Delta_2 + \lambda + \theta \tag{1.32}$$

$$\lambda = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[A_1 k_z^2 + A_2 \left(k_x^2 + k_y^2 \right) \right] + D_1 \epsilon_{zz} + D_2 \left(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} \right)$$
(1.33)

$$\theta = \frac{\hbar^2}{2 m_0} \left[A_3 k_z^2 + A_4 \left(k_x^2 + k_y^2 \right) \right] + D_3 \epsilon_{zz} + D_4 \left(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} \right)$$
(1.34)

$$K = \frac{\hbar^2}{2 m_0} A_5 (k_x + i k_y) + D_5 (\epsilon_{xx} + 2i \epsilon_{xy} - \epsilon_{yy})$$
(1.35)

$$H = \frac{\hbar^2}{2 m_0} A_6 k_z (k_x + i k_y) + D_6 (\epsilon_{zx} + i \epsilon_{yz})$$
(1.36)

Hierbei sind $A_{1...6}$ die Parameter für die effektiven Massen, $D_{1...6}$ die Deformationspotentiale, ϵ_{ij} die Einträge des Verspannungstensors, k_i die Einträge des reziproken Gittervektors, m_0 die freie Elektronenmasse und \hbar das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum. Die Parametersätze für GaN und AlN sind aus Referenz [42] zu entnehmen. Durch lineare Interpolation dieser Parameter kann über Gleichung 1.30 die Valenzbandstruktur jeder AlGaN-Zusammensetzung und in Abhängigkeit der Verspannung für einen beliebigen k-Vektor berechnet werden. Allerdings gilt dies nur für Einzelschichten. Im Falle einer Heterostruktur bzw. eines Quantentopfs kommt es in z-Richtung zu einer Quantisierung, sodass aus k_z der Operator $k_z \equiv -i \frac{\partial}{\partial z}$ wird. Weiter muss auch die Änderung des Potentials V(z), also eine Bandlückenänderung, ionisierte Atomrümpfe oder Polarisationsladungen, in z-Richtung berücksichtigt werden. Zur Bestimmung des Potentials wird die später aufgeführte Poisson-Gleichung verwendet (Gleichung 1.37). Das Simulationsprogramm verwendet die Finite-Differenzen-Methode zur Lösung des Eigenwertproblems [43]. Die Heterostruktur wird dabei in ein feines Gitternetz (engl. mesh) mit N-Gitterpunkten eingeteilt und alle ortsabhängigen Materialparameter aus den Gleichungen 1.31-1.36 werden in Form eines Vektors der Länge N bzw. im Hamiltonian in Form einer $(N \times N)$ -Diagonalmatrix beschrieben, in der jeder Diagonaleintrag dem Parameter des jeweiligen Gitterpunkts entspricht. Der Operator $k_z \equiv -i \frac{\partial}{\partial z}$ wird durch eine diskrete Ableitung in Matrixschreibweise ausgedrückt [43]. Durch das Lösen des Eigenwertproblems des so entstehenden ($6N \times 6N$)-Hamiltonians können so (6N)-Eigenwerte (Zustandsenergien) und -Eigenvektoren (Wellenfunktionen) bestimmt werden. Ein Eigenvektor enthält dabei die sechs Wellenfunktionen (als Vektoren der Länge N), deren Betragsquadrat die jeweilige Oszillatorstärke repräsentiert. Durch Bilden der Überlappungsintegrale der Elektron- und Lochwellenfunktionen, Berechnen der Interband-Matrix-Elementen und Besetzung der verschiedenen Zustände nach der Boltzmann-Verteilung kann so der Anteil an TE- und TM-polarisierten Übergängen und somit nach Gleichung 2.1 in Kapitel 2.1.2 der optische Polarisationsgrad bestimmt werden [44].

1.2.2 Bestimmung des Potentials und der Ladungsträgerverteilung

Zur Bestimmung des Potentials *V* einer Heterostruktur wird sowohl im Programm von REICH als auch in *"SiLENSe"* die Poisson-Gleichung gelöst [45]:

$$\partial_x (P - \varepsilon \,\partial_x V) = q_e \,(p - n + N_{\rm D}^+ - N_{\rm A}^-) \tag{1.37}$$

Hierbei ist *P* die elektrische Polarisation (spontane und piezoelektrische), ε die Permitivität, *p* und *n* sind die Ladungsträgerdichten von Löchern und Elektronen, N_D^+ und N_A^- die ionisierten Donatoren und Akzeptoren und q_e die Elementarladung. Die Dichte der ionisierten Störstellen wird in Abhängigkeit der Temperatur *T*, der Quasi-Fermi-Niveaus F_n und F_p für Elektronen und Löcher, der Leitungs- (E_L) und Valenzbandkante E_V sowie den Ionisationsenergien ΔE_D und ΔE_A , den Dotierungsdichten N_D und N_A und den Entartungsfaktoren g_D und g_A für Donatoren und Akzeptoren über die Botzmann-Verteilung bestimmt [45]:

$$N_{\rm D}^{+} = \frac{N_{\rm D}}{1 + g_{\rm D} \exp\left(\frac{F_n - E_{\rm L} + \Delta E_{\rm D} + qV}{k_{\rm B}T}\right)}$$
(1.38)

$$N_{\rm A}^{-} = \frac{N_{\rm A}}{1 + g_{\rm A} \exp\left(\frac{E_{\rm V} - F_p + \Delta E_{\rm A} - qV}{k_{\rm B}T}\right)}$$
(1.39)

Für die Entartungsfaktoren wird $g_D = 2$ (Donatoren) und $g_A = 4$ (Akzeptoren) verwendet [45]. Die Ladungsträgerdichten n und p für Elektronen und Löcher werden über das Fermi-Dirac-Integral $F_{\frac{1}{2}}(\xi) = \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{1 + \exp(x - \xi)} dx$ [46] und die effektiven Zustandsdichten des Leistungsbands (N_L) und des Valenzbands (N_V) bestimmt [45]:

$$n = N_{\rm L} \, \mathrm{F}_{\frac{1}{2}} \left(\frac{F_n - E_{\rm L} + qV}{k_{\rm B}T} \right) \tag{1.40}$$

$$p = N_{\rm V} \, {\rm F}_{\frac{1}{2}} \left(\frac{E_{\rm V} - F_p - qV}{k_{\rm B}T} \right) \tag{1.41}$$

Die effektive Zustandsdichte des Leitungsbandes ergibt sich aus dem geometrischen Mittel der transversalen (m_a^*) und longitudinalen (m_c^*) effektiven Elektronenmassen, während sich die effektive Zustandsdichte des Valenzbandes aus den effektiven Lochmassen der drei Subvalenzbänder zusammensetzt.

$$N_{\rm L} = 2 \ m_a^* \sqrt{m_c^*} \left(\frac{k_{\rm B}T}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}$$
(1.42)

$$N_{\rm V} = 2 \left(m_a^{\Gamma_9} \sqrt{m_c^{\Gamma_9}} + m_a^{\Gamma_{7+}} \sqrt{m_c^{\Gamma_{7+}}} + m_a^{\Gamma_{7-}} \sqrt{m_c^{\Gamma_{7-}}} \right) \left(\frac{k_{\rm B}T}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$
(1.43)

1.2.3 Berechnung der Drift-Diffusion-Ströme und Rekombinationsraten

Befindet sich das System nicht im thermodynamischen Gleichgewicht, so müssen neben der Poisson-Gleichung auch die beiden Kontinuitätsgleichungen mit den Teilchenstromdichten J_n und J_p für Elektronen und Löcher und der Rekombinationsrate *R* selbstkonsistent gelöst werden [45].

$$0 = \frac{\partial}{\partial z} J_n + R = \frac{\partial}{\partial z} \left(-\frac{\mu_n n}{q_e} \frac{\partial}{\partial z} F_n \right) + R \tag{1.44}$$

$$0 = \frac{\partial}{\partial z} J_p + R = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\mu_p \, p}{q_e} \, \frac{\partial}{\partial z} F_p \right) + R \tag{1.45}$$

Dazu werden in "*SiLENSe*" die Beweglichkeiten μ_n und μ_p sowie die Quasi-Fermi-Niveaus F_n und F_p für Elektronen und Löcher verwendet, während die Ladungsträgerdichten n und p selbst wieder von F_n , F_p und V abhängen. Die Rekombinationsrate ergibt sich aus der Summe der strahlenden Rekombinationsrate R_{rad} und den nicht-strahlenden Rekombinationsraten für Shockley-Read-Hall- (R_{SRH}) und Auger- (R_{Auger}) Rekombinationen mit den jeweiligen Rekombinationskonstanten B, A_n , A_p , C_n und C_p [45]:

$$R = R_{\rm rad} + R_{\rm SRH} + R_{\rm Auger} \tag{1.46}$$

$$R_{\rm rad} = B \ n \ p \cdot \left(1 - \exp\left(\frac{F_p - F_n}{k_{\rm B}T}\right)\right) \tag{1.47}$$

$$R_{\text{SRH}} = \left(\frac{1}{A_n n} + \frac{1}{A_p p}\right)^{-1} \cdot \left(1 - \exp\left(\frac{F_p - F_n}{k_B T}\right)\right)$$
(1.48)

$$R_{\text{Auger}} = \left(C_n \, n + C_p \, p\right) n \, p \cdot \left(1 - \exp\left(\frac{F_p - F_n}{k_{\text{B}}T}\right)\right) \tag{1.49}$$

Es sei hier anzumerken, dass "SiLENSe" die Ladungsträgerdichten n und p für die Kontinuitätsgleichungen (1.44 und 1.45) und die Rekombinationsraten (1.47 bis 1.49) nicht quantenmechanisch berechnet, sondern klassisch über Gleichung 1.40 und 1.41. Um quantenmechanische Effekte wie Ladungsträgereinschluss, den "quantum-confined Stark effect" (QCSE) [47] oder Tunneln von Ladungsträgern trotzdem in vereinfachter Weise zu berücksichtigen (semi-klassisch), wird der Leitungs- und Valenzbandverlauf mit einer Gaußfunktion gefaltet und somit unscharf gemacht [48]. Die Koeffizienten A_n und A_p werden über das Modell von KARPOV et al. [49] unter Verwendung der Versetzungsdichten berechnet. Für UVC-LEDs dieser Arbeit, welche auf einer epitaktisch lateral überwachsenen (ELO) AlN-Basisschicht auf einem Saphir-Substrat – kurz ELO-AlN/Saphir-Template – hergestellt werden, liegt die Versetzungsdichte typischerweise bei etwa $1 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ bis $2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ [50, 51]. Diese ergibt laut den Simulationen bei Raumtemperatur einen Wert in der Größenordnung von 10^9 s^{-1} für A_n bzw. 10^8 s^{-1} für A_n . Der Koeffizient *B* ist proportional zu $T^{-\frac{3}{2}}$ und bei Raumtemperatur wird ein Wert von $B = 2 \cdot 10^{-11}$ cm³ s⁻¹ verwendet [52]. Ausgehend von einem aktuellen Literaturwert für den (Gesamt-)Augerkoeffizienten von AlGaN-Quantentöpfen mit $C = 2,3 \cdot 10^{-30}$ cm⁶ s⁻¹ [53] werden die Koeffizienten C_n und C_p in den hier verwendeten Simulationen beide auf 10^{-30} cm⁶ s⁻¹ gesetzt.

1.3 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird ein selbstgeschriebenes Raytracing-Simulationsprogramm zur Bestimmung der Lichtextraktionseffizienz und der Fern- und Nahfelder sowie das eindimensionale (6×6)- $k \cdot p$ -Modell und Drift-Diffusions-Modell zur Simulation der Bandstruktur, Ladungsträgerströme und -rekombinationen genutzt. Die Raytracing-Simulation rechnet im dreidimensionalen Raum und berücksichtigt den komplexen Brechungsindex der Materialien und die optische Polarisation des Lichts bei der Brechung, Absorption, Reflexion und Transmission. Außerdem werden das polarisationsabhängige Abstrahlungsmuster der aktiven Zone und die Lichtinteraktionen mit nicht-glatten Grenzflächen mithilfe eines Rauheitsmodells berücksichtigt. Die $k \cdot p$ -Simulationen errechnen die Elektronen- und Löcherzustände der aktiven Zone und den optischen Polarisationsgrad der erzeugten Photonen unter Berücksichtigung der interpolierten Materialparameter und Verzerrung der AlGaN-Heterostruktur. Die Drift-Diffusions-Simulationen ermitteln die Ladungsträgerströme und Rekombinationsprozesse in der Heterostruktur unter Berücksichtigung der semi-klassisch bestimmten Ladungsträgerdichten, ionisierten Störstellen und der Versetzungsdichte.

2 Experimentelle Methoden

In diesem Kapitel werden einige wichtige Messmethoden sowie zum Teil selbst geplante und aufgebaute Messplätze vorgestellt. Hierbei soll unter anderem auf das Auflösungsvermögen bestimmter Messgrößen eingegangen sowie mögliche Fehlerquellen aufgezeigt werden, die das Messergebnis beeinflussen können.

2.1 Elektrolumineszenzspektroskopie an UV-LEDs

Eine der Hauptcharakterisierungsmethoden, die in dieser Arbeit verwendet werden, ist die Elektrolumineszenzspektroskopie (EL). Dabei werden Ladungsträger über eine Spannungsquelle oder Pulsgenerator in die LED injiziert, welche in der aktiven Zone dann strahlend oder nicht-strahlend rekombinieren. Das emittierte Licht wird dann mit einem Kompaktspektrometer und/oder einer Photodiode detektiert. Mit diesem Grundprinzip können nun an verschiedenen Messplätzen weitere Informationen zum emittierten Licht gewonnen werden, welche im Folgenden vorgestellt werden.

2.1.1 Messung des Spektrums und der Emissionsleistung

Alle in dieser Arbeit gezeigten Emissionsspektren und -leistungen werden (wenn nicht anders angegeben) am sogenannten "Standard"-EL-Aufbau im Dauerstrich-Betrieb (engl. *continuous wave*, CW) und bei Raumtemperatur gemessen (Abbildung 2.1a). Dieser Messplatz besteht aus einem Probentisch mit einem Loch für eine Glasfaser und eine Photodiode sowie zwei Mikropositionierern mit Nadeln zum Kontaktieren der LEDs auf dem Wafer. Dieser liegt auf einem UV-transparenten Quarz-Objektträger. Die Glasfaser ist mit einem Kompaktspektrometer verbunden, welches sowohl radiometrisch als auch gegenüber der Wellenlänge kalibriert ist. Dies ermöglicht die Aufnahme von Spektren, welche die (relative) Emissionsleistung gegenüber der Wellenlänge zeigen. Die Sensitivität der Photodiode ist ebenfalls radiometrisch kalibriert, sodass über den gemessenen Photostrom und der Emissionswellenlänge die Emissionsleistung bestimmt werden kann. Die aktive Zone der Photodiode hat einen Durchmesser von 11,3 mm (eine Fläche von 1 cm²) und einen Abstand von



Abbildung 2.1: (a) Schematische Darstellung des Standard-EL-Messplatzes mit den Mikropositionierern, den Nadeln, dem Objektträger mit Wafer sowie der Photodiode und der Glasfaser. (b) Foto vom inneren der Ulbricht-Kugel mit dem Probenhalter in der Mitte unten, dem Detektor und der Weißlichtquelle. (Bild der Ulbricht-Kugel aus Referenz [54])

3 mm zum Wafer. Somit wird die Emissionsleistung der LED nur bis zu einem Abstrahlwinkel von 62° zur Wafer-Normalen detektiert und entspricht somit nicht der Gesamtleistung der LED. Da die LED gegenüber der Photodiodengröße jedoch als Punktquelle gesehen werden kann und sich das Fernfeld der LEDs auf Wafer-Ebene kaum unterscheidet, kann diese gemessene Leistung trotzdem als Vergleich der Emissionsleistungen zwischen verschiedenen Wafern genutzt werden.

Für aufgebaute LED-Chips ist dies aufgrund der Emission aus den Chipseitenflächen (wie es in Kapitel 6.1 gezeigt wird) nicht mehr gegeben. Um die Gesamtemissionsleistung einer LED zu messen, muss diese in einer sogenannten Ulbricht-Kugel gemessen werden (Abbildung 2.1b)¹. In dieser Ulbricht-Kugel befindet sich die zu messende LED innerhalb einer Hohlkugel mit einer hochreflektierenden und diffus streuenden Innenwand aus BaSO₄. Das emittierte Licht wird so mehrfach in der Kugel reflektiert bis es schließlich in den Detektor fällt bzw. vom Probenhalter absorbiert wird. Der Detektor ist hierbei ein radiometrisch kalibriertes Spektrometer. Um die Absorption am Probenhalter zu berücksichtigen, wird das Reflexionsvermögen des Ulbricht-Kugel-Innenraums vor einer Messung mithilfe einer kalibrierten Weißlichtquelle, welche in die Kugel strahlt, kalibriert. Trotz dieser Kalibrierung muss bei dieser Messmethode mit einem Fehler von bis zu 10 % gerechnet werden. Dies ist vor allem durch Abschattungseffekte nahe der LED durch den Halter und die Kabel gegeben.

¹ Die Ulbricht-Kugel befindet sich am Ferdinand-Braun-Institut (FBH), Leibniz-Institut für Höchstfrequenztechnik, Berlin.



Abbildung 2.2: Schematische Abbildung des Aufbaus zur Messung der optischen Polarisation aus der gespaltenen Mesa-Kante einer LED mithilfe eines Glan-Taylor-Polarisators. Zur Abschattung von Streulicht werden eine Rasierklinge und eine Blende verwendet.

2.1.2 Messung der optischen Polarisation aus der Mesa-Kante

Zur Bestimmung der optischen Polarisation des von der aktiven Zone emittierten Lichts kann das Licht, welches durch das Substrat ausgekoppelt wird, nicht genutzt werden. Während TE-polarisiertes Licht in alle Raumrichtungen emittiert wird (Gleichung 1.4), hat die Emission von TM-polarisiertem Licht eine verschwindende Intensität in Richtung des Substrats (Gleichung 1.3). Eine Möglichkeit ist daher, das Licht, welches in die Waferebene $(\theta = 90^{\circ})$ emittiert wird, zur Bestimmung der optischen Polarisation zu benutzen [55]. Abbildung 2.2 zeigt den schematischen Aufbau zur Bestimmung der optischen Polarisation dieser Emission. Die zu analysierende LED wird durch den p-Kontakt gespalten, um so Zugang zur Emission aus der Mesa-Kante der aktiven Zone zu erhalten. Bei ELO-AlN/Saphir-Templates ist die Spaltrichtung immer senkrecht zu den Strukturierungsstreifen. Voruntersuchungen zeigten, dass der so bestimmte Polarisationsgrad reproduzierbarer ist, als wenn die Spaltrichtung parallel zu diesen Streifen erfolgt. Das emittierte Licht wird aus dem Fokus der ersten Linse und innerhalb eines Raumwinkels von 10° gesammelt und in einen parallelen Strahlengang überführt. Zur Abschattung von Streulicht aus dem Substrat wird dicht an der LED eine Rasierklinge in Höhe der Heterostrukturschichten mithilfe einer Mikrometerschraube positioniert. Nach dem Durchgang durch eine Blende, zur weiteren Reduzierung von Streulicht, wird das Licht über ein Glan-Taylor-Polarisator linear polarisiert und in der richtigen Stellung (Rotation um die optische Achse) so nur das TE- oder nur das TM-polarisierte Licht transmittiert. Über eine weitere Linse wird das Licht dann in eine Glasfaser fokussiert und mit einem Kompaktspektrometer analysiert. In je zwei Stellungen des Polarisators kann das Spektrum von TE- (bei 0° und 180°) bzw. TM- (bei 90° und 270°) polarisiertem Licht gemessen werden. Die Intensität des TE-polarisierten Lichts (I_{TE}) und die Intensität des TM-polarisierten Lichts (I_{TM}) wird aus den Integralen beider jeweiligen Spektren errechnet. Der optische Polarisationsgrad (engl. degree of polarization, DoP) wird aus den Intensitäten über Gleichung 2.1 bestimmt:

$$DoP = \frac{I_{\rm TE} - I_{\rm TM}}{I_{\rm TE} + I_{\rm TM}}$$
(2.1)



Abbildung 2.3: (a) Schematische Darstellung des Fernfeldmessplatzes mit einem Probenhalter für LEDs auf einer Leiterplatte (PCB), den beiden Rotationsarmen für den Azimutwinkel φ und Polarwinkel θ sowie der Photodiode im Abstand *r* zur LED. Der *xyz*-Tisch, an dem der Probenhalter befestigt ist, wird hier nicht gezeigt. (b) Foto des Fernfeldmessplatzes mit einem Probenhalter für LEDs auf einem Wafer, zwei Mikropositionierern mit Kontaktiernadeln auf dem *xyz*-Tisch sowie den beiden Rotations-Schrittmotoren. (Foto aus Referenz [54]).

In dieser Definition hat eine aktive Zone, welche rein TM-polarisiertes Licht abstrahlt, einen DoP von -1 und eine aktive Zone, welche rein TE-polarisiertes Licht abstrahlt, einen DoP von +1. Aufgrund der unterschiedlichen Abstrahlungscharakteristiken von TE- und TM-polarisiertem Licht (Vergleich Kapitel 1.1.1), entspricht das Verhältnis zwischen emittiertem TE- und TM-polarisierten Licht nicht dem Verhältnis zwischen den in der Ebene gemessenen Intensitäten von TE- und TM-polarisiertem Licht. Wird gleich viel TE- und TM-polarisiertes Licht emittiert, ist der DoP $-\frac{1}{3}$. Bei einem DoP von 0 wird doppelt so viel TE-wie TM-polarisiertes Licht emittiert. Dieser Zusammenhang wird auch in den Lichtextraktions- und Bandstruktursimulationen beachtet.

2.1.3 Fernfeldmessung und Bestimmung der Strahlungsstärke

Für die Charakterisierung der Fernfelder von LEDs wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Messplatz geplant und aufgebaut. Zu den Planungskriterien zählte unter anderem, dass mit dem Messplatz sowohl ¼ 2-Zoll-Wafer als auch aufgebaute LED-Chips vermessen werden können. Außerdem sollte die Möglichkeit bestehen, eine komplette Halbkugel des Fernfelds aufnehmen zu können. Daher wurden ein zweiachsiger Rotationsdetektor und ein davon unabhängig bewegbarer dreiachsiger Probenhalter ausgewählt. Abbildung 2.3a zeigt die schematische Darstellung des Fernfeldmessplatzes mit einem Probenhalter für aufgebaute LED-Chips auf einer Leiterplatte (engl. *printed circuit board*, PCB). Der Probenhalter ist an einem *xyz*-Tisch befestigt, sodass die Möglichkeit besteht, die LED in das Rotationszentrum

des Detektors zu bewegen. Die Photodiode kann über zwei Rotationsarme für den Azimutwinkel φ und den Polarwinkel θ an beliebige Stellen der Vollkugel des Fernfelds mittels Schrittmotoren bewegt werden. Alternativ kann ein Probenhalter für ¼ 2-Zoll-Wafer verwendet werden, wie es in Abbildung 2.3b gezeigt wird. Im oberen Teil des Bildes sind zwei Mikropositionierer mit Kontaktiernadeln auf dem *xyz*-Tisch zu sehen. Somit besteht auch hier die Möglichkeit, eine LED auf jeder beliebigen Position des Wafers zu kontaktieren und diese LED mit dem gesamten Probenhalter mithilfe des *xyz*-Tischs in das Rotationszentrum des Detektors zu bewegen. Die Ansteuerung wird über ein dafür geschriebenes LabVIEW-Programm geregelt, welches über verschiedene Messmodi des Fernfelds verfügt. Die aktive Fläche der Photodiode beträgt A = 0,8 mm², was einem Durchmesser von 1 mm entspricht. Die Entfernung zwischen der Photodiode und der LED beträgt r = 37 mm. Daraus ergibt sich eine Winkelauflösung von etwa 1,5°. Über die wellenlängenabhängige Empfindlichkeit (S_λ) der Photodiode kann über Gleichung 2.2 aus dem aufgenommenen Photostrom (I_{Ph}) eine Strahlungsstärke (engl. *radiant intensity*, P_{Ω} [W sr⁻¹], Leistung pro Raumwinkel) bestimmt werden.

$$P_{\Omega} = \frac{I_{\rm Ph} \cdot r^2}{S_{\lambda} \cdot A} \tag{2.2}$$

Eine Genauigkeit der Justierung der LED im Rotationspunkt des Detektors von etwa 0,5 mm führt zu einem Fehler der Strahlungsstärke von etwa ± 5 %. Über das Integral der Strahlungsstärke über alle Raumwinkel kann so auch die Gesamtemissionsleistung einer LED bestimmt werden. Dieser Wert wurde zur Kalibrierung des Aufbaus mit der Emissionsleistung aus Ulbricht-Kugel-Messungen am FBH verglichen und entsprechend die Empfindlichkeit S_{λ} angepasst.

2.2 Messung des Reflexionsgrads von Metallen

Für die Genauigkeit der Lichtextraktionssimulation ist die Kenntnis des Reflexionsvermögens verschiedener Metalle, die bei einer LED als *p*- und *n*-Kontakt verwendet werden, von entscheidender Bedeutung. Hierbei müssen jedoch zwei Punkte beachtet werden: Zum einen ist der Reflexionsgrad des Metalls gegenüber AlGaN mit einem Brechungsindex n > 2je nach Metall deutlich geringer als gegenüber Luft (n = 1). Zum anderen muss eine Methode gefunden werden, genau diesen Reflexionsgrad gegenüber AlGaN oder einem vergleichbaren Material auch zu messen. Aufgrund von komplexen Absorptions- und Reflexionsprozessen kann der Reflexionsgrad des Kontaktmetalls nicht zuverlässig an einer LED-AlGaN-Heterostruktur bestimmt werden. Um dem ersten Punkt trotzdem Genüge zu tun, werden die Metalle auf doppelseitig poliertem Saphir abgeschieden. Saphir hat mit $n \approx 1,8$ [56] im UVB-Spektralbereich einen ausreichend hohen Brechungsindex gegenüber AlN mit $n \approx 2,2$ oder Al_{0,5}Ga_{0,5}N $n \approx 2,5$ [57]. Dadurch ergibt sich eine maximale Abweichung des tatsächlichen Reflexionsgrads zwischen AlGaN und Metall von etwa 7 Prozentpunkten¹. Allerdings können dadurch die an der Reflexion beteiligten Grenzflächen so auf die Luft/Saphir-Grenzfläche (R_{LS}) und die Saphir/Metall-Grenzfläche (R_{SM}) reduziert werden. Die gemessene Reflexion (R) kann so über folgende Gleichung genähert werden:

$$R = R_{\rm LS} + (1 - R_{\rm LS})^2 R_{\rm SM} \cdot \left(1 + R_{\rm LS} R_{\rm SM} + R_{\rm LS}^2 R_{\rm SM}^2 + \cdots\right)$$
(2.3)

Mittels einer Referenzmessung von Saphir ohne Metall ($R_{SM} = R_{LS}$) kann über Gleichung 2.3 aus der gemessenen Reflexion *R* der Reflexionsgrad R_{LS} bestimmt werden und damit im allgemeinen Fall auch R_{SM} für beliebige Metalle.

Die Reflexion *R* kann über zwei verschiedene Messkonfigurationen in einem Spektrometer bestimmt werden²: In der Ulbricht-Kugel und in der sogenannten Freistrahl-Konfiguration, die im Folgenden beide näher erklärt werden. Das Spektrometer hat einen Wellenlängenmessbereich von 185 nm bis 900 nm. In der Ulbricht-Kugel wird die reflektierte Intensität der Probe mit der vollständig diffus reflektierten Intensität der BaSO₄-beschichteten Innenwand verglichen. Während diese Methode auch für Proben mit rauer Oberfläche geeignet ist, kann die Ulbricht-Kugel wegen des abfallenden Reflexionsgrads nur für Wellenlängen > 250 nm verwendet werden. In der Freistrahl-Konfiguration wird die reflektierte Intensität der Probe mit der reflektierten Intensität einer Referenzprobe unter senkrechtem Lichteinfall und -austritt gemessen. Als Referenz wird hierbei eine Saphirscheibe genutzt, da der Brechungsindex von Saphir und damit die Reflexion sehr genau bekannt sind. Diese Methode kann auch für Wellenlängen < 250 nm genutzt werden, verlangt aber glatte bzw. polierte Probenoberflächen. Somit haben beide Methoden Vor- und Nachteile und werden in der Arbeit auch in Kombination verwendet.

¹ Wenn der Reflexionsgrad zu Luft (n = 1) gemessen wird, wäre die maximale Abweichung des tatsächlichen Reflexionsgrads 24 Prozentpunkte.

² Es wird das "Shimadzu UV-2600"-Spektrometer verwendet.
3 Einflussfaktoren der Lichtextraktion von AlGaN-basierten UV-LEDs

LEDs mit einer Emissionswellenlänge im UVB- oder UVC-Spektralbereich bestehen typischerweise aus einer AlGaN-Heterostruktur, welche auf einem Saphir-Substrat abgeschieden wird. Solche LEDs werden üblicherweise mittels der sogenannten Wende-Montage (engl. *flip-chip mounting*) aufgebaut und emittieren das Licht ausschließlich durch die *n*-dotierten AlGaN-Schichten und das Substrat. Auf der p-Seite wird p-GaN als Kontaktschicht verwendet, um geringe Serienwiderstände und ohmsche *p*-Kontakte zu ermöglichen [1, 58]. Die Lichtextraktionseffizienz (LEE) dieser nicht für die Lichtextraktion optimierten LEDs liegt zwischen 7 % und 9 % [59]. Dieser geringe Wert ist auf Totalreflexion an Grenzflächen sowie die Lichtabsorption in den verwendeten Halbleiterschichten (vorwiegend in der p-dotierten Kontaktschicht) und Kontaktmetallen zurückzuführen [60]. In der aktuellen Forschung werden verschiedene Ansätze untersucht, welche die Lichtauskopplung optimieren sollen. Zur Reduktion der Totalreflexionen im Substrat werden Vergussmaterialien verwendet [20, 23, 61]. Strukturierte Grenzflächen tragen ebenfalls dazu bei, die Totalreflexionen innerhalb der LED zu verringern [19, 62]. Durch die Nutzung von UV-transparenten p-Schichten in Kombination mit hochreflektierenden Kontakten kann die LEE auf mehr als 40 % erhöht werden [63]. Auch in dieser Arbeit soll in den Kapiteln 4–6 die LEE von AlGaNbasierten UV-LEDs untersucht und nach Möglichkeit erhöht werden. Zur Bestimmung der LEE mittels Raytracing-Simulation ist jedoch ein detailliertes Modell der im Experiment verwendeten LEDs nötig, welches in diesem Kapitel entwickelt und verifiziert werden soll. Ausgehend von einem einfachen Modell für UV-LEDs werden zunächst die grundlegenden Phänomene der Lichtauskopplung analysiert (Kapitel 3.1). Danach soll das Reflexionsvermögen und ein effektiver Brechungsindex für formierte V/Al/Ni/Au-Kontakte auf AlGaN:Si ermittelt werden, welche typischerweise für LEDs in dieser Arbeit verwendet werden (Kapitel 3.2). Des Weiteren haben die verwendeten LEDs eine raue Saphirrückseite und je nach Emissionswellenlänge Basisschichten mit epitaktisch lateral überwachsenem (engl. epitaxial lateral overgrowth, ELO) AlN auf einem Saphir-Substrat. Daher soll in Kapitel 3.3 ein mathematisches Modell zur Beschreibung und Implementierung rauer Oberflächen sowie in Kapitel 3.4 ein Modell für die ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche gefunden und verifiziert werden.



Abbildung 3.1: Aufbau einer vereinfachten UVB-LED mit UV-absorbierender *p*-Seite aus GaN zur Simulation der Lichtpfade und Absorptionsverluste. Die Abbildung und deren Schichten sind nicht maßstabsgetreu.

3.1 Strahlverfolgung in einer UV-LED

In diesem Kapitel sollen die grundlegenden Eigenschaften der Lichtausbreitung und -extraktion in AlGaN-basierten UV-LEDs untersucht werden. Zur Veranschaulichung wird dabei ein stark vereinfachter Schichtstapel und eine Emissionswellenlänge von $\lambda = 300$ nm genutzt¹. Des Weiteren werden immer nur genau zwei Fälle für die optische Polarisation des von der aktiven Zone emittierten Lichts betrachtet: Vollständig TE-polarisiert oder vollständig TM-polarisiert. Spezifische Simulationen zu experimentellen Serien mit komplexeren Schichtstapeln, bei denen ein konkretes Verhältnis zwischen TE- und TM-polarisierter Emission gegeben ist, folgen später in den jeweiligen Kapiteln zu diesen Serien.

Abbildung 3.1 zeigt den vereinfachten schematischen Aufbau der simulierten LED. Das Saphir-Substrat hat eine Dicke von 430 μ m und wird (zunächst) in der Simulation als vollständig glatt angenommen. Bei einer sogenannten planaren Basisschicht folgt dann eine 1,8 μ m dicke AlN-Schicht. Die für eine LED relevante Heterostruktur besteht im vereinfachten Modell aus einer *n*-Seite mit 4,4 μ m dicken transparenten Al_{0,5}Ga_{0,5}N, einer aktiven Zone mit 60 nm Al_{0,4}Ga_{0,6}N (optisch relevantes effektives Material aus Barrieren und Quantentöpfen) und einer *p*-Seite mit 150 nm dicken UV-absorbierenden GaN. Weitere UV-transparente AlGaN-Schichten, wie z. B. eine Elektronensperrschicht, werden aufgrund der geringen Absorption und der geringen Änderung im Brechungsindex im Rahmen dieses Modells als nicht relevant angesehen. Des Weiteren wird von einem LED-Chip mit einer Länge von 1 mm × 1 mm ausgegangen. Die Kontakt- bzw. Mesa-Größe beträgt 500 μ m × 500 μ m und reicht 200 nm tief in die *n*-Schicht hinein. Die Mesa-Kante wird dabei mit SiN als Isolator beschichtet. Als Kontaktmetalle werden für die *p*-Seite Palladium und für die *n*-Seite Vanadium verwendet. Für den wellenlängenabhängigen sowie vom Al-Stoffmengenanteil abhängigen Brechungsindex von AlGaN wird ein Modell von WENZEL aus Referenz [57] verwendet,

¹ Die später gezeigten Effekte treten qualitativ auch bei komplexeren Schichtstapeln und anderen Emissionswellenlängen im UVC- und UVB-Spektralbereich auf.

Schicht	<i>d</i> (μm)	n	α (cm⁻¹)	
<i>p</i> -GaN	0,15	2,63 [57]	1,45 · 10 ⁵ [71]	
Al _{0,4} Ga _{0,6} N	0,06	2,62 [57]	10 ³ [32]	
<i>n-</i> Al _{0,5} Ga _{0,5} N	4,40	2,51 [57]	10 [33]	
AIN	1,80	2,24 [57]	1	
AI_2O_3	430	1,81 [56]	0	
SiN	0,3	2,05 [72]	10 ⁴ [72]	
Schicht	<i>d</i> (μm)	n	R	
Pd	-	1,2 + 2,3 i [73]	37 %	
V	-	2,1 + 2,9 i [73]	30 %	

Tabelle 3.1: Schichten der simulierten LED mit der Dicke *d*, dem realen Brechungsindex *n* und dem Absorptionskoeffizient α . Für die Metalle ist statt des Absorptionskoeffizienten der komplexe Brechungsindex *n* und der Reflexionsgrad *R* auf Al_{0,5}Ga_{0,5}N gelistet.

welches auf experimentell bestimmten Daten aus den Referenzen [64–66] basiert. Ein Literaturvergleich mit anderen Modellen ist in Anhang A.5 zu finden [57, 67–70]. Hierbei wurde sich für die Verwendung des ordentlichen Brechungsindexes von AlGaN entschieden, da die Lichtextraktion im AlGaN überwiegend in Richtung der optischen Achse (*c*-Kristallachse) stattfindet und der überwiegende Teil der LEDs in dieser Arbeit dominant TE-polarisierte Emission zeigt. Der Fehler des verwendeten Brechungsindexes für den Fall einer TMpolarisierten Emission senkrecht zur optischen Achse ist < 10 %. Die entsprechenden Brechungsindizes, Absorptionskoeffizienten bzw. Reflexionsgrade der jeweiligen Schichten können aus Tabelle 3.1 entnommen werden.

3.1.1 Typische Lichtpfade in der LED

Zunächst wird die zuvor definierte LED-Struktur schematisch betrachtet, um einige wichtige Lichtpfade zu beschreiben. Dazu werden die LED als seitliche Projektion und die Lichtpfade in verschiedenen Emissionswinkelbereichen in Abbildung 3.2 dargestellt. Der Emissionswinkel θ wird hierbei als Winkel in der aktiven Zone zwischen der *c*-Kristallachse und der Emissionsrichtung definiert (Abbildung 3.2a). Der Winkel $\theta = 0^{\circ}$ entspricht einer Emission in Richtung des Substrats, $\theta = 180^{\circ}$ einer Emission in Richtung des *p*-Kontakts und $\theta = 90^{\circ}$ einer Emission in die Ebene der aktiven Zone. Wird Licht mit $\theta < 22.4^{\circ}$ aus der aktiven Zone emittiert (Abbildung 3.2b), ist die Brechung an den Halbleiterschichten gerade schwach genug, um eine Totalreflexion an der letzten Grenzfläche (Saphir/Luft) zu verhindern. Dieser sogenannte Fluchtkegel mit $\theta = 22,4^{\circ}$ ergibt sich direkt aus der Bedingung für Totalreflexion des Snelliusschen Brechungsgesetzes [38] mit dem inneren Brechungsindex der aktiven Zone von 2,62 und dem äußeren Brechungsindex der Umgebung von 1,0. Durch diesen Fluchtkegel würden ausgehend von der Emissionsverteilung (Gleichung 1.6 und 1.7) nur 5,5 % bzw. 0,4 % des TE- bzw. TM-polarisierten Lichts der aktiven Zone ausgekoppelt werden. In einem schmalen Bereich mit $35,2^{\circ} < \theta < 43,7^{\circ}$ kann das Licht ebenfalls ausgekoppelt werden, nämlich aus den Saphirseitenflächen (Abbildung 3.2c). Die beiden Winkel 35,2° bzw. 43.7° ergeben sich hierbei wieder aus den Bedingungen für Totalreflexion an der Grenzfläche Saphir/Luft bzw. AlN/Saphir. Hierbei würden etwa 5,6 % (TE) bzw. 2,9 % (TM)



Abbildung 3.2: Schematische seitliche Darstellung einer UV-LED unter Betrachtung typischer Lichtpfade in Abhängigkeit des Emissionswinkels. (a) Definition des Emissionswinkels θ . (b) Direkte Lichtextraktion durch die Saphirrückseite. (c) Direkte Lichtextraktion durch die Saphirseitenwände. (d) Totalreflexion an der Saphir/Luft-Grenzfläche. (e) Totalreflexion an der AlN/Saphir-Grenzfläche. (f) Absorption im UV-absorbierenden GaN der *p*-Seite.

des Lichts ausgekoppelt werden. Wie es sich später zeigen wird, ist der Anteil des Lichts, der in diesen beiden Fällen ausgekoppelt wird, jedoch deutlich geringer, wenn Grenzflächenreflexionen und Absorptionen berücksichtigt werden. Für alle anderen Emissionswinkelbereiche geht die Wahrscheinlichkeit der Lichtextraktion gegen null. Für $22,4^{\circ} < \theta < 35,2^{\circ}$ (Abbildung 3.2d) wird das Licht innerhalb des Saphirs an allen Außenflächen totalreflektiert und schlussendlich zurück in die Heterostruktur geleitet. Für $43,7^{\circ} < \theta < 90^{\circ}$ (Abbildung 3.2e) wird das Licht an der AlN/Saphir-Grenzfläche totalreflektiert und somit ebenfalls zurück in die Heterostruktur reflektiert. In diesen beiden Fällen würde das Licht somit teilweise am *n*-Kontakt oder im *p*-GaN absorbiert und nur ein geringer Teil aus dem AlGaN seitlich extrahiert werden. Wird das Licht in die obere Hemisphäre mit $90^{\circ} < \theta \leq 180^{\circ}$ emittiert (Abbildung 3.2f), wird es direkt im UV-absorbierenden *p*-GaN und am *p*-Kontakt nahezu vollständig absorbiert.

3.1.2 Absorptionsverluste innerhalb einer LED

Als nächstes soll durch Raytracing-Simulationen untersucht werden, in welchen Bereichen Verluste durch Absorption stattfinden. Um dies zu illustrieren, wird in Abbildung 3.3 die extrahierte bzw. absorbierte Intensität als Funktion des Emissionswinkels θ in einem gestapeltem Flächendiagramm dargestellt. In dieser Darstellungsform entspricht die farbige Fläche den absorbierten bzw. extrahierten Intensitäten in den jeweiligen Schichten und die integrierte Einhüllende aller Flächen der Gesamtabstrahlungsintensität der aktiven Zone, welche auf den Wert 1 normiert ist. Es sei außerdem anzumerken, dass es sich bei der



Abbildung 3.3: Lichtextraktion bzw. -absorption in den verschiedenen LED-Schichten mit der Struktur aus Abbildung 3.1 in Abhängigkeit des Emissionswinkels für eine aktive Zone, welche (a) rein TM-polarisiertes bzw. (b) rein TE-polarisiertes Licht emittiert. Die Strahlungsintensität ist hierbei als gestapeltes Flächendiagramm dargestellt, berücksichtigt die Integration über alle Azimutwinkel und die über alle Emissionswinkel integrierte Gesamtintensität ist auf den Wert 1 normiert.

dargestellten Strahlungsintensität (pro Grad) um die über alle Azimutwinkel integrierte Strahlungsstärke (pro Steradiant) für den jeweiligen Emissionswinkel θ handelt. Durch den verschwindenden Integrationsumfang im Zenit ($\theta = 0^{\circ}$ und $\theta = 180^{\circ}$) konvergieren die dargestellten Werte an diesen Orten zwangsweise gegen null. Allerdings entsprechen dadurch die Flächeninhalte der dargestellten Bereiche direkt den extrahierten bzw. absorbierten Intensitäten in den jeweiligen Schichten.

