INFRAROTDETEKTOREN AUF DER BASIS VON SI/SIGE HETEROSTRUKTUREN



Diplomarbeit

zur Erlangung des akademischen Grades eines Diplom-Ingenieurs in der Studienrichtung Technische Physik

eingereicht von

Andreas Weichselbaum

angefertigt am Institut für Halbleiterphysik der Technisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Johannes Kepler Universität Linz

unter Betreuung von Univ.-Doz. Dr. Manfred Helm und Dipl. Phys. Peter Kruck

eingereicht bei Univ.-Doz. Dr. Manfred Helm

Dezember 1996

Vorwort

Im Rahmen der Suche nach einem Thema meiner Diplomarbeit bin ich auf die Gruppe von Hrn. Helm gestoßen, die sich zu dem Zeitpunkt bereits intensiv mit IR Absorption an Halbleiterübergittern beschäftigt hatte. Mich hat das Thema angesprochen, sowohl im praktischen Bereich wegen der Meßerfahrung, aber mehr wohl wegen der dabei auch anstehenden selbstkonsistenten Bandstrukturberechnungen. So habe ich mich dafür entschieden.

Meine Diplomarbeit ist sehr geprägt von der bereits geleisteten Vorarbeit am Institut. Insbesondere hat sie sich stark an der Dissertation von Hrn. Fromherz orientiert ([FromDiss94]), der während dieser seiner Arbeit auch ein Computer-Programm zur Berechnung der Bandstruktur und des Absorptionskoeffizienten von Halbleiter-Übergittern geschrieben hatte. In die entsprechenden physikalischen Grundlagen und in das erwähnte Programm habe ich mich also eingearbeitet. Dazu anstehende Messungen wurden ebenfalls durchgeführt.

Entsprechend dem Vorangegangenen ist auch diese Diplomarbeit aufgebaut. Im großen und ganzen ist sie in drei Teile gegliedert: Im ersten wird die Theorie gebracht, wobei im Anhang wichtige Teile wesentlich genauer behandelt werden, im zweiten werden die Meßapparatur und die einzelnen Meßanordnungen beschrieben. Im dritten Teil werden die durchgeführten Messungen mit den dazugehörigen Berechnungen und Auswertungen präsentiert.

Da der Großteil der zu dieser Arbeit verwendeten Literatur in Englisch verfaßt war, waren auch sämtliche Begriffe vorerst nur in Englisch bekannt. Ich habe mir nicht immer die Mühe gemacht, großartige deutsche Übersetzungen zu finden, sondern habe durchaus manchmal die englischen Begriffe als solche belassen.

November 1996

Andreas Weichselbaum

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
	1 Allgemein zu Photodetektoren	. 7
	1.1 Thermische Detektoren	. 7
	1.2 Photoelektrische Detektoren	. 8
	2 QUIP s	. 9
	3 Verwendete Abkürzungen	11

2 Photodektoren aus Si/SiGe Übergittern

1 Einleitung	13
1.1 Verlauf der Valenzbandkanten	14
1.2 Angelegte Spannung	16
2 Photostrom, Dunkelstrom oder Rauschstrom?	18
2.1 Dunkelstrommessung	18
2.2 Frequenzabhängige Photostrommessung	19
2.3 Mathematische Überlegungen zum Photostrom	20
Ausdruck für den Verstärkungsfaktor g	20
2.4 Stromrauschen	22
3 Einführung wichtiger Detektorkenngrößn	24
3.1 Einführung weiterer benötigter Größn	24
3.2 Responsivität	25
3.3 Detektivität D^*	25
Definition der NEP	25
Definition der Detektivität	26
Durch Dunkelstrom begrenzter Detektor	27
Hintergrundbegrenzter Detektor	27
Durch Rauschen des Signalstromes begrenzter Detektor	27
Größnordnungen für D^*	28

13

Präparation der Proben, Probengeometrie	3
1 Herkunft der Proben und ihre Bezeichnung	
2 Probenaufbau	
2.1 Schichtstruktur der Proben	
2.2 Dotierung	
2.3 Verspannte SiGe-Töpfe	
3 Weitere Probenpräparation	
3.1 Schleifen und Polieren der Seitenflächen	
Proze&chritte	
3.2 Proben für Transmissionsmessungen	
3.3 Detektorproben	
3.4 Anmerkung zur auf die Schichtstruktur aufgebrachten Metallschicht	3
4 Probengeometrien	
4.1 s- und p-Polarisation	
4.2 90° Geometrie	
4.3 waveguide Geometrie	

1 Kryostat	43
2 Kurze Beschreibung des Fourierspektrometers	
2.1 Anmerkung zur Position der Probe im Strahlengang	46
2.2 Spezifikationsdaten zum Fourierspektrometer IFS 66	46
3 Meßnordnungen und Meßuswertung	. 47
3.1 Transmissionsmessung	47
3.2 Frequenzabhängige Photostrommessung	47
3.3 Messung des Dunkelstromes	49

5	Messungen, Auswertungen und entsprechende	
	Berechnungen	51
	1 Gemessenen Proben, Probendaten	52
	2 Berechnungen zu R528D und R531D	54
	3 Messungen zu R528D	64
	3.1 Probengeometrien und Bezeichnungen	64
	3.2 Transmissionmessungen	65
	3.3 Dunkelstrommessungen	66
	3.4 Frequenzabhängige Photostrommessungen	70
	4 Messungen zu R531D	73
	4.1 Probengeometrien und Bezeichnungen	73
	4.2 Transmissionmessungen	73
	4.3 Dunkelstrommessungen	74
	4.4 Frequenzabhängige Photostrommessungen	78
	5 Weitere abgeleitete Meßaten zu R528D und R531D	. 79
	5.1 Aktivierungsenergie	79
	Ableitung eines Ausdrucks zur Bestimmung der Aktivierungsenergie	79
	Aktivierungsenergie für R528D und R531D	81
	Vergleich der Aktivierungsenergien mit Photostrommessungen	84
	5.2 Responsivität	85
	Ableitung des verwendeten Ausdrucks zur Berechnung der Responsivität	85
	Responsivität der Detektoren R528D(BD) und R531D(CD)	87
	5.3 Detektivität	88
	6 Auswertung zu R632A und R633A	91
	6.1 Bandstukturrechnung zu R632A	92
	6.2 Messungen zu R632A und R633A	99
	Transmission	99

6	Zusammenfassung	101
7	Anhang A - Fouriertransformation (Konvention)	103
8	Anhang B - Bandstrukturrechnung und Absorption	105
	1 Definitionen und allgemeines	105
	1.1 Festlegung der Integrale	107
	1.2 Normierung	108
	1.3 Vollständigkeit der Eigenfunktionen	108
	Vollständigkeit der $ \psi_{n\vec{k}}\rangle$ im Volumen V	108
	Vollständigkeit der $ u_{n\vec{k}}\rangle$ in der Elementarzelle Ω	109
	2 Envelopen Theorie	110
	2.1 Ansatz für die Effektivmassennäherung	111
	2.2 Envelopen Theorie für Halbleiter-Übergitterstrukturen (skizziert)	112
	Annahmen für eine Übergitterstruktur	113
	3 Berechnung der Absorption	116
	3.1 Einleitung	116
	3.2 Berechnung des Absorptionskoeffizienten α	117
	4 Anmerkung zur Oszillatorstärke	120
	4.1 Gebundene Systeme	120
	Verallgemeinerung auf den 3-dimensionalen Fall:	121
	4.2 Offene Systeme, Systeme mit periodischen Randbedingungen .	122
9	Anhang C - Stromrauschen	125
	1 Spektrale Rauschverteilung für Signal aus statistischen Pulsen	125
	2 Beispiel: Shot Noise	127
	3 Beispiel: Johnson Rauschen	129
	3.1 Ableitung der Leitfähigkeit σ (Drude Modell)	130

4_____

	5
3.2 Ableitung des Ausdrucks für das Johnson Rauschen (=Widerstandsrauschen)	132
10 Literaturverzeichnis	137
11 Lebenslauf	141
12 Danke	141

1. Einleitung

1.1 Allgemein zu IR-Photodetektoren

Funktionstüchtige Photodetektoren für Infrarot-Strahlung können schon des längeren hergestellt werden. Entsprechend den zugrundeliegenden physikalischen Mechanismen kann man folgende Unterscheidung treffen.

1.1.1 Thermische Detektoren

Thermische Detektoren erwärmen sich bei Absorption von IR Strahlung und ändern dabei ihre Materialeigenschaften, was entsprechend ausgenützt wird. Die Empfindlichkeit ist von der Wellenlänge praktisch unabhängig. Die Wellenlänge wird nicht aufgelöst. Thermische Detektoren werden daher auch bei Raumtemperatur betrieben. Beispiele sind (die relevante physikalische Eigenschaft, die natürlich von der Temperatur abhängt, ist in Klammer angeführt):

- * **Bolometer** (elektrischer Widerstand): Nachweisbare Leistungen liegen beispielsweise für Ge-Bolometer bei Raumtemperatur bei etwa 10⁻¹⁰ W und bei 4K bei etwa 10⁻¹² W.
- * *Thermoelement* (Thermospannung): eine typische Empfindlichkeit liegt bei 100 V/W.
- * Golay-Zelle (Ausdehnung eines Gasvolumens): eine typische Detektivität liegt bei 5...10·10⁹ cm√Hz/W. Golay-Zellen sind sehr langsam (Zeitkonstanten liegen bei etwa 1/100 sec).
- * **Pyroelektrische Detektoren** (elektrische Polarisation): verwendet werden ferroelektrische kristalline Materialien mit permanenter elektrischer Polarisation,

beispielsweise TGS (*triglycerine sulfate*) und LiTaO₃. Diese werden als Dielektrikum in Kondensatoren eingebaut. Nach [Kingston78] bieten pyroelektrische Detektoren bei Raumtemperatur die besten Eigenschaften. Typische Zeitkonstanten liegen bei 10^{-4} sec, typische Detektivitäten im Bereich 10^{8} - 10^{9} cm $\sqrt{Hz/W}$.

1.1.2 Photoelektrische Detektoren

Photoelektrische Detektoren sind Halbleiterbauelemente, die bei entsprechender Bestrahlung ihre Leitfähigkeit ändern (Photoleiter) oder eine Spannung erzeugen (photovoltaische Detektoren). Ihre Empfindlichkeit ist stark von der eingestrahlten Wellenlänge abhängig, eine Auflösung der Wellenlänge ist daher möglich. Im NIR (nahes Infrarot, 1... 2 µm) können die Detektoren bei Raumtemperatur betrieben werden, im MIR (mittleres Infrarot, 2... 20 µm) ist Kühlung mit LN₂ notwendig, im FIR (fernes Infrarot, 20...100 µm) Kühlung mit LHe.

- * Photovoltaische Detektoren sind im wesentlichen p-n-Dioden, deren Kennlinie sich bei Bestrahlung ändert. Die Raumladungszone sollte möglichst groß und nahe der Oberfläche sein.
- * **Photoleiter** können in *intrinsische* und in *extrinsische Photoleiter* unterteilt werden (vgl. [Rieke94]). Daneben spielen (Muli)Quantumwell IR Photodetektoren (= QWIP's) eine immer bedeutendere Rolle.
 - Intrinsische Photoleiter leben von der direkten Anregung von Elektronen vom Valenzband ins Leitungsband. Daher können nur Photonen mit Energie größer als die Halbleiter-Energielücke absorbiert werden. Das bedeutet für PbS $\lambda \leq$ 3.3µm, für Ge $\lambda \le 1.8$ µm, Si $\lambda \le 1.1$ µm, CdTe $\lambda \le 0.8$ µm (die genannten Halbleitermaterialien wurden mit steigender Energielücke angeführt). Bei letzterem, also CdTe, kann das Cd teilweise durch Hg ersetzt werden, wodurch sich die Energielücke verkleinert und sogar bis null bei vollständiger Substitution reduziert werden kann, da HgTe ein Halbleiter mit verschwindender Energielücke ist. Mit Hg_xCd_{1-x}Te können Detektoren bis $\lambda \leq$ 25µm realisiert werden. Diese haben aber bereits wegen der niedrigen Anregungsenergie eine hohe Leitfähigkeit, damit einen hohen Dunkelstrom und daher niedrige Detektivität. Für niedrige Energien (MIR, FIR) haben intrinsische Photoleiter im allgemeinen schlechte Eigenschaften. Der Halbleiter Hg_xCd_{1-x}Te beispielsweise ist nicht sehr beständig und läßt sich nur schwer handhaben. Intrinsische Photoleiter sind vor allem für sichtbares Licht bis hin zum MIR geeignet. Beispielsweise hat hier HgCdTe sehr hohe Detektivitäten (vgl. [Yariv89]; in diesem sind eigentlich GaAs/AlGaAs Übergitter behandelt,

aber die Ergebnisse sind mit HgCdTe IR Photodetektoren verglichen). In diesem Bereich werden intrinsische Photoleiter auch für *detector arrays* verwendet (im speziellen CCD's = *charged coupled devices*).

- extrinsische Photoleiter sind dotiert und besitzen entsprechende Energieniveaus (= Störstellen) in der Bandlücke. Anregung aus diesen Energieniveaus ist möglich. Damit ist Detektion von FIR bis 200µm möglich, der Detektor muß aber meist mit LHe abgekühlt werden. Bei gegebenen Randbedingungen kann ihre Sensitivität durchaus nur mehr vom Rauschen der Hintergrundstrahlung begrenzt sein. Dann spricht man von background limeted infrared photodetectors, oder BLIP's. Typische Detektivitäten liegen im Bereich von 10¹¹ cm√Hz/W.
- **OWIP's** bestehen aus (periodisch) aufeinandergewachsenen, sehr dünnen und teilweise dotierten Halbleiterschichten, einer Übergitterstruktur. Sehr dünn heißt, ein paar Atomlagen bis hin zu 500Å. Damit sich diese realisieren lassen, sollten die Halbleiterschichten am besten die gleiche Gitterstruktur haben. Am häufigsten sind Übergitterstrukturen aus GaAs / Al_xGa_{1-x}As und Si / Si_{1-x}Ge_x. Gemäß der quantenmechanischen Beschreibung mithilfe der Enveloppen-Theorie bildet sich je nach Material stärker im Leitungsband (z.B. GaAs / Al_xGa_{1-x}As) oder stärker im Valenzband (z.B. Si/SiGe) eine Stufenstruktur der Bandkante aus. Analog der Lösung der Schrödingergleichung für ein Stufenpotential bilden sich innerhalb der Töpfe schmale Bänder, sogenannte Subbänder aus, zwischen denen Anregung stattfinden kann. Über die Variation der Schichtdicken und des Gehalts an substituiertem Material hat man 'Knöpfe', an denen gedreht werden kann, um die schmalen Subbänder relativ zueinander energetisch zu positionieren. Für einen guten Detektor empfiehlt es sich, nur einen gebundenen Zustand im Topf zu haben, während das nächste Band im Fast-Kontinuum an der Barrierenkante liegt. Damit ist gewährleistet, daß von Photonen angeregte Ladungsträger leichter über die Barriere hinweg kommen und ein Stromsignal liefern.

Auf die QWIP's wird gleich im nächsten Abschnitt noch genauer eingegangen.

1.2 QWIP's

Oben sind eine Menge von unterschiedlichen IR Photodetektoren angeführt worden. Abgesehen von den Quantumwell-Photodetektoren hat man die Schwierigkeit, daß der Herstellungsprozeß im allgemeinen aufwendig ist. Verwendete Materialien wie $Hg_xCd_{1-x}Te$ sind von Natur aus problematisch und lassen sich nur schwer in die allseits sehr gut etablierte Si Technologie integrieren. Es wäre daher wünschenswert, diese Si Technologie einsetzten zu können. Dabei bieten sich Übergitter aus Si und SiGe an.

Das Wachsen von Übergitterstrukturen wird auch bei GaAs/AlGaAs technologisch sehr gut beherrscht, ein Material, das normalerweise bessere Eigenschaften als Si/SiGe aufweist. Es ist aber nicht mit der allseits verwendeten Si-Technologie kompatibel. Außerdem besitzen p-typ GaAs/AlGaAs Strukturen verglichen mit Si/SiGe (stets p-typ) keine höheren Detektorqualitäten. Im folgenden wird darauf noch etwas genauer eingegangen.

In einem Si/SiGe Übergitter bildet, wie bereits weiter oben erwähnt, hauptsächlich das teilweise entartete Valenzband Potentialstufen aus. Das Leitungsband hingegen bleibt über die gesamte Übergitterstruktur (fast) konstant. Diese Entartung und die daraus resultierende Vermischung der einzelnen Valenzbänder ermöglicht bei Si/SiGe Übergitter die Absorption von Strahlung bei senkrechtem Einfall auf die Schichtebenen, was in der Praxis leicht handzuhaben ist. Diese Absorption bei senkrechtem Einfall ist aber, wie aus entsprechenden Berechnungen folgt (vgl. [From94]), bei Verwendung von Potentialstufen im Leitungsband nicht möglich. Für n-typ GaAs/AlGaAs Strukturen, muß daher zur Detektion von Strahlung diese in einem schrägen Winkel eingestrahlt werden. Das wird in der Praxis mittels Einkoppeln über 'waveguide' Geometrie oder Gitterkoppler realisiert, was einen unangenehmen zusätzlichen Mehraufwand verursacht. GaAs/AlGaAs besitzt aber auch eine für IR-Detektoren ausreichende Übergitterstruktur im Valenzband (GaAs/AlGaAs bildet seine Übergitterstruktur zu etwa 60% im Leitungsband und etwas schwächer, zu etwa 40% im Valenzband aus). Daher werden auch p-typ GaAs/AlGaAs Anwendungen gebaut. Ihre Qualität ist aber vergleichbar mit der von (stets p-typ) Si/SiGe Übergittern. In diesem Fall sind daher letztere vorzuziehen.

Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurden Si/SiGe Quantumwell-IR-Photodetektoren untersucht. Im wesentlichen gab es drei unterschiedliche Meßmethoden. Mit frequenzaufgelösten Transmissionsmessungen wurden optisch die Absorptionspeaks untersucht. Mit Dunkelstrommessungen wurde der Signalhintergrund ausgemessen Hintergrundstrahlung und der Photostrom der 300K bestimmt. Mit frequenzaufgelösten Photostrommessungen wurde zuletzt die Sensitivität des Detektors in Abhängigkeit von der Wellenlänge gemessen. Zum Vergleich wurden die Strukturdaten der Proben in ein vorhandenes Programm zur Bandstrukturrechnung eingegeben, und die Absorption mittels Berechnen der Impulsmatrixelemente ermittelt. Für die Übergitterstruktur wurde dabei angenommen, daß die 'dicke' Si-Barriere entspannt, der wesentlich dünnere SiGe-Topf hingegen pseudomorph aufgewachsen und daher verspannt ist. Die entsprechenden Zusätze zum Hamilton wurden berücksichtigt. Die Rechenergebnisse waren wertvoll bei der Interpretation der gemessenen Daten.

1.3 Verwendete Abkürzungen

A Detektorfläche		
a atomare Gitterkonstante		
DÜbergitterkonstante		
C _F Anteil der Strahlung, der durch das Kryostatfenster gelangt,		
inklusive Einschränkung des Sichtwinkels von 360° auf den		
tatsächlichen Wert		
ϑ Einstrahlungswinkel relativ zur Wachstumsrichtung; ϑ =0		
entspricht senkrechtem Einfall auf die Schichtebene		
'+'-Pol zirkulare Polarisation der Strahlung innerhalb der Schichtebene		
'z'-Pol Polarisation der Strahlung senkrecht zur Schichtstruktur		
s-Pol		
der Schichtebene; sie hat die gleichen physikalischen Eigenschaften		
wie die '+'-Pol.		
p-Pol parallel zur Einfallsebene eingestrahlte Strahlung; nach Eintritt in		
eine 'waveguide'- Struktur besteht sie sowohl aus einem 'in-plane'-		
Anteil als auch aus einem z-Anteil		
k _{inp} Anteil des Wellenvektors innerhalb der Schichtebene		
$\lambda \equiv k_{perp}$ Anteil des Wellenvektors normal zur Schichtebene		
nE bezeichnet die Energieniveaus; diese sind vom Grundzustand		
ausgehend mit 'steigender' Energie durchnumeriert (NB! im		
Valenzband sinken dabei die Energieniveaus!)		
z		

Kapitel 2 Photodektoren aus Si/SiGe Übergittern

In diesem Kapitel wird schematisch auf die Struktur der hier verwendeten Si/SiGe Detektoren eingegangen. Im Anschlußdaran werden allgemein übliche Kenngrößn von Photodetektoren eingeführt und erklärt. Der Einflußdes Stromrauschens auf die Qualität der Detektoren wird ebenfalls behandelt. Die Berechnung der Bandstruktur und des Absorptionskoeffizienten ist im Anhang B, Bandstrukturrechnung und Absorption, dargestellt. Literatur zu diesem Kapitel findet man in [Liu96], [Kingston78]

2.1 Einleitung

Eine typische Detektoranordnung, wie sie bei dieser Diplomarbeit verwendet wurde, ist in Abb. 1 gezeigt. Die auf einem Si-Wafer gewachsene Si/SiGe Übergitterstruktur



Abb. 1: Typische Detektoranordnung (schematisch, hier senkrechter Einfall der elektromagnetischen Strahlung)

wurde bis auf ein paar kleine definierte Mesas weggeätzt. Danach wurden die Detektor- und Kontaktierungsflächen mit einer hauchdünnen Goldschicht bedampft ($\sim 1000 \text{ Å}$). Mittels Bonden dünner Goldfädchen wurde der tatsächliche Kontakt mit der äußren Elektronik geschaffen.

Genauere Daten zur aufgewachsenen Si/SiGe Schichtstruktur der Proben ist im Kapitel über die Probenpräparation (Kap. 3) zu finden.

2.1.1 Verlauf der Valenzbandkanten

Im ungestörten Diamantgitter, wie zum Beispiel in reinem Si, besteht das Valenzband aus 6 Bändern: Abseits vom Γ -Punkt treten diese als 3 jeweils 2-fach entartete Bänder auf, das Band der schweren Löcher (= heavy hole - = HH-Band), das Band der leichten Löcher (= light hole - = LH-Band) und das spin-abgespaltene Löcherband (= split off = SO-Band). Am Γ -Punkt sind das HH- und das LH-Band entartet, insgesamt ergibt dies eine 4-fache Entartung. Mit dem SO-Band sind diese dort fastentartet, der Energieabstand beträgt etwa 45 meV (vgl. [DST91, S 13]).

Bei Si/SiGe Übergitterstrukturen sind die SiGe Potentialtöpfe pseudomorph auf mehr oder weniger unverspanntem Si aufgewachsen, und daher verspannt (vgl. S 33; man beachte, daßGe eine um 4% größre Gitterkonstante besitzt). Im SiGe Topf spalten durch die dabei zusätzlich auftretenden Energieterme das HH- und das LH-Band am Γ -Punkt auf. Dieser Effekt läuft unter dem Namen strain splitting. Mit steigendem Ge-Gehalt wandern die Valenzbandkanten der Töpfe in Richtung Leitungsbandkante, jene des HH- und des LH-Bandes spalten dabei auf. Beispielsweise liegt für einen Ge Gehalt von $x_{Ge} = 0.4$ die Verschiebung in der HH-Bandkante ΔE_V im Bereich von 250meV. Die Leitungsbandkante ändert zum Vergleich ihre Position nur sehr wenig mit dem Ge Gehalt, maximal um die 10meV. Diese verwendeten Bandoffsets sind in Abb. 3 in Abhängigkeit vom Ge-Gehalt wiedergegeben.

In Abb. 2 ist nun die Si/SiGe-Übergitterstruktur im Bänderschema aufgezeichnet;



Abb. 2: Detektorprobe; normalerweise bewegt sich x im Bereich 0.2 ... 0.4



Abb. 3: Bandoffsets von verspanntem $Si_{1-x}Ge_x$ in Abhängigkeit vom Ge-Gehalt x relativ zum unverspanntem reinen Si



Abb. 4: Zusammenhang von Wellenzahl und Energie mit der Wellenlänge

man beachte, daßsich in Si-SiGe die relevanten Prozesse im Valenzband, also bei den positiven Löchern abspielen.

Durch die Verschiebung der Valenzbandkante entstehen Potentialtöpfe für die Löcher. Darin bilden sich Energiebänder, die mit der Theorie der Envelopenfunktionen berechnet werden können. Diese Bänder können mitunter sehr schmal sein. Speziell das oberste Band, der Grundzustand im Valenzband, ist sehr schmal zu erwarten, da dieser ja am stärksten gebunden ist. Mit dem Ge-Gehalt und der Breite des Potentialtopfes hat man eine Möglichkeit, die Position der Energieniveaus bezüglich der Valenzbandkante der Barriere und damit deren Differenzen einzustellen. Eine Einführung in die Berechnung der Bandstruktur ist im Anhang B gegeben.

Über die so entstehenden Energiebänder können die Ladungsträger durch Einstrahlung elektromagetischer Energie angeregt werden. In Abb. 4 ist der Zusammenhang zwischen Wellenlänge und Energie von Photonen in meV gegeben. Ein Vergleich der zur Verfügung stehenden Energiedifferenzen in der Valenzbandkante ($\Delta E_V \leq 250 meV$, vgl. Abb. 3) zeigt, daßSi/SiGe Übergitter speziell für Absorption im Infraroten geeignet sind.

Bei Einstrahlung elektromagnetischer Wellen reagieren Übergitterstrukturen sehr sensitiv bezüglich der Frequenz $\omega = E/\hbar$. Paß die Energiedifferenz zwischen zwei Energiebändern (= Energieniveaus) mit $\hbar\omega$ zusammen, kann die Strahlung stark absorbiert werden. Die Stärke ist noch abhängig von der Polarisation des eingestrahlten Feldes und vom entsprechenden Matrixelement. In Si ist aber der Zusammenhang einigermaßn komlex, da die teilweise entarteten Valenzbänder nicht unabhängig voneinander betrachtet werden können. Bezüglich genauerer Information sei auf den Anhang B über Bandstrukturrechnung und Absorption verwiesen.

2.1.2 Angelegte Spannung

Durch eine von außn angelegte Spannung in Wachstumsrichtung verkippt der Bandverlauf in Abb. 2. In der Übergitterstruktur werden die meisten Löcher innerhalb der Potentialtöpfe festgehalten. Löcher, die einmal über der Barriere sind, können sich aber mehr oder weniger frei nach dem angelegten elektrischen Feld bewegen. Über einem Topf können sie wieder Übergänge in energetisch günstigere Zustände machen und damit eingefangen werden. Bei angelegter Spannung sind die möglichen Strombeiträge der Tunnelstrom durch die Barriere und der Strom über die Barriere hinaus, generiert z.B. durch thermische Emission oder eingestrahlte Intensität. Tunnelstrom und thermisch generierter Strom sind aber bei genügend dicker Barriere und genügend tiefer Temperatur sehr klein. Bei Übergitterdetektoren kann man nun zwei Arten von Übergängen unterscheiden, die deutlich unterschiedliche Merkmale aufweisen¹:

- * Den Übergang von einem gebundenen Zustand in einen weiteren gebundenen Zustand. Dieser Übergang hat nur wenig Einflußauf die Leitfähigkeit über die Potentialstufen hinweg. Er ist daher für Detektoren nicht sehr gut geeignet.
- * Den Übergang von einem gebundenen Zustand in einen Kontinuumszustand (Abb. 5). Der Vorteil liegt klar auf der Hand: angeregte Ladungsträger sind unmittelbar frei beweglich und verursachen damit einen detektierbaren Stromfluß



Abb. 5: Schematische Darstellung eines Übergangs von einem gebundenen Zustand in einen Kontinuumszustand

Übergitterdetektoren lassen sich daher insofern optimieren, daßder relevante Subbandübergang vom gebundenen Grundzustand in ein Band nahe der Barrierenkante stattfindet. Das war auch bei den hier untersuchten Multiquantumwell-Detektoren der Fall. Für die weiteren Überlegungen wird also von einem Übergang

gebundener Grundzustand \rightarrow Band im (fast) Kontinuum

ausgegangen.

¹ Es sei nochmals darauf hingewiesen, daßhier die Spannung über die Potentialstufen hinweg, also in Wachstumsrichtung angelegt wird. Daher ist nicht wichtig, daßdurch Einstrahlung der Strom leichter innerhalb der Schichtebene fließn kann, sondern daßein Stromflußin Wachstumsrichtung, über die Barrieren hinweg, ermöglicht wird.

2.2 Photostrom, Dunkelstrom oder Rauschstrom?

Gemessene Daten richtig zu interpretieren, ist meistens eine sehr diffizile Aufgabe, insbesondere auch bei Photostromdetektoren. Welche physikalischen Prozesse nun wirklich merklich zu einem Meßrgebnis beitragen, und welche nicht, welche Mechanismen eine Rolle spielen, ist oft nicht so leicht zu beantworten.

2.2.1 Dunkelstrommessung

Der experimentelle Aufbau zur Messung des Dunkelstromes und des nicht frequenzaufgelösten Photostromes ist gegeben und im Kapitel 4 Meßipparatur auf S 49 beschrieben. Vom Fourierspektrometer wurde hier nur der Kryostat benötigt, im Gegensatz zur frequenzabhängigen Photostrommessung. Genaueres dazu kommt im nächsten Abschnitt. Nähere Informationen zum Kryostaten finden sich auf Seite 43.

Eine typische Messung von Dunkel- und Photostrom bei gegebener Raumtemperatur-Hintergrundstrahlung ist in Abb. 7 dargestellt.

Eine Skizze der Ströme rund um einen Potentialtopf, einem Multiquantumwell, ist in Fig. 6 schematisch dargestellt.



Abb. 6: Schematische Darstellung der Absorptions- und Emissionsprozesse an einem Quantentopf

Abkühlen der Probe und Abschirmen vor äußrer Strahlung, inklusive der Raumtemperatur-Wärmestrahlung, schaltet Photoströme aus, bzw., reduziert diese auf ein



Abb. 7: Typische Dunkelstrommeßurven für abgeschirmte und nicht abgeschirmte Probe; der Photostrom wurde als Differenz der beiden berechnet. Die Meßurven sind vom Detektormesa R531D(CD), der in dem späteren Kapitel zur Meßuswertung genauer behandelt wird.

kleines Maß Messung der Strom-Spannungs-Kennlinie liefert dann den spannungsund temperaturabhängigen Dunkelstrom. Die Temperatur geht klarerweise infolge der thermischen Emission über die Barriere ein. Die Spannung verkippt die Valenzbandkante der gesamten Übergitterstruktur. Dadurch ändern sich Tunnelwahrscheinlichkeiten und damit auch Dunkelströme (vergleiche Abb. 7).

Die Abschirmung der Wärmestrahlung bei Raumtemperatur wurde im Rahmen dieser Arbeit mit einem Stück Alu Folie bewerkstelligt. Darin wurde der Probenhalter mit der Detektorprobe eingewickelt. Zur Bestimmung des Photostromes der Raumtemperatur-Hintergrundstrahlung wurde eine Messung analog zu der des Dunkelstromes gemacht, bei gleicher Temperatur, nur ohne Alu Folie und damit ohne Abschirmung. So wurde die Summe von Dunkel- und Photostrom gemessen. Subtrahieren des gemessenen Dunkelstromes bei gleicher Spannung liefert dann den Photostrom.

2.2.2 Frequenzabhängige Photostrommessung

Zur frequenzabhängigen Photostrommessung wurde das im Kapitel 4 Meßpparatur beschriebene Fourierspektrometer verwendet; anstelle des spektrometereigenen Detektors wurden die Detektorproben mit der aufgewachsenen Si/SiGe Übergitterstruktur verwendet. Genauere Information findet sich im oben genannten Kapitel 4, S 47.