Für eine aktive Zone, welche rein TM- (Abbildung 3.3a) bzw. rein TE- (Abbildung 3.3b) polarisiertes Licht emittiert, werden beim Betrachten der Einhüllenden die unterschiedlichen Abstrahlungsmuster deutlich. Bei einer aktiven Zone, welche TM-polarisiertes Licht emittiert, wird das Licht fast vollständig in die Wachstumsebene emittiert. Fast 70 % der Gesamtintensität befindet sich im Bereich $60^{\circ} < \theta < 120^{\circ}$. Bei einer aktiven Zone, welche TE-polarisiertes Licht emittiert, ist der Emissionsanteil mit 40 % in diesem Winkelbereich hingegen deutlich geringer und das Licht wird stattdessen verstärkt senkrecht zur Wachstumsebene, also in Richtung des Substrats oder der p-Seite, emittiert. Die verschiedenfarbigen Flächen unter der Einhüllenden zeigen nun an, in welchen Schichten und mit welchem Anteil das Licht absorbiert wird, und die dunkelgraue Fläche gibt die extrahierte Lichtintensität an. Es sind in beiden Polarisationsfällen, wie in Abschnitt 3.1.1 beschrieben wurde, zwei Winkelbereiche zu erkennen, $\theta < 22,4^{\circ}$ und $35,2^{\circ} < \theta < 43,7^{\circ}$, in denen das Licht extrahiert wird. Aus der Simulation ist jedoch ersichtlich, dass selbst in diesen Bereichen das Licht nicht vollständig extrahiert werden kann. Bereits vor dem ersten Grenzwinkel von $\theta = 22.4^{\circ}$ ist die extrahierte Intensität geringer als die Gesamtintensität (Abbildung 3.3b). Dieser Effekt, welcher für TE-polarisiertes Licht deutlicher stärker ist als für

TM-polarisiertes Licht, kann durch die Fresnellschen Gleichungen [38] verstanden werden. Mit zunehmendem Emissionswinkel nimmt die Grenzflächenreflexion zu. Während bei TEpolarisiertem Licht (zur Einfallsebene senkrecht polarisiert) diese Zunahme stetig ist, unterbindet der Brewster-Winkel bei TM-polarisiertem Licht (zur Einfallsebene parallel polarisiert) die Reflexion in einem Bereich vor dem Grenzwinkel der Totalreflexion. Derselbe Effekt tritt verstärkt auch bei der seitlich extrahierten Emission auf. In Richtung $35,2^{\circ} < \theta < 43,7^{\circ}$ kann nur knapp die Hälfte der Gesamtintensität extrahiert werden. Durch Integration der extrahierten Intensität ergibt sich insgesamt eine LEE von 6,7 % für TE- und 1,8 % für TM-polarisiertes Licht. Im Umkehrschluss bedeutet das, es werden 93,3 % des TE-polarisierten und 98,2 % des TM-polarisierten Lichts in der LED-Heterostruktur und an den Kontakten absorbiert. 8,3 % (TE) bzw. 3,9 % (TM) der Gesamtintensität werden am *n*-Kontakt absorbiert. Diese Absorption findet größtenteils in dem Bereich statt, in welchem das Licht im Saphir totalreflektiert wird (22,4° $< \theta < 35$,2°). Trotz des relativ geringen Absorptionskoeffizienten der Al_{0.5}Ga_{0.5}N-*n*-Seite wird in dieser in beiden Polarisationsfällen 1% der Gesamtintensität absorbiert. Grund dafür ist die Brechung an der Al_{0,4}Ga_{0,6}N/*n*-Al_{0,5}Ga_{0,5}N-Grenzfläche und die Totalreflexion an der *n*-Al_{0,5}Ga_{0,5}N/AlN-Grenzfläche, welche das Licht praktisch lateral durch die *n*-Schicht leiten. Licht, welches in die Quantenfilmebene emittiert wird ($\theta \approx 90^\circ$), wird vor allem in dieser selbst wieder absorbiert. Hier ist der Anteil der Gesamtintensität für TM-polarisiertes Licht mit 10,8 % deutlich größer als der Anteil für TE-polarisiertes Licht mit 6,4 %, was den unterschiedlichen Abstrahlungsmustern geschuldet ist. Dieses absorbierte Licht könnte von der aktiven Zone erneut emittiert werden, was bei LEDs mit einer geringen internen Quanteneffizienz und einer absorbierenden p-Seite ein zu vernachlässigender Effekt ist. Die dominierende Absorption findet jedoch in der GaN-p-Seite und am p-Kontakt mit 77 % für eine TE- und 82 % für eine TM-polarisierte Emission statt. Neben der zu erwartenden Absorption in der oberen Hemisphäre ($\theta > 90^{\circ}$) wird auch etwa die Hälfte des Lichts, welches in die unteren Hemisphäre ($\theta < 90^{\circ}$) gestrahlt wird, schlussendlich doch in der *p*-Seite absorbiert. Grund dafür ist vorwiegend die Totalreflexion an der AlN/Saphir-Grenzfläche, welche ab $\theta > 43,7^{\circ}$ einsetzt und das Licht somit wieder in Richtung der *p*-Seite reflektiert. Ein kleiner Rest der emittierten Gesamtintensität von weniger als 0,4 % wird in beiden Polarisationsfällen in anderen Schichten absorbiert (z. B. im Saphir oder im AlN) und beinhaltet auch den Fehler der Simulation durch Abbruchbedingungen für die Strahlverfolgung (siehe Kapitel 1.1.2).

Anhand dieses Modells lassen sich drei entscheidende Bereiche in einer UV-LED bestimmen, welche die Lichtextraktion entscheidend beeinflussen können und näher quantifiziert werden müssen: Die Absorption am *n*-Kontakt wird von dessen Reflexionsgrad bestimmt (Kapitel 3.2). Die mehrfache Totalreflexion im Saphir könnte sich durch Aufrauhung der Saphirrückseite bzw. Saphirseitenflächen ändern (Kapitel 3.3 und 6.1). Die ebenfalls kritische Totalreflexion an der AlN/Saphir-Grenzfläche könnte durch eine strukturierte Grenzfläche beeinflusst werden (Kapitel 3.4).

3.2 Bestimmung des Reflexionsgrads eines formierten *n*-Kontakts

Der n-Kontakt für AlGaN-basierte UV-LEDs in dieser Arbeit besteht aus einem Stapel verschiedener Metalle – in der Reihenfolge V, Al, Ni, Au – und wird formiert. In dem einfachen LED-Modell aus Kapitel 3.1 wurde zunächst angenommen, dass das Reflexionsvermögen durch V bestimmt wird, welches vor der Formierung im direkten Kontakt mit dem *n*-Halbleiter steht. Durch den Formierungsprozess kommt es jedoch zur Durchmischung der Metalle und Veränderung der Grenzfläche [74]. In diesem Abschnitt soll der Reflexionsgrad des formierten *n*-Kontakts auf Al_{0,66}Ga_{0,34}N:Si unter möglichst ähnlichen Bedingungen wie bei den später verwendeten LEDs bestimmt werden. Zur Vermeidung von Streueffekten wird die Heterostruktur auf einer planaren AlN-Basisschicht auf einem doppelseitig polierten Saphir-Substrat abgeschieden¹. Die Heterostruktur besteht dabei aus 1000 nm AlN (inklusive 580 nm AlN der Basisschicht), einer 1075 nm dicken Al_{0.78}Ga_{0.22}N:Si-Stromverteilungsschicht und der Al_{0,66}Ga_{0,34}N:Si-Kontaktschicht². Die nachfolgende aktive Zone und *p*-Seite der LED wurden bis zur Kontaktschicht weggeätzt, sodass etwa 125 nm Al_{0,66}Ga_{0,34}N:Si übrig blieben. Der Wafer wurde dann mit 15 nm V, 90 nm Al, 20 nm Ni und 30 nm Au thermisch bedampft und bei 800 °C für 40 s unter N₂ formiert³. Zum Vergleich werden Reflexionsmessungen nach dem Ätzen, nach der Beschichtung und nach der Formierung durchgeführt. Die Messergebnisse werden zudem mit theoretisch bestimmten Reflexionsspektren verglichen, welche über die Transfermatrix-Methode [75] und die dielektrische Funktion von AlGaN [68] bestimmt werden. Für eine realistische Amplitude der Fabry-Pérot-Oszillation wurde dabei eine gaußverteilte Schichtdickenvariation von 50 nm für den Saphir, 5 nm für AlN, 5 nm für Al_{0,78}Ga_{0,22}N:Si und 20 nm für Al_{0,66}Ga_{0,34}N:Si angenommen, über 500 Iterationen gemittelt und eine spektrale Verbreiterung von 2 nm angesetzt.

Abbildung 3.4 zeigt die Reflexionsspektren der *n*-AlGaN-Heterostruktur mit (a) einer geätzten Oberfläche, (b) nachdem die Metalle aufgedampft wurden und (c) nachdem der Kontakt formiert wurde. Dargestellt werden dabei jeweils die Messungen durch die Saphirrückseite in der Freistrahl-Konfiguration und in der Ulbricht-Kugel (Vergleich Kapitel 2.2) sowie die berechneten Reflexionsspektren der gesamten Probenstruktur und der Einzelgrenzfläche zwischen Al_{0,66}Ga_{0,34}N:Si und Luft bzw. dem (formierten) Kontakt. Ganz allgemein sind in allen drei Abbildungen die Fabry-Pérot-Oszillationen aufgrund von Interferenzeffekten innerhalb der AlGaN-Heterostruktur und die Absorptionskannte des Al_{0,66}Ga_{0,34}N:Si bei 250 nm zu erkennen. Im Falle einer geätzten Oberfläche (Abbildung 3.4a) liegen die Reflexionskurven beider Messmethoden übereinander. Dies spricht für vernachlässigbare

¹ Das Template wurde von Sylvia Hagedorn, FBH, hergestellt.

² Die Heterostruktur wurde von Norman Susilo, TUB, mit metall-organischer Gasphasenepitaxie abgeschieden.

³ Die Ätzung, Metallisierung und Formierung wurde von Luca Sulmoni, TUB, durchgeführt.



Abbildung 3.4: Reflexionsspektren der *n*-AlGaN-Heterostruktur auf doppelseitig poliertem AlN/Saphir für den Fall (a) einer geätzten Oberfläche, (b) einer Oberfläche mit aufgedampften Metallen (V/Al/Ni/Au) und (c) einer Oberfläche mit formiertem Kontakt. Hierbei werden jeweils Messungen in der Freistrahl-Konfiguration (blau) und in der Ulbricht-Kugel (gelb) gezeigt sowie die Berechnungen aus der Transfermatrix-Methode für das Gesamtschichtsystem (grün) und die Einzelgrenzfläche zum *n*-AlGaN (rot).

Streueffekte an den Grenzflächen, welche die reflektierte Intensität in der Freistrahl-Konfiguration ansonsten reduzieren würden. Im dargestellten Bereich oberhalb der Absorptionskante (>250 nm) beträgt das Reflexionsvermögen des Wafers zwischen 20 % und 22 %, hervorgerufen durch Reflexionen an der Luft/Saphir-, Saphir/AlN-, AlN/AlGaN- und AlGaN/Luft-Grenzfläche. Unterhalb der Absorptionskante (< 250 nm) beträgt das Reflexionsvermögen nur noch 10 % bis 12 %, hervorgerufen durch Reflexionen an der Luft/Saphir- und Saphir/AlN-Grenzfläche. Das berechnete Reflexionsspektrum zeigt einen ähnlichen Verlauf mit nur leichten Abweichungen im Bereich zwischen 250 nm und 300 nm. Möglicherweise wird dies durch eine sogenannte Mikro-Rauheit der Al_{0,66}Ga_{0,34}N/Luft-Grenzfläche hervorgerufen. Diese würde einen weniger abrupten Brechungsindexsprung bewirken und die Grenzflächenreflexion vermindern, wie es bei Ellipsometrie diskutiert wird [76]. Aus den Berechnungen kann die Reflexion an der relevanten Grenzfläche Al_{0,66}Ga_{0,34}N/Luft extrahiert werden. Diese steigt aufgrund des zunehmenden Brechungsindexes von Al_{0.66}Ga_{0.34}N zu kürzeren Wellenlängen hin an und liegt bei etwa 19 % (265 nm) bzw. 17% (310 nm). Im Falle einer mit V/Al/Ni/Au bedampften Oberfläche (Abbildung 3.4b) ist die Reflexion im Bereich oberhalb der Absorptionskante höher als im Fall ohne Metalle, allerdings zeigt die Freistrahlmessung eine geringere Reflexion als die Messung in der Ulbricht-Kugel. Dies könnte ein Hinweis auf leichte Streuverluste sein. Ob diese durch die Metallisierung verursacht wurden, kann aber nicht mit Sicherheit gesagt werden. Auffällig ist zudem, dass auch das berechnete Reflexionsspektrum eine höhere Reflexion im Bereich um 280 nm zeigt, als es aus der Messung in der Ulbricht-Kugel hervorgeht. Aus den Berechnungen würde sich eine Reflexion an der Al_{0.66}Ga_{0.34}N/(V/Al/Ni/Au)-Grenzfläche von 28 % (265 nm) bzw. 30 % (310 nm) ergeben. Aufgrund der deutlich geringeren gemessenen Reflexion wird diese in Wirklichkeit aber etwas geringer ausfallen. Im

Falle eines formierten Kontakts (Abbildung 3.4c) liegen beide gemessenen Spektren übereinander und die Reflexionswerte liegen in etwa zwischen denen mit geätzter Oberfläche und denen mit aufgedampften Metallen. Aus diesem Messergebnis kann somit geschlussfolgert werden, dass das Reflexionsvermögen eines formierten V/Al/Ni/Au-Kontakts auf Al_{0.66}Ga_{0.34}N:Si zwischen 17 % (AlGaN/Luft) und 30 % (AlGaN/(V/Al/Ni/Au)) eingegrenzt werden kann. Allein der Reflexionsgrad dieser Grenzfläche ist für die späteren Lichtextraktionssimulationen allerdings nicht ausreichend, hier wird ein komplexer Brechungsindex für den Kontakt benötigt. In Abbildung 3.4c wurde dieser für die Transfermatrix-Methode nun so angepasst, dass das berechnete Reflexionsspektrum mit den Messungen übereinstimmt. Hierbei ergibt sich für den Bereich 265 nm – 310 nm ein Brechungsindex von etwa 1,7 + 2,0 *i*, welcher für die Lichtextraktionssimulationen genutzt werden kann¹. Dieser Wert liegt zwischen den Brechungsindizes von Metallen wie Au (1,5+1,8i [77]) oder Ni (2,0 + 2,2 i [73]) bei einer Wellenlänge von 290 nm. Nach SULMONI et al. sind auf der formierten Grenzfläche Metallphasen wie Au-Al, Ni-Al and V-Al-Au zu finden [74]. Für den Reflexionsgrad des formierten V/Al/Ni/Au-Kontakts auf Al_{0,66}Ga_{0,34}N:Si würde sich demnach ein Wert von 21 % bei 265 nm – 310 nm ergeben. Das Reflexionsvermögen ist demnach ähnlich gering wie das von Au (22 % [77]) oder Ni (20% [73]) auf Al_{0,66}Ga_{0,34}N für Wellenlänge um 290 nm.

3.3 Einfluss der rauen Saphirrückseite auf das Fernfeld

Für alle in dieser Arbeit untersuchten UV-LEDs wird als Substrat einseitig polierter Saphir verwendet. Einseitig bedeutet hierbei, dass die Rückseite des Wafers eine durch den Herstellungsprozess erzeugte Rauheit besitzt und somit nicht als optisch glatt angenommen werden kann. Die Rauheit selbst, genauer die Oberflächenmorphologie der Saphirrückseite, und deren Einfluss auf die Lichtausbreitung muss also zunächst untersucht werden. Danach ist es möglich, die Oberfläche in der Raytracing-Simulation möglichst realistisch zu implementieren.

3.3.1 Charakterisierung des Höhenprofils der Saphirrückseite

Eine Standardmethode zur Abbildung und morphologischen Charakterisierung von Oberflächen ist die Rasterkraftmikroskopie (engl. *atomic force microscopy*, AFM). Abbildung 3.5 zeigt einen damit aufgenommenen 90 μ m × 90 μ m großen Ausschnitt der Oberfläche einer typischen Saphirrückseite. Die Oberfläche weist Höhenunterschiede von bis zu 5 μ m auf und

¹ Es sei hier anzumerken, dass es natürlich beliebig viele Kombinationen von Realteil und Imaginärteil gibt, die zur selben Reflexion führen würden.





Strukturen wie Täler oder Hügel haben eine laterale Ausdehnung von bis zu 30 µm. Die Wellenlänge von UVB- und UVC-Licht liegt zwischen 0,20 μm und 0,33 μm – im Saphir aufgrund des Brechungsindexes von etwa 1,8 [56] zwischen 0,11 µm und 0,18 µm. Die Oberflächenstrukturen sind also im Vergleich zur Wellenlänge des Lichts als makroskopisch anzusehen. Somit muss davon angegangen werden, dass die Oberfläche auch im Rahmen der Strahlenoptik das Licht deutlich beeinflussen kann. Ein übliches statistisches Maß für die Beschreibung der Rauheit ist die Wurzel der mittleren quadratischen Abweichung (engl. root-meansquare-derivation, RMSD oder oft nur als RMS bezeichnet) zu einem Referenzwert, in dem Fall die Mittelwertebene. Der RMSD-Wert für die gezeigte Saphirrückseite beträgt 0,65 µm. Er enthält jedoch keinerlei Informationen über die lateralen Strukturgrößen. Dazu würde die Funktion der spektralen Leistungsdichte (engl. power spectral density, PSD) mehr Informationen liefern [78], die auch in Raytracing-Simulationen verwendet wird [35]. Allerdings würden auch bei der PSD-Funktion Informationen über mögliche Neigungswinkel der Oberfläche, die für die Brechung von Lichtstrahlen entscheidend sind, fehlen. Ein weiteres statistisches Maß für die Rauheit ist die Verteilung der lokalen Oberflächennormalen oder -gradienten, die sich aus der zweidimensionale Ableitung der Oberfläche nach dem Ort ergeben. Daraus kann ein Histogramm der Oberflächenneigungswinkel erzeugt werden, welches dann für die Raytracing-Simulation genutzt werden kann (Vergleich Kapitel 1.1.3). Allerdings muss bei den statistischen Maßen berücksichtigt werden, dass die Auflösung des Bilds bei etwa 0,044 µm pro Bildpunkt liegt und daher auch Strukturen enthalten kann, die unter der Wellenlänge des UV-Lichts liegen. Für diese mikroskopischen Strukturen muss auch die Wellennatur des Lichts im Rahmen des Strahlenmodells der Raytracing-Simulation berücksichtigt werden. Daher wurde sich in dieser Arbeit dafür entschieden, die Daten des Höhenprofils über "Mathematica" mithilfe eines Gaußfilters mit dem Filterradius r zu glätten¹.

¹ Bei einem zweidimensionalen Gaußfilter wird in *"Mathematica"* jeder Datenpunkt in Abhängigkeit seiner Nachbarpunkte gewichtet. Diese Gewichtung hat das Profil einer Gaußfunktion, deren Halbwertsbreite in etwa dem Filterradius *r* entspricht.



Abbildung 3.6: Histogramm der Oberflächenneigungswinkel des geglätteten Höhenprofils aus Abbildung 3.5 mit verschiedenen Filterradien des Gaußfilters. Eingebettet ist der RMSD-Wert als Funktion des Filterradius der geglätteten Höhenprofile.

Abbildung 3.6 zeigt die Verteilung der Oberflächenneigungswinkel des geglätteten Höhenprofils aus Abbildung 3.5 mit Filterradien zwischen r = 155 nm und 2067 nm. Eingebettet ist außerdem eine Grafik des dazugehörigen RMSD-Werts als Funktion von r. Die RMSD-Werte der jeweiligen geglätteten Höhenprofile unterscheiden sich kaum und nehmen nur leicht von 0,65 μ m (r = 155 nm) auf 0,59 μ m (r = 2067 nm) ab. Im Gegensatz dazu unterscheiden sich die Histogramme in ihrem Verlauf deutlich. Für alle hier dargestellten Filterradien nimmt die Häufigkeitsdichte tendenziell von flachen Winkeln (0° bis 20°) zu steileren Winkeln bis hin zu 60° ab. Für einen kleinen Filterradius von 155 nm sind drei lokale Maxima bei 0°, 20° und 36° zu erkennen. Das Maximum bei 0° zeigt, dass es eine hohe Dichte an Oberflächenelementen gibt, die parallel zur makroskopischen Oberfläche liegen und der {0001}-Kristallfacette zuzuordnen sind. Der Ursprung der beiden anderen Maxima ist nicht abschließend geklärt. Es könnte sich hierbei ebenfalls um Kristallfacetten handeln, wie zum Beispiel der $\{10\overline{1}4\}$ mit 38,2° oder der $\{10\overline{1}8\}$ mit 21,5° [79]. Als andere mögliche Ursache für das sehr scharfe Maximum bei 36° käme die Spitze des Rasterkraftmikroskops infrage, welche hier als Faltung mit der Oberfläche abgebildet wird. Die Spitze besteht aus einer Siliziumpyramide mit {111}-Seitenflächen. Die Seitenflächen dieser Pyramide hätten dann jedoch einen Winkel von 54,7° zur Oberfläche und die Kanten einen Winkel von 45°, womit dieser Effekt erst bei solchen Winkeln zu sehen sein sollte. Außerdem weist die Verteilung der Azimutwinkel – also die Neigungsrichtung, welche hier nicht dargestellt ist – eine sechs-zählige Symmetrie auf, was für Facetten eines hexagonalen Kristalls spricht. Mit zunehmendem Filterradius werden diese lokalen Maxima geglättet und es bildet sich bei großen Filterradien ab 413 nm ein globales Maximum bei 10° heraus, welches sich mit weiter zunehmendem Filterradius zu kleineren Winkeln verschiebt. Dabei nimmt die Häufigkeitsdichte bei 10° kontinuierlich zu, was zu einer Verschmälerung des Histogramms führt – die Oberfläche wird durch den Gaußfilter zunehmend geglättet. Im nächsten Abschnitt soll nun herausgefunden werden, welcher Filterradius genutzt werden muss, um das Streuvermögen dieser Oberfläche für eine definierte Wellenlänge des Lichts korrekt wiederzugeben.



Abbildung 3.7: (a) Experimentell bestimmtes Fernfeld eines blauen bzw. roten Lasers mit einer Wellenlänge von 405 nm bzw. 650 nm ohne (gestrichelte Linien) und mit (durchgezogene Linien) Streuung an der rauen Rückseite eines AlN/Saphir-Templates. (b) Simuliertes Fernfeld von senkrecht einfallenden Strahlen, die durch die raue Oberfläche gestreut werden. Der Filterradius gibt dabei an, wie stark das Höhenprofil für das Histogramm der Oberflächenneigungswinkel geglättet wurde.

3.3.2 Streufernfeld der rauen Saphirrückseite

Der Einfluss einer Oberflächenrauheit auf die Streuung von Licht kann mithilfe einer gerichteten Lichtquelle und der Bestimmung des Fernfelds nach der Lichtstreuung ermittelt werden. Dieses Fernfeld soll nun sowohl experimentell als auch mithilfe der Raytracing-Simulationen bestimmt und eine mögliche Korrelation zwischen Emissionswellenlänge der Lichtquelle und Gaußfilter-Radius der Oberfläche gefunden werden. Als Probe wird dafür ein für UVB-LEDs übliches planares AlN/Saphir-Template verwendet¹. Dieses besteht aus einem einseitig polierten 430 µm dicken Saphir-Substrat, welches mit einer 1,4 µm AlN-Basisschicht überwachsen wurde. Als gerichtete Lichtquelle werden im Experiment zwei handelsübliche Halbleiterlaser mit verschiedenen, möglichst weit auseinanderliegenden Emissionswellenlängen (λ) verwendet. In diesem Fall standen ein blauer ($\lambda = 405$ nm) bzw. roter ($\lambda = 650$ nm) Halbleiterlaser zur Verfügung. Das Licht tritt dabei in die AlN-Basisschicht ein und aus der rauen Saphirrückseite aus.

Abbildung 3.7a zeigt die experimentell aufgenommenen Fernfelder der Laser mit und ohne Streuung an der Probe. Hierbei entspricht $\theta = 0^{\circ}$ der Oberflächennormalen und der Einstrahlrichtung. Die Fernfelder sind auf die Strahlungsstärke des Lasers ohne Probe bei einem Polarwinkel von $\theta = 0^{\circ}$ normiert. Beide Laser zeigen ein sehr ähnliches Fernfeld mit einer Halbwertsbreite von etwa 3°. Die Form ergibt sich hierbei aus der Faltung des Strahlprofils des Lasers und deren Halbwertsbreite sowie dem Raumwinkel, den der Detektor abdeckt. Beim Durchgang durch die Probe wird das Fernfeld beider Laser stark verbreitert und das Maximum nimmt um mehr als eine Größenordnung ab. Obwohl beide Laser ohne

¹ Das planare AlN/Saphir-Template wurde von Sylvia Hagedorn, FBH, bereitgestellt.

Probe ein sehr ähnliches Fernfeld zeigen, weisen die Streufernfelder mit Probe leichte Unterschiede auf. Während die Strahlungsstärke beider Laser bei $\theta = 0^{\circ}$ etwa gleich ist, ist die Strahlungsstärke des roten Lasers für $\theta < 30^{\circ}$ leicht höher und für $\theta > 30^{\circ}$ leicht geringer als die Strahlungsstärke des blauen Lasers.

Abbildung 3.7b zeigt das simulierte Fernfeld für verschiedene Filterradien der aufgenommenen Saphiroberfläche. Es sollte zusätzlich erwähnt werden, dass alle simulierten Fernfelder auf die Gesamtintensität normiert und ebenfalls mit einem Gaußfilter verbreitert wurden, um die verbreiterte Darstellung des Laserfernfelds im Experiment widerzuspiegeln. Bei einem kleinen Filterradius von 155 nm besitzt das Fernfeld ein scharfes Maximum bei 0° mit einer Halbwertsbreite von 4°. Bei ±4° ist die Strahlungsstärke bereits um eine Größenordnung abgefallen und nimmt dann exponentiell zu flacheren Winkeln weiter ab. Das scharfe Maximum bei 0° ist eine direkte Folge der hohen Dichte an Oberflächenneigungswinkeln von 0°. Mit größer werdendem Filterradius bis 620 nm nimmt die Intensität des Maximums kontinuierlich ab, wobei die Halbwertsbreite auf 8° zunimmt. Währenddessen steigt die Strahlungsstärke für Winkel zwischen 4° und 25° an. Hierbei ist zu beachten, dass Abbildung 3.7b nur einen Schnitt entlang eines Längengrades des Fernfelds in Kugelkoordinaten repräsentiert. Daher verteilt sich die Strahlungsstärke um 0° auf die gesamte Kugelschicht zwischen 4° und 20°. Das Licht wird mit steigendem Filterradius also tendenziell stärker gestreut, was mit der Ausbildung eines Maximums bei einem Oberflächenneigungswinkel von 10° aus Abbildung 3.6 korreliert werden kann. Wird der Filterradius größer als 620 nm, steigt die Intensität des Maximums wieder an, während die Halbwertsbreite weiter bis auf 12° bei einem Filterradius von 2067 nm zunimmt. Da jedoch die Strahlungsstärke bei Winkeln über 15° abnimmt, wird das Licht bei großen Filterradien ($r \gg \lambda$) also tendenziell wieder weniger gestreut. Dies ist damit zu begründen, dass die Oberfläche mehr und mehr durch den Gaußfilter geglättet wird und sich die Verteilung der Oberflächenneigungswinkel verschmälert.

Zum quantitativen Vergleich der Ergebnisse von Simulation und Experiment wird in Abbildung 3.8a der RMSD-Wert zwischen den simulierten Fernfeldern (Abbildung 3.7b) und den beiden gemessenen Fernfeldern (Abbildung 3.7a) als Funktion des verwendeten Filterradius dargestellt. Je kleiner der RMSD-Wert ist, desto größer ist die Übereinstimmung von Simulation und Experiment. Beide Kurven zeigen einen ähnlichen Verlauf. Mit größer werdendem Filterradius nimmt der RMSD-Wert kontinuierlich ab, bis er bei einem bestimmten Filterradius in beiden Fällen einen minimalen Wert von etwa 0,06 sr⁻¹ erreicht. Für Filterradien, die deutlich über der Wellenlänge des verwendeten Lichts liegen, steigt der RMSD-Wert dann wieder an. Eine hohe Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation wird bei etwa 600 nm für den blauen Laser und bei etwa 830 nm für den roten Laser erreicht. Der Vergleich zwischen gemessenem Fernfeld und bei diesen Filterradien simulierten Fernfeldern ist Abbildung 3.8b dargestellt. Hier ist für beide Fernfelder der gestreuten



Abbildung 3.8: (a) Wurzel der mittlere quadratische Abweichung (RMSD) des simulierten Fernfelds zum gemessenen Fernfeld als Funktion des verwendeten Filterradius für den blauen bzw. roten Laser. Die beiden Pfeile markieren den Filterradius mit hoher Übereinstimmung zwischen Simulation und Messung. (b) Vergleich zwischen gemessenem und simuliertem Fernfeld des blauen bzw. roten Lasers mit den Filterradien 600 nm bzw. 830 nm.

Laseremission eine gute Übereinstimmung über einen großen Winkelbereich zu erkennen. Unter der Annahme, dass es zwischen der Emissionswellenlänge und dem optimalen Filterradius einen proportionalen Zusammenhang gibt — ähnlich, wie es beim Auflösungsvermögen von optischen Geräten der Fall ist [80] —, können beide in Relation gesetzt werden. Hierbei ergibt sich ein Quotient aus Filterradius und Emissionswellenlänge zwischen 1,3 (roter Laser) und 1,5 (blauer Laser). Leider konnte im Rahmen dieser Arbeit diese Untersuchung nicht ebenfalls mit einem Laser, dessen Emissionswellenlänge im UVB- oder UVC-Spektralbereich liegt, durchgeführt werden. Es ist jedoch anzunehmen, dass ein ähnlicher oder leicht höherer Quotient ebenfalls für UV-Wellenlängen zu erwarten ist. In dieser Arbeit wird daher die folgende Formel für den zu verwendenden Filterradius $r_{Gauß}$ für das Höhenprofil eines rauen Saphirs in Abhängigkeit der Wellenlängen im Vakuum λ_0 verwendet:

$$r_{\text{Gauß}} = 1,5 \lambda_0 \tag{3.1}$$

Das Höhenprofil der Saphirrückseite für die Histogramme der Oberflächenneigungswinkel wird demnach für UVC- bzw. UVB-LEDs mit einem Filterradius zwischen 300 nm und 490 nm geglättet.

3.4 Einfluss der ELO-AIN/Saphir-Grenzfläche auf das Fernfeld und die LEE

Zur Reduktion der Versetzungsdichte in der aktiven Zone von UVC-LEDs werden die Heterostrukturen der LEDs in dieser Arbeit auf ELO-AlN/Saphir-Templates abgeschieden [81].



Abbildung 3.9: Schematische Darstellung der ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche mit den Luft-gefüllten Hohlräumen (Voids) zwischen AlN und Saphir sowie der aktiven Zone im AlGaN. Zusätzlich werden mögliche Wechselwirkungen des Lichts mit diesen Voids gezeigt, welche die Lichtextraktion (A & B) kaum beeinflussen, (C) reduzieren oder (D & E) erhöhen könnten.

Die verwendeten Templates weisen eine periodische Streifenstruktur mit Hohlräumen und einer Periodenlänge von 3,5 µm auf, wie es schematisch in Abbildung 3.9 gezeigt wird. Diese Struktur entsteht durch das Ätzen ca. 1 µm breiter Gräben, welche dann mit AlN überwachsen werden. Durch die verzögerte Koaleszenz des AlN entstehen Hohlräume zwischen dem Saphir und AlN, sogenannte ELO-Voids. Da diese Struktur nach außen zum Wafer-Rand offen ist, wird davon angegangen, dass diese Voids mit Luft gefüllt sind. Die Dimension dieser Voids liegt bei einigen Wellenlängen der LED-Emission. Dies impliziert, dass das Licht auch im Rahmen der Strahlenoptik vermutlich mit diesen Voids wechselwirkt, wie es beispielhaft in Abbildung 3.9 an den Lichtstrahlen A bis E gezeigt wird. Licht könnte zum einen entweder (A) gar nicht beeinflusst oder (B) nur in einem anderen Winkel transmittiert werden. Zum anderen könnte die Lichtextraktion auch durch (C) Totalreflexion reduziert oder durch (D) Brechung an glatten bzw. (E) Reflexion an unebenen Void-Seitenflächen erhöht werden. Es ist daher nötig, die ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche näher zu untersuchen und mithilfe von geeigneten Experimenten an LEDs mit einer Emissionswellenlänge von 265 nm das Raytracing-Simulationsmodell um diese Struktur zu erweitern. Um mögliche Effekte der ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche genauer zu identifizieren, soll die Lichtstreuung an anderen Grenzflächen, wie der rauen Saphirrückseite, minimiert werden. Dazu wird die Rückseite des Saphirs poliert, dessen Oberfläche charakterisiert sowie die Emissionsleistung und das Fernfeld identischer LEDs vor und nach der Politur aufgenommen und verglichen.

3.4.1 Charakterisierung der ELO-Voids und der Saphirrückseite

Zunächst werden Bilder der ELO-Voids mit einem Rasterelektronenmikroskop (REM) aufgenommen¹. Abbildung 3.10 zeigt REM-Bilder einer orthogonal zu den ELO-Streifen gespaltene Facette eines LED-Wafers. Die Überblicksaufnahme (Abbildung 3.10a) zeigt im unteren Bildausschnitt den Saphir und im oberen Bildausschnitt Luft. Dazwischen befindet sich etwa 6 µm AlN mit den ELO-Voids und darüber die eigentliche AlGaN-LED-Heterostruktur. Die Abbildung zeigt, dass die ELO-Voids regelmäßig im Abstand von 3,5 µm angeordnet sind. Die Geometrie der Voids selbst, also deren Breite und Höhe, unterliegt jedoch gewissen Schwankungen. Zudem sind auch Ablagerungen innerhalb der Voids zu erkennen, die diese

¹ Die Aufnahmen mit dem Rasterelektronenmikroskop wurden von Luca Sulmoni, TUB, durchgeführt.



Abbildung 3.10: REM-Aufnahme einer senkrecht zu den ELO-Streifen gespalteten Facette eines LED-Wafers (a) als Überblicksaufnahme und (b) von einem repräsentativen ELO-Void. In regelmäßigen Abständen sind dreieckige Hohlräume (ELO-Voides) im ELO-AIN zu sehen. (Aufnahmen von Luca Sulmoni, TUB)



Abbildung 3.11: REM-Aufnahme einer parallel zu den ELO-Streifen gespaltenen Facette eines LED-Wafers Facette. Der Ausschnitt zeigt die Innenwand eines ELO-Voids. Die Innenwand und der Boden sind aufgeraut und mit Kristalliten besetzt. (Aufnahme von Luca Sulmoni, TUB)

merklich kleiner aussehen lassen. Abbildung 3.10b zeigt eine vergrößerte Aufnahme eines einzelnen repräsentativen Voids. Die Breite dieses Voids ist mit etwa 0,7 µm kleiner als die Streifenbreite (1,0 µm) des Ätzprozesses. Außerdem ändert sich die Steigung der Seitenwände in der Spitze des Voids, was auf geänderte Wachstumsbedingungen zurückgeführt werden kann [81]. Aus Abbildung 3.10a lässt sich eine mittlere Breite von (0,6 ± 0,1) µm und eine mittlere Höhe von (2,2 ± 0,6) µm der Voids bestimmen. Dieser Wertebereich von Breite und Höhe kann auch in einen Neigungswinkel der Void-Seitenfläche zur Waferoberflächennormalen umgerechnet werden — im Folgenden als Void-Neigungswinkel bezeichnet. Hier ergibt sich eine Variation zwischen 5° (0,5 µm breit und 2,8 µm hoch) und 12° (0,7 µm breit und 1,6 µm hoch).

Abbildung 3.11 zeigt die REM-Aufnahme einer parallel zu den ELO-Streifen gespaltenen Facette eines LED-Wafers. Der Ausschnitt zeigt dabei die Innenwand eines ELO-Voids. Im unteren Teil des Bildes ist der Saphir zu sehen. Darüber befindet sich AlN, welches im Graben gewachsen ist (Void-Boden). Im Hintergrund ist die Innenwand eines ELO-Voids zu erkennen, welche im mittleren Teil des Bildes mit der anderen Innenwand (zum Teil am rechten Bildrand zu sehen) zusammenwächst. Im oberen Bildausschnitt ist das gespaltene AlN zu



Abbildung 3.12: AFM-Aufnahme einer Saphirrückseite (a) vor und (b) nach der Politur. Darunter sind die dazugehörigen Histogramme der Oberflächenneigungswinkel (c) vor und (d) nach der Politur dargestellt. (AFM-Messung von Eviathar Ziffer, TUB)

sehen. Der Bildkontrast weist auf eine raue Oberflächenmorphologie des Void-Bodens hin und auch die Seitenwände sind mit diversen Kristalliten besetzt. Darüber hinaus ist eine relativ periodische Streifenstruktur an der Innenwand zu erkennen. Der Bildkontrast lässt hier vermuten, dass es sich ebenfalls um eine aufgeraute Oberfläche handelt. Diese Eigenschaften müssen im Simulationsmodell gegebenenfalls berücksichtigt werden.

Um in den später folgenden Raytracing-Simulationen die raue bzw. polierte Saphirrückseite berücksichtigen zu können, muss deren Oberflächenmorphologie ebenfalls analysiert werden (Vergleich Kapitel 3.3). Abbildung 3.12 zeigt dazu die AFM-Aufnahmen und Histogramme der Oberflächenneigungswinkel der jeweiligen Saphirrückseiten vor und nach der Politur¹. Nach Gleichung 3.1 wurde dabei für die Emissionswellenlänge von 265 nm ein Gaußfilterradius von 400 nm zur Berechnung der Oberflächenneigungswinkel verwendet. Abbildung 3.12a zeigt das Höhenprofil einer rauen Saphirrückseite, ähnlich wie es schon in Kapitel 3.3.1 zu sehen war. Es gibt Höhenunterschiede von bis zu 5 µm, die Oberfläche ist relativ zufällig strukturiert und der RMSD-Wert beträgt 0,72 µm. Abbildung 3.12b zeigt das

¹ Die Politur der Wafer wurde von Praphat Sonka, TUB, durchgeführt.

Höhenprofil der polierten Saphirrückseite. Hier sind die Höhenunterschiede deutlich geringer und im Bereich von wenigen 10 nm. Der RMSD-Wert liegt hier bei 2 nm. Die Oberfläche weist jedoch Grabenstrukturen (Kratzer) auf, welche vermutlich durch die Politurkörnung verursacht wurden. Beim Vergleich der Verteilung der Oberflächenneigungswinkel (Abbildung 3.12c und Abbildung 3.12d) zeigt die raue Saphirrückseite Neigungswinkel von bis zu 55°, wobei die höchste Dichte um 10° erreicht wird. Eine mögliche Erklärung für das lokale Maximum bei 35° wurde bereits in Kapitel 3.3.1 gegeben. Die polierte Saphirrückseite zeigt hingegen nur Neigungswinkel von maximal 0,5° mit der höchsten Dichte bei 0,1°.

3.4.2 Vergleich der Lichtemission von UVC-LEDs mit rauer und polierter Saphirrückseite

Zur Untersuchung des Einflusses der ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche auf die Lichtextraktion, in diesem Fall die Emissionsverteilung im Fernfeld, wird eine typische UVC-LED mit einer UV-transparenten *n*-Seite aus Al_{0.76}Ga_{0.24}N:Si, einem AlGaN-Mehrfachquantenfilm mit einer Emissionswellenlänge von 265 nm sowie einer UV-absorbierenden *p*-Seite mit einer GaN:Mg-Kontaktschicht verwendet. Die ausführliche Schichtfolge ist in Referenz [82] zu finden. Die Heterostruktur wurde mittels metall-organischer Gasphasenepitaxie (engl. *metalorganic vapor phase epitaxy*, MOVPE) auf einem ELO-AlN/Saphir-Template abgeschieden, anschließend mit Standard-Prozesstechniken zu LEDs prozessiert und jeweils vor und nach der Rückseitenpolitur elektro-optisch charakterisiert¹.

Abbildung 3.13a zeigt eine repräsentative Strom-Spannungs-Emissionsleistungs-Kennlinie derselben LED auf dem Wafer vor (raue Rückseite) und nach (glatte Rückseite) der Politur der Saphirrückseite. Nach der Politur ist eine deutliche Erhöhung der Betriebsspannung zu erkennen. Während die LED mit rauer Saphirrückseite für eine Stromstärke von 20 mA eine Spannung von 8 V benötigt, ist bei der LED mit glatter Saphirrückseite eine Spannung von 10 V nötig. Diese Differenz von 2 V bleibt auch bei höheren Stromstärken bis 60 mA konstant. Daraus lässt sich schlussfolgern, dass der Serienwiderstand beider LEDs trotzdem nahezu gleich ist. Da sich eine optische Eigenschaft (hier die Saphirrückseite) nicht auf eine elektrische Eigenschaft (hier die Betriebsspannung) auswirken sollte, wird als mögliche Ursache für das gemessene Verhalten der mechanische Stress der Kontakte während der Politur vermutet. Da der *p*-Kontakt nicht formiert wurde, ist eine Änderung der elektrischen Eigenschaften nicht auszuschließen. Die Charakterisierung von *n*- und *p*-Kontakten mittels Transferlängen-Methode (TLM) [83] ergab, dass die elektrischen Eigenschaften des *n*-Kontakts erhalten blieben². Beim *p*-Kontakt erhöhte sich jedoch die Spannung aufgrund eines

¹ Die Heterostruktur wurde von Norman Susilo, TUB, hergestellt. Die Prozessierung der Wafer wurde von Luca Sulmoni, TUB, durchgeführt. Die Elektrolumineszenzmessungen wurden von Verena Montag, TUB, und Anna Susilo, TUB, durchgeführt.

² Die TLM-Messungen wurden von Verena Montag, TUB, durchgeführt.



Abbildung 3.13: (a) Vergleich der Strom-Spannungs-Emissionsleistungs-Charakteristik einer repräsentativen LED vor (rau) und nach (glatt) der Politur der Saphirrückseite. (b) Vergleich der Emissionsleistung bei einem Strom von 20 mA von 14 LEDs vor (rau) und nach (glatt) der Politur der Saphirrückseite sowie deren Emissionsleistungsänderung. Die Box repräsentiert einen Bereich zwischen oberen und unteren Quartil und der waagerechte Strich den Mittelwert. (Messung von Anna Susilo, TUB, und Verena Montag, TUB)

stärker ausgeprägten Schottky-Verhaltens der *p-p*-Kennlinien. Beim Vergleich der Emissionsleistungskennlinie ist zwischen rauer und glatter Saphirrückseite kein Unterschied zu erkennen. Beide Kennlinien zeigen eine annährend lineare Zunahme der Emissionsleistung mit zunehmender Stromstärke. Nur bei hohen Strömen > 50 mA ist die Steigerung der Emissionsleistung der LED mit glatter Saphirrückseite etwas geringer als die der LED mit rauer Saphirrückseite. Das stärkere thermische Überrollen ist auf die höhere Betriebsspannung der LED mit glatter Saphirrückseite zurückzuführen. Abbildung 3.13b zeigt den Vergleich der Emissionsleistungen von 14 LEDs bei einer Stromstärke von 20 mA vor und nach der Politur sowie deren Änderung in der Emissionsleistung. Der Mittelwert der Emissionsleistung liegt in beiden Fällen bei 0,8 mW, wobei sich die Spanne zwischen oberem und unterem Quartil leicht verringert, von 0,10 mW (rau) auf 0,07 mW (glatt). Das würde für eine insgesamt homogenere Verteilung der Emissionsleistung auf dem Wafer sprechen. Die Darstellung der Emissionsleistungsänderung jeder einzelnen LED zeigt jedoch auch, dass die Emissionsleistung sowohl zunehmen als auch abnehmen kann. Die Spanne liegt hier zwischen +0,03 mW und –0,02 mW und ist damit größer als die Änderung der mittleren Emissionsleistung von nur +0,01 mW. Die Änderung der Emissionsleistung zwischen rauer und glatter Saphirrückseite ist somit vernachlässigbar klein, aber dennoch fehlerbehaftet und wird mit (0 ± 4) % quantifiziert.

Abbildung 3.14 zeigt das Fernfeld einer repräsentativen LED auf dem Wafer bei einem Betriebsstrom von 10 mA. Hierbei wurde ein Polarwinkel-Fernfeld vor und nach der Politur jeweils parallel bzw. senkrecht zu den ELO-Streifen gemessen (Abbildung 3.14a). Des Weiteren wurde ein Halbkugel-Fernfeld einer weiteren LED nach der Politur desselben Wafers gemessen (Abbildung 3.14b). Hierbei sei darauf hingewiesen, dass die Emissionsleistungsänderung durch Degradation der LED während der Fernfeldmessung korrigiert wurde, die



Abbildung 3.14: Repräsentative Fernfelder einer UVC-LED auf dem Wafer, gemessen bei einer Stromstärke von 10 mA. (a) Polarwinkel-Fernfeld vor (rau) und nach (glatt) der Politur der Saphirrückseite, jeweils senkrecht und parallel zu den ELO-Streifen gemessen. (b) Halbkugel-Fernfeld nach der Politur. (Messungen von Anna Susilo, TUB)

Degradation zwischen den Messungen jedoch nicht. Das führt unter anderem dazu, dass die integrierte Strahlungsstärke von Messung zu Messung leicht abnimmt und somit nicht direkt miteinander verglichen werden kann. Sowohl das Fernfeld der LED mit polierter Saphirrückseite als auch mit rauer Saphirrückseite ist nicht isotrop im Azimutwinkel. Im Falle einer rauen Saphirrückseite hat das Fernfeld parallel zu den ELO-Streifen ein Maximum bei 0° und nimmt Kosinus-artig zu größeren Winkeln ab. Dies entspricht einer Lambertschen Abstrahlung (engl. lambertian emission pattern), wie es für eine LED auf dem Wafer zu erwarten ist [60]. Das Fernfeld senkrecht zu den ELO-Streifen hat ein lokales Minimum bei 0° und zwei Maxima bei ±15°. Diese Anisotropie wird im Falle der glatten Saphirrückseite noch deutlicher. Auch hier hat das Fernfeld parallel zu den ELO-Streifen ein Maximum bei 0° und nimmt Kosinus-artig zu größeren Winkeln ab. Das Fernfeld senkrecht zu den ELO-Streifen hat nun ein deutliches lokales Minimum bei 0° und zwei Maxima (im Folgenden auch als "Ohren" bezeichnet) bei ±25°. Die Zunahme der Strahlungsstärke beträgt dabei ca. 30 % von $95 \,\mu\text{W}\,\text{sr}^{-1}$ im Minimum auf $125 \,\mu\text{W}\,\text{sr}^{-1}$ in den Ohren. Im Halbkugel-Fernfeld ist zudem zu erkennen, dass die Intensitäten der Ohren bei einem Azimutwinkel von 0° bzw. 180° maximal sind und dann kontinuierlich nach 90° bzw. 270° abnehmen. Aus den Fernfeldmessungen kann geschlussfolgert werden, dass die Streifenstruktur der ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche einen gravierenden Einfluss auf das Fernfeld hat. Diese Anisotropie wird jedoch üblicherweise von der rauen Saphirrückseite aufgrund von Streuprozessen teilweise aufgehoben.