2.2.3 Mathematische Überlegungen zum Photostrom

Ein plausibler Ansatz für den Photostrom in einem Multiquantumwell ist

$$I_{PS} = e \cdot \Phi \eta \cdot g \tag{1}$$

wobei

	Einheit	
I_{PS}	[A]	Photostrom des jeweiligen Detektormesa
e	[Asec]	Elementarladung
Φ	[Zahl/sec]	auf die Probe einfallender Photonenstrom (ab-
		hängig von der Probenfläche!)
η	[]	Quanteneffizienz der gesamten Übergitter-
		struktur ($0 \le \eta \le 1$)
g	[]	Verstärkung durch die Anwesenheit mehrerer
		Multiquantumwells (engl. gain)

Plausibilitätserklärung zu (1):

Im Mittel wird nur ein Anteil η der Photonen absorbiert, per definitionem von η . Jedes dieser absorbierten Photonen liefert gerade 1 Loch für den Strom. g steht mehr oder weniger für die Wahrscheinlichkeit, daßdie angeregten Löcher auch über die restliche Übergitterstruktur, über die restlichen Töpfe nicht wieder eingefangen werden. Zusammenmultipliziert ergeben diese Terme plausiblerweise den Photostrom.

Ausdruck für den Verstärkungsfaktor g

Die folgende Ableitung ist [Liu96] entnommen und gilt nur für den stationären Fall.

Der Beitrag eines Topfes im Halbleiterübergitter zum Photostrom ist aufgrund der Erhaltung des Gesamtstromes gegeben durch²

$$i_{PS}^{(1)} = e\Phi\eta^{(1)}\frac{\tau_1}{\tau_1 + \tau_2} \tag{2}$$

² Der Beweis ist am Ende dieses Abschnittes, auf S 22 gegeben.

wobei τ_1 und τ_2 mittlere Lebensdauern von Löchern in einem angeregten Zustand über einem Topf darstellen, genauer

$ au_1$	 Zeitkonstante für Rekombination
$ au_2$	 Zeitkonstante für das Verlassen eines Topfes über die Bar-
	riere hinweg

und wobei der Index ⁽¹⁾ dafür steht, daßnur ein Topf betrachtet wird. e, Φ hat die gleiche Bedeutung wie in (1).

Weiters gilt für den gesamten detektierten Photostrom I_{PS} im stationären Fall, wieder aufgrund der Erhaltung des Gesamtstromes

$$I_{PS} \cdot p = i_{PS}^{(1)} \tag{3}$$

p steht für Einfangwahrscheinlichkeit über 1 Topf und kann folgendermaßn geschrieben werden³:

$$p = \frac{\tau_2}{\tau_1 + \tau_2} \tag{4}$$

Mit (2) wird aus (3)

$$I_{PS} = e\Phi\eta^{(1)}\frac{1}{p}\frac{\tau_1}{\tau_1 + \tau_2}$$
(5)

Unter der Annahme von schwacher Absorption gilt

$$\eta^{(1)} \simeq \frac{\eta}{N} \tag{6}$$

(N ist die Anzahl der beteiligten Quantentöpfe, η die Quanteneffizient der gesamten Übergitterstruktur) und (5) kann weiter umgeschrieben werden

$$I_{PS} \simeq e \Phi \eta \frac{1}{Np} \frac{\tau_1}{\tau_1 + \tau_2} \tag{7}$$

oder mit (4)

$$I_{PS} \simeq e \Phi \eta \frac{1-p}{Np} \tag{8}$$

Man beachte, da $\theta_{\eta} \sim N$ angesetzt wurde (vergleiche (6)) und daher der Photostrom, wie in Gl. (8) gegeben, wieder unabhängig von der Anzahl der Übergitterperioden ist. Das war auch bereits in (5) ohne der Näherung für das η der Fall.

Ein Vergleich mit (1) führt für den Verstärkungsfaktor g zu (p ist die Einfangswahrscheinlichkeit)

$$g \simeq \frac{1-p}{Np} \tag{9}$$

³ Der Beweis ist am Ende dieses Abschnitts, auf S 22 zu finden.

Beweis

Beweis zu (2):

Ausgangspunkt ist die stationäre Ratengleichung für die angeregten Ladungsträger n^* im betrachteten Topf

$$\frac{dn^*}{dt} = \Phi \eta^{(1)} - \frac{n^*}{\tau_1} - \frac{n^*}{\tau_2} = 0$$
(10)

und der plausiblen Ansatz für den Photostrombeitrag von einem Topf

$$i_{PS}^{(1)} = en^* \cdot \frac{1}{\tau_2}$$
 (11)

Auswerten dieser beiden Gleichungen liefert

$$i_{PS}^{(1)} \stackrel{(11)}{=} \frac{e}{\tau_2} n^* \stackrel{(10)}{=} \frac{e}{\tau_2} \cdot \Phi \eta^{(1)} \frac{\tau_1 \tau_2}{\tau_1 + \tau_2} = e \Phi \eta^{(1)} \frac{\tau_1}{\tau_1 + \tau_2}$$

— q.e.d ——

Beweis

Beweis zu (4):

Sei Δt ein kleines Zeitintervall, sodaß $\Delta t \ll \tau_1, \tau_2$; zu einem beliebigen, aber fixen Potentialtopf gelten dann für ein Zeitintervall $[t, t + \Delta t]$ folgende Überlegungen

- $P_1 \equiv \frac{\Delta t}{\tau_1}$ Wahrscheinlichkteit, daßein über einem Topf angeregtes Loch in diesem eingefangen wurde
- $P_2 \equiv \frac{\Delta t}{\tau_2}$ Wahrscheinlichkteit, daßein über einem Topf angeregtes Loch bereits über die Barriere entkommen ist

Ist n^* die Anzahl der über einem Topf angeregten Ladungsträger, so wurde im Zeitintervall Δt ein Anteil von $P_1 \cdot n^*$ eingefangen, ein Anteil $P_2 \cdot n^*$ ist entkommen, im gesamten haben also $(P_1 + P_2) \cdot n^*$ Ladungsträger den angeregten Zustand über dem betrachteten Topf wieder verlassen. Der Anteil der eingefangenen gibt daher die Einfangswahrscheinlichkeit p wider

$$p \equiv \frac{P_1 \cdot n^*}{(P_1 + P_2) \cdot n^*} = \frac{\frac{1}{\tau_1}}{\frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2}} = \frac{\tau_2}{\tau_1 + \tau_2}$$

— q.e.d ——

2.2.4 Stromrauschen

Eine Einleitung zum Stromrauschen finden sich im Anhang C, Seite 125ff. Dort finden sich auch Erklärungen und Ableitungen zu Shot Noise (= Schrotrauschen) und Johnsonrauschen.

Für Übergitterdetektoren ist Shot Noise der relevante Rauschmechanismus (vgl. [Liu96]). Ladungsträger werden über die Barriere angeregt und können wieder in einem Topf eingefangen werden. Im Gegensatz zur Ableitung des Shot Noise im oben genannten Kapitel hat man es hier zwar auch mit statistisch verteilten Strompulsen zu tun, diese haben jedoch nicht alle die gleich Form. Die zeitliche Länge der Strompulse, die Zeit zwischen Generation und Rekombination ist auch statistisch entsprechend einer Rekombinationswahrscheinlichkeit verteilt.

Für das Rauschen des Stromes im Detektor ist in [Liu96] ein zusätzlicher Faktor 2 zum ursprünglichen Ausdruck für die spektrale Verteilung des Shot Noise (S 129, Gl.(111)) angegeben. Dieser dürfte in der oben gegebenen Überlegung sein Ursache haben.

$$i(\nu) = 2 \cdot 2e \langle I \rangle \tag{12}$$

 $\langle I \rangle$ steht für den Gesamtstrom, d.h. Dunkelstrom plus Photostrom. Denn Generation kann sowohl von thermischer Anregung (\rightarrow Dunkelstrom) als auch von Anregung mittels Photonen (\rightarrow Photostrom) kommen. Der Tunnelstrom läßzeitlich gleiche Strompulse erwarten, der zusätzliche Faktor 2 in (12) wäre damit nicht gerechtfertigt. Dieser Aspekt läßsich aber auch unter anderem in dem zusätzlichen, von der Spannung abhängigen Faktor $g_{Rauschen}$ in der nächsten Gleichung berücksichtigen. Für Photodetektoren mit Quantumwellstruktur wird aus (12) weiters (vergleiche [Liu96])

$$i(\nu) = 4 e g_{Rauschen} \langle I \rangle$$

($g_{Rauschen}$ steht für einen Rauschverstärkungsfaktor). Dieser Ausdruck für das spektrale Rauschen ist von der Frequenz unabhängig. Multiplizieren mit einer entsprechenden sensitiven Frequenzbandbreite B liefert damit den tatsächlichen Rauschstrom. Für B ist nun aber nicht jener Frequenzbereich einzusetzen, in dem der Detektor auf Strahlung sensitiv ist, sondern jener, den die angeschlossenen Elektronik beim Messen eines Signalstromes noch aufzulösen vermag (um das Rauschen klein zu halten, wird übrigens das Stromsignal über einen längeren Zeitraum gemittelt; im weiteren wird daher $B \sim 1Hz$ gewählt). Damit läßsich der tatsächliche Rauschstrom i_R berechnen. Das Quadrat dieses Stromes ist gegeben durch

$$(i_R)^2 = 4 e g_{Rauschen} \langle I \rangle \cdot B \tag{13}$$

2.3 Einführung wichtiger Detektorkenngrößn

Literatur: [Liu96], [Kingston78]

Es ist wünschenswert, daß Detektoren mit unterschiedlicher Bauart und unterschiedlichen physikalischen Mechanismen miteinander verglichen werden können. Als die Kenngröß gilt hier die Detektivität = detectivity = D^* .

2.3.1 Einführung weiterer benötigter Größn

Hier sind kurz die im weiteren verwendeten Variablen zusammengefaß und bestimmt. Die Indizes S, HG, DS, PS und R stehen für das gemessene Signal, für die Raumtemperatur-Hintergrundstrahlung, für den Dunkelstrom, für den Photostrom und für das Rauschen. Die Variable R bezeichnet die Responsivität (diese Größ wird mit dem entsprechenden Verweis bereits vorgezogen), P die eingestrahlte Leistung.

$P_S \equiv \Phi \cdot \hbar \omega$	zu detektierende eingestrahlte Leis-
	tung (hier bei Frequenz ω)
P_{HG}	Hintergrundstrahlung (hier bei
	Frequenz ω)
$I_{PS,S} \equiv e\eta g \frac{P_S}{\hbar\omega} \stackrel{(15)}{=} RP_S$	Signalstrom = Anteil des Photo- stromes, der allein von P_S kommt
$I_{PS,HG} \equiv e\eta g \frac{P_{HG}}{\hbar\omega} \stackrel{(15)}{=} R P_{HG}$	Photostrom, generiert durch die Hintergrundstrahlung
$I_{PS} \equiv I_{PS,S} + I_{PS,HG}$	gesamter Photostrom
I _{DS}	Dunkelstrom (Tunnelstrom, Strom
	von thermischer Emission)
$I_{ges} \equiv I_{PS,S} + I_{PS,HG} + I_{DS}$	gesamter gemessener Strom
$(i_R)^2 \equiv (i_{R,S})^2 + (i_{R,HG})^2 + (i_{R,DS})^2$	Rauschquadrat des Stromes

Der mittlerer quadratischer Rauschstrom von (13) wird damit zu

$$(i_R)^2 = 4 e g_{Rauschen} \left(I_{PS,S} + I_{PS,HG} + I_{DS} \right) \cdot B$$
(14)

2.3.2 Responsivität

Die Responsivität (= responsivity) steht für den Strom des Detektors pro eingestrahlter Leistung und kann daher im frequenzaufgelösten Fall bei einer Einstrahlung der Intensität P_S bei Frequenz ω folgendermaßn geschrieben werden (mit $P_S = \hbar \omega \cdot \Phi$ und mit Φ dem auf die Detektorfläche einfallenden Photonenstrom)

$$R \equiv \frac{I_{PS,S}}{\hbar\omega \cdot \Phi} \stackrel{(1)}{=} \frac{e}{\hbar\omega} \eta g \tag{15}$$

Für den Idealfall, daß $\eta = 1$ und g = 1, und einer hier typischen Wellenzahl von $1000 \, cm^{-1}$ wäre $R = e/\hbar\omega = 8.1 \, A/W$. Zum Vergleich wurden im Rahmen dieser Arbeit Werte in der Größnordnung von $R \simeq 0.05 \, A/W$, also rund 0.6% vom obigen Idealwert, erreicht.

Die responsivity sagt nun aber nichts darüber aus, wie klein die eingestrahlte Leistung sein darf, daßsie noch detektiert werden kann. Sie hat mit Sicherheit eine untere Schranke, die durch Rauschmechanismen gegeben ist. Diese können vom Detektor selbst herrühren (Stromrauschen) oder aber von der immer vorhandenen Hintergrundstrahlung (Photonenrauschen).

2.3.3 Detektivität D^*

Literatur zu diesem Abschnitt ist in [Kingston78] zu finden. Die folgenden Überlegungen sind ebenfalls stark daran angelehnt. Für die Einführung der Detektivität ist die NEP (= noise equivalent power) von grundlegender Bedeutung. Sie wird daher zu Beginn erklärt.

Definition der NEP

Unter noise equivalent power (=NEP) versteht man jene eingestrahlte Leistung, die einem Signal entspricht, das bei den gegebenen Randbedingungen gleich dem Rauschsignal ist. Die NEP ist also eine Strahlungsleistung, die gerade noch detektiert werden kann. Ein Ausdruck dafür folgt aus

$$1 = \frac{Signalleistung}{Rauschleistung}\Big|_{P_S = NEP} = \frac{(I_{PS,S})^2}{(i_R)^2}\Big|_{P_S = NEP}$$

Verwenden der Responsivität führt zu

$$1 = \frac{I_{PS,S}}{\sqrt{(i_R)^2}} \bigg|_{P_S = NEP} = \frac{R P_S}{\sqrt{(i_R)^2}} \bigg|_{P_S = NEP}$$

Umgeformt ergibt das

$$NEP = \frac{\sqrt{(i_R)^2}}{R} \tag{16}$$

Definition der Detektivität

Die Detektivität D^* ist im großn und ganzen durch die inverse NEP gegeben. Allgemein kann dazu gesagt werden, daßbei der Annahme, daßein Stromsignal nur noch durch das Schwanken von Rauschströmen begrenzt ist, alle restlichen Parameter sehr konstant gehalten werden müssen, hier im speziellen die Temperatur. Bei den hier gemachten Messungen wurde eine Temperaturgenauigkeit im Bereich 10...50 mK erlangt. Im allgemeinen werden aber IR Detektoren mit Flüssigkeiten wie LN_2 oder LHe gekühlt, womit sich die Temperatur auf den Siedepunkt der jeweiligen Flüssigkeit festlegen läß Die Stabilisation der Temperatur stellt daher kein allzugroßs Problem dar.

Bei der Bestimmung der Detektivität wird hier unterschieden, ob ein Detektor vom Rauschen des Signals von der detektierten eingestrahlten Leistung oder von anderen Rauschmechanismen begrenzt wird.

Ist das Photonenrauschen der zu detektierenden eingestrahlten Leistung vernachlässigbar, so ist das Dunkelstromrauschen dominierend. Da das Rauschquadrat des Stromes nach (14) noch von der Bandbreite B und vom Gesamtstrom, damit aber auch von der Detektorfläche A, abhängt, werden die entsprechenden systemabhängigen Größn herausmultipliziert. Damit bleibt für die Detektivität

$$D^* \equiv \frac{\sqrt{A}\sqrt{B}}{NEP} = R \frac{\sqrt{A}\sqrt{B}}{\sqrt{(i_R)^2}}$$
(17)

Die Einheit von D^* sieht etwas kompliziert aus

$$[D^*] = \frac{cm\sqrt{Hz}}{W}$$

Die Verwendung der Einheit cm bei der Detektivität ist allgemein gebräuchlich. Das Dunkelstromrauschen, das im Nenner eingeht, setzt sich normalerweise aus mehreren Rauschbeiträgen zusammen, die statistisch nicht miteinander korreliert sind; in diesem Fall müße D^* allgemeiner angeschrieben werden

$$D^* = R \frac{\sqrt{A}\sqrt{B}}{\sqrt{\sum\limits_n i_{R,n}^2}}$$

Mögliche Rauschbeiträge sind das Dunkelstromrauschen und das Rauschen des Strahlungshintergrundes. Auf diese beiden wird gleich im folgenden genauer eingegangen.

Durch Dunkelstrom begrenzter Detektor

Der Dunkelstrom sollte eigentlich so niedrig wie möglich sein. Aus den hier gemachten Messungen ist ersichtlich, daßer mit wachsender Spannung und wachsender Temperatur anstieg, was auch intuitiv klar ist. Es kann dann durchaus sein, daß der Dunkelstrom größr als der Photostrom wird. Der Photostrom verliert sich dann bei kleinen eingestrahlten Intensitäten im Rauschen des Dunkelstromes. Für die Detektivität D^* kann (17) verwendet werden. Für das Stromrauschen wird allerdings der dominierende Term vom Dunkelstrom genommen.

$$D^* = R \frac{\sqrt{A}\sqrt{B}}{\sqrt{(i_{R,DS})^2}} \tag{18}$$

Hintergrundbegrenzter Detektor

Ein durch den Strahlungshintergrund begrenzter Detektor kann nicht mehr weiter optimiert werden. Um seine Anwendbarkeit auszuweiten, müße die Hintergrundstrahlung reduziert oder abgeschirmt werden.

Für die Detektivität wird wieder der Ausdruck (17) und für den Rauschstrom der dominierende Beitrag der Hintergrundstrahlung genommen.

$$D^* = R \frac{\sqrt{A}\sqrt{B}}{\sqrt{(i_{R,HG})^2}} \tag{19}$$

Für kleine angelegte Spannungen und tiefe Temperaturen ist der Multiquantumwell Detektor hintergrundbegrenzt. Durch Erhöhen der Temperatur und der Spannung steigt, wie bereits weiter oben erwähnt, der Dunkelstrom. Für steigende Spannungen wächst also der Dunkelstrom an, bis er ab einer bestimmten Spannung verglichen mit dem Photostrom der Hintergrundstrahlung dominierend wird. Dann wird die Sensitivität des Detektors vom Dunkelstromrauschen begrenzt. Da der Dunkelstrom aber auch mit steigender Temperatur anwächst, wird der Spannungsbereich der Detektorprobe, in dem dieser hintergrundbegrenzt ist, immer kleiner, bis er schließlich verschwindet. Der entsprechenden Temperatur hat einen Kürzel bekommen. Sie heiß *BLIP*-Temperatur; *BLIP* steht für Background Limited Infrared Performance.

Durch Rauschen des Signalstromes begrenzter Detektor

Die Detektivität, wie in (17) definiert, macht wenig Sinn für den Fall, daßder Rauschstrom von der eingestrahlten Intensität und damit vom Signalstrom bestimmt wird. Dazu folgende Überlegungen: Nach (14) gilt für den Signalstrom, der gerade dem Rauschstrom entspricht (I_{DS} ist vernachlässigbar)

$$(I_{PS,S,min})^2 \stackrel{!}{=} (i_R)^2 \stackrel{(14)}{=} 4 e g_{Rauschen} \cdot I_{PS,S,min} \cdot B$$

oder

$$I_{PS,S,min} = 4 \, e \, g_{Rauschen} \cdot B \tag{20}$$

Für das Rauschquadrat bei gerade noch detektierbarem Photosignal gilt daher

$$(i_R)^2 = 4 e g_{Rauschen} \cdot (4 e g_{Rauschen} \cdot B) \cdot B = (4 e g_{Rauschen} \cdot B)^2$$
(21)

Damit ist der Rauschstrom $\sqrt{(i_R)^2}$ für minimales Signal nicht proportional zu \sqrt{B} , sondern proportional zur Bandbreite *B* selbst.

$$\sqrt{(i_R)^2} \sim B \tag{22}$$

Verwenden von (20) und

$$I_{PS,S,min} = e \eta g \cdot \frac{P_S}{\hbar \omega} \Big|_{P_S = NEP}$$

führt für die NEP zu

$$NEP = rac{4 g_{Rauschen}}{\eta \, g} B \, \hbar \omega$$

Diese Größ ist auch proportional zur Bandbreite B. Die Verwendung einer Detektivität wie in (17) definiert ist nicht sinnvoll.

Eine Abschätzung des gerade noch detektierbaren Signals $I_{PS,S,min}$ für diesen Fall des vom Signalrauschen dominierten Detektors führt mit (20) zu sehr kleinen Strömen. Mit $g_{Rauschen} = 1$ und dem sensitiven Frequenzbereich der angeschlossenen Elektronik B = 1Hz erhält man $I_{PS,S,min} = 6.4 \cdot 10^{-19} A$ (bei einer Sample-Rate von $1/B = 1 \sec$ kann kaum ein Strom kleiner als 1 Elektron, bzw. Loch pro Sekunde ($\equiv 1.6 \cdot 10^{-19} A$) gemessen werden!). Nach (21) ist hier das Stromrauschen äquivalent zu einem Dunkelstromrauschen mit einem Dunkelstrom von ebenfalls der Größ $6.4 \cdot 10^{-19} A$. Bei den zu dieser Arbeit gemachten Messungen war der Dunkelstrom aber stets wesentlich größr. Daher braucht dieser Fall des vom Signalstrom dominierten Detektors nicht weiter beachtet zu werden.

Größnordnungen für D*

Ihm Rahmen dieser Arbeit wurden für die Detektivität Werte im Bereich von 10^{10} $cm\sqrt{Hz}/W$ bei einer Temperatur von 77 K erreicht (siehe Meßuswertung, S 90). Dieser Wert bedeutet, daßbei einer Sensitivität der angeschlossenen Elektronik von 1Hz und einer Detektorfläche von $1 cm^2$ gerade noch $1/10^{10} W = 10^{-10} W$ eingestrahlte Photoleistung detektiert werden können.

2.3.4 Definition der $NE\Delta T$

Diese Größ wurde zwar nicht im Rahmen dieser Arbeit bei der Auswertung der Daten verwendet, wird hier der Vollständigkeit halber aber auch angeführt. $NE\Delta T$ steht für noise equivalent temperature difference. Sie stellt also jene Temperaturänderung eines IR Strahlers dar, die bei Detektion einer Variation des Signalstromes um den Rauschstrom $\sqrt{(i_R)^2}$ entspricht. Dies ist insbesondere für Temperaturmessungen von Materialoberflächen mittels IR Detektoren von Interesse. Um eine Vorstellung von der Größnordnung zu bekommen, ist hier nur auf die Veröffentlichung [Levine93] verwiesen, in der für AlGaAs/GaAs Übergitter einen Wert $NE\Delta T \simeq 10 \, mK$ angegeben ist.

Kapitel 3 Präparation der Proben, Probengeometrie

3.1 Herkunft der Proben und ihre Bezeichnung

Die Proben wurden am Walter Schottky Institut in München von J. F. Nützel gewachsen. Die nominellen Daten wurden zusammen mit unserem Institut in Linz abgesprochen. Einige Stücke der jeweiligen präparierten Si Wafer standen danach unserem Institut zur Verfügung.

Die Probenbezeichnungen wurden von München übernommen. Ihr typisches Aussehen ist in Abb. (8) zu sehen. Als Beispiel wurde die Probe R531D gewählt, die in dieser Arbeit des öfteren bei den Meßauswertungen zu finden ist.



Abb. 8: Typisches Aussehen eines Namens für eine Probe

Anmerkung zur Position des Probenstückes am Wafer: Es ist durchaus üblich, daß während des Aufwachsens von Schichtstrukturen auf einen Wafer dieser rotiert wird,

um eine bessere Homogenität der einzelnen Schichtdicken zu gewährleisten. Das wurde hier aber absichtlich unterlassen, sodaßeine kontinuierliche Änderung der Dicken und des Ge-Gehaltes über den Wafer erreicht wurde. Die Position der einzelnen Teilstücke am Wafer war daher wichtig und wurde mit einem Buchstaben am Ende des Probennamens benannt (vgl. Abb. 8). Die einzelnen Teilstücke des Wafers hatten damit leicht unterschiedliche Eigenschaften, die es zu untersuchen galt.

3.2 Probenaufbau

3.2.1 Schichtstruktur der Proben

Eine schematische Darstellung einer typischen Probengeometrie, wie sie bei dieser Arbeit verwendet wurden, ist in Abb. 9 gegeben, wobei auch die Größnordnungen für die einzelnen Schichtdicken angeführt sind (die Au-Kontakte, das partielle Wegätzen der Schichtstruktur und die Kontaktierung wurde an unserem Institut in Linz gemacht).





Die Herstellung einer solchen Struktur verläuft folgendermaßn: Auf einem ein-

seitig polierten Si-Einkristall (= Si-Wafer) wird in einer MBE Kammer zuerst nochmals reines Silizium (Puffer) aufgewachsen, um eine tatsächlich einwandfreie Si Oberfläche zu bekommen. Darauf wird meist noch eine dotierte weitere Schicht aufgewachsen, die dem besseren elektronischen Kontakt zum Si-Wafer dient. Die Dotierkonzentration ist in etwa gleich hoch, wie sie später in der Übergitterstruktur verwendet wird. Sie liegt im Bereich von $4 \times 10^{18} \, cm^{-3}$.

Auf diesen Schichten basierend wird die eigentliche Übergitterstruktur mit partiell eingebauten Dotierungen aufgewachsen. Der Ge-Gehalt in den Töpfen bewegt sich in der Regel im Bereich $x = 0.2 \dots 0.4$. Die Schichtdicke der Potentialtöpfe ist in der Größnordnung von 30 Å; die Dicke der Barrieren erstreckt sich von der Dicke der Potentialtöpfe und geht kaum über 500 Å hinaus. Dickere Barrieren würden bezüglich Tunneln keine nennenswerten Änderungen mehr bringen, da die im Topf gebunden Zustände, insbesondere der Grundzustand, keine so groß Ausdehnung haben. Zum Vergleich ist auf die Berechnungen zur Probe R531D hingewiesen, wo die Absolutquadrate der Eigenfunktionen für die unteren Eigenzustände bei einer Barrierendicke von 200 Å in Abb. 23 (S 56) aufgetragen sind.

Als Abschlußwird eine Deckschicht aufgebracht, die zum Schutz der darunterliegenden Schichtstruktur dient und meist auch dotiert ist. Sie wird als Kontaktierungsschicht für das Bedampfen mit einer Metallschicht verwendet (vgl. Anmerkung auf S 38). Ihre Dicke bewegt sich im Bereich jener noch unter der Übergitterstruktur aufgewachsenen Schichten, um die 1000 Å.

3.2.2 Dotierung

Dotiert können sowohl die Töpfe als auch die Barrieren sein. Dotierung in den Töpfen verursacht fast keine Verbiegung der Bandverläufe, da die zusätzlich eingebauten Löcher bereits dort bleiben können, wo sie eingebaut wurden. Dotierung in der Barriere hingegen hat zur Folge, daßdie zusätzlich eingebauten Löcher in die Töpfe abwandern. Ladungen werden somit getrennt, und die unmittelbare Konsequenz ist eine je nach Dotierung starke Verbiegung der Bandkanten. Diese Dotierung der Barriere läuft unter dem Namen Modulationsdotierung. Die Größnordnung der Dotierkonzentration bewegt sich im Bereich von $N_D \simeq (3...4) \times 10^{18} cm^{-3}$.

3.2.3 Verspannte SiGe-Töpfe

Ge hat im Vergleich zu Si eine um etwa 4% größre Gitterkonstante, womit Verspannungen der einzelnen Schichten zu erwarten sind. Wie aus den oben angeführten Größnordnungen für die Dicken der einzelnen Schichten zu ersehen ist, sind die mit Ge versehenen Töpfe im allgemeinen von wesentlich breiteren Si-Barrieren umgeben. Weiters befindet sich die gesamte Struktur auf einem vergleichsweise riesigen Si-Einkristall, der seine Gitterkonstante einer dünnen aufgewachsenen Schicht aufzwingt. Es kann damit angenommen werden, daßtie SiGe Potentialtöpfe verspannt auf unverspanntem Si aufgewachsen sind. Bei der Bandstrukturrechnung wurde das berücksichtigt.

3.3 Weitere Probenpräparation

Die weitere Probenpräparation war jeweils von den folgenden Messungen abhängig. Sollten an einem Probenstück sowohl Transmissions- als auch detektorspezifische Messungen durchgeführt werden, wurde das Probenstück geteilt. Der eine Teil wurde für die Transmissionsmessung präpariert, auf dem zweiten wurden unter anderem einzelne Detektormesas geätzt und kontaktiert. Zwei gegenüberliegende seitlichen Spaltflächen und die unpolierte Unterseite der Proben wurden dabei aber immer geschliffen, bwz. poliert.

3.3.1 Schleifen und Polieren der Seitenflächen

Bei den polarisationsabhängigen Messungen muße teilweise elektromagnetische Strahlung von der Seite in die Probe eingekoppelt werden, da ein Anteil des Feldes normal zu den gewachsenen Schichten erforderlich war. Die Einkoppel- sowie die Auskoppelfläche sind als unbearbeitete Spaltflächen unkontrollierbar. Sie mußen daher geschliffen und poliert werden, ebenso wie die unpolierte und unbehandelte Probenunterseite.

Im gesamten wurden zwei unterschiedliche Winkel geschliffen, 90° für die 90° Geometrie und 38° für die waveguide Geometrie (genaueres dazu weiter unten).

Zum Schleifen und Polieren der Kanten wurden die Proben auf einen entsprechenden Halter befestigt. Als Haftmittel dienten für das Polieren der Probenunterseite Wachs, für das Bearbeiten der Spaltflächen normaler Superkleber. In Abb. 10 ist der Probenhalter mit einer Probe für das Herstellen der waveguide Geometrie skizziert.

Der dargestellte Plastikblock wird in einem dazu passenden Halter auf der Schleifmaschine gegeben. Er kann darin senkrecht verschoben und damit auf das jeweilige Schleifpapier gedrückt werden, das auf einem Teller befestigt rotiert (~ 1 Umdrehung pro Sekunde). Unter ständigem Spülen mit Wasser findet so das Schleifen,


Abb. 10: Schematische Darstellung des Probenhalters zum Schleifen der waveguide Geometrie

bzw. Polieren statt.

ProzeSchritte

Das Prinzip des Schleifen und Polierens ist klar gegeben: Vom groben Schleifen wird auf immer feiner werdenden Unterlagen bis zur feinen Politur gegangen. Die Prozeßchritte waren dabei wie folgt:

- * Aufbringen der Probe am entsprechenden Probenhalter
- * Grober Schleifvorgang mit einem 2400 er Papier⁴
- * Feiner Schleifvorgang mit einem 4000 er Papier⁴
- * Polieren auf der Polierscheibe DP+Pan unter Benützung eines 3μ Sprays⁵
- * Polieren auf der Polierscheibe DP+Nap unter Benützung eines 1μ Sprays⁵
- * Ablösen der Probe vom Probenhalter

3.3.2 Proben für Transmissionsmessungen

Bei diesen Proben wurde normalerweise die Schichtstruktur noch mit einer Auoder mit einer Al-Au - Schicht metallisiert. Damit war die Schichtstruktur ähnlich zu den Detektorproben weiter unten, wo die Metallisierung der top-Schicht zur elektronischen Kontaktierung notwendig war (vgl. auch Anmerkung auf S 38). Nach dem Aufbringen der Metall-Schicht wurden die benötigten, noch unbehandelten

⁴ Die Zahl (hier 2400, bzw. 4000) steht in etwa für die Anzahl der Schleifpartikel pro Fläche; eine größre Zahl bedeutet daher eine feinere Oberfläche.

 $^{^5}$ Die Angabe zum Spray gibt die Größnordnung der Schleifpartikel im Spraymaterial an; dabei steht μ für $\mu m.$

Flächen geschliffen, bzw. poliert, im speziellen zwei gegenüberliegende seitliche Spaltflächen und die Probenunterseite (genaueres dazu weiter oben).