3.4.3 Einfluss der Geometrie und Rauheit der ELO-Voids auf die Lichtextraktion und das Fernfeld

Ausgehend von den Erkenntnissen aus Kapitel 3.4.1 und 3.4.2 soll nun ein Simulationsmodell für die ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche gefunden werden, welches die höchste Übereinstimmung mit den experimentell ermittelten Daten liefert. Das heißt, das Fernfeld, welches senkrecht zu den ELO-Streifen simuliert wird, muss im Falle einer glatten Saphirrückseite zwei deutliche Ohren bei etwa ±25° mit etwa 30 % mehr Intensität gegenüber 0° aufweisen (Abbildung 3.14). Diese Ohren sollen auch teilweise noch bei einer rauen Saphirrückseite zu erkennen sein. Außerdem muss die LEE im Falle einer rauen und glatten Saphirrückseite etwa gleich sein (Abbildung 3.13b). Für die Raytracing-Simulation wird die Schichtstruktur aus Kapitel 3.4.2 auf optische relevante Schichten reduziert. Nach dem 430 µm dicken Saphirsubstrat folgt 7,4 µm AlN, die n-Seite mit 1325 nm Al_{0,76}Ga_{0,24}N, die aktive Zone mit 55 nm Al_{0.60}Ga_{0.40}N sowie die *p*-Seite mit 30 nm Al_{0.77}Ga_{0.23}N, UV-absorbierendem Al_{0.22}Ga_{0,78}N (60 nm) und GaN (160 nm). Das AlN wird durch periodisch angeordnete ELO-Voids mit zwei AlN/Luft-Void-Seitenflächen und einer Luft/Saphir-Void-Bodenfläche konstruiert, deren Abmessungen und Rauheit im Folgenden variiert wird. Es sei darauf hingewiesen, dass es neben den in dieser Arbeit vorgestellten Variationsserien eine Vielzahl weiterer Void-Geometrien und Anpassungen der Raytracing-Simulation selbst gab, um das Modell auf den hier gezeigten Stand zu bringen. Der Übersicht halber werden in den folgenden Abschnitten nur drei Serien vorgestellt, die die wichtigsten Erkenntnisse beinhalten. Die folgenden simulierten Fernfelder sind immer auf die erzeugte Emissionsleistung in der aktiven Zone normiert.

Abbildung 3.15 zeigt die Variation der ELO-Void-Geometrie mit glatten Grenzflächen. Die Breite/Höhe der Voids wurde hier zwischen $0,4 \mu m/3,4 \mu m$ und $0,8 \mu m/1,0 \mu m$ variiert, was einem Neigungswinkel der ELO-Void-Seitenflächen zwischen 3,4° und 21,8° gegenüber der Waferoberflächennormalen entspricht. Abbildung 3.15a zeigt exemplarisch die simulierten Fernfelder senkrecht zu den ELO-Streifen für einen Void-Neigungswinkel von 3,4°, 7,8° und 21,8° sowie den Vergleich zu einem simulierten Fernfeld ohne ELO-Voids und dem gemessenen Fernfeld. Zunächst fällt auf, dass alle simulierten Fernfelder zwar die Intensitätsabnahme des gemessenen Fernfelds zu hohen Polarwinkeln ($\theta > 60^{\circ}$) gut nachbilden, aber keines der simulierten Fernfelder die charakteristischen Ohren bei ±25° aufweist. Auch gibt es zwischen den Fernfeldern mit ELO-Voids und dem Fernfeld ohne ELO-Voids nur geringe Unterschiede. Bei genauerer Betrachtung gibt es bei stark geneigten (21,8°) ELO-Void-Seitenflächen eine Intensitätszunahme bei hohen Polarwinkeln um $|\theta| = 50^{\circ}$, welche sich mit kleiner werdenden Void-Neigungswinkel Richtung $\theta = 0^{\circ}$ verschiebt. In Abbildung 3.15b wird die simulierte Detektor-LEE wird als Funktion des Void-Neigungswinkels gezeigt. Die Detektor-LEE ist bei allen ELO-Void-Geometrien höher als die Detektor-LEE ohne ELO-Voids. Dies lässt vermuten, dass Reflexionen bzw. Brechungen an den ELO-Voids die



Abbildung 3.15: Variation der Breite und Höhe der ELO-Voids und den daraus resultierenden Neigungswinkel der glatten ELO-Void-Seitenflächen zur Waferoberflächennormalen. (a) Simulation der Fernfelder für verschiedene Void-Neigungswinkel, Vergleich mit dem simulierten Fernfeld ohne ELO-Voids und Vergleich mit dem gemessenen Fernfeld senkrecht zu den ELO-Streifen. (b) Simulierte Detektor-LEE als Funktion des Void-Neigungswinkels. Das Intervall zwischen 5° und 12° markiert den Bereich des gemessenen Void-Neigungswinkels, der aus den REM-Aufnahmen aus Abbildung 3.10 entnommen wurde.

Totalreflexion an der AlN/Saphir-Grenzfläche teilweise unterbinden können. Im Maximum bei 12° ist die Detektor-LEE mit ELO-Voids etwa 11 % höher als die Detektor-LEE ohne ELO-Voids. Für kleinere Void-Neigungswinkel stehen die Void-Seitenflächen fast senkrecht auf dem Saphir, sodass der Einfallswinkel auf die AlN/Saphir-Grenzfläche kaum noch durch die Voids verändert wird. Für größere Void-Neigungswinkel wird der Bereich zwischen zwei Voids kleiner und die Wahrscheinlichkeit steigt, dass Strahlen durch Totalreflexion zurück zur aktiven Zone reflektiert werden (Vergleich Abbildung 3.9, Variante C). Nach dieser Simulationsserie zu urteilen, ist der Void-Neigungswinkel nicht alleinige Ursache für das charakteristische Fernfeld mit den Ohren, sodass im Folgenden die Rauheit der Void-Seitenflächen und des Void-Bodens variiert wird.

Abbildung 3.16 zeigt die Variation der Rauheit der ELO-Void-Seitenfläche und ELO-Void-Grundfläche mit einer Breite/Höhe von 0,6 μ m/2,2 μ m. Da eine Messung der Rauheit dieser Flächen schwer zugänglich ist, wird hier eine Verteilung der Oberflächenneigungswinkel angesetzt, deren Erwartungswert (mittlerer Oberflächenneigungswinkel) zwischen 0° (keine Rauheit) und 85° (extrem raue Fläche) variiert wird. Die Verteilung ist dabei ähnlich den gezeigten Verteilungen aus Kapitel 1.1.3. Abbildung 3.16a zeigt exemplarisch die simulierten Fernfelder senkrecht zu den ELO-Streifen für einen mittleren Oberflächenneigungswinkel von 14°, 63° und 85° sowie den Vergleich zu einem simulierten Fernfeld mit glatten ELO-Void-Seitenflächen und dem gemessenen Fernfeld. Beim Vergleich zwischen den Fernfeldern mit rauen Seitenflächen und dem Fernfeld mit glatten Seitenflächen fällt auf, dass die Intensität für Polarwinkel $|\theta| < 50°$ tendenziell erhöht ist. Weiter unterscheiden sich die Fernfelder mit rauen ELO-Voids auch untereinander deutlich. Für kleine mittlere



Abbildung 3.16: Variation der Rauheit der ELO-Void-Seitenwände und -Grundfläche quantitativ durch den mittleren Oberflächenneigungswinkel ausgedrückt. (a) Simulation der Fernfelder für verschiedene mittlere Oberflächenneigungswinkel, Vergleich mit dem simulierten Fernfeld ohne Rauheit und Vergleich mit dem gemessenen Fernfeld senkrecht zu den ELO-Streifen. (b) RMSD zwischen Simulation und Messung sowie die simulierte Detektor-LEE als Funktion des mittleren Oberflächenneigungswinkels.

Oberflächenneigungswinkel erreicht die Intensität um $\theta = 0^{\circ}$ ein Maximum. Wird der mittlere Oberflächenneigungswinkel größer, sinkt die Intensität bei $\theta = 0^{\circ}$ und steigt bei $|\theta| =$ 25°, sodass sich zwei Ohren bilden, die den gemessenen ähnlich sehen. Um diese quantitativ zu bewerten, wird hier die RMSD zwischen Simulation und Messung errechnet. Dabei wird sowohl das hier gezeigte Fernfeld senkrecht zu den ELO-Streifen als auch das nicht gezeigte Fernfeld parallel zu den ELO-Streifen berücksichtigt. Der RMSD-Wert sowie die simulierte Detektor-LEE wird als Funktion des mittleren Oberflächenneigungswinkels in Abbildung 3.16b gezeigt. Durch das Einbeziehen von rauen ELO-Void-Seitenwänden steigt die LEE nochmals an und erreicht ein konstantes Niveau von etwa 4,2 % zwischen einem mittleren Oberflächenneigungswinkel von 15° und 75°. Für kleinere Winkel ist die Streuung zu gering und die Detektor-LEE konvergiert zu dem Wert von 3,9 % ohne Rauheit. Für sehr große Winkel steigt die Detektor-LEE weiter an. In diesem Bereich verliert das Rauheitsmodell jedoch seine physikalische Relevanz, da hier die Oberfläche irgendwann nur noch aus sehr steilen Spitzen bestehen müsste (Vergleich 1.1.3). Der RMSD-Wert nimmt von 21 bei 6° mit zunehmendem mittleren Oberflächenneigungswinkel kontinuierlich ab, was einer immer besseren Übereinstimmung zwischen Simulation und Messung entspricht. Das Minimum, also die höchste Übereinstimmung, wird für einen mittleren Oberflächenneigungswinkel von 75° erreicht, wobei der RMSD-Wert für noch größere mittlere Oberflächenneigungswinkel wie die Detektor-LEE rapide zunimmt. Daher wird dieses Minimum, auch im Hinblick auf eine mögliche Schwankung der hier festgehaltenen ELO-Void-Dimensionen, als labil eingestuft. Da bereits ein mittlerer Oberflächenneigungswinkel von 63° charakteristische Ohren zeigt (Abbildung 3.16a), wird dieser Wert als physikalisch sinnvoll erachtet und weiter genutzt.



Abbildung 3.17: Variation der Breite und Höhe der ELO-Voids und den daraus resultierenden Neigungswinkeln der rauen ELO-Void-Seitenflächen zur Waferoberflächennormalen. (a) Simulation der Fernfelder für verschiedene Void-Neigungswinkel und Vergleich mit dem gemessenen Fernfeld senkrecht zu den ELO-Streifen. (b) RMSD zwischen Simulation und Messung sowie die simulierte Detektor-LEE als Funktion des Void-Neigungswinkels.

Aufbauend darauf zeigt Abbildung 3.17 erneut die Variation der ELO-Void-Geometrie, jedoch nun mit rauen ELO-Void-Seitenflächen und rauer ELO-Void-Grundfläche. Die Breite/Höhe der Voids wurde hier zwischen $0,5 \,\mu$ m/ $2,8 \,\mu$ m und $0,7 \,\mu$ m/ $1,6 \,\mu$ m variiert, was einem Neigungswinkel der ELO-Void-Seitenflächen zwischen 5,1° und 12,3° entspricht. Abbildung 3.17a zeigt exemplarisch die simulierten Fernfelder senkrecht und parallel zu den ELO-Streifen für einen Void-Neigungswinkel von 5,1°, 7,8° und 12,3° sowie den Vergleich zu den gemessenen Fernfeldern. Die simulierten Fernfelder parallel zu den ELO-Streifen zeigen keine Unterschiede zwischen den verschiedenen Void-Neigungswinkeln. In jedem Fall stimmt hier der Verlauf der simulierten Fernfelder mit dem gemessenen Fernfeld überein. Im Gegensatz dazu unterscheiden sich die simulierten Fernfelder senkrecht zu den ELO-Streifen. Die beiden Maxima, welche für einen Void-Neigungswinkel von 7,8° gut mit den gemessenen Maxima übereinstimmen, verändern ihre Position mit Änderung des Void-Neigungswinkels. Für kleine Neigungswinkel (hier 5,1°) verschieben sich die Maxima zu ±20° und werden auch intensiver. Für große Neigungswinkel (hier 12,3°) verschieben sich die Maxima zu ±35° und nehmen in ihrer Intensität ab. Hinzu kommt, dass durch diese Verschiebung zwei weitere Maxima sichtbar werden, welche bei allen Void-Neigungswinkeln vermutlich immer bei etwa ±10° liegen. Für kleine Void-Neigungswinkel überlagerten sie sich jedoch mit den Hauptmaxima. Diese Simulation zeigt deutlich, wie empfindlich das Fernfeld gegenüber kleinen Variationen der ELO-Geometrie ist. Der RMSD-Wert sowie die simulierte Detektor-LEE wird als Funktion des Void-Neigungswinkels in Abbildung 3.17b gezeigt. Die Detektor-LEE nimmt im hier simulierten Wertebereich kontinuierlich mit steigendem Void-Neigungswinkel ab. Anders als im Falle der glatten Void-Seitenflächen können



Abbildung 3.18: (a) Vergleich des gemessenen und simulierten Polarwinkel-Fernfelds mit finalem ELO-Void-Modell, jeweils parallel und senkrecht zu den ELO-Streifen und jeweils für eine glatte und eine raue Saphirrückseite. (b) Simuliertes Halbkugel-Fernfeld mit finalem ELO-Void-Modell und glatter Saphirrückseite. (Gemessenes Fernfeld von Anna Susilo, TUB)

nun auch fast senkrecht stehende Seitenflächen die Richtung des Lichts ändern. Die zunehmende Höhe der Seitenwände (kleinerer Neigungswinkel) wirkt sich somit positiv auf die Lichtextraktion aus. Das Minimum des RMSD-Werts liegt bei einem Void-Neigungswinkel von 7° ± 1° und stimmt mit dem aus REM-Aufnahmen bestimmten Void-Neigungswinkel (Vergleich Kapitel 3.4.1) von 8° überein, was für einen richtigen Ansatz dieses Modells spricht.

Abschließend zeigt Abbildung 3.18 die Simulation des Fernfelds einer LED mit dem finalen Modell für die ELO-Voids. In Abbildung 3.18a werden die Fernfelder der Simulation mit den gemessenen Fernfeldern aus Abbildung 3.14 verglichen. Neben der schon gezeigten guten Übereinstimmung im Falle einer glatten Saphirrückseite wird ebenso das Fernfeld im Falle einer rauen Saphirrückseite sehr gut nachgebildet. Somit ist die erste Bedingung vom Anfang dieses Kapitels, die charakteristischen Ohren nachzubilden, erfüllt. Außerdem zeigt es, dass auch das Rauheitsmodell für den Saphir aus Kapitel 3.3 zu richtigen Ergebnissen führt. Auch das simulierte Halbkugel-Fernfeld (Abbildung 3.18b) stimmt in der Form der Ohren gut mit dem gemessenen Halbkugel-Fernfeld aus Abbildung 3.14b überein. Die simulierte Detektor-LEE ändert sich von 4,0 % für eine raue Saphirrückseite zu 4,2 % für eine glatte Saphirrückseite. Dies entspricht einer relativen Änderung von +5 %, welche leicht außerhalb des Fehlerbereichs des Messergebnisses von (0 ± 4) % liegt. Jedoch gibt es auch bei der Simulation neben dem statistischen Fehler aufgrund der Monte-Carlo-Simulationsmethode einen systematischen Fehler der Strahlverfolgung selbst. In den gezeigten Simulationen liegt dieser bei rund 3 %. Der Fehler ergibt sich aus den "verlorenen" Strahlen, über die es durch verschiedene Abbruchbedingungen in der Simulation keine Aussage über Extraktion oder Absorption gibt (Vergleich Kapitel 1.1.2). Somit wird auch die zweite Bedingung, eine etwa gleiche LEE vor und nach der Politur, durch dieses Modell als erfüllt angesehen. Zusätzlich zeigt diese Lichtextraktionssimulation, dass die LEE auf Wafer-Ebene in diesem Fall um etwa 15 % durch die Verwendung einer ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche gesteigert werden kann. Dieser Einfluss der ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche wird ebenfalls in den Kapiteln 4.1.3 und 5.1.1 thematisiert.

3.5 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden die Lichtpfade und Absorptionsverluste in AlGaN-basierten UV-LEDs anhand eines Basismodells zur Simulation der Lichtextraktion vorgestellt, der Reflexionsgrad und komplexe Brechungsindex von formierten n-Kontakten bestimmt sowie ein erweitertes Modell der Lichtextraktionssimulation mit der Nachbildung einer rauen Saphirrückseite und der ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche mithilfe von Fernfeldmessungen validiert. Reflexionsmessungen an einem formierten V/Al/Ni/Au-Kontakt auf Al_{0,66}Ga_{0,34}N:Si ergaben ein Reflexionsgrad des n-Kontakts von 21 % für Wellenlängen zwischen 265 nm und 310 nm. Durch Vergleich mit Transfermatrix-Rechnungen konnte ein Brechungsindex von 1,7 + 2,0 i abgeschätzt werden, welcher im Bereich von Au oder Ni in diesem Wellenlängenbereich liegt. Zur Validierung eines Modells für die Oberflächenrauheit auf Basis der Verteilung der Oberflächenneigungswinkel eines Höhenprofils wurde das Streufernfeld zweier Laser, welche durch eine raue Saphirrückseite strahlen, analysiert. Experiment und Simulationen zeigten eine Intensitätsverteilung im Fernfeld, welche eine wellenlängenabhängige Charakteristik aufwies. In der Simulation wurde diese Wellenlängenabhängigkeit durch Glättung des Höhenprofils mit einem Gaußfilter erreicht, um den Wellencharakter des Lichts korrekt zu beschreiben. Hier lieferte ein Radius des Gaußfilters, der etwa dem 1,5-fachen der Wellenlänge entspricht, die höchste Übereinstimmung von Simulation und Experiment. Die Fernfelder von typischen UVC-LEDs zeigten im Fernfeld auf Wafer-Ebene zwei charakteristische Intensitätsmaxima bei Polarwinkeln um ±25°, welche durch Politur der Saphirrückseite in ihrer Intensität zunahmen und Streuprozessen an den ELO-Voids zuzuordnen waren. Die Geometrie und Grenzflächeneigenschaften dieser ELO-Voids wurden schrittweise in das Simulationsmodell eingebunden, welches schließlich die Fernfelder einer LED mit polierter und nicht polierter Rückseite mit hoher Übereinstimmung reproduzieren konnte. Hierbei zeigte sich, dass die Annahme einer hohen Rauheit der Void-Innenwände entscheidend für die Ausbildung der Intensitätsmaxima ist.

4 Einfluss der aktiven Zone von UVC-LEDs auf die Emissionsleistung

Die Heterostruktur der aktiven Zone hat einen wichtigen Einfluss auf die elektro-optischen Eigenschaften einer LED [60]. Neben dem entscheidenden Kriterium, eine bestimmte Emissionswellenlänge zu erhalten, hat das Design der Quantentöpfe (engl. quantum wells, QWs) und deren Barrieren (engl. quantum barriers, QBs) auch einen Einfluss auf alle drei Faktoren der externen Quanteneffizienz (EQE). Speziell im AlGaN-Materialsystem wird die strahlende Rekombinationseffizienz (engl. radiative recombination efficiency, RRE) maßgeblich durch die Breite der QWs und durch die Bandlückendifferenz zwischen QW und QB – also der "Tiefe" des Quantentopfs – beeinflusst [84–86]. Tiefere QWs erhöhen die Ladungsträgerdichte und somit die RRE. Dem entgegengesetzt führt der "quantum-confined Stark effect" (QCSE) bei zunehmender Tiefe und Breite der QWs zu einer verringerten Überlappung der Ladungsträgerwellenfunktionen, wodurch die RRE reduziert wird. Die Ladungsträgerinjektionseffizienz (engl. charge carrier injection efficiency, CIE) wird vor allem von der Anzahl der QWs und dem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs beeinflusst [60, 87]. Letzteres bestimmt die Wahrscheinlichkeit für das Entweichen von Ladungsträgern aus den QWs sowie die Potentialbarriere zur nachfolgenden Elektronensperrschicht (engl. electron blocking layer, EBL) und damit den Elektronenleckstrom. Die Lichtextraktionseffizienz (LEE) wird in der Weise beeinflusst, dass sich der optische Polarisationsgrad (engl. degree of polarization, DoP) der aktiven Zone je nach Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QWs und AlGaN-QBs sowie der Breite und Verzerrung der QWs ändert [44, 88–91]. Da deutlich weniger TM-polarisiertes Licht aus der LED extrahiert werden kann als TE-polarisiertes Licht, führt eine Änderung des DoP zu einer Änderung der LEE (Vergleich Kapitel 3.1).

In den folgenden zwei Unterkapiteln sollen diese Vorüberlegungen anhand von zwei verschiedenen Probenserien näher untersucht werden. In Kapitel 4.1 wird zunächst die in der Einleitung erwähnte Effizienzabnahme von LEDs zu kürzeren Emissionswellenlängen untersucht, indem der Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QWs und in den AlGaN-QBs systematisch variiert wird [15]. In Kapitel 4.2 wird der Einfluss des Al-Soffmengenanteils in den AlGaN-Barrieren der aktiven Zone auf die elektro-optischen Eigenschaften von UVC-LEDs mit einer Emissionswellenlänge um 268 nm untersucht [42].



4.1 Ursache der Effizienzabnahme von LEDs mit Emissionswellenlängen unter 265 nm

In der Einleitung dieser Arbeit wurden eine Vielzahl von Veröffentlichungen gezeigt, die alle darauf hindeuten, dass es ab etwa 270 nm zu einer starken Abnahme der EQE zu kürzeren Wellenlängen für AlGaN-basierte LEDs kommt. Die Ursache für diese Abnahme könnte in allen drei Teileffizienzen der EQE zu finden sein. Für LEDs mit kürzeren Emissionswellenlängen muss zwangsläufig der Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QWs, in den AlGaN-QBs und auch im AlGaN-EBL erhöht werden. Dem ist jedoch mit AlN im EBL eine Grenze gesetzt, was sich in einer sinkenden CIE für kurzwellige LEDs widerspiegeln könnte. Des Weiteren wird es zum Wechsel der dominanten optischen Polarisation der Emission kommen. Während GaN TE-polarisierte Emission zeigt, emittiert AlN TM-polarisiertes Licht [37]. In diesem Kapitel soll der Einfluss des Al-Stoffmengenanteils in den AlGaN-QWs und AlGaN-QBs auf die elektro-optischen Eigenschaften von UVC-LEDs mit einer Emissionswellenlänge zwischen 218 nm und 263 nm untersucht werden. Hierbei werden im Speziellen die Emissionswellenlänge, die optische Polarisation, die Emissionsleistung und die EQE gemessen. Die Messergebnisse werden dann mit Bandstruktur- und Raytracing-Simulationen verglichen, diskutiert und so Rückschlüsse auf die LEE, IQE und EQE gezogen.

Die UVC-LEDs wurden mittels MOVPE auf ELO-AlN/Saphir-Templates abgeschieden¹. Die Heterostruktur wird schematisch in Abbildung 4.1 dargestellt und besteht aus einer $Al_{0,90}Ga_{0,10}N$:Si- oder $Al_{0,95}Ga_{0,05}N$:Si-Stromverteilungsschicht, einer aktiven Zone mit drei

¹ Die LED-Heterostruktur wurde von Frank Mehnke, TUB, hergestellt. Die Templates wurden von Sylvia Hagedorn, FBH, und Arne Knauer, FBH, hergestellt.

Emissionswellen	länge	218 nm	222 nm	228 nm	232 nm	239 nm	249 nm	263 nm
Quantentöpfe	x	0,86	0,82	0,77	0,74	0,68	0,59	0,47
Barrieren	у	0,97	0,93	0,88	0,85	0,80	0,71	0,60
n-Seite	Ζ	0,95	0,95	0,90	0,90	0,90	0,90	0,90

Tabelle 4.1: Nomineller Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-Quantentöpfen (x) und den -Barrieren (y) der aktiven Zone sowie in der AlGaN:Si-n-Seite (z) der Heterostruktur für LEDs mit einer Emissionswellenlänge zwischen 218 nm und 263 nm.

1 nm dünnen Al_xGa_{1-x}N-QWs mit 5 nm breiten Al_yGa_{1-y}N-QBs, einem 6 nm breiten AlN-EBL, einem 25 nm kurzperiodischen Al_{0,80}Ga_{0,20}N:Mg/Al_{0,70}Ga_{0,30}N:Mg-Übergitter, einem 75 nm Al_{0,37}Ga_{0,63}N:Mg/Al_{0,20}Ga_{0,80}N:Mg-Übergitter und einer 40 nm GaN:Mg-Kontaktschicht. Der Al-Stoffmengenanteil in den Al_xGa_{1-x}N-QWs und Al_yGa_{1-y}N-QBs wurde für 0,47 < x < 0,86 und 0,60 < y < 0,97 bei einer konstanten Bandlückendifferenz von 325 meV variiert und ist in Tabelle 4.1 aufgelistet. Alle Wafer wurden dann mit Standard-Prozesstechniken zu UVC-LEDs mit 200 × 200 µm² großen Mesa-Strukturen prozessiert¹. Die für Bandstruktursimulationen genutzten Materialparameter für GaN und AlN sind in Referenz [42] zu finden.

4.1.1 Messung der Emissionswellenlänge und -leistung

Abbildung 4.2 zeigt die Ergebnisse der EL-Messungen an prozessierten LEDs auf Wafer-Ebene mit einem Al-Stoffmengenanteil zwischen x = 0,47 und x = 0,86 in den Al_xGa_{1-x}N-QWs und zwischen y = 0,60 und y = 0,97 in den Al_yGa_{1-y}N-QBs, gemessen durch das Substrat². Zur besseren Lesbarkeit wird im Folgenden nur noch der x-Wert für den QW genannt. Damit folgt auch immer der korrespondierende y-Wert der QBs. In Abbildung 4.2a sind die normierten Spektren dieser LEDs bei einer Stromstärke von 20 mA zu sehen. Durch die Änderung des Al-Stoffmengenanteils in den QWs und den QBs schiebt die zentrale Emissionswellenlänge von 263 nm für x = 0,47 zu 218 nm für x = 0,86, was durch die sich ändernde Bandlückenenergie zu erklären ist. Die Halbwertsbreite (engl. full width at half maximum, FWHM) variiert dabei zwischen 200 meV und 270 meV. Für die LED mit $x \ge 0.74$ ist um 370 nm sowie für $x \ge 0.82$ zwischen 230 nm und 290 nm ein zunehmender Anteil an Nebenlumineszenz zu erkennen, was für defekt-assoziierte Rekombinationsmechanismen oder Rekombinationen in anderen Teilen der LED mit kleinerer Bandlücke spricht [60]. Die Emission um 370 nm kann einem Übergang von einer geladenen Stickstoffvakanz zu einem Magnesium-Akzeptor $(V_N^{3+} \rightarrow Mg^0)$ im Al_{0,37}Ga_{0,63}N:Mg/Al_{0,20}Ga_{0,80}N:Mg-Übergitter zugeordnet werden [92]. Dies könnte auf einen Elektronenleckstrom und damit eine abnehmende CIE mit steigendem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QWs hindeuten. In Abbildung 4.2b sind die Kennlinien der Emissionsleistung dieser LEDs zu sehen, dabei ist auf die

¹ Die Wafer wurden von Luca Sulmoni, TUB, prozessiert.

² Die Elektrolumineszenzmessungen zur Bestimmung der Emissionswellenlänge und Emissionsleistung wurden von Frank Mehnke, TUB, durchgeführt.



Abbildung 4.2: EL-Messungen an prozessieren LEDs mit Al_xGa_{1-x}N-QWs und Al_yGa_{1-y}N-QBs für 0,47 < x < 0,86 und 0,60 < y < 0,97. (a) Normierte Emissionsspektren bei 20 mA. Zu beachten ist hier die sich ändernde Skalierung bei 4,4 eV. (b) Typische Kennlinien der Emissionsleistung anhand der dominanten Emissionswellenlänge. Zu beachten sind die unterschiedlichen Wertebereiche. (Messungen von Frank Mehnke, TUB)

stark unterschiedliche Achsenskalierung zu achten. Alle Kennlinien zeigen einen ähnlichen Verlauf, also eine steigende Emissionsleistung mit steigender Stromstärke und einem verschieden starken thermischen Überrollen bei höheren Strömen. Trotzdem unterschieden sich die absoluten Emissionsleistungen deutlich. Während bei 20 mA für x = 0,47 eine Emissionsleistung von 600 µW gemessen wird, erreicht die LED mit x = 0,74 nur 68 µW und mit x = 0,86 nur noch 0,44 µW, also mehr als drei Größenordnungen weniger. Hinzu kommt, dass die Emissionsleistung für x = 0,86 teilweise die Nebenlumineszenz enthält. Nur etwa 40 % der Emissionsleistung wird aus dem QW emittiert, was bei der Bestimmung der EQE berücksichtigt wird. Die EQE ändert sich demnach bei einer Stromstärke von 20 mA von 0,6 % (x = 0,47) über fast vier Größenordnungen auf $1,3 \cdot 10^{-4}$ % (x = 0,86). Die starke Abnahme der EQE zu kürzeren Wellenlängen ist somit auch in dieser Serie eindeutig zu erkennen. Die Ursachen sollen in den folgenden Abschnitten aufgeschlüsselt werden. Der Fokus wird hierbei auf die Bestimmung des DoP und der LEE gelegt.

4.1.2 Simulation und Messung der optischen Polarisation

Wie im Grundlagenkapitel 1.2.1 beschrieben wurde, haben die drei Subvalenzbänder (Γ_9 , Γ_{7+} , Γ_{7-}) in AlGaN je nach Zusammensetzung eine unterschiedliche energetische Position und Oszillatorstärke. Mittels Bandstruktursimulationen wurden die Energiezustände und Wellenfunktionen für die Elektronen und Löcher für einen 1 nm dünnen Al_xGa_{1-x}N/Al_yGa_{1-y}N-Quantentopf für 0,40 < *x* < 0,88 und 0,54 < *y* < 0,99 berechnet¹. Abbildung 4.3 zeigt die berechnete Grundzustandsenergie $E_0(\Gamma_{7+})$ und $E_0(\Gamma_{7-})$ relativ zum

¹ Die *k*·*p*-Bandstruktursimulationen wurden von Christoph Reich, TUB, durchgeführt.



Abbildung 4.3: Berechnete energetische Position der Grundzustände $E_0(\Gamma_{7+})$ und $E_0(\Gamma_{7-})$ relativ zum Grundzustand $E_0(\Gamma_9)$ in den drei Subvalenzbändern und farbkodierte optische Polarisation von +1 = TE (rot) nach -1 = TM (blau) für Übergänge vom Elektrongrundzustand zum jeweiligen Lochgrundzustand als Funktion des Al-Stoffmengenanteils im AlGaN-QW bzw. in den AlGaN-QBs. (Simulation von Christoph Reich, TUB)

Grundzustand $E_0(\Gamma_9)$ als Funktion des Al-Stoffmengenanteils im AlGaN-QW (bzw. den AlGaN-QBs). Die optische Polarisation für Übergänge vom Leitungsband- (LB) Grundzustand zum Valenzband- (VB) Grundzustand $E_0(\Gamma_{7+})$, $E_0(\Gamma_{7-})$ oder $E_0(\Gamma_9)$ ist farbkodiert von rot (TE) nach blau (TM). Im Folgenden wird vereinfacht immer von TE- oder TMpolarisierten Bändern gesprochen, wobei der Übergang vom Leitungsband zu einem dieser Lochbänder gemeint ist. Für einen Al-Stoffmengenanteil von x < 0,62 liegen die obersten beiden TE-polarisierten Eigenzustände $E_0(\Gamma_9)$ und $E_0(\Gamma_{7+})$ mehr als 40 meV höher als der TM-polarisierte Eigenzustand $E_0(\Gamma_{7-})$. Daraus folgt, dass optische Übergänge dieser QWs durch eine hohe Besetzung von Γ_9 und Γ_{7+} dominant TE-polarisiert sind. Für 0,62 < x < 0,69 ändert Γ_{7+} seine Oszillatorstärke und die Polarisation ändert sich von TE zu TM. Da jedoch der energetische Abstand beider oberen Grundzustände nahezu unverändert bleibt, nimmt der Anteil an TM-polarisiertem Licht zu, nämlich durch Übergänge vom LB zu Γ_{7+} . Bei x = 0,69 kreuzt $E_0(\Gamma_{7+})$ den weiterhin TE-polarisierten Eigenzustand $E_0(\Gamma_9)$. Der tiefste Grundzustand bleibt weiterhin $E_0(\Gamma_{7-})$, wobei sich die Oszillatorstärke von Γ_{7-} ändert und Übergänge mit diesem Band somit einen Wechsel der Polarisation von TM nach TE erfahren. Beides führt zu einer gemischten TE- und TM-polarisierten Emission, also einer nahezu unpolarisierten Emission, in der Nähe des Kreuzungspunkts. Für x > 0,69 ist $E_0(\Gamma_{7+})$, der nun TM-polarisiert ist, der oberste Grundzustand, während der energetische Abstand zu den TE-polarisierten Grundzuständen $E_0(\Gamma_9)$ und $E_0(\Gamma_{7-})$ mit zunehmendem Al-Stoffmengenanteil im AlGaN-QW steigt. Daraus folgt, dass optische Übergänge dieser QWs durch eine hohe Besetzung von Γ_{7+} dominant TM-polarisiert sind.

Zur experimentellen Überprüfung der eben diskutierten Änderung der optischen Polarisation werden Spektren aus der Mesa-Facette von den in Abschnitt 4.1.1 vorgestellten Proben aufgenommen. Abbildung 4.4 zeigt polarisationsaufgelöste Spektren von prozessierten LEDs auf Wafer-Ebene mit einem Al-Stoffmengenanteil zwischen x = 0,47 und x = 0,86 in den Al_xGa_{1-x}N-QWs und zwischen y = 0,60 und y = 0,97 in den Al_yGa_{1-y}N-QBs. Die Spektren für TE- und TM-polarisiertes Licht wurden dabei proportional auf die Maximalintensität der



Abbildung 4.4: Polarisationsaufgelöste Spektren aus der Mesa-Facette von LEDs mit verschiedenen Al-Stoffmengenanteilen (Dezimalzahl in den Ecken oben rechts) in den AlGaN-QWs und in den AlGaN-QBs. Die Intensität des TE- (rot) und TM- (blau) polarisierten Spektrums ist proportional auf die Maximalintensität der Summe beider Spektren (grau) normiert.

Summe beider Spektren normiert. Die Emissionswellenlänge des Summenspektrums ändert sich mit steigendem Al-Stoffmengenanteil in den QWs und QBs von 264 nm nach 220 nm während die FWHM zwischen 8 nm und 12 nm liegt. Die Spektren für $x \ge 0.74$ sind dominant TM-polarisiert, die Spektren für $x \le 0.59$ sind dominant TE-polarisiert und das Spektrum für x = 0.68 ist nahezu unpolarisiert. Zusätzlich zeigt letzteres einen Abstand von 4 nm zwischen den Maxima der TE- und TM-polarisierten Emission. Eine mögliche Erklärung wäre, dies auf lokale Fluktuationen des Al-Stoffmengenanteils im AlGaN-QW zurückzuführen. Nahe des Kreuzungspunkts von $E_0(\Gamma_9)$ und $E_0(\Gamma_{7+})$ können kleine Änderungen in der QW-Zusammensetzung die Besetzungswahrscheinlichkeit und damit die optische Polarisation signifikant beeinflussen. Regionen mit einem etwas geringeren Al-Stoffmengenanteil würden eine längere Emissionswellenlänge und mehr TE-polarisierte Emission ausweisen. Regionen mit einem etwas höheren Al-Stoffmengenanteil würden eine kürzere Emissionswellenlänge und mehr TM-polarisierte Emission aufweisen. Dies würde zu einer scheinbaren Separation des TE- und des TM-polarisierten Spektrums führen. Auch die Spektren mit x < 0.68 zeigen eine leichte Separation zwischen den Maxima der TE- und TMpolarisierten Emission von bis zu 2 nm (was bis zu 36 meV entspricht). Auch die Berechnungen aus Abbildung 4.3 deuten aufgrund des energetischen Abstands von $E_0(\Gamma_{7-})$ (TM) zu $E_0(\Gamma_9)$ und $E_0(\Gamma_{7+})$ (beide TE) von z. B. 55 meV (x = 0,59) oder 110 meV (x = 0,47) auf eine längere Emissionswellenlänge der dominanten Polarisation hin. Für x > 0,68 ist eine solche Separation hingegen nicht zu beobachten. Möglicherweise kann dies auch wieder durch Fluktuationen der QW-Zusammensetzung erklärt werden. Regionen mit einem etwas geringeren Al-Stoffmengenanteil würden eine längere Emissionswellenlänge und mehr TEpolarisierte Emission ausweisen. Das würde zu einer erhöhten TE-polarisierten Emission an der langwelligen Seite des Emissionsspektrums führen, was der Aufspaltung aufgrund der energetischen Distanz zwischen $E_0(\Gamma_{7+})$ (TM) und $E_0(\Gamma_9)$ (TE) entgegenwirkt.



Abbildung 4.5: Aus den EL-Messungen berechneter (blaue Punkte) und aus der Simulation bestimmter (hellblaue Linie) Polarisationsgrad als Funktion des Al-Stoffmengenanteils in den AlGaN-QWs. Zusätzlich ist die gemessene Emissionswellenlänge auf der oberen Achse angegeben. Die Fehlerbalken repräsentieren die Standardabweichung der gemessenen Werte und die erwartete Abweichung durch Lichtstreuprozesse. (Simulation von Christoph Reich, TUB)

Zur Auswertung des gemessenen Polarisationsgrads werden die TE- und TM-polarisierten Spektren integriert und der DoP nach Gleichung 2.1 berechnet. Der simulierte DoP wird aus den Überlappungsintegralen der Elektron- und Lochwellenfunktionen, den Interband-Matrix-Elementen und der Besetzung der verschiedenen Bänder nach der Boltzmann-Verteilung berechnet (Vergleich Kapitel 1.2.1). Abbildung 4.5 zeigt den gemessenen DoP und den simulierten DoP als Funktion des Al-Stoffmengenanteils in den Al_xGa_{1-x}N-QWs. Der simulierte DoP sinkt kontinuierlich von +0,94 bei x = 0,47 nach -0,95 bei x = 0,86 mit einem Übergang von dominant TE- zu dominant TM-polarisiertem Licht (DoP = 0) bei x = 0,66. Der gemessene DoP sinkt von +0,74 bei x = 0,47 nach -0,70 bei x = 0,86 mit einem Übergang bei x = 0.68. Während der Trend von Simulation und Messung gut übereinstimmt, liegt der Übergang (DoP = 0) im Experiment bei einem etwas höheren Al-Stoffmengenanteil im QW als bei der Simulation. Diese Abweichung ist höchstwahrscheinlich Lokalisierungseffekten in Ga-reichen Regionen im QW, wie es auch in nicht-polaren und semi-polaren InGaN/GaN-QWs beobachtet wurde [93], und der Genauigkeit der Bestimmung des Al-Stoffmengenanteils in den AlGaN-QWs und den AlGaN-QBs mit 1 % bis 2 % zuzuschreiben. Außerdem sind die absoluten Werte des gemessenen DoP für hohe TE- (x < 0,56) und hohe TM- (x > 0.80) polarisierte Emission kleiner als die jeweils simulierten absoluten Werte. Wie im nächsten Abschnitt noch gezeigt wird, ist diese Abweichungen des gemessenen DoP auf Lichtstreuprozesse an den gebrochenen Facetten, den Hohlräumen in der ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche und an der rauen Saphirrückseite zurückzuführen.

4.1.3 Simulation der Lichtextraktionseffizienz

In diesem Abschnitt werden Raytracing-Simulationen unter zwei Aspekten durchgeführt. Zum einen soll analysiert werden, wie der Zusammenhang zwischen dem "realen" DoP der aktiven Zone und dem tatsächlich im Experiment nachweisbaren DoP ist. Zum anderen wird dann unter Variation der Emissionswellenlänge und des zuvor bestimmten DoP die LEE der LEDs simuliert.



Abbildung 4.6: Simulation des systematischen Fehlers bei der Messung der optischen Lichtpolarisation. Gezeigt wird die Abweichung $\Delta P = P_{\theta} - P_{AZ}$ des nachweisbaren DoP (P_{θ}) zum DoP der aktiven Zone (P_{AZ}) als Funktion von P_{AZ} für den Fall, dass die aktive Zone direkt betrachtet wird oder das Licht mit einer Heterostruktur auf einem planaren AlN/Saphir- bzw. ELO-AlN/Saphir-Template wechselwirkt.

Durch Lichtstreuprozesse an den Oberflächen und Grenzflächen des Wafers kann sich die Polarisation des Lichts ändern. Der Messaufbau bedingt außerdem, dass nicht nur Licht, welches parallel zur QW-Ebene aus der Mesa-Facette emittiert wird, detektiert wird, sondern über die Sammellinse immer Licht aus einem gewissen Bereich um die Mesa-Facette und einem gewissen Öffnungskegel gemessen wird (Vergleich Kapitel 2.1.2). Zur Abschätzung dieses systematischen Fehlers des im Versuchsaufbau nachweisbaren DoP (P_{θ}) wird der DoP der aktiven Zone (P_{AZ}) zwischen –1,0 und +1,0 variiert und P_{θ} für einen Öffnungswinkel von $2\theta = 10^{\circ}$ simuliert. Abbildung 4.6 zeigt die Abweichung $\Delta P = P_{\theta} - P_{AZ}$ als Funktion von PAZ für den Fall, dass die aktive Zone direkt (ohne Heterostruktur) betrachtet wird oder das Licht mit einer Heterostruktur auf einem planaren AlN/Saphir- bzw. einem ELO-AlN/Saphir-Template wechselwirkt. Die ELO-Streifen verlaufen im letzteren Fall parallel zur optischen Achse des Aufbaus. Wird die aktive Zone direkt betrachtet, ist $\Delta P = 0$ für $P_{AZ} = \pm 1,0$ und steigt bis auf +0,01 für $P_{AZ} = -0,2$ an. Aufgrund der unterschiedlichen Abstrahlcharakteristiken der aktive Zonen für TE- bzw. TM-polarisiertes Licht sowie des nicht verschwindend kleinen Öffnungswinkels, in dem die Stahlen analysiert werden, ist der Anteil an nachweisbaren TE-polarisierten Stahlen etwas höher als der Anteil der nachweisbaren TM-polarisierten Strahlen. Wird P_{θ} für eine Heterostruktur auf einem planaren AlN/Saphir-Template simuliert, so ist auch hier $\Delta P \approx 0$ für $P_{AZ} = \pm 1,0$, steigt aber bis auf +0,04 für $P_{AZ} = -0.4$ an. In diesem Fall wäre hier laut den Simulationen mehr TE-polarisiertes Licht nachweisbar. Eine Vermutung wäre, dass die Extraktionswahrscheinlichkeiten von TE- und TM-polarisiertem Licht auch aus der Mesa-Facette leicht unterschiedlich sind und die von TE-polarisiertem Licht höher ist als die von TM-polarisiertem Licht. Wird P_{θ} für eine Heterostruktur auf einem ELO-AlN/Saphir-Template simuliert, so ist $\Delta P > 0$ für $P_{AZ} < +0.3$ und $\Delta P < 0$ für $P_{AZ} > +0.3$. Das heißt, selbst für eine aktive Zone mit rein TE- bzw. TMpolarisierter Emission ist der nachweisbare Polarisationsgrad nur $P_{\theta} = +0.85$ (TE) bzw. $P_{\theta} = -0.94$ (TM) und der Betrag des gemessenen DoP wird laut den Simulationen systematisch unterschätzt. Das lässt vermuten, dass Lichtstreuprozesse an der gebrochenen Facette, den Hohlräumen in der ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche und an der rauen Substratrückseite auftreten, welche die Polarisation des Lichts ändern. Der systematische Fehler, der sich



Abbildung 4.7: Simulierte Verteilung der extrahierten Strahlungsintensität als Funktion des Emissionswinkels innerhalb der aktiven Zone (0° = Richtung Substrat, 90° = QW-Ebene) für eine LED auf einem planaren AlN/Saphir-Template (hellblau), einem ELO-AlN/Saphir-Template (violett) und für die Abstrahlcharakteristik der aktiven Zone selbst (grau). (a) Intensitätsverteilung für eine 264 nm LED mit dominant TE-polarisierter Emission. (b) Intensitätsverteilung für eine 220 nm LED mit dominant TM-polarisierter Emission.

dadurch ergibt, wurde bereits in Form der asymmetrischen Fehlerbalken in Abbildung 4.5 berücksichtigt. Die tatsächlichen Lichtstreumechanismen innerhalb jeder einzelnen LED können allerdings nicht individuell quantifiziert werden. Diese Simulation hat jedoch gezeigt, dass der systematische Fehler des gemessenen DoP jeweils genau in Richtung des über Bandstruktursimulation berechneten DoP zeigt (Abbildung 4.5). Somit wird in den nachfolgenden Simulationen zur LEE der berechnete DoP aus den Bandstruktursimulation für die aktive Zone verwendet.

Für die Raytracing-Simulation der LEE unter Berücksichtigung der Emissionswellenlänge und des DoP wird die Heterostruktur auf folgende optisch relevante Schichten reduziert: Auf das 430 µm dicke Saphir-Substrat und die 7,4 µm dicke ELO-AlN-Basisschicht folgt die *n*-Seite mit 1325 nm Al_{0,90}Ga_{0,10}N bzw. Al_{0,95}Ga_{0,05}N, eine 60 nm dicke aktive Zone mit einer effektiven AlGaN-Zusammensetzung aus QWs und QBs in Abhängigkeit der jeweiligen Probe und eine *p*-Seite mit 30 nm Al_{0,88}Ga_{0,12}N, 75 nm Al_{0,28}Ga_{0,72}N und 40 nm GaN. Die Mesa reicht 200 nm in die *n*-Seite hinein und für den *n*-Kontakt wird der Brechungsindex 1,7 + 2,0 *i* verwendet (Vergleich Kapitel 3.2). Die Simulationen beinhalten die Wellenlängendispersion der Brechungsindizes [57], die Absorption in der aktiven Zone (10³ cm⁻¹) [32], der *n*-Seite (10 cm⁻¹) [33] und der *p*-Seite, die als vollständig absorbierend angenommen wird.

Abbildung 4.7a zeigt die simulierte extrahierte Strahlungsintensitätsverteilung (Vergleich Kapitel 3.1.2) als Funktion des Emissionswinkels θ (0° = Richtung Substrat, 90° = QW-Ebene) innerhalb der aktiven Zone für eine LED mit einer Emissionswellenlänge von 264 nm und einem DoP von +0,94. Abbildung 4.7b zeigt dasselbe für eine LED mit einer

Emissionswellenlänge von 220 nm und einem DoP von -0,95. Hierbei wird Lichtextraktion von LEDs mit einer planaren AlN/Saphir-Grenzfläche und einer ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche berücksichtigt und mit der Strahlungsverteilung der aktiven Zone verglichen. Für eine LED mit dominant TE-polarisierter Emission (Abbildung 4.7a) ist die Strahlung größtenteils parallel zur c-Achse gerichtet. Die Strahlungsintensität in der aktiven Zone steigt schnell für größere Emissionswinkel und erreicht einen fast konstanten Wert von $7 \cdot 10^{-3}$ /° für $\theta > 40^{\circ}$. Wie in Kapitel 3.1 gezeigt wurde, ist der Lichtfluchtkegel für eine idealisierte Struktur etwa 22°. Für eine LED auf planarem AlN/Saphir mit rauer Saphirrückseite wird dieser Fluchtkegel verbreitert. Durch das geänderte Reflexionsvermögen der Saphir/Luft-Grenzfläche sinkt die Lichtextraktion für $\theta < 22^{\circ}$ und steigt für $\theta > 22^{\circ}$, was insgesamt zu einer LEE von 4,4 % führt. Für eine LED auf ELO-AlN/Saphir kommen zusätzliche Reflexionen an den ELO-Voids hinzu. Auch dies führt zu einer reduzierten Lichtextraktion für kleine Winkel ($\theta < 30^\circ$), aber zu einer zusätzlichen Lichtextraktion bis hin zu 60°, was insgesamt zu einer LEE von 4,9 % führt. Die ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche hat bei einer dominant TE-polarisierten Abstrahlung einen relativ geringen Einfluss auf die LEE, da bereits ein hoher Anteil an Licht in Richtung des Substrats emittiert wird. Für eine LED mit dominant TM-polarisierter Emission ist die Strahlungsintensität der aktiven Zone für kleine Winkel relativ gering und steigt kontinuierlich zu größeren Winkeln bis auf $13 \cdot 10^{-3}$ /° bei $\theta =$ 90°. Für eine LED auf planarem AlN/Saphir mit rauer Saphirrückseite ist die Verteilung der Strahlungsintensität ähnlich zu der TE-polarisierten LED, aber mit einer deutlich kleineren Gesamtintensität. Durch die Änderung im Abstrahlungsprofil reduziert sich die LEE auf 0,8 %. Für eine LED auf ELO-AlN/Saphir gibt es wieder zusätzliche Reflexionen an der ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche, die zu einer leicht reduzierten Lichtextraktion für $\theta < 33^\circ$, aber einer weitaus größeren Erhöhung der Lichtextraktion für $33^{\circ} < \theta < 75^{\circ}$ führt, was insgesamt in einer LEE von 1,9 % resultiert¹. Der Effekt einer Lichtextraktionserhöhung durch die ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche ist bei einer TM-polarisierten LED also weitaus größer. Durch die hauptsächlich in die QW-Ebene gerichtete Emissionsverteilung wird die Wahrscheinlichkeit erhöht, dass Lichtstrahlen mit den Voids im ELO-AlN/Saphir interagieren und so potentiell ausgekoppelt werden könnten. Die Änderung der LEE für LEDs auf einem ELO-AlN/Saphir-Template von 4,9% (dominant TE-polarisiert) nach 1,9 (dominant TMpolarisiert) ist vergleichbar mit FDTD-Simulationen von RYU et al. [32], bei denen sich die LEE für strukturierte AlGaN-Basisschichten von 6 % (TE) auf 2,5 % (TM) ändert.

4.1.4 Aufteilung der EQE in LEE, RRE und CIE

Aus den Emissionsleistungen und Spektren von Abschnitt 4.1.1 sowie den Simulationen zur Lichtextraktion aus Abschnitt 4.1.3 kann die EQE berechnet und die Detektor-LEE der

¹ Der größere Grenzwinkel von 75° bei der LED mit λ = 220 nm gegenüber 60° bei der LED mit λ = 264 nm ergibt sich aus dem reduzierten Brechungsindexunterschied zwischen aktiver Zone und der ELO-AlN-Schicht.


Abbildung 4.8: EQE, Detektor-LEE, RRE und CIE von LEDs bzw. MQWs als Funktion der Emissionswellenlänge. Die EQE ergibt sich aus den QW-Emissionsleistungen der LEDs aus EL-Messungen. Die Detektor-LEE wurde mithilfe des errechneten DoP simuliert und berücksichtigt die Detektionsfläche und den Abstand der Photodiode. Die RRE wurde über temperaturabhängige PL-Messungen bestimmt. Die CIE ergibt sich als Funktion der Trendlinien von EQE, Detektor-LEE und RRE. (Messung der EQE von Frank Mehnke, TUB, und Messung der RRE von Bettina Belde, TUB)

Probenserie bestimmt werden. Zur Berechnung der EQE wurde von mindestens neun LEDs je Probe der Photostrom und die Spektren bei einer Stromstärke von 20 mA gemessen und die QW-Emissionsleistung bestimmt. Die Detektor-LEE wurde anhand der Emissionswellenlänge und des simulierten DoP bestimmt und berücksichtigt die Lichtstreuung an der ELO-AIN/Saphir-Grenzfläche sowie die begrenzte Detektionsfläche und den Abstand der Photodiode. Des Weiteren kann mittels temperaturabhängigen Photolumineszenz- (PL) Messungen an Proben mit AlGaN-Mehrfachquantenfilmen (engl. *multiple quantum wells,* MQW) mit ähnlicher Zusammensetzung der QWs und QBs die RRE bestimmt werden¹. Dadurch kann die EQE in LEE, RRE und CIE aufgeteilt werden.

Abbildung 4.8 zeigt die EQE, Detektor-LEE und RRE als Funktion der Emissionswellenlänge λ zwischen 210 nm und 270 nm. Aus den Trendlinien von EQE, Detektor-LEE und RRE kann außerdem eine mögliche Funktion der CIE abgeschätzt werden, welche ebenfalls als Trendlinie dargestellt ist. Die EQE beträgt 0,6 % bei λ = 263 nm, fällt auf 0,07 % bei λ = 232 nm ab und sinkt dann etwa alle 5 nm um eine Größenordnung weiter auf 1,3 · 10⁻⁴ % bei λ = 218 nm. Die Detektor-LEE beträgt 3,6 % bei λ = 240 nm ab und erreicht schließlich für $\lambda \leq 223$ nm einen Wert von 1,3 %. Die gemessene RRE erhöht sich von 8 % bei λ = 226 nm auf 18 % bei λ = 243 nm, fällt um mehr als eine Größenordnung auf 0,5 % bei λ = 225 nm ab und bleibt dann konstant für kürzere Emissionswellenlängen. Entgegen der Messung wird eine konstante Trendlinie für die REE für λ > 245 nm angesetzt. Aufgrund der nichtresonanten Anregung bei den Photolumineszenzmessungen zur Bestimmung der REE muss davon ausgegangen werden, dass die REE stark fehlerbehaftet ist [94]. Der resultierende Trend der CIE zeigt ein konstantes Niveau von ≈ 90 % für 270 nm > λ > 230 nm und eine starke Abnahme für λ < 230 nm auf unter 1 % für λ < 217 nm. Ob eine CIE von ≈ 90 %

¹ Die temperaturabhängigen Photolumineszenzmessungen wurden von Bettina Belde, TUB, durchgeführt.

für diese Heterostruktur realistisch ist, kann nicht abschließend gesagt werden. Drift-Diffusions-Simulationen an ähnlichen LEDs mit $\lambda = 268$ nm in Kapitel 4.2.4 zeigen, dass die CIE einen Wert von bis zu 95% erreichen könnte. Eine schnelle Abnahme der CIE für $\lambda < 226$ nm ist aber durchaus realistisch, da die AlGaN-QBs dann einen Al-Stoffmengenanteil von mehr als 90% haben und eine effiziente Potentialbarriere zum AlN-EBL nicht mehr gegeben ist. Außerdem entsteht für die Löcher für $\lambda < 226$ nm eine Potentialzunahme vom *p*-dotierten Al_{0,80}Ga_{0,20}N:Mg/Al_{0,70}Ga_{0,30}N:Mg-Übergitter zu den AlGaN-QBs und auch zu den AlGaN-QWs, was die Injektion der Löcher deutlich reduzieren wird. Gestützt wird dies durch die zunehmende Nebenlumineszenz bei den Emissionsspektren der LED mit $\lambda < 230$ nm (Vergleich Kapitel 4.1.1).

Der Verlauf der EQE kann somit in drei Wellenlängenbereiche aufgeteilt werden: Zwischen 270 nm und etwa 239 nm wird die leichte Abnahme der EQE von 0,6 % auf 0,3 % größtenteils durch die Abnahme der Detektor-LEE von 3,6 % auf 2,5 % verursacht, während die RRE nur leicht und die CIE gar nicht abnimmt. Zwischen etwa 239 nm und etwa 226 nm wird die stärkere Abnahme der EQE von 0,3 % auf 0,02 % sowohl durch die weiter sinkende Detektor-LEE von 2,5 % auf 1,5 % als auch durch eine nun mehr als eine Größenordnung abnehmende RRE verursacht. Für kürzere Emissionswellenlängen unter 226 nm wird die weiter abnehmende EQE hauptsächlich durch eine nun schnell sinkende CIE dominiert, während Detektor-LEE bzw. RRE nahezu konstant auf 1,3 % bzw. 0,5 % bleiben.

4.2 Einfluss der Barrierenhöhe der AlGaN-Quantentöpfe auf die IQE und LEE

Wie eingangs erwähnt, können die Barrieren der aktiven Zone die CIE, REE und auch die LEE maßgeblich beeinflussen. In diesem Kapitel soll der Einfluss des Al-Stoffmengenanteils in den AlGaN-QBs auf die elektrischen und optischen Eigenschaften von UVC-LEDs mit einer Emissionswellenlänge um 268 nm untersucht werden. Hierbei werden im Speziellen die Emissionswellenlänge, die optische Polarisation und die Emissionsleistung gemessen¹. Die Messergebnisse werden dann mit Bandstruktur-, Drift-Diffusions- und Raytracing-Simulationen verglichen und diskutiert². Die UVC-LEDs wurden mittels MOVPE auf ELO-AlN/Saphir-Templates abgeschieden³. Die Heterostruktur besteht aus einer Al_{0,8}Ga_{0,2}N:Si-Stromverteilungschicht, einer aktiven Zone mit drei 2,2 nm dünnen Al_{0,53}Ga_{0,47}N-QWs und 5 nm breiten AlGaN-QBs, einem 5 nm breiten Al_{0,92}Ga_{0,08}N-EBL, einem 100 nm kurzperiodischen Al_{0,75}Ga_{0,25}N:Mg/Al_{0,55}Ga_{0,45}N:Mg-Übergitter und einer 40 nm GaN:Mg-Kontaktschicht

¹ Die Elektrolumineszenzspektroskopie wurde von Jakob Höpfern, TUB, durchgeführt.

² Die *k*·*p*-Bandstruktursimulationen wurden von Christoph Reich, TUB, durchgeführt.

³ Die LED-Heterostruktur wurde von Christian Kuhn, TUB, hergestellt.

Die Templates wurden von Sylvia Hagedorn, FBH, und Arne Knauer, FBH, hergestellt.



(Abbildung 4.9). Der Al-Stoffmengenanteil in den Al_xGa_{1-x}N-QBs wurde zwischen x = 55 % und x = 76 % variiert und anhand von reziproken Gitterkarten aus der Röntgendiffraktometrie mit einem Fehler von 1–2 % bestimmt¹. Alle Wafer wurden dann mit Standard-Prozesstechniken zu UVC-LEDs mit 200 × 200 µm² großen Mesa-Strukturen prozessiert². Die für Bandstruktur- und Drift-Diffusions-Simulationen genutzten Materialparameter für GaN

und AlN sind in Referenz [42] zu finden.

4.2.1 Messung und Simulation der Emissionswellenlänge

Abbildung 4.10a zeigt die normierten Spektren von LEDs mit einem Al-Stoffmengenanteil von 55 %, 60 %, 67 % und 76 % in den AlGaN-QBs, aufgenommen durch das Substrat. Alle Spektren zeigen eine Einzelpeak-Emission der QWs ohne Nebenmaxima, die auf parasitäre Rekombinationen in anderen Gebieten hindeuten könnten. Die FWHM beträgt 11 nm, je-doch schiebt das Maximum der Emission mit steigendem Al-Stoffmengenanteil zu kürzeren Wellenlängen. Zur Auswertung der zentralen Emissionswellenlänge wurden die Spektren mit einer Gaußfunktion gefittet. Der Mittelwert der Emissionswellenlänge von je fünf gemessenen LEDs wird als Funktion des Al-Stoffmengenanteils in den AlGaN-QBs in Abbildung 4.10b (blaue Quadrate) dargestellt. Es sei darauf hingewiesen, dass die Emissionswellenlänge über den gesamten Wafer verteilt um bis zu 4 nm aufgrund der inhomogen verteilten Wachstumstemperatur über dem Suszeptor schwankt. Daher werden hier nur LEDs aus einem lokalen Gebiet der jeweiligen Wafer verwendet. Die Fehlerbalken repräsentieren die Standardabweichung der Emissionswellenlänge sowie die Unsicherheit bei der Bestimmung des Al-Stoffmengenanteils. Die gemessene Emissionswellenlänge schiebt kontinuierlich mit steigendem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QB, also zunehmender Barrieren-

¹ Die Röntgendiffraktrometrie wurde von Pascal Röder, TUB, und Christian Kuhn, TUB, durchgeführt und ausgewertet.

² Die Wafer wurden von Luca Sulmoni, TUB, prozessiert.



Abbildung 4.10: (a) Typische normierte, durch das Substrat gemessene Emissionsspektren der prozessierten LEDs mit einem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs von 55 %, 60 %, 67 % und 76 %. (b) Gefittete und über fünf LEDs gemittelte zentrale Emissionswellenlänge (blaue Quadrate) und simulierte Emissionswellenlänge (hellblaue gestrichelte Linie) als Funktion des Al-Stoffmengenanteils in den AlGaN-QBs. Der hellblau schattierte Bereich zeigt die Abweichung der simulierten Emissionswellenlänge bei einer Fluktuation des Al-Stoffmengenanteils im QW um ±1 %. (Messung von Jakob Höpfner, TUB, und Simulation von Christoph Reich, TUB)

höhe, zu kürzeren Wellenlängen von 269,4 nm bei 55 % zu 266,6 nm bei 76 %. Die Emissionswellenlänge hängt zum einen vom Ladungsträgereinschluss, in polaren Materialien wie (0001)-AlGaN aber auch vom QCSE ab. Die Änderung der Emissionswellenlänge mit zunehmender Barrierenhöhe deutet an, dass die Verschiebung zu längeren Wellenlängen aufgrund des QCSE weniger Auswirkungen hat als die Verschiebung zu kürzeren Wellenlängen aufgrund des Ladungsträgereinschlusses. Um diese Hypothese zu unterstützen, wurde eine Reihe von Simulationen der aktiven Zone durchgeführt, um die Messergebnisse zu reproduzieren. Zur Bestimmung der Emissionswellenlänge aus den Simulationen wurden folgende Fitparameter genutzt: ein Skalierungsfaktor für die Polarisationsfelder (engl. polarization field scaling, PFS), ein systematischer Fehler bei der Bestimmung des Al-Stoffmengenanteils im AlGaN-QW sowie eine Reduktion der Übergangsenergie durch Lokalisation von Ladungsträgern in Ga-reichen Gebieten, exzitonischen Übergängen oder einer inhomogenen spektralen Verbreiterung [95–97]. Die kleinste Abweichung zwischen simulierter und gemessener Emissionswellenlänge wurde für eine Reduktion des Al-Stoffmengenanteils im QW von 2 %, einer Übergangsenergiereduktion von 200 meV und einer PFS von 50 % gefunden. Die damit simulierte Emissionswellenlänge ist ebenfalls in Abbildung 4.10b als hellblau gestrichelte Linie dargestellt. Der hellblau schattierte Bereich gibt die Änderung der Emissionswellenläge bei einer Fluktuation des Al-Stoffmengenanteils im QW um ±1 % an. Die Simulation bestätigt den Trend aus dem Experiment, dass die Emission mit steigender Barrierenhöhe zu kürzeren Wellenlängen schiebt.

Eine Skalierung der Polarisationsfeldstärken von 50 % zu theoretisch bestimmten Werten steht nicht im Einklang mit einer aktuellen Veröffentlichung von SUSILO *et al.* [98]. Dort



Abbildung 4.11: Polarisationsabhängige Elektrolumineszenzspektren aus der Mesa-Facette von LEDs für einen Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs von 55 %, 60 %, 67 % und 76 % bei Raumtemperatur und einer Stromstärke von 10 mA. Die Intensität des TE- (rot) und TM- (blau) polarisierten Spektrums ist proportional auf die Maximalintensität der Summe beider Spektren (grau) normiert. (Messung von Jakob Höpfner, TUB)

stimmen die mittels Kapazitäts-Spannungs-Messungen bestimmten Polarisationsfelder gut mit verschiedenen Simulationsmethoden überein. Bei optischen Messmethoden (wie dem Messen von Emissionswellenlängen) sind in der Literatur hingegen Ergebnisse zu finden, die ebenfalls auf verminderte Polarisationsfelder hindeuten [99]. Auch sind Quellen zu finden, bei denen in Simulationen bis auf 30 % reduzierte Polarisationsfeldstärken genutzt werden [100]. Diese Verminderung der Polarisationsfelder ist also nicht ungewöhnlich und wird vor allem durch Abschirmeffekte von Dotierung oder Defekten erklärt.

4.2.2 Bestimmung der optische Polarisation und Simulation der Lichtextraktionseffizienz

Abbildung 4.11 zeigt die polarisationsaufgelösten Elektrolumineszenzspektren von LEDs mit einem Al-Stoffmengenanteil von 55 %, 60 %, 67 % und 76 % in den AlGaN-QBs, aufgenommen aus der Mesa-Facette. Die Spektren für TE- und TM-polarisiertes Licht wurden dabei proportional auf die Maximalintensität der Summe beider Spektren normiert. Alle LEDs weisen eine dominante TE-polarisierte Emission auf und die Emissionswellenlänge liegt bei allen LEDs bei etwa 270 nm ± 1 nm. Aufgrund des Spaltprozesses durch die Mesa mussten LEDs von verschiedenen Gebieten auf dem Wafer vermessen werden. Die Emissionswellenlängen sind daher nicht mit denen aus Kapitel 4.2.1 vergleichbar. Inwiefern der DoP von einer möglichen Variation des Al-Stoffmengenanteils in den AlGaN-QWs beeinflusst wird, wird später gezeigt. Den Spektren ist zu entnehmen, dass die zentrale Emissionswellenlänge des TM-polarisierten Spektrums etwa 1 nm kürzer ist als die des TE-polarisierten Spektrums. Dies deutet auf eine höhere Übergangsenergie (etwa +17 meV in diesem Wellenlängenbereich) der TM-polarisierten Emission hin, wie es für eine nicht dominante Emission zu erwarten wäre (Vergleich Kapitel 4.1.2).



Abbildung 4.12: Gemessener und über drei LEDs gemittelter Polarisationsgrad (blaue Quadrate) und simulierter Polarisationsgrad (hellblaue gestrichelte Linie) als Funktion des Al-Stoffmengenanteils in den AlGaN-QBs. Der hellblau schattierte Bereich zeigt die Abweichung dieses Polarisationsgrads bei einer Fluktuation des Al-Stoffmengenanteils im AlGaN-QW um ±1%. (Messung von Jakob Höpfner, TUB, und Simulation von Christoph Reich, TUB)

Zur Auswertung des Polarisationsgrads wurden die TE- und TM-polarisierten Spektren integriert und der DoP nach Gleichung 2.1 berechnet. Der gemittelte DoP von jeweils drei LEDs wird als Funktion des Al-Stoffmengenanteils in den AlGaN-QBs in Abbildung 4.12 (blaue Quadrate) dargestellt. Der DoP steigt mit zunehmendem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs von 0,38 bei 55 % auf 0,72 bei 67 % und sinkt dann geringfügig auf 0,66 bei 76 % ab. Da der Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QWs konstant gehalten wurde, sind die Änderungen des DoP auf die Änderung der Barrierenhöhe zurückzuführen. Der aus den Simulationen bestimmte DoP ist in Abbildung 4.12 als gestrichelte hellblaue Linie dargestellt. Auch hier stellt der hellblau schattierte Bereich die Änderung des DoP bei einer Fluktuation des Al-Stoffmengenanteils im QW um ±1 % dar, wobei ein geringerer Al-Stoffmengenanteil im QW zu einem höheren DoP führt. Hierbei wird ersichtlich, dass diese Fluktuation relativ geringe Auswirkungen auf den DoP haben. Der simulierte DoP steigt kontinuierlich von 0,66 bei 55 % auf 0,97 bei 76 % an und reproduziert qualitativ den Trend aus dem Experiment. Aufgrund der unterschiedlichen effektiven Massen und Oszillatorstärken der Lochbänder wird das abgespaltene Lochband (mit einer geringeren effektiven Masse und TMpolarisierten Übergängen) stärker vom Al-Stoffmengenanteil in den QBs beeinflusst als das Leicht- und Schwerlochband (höchstliegende Bänder mit höheren effektiven Massen und TE-polarisierten Übergängen). Das führt zu einer energetischen Separation des abgespaltenen Lochbands von dem Leicht- und Schwerlochband und somit zu einer geringeren Besetzung dieses Lochbands (mit TM-polarisierten Übergängen) mit steigendem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs. Die geringere Besetzung des abgespaltenen Lochbands führt zu einer geringeren TM-Emission und somit insgesamt zu einem höheren DoP. Der simulierte DoP ist jedoch deutlich höher als der gemessene DoP. Diese Diskrepanz zwischen Simulation und Messung wird größtenteils Lichtstreuprozessen zugeschrieben, wie sie an der gebrochenen Facette und an den ELO-Voids auftreten. Diese können die Polarisation des Lichts verändern und den gemessenen DoP reduzieren, was bereits in Kapitel 4.1.3 gezeigt wurde. Auch Lokalisationen von Ladungsträgern beeinflussen den DoP, wie es bereits an semi-polaren InGaN/GaN-QWs beobachtet wurde [93].



Abbildung 4.13: (a) Typische Strom-Spannungs- und Strom-Emissionsleistungs-Kennlinien der prozessierten LEDs mit einem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs von 55 %, 60 %, 67 % und 76 %. (b) Die über mindestens fünf LEDs gemittelte Betriebsspannung und Emissionsleistung als Funktion des Al-Stoffmengenanteils in den AlGaN-QBs. (Messungen von Jakob Höpfner, TUB)

Auf Basis des gemessenen DoP, der gemessenen Wellenlänge und des sich ändernden effektiven AlGaN-Zusammensetzung in der aktiven Zone können Raytracing-Simulationen für die zu Beginn vorgestellte Heterostruktur auf den ELO-AlN/Saphir-Templates durchgeführt werden. Die LEE nimmt unter Berücksichtigung der Detektionsfläche und des Abstands der Photodiode im Experiment kontinuierlich mit steigendem Al-Stoffmengenanteil x in den Barrieren von 3,3 % (x = 55 %) auf 4,5 % (x = 76 %) zu. Dies wird zum einen durch den steigenden Anteil an TE-polarisierten Lichts verursacht, zum anderen aber auch durch den stetig abnehmenden effektiven Brechungsindex der aktiven Zone von etwa 2,7 (x = 55 %) nach 2,5 (x = 76 %) [57]. Demnach ist innerhalb dieser Serie eine Zunahme der LEE um 40 % von geringen (x = 55%) zu hohen (x = 76%) Al-Stoffmengenanteilen in den AlGaN-Barrieren möglich und würde sich in einer zunehmenden EQE mit zunehmendem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-Barrieren widerspiegeln.

4.2.3 Einfluss der Barrierenhöhe auf die Betriebsspannung und die Emissionsleistung

Nach der Untersuchung der spektralen Eigenschaften sollen im Folgenden auch die elektrooptischen Eigenschaften untersucht und die Ergebnisse dann im nächsten Abschnitt mithilfe von Drift-Diffusions-Simulationen diskutiert werden. Abbildung 4.13a zeigt typische Strom-Spannungs- und Strom-Emissionsleistungs-Kennlinien der prozessierten LEDs mit einem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs von 55 %, 60 %, 67 % und 76 %. Alle LEDs zeigen ähnliche Diodenkennlinien mit einer Einsetzspannung von etwa 7,7 V bei 1 mA. Die gegenüber der Bandlücke von 4,7 eV relative hohe Betriebsspannung zwischen 11,5 V und

12,3 V bei 40 mA ist größtenteils den gleichrichtenden und nicht optimierten n- und p-Kontakten geschuldet. Die Emissionsleistung steigt bei allen LEDs nahezu linear mit zunehmender Stromstärke bis etwa 30 mA an. Bei höheren Stromstärken beginnt aufgrund der Selbsterwärmung der LED das sogenannte thermische Überrollen der Emissionsleistung. Abbildung 4.13b zeigt die über mindestens fünf LEDs gemittelte Betriebsspannung und Emissionsleistung bei einer Stromstärke von 40 mA, was einer Stromdichte von 100 A cm⁻² entspricht. Der Mittelwert der Betriebsspannung unterscheidet sich leicht je nach Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs von 11,4 V im Minimum bei 60 % zu 12,4 V im Maximum bei 76 %. Allerdings sind die statistischen Schwankungen der Spannung von LED zu LED teilweise größer als die Änderung von Probe zu Probe. Daher kann vom Experiment keine belastbare Aussage über den Einfluss der Barrierenhöhe auf die Betriebsspannung getroffen werden. Die Emissionsleistung bei 40 mA steigt zunächst mit zunehmendem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs von 0,2 mW bei 55 % auf 0,84 mW bei 67 % an und fällt dann auf 0,75 mW mit weiter steigendem Al-Stoffmengenanteil in den QBs ab. Die Emissionsleistung ist bei einer vergleichbaren Emissionswellenlänge proportional zur EQE, welche sich demnach etwas mehr als den Faktor vier unterscheidet. Wie in Abschnitt 4.2.2 diskutiert wurde, ist die Änderung der LEE (als ein Teil der EQE) aufgrund des sich ändernden Polarisationsgrads und Brechungsindexes nur 40 %. Somit muss die Steigerung der Emissionsleistung vorwiegend durch eine sich ändernde IQE (als zweiter Teil der EQE) hervorgerufen werden, was es nun zu analysieren gilt.

4.2.4 Bestimmung der IQE aus Drift-Diffusions-Simulationen

Zur Bestimmung der IQE selbst und deren bestimmenden Größen wie Ladungsträgerdichten, Rekombinationsraten und Leckströmen werden Drift-Diffusions-Simulationen bei einer Stromdichte von 100 A cm⁻² durchgeführt. Das 100 nm lange kurzperiodische Al_{0.75}Ga_{0.25}N:Mg/Al_{0.55}Ga_{0.45}N:Mg-Übergitter wurde hierbei vereinfacht durch eine effektive Al_{0.65}Ga_{0.35}N:Mg-Schicht ersetzt. Abbildung 4.14 zeigt die Bandstruktur mit Leitungs- und Valenzband (LB und VB) sowie den beiden Quasi-Fermi-Niveaus für Elektronen und Löcher $(F_{\rm e} \text{ und } F_{\rm h})$ für die elektrisch relevante Heterostruktur und einem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs von 56 %, 66 % und 76 %. In allen Diagrammen ist die Bandenergie relativ zur energetischen Position von Fe auf der n-Seite dargestellt. Demnach ist das Potentialgefälle für 100 A cm⁻² durch die Position von F_h in der *p*-Kontaktschicht am rechten Rand des Bildes gegeben, worauf später näher eingegangen wird. Beim Betrachten der n-Seite und der ersten QB sind die unterschiedlichen Bandlücken für die verschiedenen Al-Stoffmengenanteile in den AlGaN-QBs zu erkennen. Die Bandlücke ändert sich hierbei von 4,6 eV für 56 % auf 5,2 eV für 76 % im Vergleich zu 5,3 eV in der n-Al_{0.8}Ga_{0.2}N-Seite. Die Änderung des Al-Stoffmengenanteils hat zudem in polaren Materialien wie AlGaN zur Folge, dass sich Polarisationsladungen an den Grenzflächen ausbilden. Dadurch steigt mit abnehmendem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs die Potentialbarriere für Elektronen zwischen



Abbildung 4.14: Simulierte Bandstruktur mit Leitungs- und Valenzband (durchgezogene Linie) sowie den Quasi-Fermi-Niveaus für Elektronen und Löcher (gestrichelte Linie) für einen Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs von 56 %, 66 % und 76 % bei einer Stromdichte von $J = 100 \text{ A cm}^{-2}$. Statt dem kurzperiodischen Al_{0,75}Ga_{0,25}N:Mg/Al_{0,55}Ga_{0,45}N:Mg-Übergitter wurde in den Simulationen eine effektive Schicht aus Al_{0,65}Ga_{0,35}N:Mg verwendet.

n-Seite und erster QB. Ein ähnlicher Effekt tritt in der aktiven Zone auf. Mit zunehmendem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs, im Vergleich zu 53 % im AlGaN-QW, nimmt die Verzerrung der Bänder in den QBs und QWs zu, was ebenfalls zu Potentialbarrieren an jeder QB und zum QCSE in den QWs führt. Beide Effekte führen bei den jeweiligen LEDs zu Potentialgefällen, wie es aus den Stufen von F_e bei 200 nm (für 56 %) sowie im MQW (für 76 %) hervor geht. Ein weiterer Effekt ist im Bereich des Al_{0,92}Ga_{0,08}N-EBL zu erkennen. Mit zunehmendem Al-Stoffmengenanteil in den AlGAN-QBs verringert sich die Potentialbarriere zwischen F_e und dem LB. Genauer gesagt ändert sich die Energiedifferenz zwischen F_e vor dem EBL und LB im EBL von 510 meV bei 56 % auf 370 meV bei 76 %, was die Sperreigenschaften des EBL reduziert. Aus den genannten Effekten resultieren die unterschiedlichen Potentialbärlie über den gesamten *p*-*n*-Übergang, je nach Barrierenhöhe.

Die Resultate aus den Drift-Diffusions-Simulationen bei einer Stromdichte von 100 A cm⁻² werden in Abbildung 4.15 als Funktion des Al-Stoffmengenanteils (im Folgenden mit *x* bezeichnet) in den AlGaN-QBs zusammengefasst. Abbildung 4.15a zeigt die Spannung am *p*-*n*-Übergang sowie den Leckstrom für Elektronen und Löcher. Die Spannung zeigt ein Minimum von 5,35 V bei x = 65 % und steigt sowohl für einen geringeren als auch für einen höheren Al-Stoffmengenanteil in den QBs. Die zunehmende Spannung mit sinkendem Al-Stoffmengenanteil für x < 65 % ist durch die zunehmende Potentialbarriere an der Grenzfläche zwischen *n*-Seite und erster Barriere zu erklären, wie es auch durch die Änderung von *F*_e für x = 56 % in diesem Bereich zu erkennen ist (Abbildung 4.14). Die zunehmende Spannung mit steigendem Al-Stoffmengenanteil für x > 72 % ist durch die zunehmenden Potentialbarrieren an den Grenzflächen zwischen jedem QW und QB zu erklären,



Abbildung 4.15: Extrahierte Drift-Diffusions-Simulationsergebnisse als Funktion des Al-Stoffmengenanteils in den AlGaNbei einer Stromdichte QBs von $J = 100 \text{ A cm}^{-2}$. (a) Betriebsspannung (rot) und Leckstromdichte der Elektronen (orange) und Löcher (blau). (b) Schichtladungsträgerkonzentration (SCC) der Elektronen (orange) und Löcher (blau) in den drei QWs sowie die prozentuale Überlappung (WFO) der Elektron- und Lochwellenfunktion im zweiten QW. (c) Ladungsträgerinjektionseffizienz (CIE, violett), strahlende Rekombinationseffizienz (RRE, hellblau) und deren Produkt, die interne Quanteneffizienz (IQE, schwarz).

wie es ebenfalls durch die Änderung von F_e für x = 76% im Bereich des MQW zu erkennen ist (Abbildung 4.14). Beim Betrachten der Leckströme ist zu sehen, dass alle Löcher innerhalb der Heterostruktur rekombinieren und es über den gesamten Simulationsbereich keinen Lochleckstrom gibt. Für Elektronen nimmt der Leckstrom (zum *p*-Kontakt) ab $x \approx 64$ % rapide bis auf $32 \,\mathrm{A\,cm^{-2}}$ bei $x = 77 \,\%$ zu (im Vergleich zur Gesamtstromdichte von 100 A cm⁻²). Dies kann auf die reduzierte Effizienz des Al_{0,92}Ga_{0,08}N-EBL zurückgeführt werden, dessen relative Barrierenhöhe mit zunehmendem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs stetig kleiner wird. Abbildung 4.15b zeigt die über alle drei QWs integrierte Schichtladungsträgerdichte (engl. sheet charge carrier concentration, SCC) für Elektronen und Löcher sowie die prozentuale Überlappung (engl. wave function overlap, WFO) zwischen der Elektron- und Lochwellenfunktion, hier repräsentativ für den Grundzustand des LB und den Grundzustand des Leichtloch-VB im mittleren QW dargestellt. Mit zunehmendem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs steigt die SCC für Elektronen von 1,2 · 10¹² cm⁻² bei x = 54% auf $4,7 \cdot 10^{12}$ cm⁻² bei x = 64% und für Löcher von $0,3 \cdot 10^{12}$ cm⁻² bei x = 54%auf $1,3 \cdot 10^{12}$ cm⁻² bei x = 64 %. Die zunehmende Höhe der QBs führt zunächst zu einem stärkeren Einschluss der Ladungsträger im QW und reduziert die Wahrscheinlichkeit für thermisches Entweichen der Ladungsträger aus dem QW. Mit weiter steigendem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs führt der zunehmende Elektronenleckstrom dazu, dass immer weniger Löcher in den QW gelangen und die SCC der Löcher von $1,3 \cdot 10^{12}$ cm⁻² bei x = 64% auf $0.9 \cdot 10^{12}$ cm⁻² bei x = 77% abnimmt. Für Elektronen steigt die SCC, wenn auch schwächer, auf bis zu $6.8 \cdot 10^{12}$ cm⁻² bei x = 77% weiter an. Die WFO erreicht bei

 $x \approx 60\%$ ein Maximum von 0,76, wobei die Simulation für x < 57% keinen Wert mehr bestimmen konnte. Es ist jedoch anzunehmen, dass die WFO für x < 57% sinkt, da durch die geringe Höhe der QBs die Ladungsträger nicht mehr im QW eingeschlossen werden. Für x > 60% nimmt die WFO kontinuierlich bis auf 0,56 bei x = 77% ab. Dieses Verhalten ist dem QCSE zuzuschreiben, da das elektrische Feld in den QWs von 0,22 MV cm⁻¹ bei x = 60% auf von 0,96 MV cm⁻¹ bei x = 77% zunimmt und die Verkippung der Bänder zur Separation der Elektron- und Lochwellenfunktion führt.

Abschließend zeigt Abbildung 4.15c die CIE, RRE und die IQE. Die CIE ergibt sich aus dem Verhältnis der in den QWs rekombinierenden Ladungsträgern und den von den Kontakten injizierten Ladungsträgern. Der zunehmende Ladungsträgereinschluss führt für x < 66%zu einer Zunahme der CIE bis auf ein Maximum von 93 %. Für x > 66 % führt der ansteigende Elektronenleckstrom zu einer stetigen Abnahme der CIE auf 67 % bei x = 77 %. Die RRE ergibt sich aus dem Verhältnis der strahlenden Rekombinationen und allen Rekombinationen in den QWs. Die steigende SSC in den QWs führt zu einem Anstieg der RRE von 8 % bei x = 54 % auf 29 % bei $x \approx 68$ %. Für 68 % $< x \leq 77$ % bleibt die RRE konstant bei 29 %, was wie folgt zu begründen ist: Einerseits sinkt für x > 60 % die WFO und auch das Produkt aus der SCC von Elektronen und Löchern steigt für x > 70 % nicht weiter, was zu einer abnehmenden strahlenden Rekombinationsrate führt. Andererseits nimmt auch die nichtstrahlende Rekombinationsrate für x > 64% ab. Die hier dominierenden Shockley-Read-Hall-Rekombinationen hängen von den Minoritätsträgern ab [60], was in diesem Fall die Löcher sind, deren SCC ab x = 64% abnimmt. Schlussendlich ergibt sich für das Produkt aus CIE und RRE, also die IQE, ein sehr ähnlicher Verlauf wie für die Emissionsleistung im Experiment. Die IQE steigt von weniger als 2 % bei x = 54 % auf ein breites Maximum von 27 % zwischen x = 65 % und x = 69 % durch die steigende CIE und RRE an. Danach fällt die IQE mit weiter steigendem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs auf 19% bei x = 77 % durch die sinkende CIE, aber konstant bleibende REE, ab.

4.3 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde der Einfluss des Heterostrukturdesigns der aktiven Zone auf die IQE und die LEE an zwei verschiedenen Probenserien untersucht. Im ersten Teil wurde die Effizienzabnahme von UVC-LEDs mit einer Emissionswellenlänge unter 270 nm untersucht. Durch Änderung des Al-Stoffmengenanteils in den AlGaN-QWs und den AlGaN-QBs wurde die Emissionswellenlänge der aktiven Zone von 263 nm nach 218 nm verschoben und der Einfluss auf die optische Polarisation, die LEE, die Emissionsleistung und die EQE untersucht. Der gemessene DoP sank mit steigendem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QWs und AlGaN-QBs bzw. mit kürzer werdender Emissionswellenlänge von +0,74 (dominant

TE-polarisiert) für 264 nm auf -0.70 (dominant TM-polarisiert) für 220 nm mit einem Übergang (unpolarisiert) bei etwa 239 nm. Dieser Trend konnte mithilfe von Bandstruktursimulationen bestätigt werden, wobei die Simulation eine stärkere Polarisation zeigte. Abweichungen zwischen dem gemessen und simulierten DoP wurden auf Streueffekte an der Bruchkante der Mesa und der ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche zurückgeführt. Der Übergang von dominant TE- zu dominant TM-polarisierter Emission konnte durch einen Wechsel der energetischen Position und Oszillatorstärke der Valenzbandzustände erklärt werden. Ausgehend vom DoP konnten Lichtextraktionssimulationen zeigen, dass die Detektor-LEE von 3,6 % (bei 264 nm) auf 1,3 % (bei 220 nm) abnimmt. Die Lichtauskopplung ist durch Lichtstreuung an der ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche jedoch deutlich größer als bei planaren AlN/Saphir-Templates. Die aus der gemessenen Emissionsleistung ermittelte EQE sank im Experiment zu kürzeren Emissionswellenlängen um fast vier Größenordnungen von 0,6 % bei 263 nm auf $1,3 \cdot 10^{-4}$ % bei 218 nm ab. Durch den Vergleich mit temperaturabhängigen Photolumineszenzmessungen an ähnlichen Proben konnte ermittelt werden, dass diese Abnahme der EQE vor allem einer etwa ein bis zwei Größenordnungen sinkenden strahlenden Rekombinationseffizienz (ab 245 nm) sowie einer schnell fallenden Injektionseffizienz (ab 226 nm) zugeschrieben werden kann und weniger der nur um etwa 65 % abnehmenden LEE.

Im zweiten Teil wurde der Einfluss des Al-Stoffmengenanteils in den AlGaN-QBs der aktiven Zone mit Al_{0.53}Ga_{0.47}N-QWs auf die Emissionswellenlänge, die optische Polarisation und die Emissionsleistung untersucht. Die Emissionswellenlänge verkürzt sich mit steigendem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs von 269,4 nm bei 55 % zu 266,6 nm bei 76 %, während sich der DoP von +0,38 bei 55 % auf +0,72 bei 67 % erhöht und für 76 % auf +0,66 geringfügig sinkt. Bandstruktursimulationen zeigten hier, dass die Verschiebung der Emissionswellenlänge primär durch den Ladungsträgereinschluss und weniger durch den QCSE hervorgerufen wird. Die Simulationen konnten ebenfalls zeigen, dass der DoP sich mit zunehmender Barrierenhöhe aufgrund der abnehmenden Besetzung des abgespaltenen Lochbands erhöht – in den Simulationen bis auf +0,97 bei 76 %. Die Steigerung der Lichtextraktion aufgrund des steigenden DoP und des abnehmenden effektiven Brechungsindexes der aktiven Zone konnte auf etwa 40 % abgeschätzt werden. Die Emissionsleistung stieg bei einem Strom von 40 mA mit zunehmendem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs zunächst von 0,2 mW bei 55 % auf 0,84 mW bei 67 % an und fiel dann auf 0,75 mW mit weiter steigendem Al-Stoffmengenanteil ab. Drift-Diffusions-Simulationen der IQE konnten diesen Verlauf gut reproduzieren. Als Ursache der Emissionsleistungs- bzw. EQE-Änderung konnten die bis 68 % stetig zunehmende strahlende Rekombinationseffizienz und der gleichzeitig ab etwa 66 % stetig zunehmende Elektronenleckstrom über die Elektronensperrschicht ermittelt werden. Dies führt bei Al_{0,53}Ga_{0,47}N-QWs zu einem IQE-Maximum für AlGaN-QBs mit einem Al-Stoffmengenanteil um 67 %.