3.3.3 Detektorproben

Auf den Detektorproben wurden Detektormesas präpariert und kontaktiert. Schematisch wurde ein Detektormesa bereits weiter oben in Abb. 9 gezeigt. Zu seiner Herstellung wurden schematisch die folgenden Prozeßchritte vollzogen (die gewachsene Schichtstruktur auf dem Si Wafer war bereits vorhanden):

- * Als erstes wurden die unbehandelten Seitenflächen, wieder zwei gegenüberliegende seitliche Spaltflächen und die Probenunterseite, geschliffen und poliert (siehe dazu weiter oben).
- * Danach wurde bis auf einige klar definierte Detektormesas die gesamte Übergitterstruktur der Probe bis auf die gewachsene Kontaktschicht zum Wafer mittels RIE in CF₄ Plasma weggeätzt (RIE steht für *reactiv ion etching*). Die Anzahl, Position und Größ der Detektormesas auf einem Probenstück ist unter anderem in Abb. 11 schematisch wiedergegeben (manche Bezeichnungen wurden aus der Literatur, und daher in Englisch, übernommen).
- * Es folgte das Aufbringen der bottom Kontakte, zweier metallisierter Flächen,



Abb. 11: Skizze einer Detektorprobe mit den unterschiedlich großn Detekorflächen (= Mesas). top steht für die Deckfläche eines Mesas, bottom für die Kontaktierungsschicht darunter.

auf der Bodenkontaktschicht. Ihre Position und Größ auf der Probe ist ebenfalls bereits in Abb. 11 schematisch aufgezeigt. Das Aufbringen dieser Kontakte bestand erstens im Aufdampfen von etwa 2000 \mathring{A} Alu, zweitens im Einlegieren dieser Schicht und drittens im Aufdampfen einer Au Schicht. Letztere war nicht mehr ganz so wichtig. Die Metallisierung mit Al gewährleistet einen guten ohm schen Kontakt, wodurch bei U-I-Messungen an den Detektormesas unerwünschte Nebeneffekte verhindert werden.

- * Danach wurden die top Schicht der einzelnen Detektormesas metallisiert, zuerst mit 100 \mathring{A} Ti, danach mit etwa 1000 \mathring{A} Au. Anstelle des Al beim bottom Kontakt wurde hier Ti verwendet, weil Al spikes durch die aufgebrachte Schichtstruktur ausbilden kann, damit sämtliche Potentialtöpfe kurzschließund der Detektor unbrauchbar wird.
- * Zuletzt wurden die metallisierten bottom und top Flächen auf der Detektorprobe mittels Bonden sehr dünner Au-Fädchen kontaktiert, um den Anschlußzu weiterer äußrer Elektronik zu gewährleisten.

An den so präparierten Detektoren wurden dann Photo- und Dunkelstrommessungen durchgeführt. Die Einstrahlung erfolgte je nach Bedarf von der schräg polierten Seitenfläche (waveguide Geometrie) oder von hinten durch das Substrat durch (letz-tere wurde mit ni (= normal incidence) bezeichnet). Schematisch ist dies in Abb. 12 dargestellt. Die waveguide Geometrie wird weiter unten noch genauer beschrieben.



Abb. 12: Schematische Darstellung der verwendeten Detektorgeometrie

3.3.4 Anmerkung zur auf die Schichtstruktur aufgebrachten Metallschicht

Normalerweise wurde auf die bereits gewachsenen Schichtstruktur noch eine Metallschicht mit größnordnungsmäßg 1000 \mathring{A} Dicke aufgedampft. Damit konnte bei Detektoren die top Schicht kontaktiert werden. Für elektrische Felder hat diese Metallschicht aber schwerwiegende Konsequenzen: Unmittelbar an der Grenzfläche wird s-polarisierte Strahlung, also Strahlung mit dem elektrischen Feld in der Schichteben, kurzgeschlossen und hat mit Berücksichtigung der reflektierten Strahlung an dieser Grenzfläche einen Knoten. Strahlung mit dem elektrischen Feld normal zur Schichtebene, also in p-Polarisation, wird zugelassen (ohne Metallschicht an der Grenzfläche wäre der Sachverhalt übrigens gerade umgekehrt). Da die Dicke der gesamten aufgewachsenen Schichtstruktur ($\sim 0.2 \, \mu m$) einen Bruchteil einer Wellenlänge im untersuchten Wellenlängenbereich ($\sim 3...15 \, \mu m$) betrug, war die s- im Vergleich zur p-polarisierter Strahlung nur schwach in der aufgewachsenen absorbierenden Schichtstruktur vertreten. Dementsprechender Einflußauf die Absorption von Strahlung in der jeweiligen Polarisation war zu erwarten. Eine Beschreibung dieser Problematik findet sich in [FromDiss94]. Wider Erwarten zeigten aber frequenzabhängige Photostrommessungen einen vergleichsweise starken Photoresponse bei s-polarisierter Strahlung (siehe dazu später bei den Meßuswertungen).

3.4 Probengeometrien

Die beiden Probengeometrien, die 90° Geometrie und die waveguide Geometrie, beschreiben die Form des gesamten Probenstückes, speziell die seitlichen Einkoppelflächen. Mittels weiterer Behandlung der Proben, sprich Strukturierung der Oberfläche, konnten daraus Detektoren gebaut werden. Bevor jedoch die beiden Geometrien genauer beschrieben werden, wird noch die Bezeichnung der einzelnen Polarisationen bezüglich der Einfallsebene, bzw. bezüglich der Schichtebene klargestellt.

3.4.1 s- und p-Polarisation

In der weiter unten folgenden Abbildung Abb. 14 sind zur Veranschaulichung bereits s- und p-polarisierte Strahlung für die waveguide Geometrie eingezeichnet (dabei ist die Einfallsebene in dieser Abbildung die Blattebene!):

- * s Polarisation bezeichnet eine elektromagnetische Strahlung mit dem elektrischen Feld senkrecht zur Einfallsebene, also stets in der Ebene der aufgewachsenen Schichten. Alternativ wird sie auch als *TE*-Mode bezeichnet, was für *transverse electric mode* steht.
- * p Polarisation bezeichnet eine elektromagnetische Strahlung mit dem elektrischen Feld parallel zur Einfallsebene. Sie hat stets einen Anteil des elektrischen Feldes normal zur Schichteben. Eine alternative Bezeichnung für p-Polarisation ist *TM*-Mode, was für *transverse magnetic mode* steht.

(s/p-Polarisation stammt aus der Terminologie der Optik, während die Bezeichnung TE/TM-Mode aus der Theorie zum Elektromagnetismus kommt.)

3.4.2 90° Geometrie

Die seitlichen Einkoppelflächen stehen normal zur gewachsenen Oberfläche und zur polierten Unterseite.



polierte Unterseite

Abb. 13: Probe mit 90° Schliff

3.4.3 waveguide Geometrie

Im weitaus größren Teil der Proben wurde waveguide Geometrie verwendet. Diese sieht ähnlich wie in Abb. 13 aus, die Spaltflächen jedoch, wo die Strahlung ein- und austritt, sind im schrägen Winkel von 38° angeschliffen. Die Seitenansicht ist in Abb. 14 dargestellt.



Abb. 14: Schematische Darstellung der waveguide Geometrie

Der Vorteil der waveguide Geometrie von Abb. 14 gegenüber der 90° Geometrie liegt auf der Hand: Durch die Mehrfachreflexionen gelangt ein größrer Anteil der Strahlung in unmittelbaren Kontakt mit der sehr dünnen aufgewachsenen Schichtstruktur. Stärkere Absorption ist die Folge. Freilich sind hier Normal- und Parallelkomponenten des elektrischen Feldes (normal, parallel bezüglich der Schichtebenen!) vermischt. Das läßsich in der Analyse aber leicht berücksichtigen.

Der Winkel der Seitenflächen wurde so gewählt, daßdie reflektierten Strahlen im Inneren der Probe genau parallel zu den geschliffenen Seitenflächen verlaufen. Nachrechnen der waveguide Geometrie, also Anwenden des Brechungsgesetzes und Einbeziehen von geometrischen Überlegungen, führt zum Ergebnis, daßso ein Winkel immer existiert und daßdann im Inneren der Probe, an der Unter- und Oberseite, Totalreflexion auftritt. Bei einer Wahl für den Brechungsindex von Silizium von 3.5 führt dies zu einem Winkel von 38.54°.

Nach den oben eingeführten Bezeichnungen für die einzelnen Polarisationen liegt in der waveguide Geometrie für eine s-polarisierte Strahlung das elektrische Feld vollständig in der Schichtebene, während für p-polarisierte Strahlung dadurch, daßie auch beim Eintritt in die Probe gebrochen wird, ein Anteil des Feldes in Wachstumsebene die Folge ist.

Für die Grenzfläche Si-Vakuum wurden die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten für eingestrahlte Intensität in s- und p-Polarisation mithilfe des Formalismus der Fresnelgleichungen berechnet. Eine Ableitung dazu findet sich in der Dissertation von T. Fromherz [FromDiss94]⁶. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 15 und

⁶ NB! Ein kleiner Fehler findet sich dort im Endergebnis für den Transmissionskoeffizienten der Intensitäten. Das Absolutquadrat des Transmissionskoeffizienten für die Amplitude ist nicht mit dem Verhältnis der Brechungsindizes zu multiplizieren, sondern mit dem der verallgemeinerten Brechungsindizes v_p . Das ist ersichtlich aus einer Betrachtung des Poynting Vektors. Durch einen Vergleich der einzelnen Intensitäten (eingestrahlt, reflektiert, transmittiert) durch ein Flächenelement an der Grenzfläche (xy-Ebene) folgt, daßdie Normalkomponente (=z-Komponente) des Poynting Vektors und nicht sein Absolutbetrag erhalten bleiben müssen.



Abb. 15: Transmissions- und Reflexionskoeffizienten für den Übergang elektromagnetischer Strahlung von Vakuum auf isotropes Silizium (n=3.5) in Abhängigkeit des eingestrahlten Winkels (0° entspricht senkrechtem Einfall)



Abb. 16: Transmissions- und Reflexionskoeffizienten für den Übergang elektromagnetischer Strahlung von isotropem Silizium (n=3.5) auf Vakuum in Abhängigkeit des eingestrahlten Winkels (0° entspricht senkrechtem Einfall)

16 dargestellt. Für Si wurde ein Brechungsindex von n = 3.5 gewählt.

Der graue Balken bei 52° deutet den entsprechenden Winkel bei waveguide Geometrie an. T und R stehen für Transmission und Reflexion, s und p für s – Polarisation und p – Polarisation. Entsprechende Kombinationen finden sich in den Abbildungen. Durch den hohen Brechungsindex von Silizium reicht bereits ein geringer Einstrahlungswinkel, um Totalreflexion innerhalb des Siliziums zu erhalten, nämlich 16.6° (mit n = 3.5), was auch aus Abb. 16 ersichtlich ist.

Die beiden Abbildungen 15 und 16 sind übrigens sehr eng miteinander verknüpft: Der gesamte Winkelbereich in Abb. 15, also von 0° bis 90° , ist in Abb. 16 auf den kleinen Winkelbereich von 0° bis 16.6° komprimiert. Das erklärt sich aus der Tatsache, daßdie transmittierte und die reflektrierte Intensität an einer Grenzfläche bei fester Geometrie unabhängig von Strahlungsrichtung sind. Der Beweis dafür folgt aus dem Formulismus der weiter oben zitierten Fresnelgleichungen.

Die Intensitätsverhältnisse beim Eintritt der IR Strahlung in die Probe können aus Abb. 15 abgelesen werden. Der Transmissionskoeffizient von p-polarisierter Strahlung liegt dabei höher als jener von s-polarisierter.

Der restliche Verlauf der Strahlungsintensitäten kann von Abb. 16 abgelesen werden. Bei einem Winkel von 52° (waveguide Geometrie) werden an der Bodenfläche der Probe und in etwa auch an der präparierten Deckfläche jeweils die gesamte Intensität reflektiert. Die absorbierende Schichtstruktur der Deckfläche bedarf noch einer genaueren Untersuchung; dazu wird auf die Bandstrukturrechnung im Anhang B verwiesen.

Der Austritt aus der waveguide Geometrie geschieht unter einem Winkel von 14°, wie beim Eintritt in die Probe in einem Bereich, wo noch hohe Transmission, insbesondere bei der p-Polarisation, stattfindet (die Situation ist aufgrund der gleichen Winkelgeometrie analog zum Eintritt der Strahlung in die waveguide Struktur!) Daßaber nicht die gesamte Strahlung austritt, sondern ein Teil wieder reflektiert wird, und dieser nun unter einem anderen Winkel, als bei waveguide Geometrie üblich, auf die aktive Schichtstruktur trifft, ist Realität und macht das gesamte nochmals etwas schwieriger. Was aber zumindest angenommen werden kann, ist, daßdie beiden Polarisationen, s- und p-Polarisation, als solche erhalten bleiben. Dies folgt aus den Stetigkeitsbedingungen der Maxwellgleichungen, angewandt auf einen Übergang zwischen zwei Materialien mit einer ebenen Trennfläche. Damit gilt: Die Positionen der Meßeaks im Spektrum bleiben natürlich erhalten, die relativen Intensitäten bedürfen aber einer genaueren Analyse.

Kapitel 4 Meßpparatur und Meßufbau

Für Messungen im Rahmen dieser Arbeit wurde fast ausschließlich das vorhandene Fourierspektrometer *Bruker IFS*66 verwendet; dies betrifft insbesondere die Transmissions- und die frequenzabhängigen Photostrommessungen. Für die Dunkelstrommessungen wurde zumindest der Kryostat des Fourierspektrometers benutzt. Eine kurze Beschreibung des Fourierspektrometers und der einzelnen Meßaufbaus werden in diesem Kapitel gegeben.

4.1 Kryostat

Die verwendeten Photodetektoren waren nur für Temperaturen kleiner als 80..90K als solche verwendbar. Darüber war der Strombeitrag über thermische Anregung zu dominierend. Zur Abgekühlung wurde der Helium-Kryostat des Fourierspektrometers verwendet. Eine Schematische Darstellung dieses Kryostaten ist in Abb. 17 gegeben.

Flüssiges Helium (= LHe) für die Kühlung war in Kannen beim universitätseigenen Helium-Verflüssiger abzuholen. Das verbrauchte (=verdampfte) Helium wurde in eigens dafür vorgesehenen Rückleitungen in Vorratsbehälter zusammengesammelt, um später wieder verflüssigt zu werden. Diese Vorgehensweise empfiehlt sich insofern, als Helium nicht ganz billig ist (der Preis für 1 Liter flüssiges Helium liegt bei etwa 100ÖS).

Durch Abkühlen mit Helium können leicht tiefe Temperaturen erreicht werden. Der Siedepunkt von Helium liegt ja bei etwa 4.2K. Nach außn, zur Raumtemperatur (~ 300K), ergibt sich damit ein großr Temperaturgradient. Um nun nicht allzuviel von außn einströmende Wärme zu haben, wird der Kryostat von einem Vakuummantel umgeben. Die Luft darin wird mit einer Turbomolekularpumpe und einer vorgehängten mechanischen Pumpe abgesaugt. Normalerweise herrscht im Vakuummantel ein Unterdruck von $10^{-3}...10^{-5}$ mbar.

Zur groben Einstellung der Temperatur auf einen fixen Wert muße der Heliumfluß an der Kanne mittels einem Ventil am Heber eingestellt werden. Zur Feineinstel-



Abb. 17: Schematische Darstellung des Krystaten. Die gesamte Höhe des Kryostaten beträgt um die 40..50cm.

lung und Überwachung der Temperatur standen zwei dafür vorgesehene LakeShore Geräte (PID-Regler) zur Verfügung. Jedes von diesen Geräten war mit einem Paar, Thermoelement plus Heizer, im Kryostaten gekoppelt, von denen sich das erste unmittelbar beim Eintritt des Heliums in die Probenkammer, das zweite am Probenhalter selbst befand (vergleiche Abb. 17). Mit ein bißhen Geduld beim Einstellen des Heliumflusses und der Parameter des PID Reglers (LakeShore) konnte damit die Temperatur auf etwa 0.01K genau geregelt werden.

4.2 Kurze Beschreibung des Fourierspektrometers

Ein Fourierspektrometer dient zur spektralen Analyse von elektromagnetischer Strahlung im IR-Bereich. Für die hier untersuchten Infrarotdetektoren bot das am Institut vorhandene Fourierspektrometer *Bruker IFS*66 die Möglichkeit, Intrabandübergänge optisch auszumessen, zum einen, indem einfach die Transmission durch die Probe gemessen, zum anderen, indem die Probe selbst als Detektor für das Fourierspektrometer verwendet wurde. Genaueres folgt weiter unten.



Abb. 18: Schematische Darstellung des Fourierspektrometers

Die experimentelle Anordnung des IR-Fourierspektrometers gleicht sehr dem Michelson Interferometer, wie aus Abb. 18 zu ersehen ist.

Als IR Strahlungsquelle wurde ein glowbar auf einer Temperatur von $T \sim 1000 K$ verwendet. Dabei gibt dieser Infrarotstrahlung (=Wärmestrahlung) mit etwa Planckscher Verteilung ab, das sein Maximum bei der verwendeten Temperatur bei etwa $3 \mu m$ hat. Bei $T \sim 1000 K$ glüht übrigens der glowbar bereits in oranger Farbe. Absorption an Luft und Optik machen die spektrale Verteilung aber wesentlich komplizierter. Das vom Detektor des Fourierspektrometers letztendlich gelieferte Stromsignal hat folgende Frequenzabhängigkeit (FS steht für FourierSpektrometer)

$$I_{FS}(\omega) = const \cdot R_{FS}(\omega) \cdot G_{FS}(\omega) \cdot T(\omega) \cdot P_S(\omega)$$
(23)

wobei

	Einheit	
$I_{FS}(\omega)$	$[A/m^2]$	 Photostrom am Detektor des Fourierspektrometers für
		Intensität bei Frequenz ω
const	[]	 Konstante
$P_S(\omega)$	$[W/m^2]$	 Frequenzabhängigkeit der Intensität der IR Quelle
$R_{FS}(\omega)$	[A/W]	 Responsivität des Detektors vom Fourierspektrometer
$G_{FS}(\omega)$	[]	 Transmissionsfaktoren der gesamten Optik ($0 \le G \le 1$)
$T(\omega)$	[]	 Transmissionsfaktor durch die Probe ($0 \le T \le 1$)

 $I_{FS}(\omega)$ erhält man durch Fouriertransformation des detektierten Signals $I_{FS}(z)$, wobei z für die Position des beweglichen Spiegels in Abb. 18 steht. Man beachte dabei, $da\beta \frac{\omega}{c}z = kz$ (k ist der Wellenvektor, c die Lichtgeschwindigkeit).

4.2.1 Anmerkung zur Position der Probe im Strahlengang

Die Probe ist hier bis auf restliche Optik (Umlenkspiegel, usw.) unmittelbar vor dem Detektor angebracht. Eine alternative Position wäre gleich nach der IR Strahlungsquelle. Dies ist schon allein aus (23) ersichtlich: Substituieren von

$$\begin{array}{rcl} P_S(\omega) & \to & P_S(\omega) \cdot T(\omega) \\ T(\omega) & \to & 1 \end{array}$$

entspricht genau einem Ansatz für die alternative Position der Probe und führt genau zum gleichen Ergebnis.

4.2.2 Spezifikationsdaten zum Fourierspektrometer IFS 66

Ein paar Daten für die verwendete Konfiguration wurden aus Datenblättern zur Anlage entnommen:

$400 cm^{-1} - 4800 cm^{-1}$
$< 0.25 cm^{-1}$
$< 0.01 cm^{-1}$

Optik	
IR Quelle	wassergekühlter SiC glowbar
Strahlteiler	KBr
Detektor	LN ₂ gekühlter MCT Detektor

(MCT = Mercury Cadmium Telluride = HgCdTe)

4.3 Meßnordnungen und Meßuswertung

4.3.1 Transmissionsmessung

Durch Messen der frequenzaufgelösten Transmission durch die zu untersuchenden Si/SiGe Strukturen erhält man Informationen über Absorption in Abhängigkeit von der Wellenzahl. Eventuell auftretende Absorptionspeaks geben dann Anlaßzu entsprechendem Erklärungsbedarf. Zur Transmissionsmessung auf dem IR-Fourierspektrometer ergibt sich aus Gl. (23) folgende Vorgehensweise:

 $I_{FS}(\omega)$ ist im allgemeinen von komplizierter Gestalt, was durch die schwer zugänglichen Faktoren $P_S(\omega)$, $R_{FS}(\omega)$ und $G_{FS}(\omega)$ verursacht wird. Eine einzige Messung an der Probe sagt daher nicht viel über $T(\omega)$ aus, da man über P_S , R_{FS} und G_{FS} ja auch nicht viel weiß Es wird eine Referenz gebraucht, an der auch eine Transmissionsmessung durchgeführt wird. Die Referenz besteht aus dem gleichen Substratmaterial wie die Detektorprobe, hat jedoch keine Schichtstruktur aufgewachsen, ein Stück Substrat also.

Aus zwei Messungen mit exakt gleichem Versuchsaufbau, jedoch einmal mit der Probe, das andere Mal mit dem Substrat im Strahlengang, läß sich der Transmissionkoeffizient der Schichtstruktur leicht bestimmen. Simples Durchdividieren der Spektren liefert das gewünschte Ergebnis. Die Faktoren P_S , R_{FS} und G_{FS} fallen heraus.

4.3.2 Frequenzabhängige Photostrommessung

Eine frequenzaufgelöste Messung des Photostromes bringt sehr viel an Informatio-

nen über Anregungsmechanismen in der aktiven Detektorschicht und über die Detektorqualität. Ihre Meßlaten wurden zur Berechnung der Responsivität und der Detektivität benötigt.

Zur Messung wurde das weiter oben beschriebene IR Fourierspektrometer verwendet. Analog zu Abb. 18 ist die Detektorprobe unmittelbar vor dem Detektor des Fourierspektrometers in dem Kryostaten eingebaut. In diesem Fall wurde aber das Stromsignal der gewachsene Detektorprobe anstelle von jenem des spektrometereigenen Detektors verwendet.

Der schematische Versuchsaufbau für die frequenzabhängige Photostrommessung ist in Abb. 19 dargestellt.



Abb. 19: Schematische Aufbau der frequenabhängigen Messung des Photostroms

Das fourieranalysierte Stromsignal vom Fourierspektrometer hat dadurch folgendes Aussehen

$$I_{PS}(\omega) = const \cdot P_S(\omega) \cdot G_{PS}(\omega) \cdot R_{PS}(\omega)$$
(24)

Im Vergleich zu (23) fällt $T(\omega)$ heraus. Der Index PS ist steht für PhotoStrom. Anstelle von G_{FS} tritt G_{PS} , zwei Größn, die sich sehr wohl unterscheiden, doch dazu weiter unten noch genauer. Die interessante Größ in (24) ist $R_{PS}(\omega)$, die frequenabhängige Sensitivität des selbstgebauten Detektors in Einheiten von Ampere pro Watt eingestrahlter Leistung.

Die eingestrahlte Leistung P_S kommt wieder vom glowbar, der Infrarotquelle. Um diese Größ loszuwerden, empfiehlt es sich, eine weitere Messung zu machen, nämlich die Messung eines Leerspektrums mit dem MCT-Detektor des Fourierspektrometers. Leerspektrum heiß daßich der Kryostat zwar im Strahlengang befindet, aber die Probe im Kryostat aus dem Strahlengang herausgezogen wurde. Hier ist Gl. (23) zu verwenden. $T(\omega)$ wird dabei klarerweise auf 1 gesetzt. Durchdividieren der so erhaltenen Meßurven liefert nach Gl. (23) und (24)

$$\frac{I_{PS}}{I_{FS}} = \frac{G_{PS}(\omega)}{G_{FS}(\omega)} \frac{R_{PS}(\omega)}{R_{FS}(\omega)}$$
(25)

 R_{FS} , die Responsivität des fourierspektrometereigenen IR Detektors, ist geprägt von der Absorptionscharakteristik eines HgCdTe-Halbleiters (MCT Detektor!), der in etwa eine Energielücke von $600 \, cm^{-1}$ hat. Die Absorption in Abhängigkeit der Wellenzahl stellt im großn und ganzen eine kontinuierliche Kurve dar, die bei $600 \, cm^{-1}$ stark einsetzt und dann wieder ausklingt. Sie weist keine nennenswerten Peaks auf. Für eine erste Abschätzung von R_{PS} wurde ihre Abhängigkeit von der Wellenzahl vernachlässigt.

Die beiden geometrischen Faktoren G_{PS} und G_{FS} sind fast ident. Der einzige Unterschied besteht darin, daßbei der Messung von I_{PS} die Strahlung im Kryostaten gemessen wird, während bei I_{FS} die Strahlung noch durch die Kryostatfenster hinaus muß über ein paar Spiegel umgelenkt und dann erst detektiert wird. Der Unterschied besteht im großn und ganzen also in den zusätzlichen Kryostatfenstern, die tatsächlich im hier relevanten Frequenzbereich einen Absorptionspeak bei tiefen Temperaturen verursachen - man beachte, bei tiefen Temperaturen. Bei Raumtemperatur ist dieser Peak praktisch verschwunden. ZnSe sollte jedoch beim hier relevanten Frequenzbereich fast keine Absorption aufweisen. Der Peak in der Absorption dürfte daher auf Verschmutzungen der Oberflächen der Kryostatfenster, möglicherweise auch Eis, zurückzuführen sein. Diesen einen Effekt herauszurechnen, gestaltete sich aber als einigermaßn schwierig.

Zusammenfassend wird (25) unter Vernachläßgung der Frequenzabhängigkeit von R_{FS} nochmals umgeschrieben

$$R_{PS}(\omega) \sim \frac{G_{FS}(\omega)}{G_{PS}(\omega)} \frac{I_{PS}}{I_{FS}}$$
(26)

4.3.3 Messung des Dunkelstromes

Schematisch ist die Meßnordnung in Abb. 20 dargestellt (eine genauere Beschreibung des Kryostaten findet sich auf S 43). Eine Dunkelstrommessung besteht in der Messung einer Strom-Spannungscharakteristik des kontaktierten Detektormesas bei festgehaltener Temperatur.

Die Temperaturregelung im Kryostaten wurde mit LakeShore Geräten (=PID Regler) durchgeführt. Die Temperatur selbst war normalerweise im Bereich von 10 bis 100 K auf einen fixen Wert eingestellt.



Abb. 20: Schematische Darstellung der Meßnordnung für Photostrom und Dunkelstrom

Das Strom-Spannungs-Meßerät hatte eine standardisierte GPIB⁷ Schnittstelle, wodurch die Spannungsregelung vom Computer aus gesteuert werden konnte. So wurde im Normalfall über ein LabView⁸ Programm auf einem Macintosh Computer die Spannung von -5V bis +5V in Schritten von 50mV durchgefahren. Der dazugehörige Strom wurde gemessen, über die GPIB Schnittstelle ausgelesen und in entsprechende Files abgespeichert.

Bei Dunkelstrommessungen war der glowbar des Fourierspektrometers außr Betrieb. Bis auf die 300K Hintergrundstrahlung war es für die Probe praktisch dunkel, wie auch der Name der Messungen besagt. Je nachdem, ob der durch die Raumtemperaturstrahlung erzeugte Photostrom miteinbezogen werden sollte, wurde eine Abschirmung mit normaler, kommerziell erhältlicher Al Folie verwendet. Diese bestand in einem schlichten Einwickeln des Probenhalters inklusive Probe mit der erwähnten Folie.

 $^{^7\,}$ GPIB steht für General Purpose Interface Bus

⁸ LabView ist eine Visuelle Programmiersprache zur Erleichterung von computergesteuerten Meßufgaben im Labor. Als Schnittstelle vom Computer zur Außnwelt wird der standardisierte GPIB Bus verwendet. Während des Ablaufens eines LabView Programmes können zuvor am Bildschirm individuell eingestellte symbolische Meßeräte zum Ablesen der jeweiligen Meßaten verwendet werden. Gleichzeitiges Abspeichern der Daten erspart eine Menge an Arbeit.

Kapitel 5 Messungen, Auswertungen und entsprechende Berechnungen

Die vorhandenen Proben wurden auf dreifache Weise experimentell untersucht. Entsprechende Berechnungen zur Bandstruktur und zum Absorptionskoeffizienten der Proben dienten danach zum Vergleich mit den experimentellen Daten und waren somit ein Maßdafür, inwieweit man die Strukturen verstand.

* Mit Transmissionsmessungen am Fourierspektrometer wurden die frequenzabhängige Transmission gemessen. Eine nähere Beschreibung und eine schematische Darstellung der Meßnordnung befindet sich im Kapitel 4 auf S 47. Die Form der Probe war normalerweise die waveguide Geometrie. Zum Aussondieren der polarisationsabhängigen Transmissionseigenschaften der Probe mußen die Spektren der Probe durch die des Substrates durchdividiert werden. Ein sehr kompakte Darstellungsweise ist dabei das 4-fach dividierte Spektrum. Es berechnet sich folgendermaßn:

$$4 - fach \, dividientes \, Spektrum \equiv \frac{\frac{T_p}{T_s}|_{Probe}}{\frac{T_p}{T_s}|_{Substrat}} = \frac{\left(\frac{T_p|_{Probe}}{T_p|_{Substrat}}\right)}{\left(\frac{T_s|_{Probe}}{T_s|_{Substrat}}\right)} \tag{27}$$

(T_p und T_s stehen jeweils für das Transmissionsspektrum von Strahlung in *p*und *s*-*Polarisation*). Bei den 4-fach dividierten Transmissionsspektren äußrt sich daher ein Absorptionspeak bei p-polarisierter Strahlung als Peak nach unten, während sich einer bei s-polarisierter Strahlung als Peak nach oben erweist.

Nach Ätzen und Kontaktieren der Detektormesas wurden dann Dunkel- und Photostrommessungen durchgeführt.

* Dunkelstrommessungen bezeichnen die Strom-Spannungs-Charakteristiken der Detektormesas auf der jeweiligen Probe. Die 300°K Hintergrundstrahlung wurde entweder mittels Alu-Folie abgeschirmt, oder zur Probe durchgelassen. Daraus konnte durch Subtraktion der Photostrom der 300°K Hintergrundstrahlung, der Raumtemperaturstrahlung also, bestimmt werden. Eine n\u00e4here Beschreibung und eine schematische Darstellung der Me\u00dfnordnung befindet sich im Kapitel 4 auf S 49.

- * Bei den Photostrommessungen wurde, wieder unter Benützung des Fourierspektrometers, die frequenzabhängige Responsivität des Detektors bestimmt. Wie oben gibt es eine nähere Beschreibung und eine schematische Darstellung der Meßnordnung im Kapitel 4 auf S 47.
- * Zur Berechnung des Absorptionskoeffizienten diente ein MatLab⁹ Programm, das von Thomas Fromherz während seiner Dissertation (siehe [FromDiss94]) entwickelt worden war. Die Theorie dahinter wird im Anhang B (vgl. S 119) erklärt. Selbstkonsistente Berechnungen und Berücksichtigung von diversen Korrekturen machten das Programm zu einem nützlichen Werkzeug bei der Interpretation der gemessenen Daten.

5.1 Gemessenen Proben, Probendaten

Messungen fanden zu mehrereren Proben mit Übergitterstruktur statt. In dieser Arbeit wird aber nur auf die in Abb. 21 angeführten Proben genauer eingegangen, im wesentlichen sind es drei. Sie spiegeln am besten die zu erwartenden physikalischen Prozesse wider. Genauere Informationen zu Probenbezeichnungen und zum Probenaufbau finden sich im Kapitel 3, Seite 31. Die Buchstaben für die jeweilige Kontaktierung bei Dunkel- und Photostrommessungen werden in Klammer hinter dem Probennamen angeführt, sodaßder gewählte Detektormesa festgelegt ist.

In Abb. 21 finden sich die Strukturdaten der hier ausgewerteten Proben und eine Zusammenfassung der dazu gemachten Messungen. Die verwendete Abkürzungen sind dort im Begleittext erklärt. Ein *Spacer* dient zur Trennung der auch als Störstellen fungierenden Dotieratome vom Topf, wo sich die meisten frei beweglichen Ladungsträger befinden. Er ist klarerweise nur relevant bei Dotierung der Barriere, aber nicht bei Dotierung des Topfes.