5 Reduzierung der UV-Absorption in UVC-LEDs

In einem einfachen Modell für eine auf AlGaN-basierende UV-LED konnte in Kapitel 3.1.2 gezeigt werden, dass etwa drei Viertel des in der aktiven Zone erzeugten Lichts in der nicht UV-transparenten *p*-Seite absorbiert wird, was die LEE und damit auch die EQE auf einen Maximalwert von etwa 10 % limitiert. Ein notweniger Schritt zur Erhöhung der Effizienz von UVC-LEDs ist somit, die Absorption der *p*-Seite zu verringern. In der Literatur konnte bereits mehrfach gezeigt werden, dass die EQE von LEDs mit einer Emissionswellenlänge um (275 ± 15) nm mehr als verdoppelt werden kann, wenn auf der *p*-Seite UV-transparentes AlGaN und ein hochreflektierender Kontakt verwendet wird [20, 63, 101]. Allerdings wird in diesen Publikationen immer nur ein gesamtoptimierter LED-Chip vorgestellt, der gegebenenfalls mit einer konventionellen UV-LED (mit p-GaN) verglichen wird. Es geht somit nicht direkt hervor, welchen Einfluss die veränderte *p*-Seite auf die Teileffizienzen der EQE, also LEE und IQE, hat. In diesem Kapitel soll daher der Übergangsbereich von einer UV-absorbierenden (bezogen auf eine Emissionswellenlänge von 263 nm) p-AlGaN-Seite zu einer UV-transparenten p-AlGaN-Seite untersucht werden. Dazu werden Raytracing-Simulationen und EL-Messungen an LEDs mit verschiedenem Al-Stoffmengenanteil im p-AlGaN-Übergitter und verschiedenen Kontaktmetallisierungen durchgeführt. Aus der simulierten LEE und der gemessenen EQE können dann auch Rückschlüsse auf die IQE gezogen werden.

5.1 Simulation der Lichtextraktion und Entwicklung einer UV-transparenten UVC-LED

Im ersten Unterkapitel werden zunächst die nötigen Lichtextraktionssimulationen unter Variation des Absorptionskoeffizienten des *p*-AlGaN und des Reflexionsgrads des *p*-Kontakts zur Bestimmung der LEE durchgeführt. Danach wird der Absorptionskoeffizient verschiedener *p*-AlGaN-Übergitter mittels Transmissionsspektroskopie bestimmt und mögliche Metallisierungen für den LED-Prozess auf ihren Reflexionsgrad und ihre elektrische Stabilität auf UV-transparentem *p*-AlGaN hin untersucht.



(a) Struktur für die Simulation

(b) Struktur für das Experiment

Abbildung 5.1: Vergleich zwischen (a) der für die Raytracing-Simulation vereinfachten und (b) der nominellen Heterostruktur im Experiment für eine voll-transparente UVC-LED auf einem ELO-AlN/Saphir-Template. In der vereinfachten Struktur für die Simulation wird für die *p*-Seite AlGaN mit einem konstanten Brechungsindex von 2,6 unter Variation des Absorptionskoeffizienten zwischen 100 cm⁻¹ und $3 \cdot 10^5$ cm⁻¹ verwendet und der Reflexionsgrad des *p*-Kontakts (\star) zwischen 0% und 100% variiert. Im Experiment wird der Al-Stoffmengenanteil im Al_wGa_{1-w}N:Mg/Al_bGa_{1-b}N:Mg-Übergitter zwischen *w* = 32 % / *b* = 40 % und *w* = 65 % / *b* = 71 % variiert und als *p*-Kontakt In, Pd+Al oder Au verwendet.

5.1.1 Einfluss der Absorption im *p*-AlGaN und des Reflexionsgrads des *p*-Kontakts auf die Lichtextraktion

Abbildung 5.1 zeigt die Heterostruktur von UVC-LEDs mit einer UV-transparenten p-Seite und einer Emissionswellenlänge von etwa 265 nm. Für die Raytracing-Simulationen wird eine vereinfachte Heterostruktur zugrunde gelegt (Abbildung 5.1a). Nach dem ELO-AlN/Saphir-Template mit 430 µm Saphir und 7,4 µm ELO-AlN folgt eine *n*-Seite mit 1325 nm Al_{0.76}Ga_{0.24}N, eine 55 nm dicke aktive Zone mit Al_{0.61}Ga_{0.39}N (einer effektiven AlGaN-Zusammensetzung aus QWs und QBs), ein 35 nm dicker Al_{0,78}Ga_{0,22}N-EBL und eine p-Seite mit 90 nm AlGaN. Letzteres ist in der realen Struktur ein AlGaN/AlGaN-Übergitter, welches im Al-Stoffmengenanteil variiert werden soll (Abbildung 5.1b). Es sollte an dieser Stelle erwähnt werden, dass der Brechungsindex eines Übergitters fehlerbehaftet ist. Der Grund hierfür sind die alternierenden Schichten und die daraus folgenden Änderungen im Brechungsindex. Außerdem liegt die Absorptionskante des Übergitters nahe der Emissionswellenlänge (wie es später in Kapitel 5.1.2 gezeigt wird), weshalb der Brechungsindex ebenfalls hohen Änderungen unterliegt. Entscheidend für die Lichtextraktion ist bei der p-Seite jedoch hauptsächlich die Absorption. In der Simulation wird daher ein reduzierter Brechungsindex mit einem konstanten Realteil von 2,6 und einem absorptionsabhängigen Imaginärteil verwendet. Der Absorptionskoeffizient wird dabei zwischen 100 cm⁻¹ und



Abbildung 5.2: (a) Simulierte Lichtextraktionseffizienz als Funktion des Absorptionskoeffizienten im *p*-AlGaN und des Reflexionsgrads des *p*-Kontakts. Für zwei ausgewählte Fälle, einer LED mit absorbierender *p*-Seite (hellblauer Punkt) bzw. transparenter *p*-Seite (violett Stern), wird in (b) die extrahierte Strahlungsintensität als Funktion des Emissionswinkels in der aktiven Zone mit einer TE-polarisierten (DoP = +0,92) Abstrahlungsverteilung verglichen.

 $3 \cdot 10^5$ cm⁻¹ variiert. Die Absorption der *n*-Seite wird auf 10 cm⁻¹ [33] gesetzt, die Absorption in der aktiven Zone auf 10^3 cm⁻¹ [32] und der DoP auf +0,92 (Vergleich Kapitel 4). Die Mesa reicht 200 nm in die *n*-Seite hinein und als *n*-Kontakt wird der Brechungsindex 1,7 + 2,0 *i* des formierten V/Al/Ni/Au-Kontakts verwendet (Vergleich Kapitel 3.2). Der Reflexionsgrad des *p*-Kontakts wird zwischen 0 % und 100 % variiert, indem der Brechungsindex des Metalls verändert wird. Hierbei wird zwischen bekannten Brechungsindizes für eine hohe Reflexion wie Al (0,16 + 2,7 *i* [102]) und eine geringe Reflexion wie Au (1,3 + 1,7 *i* [77]) interpoliert und die Reflexion der Grenzfläche AlGaN/Metall berechnet.

Abbildung 5.2a zeigt die simulierte LEE als Konturlinien und Funktion des Absorptionskoeffizienten α im *p*-AlGaN und des Reflexionsgrads *R* des *p*-Kontakts. Die Transparenz der 90 nm dicken *p*-AlGaN-Schicht wird auf der oberen Achse als Funktion des Absorptionskoeffizienten gezeigt. Bei einem hohen Absorptionskoeffizienten von $\alpha > 2 \cdot 10^5$ cm⁻¹ ist die LEE unabhängig vom Reflexionsgrad des *p*-Kontakts und liegt bei etwa 5 %. Das *p*-AlGaN absorbiert fast vollständig das zum Kontakt abgestrahlte Licht aus der aktiven Zone. Mit abnehmendem Absorptionskoeffizienten von 10^5 cm⁻¹ nach 10^3 cm⁻¹ steigt die Transparenz des *p*-AlGaN von 30 % auf 99 %. Damit wird mehr Licht durch das *p*-AlGaN transmittiert und kann potentiell vom *p*-Kontakt reflektiert werden. Der Einfluss des Reflexionsgrads des *p*-Kontakts nimmt zu. Während die LEE bei $\alpha = 10^3$ cm⁻¹ für einen nicht reflektierenden *p*-Kontakt (*R* = 0 %) weiterhin bei 5 % liegt, steigt die LEE bei $\alpha = 10^3$ cm⁻¹ gibt es bezüglich α keine signifikante Änderung der LEE. In diesem Bereich wird die LEE von Absorptionen in anderen Schichten wie der aktive Zone, der *n*-AlGaN-Schicht und dem *n*-Kontakt dominiert. Die Simulationen zeigen, dass die LEE um mehr als 150 % steigt, wenn die absorbierende *p*-Seite mit einem UV-transparenten *p*-AlGaN ($\alpha < 10^3 \text{ cm}^{-1}$) und einem reflektierenden *p*-Kontakt (R > 85%) ersetzt wird. Um zu verstehen, warum die LEE nicht nur verdoppelt wird – wie es aufgrund einer symmetrischen Abstrahlung aus dem QW zu vermuten wäre –, werden zwei Fälle genauer untersucht: Eine LED mit UV-transparentem *p*-AlGaN und reflektierendem *p*-Kontakt bzw. UV-absorbierendem *p*-AlGaN und gering reflektierendem *p*-Kontakt. Die beiden Fälle sind durch einen violetten Stern bzw. hellblauen Punkt in Abbildung 5.2a markiert.

Abbildung 5.2b zeigt die simulierte extrahierte Strahlungsintensität als Funktion des Emissionswinkels θ in der aktiven Zone, für eine LED mit absorbierender *p*-Seite $(\alpha > 1.5 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1})$, R = 36% und mit einer transparenten *p*-Seite ($\alpha = 10^2 \text{ cm}^{-1}$), R = 87%) sowie die Abstrahlcharakteristik der aktiven Zone selbst. Die Strahlungsintensität der aktiven Zone nimmt mit steigendem Emissionswinkel zu und erreicht ein breites Plateau von $6.7 \cdot 10^{-3}$ / ° für 40° < θ < 140°. Diese Verteilung ist das Produkt aus der Abstrahlcharakteristik der aktiven Zone mit dominant TE-polarisierter Emission und der Integration über alle Azimutwinkel (Vergleich Kapitel 3.1.2). Für eine LED mit absorbierender *p*-Seite ist die Lichtextraktion auf die Emission in Richtung des Substrats beschränkt. Der idealisierte Lichtfluchtkegel von etwa $\theta = 22^{\circ}$ wird aufgrund von Streueffekten an der ELO-AlN/Saphir- und Saphir/Luft-Grenzfläche bis auf $\theta = 61^{\circ}$ vergrößert (Vergleich Kapitel 4.1.3). Die Kante bei $\theta = 61^{\circ}$ ergibt sich aus dem Brechungsindexunterschied zwischen aktiver Zone (2,64), n-Seite (2,47) und AlN (2,31) [57]. Für eine LED mit transparenter *p*-Seite wird die Emission in Richtung des Kontakts ($\theta > 119^\circ$) nicht absorbiert, sondern vom Kontakt reflektiert und kann somit ebenfalls durch das Substrat extrahiert werden. Ferner verdoppelt sich auch die extrahierte Strahlungsintensität für $30^{\circ} \lesssim \theta < 61^{\circ}$ gegenüber der LED mit absorbierender p-Seite. Licht mit diesem Emissionswinkel wird an der n-AlGaN/AlN-Grenzfläche stark gebrochen und bewegt sich fast parallel zur ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche. Die Wahrscheinlichkeit für die Streuung an einem der rauen ELO-Voids ist somit hoch (Vergleich Kapitel 3.4). Bei einer absorbierenden p-Seite können nur Stahlen, die in den Substrat-Lichtfluchtkegel ($\theta \leq 22^{\circ}$) gestreut werden, potentiell ausgekoppelt werden. Hingegen können bei einer transparenten p-Seite auch Stahlen, die in den Kontakt-Lichtfluchtkegel ($\theta \ge 158^\circ$) gestreut werden, potentiell am Kontakt reflektiert und dann ebenfalls durch das Substrat ausgekoppelt werden. Ohne die Streuzentren in der ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche würde sich LEE maximal verdoppeln. Die ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche spielt also eine entscheidende Rolle für die von 5 % auf 13 % steigende LEE für UV-transparente UVC-LEDs¹.

¹ Es sei hier anzumerken, dass bei einer ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche ein ebenfalls hochreflektierender *n*-Kontakt zu einer weiteren Steigung der LEE führen würde.



Abbildung 5.3: Reziproke Gitterkarten in der Nähe des AlN- $(10\overline{1}5)$ -Reflexes aus Röntgendiffraktometrie an LED-Heterostrukturen mit verschiedenen Al-Stoffmengenanteilen (weiße Boxen unten) im *p*-AlGaN-Übergitter. (Messung von Eviathar Ziffer, TUB, und Norman Susilo, TUB)

5.1.2 Bestimmung des Al-Stoffmengenanteils und des Absorptionskoeffizienten im *p*-AlGaN-Übergitter

Für die experimentelle Untersuchung der Steigerung der LEE werden LEDs mittels MOVPE auf ELO-AlN/Saphir-Templates abgeschieden¹. Die Heterostruktur ist schematisch in Abbildung 5.1b dargestellt und besteht aus einer 1100 nm dicken Al_{0,76}Ga_{0,24}N:Si-Stromverteilungsschicht, einer Übergangsschicht von Al_{0,76}Ga_{0,24}N:Si nach Al_{0,65}Ga_{0,35}:Si, einer 200 nm dicken Al_{0,65}Ga_{0,35}:Si-Kontaktschicht sowie einer aktiven Zone mit drei 1,4 nm dünnen Al_{0,48}Ga_{0,52}N-QWs und 5 nm breiten Al_{0,63}Ga_{0,37}N:Si-QBs. Die *p*-Seite setzt sich aus einer 10 nm dicken Al_{0,85}Ga_{0,15}N-Zwischenschicht, einem 25 nm dicken Al_{0,75}Ga_{0,25}N:Mg-EBL und einem 90 nm dicken kurzperiodischen Al_wGa_{1-w}N:Mg/Al_bGa_{1-b}N:Mg-Übergitter mit einer Periodenlänge von 6 nm zusammen. Auf eine absorbierende GaN:Mg-Kontaktschicht wird verzichtet. Der Al-Stoffmengenanteil im Übergitter wird nominell zwischen w = 0,32 bzw. b = 0,40 (kurz 32/40) und w = 0,65 bzw. b = 0,71 (kurz 65/71) variiert, sodass die Bandlückendifferenz zwischen den einzelnen Übergitterschichten nahezu konstant bei etwa 0,2 eV bleibt. Die strukturellen und optischen Eigenschaften dieser LEDs bzw. *p*-AlGaN-Übergitter sollen nun mithilfe von Röntgendiffraktometrie und Transmissionsspektroskopie genauer untersucht werden.

Abbildung 5.3 zeigt die reziproken Gitterkarten mit den reziproken Gitterkoordinaten Q_x und Q_z in der Nähe des AlN-(1015)-Reflexes aus Röntgenmessungen an LEDs mit einem 32/40-, 44/51-, 55/62- und 65/71-AlGaN:Mg/AlGaN:Mg-Übergitter². Von hohen zu kleinen Q_z -Werten sind in allen Messungen folgende Schichten identifizierbar: Das (ELO)-AlN aus

¹ Die ELO-AlN/Saphir-Templates wurden von Sylvia Hagedorn, FBH, hergestellt.

Die LED-Heterostruktur wurde von Norman Susilo, TUB, hergestellt.

² Die Röntgenmessungen wurden von Eviathar Ziffer, TUB, und Norman Susilo, TUB, durchgeführt.



Abbildung 5.4: Transmissionsspektren der gesamten LED-Heterostruktur mit verschiedenen mittleren Al-Stoffmengenanteilen im *p*-AlGaN-Übergitter. In Grau ist zum Vergleich ein typisches normiertes Emissionsspektrum einer LED mit einem mittleren Al-Stoffmengenanteil von 68 % im *p*-AlGaN-Übergitter bei einer Stromstärke von 5 mA zu sehen. (Messungen von Anna Susilo, TUB, Eviathar Ziffer, TUB, und Norman Susilo, TUB)

der Basisschicht, die Al_{0,76}Ga_{0,24}N:Si-Stromverteilungsschicht, der Gradient der Übergangsschicht, die Al_{0,65}Ga_{0,35}:Si-Kontaktschicht und die erste Barriere der aktiven Zone. Bei noch kleineren Q_z -Werten ist der Reflex des *p*-AlGaN-Übergitters zu erkennen. Dieser schiebt von $Q_z = 6,09 \text{ Å}^{-1}$ für das 32/40-Übergitter in den Bereich der Kontaktschicht nach $Q_z \approx 6,2$ Å⁻¹ für das 65/71-Übergitter. Bis zur aktiven Zone ist die Heterostruktur bei allen Proben nahezu vollverzerrt zu AlN, wie es an der vertikalen Anordnung der Maxima zu erkennen ist. Auch das 44/51-, 55/62- und 65/71-Übergitter ist vollverzerrt zu AlN, während für das 32/40-Übergitter eine Teilrelaxation zu einem kleineren Q_x -Wert zu erkennen ist. Somit könnten im 32/40-Übergitter neue Versetzungen entstehen [103], die auch die elektrischen Eigenschaften beeinflussen könnten, während die Versetzungsdichte der anderen LEDs einschließlich des p-AlGaN-Übergitters vergleichbar bleiben sollte. Anhand der Position der Übergitterreflexe können die mittleren Al-Stoffmengenanteile der jeweiligen Übergitter entnommen werden, welche dann im Weiteren als Referenzierung der LEDs verwendet werden. Der mittlere Al-Stoffmengenanteile im *p*-AlGaN-Übergitter beträgt (33 ± 1) % für 32/40-, (44 ± 1) % für 44/51-, (58 ± 1) % für 55/62- und (68 ± 2) % für das 65/71-Übergitter.

Abbildung 5.4 zeigt die in der Freistrahl-Konfiguration gemessenen Transmissionsspektren der gesamten Heterostruktur von LEDs mit einem mittleren Al-Stoffmengenanteilen x im p-AlGaN-Übergitter zwischen x = 33 % und x = 68 % und als Orientierung das Emissionsspektrum einer typischen LED mit x = 68 % und einer Emissionswellenlänge von 263 nm aus dieser Serie¹. Die Transmissionsspektren wurden in einem Bereich hoher Transparenz bei einer Wellenlänge von 360 nm aneinander ausgerichtet und sind unter der Annahme einer vernachlässigbaren Absorption im p-AlGaN-Übergitter von $\leq 10^2$ cm⁻¹ [104] für x = 68 % bei 263 nm normiert. Alle Transmissionsspektren zeigen bei Wellenlängen über 300 nm eine Abnahme der Transmission mit kürzer werdender Wellenlänge. Dies wird auf wellenlängenabhängige Streuverluste an der ELO-AlN/Saphir- und Saphir/Luft-Grenz-

¹ Die Transmissionsmessung wurden von Anna Susilo, TUB, Eviathar Ziffer, TUB, und Norman Susilo, TUB, durchgeführt. Das Emissionsspektrum wurde von Anna Susilo, TUB, aufgenommen.

fläche zurückgeführt. Außerdem zeigen alle Transmissionsspektren eine Absorptionskante unter 250 nm, welche der Absorptionskante der Al_{0,65}Ga_{0,35}:Si-Kontaktschicht zugeschrieben werden kann. Eine zweite Absorptionskante ist unter 300 nm für x = 33 %, unter 280 nm für x = 44 % und unter 265 nm für x = 58 % zu sehen. Diese wird den Absorptionskanten der jeweiligen *p*-AlGaN-Übergitter zugeordnet, während sich die Absorptionskanten für x = 68 % mit der Absorptionskanten der Kontaktschicht überlagert. Aus den Transmissionsintensitäten bei der LED-Emissionswellenlänge von 263 nm und der Schichtdicke des *p*-AlGaN-Übergitters von 90 nm können nach dem Lambert-Beerschen Absorptionsgesetz [38] die Absorptionskoeffizienten der jeweiligen *p*-AlGaN-Übergitter abgeschätzt werden. Die Absorptionskoeffizienten sind $1,5 \cdot 10^5$ cm⁻¹ für x = 33 %, $1,2 \cdot 10^5$ cm⁻¹ für x = 44 %, $7 \cdot 10^3$ cm⁻¹ für x = 58 % und wie zuvor angenommen als obere Abschätzung 10^2 cm⁻¹ für x = 68 %. Somit gibt es in der Serie zwei LEDs mit absorbierender *p*-Seite und zwei LEDs mit einer (nahezu) UV-transparenten *p*-Seite, was sich direkt auf die LEE und damit auf die EQE auswirken sollte.

5.1.3 Vergleich verschiedener p-Kontaktmetallisierungen

Neben einer hohen UVC-Transparenz des *p*-AlGaN-Übergitters ist auch ein hochreflektierender *p*-Kontakt notwendig, um eine hohe LEE zu erreichen (Vergleich Kapitel 5.1.1). Entscheidend ist hierbei der Reflexionsgrad des p-Kontakts auf p-AlGaN. Allerdings muss dabei auch die elektrische und mechanische Stabilität des Kontakts beachtet werden. Die mechanische Stabilität wird durch eine geringe Schmelztemperatur oder eine geringe Oberflächenhaftung beeinflusst. Die elektrische Stabilität wird maßgeblich von der Austrittsarbeit des Metalls beeinflusst. Diese sollte für einen Kontakt auf p-AlGaN so hoch wie möglich sein, um einen geringen Kontaktwiderstand zu erreichen und eine Schottky-Barriere zu verhindern [105]. Voruntersuchungen des Reflexionsvermögens von Metallen zeigten, dass im UVC-Spektralbereich nur zwei Metalle, In und Al, ein Reflexionsgrad über 80 % haben, deren Austrittsarbeiten mit 4,3 eV (Al) und 4,1 eV (In) aber gering sind [106]. Dem gegenüber stehen Metalle mit hohen Austrittsarbeiten, wie zum Beispiel Pd (5,1 eV) und Pt (5,6 eV) [106], deren Reflexionsgrad gegenüber p-AlGaN aber unter 40% liegt. Als Kompromiss werden in der Literatur daher oft Rh- [20], Pd/Al- [107], Ni/Al- [63, 101] oder Ni/Mg- [108] Kontakte verwendet, wobei die Schichtdicke des Ni nur 1 nm beträgt, der Reflexionsgrad des Kontakt jedoch trotzdem um etwa 20 % reduziert wird [108]. Im folgenden Abschnitt werden ebenfalls vier Metalle – In, Al, Pd, Au – und deren Kombinationen mithilfe einer Schattenmaske auf einer UV-transparenten UVC-LED (Vergleich Kapitel 5.1.2) als p-Kontakt abgeschieden und verglichen¹. Die Metalle und Metallkombinationen werden zeitgleich jeweils auf einem doppelseitig polierten Saphir-Wafer abgeschieden, um daran experimentell den Reflexionsgrad zu bestimmen. Rechnerisch wird der Reflexionsgrad mittels der

¹ Die Metallabscheidung wurde von Luca Sulmoni, TUB, durchgeführt.



Abbildung 5.5: Vergleich von gemessenem und berechnetem Metallreflexionsgrad verschiedener Metallisierungen auf Saphir. Zusätzlich wird das durchschnittliche EQE-Maximum aus den EL-Messungen auf Wafer-Ebene an mittels Schattenmaske metallisierten LEDs und deren qualitative Stabilität im Betrieb dargestellt. Eine hohe Stabilität bedeutet kein Kurzschluss bei 5 mA. Eine geringe Stabilität bedeutet ein Kurzschuss bei < 5 mA.

Transfermatrix-Methode [75] mit den (komplexen) Brechungsindizes von Saphir (1,83 [56]), Al (0,16 + 2,7 *i* [102]), Pd (1,14 + 2,1 *i* [73]) und Au (1,3 + 1,7 *i* [77]) bestimmt. Der *n*-Kontakt wird durch das Ankratzen der Oberfläche und Aufbringen eines In-Punkts realisiert [109]. Danach werden die einzelnen *p*-Kontakte mit unterschiedlichen Metallisierungen am EL-Messplatz im sogenannten Schnelltest vermessen und bewertet.

Abbildung 5.5 zeigt den gemessenen und berechneten Reflexionsgrad der Metallisierung, die maximal erreichte EQE von LEDs mit diesem Kontakt im Schnelltest und die qualitativ bewertete elektrische Stabilität der LED. Eine geringe Stabilität bedeutet hier, dass es bei geringen Stromstärken (< 5 mA) zu einem Kurzschluss des *p*-*n*-Übergangs kam und keine Lichtemission mehr zu messen war. Eine hohe Stabilität bedeutet hier, dass die LED bis mindestens 5 mA Licht emittiert. Die Reflexionsmessungen auf Saphir bei einer Wellenlänge von 263 nm zeigen, dass In bzw. Al einen Reflexionsgrad von 87 % bzw. 90 % haben, während Pd bzw. Au nur 36 % bzw. 24 % vorweisen. Diese Werte stimmen mit den rechnerisch bestimmten Reflexionsgraden, die zwischen dem Metall und Saphir berechnet wurden, überein. In der Kombination einer dünnen Pd-Schicht und einer dicken Al-Schicht fällt der Reflexionsgrad bereits bei einer geringen Pd-Schichtdicke von 1 nm auf 67 % deutlich ab. Mit zunehmender Pd-Schichtdicke sinkt der Reflexionsgrad kontinuierlich weiter und nährt sich dem Reflexionsgrad von Pd (36 %). Der geringe Reflexionsgrad für die Pd/Al-Kombinationen steht im Widerspruch zu den Berechnungen mittels der Transfermatrixmethode. Der errechnete Reflexionsgrad liegt auch für Pd/Al mit 3 nm/200 nm auf Saphir immer noch über 70 %. Möglicherweise ist die kalibrierte Abscheidungsrate bei geringen Schichtdicken fehlerbehaftet, sodass die tatsächliche Pd-Schichtdicke größer ist. Andererseits ist diese relative starke Abnahme des Reflexionsgrads auch bei Ni/Al- (1 nm/200 nm) Kontakten beobachtet worden [108]. Die EL-Messungen, welche aufgrund der fehlenden Prozessierung nur als Orientierung dienen sollen, zeigen folgenden Trend: Die EQE der LEDs mit In- und Al-*p*-Kontakten erreicht \gtrsim 4 %. Die EQE der LEDs mit den verschiedenen Pd(/Al)-*p*-Kontakten beträgt, mit Ausnahme von Pd/Al (5 nm/200 nm), etwa 3 %¹. Die EQE der LEDs mit Au-*p*-Kontakt erreicht nur etwa 1 %. Somit spiegelt sich ein höherer Reflexionsgrad des *p*-Kontakts direkt in einer höheren EQE wider. Quantitativ wird dies später an prozessierten LEDs ausführlich diskutiert. Die Bewertung der elektrischen Stabilität zeigt, dass die *p*-Kontakte mit Al (200 nm) oder mit Pd/Al (1 nm/200 nm) aufgrund der geringen elektrischen Stabilität nicht für den Prozess geeignet sind. Ausgehend von diesen Ergebnissen des Schattenmasken-Schnelltests wird für den LED-Prozess die folgende Serie an *p*-Kontakten gewählt: Als hochreflektierender Kontakt wird In mit einem Reflexionsgrad von R = 87 % verwendet. Da In aufgrund der geringen Schmelztemperatur eine geringe mechanische Stabilität bietet, wird als zweiter *p*-Kontakt Pd/Al (2 nm/200 nm) mit R = 63 % verwendet. Zur Validierung der Raytracing-Simulationen wird als Referenz und geringreflektierender *p*-Kontakt Au mit R = 24 % verwendet.

5.2 Messung der elektro-optischen Eigenschaften von UV-transparenten UVC-LEDs

Für die Prozessierung von LEDs mit verschiedenen p-Kontakten wurde im Rahmen dieser Arbeit eine spezielle Maske entwickelt. Abbildung 5.6a zeigt das Maskendesign für den *n*-Kontakt in Grün, die Mesa als gelbe Linie und zwei verschiedene *p*-Kontakte in Rot und Blau. Die Maske ist so designt, dass immer zwei p-Kontaktmetallisierungen in einem kleinen Bereich von < 2 mm zu finden sind. Aufgrund einer möglichen großskaligen Inhomogenität der Emissionsleistung über den Wafer ermöglicht diese Anordnung der LEDs eine Vergleichsmöglichkeit von verschiedenen p-Kontakten im selben Gebiet des Wafers. Um drei *p*-Kontakttypen miteinander zu vergleichen, wurden die ¼-2"-Wafer halbiert und je eine Hälfte mit p-Kontakten aus In (200 nm) und Au (200 nm) und die andere Hälfte mit p-Kontakten aus Pd/Al/Au (2 nm/200 nm/200 nm) – im Folgenden als Pd+Al bezeichnet – und Au (200 nm) prozessiert². Der Au-*p*-Kontakt dient auf beiden Hälften als Referenz, um einen Vergleich zwischen allen p-Kontakten zu gewährleisten. Der Au-p-Kontakt wurde bei 500 °C für 1 min unter N₂ formiert. Der *n*-Kontakt besteht aus V/Al/Ni/Au und wurde ebenfalls formiert (Vergleich Kapitel 3.2). Abbildung 5.6b zeigt einen prozessierten Wafer mit einem Au-p-Kontakt (oben, gelblich) und einem In-p-Kontakt (unten, gräulich). Der formierte *n*-Kontakt erscheint in dieser Aufnahme aufgrund der hohen Rauheit als bräunlich. Das Maskendesign zeigt auch verschiedene p-Kontaktgrößen und -geometrien. In dieser Serie wurden quadratische Kontakte mit einer Mesa-Fläche von 0,02 mm² genutzt.

¹ Beim Vergleich der EQE von LEDs mit 5 nm Pd + 200 nm Al p-Kontakt und 50 nm Pd p-Kontakt liegt im Hinblick auf deren Reflexionsgrad der Verdacht nahe, dass diese beiden Metallisierungen in den EL-Messungen vertauscht wurden. Leider konnte dies nicht abschließend bestätigt bzw. widerlegt werden.

² Die Prozessierung wurde von Luca Sulmoni, TUB, durchgeführt.



(a) Maskendesign

(b) Lichtmikroskopaufnahme

Abbildung 5.6: (a) Maskendesign für LEDs mit *n*-Kontakt (grün), Mesa (gelbe Linie) und zwei verschiedenen *p*-Kontakten, P1 (blau) und P2 (rot). (b) Lichtmikroskopaufnahme einer prozessierten LED mit einem Au-*p*-Kontakt (P2, oben) und einem In-*p*-Kontakt (P1, unten). (Prozessierung von Luca Sulmoni, TUB)

5.2.1 Einfluss des Al-Stoffmengenanteils im *p*-AlGaN-Übergitter und des *p*-Kontaktmetalls auf die Spannung und Emissionsleistung

Um die später folgenden LED-Kennlinien besser interpretieren zu können, werden in Abbildung 5.7 zunächst typische TLM-Kennlinien der formierten V/Al/Ni/Au-n-Kontakte und formierten Au-p-Kontakte für einen Kontaktabstand von 8 µm und für einen Al-Stoffmengenanteil von 33 %, 44 %, 58 % und 68 % im *p*-AlGaN-Übergitter (Vergleich Kapitel 5.1.2) gezeigt¹. Bei den *n*-TLM-Strukturen zeigen alle Kennlinien ein lineares Verhalten und für eine Stromstärke von 50 mA fällt eine Spannung zwischen 0,9 V und 1,2 V zwischen den n-Kontakten ab. Die Kontakte sind ohmsch und es kann aus den verschiedenen Kontaktabständen (nicht gezeigt) der spezifische Kontaktwiderstand $\rho_{\rm C}$ und der spezifische Widerstand $\rho_{\rm S}$ der *n*-Seite ermittelt werden. $\rho_{\rm C}$ ist im Rahmen der statistischen Streuung unabhängig vom Al-Stoffmengenanteil im *p*-AlGaN-Übergitter und liegt bei $(7 \pm 5) \cdot 10^{-4} \Omega \text{ cm}^2$. Auch $\rho_{\rm S}$ ist im Rahmen der statistischen Streuung unabhängig vom Al-Stoffmengenanteil im *p*-AlGaN-Übergitter und liegt bei $(2 \pm 1) \cdot 10^{-2} \Omega$ cm. Somit sind die elektrischen Eigenschaften der n-Seite vergleichbar. Für die p-TLM-Strukturen zeigen die Kennlinien für verschiedene Al-Stoffmengenanteile im *p*-AlGaN-Übergitter ein sehr unterschiedliches Verhalten. Die Stromstärke, die bei einer Spannung von beispielsweise 10 V zwischen den p-Kontakten fließt, ist deutlich kleiner als bei den n-TLM-Strukturen und ändert sich über sechs Größenordnungen von 0,4 mA für 33 % nach 0,7 nA für 68 %. Die Kennlinien sind nicht linear,

¹ Die TLM-Kennlinien wurden von Verena Montag, TUB, aufgenommen und ausgewertet.



Abbildung 5.7: Typische TLM-Strom-Spannungs-Kennlinie (a) eines formierten V/Al/Ni/Au-*n*-Kontakts und (b) eines formierten Au-*p*-Kontakts für einen Kontaktabstand von 8 μm an LEDs mit verschiedenen mittleren Al-Stoffmengenanteilen im *p*-AlGaN-Übergitter. (Messungen von Verena Montag)

sondern zeigen teilweise einen exponentiellen Anstieg der Stromstärke mit steigender Spannung. Die p-Kontakte sind somit gleichrichtend, sodass keine Werte für Schicht- und Kontaktwiderstand mittels TLM ermittelt werden können. Trotzdem kann geschlussfolgert werden, dass die später folgenden LED-Charakteristiken durch die p-Seite (Schicht und Kontakt) dominiert werden, vor allem bei Proben mit hohem Al-Stoffmengenanteil im p-AlGaN-Übergitter.

Abbildung 5.8 zeigt typische Strom-Spannungs-Emissionsleistungs-Kennlinien von prozessierten LEDs mit einer Emissionswellenlänge von 263 nm und einem mittleren Al-Stoffmengenanteil von 33 %, 44 %, 58 % und 68 % im *p*-AlGaN-Übergitter und jeweils für eine LED mit einem Au-, Pd+Al- und In-p-Kontakt¹. Die Spannung, bei der ein Strom von 0,2 mA (eine Stromdichte von 1 A cm⁻²) fließt, wird vereinfacht als Einsetzspannung bezeichnet. Beim qualitativen Vergleich der Strom-Spannungs-Kennlinien ist zu erkennen, dass mit zunehmendem Al-Stoffmengenanteil im p-AlGaN-Übergitter kontinuierlich eine höhere Spannung zum Betreiben der LED benötigt wird. So steigt zum einen die Einsetzspannung von 5,6 V bei 33 % auf 9.8 V bei 68 % im Falle des Au-p-Kontakts. Dies ist teilweise auf die größer werdende Schottky-Barriere am p-Kontakt zurückzuführen. Zum anderen wird der Übergangsbereich der Kennlinie zwischen sperrendem Verhalten (unter der Bandlücke) und dem Bereich, in dem der Serienwiderstand der LED dominiert, mit zunehmendem Al-Stoffmengenanteil im p-AlGaN-Übergitter größer. Während die Kennlinie für 33% und Au-p-Kontakt ab etwa 10 mA bzw. 10 V nahezu linear ist, was auf einen konstanten Serienwiderstand schließen lässt, ändert sich die Steigung der Kennlinie für 68 % und Au-p-Kontakt auch noch bei 20 mA bzw. 18 V. Der hohe Widerstand der LED mit einem Al-Stoffmengenanteil von 68 % im p-AlGaN-Übergitter, welcher bei höheren Strömen bzw. Spannungen

¹ Die Elektrolumineszenzspektroskopie wurde von Anna Susilo, TUB, durchgeführt.



Abbildung 5.8: Typische Strom-Spannungs- (durchgezogene Linien) und Strom-Emissionsleistungs-Kennlinien (gestrichelte Linien) von LEDs mit einem mittleren Al-Stoffmengenanteil (\emptyset Al) von 33 %, 44 %, 58 % und 68 % im *p*-AlGaN-Übergitter (*p*-SL) für einen Au-, Pd+Al- und In-*p*-Kontakt. (Messungen von Anna Susilo, TUB)

abnimmt, kann folgende Ursachen haben: Die hohe Aktivierungsenergie der Akzeptoren führt bei kleinen Spannungen zu einem hohen Widerstand. Mit zunehmender Spannung steigt das elektrische Feld im p-AlGaN-Übergitter an, was dazu führt, dass mehr Akzeptoren durch das Feld ionisiert werden [110, 111] – der elektrische Widerstand des p-AlGaN-Übergitters sinkt. Außerdem kommt es in diesem Bereich hoher Spannungen auch zur Selbsterwärmung der LEDs, was ebenfalls zur Reduzierung des Widerstands beiträgt. Die Strom-Emissionsleistungs-Kennlinien zeigen bei allen Al-Stoffmengenanteilen im p-AlGaN-Übergitter und jedem p-Kontakt qualitativ ein sehr ähnliches Verhalten. Mit steigender Stromstärke nimmt die Emissionsleistung zunächst linear zu und weist keine Leckströme, bei denen es bis zu einem gewissen Strom keine Lichtemission gibt, auf. Je nach Betriebsspannung (und damit auch Übergitterzusammensetzung bzw. Kontaktart) beginnt bei höheren Stromstärken > 5 mA ein thermisches Überrollen der Kennlinie. Dieser Einfluss der Betriebsspannung auf das Überrollverhalten wird besonders deutlich bei der LED mit In-p-Kontakt und einem mittleren Al-Stoffmengenanteil von 44 % im p-AlGaN-Übergitter. Vermutlich prozessbedingt ist die Spannung hier im Vergleich zu den beiden anderen Kontakten deutlich höher. Die Selbsterwärmung ist somit bei der LED mit In-p-Kontakt deutlich stärker als beim Au- und beim Pd+Al-p-Kontakt, was sich in einem früheren und stärkeren thermischen Überrollen der Emissionskennlinie widerspiegelt. Beim Vergleich der bei 20 mA erreichten Emissionsleistung gibt es einen deutlich Unterschied zwischen den LEDs mit UV-absorbierendem p-AlGaN-Übergitter (33 % und 44 %) und den LEDs mit UV-transparentem p-Al-GaN-Übergitter (58 % und 68 %). Während für 33 % und 44 % bei 20 mA unabhängig vom p-Kontakt eine Emissionsleistung von etwa 0,5 mW erreicht wird, liegen die Emissionsleistungen für 58 % und 68 % bei 20 mA zwischen 1 mW und 2 mW und sind abhängig von der verwendeten p-Kontaktmetallisierung.

5.2.2 Aufteilung der EQE in LEE und IQE

Für eine genaue Untersuchung dieser Ergebnisse wird im Folgenden die Emissionsleistung von fünf LEDs jeder p-Kontaktmetallisierung und des Al-Stoffmengenanteils im p-AlGaN-Übergitter bei einer Stromstärke von 5 mA (bei einer Stromdichte von 25 A cm⁻²) vor dem thermischen Überrollen gemessen und die EQE bestimmt. Aus den Raytracing-Simulationen von Kapitel 5.1.1 wird die jeweilige Detektor-LEE in Abhängigkeit des Absorptionskoeffizienten des p-AlGaN-Übergitters (Kapitel 5.1.2) und des Reflexionsgrads des p-Kontakts (Kapitel 5.1.3) ermittelt. Aus dem Quotienten der gemessenen EQE und der simulierten Detektor-LEE wird dann die IQE errechnet. Die EQE, Detektor-LEE und IQE sind in Abbildung 5.9 als Funktion des mittleren Al-Stoffmengenanteils *x* im *p*-AlGaN-Übergitter von LEDs mit einem Au- (gelb), Pd+Al- (blau) und In- (grün) p-Kontakt dargestellt. Die LEDs mit einem UV-absorbierenden p-AlGaN-Übergitter erreichen eine EQE von $(0,55\pm0,1)$ % bei x = 33 % und $(0,75 \pm 0,1)$ % bei x = 44 %, welche im Rahmen des Fehlers unabhängig vom verwendeten p-Kontakt sind (Abbildung 5.9a). Eine Ausnahme stellen die LEDs mit x = 44 % und In-*p*-Kontakten dar. Da bei diesen LEDs, wie zuvor erwähnt, die Betriebsspannung deutlich höher ist, findet das thermische Überrollen möglicherweise bereits bei 5 mA statt, was zu einer geringeren EQE von nur $(0,5\pm0,2)$ % führt. Die LEDs mit einem UV-transparenten p-AlGaN-Übergitter erreichen eine deutlich höhere EQE von bis zu $(2,0 \pm 0,5)$ % bei x = 58 % und $(3,0 \pm 0,3)$ % bei x = 68 % (Abbildung 5.9a). Außerdem zeigt die EQE eine deutliche Abhängigkeit von dem verwendeten p-Kontakt. Im Falle von x = 68 % haben die LEDs mit Au-p-Kontakt (R = 24 %) eine EQE von (1,5 ± 0,3) %, die LEDs mit Pd+Al-*p*-Kontakt (R = 63 %) eine EQE von (2,1 ± 0,3) % und die LEDs mit In-*p*-Kontakt (R = 87%) eine EQE von $(3,0 \pm 0,3)\%$. Die Detektor-LEE (Abbildung 5.9b) liegt bei LEDs mit UV-absorbierendem *p*-AlGaN-Übergitter (x = 33% und x = 44%) bei etwa $(3,9 \pm 0,1)$ % und ist ebenfalls unabhängig vom verwendeten *p*-Kontakt. Für die LEDs mit UV-transparentem *p*-AlGaN-Übergitter steigt die Detektor-LEE im Falle eines In-*p*-Kontakts bis auf $(8,4 \pm 0,4)$ % für x = 58 % und $(9,8 \pm 0,6)$ % für x = 68 % an und weist eine ähnliche Abhängigkeit von dem verwendeten p-Kontakt auf wie die EQE. Der Vergleich von LEDs mit UV-transparentem p-AlGaN-Übergitter und hochreflektierenden In-p-Kontakt mit LEDs mit UV-absorbierender *p*-Seite zeigt, dass die gemessene EQE deutlich stärker steigt als die simulierte Detektor-LEE. Abbildung 5.9c zeigt die resultierende IQE. Im Rahmen des Fehlers ist diese einerseits unabhängig vom verwendeten p-Kontakt, nimmt andererseits aber mit steigendem Al-Stoffmengenanteil im p-AlGaN-Übergitter von (14 ± 3) % bei x = 33% nahezu linear auf (28 ± 5) % bei x = 68 % zu. Eine Ausnahme stellen, wie bereits diskutiert, die LEDs mit In-*p*-Kontakt und x = 44 % dar (Vergleich Abbildung 5.8).