Die in der Tabelle angeführten Daten sind Richtgrößn vom Hersteller der Proben (TU München, siehe Kapitel 3, Seite 31). Abweichungen bis etwa 20% sind, je nach Position des Probenstückes am ursprünglichen Wafer, im Bereich des Möglichen.

Wie aus Abb. 21 ersichtlich ist, unterscheiden sich die Proben R528D und R531D nur in der Dicke der Barriere um einen Faktor $5/3 \simeq 1.67$. Die Probe R531D hat dabei die dickere, wodurch zu erwarten ist, daßter Grundzustand hier stärker gebunden ist. Die Tunnelwahrscheinlichkeit durch die Barriere ist ja verringert und damit bei tiefen Temperaturen auch der Dunkelstrom. Diese Überlegung wird weiter unten bei der

⁹ Programmiersprache

Substrat		Herkunft	Wacker				
Material			Si				
Orientierung			100				
		Dotierstoff	Р				
	5	spez. Widerstand	2-3 kΩ cm				
R528D	Barriere	Topf	Spacer	Anzahl der Perioden	Anmerkungen	Messungen	
Dicke [Å]	300	25				T, DC, PC	
Ge-Gehalt [01]	0	0.4		10	symmetrisch		
Dotierung [cm-3]	0	5E+18					
R531D	Barriere	Topf	Spacer	Anzahl der Perioden	Anmerkungen	Messungen	
Dicke [Å]	500	25			symmetrisch	T, DC, PC	
Ge-Gehalt [01]	0	0.4		10			
Dotierung [cm-3]	0	5E+18					
R633A	Barriere	Topf	Spacer	Anzahl der Perioden	Anmerkungen Messungen		
Dicke [Å]	43	21 39	2 x 40			T (mit Au Schicht)	
Ge-Gehalt [01]	0	0.45 0.25	0	10	asymmetrisch	T (ohne Au Schicht)	
Dotierung [cm-3]	3E+18	0 0	0				
R632A	Barriere	Topf	Spacer	Anzahl der Perioden	Anmerkungen	Messungen	
Dicke [Å]	43	39 21	2 x 40		asymmetrisch	T (mit Au Schicht)	
Ge-Gehalt [01]	0	0.25 0.45	0	10	gespiegelt zu	T (ohne Au Schicht)	
Dotierung [cm-3]	3E+18	0 0	0		R633A		

Abb. 21: Zusammenfassung von Herkunft, Strukturdaten und durchgeführten Messungen zu den hier ausgewerteten Proben. T steht dabei für Transmissionsmessung, DC für Dunkelstrommessung (= dark current), PC für Photostrommessung (= photo current). Spacer bezeichnet eine Zwischenschicht, die eine dotierte Barriere vom Topf trennt.

Auswertung der Dunkelstommessungen bestätigt. Der Einflußder unterschiedlichen Barrierendicken der beiden Proben auf die energetische Position der Energiezustände ist vernachlässigbar.

5.2 Berechnungen zu R528D und R531D

Wie bereits oben erwähnt, sollten die beiden Proben R528D und R531D bis auf die Barrierendicke ident sein. Da die Berechnungen ohnedies nur für eine Barrierenbreite von 200 Angström gemacht wurden, reicht also eine Rechnung für beide Proben. Der Grund für die geringere Barrierenbreite bei den Berechnungen ist der geringere Rechenaufwand. Denn: Der Abstand der reziproken Gittervektoren $g_n = \frac{2\pi}{D}n$, mit D der Übergitterperiode, n einer ganzen Zahl, sinkt mit größrem D. Daher wächst die Anzahl der reziproken Gittervektoren innerhalb eines Bereichs Δg um g_0 , der für numerischen Berechnungen verwendet wird, direkt proportional mit der Dicke D. Wie weiter unten an der Ausdehnung der Eigenfunktionen in die Barriere hinein zu sehen ist (siehe Abb. 23), sind die im Topf gebundenen Zustände, insbesondere der Grundzustand auch bei der 200 \mathring{A} Barriere bereits stark gebunden. Eine dickere Barriere würde so am Rechenergebnis für die Absorption vom Grundzustand heraus nicht mehr allzuviel verändern.

Die Struktur der Valenzbänder in pseudomorph auf Si aufgewachsenem und daher verspanntem SiGe ist grob im Kapitel 2 (S 14) beschrieben (dort wird auch kurz auf das sogenannte strain splitting eingegangen; bezüglich dem Verlauf der einzelnen Valenzbandkanten wird auf Abb. 3 (S 15) verwiesen). Nahe am Γ -Punkt können entsprechend der kp-Störungstheorie und der Envelopentheorie gestörte Zustände als eine Linearkombination der 3 jeweils 2-fach entarteten Zustände vom Γ -Punkt, den HH-, den LH- und den SO-Zuständen, angesetzt werden. Da insgesamt 6 Zustände verwendet werden, spricht man von der 6-Band Näherung. Zustände, die sich zum Grofteil aus den beiden Zuständen des heavy hole Bandes zusammensetzen, werden als heavy hole artig bezeichnet und durchnumeriert. HH1 ist der am meisten gebundenen heavy hole artige Zustand, HH2 liegt energetisch etwas höher (im Löcherbild des Valenzbandes niedriger!), usw. Für light hole artige und split off artige Zustände gilt das gleiche analog. Ihre Bezeichnungen sind LH1, LH2, ..., bzw. SO1, SO2, ...

Die Bandstruktur wurde an diskreten Punkten in der $\overline{1}10$ Ebene berechnet, also in [110] und in [001] Richtung. Schematisch ist das in Abb. 22 dargestellt. Die Anzahl der Punkte konnte im verwendeten MatLab-Programm nach Vorstellung des Anwenders festgelegt werden. Zwischen diesen Punkten wurde später bei Integrationen im reziproken Raum linear interpoliert. Dabei verwendete man noch zusätzlich Zylindersymmetrie bezüglich der Wachstumsrichtung und Spiegelsymmetrie bezüglich der in-plane -Ebene.

Bei einer konkreten Rechnung zu einer gegebenen Struktur wurde zuerst das periodische Übergitterpotential berechnet. Die Bandoffsets, also die Position der jeweiligen



Abb. 22: Schematische Darstellung der gewählten Punkte im reziproken Raum zur Berechnung der Bandstruktur. D steht für die Übergitterperiode, a für die atomare Gitterperiode (beispielsweise von Si).

Bandkanten am Γ -Punkt, in Abhängigkeit vom Ge-Gehalt waren aus der Literatur bekannt (siehe [FromDiss94] oder Abb. 3). Aus dem daraus resultierenden Stufenpotential der Si/SiGe Übergitterstruktur konnten vorläufig die Bandstruktur und die Eigenzustände berechnet werden. Wie später aus den Berechnungen zu sehen ist, ist bei den hier verwendeten Dotierungen praktisch nur der Grundzustand (HH1) besetzt, wobei implizit die Näherung für niedere Temperaturen gemacht wird. Dieser HH1 Zustand führt zu einer räumlich variierenden Ladungsträgerkonzentration und damit über die Poisson-Gleichung zu einem zusätzlichen Potential. Unter dessen Berücksichtigung wurden neuerlich die Bandstruktur und die dazugehörigen Eigenzustände berechnet. Dieser Zyklus wurde mehrere Male wiederholt. Man spricht in diesem Zusammenhang von einer selbstkonsistenten Rechnung. Sie führte sehr rasch zu einem konvergenten Ergebnis. Im Normalfall waren nicht mehr als drei Iterationen notwendig. Ebenfalls mit der Begründung, daßnur der HH1 Zustand besetzt ist, wurde diese Rechnung 1-dimensional mit den Bandoffsets des HH-Bandes durchgeführt. Weitere Effekte, wie Austauschpotential für Fermionen und Depolarisationsverschiebung (= depolarisation shift), wurden ebenfalls berücksichtigt (siehe dazu [FromDiss94, S 49 f], [Allen76])

Mit der selbstkonsistenten Berechnung für das periodische Übergitterpotential war die Voraussetzung für das Berechnen der Bandstruktur und der Eigenzustände in 6-Band Näherung gegeben. Ein Teil der Rechenergebnisse ist in Abb. 23 dargestellt. Alle Zustände sind aufgrund der Inversionssymmetrie des symmetrischen Übergitterpoten-



Abb. 23: Darstellung der berechneten Energieniveaus und Eigenfunktionen am Γ -Punkt. Die Eigenfunktionen sind als Normquadrat auf der Höhe des jeweiligen Energieeigenwertes eingezeichnet. E1, ... bezeichnet das jeweilige Energienieveau (jeweils 2-fach entartet!, E1+E2 sind die Grundzustände, E3+E4 die ersten angeregten Zustände, ...). E_{fermi} bezeichnet die Lage der Fermienergie.

Die dickeren Linien im Diagramm geben die Bandkanten der einzelnen Bänder wieder. Im Bereich z = 100...125 Å (z die Wachstumsrichtung), im SiGe-Topf also, stehen sie für HH-Kante, LH-Kante und SO-Kante (von oben nach unten). Im Bereich reinen Siliziums sind die HH- und die LH-Kante entartet. In diesem Bereich sind sie daher in der Abbildung genau aufeinander und oberhalb der SO-Kante.

tials 2-fach entartet (vg. Anhang B, S 107). Die darin verwendeten Bezeichnungen sind im begleitenden Text im Anschlußdaran erklärt. Im SiGe Topf (= mittlerer Bereich in der Abbildung) sind die HH- und die LH-Bandkante aufgrund der Verspannungen dieser dünnen SiGe Schicht auf dem Si aufgespalten. Im Bereich reinen Siliziums sind HH Kante und LH Kante entartet.

Ein paar zusätzliche Informationen, die aus dem weiteren folgen, sind ebenfalls bereits in Abb. 23 eingezeichnet. Der zweite angeregte Zustand (=E5+E6) liegt nach dieser Rechnung noch knapp in der Barriere. Ein schwaches Verkippen der periodischen Potentialstruktur durch Anlegen einer kleine Spannung könnte daher durchaus zur Folge haben, daßLöcher, die in diesen Zustand angeregt werden, bereits einseitig über der Barriere liegen und abwandern können. Ein Indiz dafür wird später



Abb. 24: Darstellung der Ergebnisse der Bandstrukturrechnung für die Struktur der Probe R531D am Γ Punkt. Die Abbildung ist analog zur letzten Abbildung.

die Messauswertung liefern (vgl. Abb. 42, S 72). Höhere Energieniveaus sind in Abb. 24 dargestellt (in der Barriere, also im Bereich reinen Si, ist übrigens der Abstand der HH-Kante (=LH-Kante) von der SO-Kante ident zur split off Energie in einem makroskopischen Si, nämlich etwa 40 meV).

Die Dotierung des Topfes liegt hier bei etwa $4 \cdot 10^{18} cm^{-3}$. Berechnen der Zustandsdichte und Auffüllen der berechneten Bandstruktur bis die entsprechende Löcherkonzentration erreicht wird, liefert die Fermienergie E_{fermi} und und den Fermiimpuls k_{fermi} .

In Abb. 25 ist die Zusammensetzung der einzelnen Eigenzustände bezüglich HH, LH und SO graphisch dargestellt. Daraus folgt unmittelbar, ob die Zustände HH-, LH- oder SO-artig sind, und damit die Bezeichnungen HH1, HH2, ..., LH1, Diese sind für die unteren Zustände in der Tabelle in Abb. 31 mitangeführt.

Die mit den gegebenen Strukturdaten berechnete Bandstruktur ist in Abb. 26 in inplane -Richtung und in Abb. 27 in [001]-Richtung gegeben. In Abb. 26 wurde der reziproke Vektor normal zur Schichtstruktur bei $\lambda = 0$ festgehalten. Der Anteil des Vektors in der Schichtebene k_{inp} wurde variiert (*inp* steht für in-plane). Dabei ist anzumerken, daß k_{inp} in Einheiten des Wellenvektors in Wachstumsrichtung π/D



Abb. 25: Zusammensetzung der berechneten Eigenzustände bezüglich der 2-fach entarteten (siehe Indizes a, b) HH-, LH- und SO-Zustände für die Proben R528D, R531D. Dabei gilt HH≡HHa+HHb (für LH und SO analog). Schwarz bedeutet 1, weißbedeutet 0, es gilt immer HH+LH+SO=1. Horizontal sind die Eigenenergien durchnumeriert, beginnend bei nE=1, dem Grundzustand. k_{inp} wurde innerhalb einer in der Abbildung gezeigten Zelle im Rechenbereich $k_{inp} = 0, ..., 2 \cdot \frac{2\pi}{D}$ durchvariiert. λ wurde in der gesamten Abbildung festgehalten ($\lambda = 0$).

(D die Übergitterperiode) und eines Faktors k_{betr}^{10} (hier $k_{betr} = 2$) angegeben wurde. In Abb. 26 ist daher auch bei weitem nicht die gesamte Brillouinzone in [110] Richtung eingezeichnet! (Die Periode der Übergitterstruktur wurde für diese Berechnungen mit D = (200 + 25) Å gewählt, was sehr viel größr als die Ausdehnung der Elementarzelle von ungestörtem Si ist!)

Für Abb. 27 ist anzumerken, daßdie gesamte Brillouinzone eingezeichnet ist. Die Fermienergie wurde eingezeichnet. Der Wahl des Fermivektors in Wachstumsrichtung ist hier egal und daher nicht eingezeichnet. Begründung: Die erste Brillouinzone der Übergitterstruktur hat, verglichen mit der von Si etwa, eine wesentlich geringere Ausdehnung in k_z -Richtung ($k_z \equiv \lambda$), genaugenommen um einen Faktor a/D (a die Gitterperiode von Si, D die Übergitterperiode). Sie ist von der Form einer dünnen

¹⁰ Die Relevanz des Faktors k_{betr} ist die, daßn in-plane Richtung die Bandstruktur zumindest bis k_{fermi} berechnet werden muße. k_{betr} wurde daher so gewählt, daß k_{fermi} noch miteingeschlossen wurde.



Abb. 26: Berechnete Bandstruktur der Proben R528D, R531D in in-plane Richtung(λ =0). Die Fermienergie E_{fermi} und der Fermivektor k_{fermi} sind eingezeichnet. Der Grundzustand nE = 1 befindet sich ganz oben. Danach sind die Energieniveaus einfach nach unten unter Berücksichtigung der 2-fachen Entartung durchnumeriert.



Abb. 27: Berechnete Bandstruktur für die Proben R528D, R531D in Wachstumsrichtung ($k \equiv k_{inp} = 0$). Die Fermienergie E_{fermi} wurde eingezeichnet.

quadratischen Platte (vgl. dazu Abb. 22). Für den Betrag des Fermivektors spielt daher der Anteil in Wachstumsrichtung, hier λ , eine vernachlässigbare Rolle.

Nach dieser geleisteten Vorarbeit kann zum eigentlichen Zweck dieser Rechnungen gegangen werden, der Berechnung des Absorptionskoeffizienten in Abhängigkeit der Frequenz. Vom Prinzip her wird dazu nur Fermis Goldene Regel verwendet. Angenommen wurde, daßhur der 2-fach entartete Grundzustand bis zur Fermienergie besetzt ist. Details zur Berechnung finden sich im Anhang B (S 105f). Das Ergebnis des berechneten Absorptionskoeffizienten zu den Proben R528D, R531D ist in Abb. 28 gezeigt. Bei z-Polarisation findet sich der Absorptionspeak bei 1471 cm^{-1} . Das elektrische Feld steht dabei normal zu den einzelnen Schichtebenen. Eine entsprechende 1-dimensionale 1-Bandrechnung (z.B. bei Stufenpotential im Leitungsband) führt für die gleiche Polarisation zu einem ähnlichen Absorptionspeak an etwa der gleichen Position in der Wellenzahl. In diesem Modell hätte aber ein oszillierendes elektrisches Feld mit Polarisation in der Schichtebene absolut keine Absorption zur Folge. Bei dem 6-Bandmodell im Valenzband jedoch erhält man mit dieser Polarisation aufgrund der Vermischung der einzelnen Bänder eine merklich von null verschiedene Absorption. Der entsprechende Absorptionskoeffizient ist ebenfalls in Abb. 28 eingezeichnet.



Abb. 28: Berechneter Absorptionskoeffizient für z- und für +-polarisierte Strahlung für die Proben R528D, R531D. Die benötigten Eigenzustände wurde einer sebstkonsistent gerechneten 6-Bandrechnung entnommen.

Eine Zuordnung der Absorptionspeaks zu Übergängen vom Grundzustand in angeregte Bänder kann aus den Daten der zwischen den jeweiligen Zuständen berechneten Oszillatorstärken abgelesen werden. Mit den Annahmen, daßdie Temperatur niedrig und die Einstrahlung schwach ist, kommen praktisch nur Übergänge vom Grundzustand in höhere Energieniveaus in Frage. Aufgrund des, verglichen mit der Ausdehnung der Brillouinzone, niedrigen Impulses der eingestrahlten Photonen kommen in der graphischen Darstellung der Bandstruktur nur vertikale Übergänge in Frage. Die Oszillatorstärke zwischen Grundzustand und angeregten Zuständen wurde in Form eines Contour-Plots jeweils für beide Polarisationen graphisch dargestellt. Das Ergebnis dieser Berechnungen ist in den Abbildungen 29 (für $\lambda = 0$) und 30 (für $\lambda = 1$) dargestellt. Auf der x-Achse ist der in-plane Wellenvektor k_{inp} aufgetragen, und zwar nur im relevanten Bereich von 0 bis zum Fermivektor k_{fermi}

Um die Identifikation der für Absorptionspeaks verantwortlichen Übergänge einfacher zu machen, wurde noch eine Tabelle für die Übergangsenergien angefertigt. Diese könnten natürlich auch aus den Abbildungen 26 und 27 herausgelesen werden. Eine Tabelle ist aber leichter handzuhaben. Sie ist in Abb. 31 gegeben. Die Übergangsenergien sind bereits auf Wellenzahlen umgerechnet.

Mit der Tabelle in Abb. 31 und den Abbildungen 29, 30 können die Peaks in Abb. 28 folgendermaßn identifiziert werden:

- * für z-Polarisation (\simeq p-Polarisation) ist der Absorptionspeak bei 1471 cm^{-1} auf den Übergang $HH1 \rightarrow HH2$ (nE=5,6)zurückzuführen. HH2 ist der zweite angeregte Zustand und liegt knapp unterhalb der Barrierenkante. Aus Abb. 29 und Abb. 30 ist klar ersichtlich, daßfür diese Übergänge in z-Polarisation die Oszillatorstärke großist (ohne Entartung: nE=3). Die Übergangsenergie ist nach der Tabelle in Abb. 31 auch passend.
- * für +-Polarisation (≡ s-Polarisation) ist der Absorptionspeak bei 471 cm⁻¹ auf den Übergang HH1 → LH1 (nE=3,4) zurückzuführen. Aus den Abbildungen 29 und 30 ist klar eine starke Oszillatorstärke für diesen Übergang ausgebildet (ohne Entartung: nE=2). Der Zustand LH1 ist der erste angeregte Zustand und liegt noch deutlich innerhalb des Topfes (man vergleiche Abb. 23). Er ist also gebunden und spielt daher bei kleinen angelegten Spannungen bei Photostrommessungen quer zur Schichtstruktur keine Rolle. Weitere Absorption von s-Polarisation erhält man nach Abb. 28 im Bereich von 1500 cm⁻¹ bis 2500 cm⁻¹. Diese ist auf analoge Weise wie oben auf die Übergänge HH1 → LH2 (nE=7, 8), HH1 → LH3 (nE=11,12), HH1 → LH4 (nE=13,14) und HH1 → HH4 (nE=15,16) zurückzuführen. Diese Zustände liegen nach Abb. 23 bereits deutlich über der Barriere und spielen bei Photostrommessungen daher eine wichtige Rolle.



Abb. 29: Darstellung der Oszillatorstärke zwischen Grundzustand und angeregten Zuständen für $\lambda = 0$ und $0 \le k_{inp} \le k_{fermi}$. Die 2-fache Entartung der Zustände wurde bei den Berechnungen berücksichtigt, hier aber zwecks übersichtlicherer Darstellung beiseitegelassen.



Abb. 30: Darstellung der Oszillatorstärke zwischen Grundzustand und angeregten Zuständen für $\lambda = 1$ und $0 \le k_{inp} \le k_{fermi}$. Die 2-fache Entartung der Zustände wurde bei den Berechnungen berücksichtigt, hier aber zwecks übersichtlicherer Darstellung beiseitegelassen.

k = k = 0	nE = 1, 2	nE = 3, 4	nE = 5, 6	nE = 7, 8	9, 10	11, 12	13, 14
$\mathbf{\kappa}_{\text{inp},x} - \mathbf{\kappa}_{\text{inp},y} - 0$	HH1	LH1	HH2	LH2	HH3	LH3	LH4
$\lambda = 0.0$	0	-480	-1510	-1558	-1581	-1638	-1648
$\lambda = 0.5$	0	-480	-1508	-1563	-1594	-1606	-1690
$\lambda = 1.0$	0	-480	-1505	-1576	-1582	-1614	-1657
$k_{inp,x} = k_{inp,y} = 1.41$							
$\lambda = 0.0$	0	-487	-1391	-1524	-1531	-1601	-1634
$\lambda = 0.5$	0	-487	-1391	-1519	-1537	-1581	-1653
$\lambda = 1.0$	0	-487	-1391	-1516	-1543	-1567	-1672
$\mathbf{k}_{\text{inp},x} = \mathbf{k}_{\text{inp},y} = 0$	15, 16	17, 18	19, 20	21, 22	23, 24	25, 26	27, 28
$\lambda = 0.0$	-1735	-1785	-1871	-1894	-1933	-1982	-2121
$\lambda = 0.5$	-1692	-1812	-1841	-1910	-1956	-2031	-2040
$\lambda = 1.0$	-1739	-1755	-1899	-1905	-1965	-2030	-2039
$k_{inp,x} = k_{inp,y} = 1.41$							
$\lambda = 0.0$	-1642	-1772	-1827	-1857	-1904	-1952	-2053
$\lambda = 0.5$	-1666	-1746	-1791	-1864	-1925	-1988	-2028
$\lambda = 1.0$	-1702	-1722	-1746	-1865	-1960	-1996	-2028
·							
$\mathbf{k}_{\text{inp},x} = \mathbf{k}_{\text{inp},y} = 0$	29, 30	31, 32	33, 34	35, 36	37, 38	39, 40	
$\lambda = 0.0$	-2195	-2237	-2263	-2360	-2369	-2699	
$\lambda = 0.5$	-2139	-2235	-2288	-2392	-2493	-2583	
$\lambda = 1.0$	-2122	-2140	-2386	-2473	-2522	-2555	
$k_{inp,x} = k_{inp,y} = 1.41$							
$\lambda = 0.0$	-2090	-2214	-2256	-2389	-2444	-2567	
$\lambda = 0.5$	-2119	-2172	-2269	-2368	-2431	-2571	
$\lambda = 1.0$	-2119	-2161	-2276	-2312	-2479	-2536	

Abb. 31: Berechnete Übergangsenergien in Einheiten von cm^{-1} vom Grundzustand (nE=1,2) in höhere Zustände in Abhängigkeit vom Wellenvektor ($k_{inp,x}, k_{inp,y}, \lambda$) für die Proben R528D, R531D. Alle Zustände sind 2-fach entartet. Die Bezeichnungen $HH1, HH2, \ldots, LH1, \ldots$ sind aus der weiter oben angeführten Abbildung zur Zusammensetzung der einzelnen Zustände bezüglich HH, LH und SO gerechtfertigt.

Eine weitere klare Aussage von Abb. 28 ist die, daßdie Absorption von zpolarisierter Strahlung einen deutlich stärkeren Peak als die +-Polarisation aufweist. Bei Photostrommessungen kommt jedoch genau das Gegenteil zutage (vgl. Abb. 40, S 71). Die Responsivität, also der Strombeitrag in Abhängigkeit von der Frequenz, hat einen deutlich größren Peak bei der Absorption von s-polarisierter Strahlung. Das kommt der praktischen Anwendung solcher Detektoren entgegen, denn da ist natürlich der senkrechte Einfall wesentlich leichter handzuhaben als ein seitliches Einkoppeln über waveguide Geometrie. Es ist ja gerade die s-Polarisation, die einen Stromflußim Detektor verursachen soll. All zu widersprüchlich ist diese vergleichsweise groß Sensitivität auf s-Polaristion nicht: Eine Photostrommessung gibt nicht exakt den Absorptionskoeffizienten wieder. Vielmehr gehen weitere Parameter wie die Leitfähigkeit der einzelnen Bändern und die Relaxation der angeregten Löcher ein. Die Peakposition bleibt plausiblerweise die gleiche, nur die Peakhöhen relativ zueinander sind nicht so ohne weiteres auswertbar.

5.3 Messungen zu R528D

5.3.1 Probengeometrien und Bezeichnungen

Für alle Messungen wurden Proben mit geschliffener waveguide Geometrie verwendet

- * bei Transmissionsmessungen ohne Strukturierung der gewachsenen Schichten
- * bei Dunkel- und Photostrommessungen mit den Mesastrukturen, wie sie in Abb.
 32 dargestellt sind; Anmerkung: am Probenhalter standen insgesamt nur 6 Drähte zur Verfügung. So konnten nicht alle Detektormesas zugleich kontaktiert werden.



Abb. 32: Schematische Detektorstruktur und Bezeichnung der Detektormesas der Probe R528D

5.3.2 Transmissionmessungen

Am Probenstück R528D selbst wurden keine Transmissionmessungen durchgeführt, dafür aber an R528C. Dieses Probenstück war am ursprünglichen Wafer genau benachbart zur R528D. Daher ist zu erwarten, daßdie Eigenschaften zumindest qualitativ gleich sind.

Die Meßrgebnisse sind in Abb. 33 zusammengefaß (bezüglich der Definition der 4-fach dividierten Spektren siehe weiter oben, Gl.(27)).



Abb. 33: Transmissionsmessungen an R528C bei einer Temperatur von 10K. Die Probe ist in waveguide Geometrie poliert.

Die Probe R528C ist in 2 Stücke geteilt worden. Auf einem davon wurde auf die bereits gewachsenen Schichtstruktur noch eine etwa 1000 \mathring{A} dicke Au-Schicht aufgebracht. Wie aus Abb. 33 zu ersehen ist, führt dies zu etwas unterschiedlichen 4-fach dividierten Spektren, insbesondere bei niedrigen Wellenzahlen.

Die 4-*fach dividierten Spektren* von Abb. 33 sind verglichen mit weiteren, hier nicht gezeigten Messungen einigermaßn unabhängig von der Temperatur im tiefen Temperaturbereich, zumindest bis 50K. Daraus folgt, daßdie thermische Anregung in diesem Bereich nur eine untergeordnete Rolle spielt. Aus den beiden Kurven in Abb. 33 kann aber nicht wirklich brauchbare Information abgelesen werden. Die scheinbaren Peaks sind eher Artefakte als Resultate der speziellen Proben-

struktur. Der Effekt, der hier offensichtlich alles zunichte macht, dürfte die freie Ladungsträgerabsorption (= free carrier absorption) in der dotierten Kontaktierungsschicht am Top-Kontakt sein (vgl. Abb. 9, S 32; vgl. [Zan95]).

5.3.3 Dunkelstrommessungen

Zum Vergleich der Detektormesas wurde an jedem Kontakt bei der Temperatur von 5K eine Dunkelstrommessung durchgeführt. Diese sind in Abb. 34 zusammengefaß (die Bezeichnung der einzelnen Kontakierungsflächen und damit der Detektormesas ist in Abb. 32 gegeben). Zum besseren Vergleich der Daten sind sie bereits auf die Fläche normiert, auf der vertikalen Achse ist daher die Stromdichte aufgetragen.



Abb. 34: Dunkelstrommessungen an R528D; Vergleich der einzelnen Detektormesas

Aus Abb. 34 ist ersichtlich, daßdie Kontakte BD und BF die niedrigsten Dunkelstromdichten haben. Die Kontakte BC und BE haben einen merklich unterschiedlichen Strom-Spannungs-Verlauf, ihre Dunkelströme sind wesentlich höher. Der Grund dafür liegt in Leckströmen, die die Detektorcharakteristik komplett überdecken. So werden nur mehr an den beiden Kontakten BD und BF weitere Untersuchungen unternommen. Ein Vergleich der 300K Photostromdichten, dargestellt in Abb. 38, zeigt auch eine gewisse Gleichwertigkeit dieser beiden Kontakte (Abb. 38 ist analog zu Abb. 39 weiter unten, und wird daher dort gebracht). Für weitere Messungen entschied man sich aber für einen Kontakt, hier den Kontakt BD, ein Detektormesa der Fläche $200 \times 200 \,\mu m$.

Am Kontakt BD wurden eine Reihe weiterer Messungen durchgeführt. Die temperaturabhängigen Dunkelstrommessungen sind in Abb. 35 zusammengefaß Dabei wurde die Probe von der 300K Hintergrundstrahlung mittels Alufolie abgeschirmt.



Abb. 35: Dunkelstrommessungen zu verschiedenen Temperaturen an R528D (BD); die 300K Hintergrundstrahlung wurde abgeschirmt.

Klarerweise steigt mit wachsender Temperatur auch der Dunkelstrom, generiert durch thermische Emission über die Barriere. Die Asymmetrie bezüglich der angelegten Spannung läßsich vermutlich auf Diffusionsprozesse während des Wachstums zurückführen, wodurch eine symmetrische Stufensstruktur verhindert wurde.

Für ein paar niedrige Temperaturwerte wurden die Dunkelstrommessungen wiederholt, diesmal wurde aber die 300K Hintergrundstrahlung zugelassen. Diese Messungen sind in Abb. 36 zusammengefaß Für zwei Temperaturen, nämlich T=10K und T=60K sind sie in Abb. 37 mit den abgeschirmten Dunkelstrommessungen verglichen. Dabei kommt klar zum Ausdruck, daßbei diesen niedrigen Temperaturen bei kleinen Spannungen der Photostrom des 300K Hintergrundes und ab einer bestimmten Spannung dann der Dunkelstrom dominiert. Subtraktion der Dunkelstrommessungen mit 300K Hintergrundstrahlung von denen ohne ergibt den Photostrom, der aus der



Abb. 36: Dunkelstrommessungen mit 300K Hintergrundstrahlung

300K Hintergrundstrahlung resultiert. Dieser ist für die beiden Kontakte BD und BF in Abb. 38 für 5K gezeigt (bezüglich der Kontakte siehe weiter oben) und für ein paar weitere Temperaturen am Kontakt BD in Abb. 39.

Für größre Spannungen, das heiß in etwa |U| > 1V, spielt beim Dunkelstrom die 300K Hintergrundstrahlung nur mehr eine untergeordnete Rolle, und das Ergebnis der Subtraktion spiegelt alle möglichen Schwankungen wider (vgl. Abb. 39). Der relevante Bereich für den 300K Hintergrund Photostrom liegt also bei vergleichsweise niedrigen Spannungen. Anzumerken ist, daßdieser Photostrom in den Bereichen, wo er den Dunkelstrom dominiert, (klarerweise) unabhängig von der Temperatur ist (vgl. Abb. 39).



Abb. 37: Dunkelstromkurven des Detektors R528D(BD) für T=10K und T=60K (DS steht für Dunkelstrommessung mit abgeschirmtem 300K-Hintergrund, DS + HG für Dunkelstrommessung bei zugelassenem Hintergrund)



Abb. 38: Vom 300K Hintergrund erzeugter Photostrom; Vergleich der Kontakte BD und BF.



Abb. 39: 300K Hintergrund Photostrom am Detektormesa R528D (BD)

5.3.4 Frequenzabhängige Photostrommessungen

Ein typisches Beispiel einer Photostrommessung an der Probe R528D ist in Abb. 40 gegeben. Die s-Polarisation produziert klar einen stärkeren Signalstrom als die p-Polarisation. Die Absorption von s-polarisierter Strahlung sollte aber nach den gemachten Berechnungen deutlich schwächer sein als jene von p-polarisierter Strahlung. Wie bereits auf S 63 erwähnt, kann Absorption und Photostrom nicht einfach gleichgesetzt werden. Für den Photostrom spielen noch weitere Prozeß wie Leitfähigkeit eine groß Rolle. Außrdem ist die Strahlung des glowbar nach Passieren der gesamten Optik des Fourierspektrometers stärker in s- als in p-Polarisation vertreten.