Ein solches Verhalten ist nicht intuitiv, wenn davon ausgegangen wird, dass die aktive Zone und damit die strahlende Rekombinationseffizienz in allen Proben gleich ist und somit die Injektionseffizienz mit steigendem Al-Stoffmengenanteil im *p*-AlGaN-Übergitter zunehmen



Abbildung 5.9: (a) Auf dem Wafer gemessene EQE, (b) simulierte LEE unter Berücksichtigung des Photodetektordurchmessers und -abstands (Detektor-LEE) und (c) die aus EQE und LEE berechnete IQE als Funktion des mittleren Al-Stoffmengenanteils im p-AlGaN-Übergitter von LEDs mit einem Au- (gelb), Pd+Al- (blau) bzw. In- (grün) p-Kontakt. Die Fehlerbalken entsprechen der geschätzten Ungenauigkeit des aus Röntgenmessungen bestimmten Al-Stoffmengenanteils, der Standardabweichung bei der EQE-Messung, dem systematischen Fehler der Raytracing-Simulation sowie dem aus EQE und LEE durch Fehlerfortpflanzung entstehenden Fehler der IQE. Die Verschiebung der Punkte um $\pm 0,5$ % im Al-Stoffmengenanteil dient der besseren Übersicht und ist nicht Teil der Messung. (Messung der EQE von Anna Susilo, TUB)

müsste. Im Folgenden sollen daher verschiedene Erklärungsmöglichkeiten dieser Ergebnisse diskutiert werden. Sehr naheliegend wäre die Möglichkeit, dass die Erhöhung der Lichtextraktion in LEDs mit transparentem *p*-AlGaN-Übergitter deutlich unterschätzt wird. Der Vergleich von den drei verschiedenen p-Kontaktmetallisierungen (mit unterschiedlichen Reflexionsgraden) zeigt jedoch eine gute Übereinstimmung der IQE-Werte für jedes *p*-AlGaN-Übergitter — wie zuvor sei hier die IQE der LEDs mit In-*p*-Kontakt und x = 44%ausgenommen. Dies spricht für eine korrekt simulierte Lichtausbreitung und -streuung in den UVC-LEDs, vor allem im Falle des UV-transparenten p-AlGaN-Übergitters. Des Weiteren kann damit auch der Einfluss von Resonanzeffekten, wie dem Purcell-Effekt [112], als geringfügig abgeschätzt werden. Zwar ist für x = 68 % die IQE von LEDs mit In-*p*-Kontakt höher als die von LEDs mit Au-p-Kontakt, allerdings immer noch im Bereich der jeweiligen Fehlergrenzen. Auf der anderen Seite könnte die Änderung des Brechungsindexes des p-AlGaN-Übergitters von 2,5 + 0,0 *i* (transparent) nach 2,6 + 0,3 *i* (absorbierend) in der Nähe der aktiven Zone zu einer Änderung der Dipolabstrahlungsverteilung führen [113]. Dies hätte ein asymmetrisches Abstrahlungsprofil bezüglich der Quantenfilm-Ebene zur Folge. Allerdings müssten danach ebenfalls die Auswirkungen der Zwischenschicht und des EBL beachtet werden. Solche Effekte können jedoch nicht mithilfe der Strahlenoptik simuliert werden und erfordern die Verwendung von Wellenoptik, was nicht im Rahmen dieser Arbeit lag. Eine andere Erklärung der zunehmenden IQE mit steigendem Al-Stoffmengenanteil im *p*-AlGaN-Übergitter wäre eine steigende Ladungsträgerinjektion in die aktive Zone. Ein steigender Al-Stoffmengenanteil im p-AlGaN-Übergitter reduziert die Potentialbarriere zum Al_{0,75}Ga_{0,25}N-EBL für die Löcher im Valenzband. Zudem hat das *p*-AlGaN-Übergitter mit einem Al-Stoffmengenanteil von 68 % eine größere Bandlücke als die AlGaN-Barrieren in der aktiven Zone mit 63 %, was eine zusätzliche Potentialbarriere für die Elektronen darstellt. Durch das Übergitterdesign könnten ebenfalls quantenmechanische Effekte auftreten, welche den Elektronenleckstrom reduzieren [114, 25]. Diese Effekte könnten zu einer höheren Ladungsträgerinjektionseffizienz führen, welche jedoch nur mit geeigneten Modellen für Übergitter simuliert werden kann. Zum aktuellen Zeitpunkt ist noch nicht klar, ob einer dieser Effekte dominiert oder ob alle Effekte zum beobachteten Verhalten führen.

5.3 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde der Einfluss des Absorptionskoeffizienten (α) der *p*-Seite und des Reflexionsgrads (R) des p-Kontakts auf die LEE und die EQE von UVC-LEDs mit einer Emissionswellenlänge von 263 nm mithilfe von Raytracing-Simulationen und EL-Messungen untersucht. Die Simulationen zeigten, dass die LEE auf Wafer-Ebene um 150 % erhöht werden kann, wenn die absorbierende *p*-Seite durch UV-transparentes *p*-AlGaN ($\alpha < 10^3 \text{ cm}^{-1}$) und einen reflektierenden p-Kontakt (R > 85%) ersetzt wird. Dies konnte unter anderem auf mehrfache Reflexionen zwischen dem p-Kontakt und der ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche zurückgeführt werden. Für die experimentelle Untersuchung wurde die UV-absorbierende p-GaN-Kontaktschicht der konventionellen LED-Heterostruktur entfernt, durch ein *p*-AlGaN-Übergitter ersetzt und der mittlere Al-Stoffmengenanteil zwischen x = 33%(UVC-absorbierend) und x = 68% (UVC-transparent) variiert. Der mittlere Al-Stoffmengenanteil in den p-AlGaN-Übergittern wurde mittels Röntgendiffraktometrie und deren Absorptionskoeffizient mittels Transmissionsmessungen bestimmt. Der Vergleich verschiedener p-Kontaktmetallisierungen zeigte, dass Al als p-Kontakt elektrisch instabil ist und nur In bzw. eine Pd/Al-Metallkombination als reflektierender *p*-Kontakt genutzt werden kann. Zur Untersuchung der Lichtextraktion wurden die Wafer mit p-Kontakten aus Au (200 nm, formiert, R = 24 %), Pd/Al/Au (2 nm/200 nm/200 nm, R = 63 %) und In (200 nm, R = 87%) prozessiert. EL-Messungen zeigten, dass die Betriebsspannung bei einer Stromstärke von 5 mA von etwa 7 V bei x = 33% auf etwa 16 V bei x = 68% zunimmt, was auf den steigenden Serienwiderstand und die größer werdende Shottky-Barriere am p-Kontakt zurückgeführt wurde. Gleichzeitig stieg die EQE für die LEDs mit In-p-Kontakt von $(0,55 \pm 0,1)$ % bei x = 33 % auf bis zu $(3,0 \pm 0,3)$ % bei x = 68 % und somit stärker als aus den Lichtextraktionssimulationen zu erwarten war. Eine Aufteilung der EQE in LEE und IQE zeigte, dass diese Steigerung neben der 1,5-fachen Steigerung der LEE möglicherweise auch durch eine Verdopplung der IQE von (14 ± 3) % bei x = 33 % auf (28 ± 5) % bei x = 68 %, konsistent für verschiedene p-Kontakte, zurückzuführen ist. Als Ursache dieses Ergebnisses konnte eine unterschätzte simulierte LEE bei LEDs mit UV-transparentem p-AlGaN-Übergitter teilweise ausgeschlossen werden. Hingegen könnte der steigende Al-Stoffmengenanteil im *p*-AlGaN-Übergitter zu einer höheren Injektionseffizienz führen.

6 Abstrahlcharakteristik von aufgebauten UVB-LEDs

Bislang wurden in dieser Arbeit die Emissionsleistung und die Lichtextraktion experimentell auf Wafer-Ebene untersucht. Für die Untersuchung einzelner UV-LED-Chips und die kommerzielle Nutzung von LEDs ist es jedoch nötig, die prozessierten Wafer zu vereinzeln und zum Beispiel durch die sogenannte Wende-Montage (engl. *flip-chip-mounting*) auf einem Gehäuse aufzubauen [60] sowie gegebenenfalls mit weiteren optischen Elementen wie Reflektoren und Linsen zu ergänzen [115, 116]. Schematisch wird die in dieser Arbeit verwendete Prozesskette in Abbildung 6.1 dargestellt. In diesem Kapitel werden die Einflüsse der Chipvereinzelung und des Chipaufbaus sowohl experimentell als auch mithilfe von Raytracing-Simulationen an UVB-LEDs untersucht. Im ersten Unterkapitel soll zunächst das einfache Chip-Modell aus Kapitel 3 mithilfe von Fernfeldmessungen an einzelnen Chips weiterentwickelt werden. Ziel ist es dabei, aus der Simulation sogenannte Strahlendateien (engl. ray files) zu generieren, welche die Lichtabstrahlung von den verwendeten UVB-LEDs bestmöglich reproduzieren. Solche Strahlendateien sind im Hinblick auf die Modellierung von effizienten Gehäusedesigns von entscheidender Bedeutung. Beispielhaft wird dies an der Entwicklung eines neuartigen LED-Gehäuses auf Basis von Si mit Al-beschichtetem Reflektor-Rahmen und Fresnel-Linse (Abbildung 6.1, rechts) vom CiS Forschungsinstitut für Mikrosensorik (CIS) vorgestellt [117]. Die Simulationen und experimentellen Untersuchungen an diesem Gehäuse werden dann im zweiten Unterkapitel vorgestellt.



Abbildung 6.1: Schematische Darstellung der Weiterverarbeitung eines prozessierten Wafers (links), durch Chipvereinzelung und Wende-Montage (mittig), zu einem Chip auf einem flachen Gehäuse mit Reflektor und Fresnel-Linse (rechts).



6.1 Entwicklung einer Strahlendatei für UVB-LED-Chips

Für die folgenden Untersuchungen werden vom FBH hergestellte UVB-LEDs mit einer semitransparenten p-Seite und einer Emissionswellenlänge von etwa 310 nm verwendet¹. Es handelt sich hierbei nicht immer um dieselbe LED, jedoch ist die für die Lichtextraktion relevante Heterostruktur ähnlich. Die LEDs werden mittels MOVPE auf planaren AlN/Saphir-Templates abgeschieden. Die nominelle Heterostruktur ist in Abbildung 6.2 schematisch dargestellt und besteht aus einem 80 nm dicken AlN/GaN-Übergitter, einer etwa 4 µm dicken Al_{0,55}Ga_{0,45}N:Si-Stromverteilungsschicht (n-Seite), einer aktiven Zone aus einem (In)AlGaN/(In)AlGaN-Mehrfachquantenfilm, einer 16 nm AlGaN:Mg-Elektronensperrschicht, einem 130 µm dicken AlGaN:Mg-Übergitter mit einem mittleren Al-Stoffmengenanteil von 37 % und einer 20 nm GaN:Mg-Kontaktschicht. Die Wafer werden mittels Standard-Prozesstechniken mit einem V/Al/Ni/Au-n-Kontakt, einem Pt/Au-p-Kontakt, einer Au-Metallverstärkung und einem 300 nm dicken SiN-Isolator zu LEDs verarbeitet. Beide Kontakte werden dabei unter N₂-Atmosphäre formiert. Die Wafer werden anschließend zu LED-Chips vereinzelt und auf einem flachen AlN-Keramik-Gehäuse montiert [118]. Die Chipgröße beträgt 1,06 mm × 0,66 mm, während die Dicke von Substrat und Heterostruktur etwa 0,44 mm beträgt. Zur Vereinzelung des Wafers wird am FBH ein intern fokussierter 532 nm Laser verwendet (engl. internally focused laser scribing). Der Laser durchstrahlt den Wafer von der Epitaxieseite und beschädigt im Fokus schichtweise die Kristallstruktur des Saphirsubstrats. Diese Schäden dienen bei der Vereinzelung als Sollbruchstellen, erzeugen jedoch eine charakteristische Oberflächenstruktur an den Seitenflächen des Chips. Eine Dun-

¹ Die Herstellung der Templates, das Abscheiden der UVB-Heterostruktur, die Prozessierung sowie die Vereinzelung und Aufbau der Chips wurde von Mitarbeitern des FBHs durchgeführt.



Abbildung 6.3: Lichtmikroskopaufnahme des Dunkelfelds der Chipseite nach dem Vereinzelungsprozess. Die LED-Heterostruktur befindet sich im Bild oben. Zu sehen ist eine aufgeraute Saphiroberfläche im Arbeitsbereich des fokussierten Lasers, welche etwa 85 % der Seitenfläche ausmacht.

kelfeld-Lichtmikroskopaufnahme dieser Seitenfläche ist in Abbildung 6.3 zu sehen. Im oberen Bildteil befindet sich die LED-Heterostruktur von nur wenigen Mikrometern und ein schmaler Bereich mit einer Höhe von etwa 80 µm, der glatt gespalten ist. Im unteren Bildteil ist die Aufrauhung des Saphirs zu erkennen, welche etwa 85 % der Chipseitenfläche bedeckt. Eine solche Aufrauhung hat Einfluss auf die Lichtextraktion und kann auch zur Erhöhung der LEE optimiert werden [34, 35, 119]. Daher muss diese Rauheit für die Erzeugung von Strahlendateien der hier untersuchten UVB-LEDs berücksichtigt werden.

6.1.1 Einfluss der Vereinzelung und des Aufbaus von UVB-LEDs auf das Fernfeld

Abbildung 6.4a zeigt das normierte Fernfeld einer UVB-LED auf dem Wafer. Die Verteilung der Strahlungsstärke ist rotationssymmetrisch, hat ihr Maximum bei einem Polarwinkel von $\theta = 0^{\circ}$ und entspricht einer Lambertschen Abstrahlung [60]. Im Gegensatz dazu zeigt das Fernfeld einer UVB-LED als Chip auf einem flachen AlN-Keramik-Gehäuse eine vierzählige Rotationssymmetrie (Abbildung 6.4b). Die Verteilung der Strahlungsstärke zeigt vier Maxima bei einem Polarwinkel von etwa $\theta = 40^{\circ}$ bei den Azimutwinkeln $\varphi = 45^{\circ}$, 135°, 225° und 315°. Ausgehend davon nimmt die Strahlungsstärke sowohl für kleinere als auch für größere Polarwinkel ab. Bei $\theta = 0^{\circ}$ sinkt die Strahlungsstärke auf etwa zwei Drittel des Maximums und für $\theta = 90^{\circ}$ sinkt die Strahlungsstärke auf 20–40 % der maximalen Strahlungsstärke. Diese Messung zeigt, dass die UVB-LED nach der Vereinzelung einen erheblichen Emissionsanteil in Richtung der Chipseiten, -kanten und -ecken hat, wie es auch in der Literatur zu aufgebauten UV-LEDs beobachtet wurde [34, 120]. Da es sich in Abbildung 6.4b um einen LED-Chip auf einem flachen Gehäuse handelt, könnte das Fernfeld vom Gehäuse selbst beeinflusst werden und die Emission in Richtung des Gehäusebodens wird blockiert. Um dies zu umgehen, wird zusätzlich das seitliche Fernfeld eines vereinzelten, aber nicht aufgebauten LED-Chips aufgenommen.

Abbildung 6.5a zeigt die schematische Darstellung des Aufbaus zur Messung des seitlichen Fernfelds. Der einzelne LED-Chip wird an der langen Seitenfläche an einem Halter befestigt



Abbildung 6.4: Vergleich des gemessenen Fernfelds (a) einer UVB-LED auf dem Wafer und (b) einer UVB-LED als Chip auf einem flachen Gehäuse bei einer Stromstärke von 20 mA mit einer Emissionswellenlänge von etwa 310 nm. Die Fernfelder wurden dabei auf die maximale Strahlungsstärke normiert.

und seitlich von oben mit zwei Nadeln kontaktiert. Durch die Bewegung des Photodetektors kann dabei sowohl die untere Hemisphäre in Richtung des Substrats als auch die obere Hemisphäre in Richtung der Kontakte aufgenommen werden. So kann das seitliche Fernfeld eines LED-Chips von $\theta = 0^{\circ}$ bis 180° abgebildet werden, was bei einer LED mit Gehäuse sonst nicht möglich wäre. Ein solches seitliches Fernfeld ist in Abbildung 6.5b für zwei verschiedene Azimutwinkel φ über die Chipkante ($\varphi = 90^{\circ}$) und über die Chipecke ($\varphi = 45^{\circ}$) dargestellt. Zum Vergleich wird außerdem das Fernfeld des Chips auf einem flachen Gehäuse aus Abbildung 6.4b für dieselben Azimutwinkel gezeigt. Für die untere Hemisphäre $(\theta < 90^{\circ})$ stimmen die Fernfelder für einen einzelnen Chip und einen aufgebauten Chip für beide Azimutwinkel für $\theta < 60^{\circ}$ überein. Wie zuvor befindet sich das Maximum der Strahlungsstärke bei einem Polarwinkel von etwa 40° und ist in Richtung der Chipecke ($\varphi = 45^\circ$) stärker ausgeprägt als zu der Chipkante ($\varphi = 90^{\circ}$). Die obere Hemisphäre ($\theta > 90^{\circ}$) des einzelnen Chips zeigt, dass auch hierhin ein nicht unerheblicher Teil des Lichts emittiert wird. Zwar fällt die Strahlungsstärke für $\theta = 180^{\circ}$ fast auf null, erreicht jedoch im lokalen Maximum bei $\varphi = 45^{\circ}$ und $\theta = 120^{\circ}$ etwa ein Drittel der Strahlungsstärke des Maximums der unteren Hemisphäre. Für die komplette obere Hemisphäre entspricht das etwa 30 % bis 40 % der Intensität, welche in die untere Hemisphäre abgestrahlt wird. Wird die LED auf einem flachen (gering UV-reflektierenden) Gehäuse montiert, wird dieses Licht der oberen Hemisphäre fast vollständig vom Gehäuseboden absorbiert. Nur für sehr flache Winkel $(90^{\circ} < \theta < 110^{\circ})$ steigt selbst bei Medien mit geringem Reflexionsgrad die Grenzflächenreflexion nach den Fresnel-Formeln stark an [38]. Diese Reflexion der flachen Strahlen kann die leicht höhere Strahlungsstärke des Chips auf dem flachen Gehäuse im Vergleich zum einzelnen Chip im Bereich zwischen $\theta = 70^{\circ}$ und $\theta = 90^{\circ}$ erklären.



Abbildung 6.5: (a) Schematische Darstellung der Messanordnung zur Messung des Fernfelds eines einzelnen Chips. (b) Vergleich der Fernfeldmessung eines LED-Chips auf einem flachen Gehäuse (gestrichelte Linie) und eines freihängenden LED-Chips (durchgezogene Linie) für die Azimutwinkel 45° (gelb) und 90° (blau).

6.1.2 Einfluss der Oberflächenrauheit auf das simulierte Fernfeld

Für die Raytracing-Simulationen der UVB-LEDs wird folgende vereinfachte Heterostruktur verwendet: Nach dem planaren AlN/Saphir-Template mit 430 µm Saphir und 1,8 µm AlN folgt eine *n*-Seite mit 4450 nm Al_{0,55}Ga_{0,45}N, eine aktiven Zone mit 55 nm Al_{0,32}Ga_{0,68}N (einer effektiven AlGaN-Zusammensetzung aus QWs und QBs) sowie eine *p*-Seite mit 130 nm Al_{0,37}Ga_{0,63}N und 20 nm GaN. Für die Absorptionskoeffizienten werden 10 cm^{-1} (*n*-Seite) [33], 10^3 cm^{-1} (aktive Zone) [32] sowie $2 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-1}$ bzw. $1,4 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$ [71] für die *p*-Seite mit Al_{0,37}Ga_{0,63}N bzw. GaN verwendet. Der optische Polarisationsgrad wird auf Basis von eigenen, hier nicht gezeigten Polarisationsmessungen an ähnlichen UVB-LEDs auf +0,8 (dominant TE) gesetzt. Für die Saphirrückseite und die Saphirseitenflächen wird das in Kapitel 3.3 entwickelte Rauheitsmodell mit einem zur jeweiligen Oberfläche passenden Histogramm der Oberflächenneigungswinkel verwendet. Der Chip hat eine Größe von 1,06 mm × 0,66 mm, wovon die aktive Zone etwa 0,44 mm × 0,44 mm groß ist. Im Falle des Wafers werden die Chip-Dimensionen periodisch fortgesetzt und die aktive Zone hat eine Fläche von 0,83 mm × 0,48 mm. Die simulierten Fernfelder sind immer auf die erzeugte Intensität der aktiven Zone normiert.

Abbildung 6.6 zeigt den Vergleich zwischen den gemessenen und simulierten Fernfeldern von UVB-LEDs. Diese werden dabei sowohl in Richtung der unteren Substrat-Hemisphäre als auch in Richtung der oberen Kontakt-Hemisphäre gezeigt. Die gemessenen Fernfelder sind dabei jeweils auf das simulierte Fernfeld mit der höchsten Übereinstimmung skaliert. Abbildung 6.6a zeigt zunächst die Simulation des Fernfelds der LED auf Wafer-Ebene mit glatter bzw. rauer Saphirrückseite sowie das gemessene (skalierte) Fernfeld. In der Messung wird in die Substrat-Hemisphäre mit bis zu $14 \cdot 10^{-3}$ sr⁻¹ deutlich mehr Intensität emittiert als in die Kontakt-Hemisphäre mit maximal $1 \cdot 10^{-3}$ sr⁻¹. Dass bei einer LED auf dem Wafer Licht in die Kontakt-Hemisphäre emittiert werden kann, liegt an den etwa 120 µm breiten, nahezu UV-transparenten Laserritz-Bahnen zwischen den LEDs. Hier



Abbildung 6.6: Vergleich zwischen den simulierten Fernfeldern von LEDs mit verschiedenen Oberflächenrauheiten und dem gemessenen Fernfeld (a) für eine LED auf dem Wafer und (b) für eine LED als Chip. Die simulierte Strahlungsstärke ist auf die Emissionsleistung der aktiven Zone normiert und die gemessene Strahlungsstärke ist zur Simulation passend skaliert.

wurde die Heterostruktur bis auf die *n*-Seite heruntergeätzt und das von der Substratrückseite reflektierte Licht kann durch den SiN-Isolator auf der geätzten *n*-Seite teilweise extrahiert werden. Der Vergleich zwischen Experiment und Simulation zeigt, dass beide simulierten Fernfelder den charakteristischen Verlauf des gemessenen Fernfelds gut nachbilden können. Im Detail hat jedoch das Fernfeld mit einer glatten Saphirrückseite bei einem Polarwinkel von 0° eine höhere Strahlungsstärke und die Intensität für Polarwinkel größer als 90° ist insgesamt zu gering. Diese Abweichungen können durch das Hinzufügen der Saphirrückseitenrauheit kompensiert werden, sodass sich das gesamte Fernfeld insgesamt besser nachbilden lässt. Aufgrund der steigenden Emission in Richtung der Kontakt-Hemisphäre ergibt sich für die LEE ein leicht höherer Wert von 4,9 % bei einer rauen gegenüber 4,7 % bei einer glatten Saphirrückseite. Die LEE für Strahlen, die in Richtung der Substrat-Hemisphäre extrahiert werden, ist in beiden Fällen etwa gleich und beträgt 4,5 %. Auf Wafer-Ebene wird die Lichtauskopplung aufgrund der rauen Saphirrückseite also kaum beeinflusst.

Abbildung 6.6b zeigt die Simulation des Fernfelds der LED auf Chip-Ebene mit verschiedenen Oberflächeneigenschaften sowie das gemessene (skalierte) Fernfeld. Die simulierten Fernfelder unterscheiden sich nun deutlich voneinander. Werden alle Oberflächen in der Simulation als glatt angenommen (gelbe Linie), so wird die Emission in Richtung der Kontakt-Hemisphäre stark unterschätzt. In diesem Fall können aufgrund der rechtwinkligen Chipgeometrie und der Totalreflexionen im Saphir nur wenige Strahlen in die obere Hemisphäre extrahiert werden (Vergleich Abbildung 3.2d). In diesem Chip-Modell steigt die LEE gegenüber dem Wert auf Wafer-Ebene um etwa 50 % auf einen Wert von 7,3 % an. Dies wird allein durch die zusätzliche Lichtextraktion aus den Chipseiten hervorgerufen (Vergleich Abbildung 3.2c), welche zu einer höheren Strahlungsstärke zwischen 20° und 70° im Vergleich zum Fernfeld auf Wafer-Ebene führt. Wird in der Simulation eine raue Saphirrückseite angenommen (grüne Linie), steigt die Emission in Richtung der Kontakt-Hemisphäre deutlich an. Für Strahlen, die an der rauen Saphirrückseite reflektiert werden, besteht nun die Möglichkeit, in den Extraktionskegel der Seitenflächen zu gelangen und so größtenteils in die obere Hemisphäre extrahiert zu werden. Die LEE nimmt deutlich zu und erreicht nun einen Wert von 10,3 %, wobei das zusätzliche Licht kaum genutzt werden kann, da es in die Kontakt-Hemisphäre gestrahlt wird. Werden in der Simulation ebenfalls raue Chip-Seitenflächen angenommen (blaue Linie) – die in diesem Fall mit Ausnahme der $80 \,\mu m$ glatt gespaltenen Seitenfläche eine ähnliche Rauheit wie für die Saphirrückseite besitzen -, führt dies zu einer steigenden Strahlungsstärke in Richtung der Substrat-Hemisphäre und für Polarwinkel > 140°. Durch die Verwendung einer rauen Saphirrückseite in Kombination mit rauen Seitenflächen können das Emissionsverhältnis zwischen Kontakt-Hemisphäre und Substrat-Hemisphäre, die beiden Maxima bei 40° und 120° sowie die Minima bei 90° und 180° gut reproduziert werden. Die LEE nimmt in diesem Modell einen Wert von 12,4 % an bzw. 8,4 %, wenn nur Strahlen, die in Richtung der Substrat-Hemisphäre extrahiert werden, berücksichtigt werden. Somit steigt die LEE von UVB-LED-Chips gegenüber der LEE von UVB-LEDs auf dem Wafer um 160 % bzw. um 80 %, wenn nur die Substrat-Hemisphäre berücksichtigt wird. Diese Zunahme entspricht den experimentellen Beobachtungen am FBH. Beim statistischen Vergleich der Emissionsleistung von LEDs vor und nach der Vereinzelung konnte je nach Wafer eine Erhöhung der Emissionsleistung zwischen 60~% und 180~%verzeichnet werden [121]. Allerdings zeigt das Simulationsmodell eine gewisse Diskrepanz zwischen Messung und Simulation im Bereich von 0°. Ein Grund ist hier, dass es sich in der Simulation immer noch nur um eine Pseudo-Rauheit handelt (Vergleich Kapitel 1.1.3). Gerade aus den Chipseitenflächen, deren Oberflächen schwer zu modellieren sind, wird in der Simulation möglicherwiese zu viel Licht in Richtung 0° gebrochen. Dies würde bei einer real-rauen Oberfläche aufgrund von Höhenunterschieden erneut gestreut werden. Auch wenn im Rahmen dieser Arbeit in der Simulation verschiedene Verteilungen der Oberflächenneigungswinkel untersucht wurden, so konnte das Fernfeld nicht genauer reproduziert werden als Abbildung 6.6b zeigt. Hier müssen möglicherweise zusätzliche Modelle für die Oberflächenrauheit verwendet werden. Jedoch zeigt dieser Abschnitt, wie entscheidend die Berücksichtigung von rauen Oberflächen ist, um die LED als Strahlenquelle korrekt zu beschreiben.

6.1.3 Strahlendatei typischer UVB-LED-Chips

Abschließend soll in Abbildung 6.7 der Inhalt der generierten Strahlendatei eines typischen UVB-LED-Chips in grafischer Form als Fern- und Nahfeld gezeigt werden. Die Strahlendatei ist hierbei auf eine typische Ausgangsleistung von 10 mW normiert. Abbildung 6.7a und



Abbildung 6.7: Simuliertes Fern- und Nahfeld eines einzelnen LED-Chips, normiert auf eine typische UVB-LED-Ausgangsleistung von 10 mW. (a) Strahlungsstärke in Richtung der Substrat-Hemisphäre. (b) Strahlungsstärke in Richtung der Kontakt-Hemisphäre. (c) Strahlungsflussdichte auf den Chipoberflächen für Licht, welches in die Substrat-Hemisphäre emittiert wird. (d) Strahlungsflussdichte auf den Chipoberflächen für Licht, welches in die Kontakt-Hemisphäre emittiert wird.

Abbildung 6.7b zeigen die simulierten Fernfelder der (a) Substrat-Hemisphäre und (b) Kontakt-Hemisphäre. Beide Fernfelder zeigen die für UV-LED-Chips typischen Intensitätsmaxima in Richtung der Chip-Ecken, wie es qualitativ auch in den Messungen zu sehen ist (Vergleich Abbildung 6.4b). Das Emissionsverhältnis zwischen Kontakt- und Substrat-Hemisphäre liegt mit 0,47 höher als im Experiment mit 0,3 bis 0,4. Grund dafür sind die weniger stark ausgeprägten Maxima der Substrat-Hemisphäre. Die Maxima liegen bei einem etwas kleineren Polarwinkel von etwa 35° gegenüber 40° im experimentell bestimmten Fernfeld und das Minimum bei 0° ist weniger deutlich zu erkennen. Die relative Abweichung der winkelabhängigen Strahlungsstärke zwischen Simulation und Messung beträgt jedoch im Extremfall etwa 20 %, sodass das Modell als ausreichend angesehen wird, um weitere Informationen aus dem Nahfeld zu ziehen. Dieses hat vor allem Einfluss auf nah am Chip liegende Gehäuseelemente wie Reflektoren oder integrierte Linse, wie es im nächsten Kapitel noch näher untersucht wird. Korrespondierend zu den Fernfeldern zeigen Abbildung 6.7c und Abbildung 6.7d die jeweiligen Nahfelder für die in die (c) Substrat-Hemisphäre bzw. (d) Kontakt-Hemisphäre abgegebene Strahlungsflussdichte auf den Chipoberflächen. Wäh-
rend die Chipseitenflächen Emissionsanteile in beide Hemisphären haben, können die Saphirrückseite (Abbildung 6.7c unten) bzw. die Kontaktseite (Abbildung 6.7d oben) ausschließlich Emission in die Substrat- bzw. Kontakt-Hemisphäre abgeben, sodass die jeweils andere Fläche nicht gezeigt werden muss. Durch die Saphirrückseite fließen im Maximum etwa 1,3 W cm⁻² und im Mittel etwa 0,6 W cm⁻². Die Emission zentriert sich hierbei auf den Bereich unter der Mesa (aktive Zone). In diesem Bereich kann ein großer Teil des Lichts auf direktem Weg innerhalb des Austrittskegels der Saphir/Luft-Grenzfläche extrahiert werden (Vergleich Abbildung 3.2b). Verteilt auf die Fläche der Saphirrückseite entspricht dies etwa 40 % der Gesamtleistung des Chips. Somit werden 60 % der Leistung aus den Seitenflächen und im geringen Maße auch aus der Isolatorfläche extrahiert. Anhand der Farbskala ist zu erkennen, dass Licht in Richtung der Substrat-Hemisphäre hauptsächlich nahe der Heterostruktur (oben) mit bis zu 0.6 W cm^{-2} extrahiert wird. In diesem Bereich trifft das Licht innerhalb des Austrittskegels von Saphir/Luft auf die Seitenfläche und kann so gerade noch extrahiert werden (Vergleich Abbildung 3.2c). Dies erklärt auch die laterale Verteilung, welche durch die Position der Mesa definiert wird. Licht in Richtung der Kontakt-Hemisphäre wird neben der Emission aus der Isolatorfläche hauptsächlich nahe der Saphirrückseite (unten) mit bis zu $0.8 \,\mathrm{W \, cm^{-2}}$ extrahiert. Dies ist Licht, welches mindestens einmal an der Saphirrückseite totalreflektiert wurde und dann wiederum in den Austrittskegel von Saphir/Luft auf die Seitenfläche trifft. Im Hinblick auf das Design eines neuartiges Gehäuses mit Reflektor und Fresnel-Linse werden also folgende Anforderungen gestellt: Der Reflektor sollte möglichst nah am Chip liegen, um so nahezu die gesamte Seitenemission reflektieren zu können. Das Design der Fresnel-Linse muss sowohl der hohen Strahlungsflussdichte der Saphirrückseite genügen als auch der Emissionsverteilung, die sich aus den Chipseiten ergibt und durch den Reflektor verändert wird. Nach diesen Vorgaben und der im Rahmen dieser Arbeit generierten Strahlendatei konnte das CIS das neue Gehäuse mit Al-Reflektor und integrierter Fresnel-Linse entwickeln und herstellen. Die Ergebnisse aus den Simulationen sowie die experimentellen Untersuchungsergebnisse dazu werden im folgenden Kapitel vorgestellt.

6.2 Steigerung der Strahlungsstärke durch ein Gehäuse mit Reflektor und Fresnel-Linse

Im vorherigen Unterkapitel konnte gezeigt werden, dass die Abstrahlcharakteristik eines vereinzelten UVB-LED-Chips eine hohe Strahlungsstärke in Richtung der Chipseitenflächen aufweist. Eine solche Abstrahlung kann dann erwünscht sein, wenn zum Beispiel ein Volumen ausgeleuchtet werden soll. Jedoch gibt es auch Anwendungsgebiete, wie zum Beispiel die Gassensorik [6], in denen eine gerichtete Strahlung nötig ist bzw. nur ein schmaler Emissionskegel genutzt werden kann. Um im Anwendungsgebiet optische Elemente außerhalb



(c) Gehäuse mit Reflektor und Fresnel-Linse

Abbildung 6.8: Fotos der verschiedenen Aufbaustadien des CIS-Gehäuses. (a) LED auf einem Si-basierenden Unterbau. (b) LED in einem Unterbau mit Al-beschichtetem Rahmen als Reflektor. (c) LED in einem Unterbau mit Reflektor und Fresnel-Linse aus Quarz. (Fotos von Frank Mehnke, TUB)

des LED-Gehäuses zu vermeiden, wird am CIS an einem LED-Gehäuse gearbeitet, welches diese Optiken integriert [117]. Dies soll ein repräsentatives Beispiel für die Verwendung der zuvor generierten Strahlendatei bei der Modellierung von anwendungsspezifischen LED-Gehäusen sein. Abbildung 6.8 zeigt die verschiedenen Aufbaustadien des sogenannten CIS-Gehäuses. Die LEDs werden auf einen flachen Si-basierenden Unterbau gelötet (Abbildung 6.8a) – im Folgenden als "flaches Gehäuse" bezeichnet. Auf das flache Gehäuse wird ein mit Al-beschichteter und ebenfalls auf Si-basierender Rahmen geklebt, welcher das emittierte Licht umlenken soll (Abbildung 6.8b) – im Folgenden als "Gehäuse mit Reflektor" bezeichnet. Die schrägen Seitenflächen werden durch einen Ätzprozess erzeugt und haben einen Winkel von 55° zur Gehäuseoberfläche. Als Kappe wird eine Fresnel-Linse aus Quarz auf den Rahmen geklebt, welche das Licht weiter bündeln soll (Abbildung 6.8c) – im Folgenden als "Gehäuse mit Reflektor & Linse" bezeichnet. Alle drei Komponenten (der Unterbau, der Al-beschichtete Rahmen und die Fresnel-Linse) können auf Wafer-Ebene in großen Stückzahlen produziert werden, was eine kostengünstige Alternative zu konventionellen AlN-Keramik-Gehäusen darstellen könnte. Zudem können zusätzliche ESD-Schutzdioden direkt in den Si-Gehäuseboden als integrierter Schaltkreis implementiert werden. In diesem Unterkapitel sollen zunächst die Ergebnisse der Raytracing-Simulationen zum Fernfeld und der Lichtextraktionseffizienz vorgestellt werden sowie im Anschluss in einer experimentellen Aufbaustudie untersucht werden, wie sich die Gesamtemissionsleistung und das Fernfeld mit jedem Gehäuseelement ändert.

6.2.1 Simulation des Fernfelds und der Lichtextraktionseffizienz

Für die Simulation des Fernfelds werden zwei Methoden vorgestellt: In der ersten Methode wird das Fernfeld vollständig mit dem in dieser Arbeit entwickelten Raytracing-Programm simuliert. Vorteil ist hier, dass Lichtinteraktionen zwischen dem Rahmen bzw. der Linse und



(c) Gehäuse mit Reflektor und Fresnel-Linse

Abbildung 6.9: Simulationen der von der UVB-LED in den verschiedenen Gehäusen (Vergleich Abbildung 6.8) abgestrahlten Lichtstrahlen (blaue Linien). Die Materialien der LED und der Gehäusekomponenten haben folgende Farbkodierung: UV-transparent = hellblau, gering UV-reflektierend = dunkelgrau, hoch UV-reflektierend = hellgrau.

dem LED-Chip berücksichtigt werden. Der Nachteil ist allerdings, dass hier nur ein vereinfachtes Gehäuse simuliert werden kann und die Fresnel-Linse in dieser Simulation als ein einfaches Kugelsegment aus Quarz modelliert wird. In der zweiten Methode wird das Fernfeld mithilfe der Software *"Zemax"* und der in dieser Arbeit generierten Strahlendatei, die dort als Strahlenquelle dient, simuliert¹. Diese Kombination von *"Zemax"* und der Strahlendatei des Chips erlaubt eine benutzerdefinierte Strahlenquelle (die Strahlendatei des Chips) und die genaue Modellierung des Gehäuses und vor allem der Fresnel-Linse. Der Nachteil ist hier, dass es keine Interaktion von zurückreflektierten Strahlen mit der Strahlenquelle, also dem Chip, gibt. Aus diesem Grund wird die LEE aus der ersten Methode ermittelt und die zweite Methode dient als Vergleich.

Abbildung 6.9 zeigt zunächst die simulierten Lichtstrahlen (blau), die aus der LED oder nach Interaktionen mit dem Gehäuse ins "Freie" gelagt sind, für einen UVB-LED-Chip auf einem flachen Gehäuse, in einem Gehäuse mit Reflektor und in einem Gehäuse mit Reflektor & Linse. Diese Abbildung dient als Veranschaulichung der Lichtabstrahlung und soll für die Diskussion der nun folgenden simulierten Fernfelder genutzt werden. Abbildung 6.10 zeigt das simulierte Fernfeld der UVB-LED-Chips mit den verschiedenen Gehäusen jeweils entlang der kurzen symmetrischen Chipachse (Abbildung 6.10a) und entlang der langen asymmetrischen Chipachse (Abbildung 6.10b). Für das flache Gehäuse und das Gehäuse mit Reflektor liefern beide Simulationsmethoden jeweils ähnliche Fernfelder entlang beider Chipachsen. Im Falle des Gehäuses mit Reflektor & Linse sehen zwar beide Fernfelder entlang der kurzen symmetrischen Chipachse ähnlich aus, entlang der langen asymmetrischen Chipachse gibt es hingegen im Bereich um -40° und 20° deutliche Abweichungen. Grund dafür sind die zuvor genannten Vereinfachungen im Falle der eigenen Raytracing-Simulation. Im Hinblick auf die Lichtextraktionseffizienz werden diese Abweichungen aber nur

¹ Die Simulationen mit *"Zemax"* wurden von Dennis Mitrenga, CIS, durchgeführt und entsprechen den Resultaten aus Referenz [117].



Abbildung 6.10: Simuliertes Fernfeld und Lichtextraktionseffizienz des CIS-Gehäuses (a) entlang der kurzen symmetrischen Chipachse und (b) entlang der langen asymmetrischen Chipachse in den jeweiligen Stufen des Aufbaus: flaches Gehäuse (blau), Gehäuse mit Reflektor (gelb) und Gehäuse mit Reflektor & Linse (grün). Die Simulationsmethoden sind die selbst entwickelte Raytracing-Simulation dieser Arbeit (durchgezogene Linie) und *"Zemax"* mit den generierten Strahlendateien als Quelle (gestrichelte Linie). (*"Zemax"*-Simulation von Dennis Mitrenga, CIS, [117])

durch falsch gebrochene Lichtstrahlen an der Linse verursacht, wohingegen Reflexionsverluste an den Quarzgrenzflächen vergleichbar sein sollten.

Die LEE des flachen Gehäuses beträgt 10,1 %. Das Fernfeld zeigt für beide Chipachsen eine sehr breit verteilte Emission. Die normierte Strahlungsstärke beträgt für einen Bereich zwischen -45° und 45° etwa 0,02 sr⁻¹ und auch für größere Polarwinkel ($|\theta| > 70^{\circ}$) liegt die Strahlungsstärke fast immer über $0,005 \,\mathrm{sr}^{-1}$. Die simulierten Lichtstrahlen (Abbildung 6.9a) zeigen, dass viele Strahlen aus den Chipseitenflächen extrahiert werden und sehr flache Strahlen auch teilweise am Unterbau reflektiert werden. Durch das Hinzufügen des Reflektors steigt die LEE in der Simulation auf 10,8 %. Obwohl der Reflektor das Licht im geringen Maße absorbiert¹, überwiegt hier die zusätzliche Reflexion des Lichts, welches vom Chip in die Kontakt-Hemisphäre emittiert wird. Ohne Reflektor wird es zum großen Teil auf dem Unterbau absorbiert. Durch die schrägen Seitenwände werden die Lichtstrahlen umgelenkt (Abbildung 6.9b) und die Strahlungsstärke nimmt für Winkel zwischen –55° und 55° zu und für höhere (flachere) Winkel ab. In einem Bereich für $|\theta| < 25^{\circ}$ verdoppelt sich die normierte Strahlungsstärke und nimmt auf etwa 0,04 sr⁻¹ zu. Mit dem Aufkleben der Fresnel-Linse sinkt die LEE auf 9,8 %. Durch die Reflexionen an den zwei Quarz/Luft-Grenzflächen von jeweils 4% wird ein Teil des Lichts zurück ins Gehäuse und in den Chip reflektiert, wo es schließlich teilweise absorbiert wird. Allerdings führt die Fresnel-Linse zu einer

¹ Der theoretische Reflexionsgrad der Al-Beschichtung beträgt bei 310 nm 93 % [117].

weiteren Verengung des Fernfelds. Für die asymmetrische Chipachse ist durch den versetzt liegenden *p*-Kontakt zudem die Strahlungsstärke bei positiven Polarwinkeln höher als bei negativen Polarwinkeln. Für $|\theta| > 60^{\circ}$ ist die Strahlungsstärke für beide Chipachsen nahe 0 sr^{-1} . Die simulierten Lichtstrahlen (Abbildung 6.9c) zeigen, dass kaum Licht aus den Seitenflächen der Fresnel-Linse ausgekoppelt wird, sondern an den Quarzglasseitenflächen totalreflektiert wird. Innerhalb eines Öffnungswinkels von -20° bis 20° steigt die normierte Strahlungsstärke hingegen auf 0,065 sr⁻¹, im Falle der asymmetrischen Chipachse sogar auf über 0,08 sr⁻¹.

Die Simulationen deuten demnach auf folgendes Ergebnis hin: Durch das Hinzufügen eines Al-beschichteten Rahmens als Reflektor in Kombination mit einer Fresnel-Linse aus Quarzglas sollte es zu einer vernachlässigbaren Änderung der Emissionsleistung kommen, wohl aber zu einer Verengung des Emissionskegels und Verdreifachung der Strahlungsstärke in einem Halböffnungswinkel von 20°. Dieses Simulationsergebnis gilt es nun experimentell zu verifizieren.

6.2.2 Emissionsleistungen und Fernfelder der verschiedenen Aufbaustadien des Gehäuses

Die UVB-LEDs zur experimentellen Untersuchung der optischen Eigenschaften des CIS-Gehäuses wurden mittels MOVPE auf einem planaren AlN/Saphir-Template abgeschieden¹. Die Heterostruktur besteht aus einem 200 nm dicken AlN/GaN-Übergitter, einer 800 nm dicken Al_{0,66}Ga_{0,34}N-Pufferschicht und einer 3700 nm dicken Al_{0,5}Ga_{0,5}N:Si-Stromverteilungsschicht. Die aktive Zone besteht aus drei 2,2 nm dünnen (In)AlGaN-Quantentöpfen und 7 nm breiten (In)AlGaN-Barrieren. Die *p*-Seite beginnt mit einer 20 nm AlGaN:Mg-Elektronensperrschicht, gefolgt von einem 150 nm dicken Al_{0,42}Ga_{0,58}N:Mg/Al_{0,32}Ga_{0,68}N:Mg-Übergitter und einer 20 nm dünnen GaN:Mg-Kontaktschicht. Anschließend wurde die Heterostruktur mit standard-photolithographischen Methoden zu LEDs prozessiert und vereinzelt². Als *p*-Kontakt wurde 30 nm Pt, als *n*-Kontakt 15/120/20/20 nm V/Al/Ni/Au und als Isolator SiN verwendet. Die LEDs wurden dann am CIS auf einem Si-basierten Unterbau montiert und für den schrittweisen Aufbau zurück ans FBH geliefert. Dort wurde das Gehäuse schrittweise fertiggestellt und die LEDs schließlich in der Ulbricht-Kugel und am Fernfeldmessplatz gemessen³.

¹ Die Herstellung der LED-Heterostruktur und der Templates wurde von Tim Kolbe, FBH, und Arne Knauer, FBH, durchgeführt.

² Die Prozessierung der LED-Wafer wurde von Jens Raß, FBH, durchgeführt.

³ Der schrittweise Aufbau des CIS-Gehäuses wurde von Katrin Hilbrich, FBH, durchgeführt.

Die Messungen des Fernfelds und der Emissionsleistung wurden von Anna Susilo, TUB, unter der Leitung von Neysha Lobo-Ploch, FBH, und Tim Kolbe, FBH, durchgeführt.





Abbildung 6.11 zeigt die in der Ulbricht-Kugel gemessene Stromstärke-Emissionsleistungs-Kennlinie einer repräsentativen UVB-LED für die verschiedenen Aufbaustadien des Gehäuses sowie das Emissionsspektrum der LED auf einem flachen Gehäuse. Das Emissionsspektrum zeigt eine Emission bei 310 nm mit einer Halbwertsbreite von 8 nm. Für alle Aufbaustadien steigt die Emissionsleistung mit der Stromstärke und zeigt nur ein schwaches thermisches Überrollen der Kennlinie. Beim Vergleich der Emissionsleistung bei 100 mA fällt auf, dass die LED im Gehäuse mit Reflektor etwa dieselbe Emissionsleistung von 7,7 mW erreicht wie auf dem flachen Gehäuse. Im Gegensatz dazu sinkt die Emissionsleistung auf 6,3 mW, wenn das Gehäuse mit Reflektor noch die zusätzliche Fresnel-Linse erhält. Andere LEDs, an denen diese Aufbaustudie ebenfalls durchgeführt wurde, zeigen einen ähnlichen Trend. Da es sich immer um dieselbe LED handelt, kann eine Änderung der Emissionsleistung direkt mit einer Änderung der LEE gleichgesetzt werden. Demnach ändert sich die LEE zwischen flachem Gehäuse und Gehäuse mit Reflektor im Experiment nicht, wohingegen aus den Simulationen eine Steigerung von etwa 7 % zu erwarten war. Grund könnte ein geringeres Reflexionsvermögen als der angenommene Wert von 93 % [117] der Al-Beschichtung sein. Auch könnte das in der Simulation zu hoch liegende Emissionsverhältnis zwischen Kontakt- und Substrat-Hemisphäre eine Rolle spielen (Vergleich Kapitel 6.1.3). Danach würde in der Simulation mehr Licht vom Al-beschichteten Rahmen reflektiert werden. Nach dem Hinzufügen der Fresnel-Linse sinkt die LEE im Experiment um etwa 18 %, wohingegen aus den Simulationen nur eine Abnahme von etwa 9 % zu erwarten war. Aufnahmen der Fresnel-Linse mit einem Rasterelektronenmikroskop zeigten Aufrauhungen an den Stufen der Linsensegmente, die zu mehr Rückreflexionen führen könnten [122].

Abbildung 6.12 zeigt die Fernfelder derselben LED für die verschiedenen Aufbaustadien des Gehäuses. Diese sollen zunächst untereinander verglichen werden und später der Schnitt durch diese Fernfelder mit den Simulationen verglichen werden. Die LED auf dem flachen Gehäuse (Abbildung 6.12a) zeigt ein weit aufgespanntes Fernfeld. Die Strahlungsstärke erreicht in den vier Maxima bei $\theta \approx 40^{\circ}$ in Richtung der vier Chipecken einen Wert von



Abbildung 6.12: Fernfeld und Foto der LED in einem flachen Gehäuse (a), in einem Gehäuse mit Al-beschichtetem Rahmen als Reflektor (b) und in einem Gehäuse mit Reflektor und Fresnel-Linse (c) bei einer Stromstärke von 20 mA. (Messungen und Fotos von Anna Susilo, TUB)

0,4 mW sr⁻¹ und liegt selbst bei großen Polarwinkeln von $\theta \approx 80^{\circ}$ noch bei etwa 0,2 mW sr⁻¹. Für dieselbe LED im Gehäuse mit Reflektor (Abbildung 6.12b) verengt sich das Fernfeld. Die maximale Strahlungsstärke steigt auf 0,6 mW sr⁻¹ und liegt nun ringartig bei etwa $\theta = 20^{\circ}$. Mit zunehmendem Polarwinkel fällt die Strahlungsstärke schnell auf weniger als 0,2 mW sr⁻¹ für $\theta > 70^{\circ}$ ab. Für dieselbe LED im Gehäuse mit Rahmen & Linse (Abbildung 6.12c) verengt sich das Fernfeld weiter und ist nun nahezu rotationssymmetrisch. Im ringförmigen Maximum bei $\theta = 20^{\circ}$ wird eine Strahlungsstärke von 1,2 mW sr⁻¹ erreicht und für Polarwinkel über 50° liegt der Wert unter 0,1 mW sr⁻¹. Eine Asymmetrie entlang der langen Chipachse (von $\varphi = 0^{\circ}$ nach $\varphi = 180^{\circ}$), wie es in Abbildung 6.10 simuliert wurde, ist hier nicht zu erkennen.

Abbildung 6.13a zeigt nun den Schnitt durch das Fernfeld aus Abbildung 6.12 als Funktion des Polarwinkels (θ) entlang der kurzen Chipachse, also vom Azimutwinkel 90° ($\theta = 90^{\circ}$) nach 270° ($\theta = -90^{\circ}$), im Vergleich mit den simulierten Fernfeldern aus Abbildung 6.10a für die drei Aufbaustadien des Gehäuses. Die simulierten Fernfelder wurden dabei auf die gemessenen Fernfelder skaliert. Für die LED auf dem flachen Gehäuse stimmen Experiment und Simulation gut überein, wobei es ähnlich wie in Kapitel 6.1.2 eine leichte Unterschätzung der beiden Maxima ($\theta = \pm 40^{\circ}$) und der Ausprägung des lokalen Minimums ($\theta = 0^{\circ}$) gibt. Durch das Hinzufügen des Al-beschichteten Rahmens als Reflektor verringert sich die gemessene Strahlungsstärke für hohe Polarwinkel ($|\theta| \ge 60^{\circ}$). Während die abnehmende



Abbildung 6.13: (a) Vergleich des gemessenen (durchgezogene Linie) und simulierten (gestrichelte Linie) Fernfelds entlang der kurzen symmetrischen Chipachse der LED in den verschiedenen Gehäusen bei einer Stromstärke von 20 mA. Hierbei ist θ = 90° zum Azimutwinkel φ = 90° gerichtet und θ = -90° nach φ = 270°. (b) Über den Raumwinkel integrierte Strahlungsstärke (Emissionsleistung) als Funktion des Integrationsbereichs, welcher durch den Raumwinkel bzw. dem halben Öffnungswinkel gegeben ist, bei einer Stromstärke von 20 mA. (Messung von Anna Susilo, TUB)

Strahlungsstärke für hohe Polarwinkel ($|\theta| > 40^\circ$) gut mit der Simulation übereinstimmt, ist die Strahlungsstärke für kleine Polarwinkel ($|\theta| < 40^\circ$) im Experiment geringer als in der Simulation. Letztere wird gerade von der Emission beeinflusst, welche am Al-beschichteten Rahmen reflektiert wird. Demnach ist das Reflexionsvermögen des Al-beschichteten Rahmens möglicherweise deutlich kleiner als 93 % oder in der Simulation wird zu viel Strahlung in Richtung des Reflektors emittiert. Durch das Hinzufügen der Fresnel-Linse steigt für kleine Polarwinkel ($|\theta| < 20^{\circ}$) die gemessene Strahlungsstärke im Vergleich zum Gehäuse mit Reflektor im Mittel von 0.5 mW sr^{-1} auf 1.0 mW sr^{-1} an und auf mehr als das Dreifache im Vergleich zum flachen Gehäuse. Hier stimmen Experiment und Simulation für das Gehäuse mit Reflektor & Linse gut überein, obwohl im Experiment vermutlich weniger Licht vom Al-beschichteten Rahmen in Richtung der Linse reflektiert wird. Möglicherweise bündelt die Fresnel-Linse die Strahlen stärker als angenommen, wie es an der Breite des Maximums zu erkennen ist. Dies würde das Fernfeld nur leicht schmaler werden lassen, aber für Polarwinkel um 0° zu einer deutlich höheren Strahlungsstärke führen, was in diesem Fall schlussendlich die Unterschiede beim Gehäuse mit Reflektor gerade wieder ausgleicht. Da die Gesamtemissionsleistung der LED beim Aufbringen der Fresnel-Linse jedoch sinkt, gibt es für diesen Gehäusetyp nur einen bestimmten Emissionswinkelbereich (Öffnungswinkel oder Emissionskegel), in dem der Einsatz einer Fresnel-Linse effektiv ist. Abbildung 6.13b zeigt dazu die integrierte gemessene Strahlungsstärke als Funktion des Öffnungswinkels zur Oberflächennormalen (Halböffnungswinkel), also die Emissionsleistung innerhalb eines bestimmten Raumwinkels, für die verschiedenen Aufbaustadien. Bis zu einem Halböffnungswinkel von 40° erreicht die LED im Gehäuse mit Reflektor & Linse eine

mehr als 50 % höhere Emissionsleistung als die LED im Gehäuse mit Reflektor (ohne Linse). Danach sättigt die Emissionsleistung aufgrund der geringen Strahlungsstärke bei höheren Emissionswinkeln, sodass ab einem Halböffnungswinkel von 55° die Emissionsleistung der LED im Gehäuse mit Reflektor & Linse geringer ist als die der LED im Gehäuse mit Reflektor. Es kommt somit bei der Frage, welcher Gehäusetyp als geeignet angesehen werden kann, sehr auf das Anwendungsgebiet bzw. den nutzbaren Emissionskegel dieser LEDs an.

6.3 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde im ersten Abschnitt ein Simulationsmodell für vereinzelte UVB-LED-Chips entwickelt. Fernfeldmessungen an einzelnen Chips zeigten, dass es durch die Vereinzelung neben der zusätzlichen Emission aus den Chipseitenflächen auch zu einer Emission in Richtung der oberen Kontakt-Hemisphäre kommt. Das Verhältnis zwischen der Emission in die obere Kontakt-Hemisphäre und in die untere Substrat-Hemisphäre beträgt etwa 1:3. Raytracing-Simulationen konnten zeigen, dass diese Fernfeldcharakteristik durch eine Kombination von einer rauen Saphirrückseite und teilweise aufgerauten Chipseitenflächen entsteht. Durch die Vereinzelung steigt die LEE von etwa 4,9 % auf 12,4 % und aus den Chipseitenflächen wird etwa 60% des gesamten Lichts extrahiert. Somit ist das Rauheitsmodell in den Raytracing-Simulationen ein entscheidender Faktor für die realistische Simulation des Fernfelds, der LEE und für die Generierung von Strahlendateien von UVB-LED-Chips für die Modellierung von anwendungsspezifischen Gehäusen. Als repräsentatives Beispiel konnte das CIS mit der im Rahmen dieser Arbeit generierten Strahlendatei ein neuartiges LED-Gehäuse auf Si-Basis mit Al-beschichtetem Rahmen als Reflektor und Fresnel-Linse entwickeln. Im zweiten Abschnitt wurden die Simulationsergebnisse der verschiedenen Aufbaustadien des Gehäuses – flaches Gehäuse, Gehäuse mit Reflektor und Gehäuse mit Reflektor & Linse – diskutiert und mit experimentellen Daten aus einer Aufbaustudie verglichen. Die Simulationen deuteten für das Gehäuse mit Reflektor & Linse auf eine dreifache Strahlungsstärke gegenüber einem flachen Gehäuse für Emissionswinkel bis 20° zur Chipnormalen hin, ohne eine signifikante Reduktion der LEE zu bewirken. Messungen der Emissionsleistung von UVB-LEDs in diesem Gehäuse zeigten jedoch, dass diese mit dem Hinzufügen des Reflektors und der Fresnel-Linse insgesamt um etwa 18 % sinkt. Allerdings konnte in den Fernfeldmessungen ebenfalls eine Verdreifachung der Strahlungsstärke für kleine Emissionswinkel bestätigt werden. Begründet wurde dies durch ein möglicherweise geringeres Reflexionsvermögen der Al-Beschichtung oder einer geringeren Chipseitenemission in Kombination mit einer stärkeren Bündelung der Emission durch die Linse. Die generierte Strahlendatei für UVB-LED-Chips kann somit effizient für die Modellierung und Optimierung weiterer anwendungsspezifischer Gehäuse genutzt werden.

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde der Einfluss der Lichtextraktion auf die Effizienz von AlGaN-basierten LEDs mit einer Emissionswellenlänge im tiefen UV-Spektralbereich mithilfe von Elektrolumineszenzspektroskopie und Lichtextraktionssimulationen untersucht. Ziel war es, die LEE und Abstrahlungscharakteristik von UVB- und UVC-LEDs mithilfe eines in dieser Arbeit entwickelten Raytracing-Simulationsprogramms zu bestimmen und so die experimentell ermittelte EQE bezüglich der IQE und LEE zu quantifizieren. Darüber hinaus sollte gezeigt werden, wie das Lichtextraktionsmodell beim Design und der Optimierung von LED-Gehäusen verwendet werden kann.

Das entwickelte Raytracing-Simulationsprogramm rechnet im dreidimensionalen Raum, berücksichtigt den komplexen Brechungsindex der Materialien und die optische Polarisation des Lichts bei der Brechung, Absorption, Reflexion und Transmission sowie das polarisationsabhängige Abstrahlungsmuster der aktiven Zone. Das Simulationsmodell wurde durch verschiedene experimentelle Voruntersuchungen im Verlauf dieser Arbeit um folgende Komponenten erweitert und validiert: ein komplexer Brechungsindex für einen formierten n-Kontakt auf AlGaN, ein Modell für die Rauheit von Oberflächen und ein Modell für eine ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche. Der Reflexionsgrad eines formierten V/Al/Ni/Au-Kontakts auf Al_{0,66}Ga_{0,34}N:Si wurde anhand von Reflexionsmessungen auf 21 % für Wellenlängen zwischen 265 nm und 310 nm bestimmt. Durch den Vergleich mit Transfermatrix-Rechnungen konnte ein Brechungsindex von 1,7 + 2,0 i abgeschätzt werden. Die Rauheit einer Oberfläche wird durch das Histogramm der Oberflächenneigungswinkel eines Höhenprofils charakterisiert. Zur Validierung dieses Modells wurde das Streufernfeld zweier Laser, welche durch die zu untersuchende raue Saphirrückseite strahlen, analysiert. Experiment und Simulationen zeigten eine übereinstimmende Intensitätsverteilung im Fernfeld, welche eine wellenlängenabhängige Charakteristik aufwies. In der Simulation wurde diese Wellenlängenabhängigkeit durch Glättung des Höhenprofils mit einem Gaußfilter erreicht. Hier lieferte ein Radius des Gaußfilters, der etwa dem 1,5-fachen der Wellenlänge entspricht, die höchste Übereinstimmung von Simulation und Experiment. Die ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche wurde mit REM-Aufnahmen analysiert und deren Geometrie und Grenzflächeneigenschaften in die Lichtextraktionssimulation von UVC-LEDs eingebunden. Die Fernfelder von typischen UVC-LEDs zeigten im Fernfeld auf Wafer-Ebene zwei charakteristische Intensitätsmaxima bei Polarwinkeln von ±30°, welche durch Politur der Saphirrückseite in ihrer Intensität zunahmen und Streuprozessen an den ELO-Voids zuzuordnen waren. Die Modellierung der ELO-Voids wurde durch den Vergleich von experimentell bestimmten und simulierten Fernfeldern validiert. Hierbei zeigte sich, dass die Annahme einer hohen Rauheit der Void-Innenwände entscheidend für die Ausbildung der Intensitätsmaxima ist. Das entwickelte und validierte Simulationsmodell für AlGaN-basierte UV-LEDs lieferte nicht nur in dieser Arbeit einen entscheidenden Grundbaustein für die Untersuchungen der LEE, sondern kann und konnte bereits in anderen Arbeiten und wissenschaftlichen Veröffentlichungen eine quantitative Angabe der LEE bereitstellen.

Das Heterostrukturdesign der aktiven Zone von UVC-LEDs hat einen entscheidenden Einfluss auf die Emissionswellenlänge, die optische Polarisation, die Ladungsträgerinjektionseffizienz, die strahlende Rekombinationseffizienz und damit auf LEE und IQE. Hierbei sollte zum einen die starke Effizienzabnahme von UVC-LEDs mit einer Emissionswellenlänge unter 270 nm und zum anderen der Einfluss des Al-Stoffmengenanteils in den AlGaN-QBs der AlGaN-QWs auf die elektro-optischen Eigenschaften von UVC-LEDs untersucht werden. Durch Änderung des Al-Stoffmengenanteils in den AlGaN-QWs und den AlGaN-QBs wurde die Emissionswellenlänge der aktiven Zone von 263 nm nach 218 nm verkürzt. Der gemessene DoP sank mit steigendem Al-Stoffmengenanteil in der aktiven Zone bzw. kürzer werdender Emissionswellenlänge von +0,74 (dominant TE-polarisiert) für 264 nm auf -0,70 (dominant TM-polarisiert) für 220 nm mit einem Übergang (unpolarisiert) bei etwa 239 nm. Dieser Trend konnte mithilfe von *k*·*p*-Bandstruktursimulationen, bei denen sich der DoP von +0,94 (264 nm) nach -0,95 (220 nm) änderte, bestätigt werden. Abweichungen zwischen dem gemessenen und dem simulierten DoP wurden auf Streueffekte an der Bruchkante der Mesa und der ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche zurückgeführt. Der Übergang von dominant TE- zu dominant TM-polarisierter Emission konnte durch einen Wechsel der energetischen Position und Oszillatorstärke der Valenzbandzustände erklärt werden. Ausgehend von der optischen Polarisation der LED-Emission konnten Lichtextraktionssimulationen zeigen, dass die Detektor-LEE von 3,6 % (bei 264 nm) auf 1,3 % (bei 220 nm) abnimmt. Die aus der gemessenen Emissionsleistung ermittelte EQE sank im Experiment zu kürzeren Emissionswellenlängen um fast vier Größenordnungen von 0,6% bei 263 nm auf 1,3 · 10⁻⁴ % bei 218 nm ab. Durch Vergleich mit temperaturabhängigen Photolumineszenzmessungen konnte ermittelt werden, dass diese Annahme der EQE unter 245 nm einer etwa ein bis zwei Größenordnungen sinkenden strahlenden Rekombinationseffizienz und unter 226 nm einer schnell fallenden Injektionseffizienz und weniger einer um 65 % abnehmenden Lichtextraktionseffizienz zugeschrieben werden kann. Durch Erhöhung des Al-Stoffmengenanteils in den AlGaN-QBs von 55 % auf 76 % bei einem konstanten Al-Stoffmengenanteil von 53 % in den AlGaN-QWs verkürzte sich die gemessene Emissionswellenlänge von 269,4 nm (55%) zu 266,6 nm (76%), während sich der DoP von +0,38 (55%) auf +0,66

(76%) tendenziell erhöhte. Hier zeigten $k \cdot p$ -Bandstruktursimulationen, dass die Verschiebung der Emissionswellenlänge primär durch den Ladungsträgereinschluss hervorgerufen wird und dass der DoP sich mit zunehmender Barrierenhöhe aufgrund der abnehmenden Besetzung des abgespaltenen Lochbands erhöht — in den Simulationen bis auf +0,97 bei 76%. Die Steigerung der LEE aufgrund des steigenden Polarisationsgrads und des abnehmenden effektiven Brechungsindexes der aktiven Zone konnte auf etwa 40% abgeschätzt werden. Die Emissionsleistung stieg mit steigendem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs zunächst an, erreichte ein Maximum bei 67% und nahm dann für einen höheren Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs wieder ab. Drift-Diffusions-Simulationen der internen Quanteneffizienz konnten diesen Verlauf gut reproduzieren. Als Ursache der Emissionsleistungs- bzw. EQE-Änderung mit steigendem Al-Stoffmengenanteil in den AlGaN-QBs konnten die bis 68% stetig zunehmende strahlende Rekombinationseffizienz und der gleichzeitig ab etwa 66% stetig zunehmende Elektronenleckstrom über die Elektronensperrschicht ermittelt werden. Dies führt bei Al_{0,53}Ga_{0,47}N-QWs zu einem IQE-Maximum für AlGaN-QBs mit einem Al-Stoffmengenanteil um 67%.

Eine Analyse der Lichtpfade in auf AlGaN-basierenden UV-LEDs mit nicht-UV-transparenter *p*-Seite hat ergeben, dass über drei Viertel der in der aktiven Zone erzeugten Emission in der p-Seite absorbiert wird. Lichtextraktionssimulationen haben gezeigt, dass die LEE auf Wafer-Ebene um 150 % erhöht werden kann, wenn das absorbierende p-(Al)GaN durch ein UV-transparentes p-AlGaN und einen hoch-reflektierenden p-Kontakt ersetzt wird. Dies konnte unter anderem auf mehrfache Reflexionen zwischen dem p-Kontakt und der ELO-AlN/Saphir-Grenzfläche zurückgeführt werden. Für die experimentelle Untersuchung wurde die UV-absorbierende p-Seite aus (Al)GaN:Mg typischer LED-Heterostrukturen mit einer Emissionswellenlänge von 263 nm entfernt, durch ein kurzperiodisches AlGaN:Mg-Übergitter ersetzt und der mittlere Al-Stoffmengenanteil zwischen x = 33%(UVC-absorbierend) und x = 68 % (UVC-transparent) variiert. Der Vergleich verschiedener *p*-Kontaktmetallisierungen zeigte, dass In bzw. Pd/Al mit einem Reflexionsgrad von 87 % bzw. 63 % als UV-reflektierender p-Kontakt und Au mit 24 % als Referenzkontakt mit geringem UV-Reflexionsgrad genutzt werden kann. Elektrolumineszenzmessungen zeigten eine vom Reflexionsgrad unabhängige EQE von etwa 0,6 % für x = 33 % und eine Zunahme der EQE auf 1,5 % bzw. 3 % bei x = 33 % für einen Au- bzw. In-*p*-Kontakt und somit mehr als aus den Lichtextraktionssimulationen zu erwarten war. Eine Aufteilung der EQE in IQE und LEE ergab, dass die zusätzliche Steigerung möglicherweise durch eine Verdopplung der IQE von etwa 15 % bei x = 33 % auf etwa 30 % bei x = 68 % zu begründen ist. Da die IQE konsistent für verschiedene Reflexionsgrade des p-Kontakts stieg, konnte eine unterschätzte simulierte LEE bei LEDs mit UVC--transparentem *p*-AlGaN-Übergitter teilweise ausgeschlossen werden. Hingegen könnte der steigende Al-Stoffmengenanteil im p-AlGaN-Übergitter zu einer höheren Elektronenblockierung und höheren Lochinjektionseffizienz führen.

Die Chipvereinzelungstechnik und die Montage des LED-Chips in ein Gehäuse führen zu Änderungen in der Lichtextraktion und in der Abstrahlcharakteristik. Fernfeldmessungen an einzelnen UVB-LED-Chips gegenüber LEDs auf Wafer-Ebene zeigten, dass es durch die Vereinzelung neben der zusätzlichen Emission aus den Chipseitenflächen auch zu einer Emission in Richtung der oberen Kontakt-Hemisphäre kommt. Das Verhältnis zwischen der Emission in die obere Kontakt-Hemisphäre und in die untere Substrat-Hemisphäre beträgt etwa 1:3. Raytracing-Simulationen konnten zeigen, dass diese Fernfeldcharakteristik durch eine Kombination von einer rauen Saphirrückseite und teilweise aufgerauten Chipseitenflächen entsteht. Durch die Vereinzelung steigt die LEE von 4,9 % auf 12,4 % und aus den Chipseitenflächen wird etwa 60% des gesamten Lichts extrahiert. Auf dieser Grundlage konnte eine Strahlendatei von UVB-LED-Chips für die effiziente Modellierung von anwendungsspezifischen Gehäusen generiert werden. Als repräsentatives Beispiel konnte das CiS Forschungsinstitut für Mikrosensorik ein neuartiges LED-Gehäuse auf Si-Basis mit Al-beschichtetem Rahmen als Reflektor und Fresnel-Linse aus Quarz entwickeln (CIS-Gehäuse). Gegenüber einem flachen Gehäuse deuteten die Simulationen auf eine Verdreifachung der Strahlungsstärke für Emissionswinkel bis 20° zur Chipnormalen ohne eine signifikante Reduktion der LEE hin. Messungen von UVB-LEDs in der Ulbricht-Kugel zeigten, dass die Emissionsleistung der LED mit dem Hinzufügen des Reflektors und der Fresnel-Linse insgesamt um etwa 18 % sank. Allerdings konnte in den Fernfeldmessungen ebenfalls eine Verdreifachung der Strahlungsstärke für kleine Emissionswinkel bestätigt werden.

Das CIS-Gehäuse stellt somit ein erfolgreiches Anwendungsbeispiel für die Modellierung eines Gehäuses mithilfe des in dieser Arbeit entwickelten Simulationsmodells zur Lichtextraktion und den damit generierten Strahlendateien für UV-LEDs dar. Da die Komponenten des CIS-Gehäuses auch für kürzere Wellenlängen ihren hohen Reflexionsgrad (Al-beschichteter Rahmen) und UV-Transparenz (Quarz-Fresnel-Linse) behalten, kann das Gehäuse auch für LEDs mit kürzeren Emissionswellenlängen im UVC-Spektralbereich genutzt werden. Gerade im Hinblick auf UVC-LED auf ELO-AlN/Saphir-Templates — mit ihrer speziellen Fernfeldcharakteristik, hervorgerufen durch Streumechanismen an den ELO-Voids — kann das Simulationsmodell zudem für die Generierung von Strahlendateien für diese UVC-LED-Chips genutzt werden.



- [1] M. Kneissl, T.-Y. Seong, J. Han und H. Amano, "The emergence and prospects of deepultraviolet light-emitting diode technologies", *Nature Photonics* **13**, 233–244 (2019).
- [2] M. Schreiner, J. Martínez-Abaigar, J. Glaab und M. Jansen, "UV-B Induced Secondary Plant Metabolites", *Optik & Photonik* **9**, 34–37 (2014).
- [3] L. Kemény, Z. Csoma, E. Bagdi, A. H. Banham, L. Krenács und A. Koreck, "Targeted phototherapy of plaque-type psoriasis using ultraviolet B–light-emitting diodes", *British Journal of Dermatology* 163, 167–173 (2010).
- [4] M. A. Würtele, T. Kolbe, M. Lipsz, A. Külberg, M. Weyers, M. Kneissl und M. Jekel, "Application of GaN-based ultraviolet-C light emitting diodes – UV LEDs – for water disinfection", *Water Research* 45, 1481–1489 (2011).
- [5] R. Z. Chen, S. A. Craik und J. R. Bolton, "Comparison of the action spectra and relative DNA absorbance spectra of microorganisms: Information important for the determination of germicidal fluence (UV dose) in an ultraviolet disinfection of water", *Water Research* 43, 5087–5096 (2009).
- [6] F. Mehnke, M. Guttmann, J. Enslin, C. Kuhn, C. Reich, J. Jordan, S. Kapanke, A. Knauer, M. Lapeyrade, U. Zeimer, H. Krüger, M. Rabe, S. Einfeldt, T. Wernicke, H. Ewald, M. Weyers und M. Kneissl, "Gas Sensing of Nitrogen Oxide Utilizing Spectrally Pure Deep UV LEDs", *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* 23, 29–36 (2017).
- [7] 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).

- [8] 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).
- [9] Y. Muramoto, M. Kimura und S. Nouda, "Development and future of ultraviolet lightemitting diodes: UV-LED will replace the UV lamp", *Semiconductor Science and Technology* **29**, 084004 (2014).
- [10] 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).
- [11] 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 (1100) AlN", *Physical Review B* 87(23), 235209 (2013).
- [12] Y. Nagasawa und A. Hirano, "A Review of AlGaN-Based Deep-Ultraviolet Light-Emitting Diodes on Sapphire", *Applied Sciences* **8**, (2018).
- [13] M. Kneissl und J. Rass, Hrsg., "III-Nitride Ultraviolet Emitters", Bd. 227, Springer International Publishing (2016).
- [14] D. Liu, S. J. Cho, J. Park, J. Gong, J.-H. Seo, R. Dalmau, D. Zhao, K. Kim, M. Kim, A. R. K. Kalapala, J. D. Albrecht, W. Zhou, B. Moody und Z. Ma, "226 nm AlGaN/AlN UV LEDs using p-type Si for hole injection and UV reflection", *Applied Physics Letters* **113**, 011111 (2018).
- [15] 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).
- [16] H. Hirayama, S. Fujikawa, N. Noguchi, J. Norimatsu, T. Takano, K. Tsubaki und N. Kamata, "222–282 nm AlGaN and InAlGaN-based deep-UV LEDs fabricated on high-quality AlN on sapphire", *Physica Status Solidi A* 206, 1176–1182 (2009).
- [17] A. Fujioka, K. Asada, H. Yamada, T. Ohtsuka, T. Ogawa, T. Kosugi, D. Kishikawa und T. Mukai, "High-output-power 255/280/310 nm deep ultraviolet light-emitting diodes and their lifetime characteristics", *Semiconductor Science and Technology* 29, 084005 (2014).

- [18] C. Pernot, M. Kim, S. Fukahori, T. Inazu, T. Fujita, Y. Nagasawa, A. Hirano, M. Ippommatsu, M. Iwaya, S. Kamiyama, I. Akasaki und H. Amano, "Improved Efficiency of 255–280 nm AlGaN-Based Light-Emitting Diodes", *Applied Physics Express* 3, 061004 (2010).
- [19] S.-i. Inoue, N. Tamari und M. Taniguchi, "150 mW deep-ultraviolet light-emitting diodes with large-area AlN nanophotonic light-extraction structure emitting at 265 nm", *Applied Physics Letters* **110**, 141106 (2017).
- [20] T. Takano, T. Mino, J. Sakai, N. Noguchi, K. Tsubaki und H. Hirayama, "Deep-ultraviolet light-emitting diodes with external quantum efficiency higher than 20% at 275 nm achieved by improving light-extraction efficiency", *Applied Physics Express* 10, 031002 (2017).
- [21] M. A. Khan, N. Maeda, M. Jo, Y. Akamatsu, R. Tanabe, Y. Yamada und H. Hirayama, "13 mW operation of a 295–310 nm AlGaN UV-B LED with a p-AlGaN transparent contact layer for real world applications", *J. Mater. Chem. C* 7(1), 143–152 (2019).
- [22] M. A. Khan, E. Matsuura, Y. Kashima und H. Hirayama, "Overcoming the current injection issue in the 310 nm band AlGaN UVB light-emitting diode", *Japanese Journal of Applied Physics* **59**, SAAD01 (2019).
- [23] S. Wu, M. Guttmann, N. Lobo-Ploch, N. Susilo, F. Gindele, A. Knauer, T. Kolbe, J. Raß, H. K. Cho, K. Hilbrich, S. Einfeldt, T. Wernicke, M. Weyers und M. Kneissl, "Light extraction efficiency enhancement of UVC and UVB LEDs via encapsulation with UVtransparent silicone resin", *Veröffentlichung geplant*.
- [24] A. Yoshikawa, R. Hasegawa, T. Morishita, K. Nagase, S. Yamada, J. Grandusky, J. Mann, A. Miller und L. J. Schowalter, "Improve efficiency and long lifetime UVC LEDs with wavelengths between 230 and 237 nm", *Applied Physics Express* 13, 022001 (2020).
- [25] H. Hirayama, Y. Tsukada, T. Maeda und N. Kamata, "Marked Enhancement in the Efficiency of Deep-Ultraviolet AlGaN Light-Emitting Diodes by Using a Multiquantum-Barrier Electron Blocking Layer", *Applied Physics Express* 3, 031002 (2010).
- [26] M. Ichikawa, A. Fujioka, T. Kosugi, S. Endo, H. Sagawa, H. Tamaki, T. Mukai, M. Uomoto und T. Shimatsu, "High-output-power deep ultraviolet light-emitting diode assembly using direct bonding", *Applied Physics Express* 9, 072101 (2016).
- [27] J. R. Grandusky, S. R. Gibb, M. C. Mendrick, C. Moe, M. Wraback und L. J. Schowalter, "High Output Power from 260 nm Pseudomorphic Ultraviolet Light-Emitting Diodes with Improved Thermal Performance", *Applied Physics Express* 4, 082101 (2011).

- [28] J. R. Grandusky, J. Chen, S. R. Gibb, M. C. Mendrick, C. G. Moe, L. Rodak, G. A. Garrett, M. Wraback und L. J. Schowalter, "270 nm Pseudomorphic Ultraviolet Light-Emitting Diodes with Over 60 mW Continuous Wave Output Power", *Applied Physics Express* 6, 032101 (2013).
- [29] 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).
- [30] K. Aoyama, A. Suzuki, T. Kitano, S. Kamiyama, T. Takeuchi, M. Iwaya und I. Akasaki, "Study on Efficiency Component Estimation of 405 nm Light Emitting Diodes from Electroluminescence and Photoluminescence Intensities", *Japanese Journal of Applied Physics* 52, 08JL16 (2013).
- [31] S. L. Chuang und C. S. Chang, "k·p method for strained wurtzite semiconductors", *Physical Review B* 54(4), 2491–2504 (1996).
- [32] H.-Y. Ryu, I.-G. Choi, H.-S. Choi und J.-I. Shim, "Investigation of Light Extraction Efficiency in AlGaN Deep-Ultraviolet Light-Emitting Diodes", *Applied Physics Express* 6, 062101 (2013).
- [33] J. Yun und H. Hirayama, "Investigation of the light-extraction efficiency in 280 nm AlGaN-based light-emitting diodes having a highly transparent p-AlGaN layer", *Journal of Applied Physics* **121**, 013105 (2017).
- [34] K. H. Lee, H. J. Park, S. H. Kim, M. Asadirad, Y.-T. Moon, J. S. Kwak und J.-H. Ryou, "Lightextraction efficiency control in AlGaN-based deep-ultraviolet flip-chip light-emitting diodes: a comparison to InGaN-based visible flip-chip light-emitting diodes", *Optics Express* 23, 20340–20349 (2015).
- [35] Z. Liu, K. Wang, X. Luo und S. Liu, "Precise optical modeling of blue light-emitting diodes by Monte Carlo ray-tracing", *Optics Express* **18**, 9398–9412 (2010).
- [36] Hahn und Dzewas, "Lineare Algebra / Analytische Geometrie", Braunschweig: *Westermann Schulbuchverlag GmbH* (1992).
- [37] Y. Taniyasu und M. Kasu, "Origin of exciton emissions from an AlN p-n junction lightemitting diode", *Applied Physics Letters* **98**, 131910 (2011).
- [38] E. Hecht, "Optik", F. Siemsen, Hrsg., Bonn: Addison-Wesley (1989).

- [39] B. Sundar, A. C. Hamilton und J. Courtial, "Fermat's principle and the formal equivalence of local light-ray rotation and refraction at the interface between homogeneous media with a complex refractive index ratio", *Optics Letters* 34, 374–376 (2009).
- [40] M. Suzuki, T. Uenoyama und A. Yanase, "First-principles calculations of effective-mass parameters of AlN and GaN", *Physical Review B* 52(11), 8132–8139 (1995).
- [41] M. Röppischer, "Optische Eigenschaften von Aluminium-Galliumnitrid-Halbleitern", Dissertation, *Technische Universität Berlin*, Berlin (2011).
- [42] M. Guttmann, J. Höpfner, C. Reich, L. Sulmoni, C. Kuhn, P. Röder, T. Wernicke und M. Kneissl, "Effect of quantum barrier composition on electro-optical properties of AlGaN-based UVC light emitting diodes", *Semiconductor Science and Technology* 34, 085007 (2019).
- [43] D. Marsal, "Die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen in Wissenschaft und Technik", Mannheim: *Bibliographisches Institut* (1976).
- [44] C. Reich, M. Guttmann, M. Feneberg, T. Wernicke, F. Mehnke, C. Kuhn, J. Rass, M. Lapeyrade, S. Einfeldt, A. Knauer, V. Kueller, M. Weyers, R. Goldhahn und M. Kneissl, "Strongly transverse-electric-polarized emission from deep ultraviolet AlGaN quantum well light emitting diodes", *Applied Physics Letters* **107**, 142101 (2015).
- [45] STR Group, Inc., "SiLENSe Simulator of Light Emitters based on Nitride Semiconductors Physics Summary", Richmond: *STR IP Holding, LLC* (2015).
- [46] J. S. Blakemore, "Approximations for Fermi-Dirac integrals, especially the function F12(η) used to describe electron density in a semiconductor", *Solid-State Electronics* 25, 1067–1076 (1982).
- [47] D. A. B. Miller, D. S. Chemla, T. C. Damen, A. C. Gossard, W. Wiegmann, T. H. Wood und C. A. Burrus, "Band-Edge Electroabsorption in Quantum Well Structures: The Quantum-Confined Stark Effect", *Physical Review Letters* 53(22), 2173–2176 (1984).
- [48] K. A. Bulashevich, O. V. Khokhlev, I. Y. Evstratov und S. Y. Karpov, "Simulation of lightemitting diodes for new physics understanding and device design," SPIE, in *Light-Emitting Diodes: Materials, Devices, and Applications for Solid State Lighting XVI*, 8278, 152–163 (2012).

- [49] S. Y. Karpov und Y. N. Makarov, "Dislocation effect on light emission efficiency in gallium nitride", *Applied Physics Letters* 81, 4721–4723 (2002).
- [50] N. Susilo, E. Ziffer, S. Hagedorn, L. Cancellara, C. Netzel, N. Lobo-Ploch, S. Wu, J. Rass, S. Walde, L. Sulmoni, M. Guttmann, T. Wernicke, M. Albrecht, M. Weyers und M. Kneissl, "Improved performance of UVC-LEDs by combination of high temperature annealing and epitaxially laterally overgrown AlN/sapphire", *Photonics Research* 8(4), 04000589 (2020).
- [51] A. Knauer, A. Mogilatenko, S. Hagedorn, J. Enslin, T. Wernicke, M. Kneissl und M. Weyers, "Correlation of sapphire off-cut and reduction of defect density in MOVPE grown AlN", *Physica Status Solidi B* 253, 809–813 (2016).
- [52] J. Yun, J.-I. Shim und H. Hirayama, "Analysis of efficiency droop in 280-nm AlGaN multiple-quantum-well light-emitting diodes based on carrier rate equation", *Applied Physics Express* 8, 022104 (2015).
- [53] 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**, 071107 (2018).
- [54] A. Ghazaryan, "Untersuchung der Lichtextraktion von AlGaN-basierten UV-LEDs mittels Ray-Tracing Simulationen und Elektrolumineszenzspektroskopie unter Variation der Heterostruktur und des Chip-Designs", Masterarbeit, *Technischen Universitat Berlin*, Berlin (2019).
- [55] T. Kolbe, A. Knauer, C. Chua, Z. Yang, S. Einfeldt, P. Vogt, N. M. Johnson, M. Weyers und M. Kneissl, "Optical polarization characteristics of ultraviolet (In)(Al)GaN multiple quantum well light emitting diodes", *Applied Physics Letters* 97, 171105 (2010).
- [56] I. H. Malitson und M. J. Dodge, "Refractive-index and birefringence of synthetic sapphire", *Journal Of The Optical Society Of America* **62**, 1405–1405 (1972).
- [57] M. Martens, "Optical gain and modal loss in AlGaN based deep UV lasers", Dissertation, *Technischen Universitat Berlin*, Berlin (2018).
- [58] M. H. Crawford, "Chapter One Materials Challenges of AlGaN-Based UV Optoelectronic Devices," in *III-Nitride Semiconductor Optoelectronics*, Bd. 96, 3–44, Z. Mi und C. Jagadish, Hrsg., *Elsevier* (2017).

- [59] M. Kneissl, T. Kolbe, C. Chua, V. Kueller, N. Lobo, J. Stellmach, A. Knauer, H. Rodriguez, S. Einfeldt, Z. Yang, N. M. Johnson und M. Weyers, "Advances in group III-nitride-based deep UV light-emitting diode technology", *Semiconductor Science and Technology* 26, 014036 (2010).
- [60] E. F. Schubert, "Light-Emitting Diodes", Cambridge: *Cambridge University Press* (2006).
- [61] Y. Nagasawa und A. Hirano, "Review of encapsulation materials for AlGaN-based deep-ultraviolet light-emitting diodes", *Photonics Research* **7**, B55–B65 (2019).
- [62] P. Dong, J. Yan, J. Wang, Y. Zhang, C. Geng, T. Wei, P. Cong, Y. Zhang, J. Zeng, Y. Tian, L. Sun, Q. Yan, J. Li, S. Fan und Z. Qin, "282-nm AlGaN-based deep ultraviolet lightemitting diodes with improved performance on nano-patterned sapphire substrates", *Applied Physics Letters* **102**, 241113 (2013).
- [63] 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).
- [64] R. Goldhahn, S. Shokhovets, J. Scheiner, G. Gobsch, T. S. Cheng, C. T. Foxon, U. Kaiser, G. D. Kipshidze und W. Richter, "Determination of Group III Nitride Film Properties by Reflectance and Spectroscopic Ellipsometry Studies", *Physica Status Solidi A* 177, 107–115 (2000).
- [65] S. Shokhovets, R. Goldhahn, G. Gobsch, S. Piekh, R. Lantier, A. Rizzi, V. Lebedev und W. Richter, "Determination of the anisotropic dielectric function for wurtzite AlN and GaN by spectroscopic ellipsometry", *Journal of Applied Physics* 94, 307–312 (2003).
- [66] N. A. Sanford, L. H. Robins, A. V. Davydov, A. Shapiro, D. V. Tsvetkov, A. V. Dmitriev, S. Keller, U. K. Mishra und S. P. DenBaars, "Refractive index study of Al_xGa_{1-x}N films grown on sapphire substrates", *Journal of Applied Physics* 94, 2980–2991 (2003).
- [67] J. Raß, "Außerordentliche Brechungsindex für AlGaN nach H. Wenzel", *Private Kommunikation* (2020).
- [68] M. Winkler, "Dielektrische Funktion von AlGaN zwischen 0,5 eV und 50 eV", *Private Kommunikation* (2019).
- [69] K. Takeuchi, S. Adachi und K. Ohtsuka, "Optical properties of Al_xGa_{1-x}N alloy", *Journal of Applied Physics* **107**, 023306 (2010).

- [70] M. Soltani, R. Soref, T. Palacios und D. Englund, "AlGaN/AlN integrated photonics platform for the ultraviolet and visible spectral range", *Optics Express* 24, 25415– 25423 (2016).
- [71] J. F. Muth, J. D. Brown, M. A. L. Johnson, Z. Yu, R. M. Kolbas, J. W. Cook und J. F. Schetzina, "Absorption Coefficient and Refractive Index of GaN, AlN and AlGaN Alloys", MRS Internet Journal of Nitride Semiconductor Research 4, 502–507 (1999).
- [72] M. R. Vogt, "Development of physical models for the simulation of optical properties of solar cell modules", Dissertation, *Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover*, Hannover (2015).
- [73] P. B. Johnson und R. W. Christy, "Optical constants of transition metals: Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, and Pd", *Physical Review B* **9**, 5056 (1974).
- [74] 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", *Photonics Research* 8, 1381–1387 (2020).
- [75] D. A. B. Miller, "Quantum Mechanics for Scientists and Engineers", Cambridge: *Cambridge University Press* (2008).
- [76] A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov, A. V. Krasilnikova, E. Masetti, A. Duparré, E. Quesnel und D. Ristau, "Investigation of the surface micro-roughness of fluoride films by spectroscopic ellipsometry", *Thin Solid Films* 397, 229–237 (2001).
- [77] S. Babar und J. H. Weaver, "Optical constants of Cu, Ag, and Au revisited", *Applied Optics* **54**, 477–481 (2015).
- [78] A. Duparré, J. Ferre-Borrull, S. Gliech, G. Notni, J. Steinert und J. M. Bennett, "Surface characterization techniques for determining the root-mean-square roughness and power spectral densities of optical components", *Applied Optics* 41, 154–171 (2002).
- [79] J. Enslin, "CaRIne Crystallography an Saphir", Private Kommunikation (2020).
- [80] D. Meschede, "Gerthsen Physik", Berlin: Springer (2006).
- [81] V. Kueller, A. Knauer, C. Reich, A. Mogilatenko, M. Weyers, J. Stellmach, T. Wernicke, M. Kneissl, Z. Yang, C. L. Chua und N. M. Johnson, "Modulated Epitaxial Lateral Overgrowth of AlN for Efficient UV LEDs", *IEEE Photonics Technology Letters* 24, 1603–1605 (2012).