Für ein paar positive Spannungswerte sind die frequenzaufgelösten Photostromkurven für s-polarisierte Strahlung in Abb. 41 dargestellt. Bei Änderung der angelegten Spannung zeigt sich kaum eine Änderung der Peakform.

Ein interessanter Effekt ist in Abb. 42 wiedergegeben. Mehrere Messungen des frequenzabhängigen Photostromes für p-polarisierte Strahlung mit der angelegten Spannung als Parameter sind darin, mit Maximum auf 1 normiert, aufgetragen. Der größre Teil jedes Peaks kommt vom in-plane Anteil der in die waveguide Geometrie eingestrahlten p-polarisierten Strahlung. An der linken Flanke der Peaks bildet sich jedoch mit steigender angelegter Gleichspannung eine Schulter heraus.


Abb. 40: Typische Photostrommessung an der Probe R528D bei einer Temperatur von 10K. U_B beschreibt die angelegte Gleichspannung (hier $U_B = +1.0 V$).



Abb. 41: Frequenzabhängige Photostromkurven des Detektormesa R528D(BD) für s-polarisierte Strahlung bei T=10K und unterschiedlichen angelegten Gleichspannungen U_B

Diese liegt bei etwa $1500 \, cm^{-1}$ und ist wohl auf den Übergang $HH1 \rightarrow HH2$ zurückzuführen. Wie bereits oben bei den Berechnungen zur Struktur erwähnt, ist bei nicht angelegter Spannung der Zustand HH2 gerade noch im Topf gebunden. Ein leichtes Verkippen der Bandstruktur durch eine angelegte Spannung ermöglicht hier offensichtlich den Löchern, daßtie leichter über die Barriere gelangen und zum Strom beitragen können. Das ist ein starkes Indiz dafür, daßder Zustand HH2tatsächlich bei nicht angelegter Spannung noch schwach im Topf gebunden ist, in guter Übereinstimmung mit der Rechnung (vgl. Abb. 23, S 56), und bei steigender Spannung immer weniger von der verbliebenen Barrierenhöhe spürt.



Abb. 42: Zusammenfassung sämtlicher Photostrommessungen bei p-polarisierter Strahlung.

5.4 Messungen zu R531D

5.4.1 Probengeometrien und Bezeichnungen

Für alle Messungen wurden wieder Proben mit geschliffener waveguide Geometrie verwendet

- * bei Transmissionsmessungen ohne Strukturierung der gewachsenen Schichten
- * bei Dunkel- und Photostrommessungen mit der in Abb. 43 dargestellten schematischen Strukturierung und den dort gezeigten Bezeichnungen der Detektormesas (Anmerkung: am Probenhalter standen insgesamt nur 6 Drähte zur Verfügung. So konnten nicht alle Detektormesas zugleich kontaktiert werden.)



Abb. 43: Schematische Detektorstruktur und Bezeichnung der Detektormesas für die Probe R531D

5.4.2 Transmissionmessungen

Diese waren nicht allzu aussagekräftig. Der Mechanismus der freien Ladungsträgerabsorption dürfte, wie auch bei der Probe R528D (vgl. S 65), zu dominant gewesen sein (vgl. [Zan95]).

5.4.3 Dunkelstrommessungen

Zum Vergleich der kontaktierten Detektormesas wurde an allen zumindest einmal der Dunkelstrom gemessen. Eine Reihe solcher Messungen ist in Abb. 44 wiedergegeben, die 300K Hintergrundstrahlung wurde abgeschirmt. Zum besseren Vergleich der unterschiedlich großn Detektormesas sind die Meßurven auf die jeweilige Detektorfläche normiert worden. Auf der vertikalen Achse ist daher die Stromdichte aufgetragen.



Abb. 44: Dunkelstrommessungen mit abgeschirmter 300K Hintergrundstrahlung; Vergleich der kontaktierten Detektormesas

Aus Abb. 44 ist ersichtlich, daßdie Kontakte CD und CF die niedrigsten Dunkelstromdichten haben. Bei den Kontakten CA und CB treiben offensichtlich Leckströme den Dunkelstrom wieder nach oben. Zum weiteren Vergleich der Kontakte CD und CF werden die Photostromdichten des 300K Hintergrundes in Abb. 48 zusammengefaß (Abb. 48 ist analog zu Abb. 49 weiter unten und wird daher dort gebracht.). Wie bei der Probe R528D sind auch hier zwei Kontakte einigermaßn gleichwertig, jeweils eine $200 \,\mu m$ und eine $100 \,\mu m$, also eine mittlerer und eine kleiner Detektormesa. Ihre Dunkelströme sind sehr niedrig, noch niedriger als bei den guten Kontakten der Probe R528D. Für weitere Messungen wurde ein Kontakt mit niedrigem Dunkelström gewählt, hier der Kontakt CD. Wie beim weiter ver-

wendeten Kontakt der Probe R528D handelt es sich dabei um einen Detektormesa der Größ $200 \times 200 \,\mu m$.

Temperaturabhängige Dunkelstrommessungen mit abgeschirmter 300K Hintergrundstrahlung sind in Abb. 45 gezeigt. Ein Vergleich mit Abb. 35 zeigt, daßtiese Probe, also die R531D, wesentlich bessere, d.h. niedrigere, Dunkelströme aufweist, als die R528D. Wie aus der Tabelle in Abb. 21 ersichtlich ist, hat die R531D aber auch die dickeren Barrieren und damit auch die geringere Tunnelwahrscheinlichkeit durch die Barrieren hindurch, was offensichtlich den Unterschied in den Dunkelströmen ausmacht.



Abb. 45: Dunkelstrommessungen an R531D (CD) in Abhängigkeit von der Temperatur; die 300K Hintergrundstrahlung ist abgeschirmt.

Dunkelstrommessungen an R531D (CD) ohne Abschirmung der 300K Hintergrundstrahlung sind für ein paar ausgewählte Temperaturen in Abb. 46 wiedergegeben. Um ihren Zusammenhang mit den abgeschirmten Dunkelstromkurven in Abb. 45 zu verdeutlichen, sind sie zusammen mit den Kurven aus dieser Abbildung bei den entsprechenden Temperaturen in Abb. 47 aufgetragen. Ein Vergleich mit den entsprechenden Kurven von der Probe R528D (vgl. Abb. 37, S 69) zeigt die wesentlich bessere Qualität des Detektors R531D.

Subtraktion des Dunkelstromes mit 300K Hintergrund von dem ohne ergibt wieder den 300K Hintergrund Photostrom. Dieser ist für die Kontakte CD und CF bei



Abb. 46: Dunkelstrommessungen an R531D(CD) mit 300K Hintergrundstrahlung



Abb. 47: Vergleich der Dunkelstromkurven mit und ohne Hintergrundstrahlung für den Detektormesa R531D(CD) (DS steht für Dunkelstrom, HG für Hintergrund)



Abb. 48: 300K Hintergrund Photostrom an R531D; Vergleich der beiden Mesas CD und CF



Abb. 49: Photostrom der 300K Hintergrundstrahlung bei dem Detektormesa R531D(CD)

T=10K in Abb. 48 gezeigt (bzgl. Kontakte siehe weiter oben); die Ergebnisse am Kontakt CD für die gleichen Temperaturen wie bei den Messungen zu den Abbildungen 46 und 47 sind in Abb. 49 wiedergegeben. Analog zum Detektormesa R528D(BD) sind die Photostromdaten des 300K Hintergrundes nur in dem Bereich brauchbar, in dem diese den Dunkelstrom dominieren. Das ist hier bei den niedrigen Temperaturen bei Spannungen U_B bis 1 oder 2V der Fall. Darüber werden die Schwankungen aller nicht wirklich konstant gehaltener Größn widergespiegelt, hier speziell jene der Temperatur, und das berechnete Photostromsignal ist unbrauchbar.

5.4.4 Frequenzabhängige Photostrommessungen

Für positive Spannungen sind die Ergebnisse der frequenzabhängigen Photostrommessungen in Abb. 50 wiedergegeben. Die Spannungsabhängigkeit ist ähnlich zur Probe R528D; insbesondere bekommt man für die p-Polarisation ebenfalls Spektren mit einer anwachsenden Schulter bei steigender Spannung analog zu Abb. 42. Diese sind hier aber nicht mehr abgebildet.



Abb. 50: Frequenzabhängige Photostrommessungen an R531D bei T=10K und senkrechtem Einfall der Strahlung auf die Detektorfläche (ni \equiv normal incidence).

Die Frequenzabhängigkeit der eingestrahlte Intensität war geprägt von der Abstrahlcharakteristik des glowbar und der Absorptionskoeffizienten der Optik des Fourierspektrometers. Der Einbruch der Kurven in Abb. 50 im Bereich von $3000 \, cm^{-1}$ bis $3500 \, cm^{-1}$ ist beispielsweise auf Absorption an den ZnSe-Kryostatfenstern zurückzuführen, hat also nichts mit der Detektorprobe zu tun. Genausowenig hat die Probe bei etwa $3600 \, cm^{-1}$ einen Absorptionspeak. Das Herausrechnen der Absorption der ZnSe Kryostatfenster gestaltete sich aber schwieriger als vorerst vermutet. Das Referenzspektrum wurde mit dem fourierspektrometereigenen MCT Detektor gemessen. Zwischen diesem Detektor und der Probe war aber noch neben dem zweiten Paar an Kryostatfenstern noch weitere Optik, sprich Umlenkspiegel und dergleichen, deren optische Eigenschaften nicht bekannt waren. Die gemessenen frequenzabhängigen Photostromkurven wurden daher als solche belassen. Näherungsweise wurden sie später bei weiteren Berechnungen bis auf einen noch zu bestimmenden Faktor als Kurven für die Responsivität verwendet.

5.5 Weitere abgeleitete Meßaten zu R528D und R531D

5.5.1 Aktivierungsenergie

Ableitung eines Ausdrucks zur Bestimmung der Aktivierungsenergie

Zu den beiden Detektormesas R528D(BD) und R531D(CD) wurden eine Reihe von Dunkelstrommessungen, also U-I Charakteristiken, zu unterschiedlichen Temperaturen durchgeführt. In dem Bereich, in dem der Dunkelstrom von den thermisch generierten Löchern dominiert wird, läßsich aus diesen Daten eine Anregungs- oder Aktivierungsenergie aus dem Topf berechnen. Die folgende Ableitung ist analog zu [Levine93].

Die Anzahl der Ladungsträger, die zum Dunkelstrom beitragen, läß sich mit einer der Einfachheit halber homogenen effektiven Masse m^* allgemein schreiben als

$$n^*(U) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2 D} \cdot \int_{-\infty}^{E_1} dE \cdot f(E) \cdot T(E, U)$$
(28)

(Man beachte, daßhier ständig nur vom Valenzband die Rede ist!). U steht für die

angelegte Gleichspannung, D die Übergitterperiode, E_1 die Energie des Grundzustandes, f(E) für die Besetzungswahrscheinlichkeit eines Zustandes bei der Energie E, hier die Fermiverteilung, T(E, U) für die Transmissionswahrscheinlichkeit an 1 Barriere für ein Elektron im Zustand bei Energie E. Diese Größ ist klarerweise von der angelegten Spannung U abhängig. Der Faktor vor dem Integral steht für die 2-dimensionale Zustandsdichte pro Fläche, dividiert durch die Übergitterperiode D. Dadurch wird aus n^* einer über die Periode D gemittelten 3-dimensionalen Ladungsträgerdichte, was auch so sein soll. Die untere Integralgrenze ist insofern gerechtfertigt, als die Temperatur niedrig angenommen wurde und daher die Fermiverteilung f(E) genügend rasch im Valenzband abfällt.

Für f(E) gilt also die Fermiverteilung für Löcher

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E_F - E}{kT}}}$$
(29)

(E_F ist die Fermienergie, k die Boltzmann Konstante, T die Temperatur der Probe). Im Ausdruck für T(E, U) können praktisch alle relevanten Mechanismen, die einen Dunkelstrom liefern, verpackt werden, wie z.B. Tunnelstrom, thermische Emission und sogar elektromagnetische Anregung. Hier beschränkt man sich allerdings auf den Fall der thermischen Emission. Für T(E, U) wird dabei der für eine Rechnung überaus praktische und einfache Ansatz

$$T(E,U) = 0 \ f \ddot{u}r \ E > E_B$$

= 1 f \ddot{u}r \ E < E_B (30)

gemacht. E_B steht dabei für die Energie an der Barrierenkante. Wie man sieht, wurde die Spannungsabhängigkeit vernachlässigt. Das Ergebnis dieser Ableitung kann daher nur für kleine Spannungen gültig sein. Mit den Gleichungen (29) und (30) wird somit aus (28)

$$n^* = \frac{m^*}{\pi\hbar^2 D} \cdot \int_{-\infty}^{E_B} dE \cdot \frac{1}{1 + e^{\frac{E_F - E}{kT}}} \cdot 1 \simeq \frac{m^*}{\pi\hbar^2 D} \cdot \int_{-\infty}^{E_B} dE \cdot \frac{1}{e^{\frac{E_F - E}{kT}}} = \frac{m^*}{\pi\hbar^2 D} \cdot kT \ e^{-\frac{E_F - E_B}{kT}}$$

Dabei wurde die Näherung gemacht, daßdie Fermienergie verglichen mit kT genügend weit in der Barriere liegt.

Die effektive Ladungsträgerkonzentration n^* geht unmittelbar in die Leitfähigkeit ein. Für den Dunkelstrom kann daher mithilfe der letzten Gleichung folgende Proportionalität aufgestellt werden (I_{DS} steht für den Dunkelstrom)

$$\frac{I_{DS}}{T} \propto e^{-\frac{E_F - E_B}{kT}} \tag{31}$$

In einem Plot, in dem $lg(I_{DC}/T)$ über 1/T aufgetragen ist, kann dann unmittelbar aus der Steigung der resultierenden Fit-Gerade die Anregungsenergie $E_F - E_B$ bestimmt werden.

Aktivierungsenergie für R528D und R531D

Die gemessenen Dunkelstromkurven bei abgeschirmter 300K Hintergrundstrahlung sind entsprechend Gl.(31) für die Detektoren R528D (BD) und R531D (CD) in den Abbildungen 52 und 53 aufgetragen. Wie bereits oben erwähnt, mußbei einer Verwendung von Gl.(31) aber ein Parameterbereich verwendet werden, der von thermischer Emission dominiert wird, das heißalso, die Temperatur sollte nicht zu niedrig sein. In Abb. 51 sind deutlich 2 unterschiedliche Temperaturbereiche erkennbar: Für hohe Temperaturen, für kleine 1/T Werte also, zeigen alle Kurven eine vergleichbares, konstantes Gefälle. Bei Werten von 1000/T > 12.5, das entspricht Temperaturen T < 80K, gehen die Kurven in nahezu waagrechte Geraden über. Das heiß daßter Dunkelstrom mit kleiner werdender Temperatur weiter sinkt, aber verglichen mit Werten bei Temperaturen T > 80K wesentlich langsamer. Der dominierende physikalische Mechanismus für den Dunkelstrom hat gewechselt, offensichtlich von thermischer Emission zu Tunneln.



Abb. 51: Auftragung der Dunkelstromdaten entsprechend dem Ausdruck zur Berechnung der Aktivierungsenergie für den Detektor R528D (BD) über den gesamten gemessenen Temperaturbereich.

Für das Auswerten von Gl.(31) wird also in etwa der Bereich T > 80K, oder äquivalent 1000/T < 12.5, gewählt. Die exponentiellen Fit-Funktionen, im logarithmischen Plot Geraden, wurden berechnet und in den Abbildungen 52 und 53 strichliert eingezeichnet. Die entsprechenden Fitdaten sind in der Tabelle in Abb. 54 zusammengefaß



Abb. 52: Diese Abbildung ist bis auf den geänderten Temperaturbereich ident zur letzten Abbildung. Die strichlierten Linien zeigen den exponentiellen Fit und gleichzeitig auch den Temperaturbereich, in dem gefittet wurde. Die Parameter der gefitteten Exponentialfunktionen sind in der Tabelle in der übernächsten Abbildung zu finden.

Bei der Herleitung von Gl.(31) wurde der Einflußder angelegten Spannung U vernachlässigt. Daher kann sie, wie bereits erwähnt, nur für kleine U gelten. In der Tabelle von Abb. 54 sind so nur die Werte bei der Spannung |U| = 0.5V tatsächlich für eine Aktivierungsenergie verwendbar. Für höhere Spannungen läß sich aber qualitativ sagen, daßdie Aktivierungsenergie abnimmt und damit die Effektivität der Barriere. Die Tunnelwahrscheinlichkeit durch die Barriere der verkippte Potentialstruktur wird größr und damit die effektive Barrierenhöhe niedriger.

Ein Vergleich der Daten für die Aktivierungsenergie mit der Potentialstruktur und den eingezeichneten Energieniveaus in Abb. 23 auf S 56 bringt auch eine ganz gute Übereinstimmung. Für eine Spannung von U = 0V hat man dort eine Barrierenhöhe, gemessen relativ zur Fermienergie, von etwa $180 \, meV$. Für die Probe R528D scheint nach der Tabelle in Abb. 54 die Barriere etwas niedriger zu sein,



Abb. 53: Auftragung der Dunkelstromdaten entsprechend dem Ausdruck zur Berechnung der Aktivierungsenergie für den Detektor R531D (CD) über den höheren Temperaturbereich. Die Parameter der gefitteten Kurven sind in der folgenden Tabelle aufgelistet.

Y = M0 * exp(M1 *	$1E6*k_B/e =$	86,174				
R528D(BD)	U=-2V	U=-1V	U=-0,5V	U=+0,5V	U=+1V	U=+2V
M0	0,002	0,015	0,043	0,080	0,018	0,003
M1	-0,809	-1,235	-1,515	-1,690	-1,375	-0,977
R	0,999	0,999	1,000	1,000	0,999	0,998
$\Delta E = E_F - E_B [meV]$	70	106	131	146	118	84
	•					
R531D(CD)	U=-2V	U=-1V	U=-0,5V	U=+0,5V	U=+1V	U=+2V
M0		0,155	0,294	0,707	0,479	0,157
M1		-1,562	-1,754	-1,956	-1,822	-1,548
R		0,998	0,997	1,000	1,000	1,000
$\Delta E = E_F - E_B [meV]$		135	151	169	157	133

Abb. 54: Tabelle mit den Ergebnissen der exponentiellen Fit-Funktionen, berechnet zu den Daten in der vorletzten und in der letzten Abbildung für die Detektoren R528D(BD) R531D(CD). Die rechts oben angegebene Konstante entspricht der Proportionalitätskonstante zwischen der Steigung der Ausgleichsgerade in der exponentiellen Darstellung und dem Wert für die Aktivierungsenergie. sodaßich für diese Probe auch ein geringerer Ge-Gehalt vermuten läß(vgl. Kap.3 über Probenräparation, S 31).

Ebenso ist aus der Tabelle in Abb. 54 ersichtlich, daßdie Aktivierungsenergien nicht symmetrisch bezüglich dem Vorzeichen der angelegten Spannungen sind. Wie bereits weiter oben bei der Präsentation der Meßaten angemerkt wurde (vgl. S 67), ist nämlich beim Aufwachsen, beim Präparieren der Schichtstruktur keine exakte Symmetrie erreichbar. Dies spiegelt sich auch in den hier berechneten Daten wider.

Vergleich der Aktivierungsenergien mit Photostrommessungen

Die Meßurven zur frequenzabhängigen Photostrommessung wiesen im allgemeinen einen markanten Peak auf. Für s- und p-polarisierte Strahlung sind für die Probenstruktur R528D, R531D nach den Berechnungen am Anfang dieses Kapitels die Übergänge mit niedrigster Energie, die zu einem Stromflußüber die Barriere beitragen, die Übergänge $HH1 \rightarrow HH2$ und $HH1 \rightarrow LH2$ Nach Abb. 23 (S 56) liegen HH1 und LH2 nahe beieinander und in etwa an der Barrierenkante. Das Einsetzen der Peaks der Photostrommessungen bei niedrigen Wellenzahlen kann daher zur groben Berechnung der Aktivierungsenergie herangezogen werden. Das wurde bei den beiden Proben R528D und R531D auch gemacht.

Beim Detektormesa R528D(BD) bieten sich die Meßurven in Abb. 42 (S 72) an. Wie aus dieser Abbildung zu ersehen ist, setzt merklicher response bei etwa $1300 \, cm^{-1}$ ein, was einer Aktivierungsenergie von rund 160 meV entspricht, in grober Übereinstimmung mit obigem Wert von etwa 146 meV (vgl. Tabelle in Abb. 54). Aus Abb. 42 ist weiters ersichtlich, daßmit steigender Spannung der Photostrompeak bereits bei kleineren Wellenzahlen einsetzt und damit die Aktivierungsenergie sinkt, eine Tendenz, wie sie ebenfalls aus der Tabelle in Abb. 54 ersichtlich ist.

Beim Detektormesa R531D(CD) steht Abb. 50 (S 78) zur Verfügung. Diese Photostromkurven sind bei senkrechtem Einfall und daher bei s-polarisierter Strahlung gemessen. Bei $U_B = 0.5V$ setzt merklicher Response bei etwa 1500 $cm^{-1} \simeq 186 \, meV$ ein und sinkt wieder kontinuierlich mit steigender Spannung. Dieser Wert liegt ebenfalls wieder etwas oberhalb dem weiter oben bestimmten Wert für die Austrittsenergie von etwa 170 meV, stimmt aber für diese über den Daumen gepeilte Rechnung ganz gut.

5.5.2 Responsivität

Ableitung des verwendeten Ausdrucks zur Berechnung der Responsivität

Eine Einführung der Responsivität ist im Kapitel über Photodetektoren, Kapitel 2 (Seite 24ff), zu finden. Die folgende Ableitung ist aus [Levine93] entnommen.

Ein plausibler Ausdruck für den Photostrom ist gegeben durch

$$I_{PS} = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda \ R(\lambda) \ P_S(\lambda)$$
(32)

 I_{PS} steht für den Photostrom, $R(\lambda)$ für die Responsivität im Wellenlängenbereich um λ , $P_S(\lambda) d\lambda$ für die eingestrahlte Intensität im Bereich $[\lambda, \lambda + d\lambda]$. λ_1 und λ_2 sind die Grenzen, innerhalb derer der Photodetektor arbeitet. Die Grenzen können sowohl durch die Empfindlichkeit des Detektors selbst gesetzt sein, als auch durch die verwendete Optik.

Für die Responsivität des Detektors $R(\lambda)$ wurde näherungsweise die Meßurve von der frequenzabhängigen Photostrommessung bis auf einen vorerst unbekannten multiplikativen Faktor verwendet. Diese enthält zwar noch den Frequenzgang des glowbar und der Optik, das wurde aber mangels geeigneter Information vernachlässigt. Für $R(\lambda)$ wurde

$$R(\lambda) \equiv R_p^0 \cdot R_{norm}(\lambda) \tag{33}$$

angesetzt. R_{norm} entspricht der mit Peak auf 1 normierten Photostrommeßurve. R_p^0 bleibt zu berechnen.

Die Dunkelstrommessungen wurden sowohl mit, als auch ohne der 300K Hintergrundstrahlung durchgeführt. Daraus wurde mittels Subtraktion der durch die Raumtemperatur-Strahlung induzierte Photostrom $I_{PS,RT}$ ermittelt. Diese Raumtemperaturstrahlung entspricht der klar definierten Schwarzkörperstrahlung. Deren Intensitätsverteilung ist gegeben durch

$$W(\lambda) = \frac{2\pi h c^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$$
(34)

h ist das Plancksche Wirkungsquantum, *c* die Lichtgeschwindigkeit, ω ist gleich $2\pi c/\lambda$, *k* ist die Boltzmann Konstante, *T* die Temperatur (eine Ableitung ist beispielsweise in [Schwabl93, S 3f] oder in [Kittel91] zu finden).

Da die hier untersuchten IR Detektoren mit LHe gekühlt wurden, waren sie auch in einem entsprechenden Kryostaten eingebaut (nähere Informationen zum Kryostaten im Kapitel 4, S 43f). Durch die Kryostatfenster war aber erstens die eingestrahlte Photointensität durch Reflexion modifiziert und zweitens das Sichtfeld der Probe eingeschränkt. Der Ausdruck für $P_S(\lambda)$ kann so für ein kreisförmiges Sichtfenster und für eine im Winkel homogen verteilte Strahlung, hier die Hintergrundstrahlung, umgeschrieben in (vgl. [Levine93])

$$P_S(\lambda) = W(\lambda) \cdot \sin^2(\frac{\Omega}{2}) \cdot C_F \cdot A\cos(\vartheta) \equiv W(\lambda) \cdot G \cdot A$$
(35)

 $W(\lambda)$ ist die spektrale Intensitätsverteilung der Hintergrundstrahlung außrhalb des Kryostaten, Ω der Öffnungswinkel entsprechend der Anordnung Probe-Sichtfenster, ϑ der Einstrahlungswinkel auf die Probe, A die Fläche der Probe. Die Geometrie ist der Klarheit halber in Abb. 55 skizziert. Mit dem Faktor C_F werden die Reflexion und Transmission der beiden Kryostatfenster berücksichtigt. Er wird aus den Brechungsindizes der jeweiligen Fenster berechnet und näherungsweise als Konstante über den verwendeten Frequenzbereich angenommen. C_F wurde unter Verwendung der Brechnungsindizes für die Kryostatfenster auf 0.455 berechnet. Mit G wurden per definitionem die geometrieabhängigen Faktoren zusammengefaß



Abb. 55: Schematische Darstellung des Kryostaten mit Winkelbezeichnungen

Der Photostrom der 300K Hintergrundstrahlung läß sich mit Gl.(32), (33) und

Gl.(35) nun folgendermaßn anschreiben (RT = Raumtemperatur = 300K)

$$I_{PS,RT} = R_p^0 \cdot G A \cdot \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda \ R_{norm}(\lambda) W(\lambda)$$
(36)

Darin ist alles bis auf den Faktor R_p^0 bekannt. Gl.(36) dient damit als Bestimmungsgleichung für R_p^0 .

Responsivität der Detektoren R528D(BD) und R531D(CD)

Zum Berechnen von R_p^0 aus Gl.(36) wurde im Rahmen dieser Arbeit eine MatLab-Routine geschrieben. Mit den für Gl.(36) benötigten gemessenen und berechneten Daten wurde damit R_p^0 in Abhängigkeit der angelegten Spannung für R528D(BD) und R531D(CD) berechnet. Die Ergebnisse sind in Abb. 56 aufgetragen. Werte von 40 mA pro W eingestrahlter Leistung sind durchaus erreichbar (zum Vergleich: der theoretische Höchstwert für die Responsivität liegt bei 8.1 A/W (vgl. S 25). Die Tatsache, daßnicht alle eingestrahlten Photonen absorbiert werden und angeregte Löcher noch im gleichen Topf oder in den weiteren Töpfen rekombinieren können, mindert den Photostrom).



Abb. 56: Berechnete Peak-Responsivität R_p^0 für die Detektoren R528D(BD) und R531D(CD).

5.5.3 Detektivität

Veröffentlichte Messungen und Auswertungen von Übergitterphotodetektoren sind in [People92] für Si/SiGe und in [Levine93] für GaAs/AlGaAs¹¹ zu finden.

Eine Einführung der Detektivität findet sich im Kapitel 2. Für ihre Berechnung wurde hier der Ausdruck für einen durch Dunkelstrom begrenzten Detektor verwendet, da sich die Hintergrundstrahlung ja abschirmen läß und das Rauschen des Signalstromes kann vernachlässigt werden, zumindest für kleine Signale. Genauere Information dazu siehe Seite 27, Gl. (18). Die von der Spannung U abhängige Detetektivität D^* wurde also folgendermaßn berechnet:

$$D^{*}(U) = R_{p}^{0}(U) \frac{\sqrt{A}\sqrt{B}}{\sqrt{(i_{R,DS})^{2}}}$$
(37)

wobei

$$(i_{R,DS})^2 = 4 e g_R \cdot I_{DS}(U) \cdot B \tag{38}$$

(A steht für die Detektorfläche, B für die Frequenzbandbreite der angeschlossenen Elektronik(!!!) (zur Auswertung wurde B = 1Hz verwendet), $(i_{R,DS})^2$ steht für das mittlere Rauschquadrat des Dunkelstromes, e für die Elementarladung, g_R für den Rauschverstärkungsfaktor)

Man beachte in Gl. (37), daßzum Unterschied von Gl. (18) auf Seite 27 die Peakresponsivität R_p^0 verwendet wurde. Das berechnete D^* gilt daher nur für den Wellenzahlenbereich, in dem der Detektor seine maximale Responsivität aufweist, hier also bei etwa 1500 cm⁻¹, was einer Wellenlänge von 6.7 μm entspricht.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde keine explizite Messung des Rauschstromes durchgeführt, er wurde vielmehr mittels Gl. (38) abgeschätzt. Der konstante Faktor g_R wurde mit 0.3 angenommen. Dieser Wert wurde dem Artikel [People92] entnommen. Darin sind ebenfalls Si/SiGe Multiquantumwell Detektoren behandelt. Ein ähnlicher Wert für g_R wurde von Levine in [Levine93] für AlGaAs/GaAs Detektoren veröffentlicht. In diesem Paper wurde unter anderem eine explizite Messung

¹¹ Man beachte, daß sich zum Unterschied zu Si/SiGe Strukturen bei AlGaAs/GaAs die Übergitterstruktur hauptsächlich im Leitungsband ausgenützt wird, ist damit seitliches Einkoppeln der Strahlung über waveguide Geometrie oder Gitterkoppler (= grating) notwendig. Denn für eine Übergitterstruktur im Leitungsband, wie bei AlGaAs/GaAs Multiquantumwells der Fall, reicht bei störungstheoretischer Behandlung das Verwenden von bloßeinem Band, eben dem Leitungsband, und in diesem Fall sind die Übergangsmatrixelemente bei zugeführter s-polarisierter Strahlung, bei Polarisation in der Schichtebene also, ident null. Andererseits gibt es auch p-typ AlGaAs/GaAs Detektoren. Diese nützen die Übergitterstruktur in den teilweise entarteten Valenzbändern, haben damit einen response bei senkrechter Einstrahlung auf die Schichtebenen, haben aber auch eine geringere Detektivität.

des Rauschstromes an IR-Multiquantumwell-Photodetektoren präsentiert. Dabei ist auch eine spannungsabhängige Berechnung des Rauschstromverstärkungsfaktors g_R durchgeführt worden. Ein Wert von $g_R \simeq 0.3$ bildet dabei eine Abschätzung nach oben. Mit dieser Wahl ist daher der Rauschstrom eher großangesetzt und damit die Detektivität nicht als allzu hoch abgeschätzt.

Die Ergebnisse für die mit Gl.(37) und Gl.(38) berechnete Peak-Detektivität sind in den Abbildungen 57 und 58 dargestellt. Für die Frequenbandbreite wurde dabei B = 1Hz gewählt; für den Dunkelstrom wurden jene Dunkelstrommeßurven verwendet, die bei T = 5K und bei T = 77K unter Abschirmung der 300K-Hintergrundstrahlung gemessen wurden. Die Temperatur von T=77K ist insofern interessant, als sie durch bloß Kühlung mit flüssigem Stickstoff erreichbar ist. Die Zacken nach oben, die in den Abbildungen 57 und 58 insbesondere bei T = 5K zu beobachten sind, stellen Artefakte dar, die sich daraus erklären, daßdie verwendeten Dunkelstromkurven bei kleinen Spannungen sehr niedrige Werte aufwiesen und daher an der Grenze der Meßarkeit des verwendeten U-I-Meßerätes lagen. Durchdividieren dieser kleinen Stromwerte bringt dann jede Ungenauigkeit, jedes Schwanken zum Vorschein.

Für die Temperatur von T=77K sind nach den Abbildungen 57 und 58 bei kleinen Spannungen (|U| < 1V) für die Detektivität Werte von über $10^{10} \ cm\sqrt{Hz}/W$ erreichbar, was durchaus mit bereits veröffentlichten Werten vergleichbar ist. Man vergleiche [People92], hier wurden Werte um $D^* \simeq 4 \cdot 10^9 \ cm\sqrt{Hz}/W$ (Si/SiGe, T=77K, $\lambda \simeq 10 \mu m$) angegeben, oder [Levine93] mit Werten für die Detektivität um $D^* \simeq 10^{10} \ cm\sqrt{Hz}/W$ (AlGaAs/GaAs (!)¹², senkrechter Einfall über Gitterkoppler, T=77K, $\lambda \simeq 10 \mu m$). In [Levine91] wurden für p-typ AlGaAs/GaAs Strukturen¹² ebenfalls vergleichbare Werte zu den hier untersuchten IR Detektoren angegeben.

 $^{^{12}}$ Für n-typ GaAs/AlGaAs Übergitterstrukturen werden in der Regel höhere Detektivitäten als für Si/SiGe erreicht, nur mit dem großen Nachteil, daßbei diesen Strukturen seitliches Einkoppeln notwendig ist. Für p-typ GaAs/AlGaAs sind typische Werte für die Detektivität niedriger. (vgl. Fußote 11 auf S 88).



Abb. 57: Berechnete Peak-Detektivität des Mesas R528D(BD) in Abhängigkeit der angelegten Spannung. Für die zur Berechnung benötigte Dunkelstromkurve wurden jene bei T=5K und bei T=77K genommen.



Abb. 58: Berechnete Peak-Detektivität des Detektors R531D(CD) in Abhängigkeit der angelegten Spannung. Für die zur Berechnung benötigte Dunkelstromkurve wurden jene bei T=5K und bei T=77K genommen.

5.6 Auswertung zu R632A und R633A

Die Proben R632A und R633A bestehen beide aus 10 asymmetrischen Quantentöpfen (vgl. Tabelle in Abb. 21, S 53). Sie waren für Messungen zur SHG (= second harmonic generation), also für Messungen der Frequenzverdoppelung gedacht. Die Asymmetrie im Übergitterpotential ist dafür von existenzieller Bedeutung. Diese ermöglicht, daßdie elektrische Suszeptibilität für groß elektrische Felder, im nichtlinearen Fall also, auch einen nicht-verschwindenden Entwicklungsterm $\chi^{(2)}$ enthält

$$P \simeq \chi^{(1)} E + \chi^{(2)} E^2$$

(P beschreibt die Polarisation, $\chi^{(n)}$ den jeweiligen Entwicklungskoeffizienten für das elektrische Feld E zur n-ten Potenz). Für ein inversionssymmetrisches Potential müße das $\chi^{(2)}$ rein aus Symmetrieüberlegungen gleich null sein und damit verschwinden.

Bei einem $\chi^{(2)}$ ungleich null entstehen für groß *E* mit einer Frequenz ω über die Polarisation *P* neue elektrische Felder mit den Frequenzen 0 und 2ω , wie auch aus dem Lösen der Maxwell-Gleichungen mit obigem Ansatz für die Polarisation folgt.

Durch den weiteren Parameter der Asymmetrie in der Übergitterstruktur, an dem nun gedreht werden kann, variieren die Energieniveaus der Eigenlösungen relativ zueinander etwas. So kann man erreichen, daßbeispielsweise drei heavy hole artige Zustände zueinander energetisch äquidistant sind, hier HH1, HH2 und $HH4^{13}$. Zwischen diesen Zuständen ist hauptsächlich Anregung aus dem Grundzustand HH1durch Absorption von p-polarisierter elektromagnetischer Strahlung erlaubt, bzw. möglich. Diese Äquidistanz in der Energie ist für Messungen der 2.Harmonischen, also für Messungen der Fähigkeit einer Probe zur Frequenzverdoppelung, zwar nicht unbedingt notwendig, verstärkt aber den Effekt aufgrund der resonanten Übergänge.

Die Strukturdaten der Probe R632A und R633A wurden so gewählt, daßter Übergang $HH1 \rightarrow HH2$ etwa bei $10\mu m$ zu liegen kam, der Wellenlänge eines CO_2 -Lasers (die genauen Werte sind in der Tabelle in Abb. 21 (S 53) zu finden). Nach den nominellen Daten besitzen beide die gleiche Schichtstruktur bis auf den feinen Unterschied, daßtie asymmetrischen Quantentöpfe genau spiegelverkehrt (in Wachstumsrichtung) aufgewachsen sind. Damit erhält man durch Aufeinanderlegen der beiden Proben, die Schichtstruktur dabei zueinander gewandt, eine Fortsetzung(!) der asymmetrischen Potentialstruktur, was bei der Messung der Frequenzverdoppelung ausgenützt werden sollte.

 $^{^{13}}$ Der Zustand *HH*3 liegt haupsächlich in der Barriere(!) (vgl. dazu die Abbildung der Eigenzustände weiter unten), während *HH*4 wieder stärker im Topf vertreten ist.

5.6.1 Bandstukturrechnung zu R632A

Zur Probe R632A wurden Rechnungen analog zu weiter oben für die Struktur der Probe R531D durchgeführt. Da die Probe R633A nominell nur spiegelverkehrte Potentialstruktur aufweist, sonst aber gleich zur R632A ist, gilt die Rechnung analog. Die berechneten Eigenenergien und die dazugehörigen Wellenfunktionen sind für die niedrigsten Niveaus in Abb. 59 und für einige höhere in Abb. 60 dargestellt. Aufgrund der Asymmetrie der Potentialtöpfe sind hier die Lösungen der Schrödingergleichung nicht mehr 2-fach entartet, sie spalten auf, wenn auch im verwendeten Bereich der ersten Brillouinzone nur wenig (vgl. Anhang B, S 107). Am Γ-Punkt sowie bei $k_{inp} = 0$ sind die Zustände laut Bandstrukturrechnung aber noch entartet (vgl. Abb. 62 und Abb. 63). Es reicht daher in Abb. 59 und 60 aus, nur jedes zweite Engergieniveau aufzutragen.



Abb. 59: Darstellung der berechneten Eigenzustände für die untersten Energieniveaus für die Probe R632A am Γ -Punkt in der selbstkonsistent berechneten Potentialstruktur. Das Absolutquadrat der Wellenfunktionen wurde jeweils in der Höhe des Energieeigenwertes eingezeichnet. Die Potentialstruktur ist mit etwas dickeren Linien eingezeichnet. Im mittleren Bereich (z = 63...123 Å) stellt die oberste dieser Linien die HH-Bandkante dar, die darunter die LH- und dann die SO-Bandkante. Im restlichen z-Bereich gilt gleiches, nur daßlie HH- und die LH-Bandkante aufgrund der Annahme von relaxiertem Silizium entartet sind. Die Fermienergie E_{fermi} ist eingezeichnet.



Abb. 60: Berechnete Eigenenergien und deren Eigenzustände (Absolutquadrat) für die bezeichneten Zustände; die Abbildung ist analog zur letzten, bezüglich weiterer Erklärung siehe daher dort.

Die Zusammensetzung der einzelnen Zustände bezüglich HH, LH oder SO ist aus Abb. 61 ersichtlich. Daraus geht klar hervor, ob die einzelnen Wellenfunktionen HH-, LH- oder SO-artig sind und damit die Bezeichnungen HH1, HH2, ..., LH1, Der Grundzustand ist beispielsweise, wie auch bei den Proben R528D, R531D, wieder der Zustand HH1.

Das errechnete Bänderschema ist in Abb. 62 für die [110] Richtung und in Abb. 63 für die [001] Richtung dargestellt (NB! In der ersten Abbildung (Abb. 62) ist bei weitem nicht die gesamte Brillouinzone eingezeichnet). Die 2-fache Entartung, wie beim symmetrischen Potentialtopft, ist nicht mehr überall gegeben. Aus der gegebenen Dotierung wurde die Fermienergie E_{fermi} und der Fermivektor k_{fermi} berechnet. Da die Fermienergie etwas unter dem Grundzustand liegt, ist bei niederer Temperatur und schwacher Anregung praktisch nur dieser besetzt (Valenzband!).

Der aus dem Bänderschema und den Eigenfunktionen berechnete Absorptionskoeffizient ist in Abb. 64 für die beiden Polarisation + und z dargestellt.

Die Identifikation der Absorptionspeaks, also die Zuordnung der Peaks zu den spezifischen Anregungen im Bänderschema, erfolgt wieder durch Untersuchen der berechneten Oszillatorstärken. Sie sind in Abhängigkeit von $k_{inp,x} = k_{inp,y}$ in Form



Abb. 61: Zusammensetzung der berechneten Eigenzustände bezüglich der 2-fach entarteten (siehe Indizes a, b) HH-, LH- und SO-Zustände der Probe R632A. Dabei gilt HH≡HHa+HHb (für LH und SO analog). Schwarz bedeutet 1, weißbedeutet 0, es gilt immer HH+LH+SO=1. Horizontal sind die Eigenenergien durchnumeriert, beginnend bei nE=1, dem Grundzustand. k_{inp} wurde innerhalb einer in der Abbildung gezeigten Zelle im Rechenbereich $k_{inp} = 0, ..., 2 \cdot \frac{2\pi}{D}$ durchvariiert. λ wurde in der gesamten Abbildung festgehalten ($\lambda = 0$).

von Contour-Plots in den Abbildungen Abb. 65 für $\lambda = 0$ und Abb. 66 für $\lambda = 1$ dargestellt. Dabei sind der Übersichtlichkeit halber die fastentarteten Zustände zusammengefaßworden. Die Oszillatorstärke ist jedoch immer für alle vier möglichen Kombinationen der Anregung zwischen den beiden Grundzuständen und den beiden fastentarteten angeregten Zuständen berechnet, addiert und in den Abbildungen 65 und 66 entsprechend aufgetragen worden. Eine Tabelle mit den Übergangsenergien vom Grundzustand aus, berechnet an den angegebenen Punkten im reziproken Raum, ist in Abb. 67 gegeben. Dabei ist der Übersichtlichkeit halber nur jeder zweite Zustand angeführt; aufgrund der Fastentartung im verwendeten und angegebenen reziproken Bereich reicht das, um die Übergangsenergie vom Grundzustand aus einigermaßn gut angeben zu können (die Aufspaltung der einzelnen Zustände ist im verwendeten Bereich nie größr als 6 meV ($\cong 50 \text{ cm}^{-1}$).

Mit diesem Material können den berechneten Absorptionspeaks in Abb. 64 entsprechende Übergänge zwischen Bändern zugeordnet werden:



Abb. 62: Berechnetes Bänderschema der Probe R632A in [110] Richtung für die bezeichneten Eigenzustände ($\lambda = 0$). Die Fermienergie E_{fermi} und der Fermivektor k_{fermi} sind eingezeichnet. nE=1, 2 entspricht den (fastenarteten) Grundzuständen.



Abb. 63: Berechnetes Bänderschema der Probe R632A in [001] Richtung für die bezeichneten Eigenzustände ($k_{inp} \equiv k = 0$). Die Fermienergie E_{fermi} ist eingezeichnet.



Abb. 64: Berechneter Absorptionskoeffizient für z- und für +-polarisierte Strahlung für die Probe R632A. Die verwendeten Eigenfunktionen wurden mit einer selbskonsistenten 6-Bandrechnung ermittelt.

- * Für die z Polarisation sind die Peaks bei $831 \, cm^{-1}$ und bei $1606 \, cm^{-1}$ eindeutig den Übergängen $HH1 \rightarrow HH2$ und $HH1 \rightarrow HH4$ (vgl. Fußote auf S 91) zuzuordnen. Nach den Abbildungen Abb. 65 und Abb. 66, jeweils rechte Hälfte, ist die Oszillatorstärke bei diesen Übergängen merklich hoch (unter Vernachlässigung der Entartung: nE=3 und nE=7). Diese Zustände entsprechen im entarteten Bänderschema den Zuständen 5,6 und 13,14, die nach Abb. 61 wiederum den Zuständen HH2 und HH4 entsprechen. Die Übergangsenergien nach der Tabelle in Abb. 67 passen auch mit den Peakpositionen in 64 zusammen. Bei den beiden Peaks handelt es sich also um die Übergänge $HH1 \rightarrow HH2$ und $HH1 \rightarrow HH4$.
- * Für die + Polarisation finden sich neben anderen drei markante Absorptionspeaks, bei $541 \, cm^{-1}$, bei $1216 \, cm^{-1}$ und bei $1986 \, cm^{-1}$. Diese können analog zur z-Polarisation oben mit den Übergängen $HH1 \rightarrow LH1$ (nE=3,4), $HH1 \rightarrow$ LH2 (nE=7,8) und $HH1 \rightarrow LH4$ (nE=19,20) identifiziert werden (in Klammer ist jeweils die Nummer des Energieniveaus bei berücksichtigter Entartung angegeben).

Zusammenfassend zu den Berechnunen zur Probe R632 kann gesagt werden, daßdie Zustände HH1, HH2 und HH4 einigermaßn äquidistant im Bänderschema liegen



Abb. 65: Darstellung der Oszillatorstärke zwischen Grundzustand und angeregten Zuständen für $\lambda = 0$ in Abhängigkeit von $k_{inp,x} = k_{inp,y}$ für die Probe R632A



Abb. 66: Darstellung der Oszillatorstärke zwischen Grundzustand und angeregten Zuständen für $\lambda = 1$ in Abhängigkeit von $k_{inp,x} = k_{inp,y}$ für die Probe R632A

	nE=1	nE=3	nE=5	nE=7	9	11	13
$k_{inp,x} = k_{inp,y} = 0$	HH1	LH1	HH2	LH2	HH3	LH3	HH4
$\lambda = 0.0$	0	-547	-850	-1253	-1568	-1609	-1722
$\lambda = 0.5$	0	-547	-850	-1252	-1579	-1617	-1686
$\lambda = 1.0$	0	-547	-850	-1252	-1596	-1626	-1650
$k_{inp,x} = k_{inp,y} = 1.41$							
$\lambda = 0.0$	0	-560	-808	-1168	-1491	-1551	-1598
$\lambda = 0.5$	0	-560	-808	-1168	-1485	-1552	-1607
$\lambda = 1.0$	0	-560	-808	-1169	-1480	-1553	-1620
$k_{inp,x} = k_{inp,y} = 0$	15	17	19	21	23	25	27
$\lambda = 0.0$	-1869	-1872	-1937	-1970	-2068	-2150	-2360
$\lambda = 0.5$	-1847	-1904	-1926	-1987	-2102	-2220	-2248
$\lambda = 1.0$	-1817	-1919	-1953	-1990	-2160	-2228	-2245
$k_{inp,x} = k_{inp,y} = 1.41$							
$\lambda = 0.0$	-1699	-1808	-1888	-1934	-2061	-2070	-2247
$\lambda = 0.5$	-1713	-1773	-1877	-1969	-2002	-2131	-2253
$\lambda = 1.0$	-1713	-1794	-1812	-1972	-2055	-2113	-2200
	_						
$k_{inp,x} = k_{inp,y} = 0$	29	31	33	35	37	39	
$\lambda = 0.0$	-2487	-2595	-2602	-2718	-2749	-3273	
$\lambda = 0.5$	-2423	-2517	-2626	-2860	-2913	-3065	
$\lambda = 1.0$	-2337	-2396	-2817	-2853	-3069	-3076	
$k_{inp,x} = k_{inp,y} = 1.41$							
$\lambda = 0.0$	-2340	-2450	-2552	-2837	-2865	-3126	
$\lambda = 0.5$	-2313	-2476	-2632	-2701	-2885	-3096	
$\lambda = 1.0$	-2418	-2432	-2649	-2686	-2884	-2944	

Abb. 67: Tabelle mit den Übergangsenergien vom Grundzustand in die jeweils angegebenen Energieniveaus in Einheiten von cm^{-1} für die Probe R632A für die angegebenen Wellenvektoren ($k_{inp,x}, k_{inp,y}, \lambda$). Dabei ist anzumerken, daßdie Zustände nE=1, 2, nE=3, 4, ... jeweils fastentartet sind. Die Bezeichnungen *HH*1, *HH*2, ..., *LH*1, ... sind aus der weiter oben angeführten Abbildung zur Zusammensetzung der einzelnen Zustände bezüglich *HH*, *LH* und *SO* gerechtfertigt.

und die Absorptionen entsprechend $HH1 \rightarrow HH2$ und $HH1 \rightarrow HH4$ einen Peak bei 831 cm^{-1} und beim doppelten Wert, bei etwa 1606 cm^{-1} , im Absorptionsspekturm erwarten lassen.

5.6.2 Messungen zu R632A und R633A

Transmission

Die gemessenen Transmissionsdaten sind wieder in Form von 4-fach dividierten Spektren dargestellt (bezüglich ihrer Definition siehe S 51) und in Abb. 68 zusammengefaß Der Peak der Probe R632A bei $850 \, cm^{-1}$ und jener der Probe R633A bei $1250 \, cm^{-1}$ dürften äquivalent sein. Die Ursache für die Peakverschiebung ist wohl die Diffusion von Ge während des Wachstums. Obwohl die Proben nominell die gleichen Daten haben, wirken sich aufgrund der Spiegel- und der Asymmetrie der Proben Diffusionsprozesse unterschiedlich aus. Ein zweiter Absorptionspeak tritt jeweils bei etwa $1700 \, cm^{-1}$ auf, in Übereinstimmung mit der Rechnung (vgl. Abb. 64, S 96). Die kleinen Peaks um $1500 \, cm^{-1}$ in Abb. 68 dürften Artefakte sein, die vom Spektrometer herrühren und daher nichts mit der gemessenen Probe zu tun haben.

Eine Simulation der 4-fach dividierten Transmissionskoeffizienten unter Einbezug der errechneten Absorptionskoeffizienten ist in Abb. 69 gezeigt. Für die Transmissionskoeffizienten von s- und p-Polarisation T_s und T_p wurden folgende Ansätze gemacht: $T_s \equiv \exp(-\alpha^{(+)} d)$ mit $\alpha^{(+)}$ dem errechneten Absorptionskoeffizient für +-polarisierte Strahlung und d der absorbierenden Schichtdicke (hier $d = 1 \mu m$), während $T_p \equiv \cos^2(\vartheta) \exp(-\alpha^{(+)} d) + \sin^2(\vartheta) \exp(-\alpha^{(z)} d)$ mit $\vartheta \equiv 52^\circ$ dem Einstrahlungswinkel auf die absorbierende Schicht in waveguide Geometrie und $\alpha^{(z)}$ dem errechneten Absorptionskoeffizienten für die z-polarisierte Strahlung. Für die strichlierte Linie wurde $\alpha^{(+)}$ auf 0 gesetzt mit der folgenden Begründung: Die Proben R632A und R633A hatten zur Transmissionsmessung eine Au-Schicht auf die Übergitterstruktur aufgedampft. Unmittelbar an der Kontaktfläche wird daher das elektrische Feld in der Schichtebene kurzgeschlossen. s-polarisierte Strahlung wird damit in der Nähe der Au-Schicht unterdrückt, p-polarisierte Strahlung ermöglicht. Ohne Au Schicht ist der Sachverhalt übrigens genau umgekehrt, da hat die ppolarisierte Strahlung an der Grenzfläche einen Knoten (vgl. dazu [FromDiss94, S21f]). Bei einer aktiven Schicht von etwa $0.2\mu m$ in unmittelbarem Anschlußan die aufgedampfte Au Schicht der Probe und typischen verwendeten Wellenlängen von der Größnordnung $10\mu m$ kann von s-polarisierte Strahlung nicht viel absorbiert werden, einfach weil sie in der aktiven Schicht, in der Übergitterstruktur kaum vertreten ist. Daher wurde in der Simulation der 4-fach dividierten Spektren von Abb. 68 in Abb. 69 die strichlierte Kurve bei Vernachlässigung der s-Absorption berechnet.

Eine gewisse Ähnlichkeit der Kurven in den Abbildungen 68 und 69 ist feststellbar. Die Peaks nach unten bei ~ $850 \, cm^{-1}$ und bei ~ $1700 \, cm^{-1}$ kommen sowohl bei der Rechnung, als auch beim Meßrgebnis zur Probe R632A zum Vorschein. Bei der Probe R633A scheinen beide verschoben zu sein (vgl. dazu weiter oben).



Abb. 68: 4fach dividierte Transmissionsspektren der Proben R632A und R633A bei T=10K.



Abb. 69: Simulation der 4-fach dividierten, gemessenen Spektren. Die absorbierende Schichtdicke wurde mit $1\mu m$ angesetzt. Nähere Information ist im Absatz zu dieser Abbildung zu finden.

Auswertung zu R632A und R633A

6. Zusammenfassung

Si/SiGe Multiquantumwell-Photodetektoren mit symmetrischer Übergitterstruktur wurden hergestellt und charakterisiert. Entsprechende Bandstrukturberechnungen zur Bestimmung des Absorptionskoeffizienten wurden durchgeführt. Der angeregte Zustand HH2 wurde stets an der Barrierenkante gewählt, sodaß die Übergänge im allgemeinen vom gebundenen Grundzustand ins (Fast)Kontinuum stattfanden. Nach den gemachten Berechnungen überraschend, aber doch erfreulich war, daß die Responsivität bei s-polarisierter im Vergleich zu ppolarisierter Strahlung stärker vertreten war.

Die Qualität der untersuchten Si/SiGe Multiquantumwell-Photodetektoren war durchaus vergleichbar mit jener gängiger IR Photodetektoren. Bei einer Wellenlänge von etwa 7.6µm und einer Temperatur von 77K wurden bei senkrechtem Einfall Detektivitäten von $2 \cdot 10^{10}$ cm \sqrt{Hz} / W erreicht.

Asymmetrische Si/SiGe Strukturen wurden ebenfalls gewachsen mit dem Ziel, später Messungen bezüglich der '2ten Harmonischen' (= SHG = second harmonic generation) zu machen. Im Rahmen dieser Arbeit wurden dazu Berechnungen ausgeführt und einführende Messungen, genauer, Transmissionsmessungen, begonnen.

Kapitel 7 Anhang A - Fouriertransformation (Konvention)

In dieser Diplomarbeit gilt folgende Konvention über Vorzeichen und Vorfaktoren bei Fouriertransformationen:

Sei f(x) eine beliebige Funktion mit der Eigenschaft

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \ |f(x)|^2 < \infty \tag{39}$$

Dann ist f fouriertransformierbar

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk f(k) e^{ikx} \quad \text{wobei} \quad f(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-ikx}$$
(40)

Besonders hingewiesen sei auf die Bezeichnungen f(x) und f(k). Diese Funktionen sind unterschiedlich! Die Namen sind zwar gleich, aber die Argumente unterschiedlich, was symbolisch den Unterschied dieser Funktionen zum Ausdruck bringen soll.

Normalerweise wird k mit x,y oder z für räumliche Fouriertransformationen verwendet. Für Transformationen von Funktionen der Zeit wird dann t mit ω verwendet (hier ohne das Vorzeichen zu wechseln):

$$\begin{array}{rccc} x\left(,y,z\right) & \to & t \\ k & \to & \omega \end{array} \tag{41}$$

Für reelle Funktionen (Signale, ...) sei noch folgende Identität gegeben ¹⁴:

$$f(-k) = [f(k)]^*$$
(42)

¹⁴ Beweis: $f(-k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{+ikx} = \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-ikx}\right]^* = [f(k)]^*$

Kapitel 8 Anhang B - Bandstrukturrechnung und Absorption

Für die Auswertung von Messungen zur Absorption durch eine Probe diente ein MatLab¹⁵ Programm, das von Thomas Fromherz während seiner Dissertation (siehe [FromDiss94]) entwickelt worden war. Darin wurde der Absorptionskoeffizient einer Probenstruktur in Abhängigkeit der eingestrahlten Wellenlänge berechnet. In diesem Kapitel wird ein entsprechender Ausdruck abgeleitet, im wesentlichen in Anlehnung an [FromDiss94]. Ein paar zusätzliche Anmerkungen sind ebenfalls angeführt. Bezüglich weiterer Literatur zu diesem Kapitel sei auf [LuttKohn55], [Burt88] verwiesen.

8.1 Definitionen und allgemeines

Informationen zum folgenden Teil können in jedem Standardbuch zur Quantenmechanik von Festkörpern nachgelesen werden (z.B. [Merz70], [Kittel91]). Die Auflistung hier dient lediglich der Festlegung der Bezeichnung der einzelnen Ausdrücke, die in der Literatur durchaus unterschiedlich vorzufinden sind.

In einem periodischen Potential kann die Lösung der Schrödingergleichung mit dem Hamilton

$$H_0 = T + V_0 \qquad T \qquad \dots \qquad kinetische Energie \\ V_0 \qquad \dots \qquad gitterperiodisches Potential$$
(43)

nach Bloch folgendermaßn angeschrieben werden:

$$H_0 \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) \,\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \tag{44}$$

wobei

¹⁵ Programmiersprache

$$\psi_{n\vec{k}} \equiv e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \tag{45}$$

und $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ gitterperiodisch ist. \vec{k} beschreibt den auf die erste Brillouinzone beschränkten reziproken Gittervektor, n beschreibt den Bandindex (n = 1, 2, 3, ...).

Alternativ zu obiger Scheibweise mit Funkionen kann die allgemein übliche und übersichtlichere ket, bzw. bra Schreibweise verwendet werden (äquivalent zu (44)):

$$H_0 |\psi_{n\vec{k}}\rangle = E_n(\vec{k}) |\psi_{n\vec{k}}\rangle \tag{46}$$

Zwecks Erleichterung der Rechenarbeit werden, wie bereits in (45) verwendet, gern periodische Randbedingungen bezüglich $\psi_{n\vec{k}}$ eingeführt. $\psi_{n\vec{k}}$ wird dann in einem Würfel (oder allgemeiner, einem Parallelepiped) mit Seitenlänge *L* berechnet. Der Würfel enthält $N = N_x N_y N_z$ Gitterzellen. Außrhalb wird $\psi_{n\vec{k}}$ periodisch fortgesetzt

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{L}_{\vec{m}}) = \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad wobei \quad \vec{L}_{\vec{m}} = \sum_{i=1}^{3} \vec{L}_{i}m_{i}$$

(\vec{L}_i die Vektoren entlang der Würfelkanten, m_i ganze Zahlen)

Zusammengefaßläßsich über periodische Randbedingungen sagen, daßsie

- * die Rechenarbeit erleichtern
- * Oberflächeneffekte vernachlässigen
- * Bulk Effekte für $V \to \infty$ liefern

Die erste Brillouinzone wird dann üblicherweise wie folgt gewählt (i = x, y, z)

$$k_i = \frac{2\pi}{L} n_i \quad wobei \quad -\frac{N_i}{2} < n_i \le \frac{N_i}{2} \tag{47}$$

Die reziproken Gittervektoren werden mit

$$\vec{G} \equiv \vec{G}_{\vec{m}} = \sum_{i=1}^{3} \vec{G}_{i} m_{i}$$
 reziproke Gittervektoren

bezeichnet, wobei die \vec{G}_i die reziproke Einheitszelle darstellen. Die m_i stehen für beliebige ganze Zahlen.

Einsetzen von (45) in (44) liefert

$$\left[\frac{1}{2m}(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + \hbar\vec{k})^2 + V_0(\vec{r})\right] u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) u_{n\vec{k}}(\vec{r})$$
(48)
Anmerkungen zu Gl. (48)

- * Gl. (48) ist die zur Schrödingergleichung äquivalente Differentialgleichung für die gitterperiodischen Funktionen $u_{n\vec{k}}$. Diese brauchen nur innerhalb einer Elementarzelle gelöst werden mit der Randbedingung, daßdie $u_{n\vec{k}}$ gitterperiodisch sind.
- Komplex konjugieren von (48) liefert (beachte $(-1)^2 = 1!$) *

$$\left[\frac{1}{2m}(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \hbar\vec{k})^2 + V_0(\vec{r})\right] u_{n\vec{k}}^*(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) u_{n\vec{k}}^*(\vec{r})$$
(49)

Diese Gleichung ist ident mit (48), nur daßanstelle von $u_{n\vec{k}}$ die dazu komplex konjugierte Funktion $u_{n\vec{k}}^*$ steht und \vec{k} das Vorzeichen geändert hat. Somit stellen die $u_{n\vec{k}}^*$ die gitterperiodischen Funktionen für $(-\vec{k})$ dar. Es gilt unabhängig von den Symmetrien des gitterperiodischen Potentials $V_0(\vec{r})$

$$u_{n\vec{k}} = u_{n,-\vec{k}}$$
$$E_n(\vec{k}) = E_n(-\vec{k})$$

Die Bandstruktur ist also symmetrisch im \vec{k} -Raum.

* Ohne Beweis sei noch angemerkt (genauere Informationen finden sich zum Beispiel in ([Callaway64, Seite 52ff]): für ein inversionssymmetrisches Potential und einem bezüglich Zeitumkehr invarianten Hamiltonoperator ist jedes Band im reziproken Raum (mindestens) 2-fach entartet. Ein stufensymmetrisches Übergitterpotential beispielsweise ist inversionssymmetrisch, und jeder Eigenzustand daher 2-fach entartet. Bei asymmetrischen Übergitterstrukturen hebt sich die 2-fache Entartung aufgrund der nicht-vorhandenen Inversionssymmetrie bis auf weiteres auf.

8.1.1 Festlegung der Integrale

Bei Skalarprodukten in ket / bra - Schreibweise wird bei der äquivalenten Integralform immer die Normierung bezüglich dem Integralvolumen mitgenommen (Bei ausgeschriebenen Integralen kann aber durchaus die explizit angeschriebene Normierung durch das Integrationsvolumen fehlen).