- [82] N. Susilo, S. Hagedorn, D. Jaeger, H. Miyake, U. Zeimer, C. Reich, B. Neuschulz, L. Sulmoni, M. Guttmann, F. Mehnke, C. Kuhn, T. Wernicke, M. Weyers und M. Kneissl, "AlGaN-based deep UV LEDs grown on sputtered and high temperature annealed AlN/sapphire", *Applied Physics Letters* **112**, 041110 (2018).
- [83] S. S. Cohen und G. S. Gildenblat, "Metal-semiconductor contacts and devices", Bd. 13, N. G. Einspruch, Hrsg., Orlando: *Academic Press* (1986).
- [84] M.-F. Huang und T.-H. Lu, "Optimization of the active-Layer structure for the deep-UV AlGaN light-emitting diodes", *IEEE Journal of Quantum Electronics* 42, 820–826 (2006).
- [85] H. Hirayama, T. Kyono, K. Akita, T. Nakamura und K. Ishibashi, "High-efficiency UV LEDs using quaternary InAlGaN", *Electrical Engineering in Japan* **157**, 43–51 (2006).
- [86] T. Kolbe, T. Sembdner, A. Knauer, V. Kueller, H. Rodriguez, S. Einfeldt, P. Vogt, M. Weyers und M. Kneissl, "(In)AlGaN deep ultraviolet light emitting diodes with optimized quantum well width", *Physica Status Solidi A* 207, 2198–2200 (2010).
- [87] T. Kolbe, T. Sembdner, A. Knauer, V. Kueller, H. Rodriguez, S. Einfeldt, P. Vogt, M. Weyers und M. Kneissl, "Carrier injection in InAlGaN single and multi-quantumwell ultraviolet light emitting diodes", *Physica Status Solidi C* 7, 2196–2198 (2010).
- [88] R. G. Banal, M. Funato und Y. Kawakami, "Optical anisotropy in [0001]-oriented Al_xGa_{1-x}N/AlN quantum wells (x>0.69)", *Physical Review B* 79(12), 121308 (2009).
- [89] W. W. Chow, M. Kneissl, J. E. Northrup und N. M. Johnson, "Influence of quantum-wellbarrier composition on gain and threshold current in AlGaN lasers", *Applied Physics Letters* 90, 101116 (2007).
- [90] 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**, 021101 (2012).
- [91] A. Atsushi Yamaguchi, "Valence band engineering for remarkable enhancement of surface emission in AlGaN deep-ultraviolet light emitting diodes", *Physica Status Solidi C* 5, 2364–2366 (2008).
- [92] 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).

- [93] C. Mounir, U. T. Schwarz, I. L. Koslow, M. Kneissl, T. Wernicke, T. Schimpke und M. Strassburg, "Impact of inhomogeneous broadening on optical polarization of highinclination semipolar and nonpolar In_xGa_{1-x}N/GaN quantum wells", *Physical Review B* **93**(23), 235314 (2016).
- [94] T. Kohno, Y. Sudo, M. Yamauchi, K. Mitsui, H. Kudo, H. Okagawa und Y. Yamada, "Internal Quantum Efficiency and Nonradiative Recombination Rate in InGaN-Based Near-Ultraviolet Light-Emitting Diodes", *Japanese Journal of Applied Physics* 51, 072102 (2012).
- [95] N. Nepal, J. Li, M. L. Nakarmi, J. Y. Lin und H. X. Jiang, "Exciton localization in AlGaN alloys", *Applied Physics Letters* **88**, 062103 (2006).
- [96] Y. Hayakawa, T. Fukuno, K. Nakamura, H. Miyake, K. Hiramatsu und Y. Yamada, "Binding energy of localized biexcitons in AlGaN-based quantum wells", *Applied Physics Express* 7, 122101 (2014).
- [97] F. Römer, B. Witzigmann, M. Guttmann, N. Susilo, T. Wernicke und M. Kneissl, "Inhomogeneous spectral broadening in deep ultraviolet light emitting diodes," SPIE, in *Physics and Simulation of Optoelectronic Devices XXVII*, **10912**, 18–26 (2019).
- [98] N. Susilo, M. Schilling, M. Narodovitch, H.-H. Yao, X. Li, B. Witzigmann, J. Enslin, M. Guttmann, G. G. Roumeliotis, M. Rychetsky, I. Koslow, T. Wernicke, T. Niermann, M. Lehmann und M. Kneissl, "Precise determination of polarization fields in c-plane GaN/Al_xGa_{1-x}N/GaN heterostructures with capacitance-voltage-measurements", *Japanese Journal of Applied Physics* **58**, SCCB08 (2019).
- [99] S.-H. Park und S.-L. Chuang, "Spontaneous polarization effects in wurtzite GaN/AlGaN quantum wells and comparison with experiment", *Applied Physics Letters* 76, 1981–1983 (2000).
- [100] Y. Kuo, J. Chang, F. Chen, Y. Shih und H. Chang, "Numerical Investigation on the Carrier Transport Characteristics of AlGaN Deep-UV Light-Emitting Diodes", *IEEE Journal of Quantum Electronics* 52, 1–5 (2016).
- [101] M. Jo, N. Maeda und H. Hirayama, "Enhanced light extraction in 260 nm light-emitting diode with a highly transparent p-AlGaN layer", *Applied Physics Express* 9, 012102 (2015).
- [102] K. M. McPeak, S. V. Jayanti, S. J. P. Kress, S. Meyer, S. Iotti, A. Rossinelli und D. J. Norris, "Plasmonic Films Can Easily Be Better: Rules and Recipes", ACS Photonics 2, 326–333 (2015).

- [103] K. Ide, Y. Matsubara, M. Iwaya, S. Kamiyama, T. Takeuchi, I. Akasaki und H. Amano, "Microstructure Analysis of AlGaN on AlN Underlying Layers with Different Threading Dislocation Densities", *Japanese Journal of Applied Physics* 52, 08JE22 (2013).
- [104] M. Martens, C. Kuhn, T. Simoneit, S. Hagedorn, A. Knauer, T. Wernicke, M. Weyers und M. Kneissl, "The effects of magnesium doping on the modal loss in AlGaN-based deep UV lasers", *Applied Physics Letters* **110**, 081103 (2017).
- [105] G. Greco, F. Iucolano und F. Roccaforte, "Ohmic contacts to Gallium Nitride materials", *Applied Surface Science* **383**, 324–345 (2016).
- [106] H. B. Michaelson, "The work function of the elements and its periodicity", *Journal of Applied Physics* **48**, 4729–4733 (1977).
- [107] H. K. Cho, I. Ostermay, U. Zeimer, J. Enslin, T. Wernicke, S. Einfeldt, M. Weyers und M. Kneissl, "Highly Reflective p-Contacts Made of Pd-Al on Deep Ultraviolet Light-Emitting Diodes", *IEEE Photonics Technology Letters* 29, 2222–2225 (2017).
- [108] N. Maeda, J. Yun, M. Jo und H. Hirayama, "Enhancing the light-extraction efficiency of AlGaN deep-ultraviolet light-emitting diodes using highly reflective Ni/Mg and Rh as p-type electrodes", Japanese Journal of Applied Physics 57, 04FH08 (2018).
- [109] T. Kolbe, "Einfluss des Heterostrukturdesigns auf die Effizienz und die optische Polarisation von (In)AlGaN-basierten Leuchtdioden im ultravioletten Spektralbereich", Dissertation, *Technische Universität Berlin*, Berlin (2012).
- [110] J. L. Hartke, "The Three-Dimensional Poole-Frenkel Effect", Journal of Applied Physics 39, 4871–4873 (1968).
- [111] 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).
- [112] H.-Y. Ryu, "Modification of internal quantum efficiency and efficiency droop in GaNbased flip-chip light-emitting diodes via the Purcell effect", *Optics Express* 23, A1157–A1166 (2015).
- [113] W. Lukosz, "Light emission by magnetic and electric dipoles close to a plane dielectric interface. III. Radiation patterns of dipoles with arbitrary orientation", J. Opt. Soc. Am. 69, 1495–1503 (1979).

- [114] K. Iga, H. Uenohara und F. Koyama, "Electron reflectance of multiquantum barrier (MQB)", *Electronics Letters* **22**, 1008–1010 (1986).
- [115] X. Qiu, J. C. C. Lo und S. W. R. Lee, "Packaging of UV LED with a stacked silicon reflector for converged UV emission," in 2017 International Conference on Electronics Packaging (ICEP), 259–263 (2017).
- [116] NGK INSULATORS, LTD., "Micro-Lens for UV-LED", https://www.ngk-insulators.com/en/product/electron/uv_led_microlens/index.html [Zugriff am 10 Mai 2020].
- [117] I. Kaepplinger, R. Taeschner, D. Mitrenga, D. Karolewski, L. Li, C. Meier, M. Schaedel und T. Ortlepp, "An innovative Si package for high-performance UV LEDs," SPIE, in *Light-Emitting Devices, Materials, and Applications*, **10940**, 35–45 (2019).
- [118] J. Rass, T. Kolbe, N. Lobo-Ploch, T. Wernicke, F. Mehnke, C. Kuhn, J. Enslin, M. Guttmann, C. Reich, A. Mogilatenko, J. Glaab, C. Stoelmacker, M. Lapeyrade, S. Einfeldt, M. Weyers und M. Kneissl, "High-power UV-B LEDs with long lifetime," SPIE, in *Gallium Nitride Materials and Devices X*, 9363, 182–194 (2015).
- [119] Y. Guo, Y. Zhang, J. Yan, H. Xie, L. Liu, X. Chen, M. Hou, Z. Qin, J. Wang und J. Li, "Light extraction enhancement of AlGaN-based ultraviolet light-emitting diodes by substrate sidewall roughening", *Applied Physics Letters* **111**, 011102 (2017).
- [120] M. Shatalov, W. Sun, Y. Bilenko, A. Sattu, X. Hu, J. Deng, J. Yang, M. Shur, C. Moe, M. Wraback und R. Gaska, "Large Chip High Power Deep Ultraviolet Light-Emitting Diodes", *Applied Physics Express* **3**, 062101 (2010).
- [121] N. Lobo-Ploch, "Vergleich der LED Emissionsleistung vor und nach der Vereinzelung", *Private Kommunikation* (2020).
- [122] I. Käpplinger, "Mount-LED Statustreffen Optimierung der Linsengeometrie", *Private Kommunikation* (2018).

Anhang A: Ergänzungen zur Raytracing-Simulation

A.1 Herleitung der vektoriellen Form des Snelliusschen Brechungsgesetzes

Betrachtet man das Snelliussche Brechungsgesetz vektoriell in einer Einheitskugel bzw. in einem Einheitskreis der Einfallsebene, so ergeben sich die in Abbildung A.1 gezeigten Beziehungen der Reflexionsrichtung \vec{v}_1' und Transmissionsrichtung \vec{v}_2 in Abhängigkeit der Einfallsrichtung \vec{v}_1 an der Grenzfläche mit dem Normalenvektor \vec{n} . Neben der Äquivalenz von $\cos \theta_1 = \langle \vec{v}_1, \vec{n} \rangle$ und $\cos \theta_2 = \langle \vec{v}_2, \vec{n} \rangle$ ist der normierte Tangentialvektor \vec{t} gegeben durch:

$$\vec{t} = (\vec{v}_1 - \vec{n} \, \cos\theta_1) \frac{1}{\sin\theta_1} \tag{A.1}$$

Die Herleitung für die Reflexionsrichtung \vec{v}'_1 ist:

$$\vec{v}_1' = \vec{v}_1 - 2\,\vec{n}\cos\theta_1 \tag{A.2}$$

$$= \vec{v}_1 - 2\,\vec{n}\,\langle\vec{v}_1,\vec{n}\rangle\tag{A.3}$$



Abbildung A.1: Vektorielle Form des Brechungsgesetzes, dargestellt in einem Einheitskreis. Ein Lichtstrahl mit der Einfallsrichtung \vec{v}_1 unter dem Winkel θ_1 wird an der Ebene mit dem Normalenvektor \vec{n} und Tangentialvektor \vec{t} zwischen zwei Medien mit den Brechungsindizes n_1 und n_2 in Richtung \vec{v}'_1 reflektiert und in Richtung \vec{v}_2 unter dem Winkel θ_2 transmittiert. Die Herleitung für die Transmissionsrichtung \vec{v}_2 setzt sich aus einem tangentialen und normalen Anteil zusammen sowie mithilfe des abgewandelten Brechungsgesetzes (Gleichung 1.19) mit den Brechungsindizes der beiden Medien n_1 und n_2 :

$$\vec{v}_2 = \underbrace{\vec{t}\sin\theta_2}_{\text{tangential}} + \underbrace{\vec{n}\cos\theta_2}_{\text{orthogonal}}$$
(A.4)

$$= (\vec{v}_1 - \vec{n}\,\cos\theta_1)\frac{\sin\theta_2}{\sin\theta_1} + \vec{n}\sqrt{1 - \sin^2\theta_2} \tag{A.5}$$

$$= (\vec{v}_1 - \vec{n} \langle \vec{v}_1, \vec{n} \rangle) \left| \frac{n_1}{n_2} \right| + \vec{n} \sqrt{1 - \left| \frac{n_1}{n_2} \right|^2 \sin^2 \theta_1}$$
(A.6)

$$= (\vec{v}_1 - \vec{n} \, \langle \vec{v}_1, \vec{n} \rangle) \left| \frac{n_1}{n_2} \right| + \vec{n} \sqrt{1 - \left| \frac{n_1}{n_2} \right|^2 (1 - \cos^2 \theta_1)} \tag{A.7}$$

$$= \underbrace{\left(\vec{v}_{1} - \vec{n} \langle \vec{v}_{1}, \vec{n} \rangle\right) \left| \frac{n_{1}}{n_{2}} \right|}_{\text{tangential}} + \underbrace{\vec{n} \sqrt{1 - \left| \frac{n_{1}}{n_{2}} \right|^{2} (1 - \langle \vec{v}_{1}, \vec{n} \rangle^{2})}}_{\text{orthogonal}}$$
(A.8)

A.2 Herleitung der vektoriellen Form der Fresnelschen Formeln

Wie zuvor können durch die Äquivalenzen von $\cos \theta_1 = \langle \vec{v}_1, \vec{n} \rangle$ und $\cos \theta_2 = \langle \vec{v}_2, \vec{n} \rangle$ sowie dem Snelliussche Brechungsgesetz $n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2$ die Fresnelschen Formeln [38] ebenfalls in eine vektorielle Form gebracht werden. Für das senkrecht polarisierte Licht gilt:

$$r_{\perp} = \frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} = \frac{\cos \theta_1 - \frac{n_2}{n_1} \cos \theta_2}{\cos \theta_1 + \frac{n_2}{n_1} \cos \theta_2}$$
(A.9)

$$=\frac{\cos\theta_{1}-\frac{n_{2}}{n_{1}}\sqrt{1-\sin^{2}\theta_{2}}}{\cos\theta_{1}+\frac{n_{2}}{n_{1}}\sqrt{1-\sin^{2}\theta_{2}}}=\frac{\cos\theta_{1}-\frac{n_{2}}{n_{1}}\sqrt{1-\left(\frac{n_{1}}{n_{2}}\right)^{2}\sin^{2}\theta_{1}}}{\cos\theta_{1}+\frac{n_{2}}{n_{1}}\sqrt{1-\left(\frac{n_{1}}{n_{2}}\right)^{2}\sin^{2}\theta_{1}}}$$
(A.10)

$$=\frac{\cos\theta_{1}-\sqrt{\left(\frac{n_{2}}{n_{1}}\right)^{2}-\sin^{2}\theta_{1}}}{\cos\theta_{1}+\sqrt{\left(\frac{n_{2}}{n_{1}}\right)^{2}-\sin^{2}\theta_{1}}}=\frac{\cos\theta_{1}-\sqrt{\left(\frac{n_{2}}{n_{1}}\right)^{2}-(1-\cos^{2}\theta_{1})}}{\cos\theta_{1}+\sqrt{\left(\frac{n_{2}}{n_{1}}\right)^{2}-(1-\cos^{2}\theta_{1})}}$$
(A.11)

$$\cos\theta_{1} + \sqrt{\left(\frac{n_{2}}{n_{1}}\right)^{2} - \sin^{2}\theta_{1}} \quad \cos\theta_{1} + \sqrt{\left(\frac{n_{2}}{n_{1}}\right)^{2} - (1 - \cos^{2}\theta_{1})}$$

$$= \frac{\langle \vec{v}_{1}, \vec{n} \rangle - \sqrt{\left(\frac{n_{2}}{n_{1}}\right)^{2} + \langle \vec{v}_{1}, \vec{n} \rangle^{2} - 1}}{\langle \vec{v}_{1}, \vec{n} \rangle + \sqrt{\left(\frac{n_{2}}{n_{1}}\right)^{2} + \langle \vec{v}_{1}, \vec{n} \rangle^{2} - 1}}$$
(A.12)

Für das parallel polarisierte Licht gilt:

$$r_{\parallel} = \frac{n_2 \cos \theta_1 - n_1 \cos \theta_2}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2} = \frac{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2 \cos \theta_1 - \frac{n_2}{n_1} \cos \theta_2}{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2 \cos \theta_1 + \frac{n_2}{n_1} \cos \theta_2}$$
(A.13)

$$=\frac{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2\cos\theta_1 - \frac{n_2}{n_1}\sqrt{1 - \sin^2\theta_2}}{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2\cos\theta_1 + \frac{n_2}{n_1}\sqrt{1 - \sin^2\theta_2}} = \frac{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2\cos\theta_1 - \frac{n_2}{n_1}\sqrt{1 - \left(\frac{n_1}{n_2}\right)^2\sin^2\theta_1}}{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2\cos\theta_1 + \frac{n_2}{n_1}\sqrt{1 - \left(\frac{n_1}{n_2}\right)^2\sin^2\theta_1}}$$
(A.14)

$$=\frac{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2\cos\theta_1 - \sqrt{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2 - \sin^2\theta_1}}{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2\cos\theta_1 + \sqrt{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2 - \sin^2\theta_1}} = \frac{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2\cos\theta_1 - \sqrt{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2 - (1 - \cos^2\theta_1)}}{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2\cos\theta_1 + \sqrt{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2 - (1 - \cos^2\theta_1)}}$$
(A.15)

$$=\frac{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2 \langle \vec{v}_1, \vec{n} \rangle - \sqrt{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2 + \langle \vec{v}_1, \vec{n} \rangle^2 - 1}}{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2 \langle \vec{v}_1, \vec{n} \rangle + \sqrt{\left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2 + \langle \vec{v}_1, \vec{n} \rangle^2 - 1}}$$
(A.16)

A.3 Herleitung des Amplitudenvektors des reflektierten und transmittierten Strahls

Betrachtet man die Brechung und Reflexion eines Lichtstrahls mit der Richtung \vec{v}_1 an einer Grenzfläche mit der Normalen \vec{n} , so ist die Einfallsebene durch ihren Normalenvektor $\vec{n}_i = \vec{v}_1 \times \vec{n}$ bestimmt. Die Polarisation eines Lichtstrahls wird in der Simulation durch die Richtung des Amplitudenvektors \vec{E} ausgedrückt, welcher immer senkrecht zur Strahlenrichtung steht. Die gesuchten Amplitudenvektoren \vec{E}_r und \vec{E}_t des reflektierten und transmittierten Strahls können daher wie folgt in eine zur Einfallsebene parallele und senkrechte Komponente aufgeteilt werden:

$$\vec{E}_{r} = \underbrace{\langle \vec{E}_{r}, \vec{n}_{i} \rangle \vec{n}_{i}}_{\text{senkrecht}} + \underbrace{\langle \vec{E}_{r}, \vec{v}_{1}' \times \vec{n}_{i} \rangle (\vec{v}_{1}' \times \vec{n}_{i})}_{\text{parallel}}$$
(A.17)

$$\vec{E}_{t} = \underbrace{\langle \vec{E}_{t}, \vec{n}_{i} \rangle \vec{n}_{i}}_{\text{senkrecht}} + \underbrace{\langle \vec{E}_{t}, \vec{v}_{2} \times \vec{n}_{i} \rangle (\vec{v}_{2} \times \vec{n}_{i})}_{\text{parallel}}$$
(A.18)

Wie viel Lichtintensität senkrecht bzw. parallel reflektiert bzw. transmittiert wird, wird gerade durch R_{\perp} , R_{\parallel} , T_{\perp} und T_{\parallel} bestimmt. Hierbei gelten die Beziehungen:

$$R_{\perp} = \frac{\langle \vec{E}_{r}, \vec{n}_{i} \rangle^{2}}{\langle \vec{E}, \vec{n}_{i} \rangle^{2}} \quad ; \quad T_{\perp} = \frac{\langle \vec{E}_{t}, \vec{n}_{i} \rangle^{2}}{\langle \vec{E}, \vec{n}_{i} \rangle^{2}} \tag{A.19}$$

$$R_{\parallel} = \frac{\langle \vec{E}_r, \vec{v}_1' \times \vec{n}_i \rangle^2}{\langle \vec{E}, \vec{v}_1 \times \vec{n}_i \rangle^2} \quad ; \quad T_{\parallel} = \frac{\langle \vec{E}_t, \vec{v}_2 \times \vec{n}_i \rangle^2}{\langle \vec{E}, \vec{v}_1 \times \vec{n}_i \rangle^2} \tag{A.20}$$

Durch Einsetzen der Relationen A.19 und A.20 in die Gleichungen A.17 und A.18 ergibt sich:

$$\vec{E}_r = \sqrt{R_\perp} \langle \vec{E}, \vec{n}_i \rangle \, \vec{n}_i + \sqrt{R_\parallel} \, \langle \vec{E}, \vec{v}_1 \times \vec{n}_i \rangle \, (\vec{v}_1' \times \vec{n}_i) \tag{A.21}$$

$$\vec{E}_t = \sqrt{T_\perp} \langle \vec{E}, \vec{n}_i \rangle \, \vec{n}_i + \sqrt{T_\parallel} \, \langle \vec{E}, \vec{v}_1 \times \vec{n}_i \rangle \, (\vec{v}_2 \times \vec{n}_i) \tag{A.22}$$

A.4 Einträge der Rotationsmatrix für raue Oberflächen

Die zufällige Neigung des Normalenvektors \vec{n} einer Ebene mit einer Matrix \vec{K} erfolgt im lokalen Raum der Ebene, sodass zusätzlich eine Koordinatentransformationsmatrix \vec{T}^{-1} bzw. \vec{T} nötig ist, welche den Vektor zwischen dem globalen und lokalen System transformiert. Für den geneigten Normalenvektor \vec{n}' gilt:

$$\vec{n}' = \vec{M}(\vec{n}, \varphi, \theta) \cdot \vec{n} = \vec{T}(\vec{n}) \cdot \vec{K}(\varphi, \theta) \cdot \vec{T}^{-1}(\vec{n}) \cdot \vec{n}$$
(A.23)

Die beiden Matrizen \overrightarrow{K} und \overrightarrow{T} haben dabei folgende Einträge:

$$\vec{K}(\varphi,\theta) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi\cos\theta & \sin\varphi\sin\theta\\ \sin\varphi & \cos\varphi\cos\theta & -\cos\varphi\sin\theta\\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$
(A.24)

$$\dot{T}(\vec{n}) = \dot{T} \begin{pmatrix} n_{\chi} \\ n_{y} \\ n_{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{n_{\chi}^{2}n_{z} + n_{y}^{2}}{n_{\chi}^{2} + n_{y}^{2}} & \frac{n_{\chi}n_{y}n_{z} - n_{\chi}n_{y}}{n_{\chi}^{2} + n_{y}^{2}} & n_{\chi} \\ \frac{n_{\chi}n_{y}n_{z} - n_{\chi}n_{y}}{n_{\chi}^{2} + n_{y}^{2}} & \frac{n_{\chi}^{2} + n_{y}^{2}n_{z}}{n_{\chi}^{2} + n_{y}^{2}} & n_{y} \\ -n_{\chi} & -n_{y} & n_{z} \end{pmatrix}$$
(A.25)

Für den Fall, dass $n_x^2 + n_y^2 = 0$ ist, wird in den Matrixeinträgen der jeweilige Grenzwert von $n_x^2 + n_y^2$ gegen 0 verwendet.

A.5 Brechungsindex von AlGaN – Literaturvergleich

Tabelle A.1 zeigt einen Vergleich verschiedener Modelle für den Brechungsindex von AlGaN für ausgewählte Al-Stoffmengenanteile und Wellenlängen. Die Unterschiede im Brechungsindex nehmen mit steigendem Al-Stoffmengenanteil bzw. kürzer werdender Wellenlänge zu. Das Modell nach WENZEL stellt hierbei einen repräsentativen Datensatz zur Verfügung.

Material	AIN			Al _{0,8} Ga _{0,2} N		Al _{0,5} Ga _{0,5} N
Wellenlänge (nm)	230	265	310	265	310	310
Photonenenergie (eV)	5,39	4,68	4,00	4,68	4,00	4,00
Wenzel (o) [57]	2,47	2,31	2,22	2,44	2,31	2,47
Wenzel (ao) [67]	2,60	2,40	2,28	2,53	2,37	2,54
Winkler (o) [68]	2,46	2,31	2,21	2,42	2,29	2,49
Winkler (ao) [68]	2,59	2,39	2,28	2,51	2,35	2,49
Takeuchi [69]	2,29	2,20	2,14	2,40	2,26	2,52
Soltani (o) [70]	2,58	2,39	2,27	2,46	2,33	2,45
Soltani (ao) [70]	2,52	2,38	2,28	2,47	2,35	2,49

Tabelle A.1: Vergleich verschiedener Modelle für den ordentlichen (o) und außerordentlichen (ao) Brechungsindex von AlGaN für ausgewählte Al-Stoffmengenanteile und Wellenlängen.

Anhang B: Probenverzeichnis

Abbildung 2:	TS5205 (233 nm), TS4782 (239 nm), TS4780 (249 nm), TS4777 (263 nm), TS5166-3 (263 nm), P1687-2 (310 nm)
Abbildung 3.4:	TS5643-3z
Abbildung 3.5:	TS4236
Abbildung 3.6:	TS4236
Abbildung 3.7:	TS4236
Abbildung 3.8:	TS4236
Abbildung 3.10:	TS4669-3-3
Abbildung 3.11:	TS4669-3-3
Abbildung 3.12a:	TS4236
Abbildung 3.12b:	TS4669-3-3
Abbildung 3.12c:	TS4236
Abbildung 3.12d:	TS4669-3-3
Abbildung 3.13:	TS4669-3-3 (Stück 2)
Abbildung 3.14:	TS4669-3-3 (Stück 3)
Abbildung 4.2:	TS4769, TS4774, TS4777, TS4780, TS4782, TS4803, TS4808
Abbildung 4.4:	TS4774, TS4777, TS4780, TS4782, TS4803, TS4808
Abbildung 4.5:	TS4769, TS4774, TS4777, TS4780, TS4782, TS4803, TS4808
Abbildung 4.8:	EQE & LEE: TS4769, TS4774, TS4777, TS4780, TS4782, TS4803 TS4808 RRE: TS5036, TS5091, TS5099, TS5094, TS5103, TS5108
Abbildung 4.10:	TS3991, TS3993, TS3998, TS4003
Abbildung 4.11:	TS3991, TS3993, TS3998, TS4003
Abbildung 4.12:	TS3991, TS3993, TS3998, TS4003
Abbildung 4.13:	TS3991, TS3993, TS3998, TS4003
5	

Abbildung 5.3:	TS4817, TS4820, TS4822, TS4824
Abbildung 5.4:	TS4817, TS4820, TS4822, TS4824
Abbildung 5.5:	TS4829
Abbildung 5.6:	TS4820
Abbildung 5.7:	TS4817, TS4820, TS4822, TS4824
Abbildung 5.8:	TS4817, TS4820, TS4822, TS4824
Abbildung 5.9:	TS4817, TS4820, TS4822, TS4824
Abbildung 6.3:	P1052-3
Abbildung 6.4a:	P1074-4
Abbildung 6.4b:	P0904-6
Abbildung 6.5:	P1052-3
Abbildung 6.6a:	P1074-4
Abbildung 6.6b:	P1052-3
Abbildung 6.8:	P0906-1
Abbildung 6.11:	P0906-1
Abbildung 6.12:	P0906-1
Abbildung 6.13:	P0906-1



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

- N. Susilo, E. Ziffer, S. Hagedorn, L. Cancellara, C. Netzel, N. Lobo Ploch, S. Wu, J. Rass, S. Walde, L. Sulmoni, <u>M. Guttmann</u>, T. Wernicke, M. Albrecht, M. Weyers und M. Kneissl, "Improved performance of UVC-LEDs by combination of high-temperature annealing and epitaxially laterally overgrown AlN/sapphire", *Photonics Research* **8**, 589 (2020).
- <u>M. Guttmann</u>, J. Höpfner, C. Reich, L. Sulmoni, C. Kuhn, P. Röder, T. Wernicke und M. Kneissl, "Effect of quantum barrier composition on electro-optical properties of AlGaN-based UVC light emitting diodes", *Semiconductor Science and Technology* 34, 085007, (2019).
- <u>M. Guttmann</u>, 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).
- F. Mehnke, L. Sulmoni, <u>M. Guttmann</u>, T. Wernicke und M. Kneissl, "Influence of light absorption on the performance characteristics of UV LEDs with emission between 239 and 217nm", *Applied Physics Express* 12, 012008 (2019).
- N. Susilo, S. Hagedorn, D. Jaeger, H. Miyake, U. Zeimer, C. Reich, B. Neuschulz, L. Sulmoni, <u>M. Guttmann</u>, F. Mehnke, C. Kuhn, T. Wernicke, M. Weyers, und M. Kneissl, "AlGaN-based deep UV LEDs grown on sputtered and high temperature annealed AlN/sapphire", *Applied Physics Letters* **112**, 041110 (2018).

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

- C. Kuhn, L. Sulmoni, <u>M. Guttmann</u>, J. Glaab, N. Susilo, T. Wernicke, M. Weyers und M. Kneissl, "MOVPE-grown AlGaN-based tunnel heterojunctions enabling fully transparent UVC LEDs", *Photonics Research* 7, B7-B11 (2019).
- N. Susilo, M. Schilling, M. Narodovitch, H.-H. Yao, X. Li, B. Witzigmann, J. Enslin, <u>M. Guttmann</u>, G. G. Roumeliotis, M. Rychetsky, I. Koslow, T. Wernicke, T. Niermann, M. Lehmann und M. Kneissl, "Precise determination of polarization fields in c-plane GaN/Al_xGa_{1-x}N/GaN heterostructures with capacitance–voltage-measurements", *Japanese Journal of Applied Physics* 58, SCCB08 (2019).
- N. Susilo, G. G. Roumeliotis, M. Narodovitch, B. Witzigmann, M. Rychetsky, S. Neugebauer, <u>M. Guttmann</u>, J. Enslin, A. Dadgar, T. Niermann, T. Wernicke, A. Strittmatter, M. Lehmann, D. N. Papadimitriou und M. Kneissl, "Accurate determination of polarization fields in (0001) c-plane InAlN/GaN heterostructures with capacitance-voltage-measurements", *Journal of Physics D: Applied Physics* 51, 485103 (2018).
- J. Glaab, J. Ruschel, F. Mehnke, M. Lapeyrade, <u>M. Guttmann</u>, T. Wernicke, M. Weyers, S. Einfeldt und M. Kneissl, "Degradation behavior of AlGaN-based 233 nm deepultraviolet light emitting diodes", *Semiconductor Science and Technology* 33, 095017 (2018).
- J. Glaab, J. Haefke, J. Ruschel, M. Brendel, J. Rass, T. Kolbe, A. Knauer, M. Weyers, S. Einfeldt, <u>M. Guttmann</u>, C. Kuhn, J. Enslin, T. Wernicke und M. Kneissl, "Degradation effects of the active region in UV-C light-emitting diodes", *Journal of Applied Physics* **123**, 104502 (2018).
- N. Susilo, J. Enslin, L. Sulmoni, <u>M. Guttmann</u>, U. Zeimer, T. Wernicke, M. Weyers und M. Kneissl, "Effect of the GaN:Mg contact layer on the light-output and current-voltage characteristic of UVB LEDs", *Phys. Status Solidi A* **215**, 1700643 (2018).
- J. Enslin, F. Mehnke, A. Mogilatenko, K. Bellmann, <u>M. Guttmann</u>, C. Kuhn, J. Rass, N. Lobo-Ploch, T. Wernicke, M. Weyers und M. Kneissl, "Metamorphic Al_{0.5}Ga_{0.5}N:Si on AlN/sapphire for the growth of UVB LEDs", *Journal of Crystal Growth* **464**, 185 (2017).
- C. D. Santi, M. Meneghini, D. Monti, J. Glaab, <u>M. Guttmann</u>, J. Rass, S. Einfeldt, F. Mehnke, J. Enslin, T. Wernicke, M. Kneissl, G. Meneghesso, E. Zanoni, "Recombination mechanisms and thermal droop in AlGaN-based UV-B LEDs", *Photonics Research* 5, A44 (2017).
- M. Lapeyrade, J. Glaab, A. Knauer, C. Kuhn, J. Enslin, C. Reich, <u>M. Guttmann</u>, F. Mehnke, T. Wernicke, S. Einfeldt, M. Weyers, M. Kneissl, "Design considerations for AlGaN-based UV LEDs emitting near 235 nm with uniform emission pattern", *Semiconductor Science and Technology* **32**, 045019 (2017).
- F. Mehnke, <u>M. Guttmann</u>, J. Enslin, C. Kuhn, C. Reich, J. Jordan, S. Kapanke, A. Knauer, M. Lapeyrade, U. Zeimer, H. Krüger, M. Rabe, S. Einfeldt, T. Wernicke, H. Ewald, M. Weyers und M. Kneissl, "Gas sensing of nitrogen oxide utilizing spectrally pure deep UV LEDs", *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* 23, 29 (2017).
- D. V. Dinh, B. Corbett, P. J. Parbrook, I. L. Koslow, M. Rychetsky, <u>M. Guttmann</u>, T. Wernicke, M. Kneissl, C. Mounir, U. Schwarz, J. Glaab, C. Netzel, F. Brunner, and M. Weyers, "Role of substrate quality on the performance of semipolar (11-22) InGaN light-emitting diodes", *Journal of Applied Physics* **120**, 135701 (2016)
- C. Reich, <u>M. Guttmann</u>, M. Feneberg, T. Wernicke, F. Mehnke, C. Kuhn, J. Rass, M. Lapeyrade, S. Einfeldt, A. Knauer, V. Kueller, M. Weyers, R. Goldhahn und M. Kneissl, "Strongly transverse-electric-polarized emission from deep ultraviolet AlGaN quantum well LEDs", *Applied Physics Letters* **107**, 142101 (2015).
- F. Mehnke, C. Kuhn, <u>M. Guttmann</u>, C. Reich, T. Kolbe, V. Kueller, A. Knauer, T. Wernicke, J. Rass, M. Weyers und M. Kneissl, "Efficient charge carrier injection into sub-250 nm AlGaN multiple quantum well light emitting diodes", *Applied Physics Letters* **105**, 051113 (2014).
- 19. T. Kolbe, F. Mehnke, <u>M. Guttmann</u>, C. Kuhn, J. Rass, T. Wernicke and M. Kneissl, "Improved injection efficiency in 290 nm light emitting diodes with Al(Ga)N electron blocking heterostructure",*Applied Physics Letters* **103**, 031109 (2013).

Veröffentlichungen ohne Peer-Review:

- 20. F. Römer, B. Witzigmann, <u>M. Guttmann</u>, N. Susilo, T. Wernicke und M. Kneissl, "Inhomogeneous spectral broadening in deep ultraviolet light emitting diodes", *Proc. SPIE* **10912**, *Physics and Simulation of Optoelectronic Devices XXVII*, 109120D (2019).
- M. Lapeyrade, F. Eberspach, N. Lobo-Ploch, C. Reich, <u>M. Guttmann</u>, T. Wernicke, F. Mehnke, S. Einfeldt, A. Knauer, M. Weyers und M. Kneissl, "Current spreading study in UV-C LED emitting at 235 nm", *Proc. SPIE* **9363**, *Gallium Nitride Materials and Devices X*, 93631P (2015).

 J. Rass, T. Kolbe, N. Lobo-Ploch, T. Wernicke, F. Mehnke, C. Kuhn, J. Enslin, <u>M. Guttmann</u>, C. Reich, A. Mogilatenko, J. Glaab, C. Stoelmacker, M. Lapeyrade, S. Einfeldt, M. Weyers und M. Kneissl, "High-power UV-B LEDs with long lifetime", *Proc. SPIE* **9363**, *Gallium Nitride Materials and Devices X*, 93631K (2015).

Präsentationen auf nationalen und internationalen Konferenzen:

- <u>M. Guttmann</u>, A. Ghazaryan, L. Sulmoni, N. Susilo, E. Ziffer, T. Wernicke und M. Kneissl, "Enhanced light extraction and internal quantum efficiency for fully-transparent AlGaN-based UVC LEDs on patterned-AlN/sapphire substrate", *Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, Regensburg (2019).
- A. Ghazaryan, <u>M. Guttmann</u>, T. Wernicke, N. Lobo-Ploch, T. Kolbe, K. Hilbrich, S. Knigge, D. Mitrenga, I. Käpplinger, T. Ortlepp, S. Einfeldt und M. Kneissl, "UVB LED with narrow emission angle using advanced silicon-based reflector package and Fresnel lens", *Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, Regensburg (2019).
- M. Guttmann, A. Ghazaryan, S. Wu, N. Susilo, J. Enslin, F. Mehnke, C. Kuhn, L. Sulmoni, T. Wernicke, J. Rass, H. K. Cho, N. Lobo-Ploch, T. Kolbe, A. Knauer, S. Hagedorn, A. Braun, A. Külberg, M. Schmidt, O. Krüger, K. Hilbrich, S. Knigge, D. Mitrenga, I. Käpplinger, T. Ortlepp, S. Einfeldt, M. Weyers und M. Kneissl, "Extracting near- and far-field radiation patterns of InAlGaN-based UV-LEDs", *International Conference on UV LED Technologies & Applications (ICULTA)*, Berlin (2018).
- 4. <u>M. Guttmann</u>, M. Hermann, J. Enslin, S. Graupeter, L. Sulmoni, C. Kuhn, T. Wernicke und M. Kneissl, "Improved light extraction and quantum efficiencies for UVB LEDs with UV-transparent *p*-AlGaN superlattices", *SPIE Photonics West*, San Francisco (2017).
- 5. <u>M. Guttmann</u>, M. Hermann, J. Enslin, S. Graupeter, L. Sulmoni, C. Kuhn, T. Wernicke und M. Kneissl, "Enhanced light extraction and internal quantum efficiency for UVB LEDs with UV-transparent *p*-AlGaN superlattices", *Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, Dresden (2017).
- 6. <u>M. Guttmann</u>, P. Möller und C. Reich, "Light extraction in AlGaN-based deep UV light emitting diodes", *Heimbach XXIX International Workshop on Physics of III-nitride nanostructures and optoelectronic devices*, Heldrungen (2015).

Anhang D: Abkürzungsverzeichnis

А	Ampere
AFM	Rasterkraftmikroskopie (atomic force microscopy)
Al	Aluminium
Al_2O_3	Saphir
AlGaN	Aluminiumgalliumnitrid
AlN	Aluminiumnitrid
Au	Gold
bzw.	beziehungsweise
CIE	Ladungsträgerinjektionseffizienz (charge carrier injection efficiency)
CIS	CiS Forschungsinstitut für Mikrosensorik GmbH, Erfurt
cm	Zentimeter
CW	Dauerstrich (continuous wave)
DoP	Polarisationsgrad (degree of polarization)
$ec{E}$	elektrischer Feldvektor
EBL	Elektronensperrschicht (electron blocking layer)
EL	Elektrolumineszenz
ELO	epitaktisch lateral überwachsen (epitaxial lateral overgrowth)
EQE	externe Quanteneffizienz
eV	Elektronenvolt
FBH	Ferdinand-Braun-Institut, Leibniz-Institut für Höchstfrequenztechnik
FWHM	Halbwertsbreite (full width at half maximum)
GaN	Galliumnitrid
i	imaginäre Einheit
Ι	Stromstärke oder Intensität
In	Indium
IQE	interne Quanteneffizienz
К	Kelvin
\vec{l}_{AZ}	Ausdehnung der aktiven Zone

LB	Leitungsband
LED	lichtemittierende Diode
LEE	Lichtextraktionseffizienz
mA	Milliampere
meV	Millielektronenvolt
Mg	Magnesium
mm	Millimeter
MOVPE	metall-organische Gasphasenepitaxie (metal-organic vapor phase epitaxy)
MQW	Mehrfachquantenfilm (<i>multiple quantum well</i>)
mW	Milliwatt
μm	Mikrometer
μW	Mikrowatt
n	(komplexer) Brechungsindex
\vec{n}	Normalenvektor
N ₂	Stickstoff
Ni	Nickel
nm	Nanometer
NO, NO ₂	Stickstoffmonoxid, Stickstoffdioxid
$ec{p}$, $ec{p}_{ m AZ}$	Ort, Ort der aktiven Zone
Р	Polarisationsgrad
${\mathcal P}$	Polarisationstyp (TE oder TM)
Pd	Palladium
PFS	Skalierung der Polarisationsfelder (polarization field scaling)
Pt	Platin
QCSE	quantum-confined Stark effect
QB	Barriere des Quantentopfs (quantum barrier)
QW	Quantentopf (quantum well)
r	Radius, Gaußfilterradius
R	Reflexionsgrad
${\mathcal R}$	gleichverteilte Zufallszahl
REM	Rasterelektronenmikroskop
RMS, RMSD	Wurzel der mittleren quadratischen Abweichung
	(root-mean-square-derivation)
RRE	strahlende Rekombinationseffizienz (radiative recombination efficiency)
SCC	Schichtladungsträgerkonzentration (sheet charge carrier concentration)
Si	Silizium
SiN	Siliziumnitrid
sr	Steradiant
TE	transversal-elektrisch
TLM	Transferlängen-Methode

ТМ	transversal-magnetisch
TUB	Technische Universität Berlin, Institut für Festkörperphysik
UV	ultraviolett
UVB	ultraviolett-B (280 nm bis 325 nm)
UVC	ultraviolett-C (200 nm bis 280 nm)
$ec{ u}$	Emissionsrichtung
V	Vanadium, Volt
V	Potential
VB	Valenzband
W	Watt
W	Emissionsverteilungsfunktion
WFO	Wellenfunktionsüberlappung (wave function overlap)
x, y, z	Position oder Al-Stoffmengenanteil in AlGaN
z. B.	zum Beispiel
α	Absorptionskoeffizient
θ	Polarwinkel
λ	Wellenlänge
arphi	Azimutwinkel
Ω	Ohm

Danksagung

Knapp fünf Jahre habe ich zusammen mit Studenten, Kollegen und meinem Doktorvater Prof. Dr. Michael Kneissl viele Messungen und Simulationen durchgeführt sowie unzählige wissenschaftliche Diskussionen geführt, um am Ende diese Arbeit fertigzustellen. Ich möchte mich zunächst bei meinen Studenten bedanken, da ich denke, dass ihnen sonst viel zu wenig Anerkennung geschenkt wird. Sie haben in dieser Zeit ihre eigene Arbeit angefertigt, mich dadurch viele Stunden im Labor oder am Simulations-PC unterstützt, mit mir diskutiert und mich auf viele Ideen gebracht: Peter Möller, Sarina Graupeter, Jakob Jordan, Martin Hermann, Anton Muhin und besonders bei Jakob Höpfern und Anna Susilo. Als nächstes möchte ich mich bei meinen Kollegen bedanken, die vor allem Teile der Simulationen, die Epitaxie, aber auch die Prozessierung von LEDs übernommen haben und mit denen ich viele gute wissenschaftliche Diskussionen hatte: Christoph Reich, Frank Mehnke, Christian Kuhn, Johannes Enslin, Norman Susilo, Anton Muhin und besonders bei Luca Sulmoni, der praktisch jede UVC-LED in dieser Arbeit prozessiert hat, sowie bei Tim Wernicke, der stets auf alle Fragen eine Antwort hatte. Auch gilt mein Dank meinen Kollegen vom FBH: Tim Kolbe, Arne Knauer, Jens Raß und Hyun K. Cho für die Herstellung und Prozessierung der UVB-LEDs sowie Sylvia Hagedorn, für die Bereitstellung der ELO-AlN/Saphir-Templates, und besonders bei Neysha Lobo-Ploch, für die zahlreichen wissenschaftlichen Diskussionen rund um LED-Chips. Natürlich möchte ich mich auch bei Prof. Dr. Michael Kneissl bedanken, der es mir ermöglicht hat, diese Arbeit in diesem tollen Fachgebiet und unter seiner Betreuung anzufertigen, aber auch bei Prof. Dr. Ulrich Schwarz für die Übernahme des zweiten Gutachtens. Zu guter Letzt bedanke ich mich noch bei meinen Freunden und meiner Familie für ihre Unterstützung in dieser Zeit sowie besonders bei meinem Bruder Philipp für das Lesen der gesamten Arbeit und der nun endlich weiß, was ich fünf Jahre lang in der Uni gemacht habe ;-)