Beispiele:

$$\langle u_{n\vec{k}} | Operator | u_{n\vec{k}} \rangle = \int_{\Omega} \frac{d^3\vec{r}}{\Omega} u_{n\vec{k}}^* \cdot Operator \cdot u_{n\vec{k}}$$
(50)

$$\langle \psi_{n\vec{k}} | Operator | \psi_{n\vec{k}} \rangle = \int_{V} \frac{d^{3}\vec{r}}{V} \psi_{n\vec{k}}^{*} \cdot Operator \cdot \psi_{n\vec{k}}$$
(51)

(V ist das Volumen für die periodische Randbedingungen, Ω das Volumen der Elementarzelle)

8.1.2 Normierung

Der Einfachheit halber wird üblicherweise eine normierte, orthogonale Basis, also eine Orthonormalbasis, verwendet. Das heiß

$$\left\langle \psi_{n\vec{k}} \,|\, \psi_{n'\vec{k}'} \right\rangle \stackrel{per Def.}{=} \delta_{nn'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \tag{52}$$

Daßdies erlaubt ist, wird im nächsten Abschnitt über die Vollständigkeit der $\psi_{n\vec{k}}$ begründet. Die Blochfunktionen $u_{n\vec{k}}$ sind für unterschiedliche \vec{k} im allgemeinen nicht orthogonal. Bei gleichem \vec{k} jedoch sind sie es:

$$\delta_{nn'} \stackrel{(52)}{=} \langle \psi_{n\vec{k}} | \psi_{n'\vec{k}} \rangle = \int_{V} \frac{d^{3}\vec{r}}{V} \cdot 1 \cdot u_{n\vec{k}}^{*} u_{n'\vec{k}} =$$

$$= \underbrace{\frac{N}{V}}_{=1/\Omega} \int_{\Omega} d^{3}\vec{r} \, u_{n\vec{k}}^{*} u_{n'\vec{k}} \equiv \langle u_{n\vec{k}} | \, u_{n'\vec{k}} \rangle$$

$$\Leftrightarrow \boxed{\langle u_{n\vec{k}} | \, u_{n'\vec{k}} \rangle = \delta_{nn'}}$$
(53)

(die $u_{n\vec{k}}$ sind gitterperiodisch, Ω ist das Volumen der Elementarzelle)

8.1.3 Vollständigkeit der Eigenfunktionen

Vollständigkeit der $|\,\psi_{n\vec{k}}\rangle$ im Volumen V

Die Funktionen $|\psi_{n\vec{k}}\rangle$ stellen einen vollständigen Funktionensatz dar, weil sie Lösungen eines hermitschen Operators sind (falls Entartung auftritt, kann zumindest ein solcher gewählt werden). Das heiß jede Funktion ψ kann entsprechend den $|\psi_{n\vec{k}}\rangle$ zerlegt werden.

$$|\psi\rangle = \sum_{n\vec{k}} |\psi_{n\vec{k}}\rangle \underbrace{\langle\psi_{n\vec{k}} |\psi\rangle}_{\equiv c_{n\vec{k}}}$$
(54)

Vollständigkeit der $|u_{n\vec{k}}\rangle$ in der Elementarzelle Ω

Die $|u_{n\vec{k}}\rangle$ bilden für jedes $\vec{k} = \vec{k}_0 \in 1.BZ$ beliebig, aber fix, mit n = 1, 2, 3, ... ein vollständiges Orthonormalsystem für alle gitterperiodischen Funktionen.¹⁶

Daraus folgt für unterschiedliche \vec{k} , daßsich die dazughörigen $u_{n\vec{k}}$ mittels einer unitären Basistransformation ineinander überführen lassen. Zum Beispiel können für alle $\vec{k} \in 1.BZ$ die $u_{n\vec{k}}$ über die $u_{n\vec{0}}$ dargestellt werden:

$$\bigwedge_{\vec{k}\in 1.BZ} u_{n\vec{k}} = \sum_{n'} |u_{n'\vec{0}}\rangle \underbrace{\langle u_{n'\vec{0}} | u_{n\vec{k}} \rangle}_{\equiv b_{nn'}(\vec{k})} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \bigwedge_{\vec{k}\in 1.BZ} u_{n\vec{k}} = \sum_{n'} b_{nn'}(\vec{k}) |u_{n'\vec{0}}\rangle$$
(56)

Zurück zu Gleichung (54). Sei beispielsweise ψ eine beliebige gitterperiodische Funktion u. Sie soll nun nach der modifizierten Ortonormalbasis $\tilde{\psi}_{n\vec{k}} \equiv e^{-i\vec{k}_0\vec{r}} \cdot \psi_{n\vec{k}}$ entwickelt werden. Zur Berechnung der Koeffizienten $\tilde{c}_{n\vec{k}}$ werden nun $\tilde{\psi}_{n\vec{k}}$ und $\psi = u$ fouriertransformiert (man beachte, daß zur Fouriertransformation von gitterperiodischen Funktionen nur reziproke Gittervektoren verwendet werden brauchen)

$$\begin{split} \psi(\vec{r}) &\equiv u(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} u(\vec{G}) \cdot e^{i\vec{G}\vec{r}} \\ \tilde{\psi}_{n\vec{k}}(\vec{r}) &= e^{-i\vec{k}_0\vec{r}} \cdot e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i(\vec{k}-\vec{k}_0)\vec{r}} \sum_{\vec{G}} u_{n\vec{k}}(\vec{G}) \cdot e^{i\vec{G}\vec{r}} \end{split}$$

Somit wird der Entwicklungskoeffizient $\tilde{c}_{n\vec{k}}$ zu

$$\tilde{c}_{n\vec{k}} \equiv \langle \tilde{\psi}_{n\vec{k}} | \psi \rangle = \sum_{\vec{G},\vec{G}'} \int_{V} \frac{d^{3}\vec{r}}{V} \cdot u_{n\vec{k}}^{*}(\vec{G}) e^{-i(\vec{k}-\vec{k}_{0})\vec{r}} e^{-i\vec{G}\vec{r}} \cdot u(\vec{G}') e^{i\vec{G}'\vec{r}} \\
= \sum_{\vec{G},\vec{G}'} u_{n\vec{k}}^{*}(\vec{G}) u(\vec{G}') \underbrace{\delta_{\vec{k}-\vec{k}_{0}+\vec{G},\vec{G}'}}_{=\delta_{\vec{k},\vec{k}_{0}} \cdot \delta_{\vec{G},\vec{G}'}} = \delta_{\vec{k},\vec{k}_{0}} \cdot \sum_{\vec{G}} u_{n\vec{k}_{0}}^{*}(\vec{G}) u(\vec{G}) \tag{55}$$

($\vec{k} + \vec{G}$ kann nur für $\vec{k} = \vec{0}$ einen reziproken Gittervektor ergeben ($\vec{k} \in 1.BZ$!). Darum kann obige Deltafunktion aufgespalten werden.)

Daraus folgt, daßsich gitterperiodische Funktion allein mit den Funktionen $\tilde{\psi}_{n\vec{k}_0} = u_{n\vec{k}_0}$ mit \vec{k}_0 beliebig, aber fix und $n = 1, 2, 3, \ldots$ darstellen lassen.

¹⁶ Beweis:

Ein äquivalenter vollständiger orthogonaler Funktionensatz in Ω ergibt sich aus der Fourieranalyse. Dieser hat folgendes Aussehen

$$|\vec{G}\rangle \equiv e^{i\vec{G}\vec{r}} \qquad \vec{G}\dots reziproker\,Gittervektor$$
(57)

Sie lassen sich einfach mit den $u_{n\vec{k}}$ verknüpfen

$$|\,\vec{G}\rangle = \sum_n |u_{n\vec{0}}\rangle \langle u_{n\vec{0}}\,|\,\vec{G}\rangle$$

oder in der Ortsschreibweise (vergleiche Anhang A über Fouriertransformation)

$$e^{i\vec{G}\vec{r}} = \sum_{n} u_{n\vec{0}}(\vec{r}) \underbrace{\int_{\Omega} \frac{d^{3}\vec{r}'}{\Omega} u_{n\vec{0}}^{*}(\vec{r}') e^{i\vec{G}\vec{r}'}}_{\equiv (u_{n\vec{0}}(\vec{G}))^{*}}$$
(58)

8.2 Envelopen Theorie

Literatur: [Burt88]

Die Lösung der mikroskopischen Schrödingergleichung ist normalerweise eine sehr komplexe Angelegenheit. Darum wird diese nur im ungestörten Fall berechnet. Die daraus resultierenden Ergebnisse werden dann dazu verwendet, daßman die einzelnen Teilchen unter bestimmten Rahmenbedingungen als quasifreie Teilchen beschreiben kann. Das heiß die Teilchen vollführen eine fiktive freie Bewegung. Alle Informationen bezüglich Gitterpotential werden in eine geänderte Masse, in die effektive Masse gesteckt, die im allgemeinen einen Tensor darstellt und vom reziproken Vektor \vec{k} abhängt. Die mathematische Beschreibungsweise vereinfacht sich dadurch grundlegend.

Mathematisch gesehen, läßsich jede beliebige Funktion ψ allgemein auf folgende Weise darstellen (Beweis folgt weiter unten):

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{n} F_n(\vec{r}) \ u_{n\vec{0}}(\vec{r})$$

Bei der Envelopentheorie wird allein mit den $F_n(\vec{r})$ gerechnet, die von Gitterzelle zu Gitterzelle nur schwach variieren. Die Informationen bezüglich der $u_{n\vec{0}}$ stecken dann in der geänderten Masse, der effektiven Masse, deren Größ aus entsprechender Literatur entnommen wird.

Zur Berechnung von gestörten Systemen, beispielsweise Defekte, Übergitter, wird ein Störpotential hinzugefügt, in dem sich nun die quasifreien Teilchen bewegen. Um die Theorie nicht überzustrapazieren, mußdas Störpotential schwach sein in dem Sinn, daßes sich nur schwach von einer Einheitszelle des Materials bis zur nächsten verändert.

8.2.1 Ansatz für die Effektivmassennäherung

Im Volumen V läßsich jede Funktion ψ folgendermaßn darstellen¹⁷:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{n} F_{n}(\vec{r}) \ u_{n\vec{0}}(\vec{r})$$
(60)

In der letzten Gleichung (59) steckt aber noch mehr Information, nämlich der Aufbau der Funktionen $F_n(\vec{r})$. Sie setzen sich bei Fourieranalyse nur aus Koeffizienten der ersten Brillouinzone zusammen.

¹⁷ Anmerkung: Die gitterperiodischen Funktionen u müssen nicht unbedingt bei $\vec{k}_0 = \vec{0}$ genommen werden. Es könnte genausogut ein anderer Wellenvektor \vec{k} aus der ersten Brillouinzone sein. Ein Punkt mit hoher Symmetrie ist allerdings aus mathematischen Gesichtspunkten von Vorteil. Allgemein wäre für einen Ausgangspunkt $\vec{k}_0 \in 1.BZ$ folgender Ansatz angebracht:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{n} F_{n}(\vec{r}) \cdot e^{i\vec{k}_{0}\vec{r}} u_{n\vec{k}_{0}}(\vec{r})$$

Beweis von (60):

 ψ kann im Volumen V fourieranalysiert werden:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k},\vec{G}} \psi_{\vec{G}}(\vec{k}) \ e^{i(\vec{k}+\vec{G}) \ \vec{r}} \quad mit \quad \psi_{\vec{G}}(\vec{k}) = \int_{V} \frac{d^3\vec{r}}{V} \psi(\vec{r}) \ e^{-i(\vec{k}+\vec{G}) \ \vec{r}}$$

Einsetzen von (58) ergibt

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k},\vec{G}} \psi_{\vec{G}}(\vec{k}) \ e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \sum_{n} u_{n\vec{0}}(\vec{r}) \ \left(u_{n\vec{0}}(-\vec{G})\right)^{*} = \\ = \sum_{n} \underbrace{\left(\sum_{\vec{k}} \underbrace{\left(\sum_{\vec{G}} \left(u_{n\vec{0}}(-\vec{G})\right)^{*} \psi_{\vec{G}}(\vec{k})\right)}_{\equiv F_{n}(\vec{k})} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\right)}_{\equiv F_{n}(\vec{r})} \cdot u_{n\vec{0}}(\vec{r})$$
(59)

womit der Beweis auch schon gegeben ist.

$$F_n(\vec{r}) = \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} F_n(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$
(61)

Sie variieren also schwächer, im allgemeinen sehr viel schwächer als die gitterperiodischen Funktionen $u_{n\vec{k}}$. Daraus resultiert auch ihr Name, Einhüllende oder aus dem Englischen übernommen, Envelopen Funktionen.

Wichtig in diesem Zusammenhang ist auch zu sehen, daßohne zusätzlichem Störpotential die $F_n(\vec{r})$ sich aus einem einzigen Summanden in (61) zusammensetzen, weil dann die Eigenlösung ψ ident mit (45) werden muß Bei schwacher Störung jedoch werden anstatt der Lösung bei \vec{k}_0 sämtliche \vec{k} -Vektoren nahe um \vec{k}_0 miteinander koppeln.

8.2.2 Envelopen Theorie für Halbleiter-Übergitterstrukturen (skizziert)

Die folgenden Ergebnisse wurden aus [Burt88] entnommen. Dort ist auch, falls hier nicht vorgeführt, ein passable Ableitung vorzufinden. Der interessiertere Leser sei darauf verwiesen.

Unter einer Übergitterstruktur versteht sich die periodische, schichtweise Aneinanderreihung unterschiedlicher Materialen. Diese Schichten müssen sehr dünn sein, wenn man quantenmechanische Effekte ausnützen will.

Unter der Bedingung von einem langsam variierenden Störpotential V, das sich also nur langsam ändert von einer Einheitszelle zur nächsten, gelangt man mit (60) und

$$H^0 \equiv \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m}}_{=T} + \underbrace{V_0 + V}_{\equiv V^{ges}}$$

($\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$ der Impulsoperator, T der Translationsenergieoperator, V_0 das gitterperiodische Potential) zur folgenden Schrödingergleichung:

$$\bigwedge_{n} -\frac{\hbar^{2}}{2m} \vec{\nabla}^{2} F_{n}(\vec{r}) + \frac{\hbar}{im} \sum_{m} \vec{p}_{nm} \cdot \vec{\nabla} F_{m} + \sum_{m} \left(T_{nm} F_{m}(\vec{r}) + \langle V_{nm}^{ges}(\vec{r}) \rangle \left\langle F_{m}(\vec{r}) \right\rangle \right) = EF_{n}$$
(62)

wobei

$$\vec{p}_{nm} \equiv \langle u_{n\vec{0}} | \vec{p} | u_{m\vec{0}} \rangle \equiv \int_{\Omega} \frac{d^3 \vec{r}}{\Omega} u_{n\vec{0}}^* \cdot \vec{p} \cdot u_{m\vec{0}}$$
(63)

$$T_{nm} \equiv \langle u_{n\vec{0}} | T | u_{m\vec{0}} \rangle \equiv \int_{\Omega} \frac{d^3 \vec{r}}{\Omega} u_{n\vec{0}}^* \cdot T \cdot u_{m\vec{0}}$$
(64)

$$\langle V_{nm}^{ges}(\vec{r}) \rangle \equiv \int_{V} d^{3}\vec{r}' \ u_{n\vec{0}}^{*}(\vec{r}') \ V^{ges}(\vec{r}) \ u_{m\vec{0}}(\vec{r}') \cdot \Delta(\vec{r} - \vec{r}')$$
(65)

$$\langle F_m(\vec{r}) \rangle \equiv \int_V d^3 \vec{r}' F_m(\vec{r}) \cdot \Delta(\vec{r} - \vec{r}')$$
(66)

$$\Delta(\vec{r} - \vec{r}') \equiv \frac{1}{V} \sum_{\vec{k} \in 1.BZ} e^{i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}')}$$
(67)

m im Nenner steht für die freie Elektronenmasse, nicht zu verwechseln mit m als Index. (67) steht für eine Pseudo-Deltafunktion. Für eine exakte Deltafunktion müße sich die Summation über \vec{k} auch über alle Bereiche außthalb der 1.BZ erstrecken. Das tut sie aber nicht. Sie ist auf die 1.BZ beschränkt, was zur Folge hat, daß sie nur im Bereich einer Elementarzelle als von null verschieden anzusehen ist, aber eben in dieser einen Elementarzelle die jeweiligen Integranden, hier in (65) und (66), gewichtet, oder besser mittelt.

Die Integrale (63) und (64) sind entsprechend (50) und (51) definiert.

Zu (62) gibt es noch anzumerken, daßnan für die Lösung dieser Schrödingergleichung zum Energieeigenwert E unendlich viele Gleichungen hat, nämlich für jedes n zum gleichen E.

Annahmen für eine Übergitterstruktur

- * Halbleiterüberstrukturen bestehen im allgemeinen aus unterschiedlichen Halbleiterschichten mit gleicher Kristallsymmetrie, da sich diese leichter aufeinander aufwachsen lassen
- * die Funktionen $u_{n\vec{0}}$ werden daher in jeder Schicht als gleich angenommen
- * Stufenpotentialnäherung: die Mittelungen von (65) und (66) werden weggelassen. Die jeweils gemittelten, schwach variierenden Funktionen F_m und Vwerden dabei im Bereich einer Elementarzelle als konstant angenommen.

Damit ist $T_{nm} + \langle V_{nm}^{ges}(\vec{r}) \rangle$ in (62) im großn und ganzen diagonal und wird zu $\delta_{nm} \cdot (E_n(z) + V(z))$ mit $E_n(z)$ dem *n*-ten Energieeigenwert der ungestörten Schicht am Ort z (z die Wachstumsrichtung). Die Summation über m fällt.

* schwache Störung und daher nahe einem ungestörten Eigenzustand s

Nachdem hier der Einfachheit halber der Ausgangspunkt im reziproken Gitter für die Berechnungen $\vec{k}_0 = \vec{0}$ ist und bei schwachen Potential nur die \vec{k} s nahe um $\vec{k}_0 = \vec{0}$ koppeln, kann mit Recht angenommen werden, daßdie $F_n(\vec{k})$ auch nur schwach von Gitterzelle zu Gitterzelle variieren.

Mit diesen Annahmen wird aus (62) mit z der Wachstumsrichtung

$$-\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 F_s(\vec{r})}_{Term \ 1ter \ Ordnung} + \underbrace{\frac{\hbar}{im}\sum_m \vec{p}_{sm} \cdot \vec{\nabla} F_m}_{Term \ 1ter \ Ordnung} + \underbrace{(E_s(z) + V(z))F_s(\vec{r}) = EF_s}_{Terme \ 0ter \ Ordnung} \tag{68}$$

Im V(z) stecken Störpotentiale wie die Bandverbiegung, bestimmt über die Poisson Gleichung von der Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit der einzelnen Eigenlösungen, Austauschpotential, usw. Dieses schwach variierende Potential wird im weiteren weggelassen, könnte aber jederzeit ohne Schwierigkeit wieder hinzugefügt werden.

Für jedes F_m mit $m \neq s$ in der Summation in Gl. (68), einem Term 1ter Ordnung, ist die Gleichung ebenfalls bekannt

$$-\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 F_m(\vec{r})}_{vernachlässigt} + \frac{\hbar}{im} \sum_{m'} \vec{p}_{mm'} \cdot \vec{\nabla} F_{m'} + E_m(z) F_m(\vec{r}) = EF_m \tag{69}$$

Wenn die Lösung um E_s betrachtet wird, wird F_s am stärktsten vertreten sein, während die restlichen F_m sehr klein sein werden und erst recht dann die zweite Ableitung davon. Diese wird daher vernachlässigt. Was bleibt, ist

$$F_m(\vec{r}) = \frac{\hbar}{im} \sum_{m'} \frac{\vec{p}_{mm'}}{E - E_m(z)} \cdot \vec{\nabla} F_{m'} \simeq \frac{\hbar}{im} \sum_{m'} \frac{\vec{p}_{mm'}}{E_s(z) - E_m(z)} \cdot \vec{\nabla} F_{m'}$$

Bei der letzten Gleichheit wurde im Nenner E durch $E_s(z)$ ersetzt, was dadurch gerechtfertigt ist, daßdiese nahe beieinander liegen und außrdem in einem Term erster Ordnung in (68) stehen. Eingesetzt in (68) folgt (der Term für m = s fällt wegen $\vec{p}_{ss} = \vec{0}$ raus (für alle s!, zu zeigen mittels partieller Integration))

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 F_s(\vec{r}) + \left(\frac{\hbar}{im}\right)^2 \sum_{m \neq s} \sum_{m'} \frac{(\vec{p}_{sm}\vec{\nabla})(\vec{p}_{mm'}\vec{\nabla})}{E_s(z) - E_m(z)} F_{m'} + E_s(z)F_s(\vec{r}) = EF_s$$

Envelopen Theorie

Störungstheoretisch bilden Übergänge $s \to m$ und dann $m \to m' \neq s$ Terme höherer Ordnung und werden ebenfalls vernachlässigt. Damit fällt die Summation über m', und was bleibt, ist

$$-\frac{\hbar^2}{2}\vec{\nabla}\left(\frac{1}{m} + \frac{2}{m^2}\sum_{m \neq s}\frac{\vec{p}_{sm} \circ \vec{p}_{ms}}{E_s(z) - E_m(z)}\right)\vec{\nabla}F_s + E_s(z)F_s(\vec{r}) = EF_s$$

Mit der Definition des Tensors für die inverse effektive Masse

$$\frac{1}{m^*(z)} \equiv \frac{1}{m} + \frac{2}{m^2} \sum_{m \neq s} \frac{\vec{p}_{sm} \circ \vec{p}_{ms}}{E_s(z) - E_m(z)}$$
(70)

gelangt man zum Endresultat

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2}\vec{\nabla}\frac{1}{m^*(z)}\vec{\nabla}F_s + E_s(z)F_s(\vec{r}) = EF_s}$$
(71)

Damit wurde das Gleichungssystem (62) entkoppelt und auf eine einzige Gleichung reduziert. Man beachte die Position des Effektivmassentensors. Sie stellt die Hermitizität und Erhaltung des Wahrscheinlichkeitsstromes sicher. Bei der hier gemachten Ableitung erhält man unmittelbar diese Position zwischen den Gradienten, was bei anderen Ableitungen oft erst plausibel gemacht werden muß

Für entartete oder fastentartete Bänder läßsich die Summation über m' nicht so einfach herausstreichen, wie weiter oben praktiziert. Es müssen alle m' mitgenommen werden, die mit s entartet sind bzw. mit ihrer Energie zwischen oder nahe bei E und E_s liegen. Diese Zustände seien per Definitionem mit den Indizes s bzw. s' abgedeckt, alle verbleibenden mit dem Index m.

Für entartete oder fastentarte Bänder gilt somit folgendes System von Envelopen Gleichungen

$$\bigwedge_{s} -\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \cdot \sum_{s'} \left(\frac{1}{m^*(z)} \right)_{ss'} \vec{\nabla} \cdot F_{s'} + E_s(z) F_s(\vec{r}) = EF_s \tag{72}$$

wobei

$$\left(\frac{1}{m^{*}(z)}\right)_{ss'} \equiv \frac{1}{m}\delta_{ss'} + \frac{2}{m^{2}}\sum_{m}\frac{\vec{p}_{sm}\circ\vec{p}_{ms'}}{E_{s}(z) - E_{m}(z)}$$
(73)

Mit der Definition der 3×3 - Matrizen

$$D_{ss'}(z) \equiv 1 \cdot \delta_{ss'} + \frac{2}{m} \sum_{m} \frac{\vec{p}_{sm} \circ \vec{p}_{ms'}}{E_s(z) - E_m(z)}$$
(74)

oder in Komponentenschreibweise (die Komponente (i,j))

$$D_{ss'}^{ij} \equiv \delta_{if} \,\delta_{ss'} + \frac{2}{m} \sum_{m} \frac{p_{sm}^i \cdot p_{ms'}^j}{E_s(z) - E_m(z)}$$

erhält man das Endergebnis für die Envelopen-Funktionen im entarteten Fall

$$\bigwedge_{s} -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{s'} \vec{\nabla} D_{ss'}(z) \ \vec{\nabla} \cdot F_{s'} + E_s(z) F_s(\vec{r}) = EF_s$$

Werden also insgesamt n_s Funktionen mitgenommen, ergeben sich auch n_s dazugehörige Differentialgleichungen, die numerisch gelöst werden können. Die $D_{ss'}$ waren hier für den Fall von Si, einem Halbleiter mit der Symmetrie des Diamantgitters, aus der Literatur bekannt. Sie waren dabei nur von drei Parametern, den Parametern γ_1 , γ_2 und γ_3 abhängig, die selber nur noch von der Gitterkonstante des Diamantgitters abhingen. Experimentell bestimmte Werte für γ_i waren ebenfalls bereits in der Literatur zu finden. Literatur dazu ist beispielsweise in [LuttKohn55], in [People90] und in [Rieger93]

8.3 Berechnung der Absorption

8.3.1 Einleitung

Ausgangspunkt von Absorption elektromagnetischer Strahlung ist Materie mit bestimmten elektronischen Eigenschaften und ein elektromagnetisches Wechselfeld bei der Frequenz ω . Die Materie kann mathematisch durch einen ungestörten Hamilton H_0 beschrieben werden. Die Strahlung wird als Störung behandelt. Üblicherweise wird zur Einbindung der Strahlung in den Hamilton folgende Substitution verwendet¹⁸

$$\vec{p} \to \vec{p} + e\vec{A}$$
 (75)

wobei $\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$ den Impulsoperator, \vec{A} das Vektorpotenial darstellt. Für den Ein-Teilchen-Hamilton

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$$

¹⁸ genauere Informationen sind in jedem standardmäßgen Quantenmechanikbuch zu finden

ergibt sich daraus der Störterm erster Ordnung ($\vec{
abla} \vec{A} = 0$)¹⁸

$$H' = \frac{e}{m}\vec{A}\,\vec{p} \tag{76}$$

oder in Dipolnäherung

$$H' = e\vec{E}\,\vec{r} \tag{77}$$

(e ist die Elementarladung (die Ladung des Elektrons ist daher -e))

Aus der Maxwellgleichung $\vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{\partial}{\partial t}\vec{B} = \vec{0}$ erhält man, daßmit dem Ansatz für ebene Wellen

$$\vec{E} = \operatorname{Re}\{\vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}\}$$
(78)

das Vektorpotential \vec{A} (bis auf einen Phasenfaktor) parallel zum elektrischen Feld steht

$$\vec{A}_0 = \frac{1}{i\omega}\vec{E}_0\tag{79}$$

Die Übergangsrate W_{if} vom Zustand $|i\rangle$ auf den Zustand $|f\rangle$ ist bei Absorption von Strahlung gegeben durch Fermis Goldene Regel¹⁸

$$W_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle i \right| H' \left| f \right\rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$$
(80)

8.3.2 Berechnung des Absorptionskoeffizienten α

Für den Absorptionskoeffizienten α in Abhängigkeit von W_{if} ergibt sich (eine Ableitung folgt am Ende dieses Abschnitts auf Seite 119)

$$\alpha = \frac{\hbar\omega}{I} n W_{if} \tag{81}$$

wobei I der eingestrahlte Intensitätsstrom und n die Dichte der beteiligten Elektronen darstellt. Bezüglich der Intensität im Nenner beachte man, daß W_{if} proportional zu I zu erwarten ist. Damit kürzt sich die Intensitätsabhängigkeit heraus.

Im allgemeinen sind die Zustände $|i\rangle$ und $|f\rangle$ nicht zu jeder Zeit und an jedem Ort der Probe gleich weit voneinander entfernt. Durch Inhomogenitäten der Probenstruktur kann $\Delta E = E_f - E_i$ räumlich variieren. Andererseits können um den Endzustand viele Energieniveaus konzentriert sein. Durch Streuung und Stöß kann damit auch ΔE variieren. Der Endzustand $|f\rangle$ sei daher verbreitert gemäßeiner auf 1 normierten Verteilungsfunktion $g(\omega)$. In der Regel wird eine Lorenzkurve mit charakteristischer Breite γ genommen:

$$g(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{\gamma^2 + (\omega - \omega_0)^2}$$
(82)

Ist das Spektrum der eingestrahlten Intensität über diese Schwankungen hinweg einigermaßn konstant, kann (80) umgeschrieben werden, indem die Deltafunktion durch $g(\omega)$ ersetzt wird (man beachte, daß $(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$)

$$W_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle i \left| H' \right| f \right\rangle \right|^2 \cdot \frac{g(\omega)}{\hbar}$$
(83)

Zusammenfassen von (76), (79), (81) und Verwenden von (beachte Ansatz (78))

$$\left\langle \vec{E}^{2} \right\rangle = \frac{1}{2} \left| \vec{E}_{0} \right|^{2} \quad \langle \rangle \dots zeitl. Mittelwert$$

und von

$$I = \sqrt{\varepsilon}\varepsilon_0 c \cdot \frac{1}{2} \left| \vec{E}_0 \right|^2$$

($\sqrt{\varepsilon}$ ist der Brechungsindex, c die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum) ergibt¹⁹

$$\alpha = n \frac{\pi}{2\sqrt{\varepsilon}} \frac{e^2}{\varepsilon_0 \, c \, m} \underbrace{\left[\frac{2}{m} \frac{|\langle i | \hat{e}_{\vec{E}} \cdot \vec{p} | f \rangle|^2}{\hbar \omega}\right]}_{\equiv f_{fi}} g_{fi}(\omega) \tag{84}$$

wobei $\hat{e}_{\vec{E}}$ den Einheitsvektor von \vec{E}_0 und f_{fi} die Oszillatorstärke für den Übergang $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$ darstellt. Da $g(\omega)$ für eine verbreiterte Deltafunktion steht mit Peak bei $\frac{1}{\hbar}(E_f - E_i)$, trägt auch diese Funktion die Indizes f und i.

Gleichung (84) wurde für die numerische Berechnung des Absorptionskoeffizienten verwendet. Anstatt der Elektronendichte stand jedoch eine Summation über alle möglichen Übergänge (für Licht finden die Übergänge im Bänderschema aufgrund

¹⁹ Anmerkung: Bei der Ableitung von (84) gibt es ein gefinkeltes Detail, nämlich die Auswirkung einer zeitlich periodischen Störung auf Fermis Goldene Regel. Bei der Ableitung von Fermis Goldener Regel (80) mit dem Störhamilton (76) und dem Ansatz für ein harmonisch variierendes \vec{E} (78), nämlich $\vec{E} = \operatorname{Re}\{\vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}\} = \frac{1}{2}\{\vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} + \vec{E}_0^* e^{-i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}\}$ fällt der zweite Summand im elektrischen Feld, proportional zu $e^{+i\omega t}$, raus; er würde eine Deltafunktion mit dem Aussehen $\delta(\omega_{fi}+\omega)$ verursachen ($\hbar\omega_{fi} = E_f - E_i$!), die bei alleiniger Betrachtung von Absorption weggelassen werden kann. Daher ergibt sich anstatt einem Term $\frac{1}{2}|\vec{E}_0|^2$, wie etwa bei der Berechnung der Intensität, der Term $|\frac{1}{2}\vec{E}_0|^2 = \frac{1}{4}|\vec{E}_0|^2$.

$$\alpha = \frac{1}{V} \sum_{\substack{n,\vec{k} \\ besetzt}}^{k_F} \sum_{\substack{j \\ un-\\ besetzt}} \frac{\pi}{2\sqrt{\varepsilon}} \frac{e^2}{\varepsilon_0 \, c \, m} \underbrace{\left[\frac{2}{m} \frac{\left|\left\langle u_{n,\vec{k}} \mid \hat{e}_{\vec{E}} \cdot \vec{p} \mid u_{j,\vec{k}} \right\rangle\right|^2}{\hbar\omega}\right]}_{\equiv f_{nj}(\vec{k})} g_{jn,\vec{k}}(\omega) \qquad (85)$$

Beweis

Ableitung zu (81):

Gedankenexperiment: Man stelle sich einen infinitesimal kleinen Quader vor mit Querschnittsfläche A und Länge Δz (siehe Abb. 70).



Die Strahlung geht senkrecht durch A, läuft durch den Quader und verläßihn auf der anderen Seite wieder durch die Fläche A. I ist die Energiestromdichte der Strahlung. Die absorbierte Energie im Quader im Zeitintervall $\Delta t = \frac{\Delta z}{c}$, jene Zeit, die die Strahlung braucht, um durch den Quader zu gelangen, ist dann

$$W_{abs} = \left(-\frac{dI}{dz}\Delta z\right) \cdot A \cdot \Delta t$$

Andererseits gilt

$$W_{abs} = \hbar \omega \cdot (n \cdot A \cdot c\Delta t) \cdot (W_{if} \cdot \Delta t)$$

 $(n \cdot A \cdot c\Delta t)$ ist die Anzahl der betroffenen Elektronen, $(W_{if} \cdot \Delta t)$ die Übergangswahrscheinlichkeit für 1 Elektron im Zeitintervall Δt . Gleichsetzen obiger Gleichungen ergibt ($\Delta z = c \Delta t$)

$$\frac{dI}{dz} = -\hbar\omega \, n \, W_{if}$$

Mit

$$\frac{dI}{dz} = -\alpha \, I$$

ergibt sich dann für α

$$\alpha = \frac{\hbar\omega}{I} n W_{ij}$$

womit der Beweis gegeben ist.

- q.e.d ——

8.4 Anmerkung zur Oszillatorstärke

Absorption elektromagnetischer Strahlung hängt sehr stark vom jeweiligen System ab. Daher wäre es wünschenswert, eine systemunabhängige Größ zu haben, die Aufschlußtiber die Stärke eines Überganges gibt. Die dimensionlose Oszillatorstärke erfüllt dies recht gut, wie aus dem weiteren zu ersehen ist.

8.4.1 Gebundene Systeme

Literatur: [Merz70, S. 457]

Als gebundenen Systemen bezeichnet man solche, bei denen die Lösungen der Schrödingergleichung nur in einem begrenzten Raumbereich merklich von null verschieden sind.

Der Einfachheit halber ist die Rechnung hier 1-dimensional. Eine Verallgemeinerung auf den 3-dimensionalen Fall hat den gleichen Rechengang, ist aber komplexer und daher unübersichtlicher. p ist gleich $\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$, die Masse konstant gleich m. Die Schrödingergleichung hat folgendes Aussehen

$$\underbrace{\left[\frac{p^2}{2m} + V(x)\right]}_{\equiv H_0} \psi(x) = E_n \psi(x)$$

Für ein solche Systeme gelten folgende Identitäten (vgl. Beweis auf Seite 121)

$$[H_0, x] = \frac{\hbar}{im} p \tag{86}$$

$$(E_s - E_n) x_{sn} = \frac{\hbar}{im} p_{sn} \tag{87}$$

$$\bigwedge_{s} \frac{2m}{\hbar^{2}} \sum_{n \neq s} (E_{n} - E_{s}) |x_{sn}|^{2} = 1$$
(88)

 $(|s\rangle, |n\rangle$ stehen für Eigenzustände des Hamiltons H_0 , $Operator_{sn}$ für das Matrixelement des Operators Operator mit den Zuständen $|s\rangle, |n\rangle$).

Einsetzten von (87) in (88) liefert die äquivalente Summenregel

$$\bigwedge_{s} \frac{2}{m} \sum_{n \neq s} \frac{|p_{sn}|^{2}}{E_{n} - E_{s}} = 1$$
(89)

Mit der Definition der Oszillatorstärke vom Zustand $|s\rangle$ in den Zustand $|n\rangle$

$$f_{sn} \equiv \frac{2}{m} \frac{|p_{sn}|^2}{E_n - E_s} \tag{90}$$

läßsich (89) umschreiben

$$\bigwedge_{s} \sum_{n \neq s} f_{sn} = 1 \tag{91}$$

Ein Vergleich von der Definition der Oszillatorstärke (90) mit obigem Ausdruck für den Absorptionskoeffizienten (84) macht den starken Zusammenhang klar, der zwischen Oszillatorstärke und strahlungsinduzierter Übergangsrate herrscht. Ist beispielsweise *s* der Grundzustand, so sind alle f_{sn} nach (90) positiv und geben damit nach (91) sowas wie eine Übergangswahrscheinlichkeit an.

Verallgemeinerung auf den 3-dimensionalen Fall:

Eine Verallgemeinerung auf den 3-dimensionalen Fall läß sich unter den gleichen Annahmen wie oben sofort anschreiben

$$f_{sn}^{i} = \frac{2}{m} \sum_{n \neq s} \frac{|p_{sn}^{i}|^{2}}{E_{n} - E_{s}} \qquad (i = 1, 2, 3)$$
(92)

(Der Index i steht für die jeweilige Raumrichtung). Damit gilt folgende Summenregel

$$\bigwedge_{s} \frac{2}{m} \sum_{i=1}^{1,2,3} \sum_{n \neq s} \frac{|p_{sn}^{i}|^{2}}{E_{n} - E_{s}} = \frac{2}{m} \sum_{n \neq s} \frac{|\vec{p}_{sn}|^{2}}{E_{n} - E_{s}} = 3$$

oder

$$\bigwedge_{s} \frac{1}{3} \sum_{i=1}^{1,2,3} \sum_{n \neq s} f_{sn}^{i} = 1$$

Beweis

Beweis zu den Identitäten (86) - (88):

Es gilt allgemein

$$[H_0, x] = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}, x\right] = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left(2\left(\frac{\partial}{\partial x}x\right)\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial^2}{\partial x^2} - x\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)$$
$$= \frac{\hbar}{im} p$$

womit (86) schon bewiesen ist. Damit folgt sofort

$$\langle s \,|\, [H_0, x] \,|\, n \rangle = \frac{\hbar}{im} p_{sn}$$

Unter Verwendung der Hermitizität von H_0 , speziell der von p^2 , gilt weiters

$$\langle s | [H_0, x] | n \rangle = (E_s - E_n) x_{sn} \tag{93}$$

Gleichsetzen der letzten beiden Gleichungen liefert den Beweis zu (87). Nun gilt weiters

$$\frac{1}{2} [x, [H_0, x]] = xH_0x - \frac{1}{2}x^2H_0 - \frac{1}{2}H_0x^2$$

und unter Benützung der Vollständigkeit der $|n\rangle$ daher

$$\langle s \mid \frac{1}{2} [x, [H_0, x]] \mid s \rangle = \langle s \mid xH_0x \mid s \rangle - E_s \langle s \mid x \cdot x \mid s \rangle$$

$$= \sum_n \langle s \mid x \mid n \rangle \underbrace{\langle n \mid H_0x \mid s \rangle}_{=E_n \langle n \mid x \mid s \rangle} - E_s \sum_n \langle s \mid x \mid n \rangle \langle n \mid x \mid s \rangle$$

$$= \sum_n (E_n - E_s) |x_{sn}|^2$$

$$= \sum_{n \neq s} (E_n - E_s) |x_{sn}|^2$$

Mit (86) gilt aber auch

$$\frac{1}{2} [x, [H_0, x]] = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{im} [x, p] = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{im} \frac{\hbar}{i} \left(-\frac{\partial}{\partial x} x \right) = +\frac{\hbar^2}{2m}$$

Auswerten der letzten Gleichung als Erwartungswert vom Zustand $|s\rangle$ und gleichsetzten des Ergebnisses mit der vorletzten Gleichung liefert den Beweis zu (88).

- q.e.d ——

8.4.2 Offene Systeme, Systeme mit periodischen Randbedingungen

Eine wichtige Eigenschaft, die oben verwendet wurde, war die Hermitizität des Hamiltonoperators, bzw. die des Impulsoperators. Diese hat hier nur mehr beschränkt Gültigkeit, wie leicht aus dem folgenden abgelesen werden kann.

Für periodische Randbedingungen läß sich die Schrödingergleichung folgendermaßn anschreiben (vgl. Gleichung (48) auf Seite 106, der Einfachheit halber wieder 1-dimensional)

$$H_k u_{nk} = E_n(k) u_{nk}$$

mit

$$H_k = \frac{1}{2m}(p + \hbar k)^2 + V_0(x)$$

Diese Differentialgleichung braucht nur innerhalb einer Einheitszelle gelöst zu werden, die u_{nk} sind gitterperiodisch.

Obige Gleichung zwischen Orts- und Impulsoperator (87) in der Schreibweise von Matrixelementen gilt nicht mehr, denn hier ist im Gegensatz zu (93)

$$\langle n'k \mid [H_k, x] \mid nk \rangle \neq (E_{n'}(k) - E_n(k)) \ x_{n'n}(k)$$

Die zusätzlichen Terme erhält man durch explizites Anschreiben der Matrixelemente in Integralschreibweise. Der Impulsoperator wird nach mehrmaligem Anwenden der partiellen Integration von u_{nk} auf $u_{n'k}$ übergewälzt. Die bei der partiellen Integration anfallenden Randterme verschwinden hier aber nicht. Anstelle von (93) gilt hier (das im ganzen Ausdruck gleiche k wurde mit Ausnahme des Hamiltonoperators als Index weggelassen)

$$\langle n' | [H_k, x] | n \rangle = (E_{n'} - E_n) x_{n'n} + + \frac{\hbar}{im} \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{a} (u_{n'}^* (p \, u_n) - (p \, u_{n'}^*) \, u_n) \Big|_{0}^{a} + + \frac{\hbar}{im} \hbar k \cdot \frac{x}{a} \, u_{n'}^* u_n \Big|_{0}^{a}$$
(94)

(*a* ist die (Über-) Gitterperiode; die letzten beiden Terme werden jeweils am Rand der Einheitszelle ausgewertet).

Eine genauere Diskussion dieser Problematik findet sich im Paper [Peet93] mit dem Titel Oscillator Strength and Sum Rule for Intersubband Transitions in a Superlattice.

Bemerkenswert an (94) ist, daßlie Randterme verschwinden, wenn die u_n und deren Ableitung am Rand verschwinden. Das wäre auf alle Fälle für gebundene Systeme erfüllt, wo die Eigenfunktionen nur auf einem begrenzten räumlichen Bereich merklich von null verschieden sind. Hier aber, für periodische Randbedingungen, ergeben sich Zusatzterme. Und so stellt sich die Frage, welche der beiden Matrixelemente, das Impuls- oder das Ortsmatrixelement, für die Oszillatorstärke entscheidend ist. Aus Gleichung (76) ist ersichtlich, daßler ursprünglich angesetzte Störhamilton den Impulsoperator und nicht den Ortsoperator enthält. Ebenso verhält es sich beim Ausdruck für den Absorptionskoeffizienten (84). Als die naheliegenste Wahl für die Oszillatorstärke ergibt sich damit Gleichung (90)

$$f_{sn}(\vec{k}) \equiv \frac{2}{m} \sum_{n \neq s} \frac{\left| p_{sn}(\vec{k}) \right|^2}{E_n(\vec{k}) - E_s(\vec{k})}$$

Mit dieser Wahl ist es allerdings möglich, $da\beta |f_{sn}(\vec{k})|^2 > 1$, da nur exakt vertikale Impulse miteinbezogen wurden. Man vergleiche dazu explizit gerechnete 1dimensionale Beispiele in [Peet93]. In diesem Paper wurde auch gezeigt, daßerst mit Mittelung über die erste Brillouinzone eine zu (91) äquivalente Summenregel angeschrieben werden kann. Diese sei der Vollständigkeit halber auch angeführt (1-dimensional)

$$\sum_{n \neq s} \left(\int_{1.BZ} \frac{dk}{2\pi} f_{sn}(k) \right) = 1$$
(95)

Kapitel 9 Anhang C - Stromrauschen

Elektrische Ströme setzen sich aus diskreten Teilchen mit disktreten Ladungen, hier Elektronen, zusammen. Damit steht in unmittelbarem Zusammenhang, daßdiese gewissen Schwankungen unterliegen. Einmal passieren etwas mehr Ladungen als durchschnittlich durch eine Querschnittsfläche, ein anderes Mal weniger. Für statistisch verteilte hypothetische Strompulse läß sich damit beispielsweise der im folgenden abgeleitete Ausdruck für die spektrale Rauschverteilung ableiten (bezüglich Fourierintegrale siehe Anhang A über Fouriertransformation). Literatur zu diesem Teil ist beispielsweise in [Yariv85] zu finden.

9.1 Spektrale Rauschverteilung für Signal aus statistischen Pulsen

Das Signal setzt sich aus vielen gleichen, statistisch verteilten Einzelpulsen zum Zeitpunkt t_i (Index i) zusammen, von denen jeder die gleiche Form $f(t - t_i)$ hat. Beispiele sind der Photostrom und die Elektronenemission in der Anordnung von Abb. 71 weiter unten. Für einen Beobachtungszeitraum T ergibt sich so für das Gesamtsignal

$$S_T(t) = \sum_{i=1}^{N_T} f(t - t_i) \quad \text{wobei} \quad 0 \le t \le T$$
(96)

T wird für gewöhnlich als Auflösungs- oder Integrationskonstante der Meßnordnung bezeichnet. N_T ist die Anzahl der Ereignisse im Zeitintervall T. Fouriertransformation von (96) liefert

$$S_T(\omega) = \sum_{i=1}^{N_T} f_i(\omega)$$
(97)

wobei $f_i(\omega)$ die Fouriertransformierte von $f_i(t) \equiv f(t-t_i)$ ist (vgl. Anhang A über

Fouriertransformation)

$$f_i(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \ f(t-t_i) e^{-i\omega t} = \frac{1}{2\pi} e^{-i\omega t_i} \int_{-\infty}^{\infty} dt \ f(t) e^{-i\omega t} \equiv e^{-i\omega t_i} f(\omega)$$
(98)

Für das Absolutquadrat des Fourierkoeffizienten des Gesamtsignals ergibt sich

$$|S_T(\omega)|^2 = |f(\omega)|^2 \sum_{i}^{N_T} \sum_{j}^{N_T} e^{-i\omega(t_j - t_i)}$$
(99)

Im Grenzwert des Scharmittels und vieler, statistisch verteilter Einzelpulse wird daraus (für $i \neq j$ ist keine Korrelation der Signale gegeben!)

$$\left\langle |S_T(\omega)|^2 \right\rangle = |f(\omega)|^2 \sum_{i}^{\langle N_T \rangle} \sum_{j}^{\langle N_T \rangle} \underbrace{\left\langle e^{-i\omega(t_j - t_i)} \right\rangle}_{\delta_{ij}} = \left\langle N_T \right\rangle |f(\omega)|^2 \tag{100}$$

Auf der Suche nach einer Verknüpfung mit der spektralen Intensitätsverteilung $S_T(\omega)$ sei folgender Ausdruck der Ausgangspunkt:

$$P = \left\langle \frac{1}{T} \int_{0}^{T} dt \left[S_{T}(t) \right]^{2} \right\rangle \equiv \int_{0}^{\infty} d\omega \ I_{R}(\omega)$$
(101)

Nun ergibt aber der mittlere Term (vgl. Anhang A über Fouriertransformation)

$$\frac{1}{T}\int_{0}^{T} dt \left[S_{T}(t)\right]^{2} = \frac{1}{T}\int_{0}^{T} dt S_{T}(t)\int_{-\infty}^{\infty} d\omega S_{T}(\omega) e^{i\omega t} =$$
$$= \frac{2\pi}{T}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega S_{T}(\omega)S_{T}(-\omega) = \frac{2\pi}{T}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left|S_{T}(\omega)\right|^{2} = \frac{4\pi}{T}\int_{0}^{\infty} d\omega \left|S_{T}(\omega)\right|^{2}$$

Einsetzen dieses Ergebnisses in (101) und Verwenden von (100) liefert

$$I_R(\omega) \equiv 4\pi \underbrace{\frac{\langle N_T \rangle}{T}}_{\equiv \bar{N}} |f(\omega)|^2$$
(102)

wobei \overline{N} die mittlere Ereignisrate darstellt. Mit dem Übergang von $\omega \to 2\pi\nu$, also $I_R(\omega) \ d\omega = I_R(\omega(\nu)) \times 2\pi \ d\nu \equiv I_R(\nu) \ d\nu$, kommt man so zum Endresultat

$$I_R(\nu) = 8\pi^2 \bar{N} |f(\omega(\nu))|^2$$
(103)

Für die Berechnung der Rauschleistung am Gesamtsignal gilt

$$P = \int_{\nu_1}^{\nu_2} d\nu \ I_R(\nu) \approx I_R(\nu) \ \Delta\nu \tag{104}$$

wobei $\Delta \nu \equiv \nu_2 - \nu_1$ die Bandbreite der angeschlossenen Elektronik darstellt. Die letzte Näherung gilt natürlich nur, wenn die Intensität $I_R(\nu)$ im Intervall $\Delta \nu$ nicht zu stark variiert.

9.2 Beispiel: Shot Noise

Zur Ableitung eines Ausdrucks für den Shot Noise wird folgende schematische, experimentelle Anordnung gewählt (Kondensatoranordnung):



Abb. 71: Beispielanordnung zum Ableiten des Shot Noise

Elektronen werden statistisch von der linken Platte A heraus emittiert. Sie beschleunigen dann im gegebenen elektrischen Feld zur rechten Platte B. Aus der mittleren Rate für die Elektronenemission aus A ergibt sich der mittlere Strom ²⁰

 $^{^{20}}$ o.B.d.A. wird hier der Strom positiv angenommen. Eigentlich wäre das Vorzeichen abhängig vom Vorzeichen der angelegten Spannung. Bei dieser Anordnung sei halt per definitionem der Strom positiv.

$$\langle I \rangle = e\bar{N}$$
 $\langle I \rangle$ mittlerer Strom
 \bar{N} mittlere Emissionsrate (105)
 e Elementarladung (positiv!)

Als Strompuls für ein einzelnes emittiertes Elektron ergibt sich²¹

$$i_e(t) = \frac{ev(t)}{d}$$
 v Geschwindigkeit des Elektrons
d Abstand der Platten (106)

Fouriertransformation von (106) ergibt

$$i_e(\omega) = \frac{e}{2\pi d} \int_0^\tau dt \, v(t) \, e^{-i\omega t} \tag{107}$$

wobei τ die Zeit ist, in der das Elektron von A nach B fliegt. Nun ist aber τ im allgemeinen klein verglichen mit Periodendauern von Frequenzen ω , die für Meßerioden relevant sind. Mit der Annahme

²¹ Ableitung von (106): Angenommen, in Abb. 71 ist zu Beginn auf der linken Platte eine Ladung $Q_1 = +Q_0$ und auf der rechten eine Ladung $Q_2 = -Q_0$. Die Spannung zwischen den Platten ist auf dem Wert U_0 konstant gehalten. Nun löst sich von der linken Platte ein Teilchen mit Ladung q, bewegt sich zur rechten Platte und ist gerade an der Position x_1 . Mit den Annahme von unendlich ausgedehnten Kondensatorplatten in Abb. 71 bei x = 0 und x = d mit der jeweiligen Ladung $Q_{1,2}$ an den Innenflächen und einer ebenfalls unendlich ausgedehnten Fläche mit Ladung q an der Stelle x_1 dazwischen folgt mithilfe der Maxwellgleichung

$$\frac{dE}{dx} = \frac{\rho}{\varepsilon}$$

und mithilfe der Randbedingungen

$$U_0 = \int_0^d dx \ E(x) = const$$
$$0 = Q_1 + q + Q_2$$

für die Ladung auf den Platten

$$Q_1 = Q_0 - q \frac{d - x_1}{d}$$
$$Q_2 = Q_0 - q \frac{x_1}{d}$$

Damit folgt für den Strom I, der auf, bzw. von den Platten fließ

$$I = \frac{dQ_1}{dt} = -\frac{dQ_2}{dt} = \frac{q}{d}\frac{dx_1}{dt}$$

womit der Beweis gegeben ist.

$$\omega \tau \ll 1 \tag{108}$$

folgt aus (107)

$$i_e(\omega) \approx \frac{e}{2\pi d} \int_0^{\tau} dt \, \frac{dx}{dt} \cdot 1 = \frac{e}{2\pi}$$
 (109)

Für die spektrale Verteilung der Rauschintensität ergibt sich somit aus (103) unter Verwendung von (105)

$$I_R(\nu) = 8\pi^2 \bar{N} \left| \frac{e}{2\pi} \right|^2 = 2e \left\langle I \right\rangle \tag{110}$$

Das Endresultat für den Shot Noise lautet somit

$$I_R(\nu) = 2e \langle I \rangle \tag{111}$$

Man beachte, daß $I_R(\nu)$ in (111) unabhängig von ω ist!

9.3 Beispiel: Johnson Rauschen

Man denke sich ein Stück Festkörper (=Widerstand), in dem sich die Elektronen bewegen, ständig gestreut durch Stöß mit Atomrümpfen, durch Stöß untereinander. Schematisch ist dies in Abb. 72 dargestellt.



Abb. 72: Schematische Darstellung der Ursache für Stromrauschen in einem Widerstand - statistische Bewegung von Elektronen

9.3.1 Ableitung der Leitfähigkeit σ (Drude Modell)

Diese Ableitung ist analog zum Drudemodell. Genauere Informationen dazu finden sich beispielsweise in [AshMerm76, 1-27].

Je nach Stoßvahrscheinlichkeit der Elektronen mit anderen (Quasi)Teilchen können sich diese unterschiedlich schnell durch einen Festkörper bewegen. Mit der Annahme, daßdie Wahrscheinlichkeit pro Zeit für einen Streuprozeßeines Elektrons eine Konstante ist, läßsich die makroskopische Größ σ (=Leitfähigkeit) ableiten. Das wird im folgenden vorgeführt.

An den Widerstand wird eine periodisch variierende Spannung angelegt

$$E(t) = \operatorname{Re}\{E_0 e^{i\omega t}\} \quad (E_0 \in R)$$
(112)

Jedes Elektron wird in diesem elektrischen Feld beschleunigt. Nach einem Stoß nach einem Streuprozeßei die Richtung der Geschwindigkeit statistisch verteilt. Das heiß das Elektron bewegt sich in jede Richtung mit gleicher Wahrscheinlichkeit, hat also im Mittel Geschwindigkeit gleich null. Dann wird das Elektron vom elektrischen Feld beschleunigt, bis es wieder gestreut wird. Diese Überlegungen rechtfertigen folgenden Ansatz für den Strompuls eines Elektrons (analog zum Ansatz (106) weiter oben):

$$i_{q,\tau}(t) \equiv \frac{qv_x}{d} = \frac{q}{d} \int_0^t dt' \frac{qE(t')}{m^*} \qquad 0 \le t \le \tau$$

$$= 0 \qquad \qquad sonst$$
(113)

q steht für die Ladung (hier q = -e), m^* für die Masse eines Elektrons, d für die Länge des Materialstücks, des Widerstandes. Mit diesem Ansatz wird das Elektron nach der Zeit τ wieder gestreut.

Um die makroskopische Größ σ zu berechnen, muß(113) über τ gemittelt werden, entsprechend der Verteilung

$$p(\tau) = \frac{1}{\tau_0} e^{-\frac{\tau}{\tau_0}}$$
(114)

Diese Verteilungsfunktion erfüllt obige Eigenschaft der konstanten Stoßvahrscheinlichkeitsrate und ist auf 1 normiert, wie leicht zu überprüfen ist.

Mittelung von (113) mittels (114) führt nun unter Benützung von (112) und der Annahme

$$\omega \tau_0 \ll 1 \tag{115}$$

zu

$$i_{q}(t_{0}) \equiv \langle i_{q,\tau}(t_{0}) \rangle_{\tau} = \int_{0}^{\infty} d\tau \cdot \frac{1}{\tau_{0}} e^{-\frac{\tau}{\tau_{0}}} \cdot \frac{q}{d} \int_{0}^{\tau} dt' \frac{qE(t_{0} - \tau + t')}{m^{*}} \stackrel{(112)}{=} \\ = \frac{q^{2}}{m^{*}d} \operatorname{Re} \left\{ \int_{0}^{\infty} \frac{d\tau}{\tau_{0}} e^{-\frac{\tau}{\tau_{0}}} \cdot \frac{E_{0}e^{i\omega t_{0}}}{i\omega} e^{-i\omega\tau} (e^{i\omega\tau} - 1) \right\} = \\ = \frac{q^{2}}{m^{*}d} \frac{1}{\omega} \operatorname{Re} \left(E_{0}e^{i\omega t_{0}} \underbrace{\left\{ \frac{1}{i} \left(1 - \frac{1}{\tau_{0}} \frac{-1}{-i\omega - \frac{1}{\tau_{0}}} \right) \right\}}_{=\frac{1}{i} \left(1 - \frac{1}{\tau_{1} + i\omega\tau_{0}} \right) = \frac{\omega\tau_{0}}{1 + i\omega\tau_{0}}} \\ = \frac{q^{2}}{m^{*}d} \frac{1}{\omega} \cdot \operatorname{Re} \left\{ \frac{\omega\tau_{0}}{1 + i\omega\tau_{0}} \cdot E_{0}e^{i\omega t_{0}} \right\} \stackrel{(115)}{\approx} \frac{q^{2}}{m^{*}d} \frac{\tau_{0}}{1 + (\omega\tau_{0})^{2}} \cdot E(t_{0}) (116)$$

(116) ist der mittlere Strom für 1 Elektron im elektrischen Wechselfeld mit Frequenz ω . Für die Näherung $\omega \tau_0 \gg 1$ würde der Strom i_q in (116) bezüglich dem *E*-Feld um $\frac{\pi}{2}$ verschoben sein und mit ω^{-1} abfallen, wie auch aus obiger Ableitung zu ersehen ist. Die Phasenverschiebung hätte das Verschwinden von Energieabsorption zur Folge.

Zur Berechnung der Leitfähigkeit werden noch folgende Identitäten benötigt:

Gesamtstrom aller Elektronen, die sich im Widerstand befinden (N steht für die Gesamtzahl der Elektronen im Widerstand, n für die Elektronendichte, V für das Volumen des Widerstandes):

$$I = i_q N = i_q n V \tag{117}$$

Koppelung von Stromdichte mit Stromstärke (*A* steht für die Querschnittsfläche der Probe):

$$Strom I = jA \tag{118}$$

und Ohmsches Gesetz zur Einführung der Leitfähigkeit σ :

Stromdichte
$$j = \sigma E$$
 (119)

Kombination der letzten drei Gleichungen liefert

$$\sigma = \frac{j}{E} = \frac{I}{AE} = \frac{i_q nV}{AE}$$

Einsetzen von (116)

$$\sigma = \frac{q^2}{m^* d} \frac{\tau_0}{1 + (\omega \tau_0)^2} E \cdot \frac{n}{E} \underbrace{\frac{V}{A}}_{=d} = \frac{nq^2}{m^*} \frac{\tau_0}{1 + (\omega \tau_0)^2}$$

Das Endresultat für die Leitfähigkeit σ lautet also

$$\sigma = \frac{nq^2}{m^*} \frac{\tau_0}{1 + (\omega\tau_0)^2}$$
(120)

9.3.2 Ableitung des Ausdrucks für das Johnson Rauschen (=Widerstandsrauschen)

Im Gegensatz zur letzten mathematischen Abhandlung wird hier ein Festkörper (=Widerstand) in einem konstanten äußren elektrischen Feld E betrachtet

$$E = const \tag{121}$$

Nun resultiert Stromrauschen daraus, daßelektrische Ströme aus diskreten Teilchen (Elektronen, ...) bestehen. Diese führen bei E = 0 genauso ihre thermische Bewegung aus. So ist klar, daßauch bei keinem äußren angelegten elektrischen Feld Stromrauschen auftritt, also Stromfluktuationen, die sich im Mittel wegheben. Damit verbunden ist Leistungsdissipation, die durch Kopplung an die Umgebung (Wärmestrahlung,...) wieder wettgemacht wird.

Entsprechend den geänderten Verhältnissen sieht auch der Ansatz für den Strompuls eines einzelnen Elektrons zwischen zwei Stößn anders aus (vergleiche (113)). Nun spielt die thermische Bewegung der Elektronen die entscheidende Rolle, die oben bei der Berechnung der makroskopischen Größ σ weggelassen werden konnte (weil im Mittel gleich null).

Die thermische Geschwindigkeit ist viel größr angenommen als jener Beitrag, der zwischen zwei Stößn durch das elektrische Feld generiert wird. Der zweite Term wird daher vernachlässigt.

Der Strompuls hat damit das Aussehen einer konstanten Geschwindigkeit ungleich null zwischen t = 0 und $t = \tau$. Ansonsten ist er gleich null gesetzt.

Zur Berechnung des Stromrauschens wird das Absolutquadrat der Fouriertransformierten des Strompulses benötigt:

Fouriertransformation

$$i_{q,v,\tau}(\omega) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \ i_{q,v,\tau}(t) \ e^{-i\omega t} =$$
$$= \frac{1}{2\pi} \frac{qv_x}{d} \int_{0}^{\tau} dt \ e^{-i\omega t} = \frac{1}{2\pi} \frac{qv_x}{d} \frac{e^{-i\omega\tau} - 1}{-i\omega}$$

Absolutquadrat

$$|i_{q,v,\tau}(\omega)|^2 = \left(\frac{1}{2\pi}\frac{qv_x}{d\omega}\right)^2 \left(2 - 2\operatorname{Re}\left\{e^{-i\omega\tau}\right\}\right)$$
(123)

Der nächste Schritt besteht in der Mittelung, zuerst über τ (wie oben), aber hier zusätzlich noch über die Geschwindigkeit, was sich aber letztendlich als nicht allzu schwierig herausstellen wird ²².

Zunächst die Mittelung von (123) über τ mit der Verteilungsfunktion von (114):

$$\left\langle |i_{q,v,\tau}(\omega)|^{2} \right\rangle_{\tau} = \int_{0}^{\infty} d\tau \cdot \frac{1}{\tau_{0}} e^{-\frac{\tau}{\tau_{0}}} \cdot |i_{q,v,\tau}(\omega)|^{2} = \\ = \left(\frac{1}{2\pi} \frac{qv_{x}}{d\omega}\right)^{2} 2 \operatorname{Re} \underbrace{\left\{ \int_{0}^{\infty} d\tau \ \frac{1}{\tau_{0}} e^{-\frac{\tau}{\tau_{0}}} \left(1 - e^{-i\omega\tau}\right) \right\}}_{=1 - \frac{1}{\tau_{0}} \frac{-1}{-\left(i\omega + \frac{1}{\tau_{0}}\right)^{2}} = \frac{1}{1 + i\omega\tau_{0}}} \\ = \left(\frac{1}{2\pi} \frac{qv_{x}}{d\omega}\right)^{2} 2 \frac{\left(\omega\tau_{0}\right)^{2}}{1 + \left(\omega\tau_{0}\right)^{2}} = \frac{1}{2} \left(\frac{q}{\pi d}\right)^{2} \frac{\tau_{0}^{2}}{1 + \left(\omega\tau_{0}\right)^{2}} v_{x}^{2} \right)^{2} \left(\frac{1}{2\pi} \frac{qv_{x}}{d\omega}\right)^{2} \left(\frac{1}{2\pi} \frac{qv_{x}}{d\omega}\right)$$

²² hier wird angenommen, daßdie Mittelungen über τ und v_x getrennt voneinander durchgeführt werden können. Für die Verteilungsfunktionen heißdies: $p(\tau, v_x) = p(\tau) \cdot p(v_x)$. Voraussetzung für diese Annahme ist, daßdie beiden Größn, Streuzeit und Geschwindigkeit, nicht korreliert sind.

Mittelung über v_x

$$\left\langle \left\langle \left| i_{q,v,\tau}(\omega) \right|^2 \right\rangle_{\tau} \right\rangle_{v_x} = \frac{1}{2} \left(\frac{q}{\pi d} \right)^2 \frac{\tau_0^2}{1 + \left(\omega \tau_0 \right)^2} \left\langle v_x^2 \right\rangle \tag{124}$$

Bei thermischer Geschwindigkeitsverteilung gilt

$$\frac{1}{2}m^*\left\langle v_i^2\right\rangle = \frac{1}{2}kT \qquad i=x,y,z$$

wobei k die Boltzmankonstante darstellt. Damit wird aus (124)

$$\left\langle \left\langle \left| i_{q,v,\tau}(\omega) \right|^2 \right\rangle_{\tau} \right\rangle_{v_x} = \frac{1}{2} \left(\frac{q}{\pi d} \right)^2 \frac{\tau_0^2}{1 + (\omega \tau_0)^2} \frac{kT}{m^*}$$

Für die spektrale Verteilung der Rauschintensität erhält man damit aus (103)

$$I_{R}(\nu) = 8\pi^{2}\bar{N} \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{q}{\pi d}\right)^{2} \frac{\tau_{0}^{2}}{1 + (\omega\tau_{0})^{2}} \frac{kT}{m^{*}} = 4kT \cdot \bar{N} \frac{q^{2}}{m^{*}d^{2}} \frac{\tau_{0}^{2}}{1 + (\omega\tau_{0})^{2}}$$
(125)

 \bar{N} stellt die mittlere Stoßate dar. Bei einem Widerstand mit Volumen V, Elektronendichte n und mittlerer Stoßeit τ_0^{23} wird diese zu

$$\bar{N} = \frac{nV}{\tau_0} \tag{126}$$

(126) eingesetzt in (125) liefert

$$I_{R}(\nu) = 4kT \cdot \frac{q^{2}}{m^{*}d^{2}} \frac{nV}{\tau_{0}} \frac{\tau_{0}^{2}}{1 + (\omega\tau_{0})^{2}} = 4kT \cdot \frac{V}{d^{2}} \frac{nq^{2}}{m^{*}} \frac{\tau_{0}}{1 + (\omega\tau_{0})^{2}} = \frac{4kT}{R(\nu)}$$

²³ mittlere Stoßeit = $\int_{0}^{\infty} d\tau \, \tau \, \frac{1}{\tau_0} e^{-\frac{\tau}{\tau_0}} \stackrel{s \equiv \frac{\tau}{\tau_0}}{=} \tau_0 \int_{0}^{\infty} ds \, s \, e^{-s} = \tau_0$

wobei der Widerstand R der Probe unter Verwendung von (120) und den Definitionen von (118) gegeben ist durch

$$\frac{1}{R(\nu)} = \frac{V}{d^2} \sigma \Big|_{\omega = 2\pi\nu} = \frac{A \sigma}{d} \Big|_{\omega = 2\pi\nu}$$

was dem konventionellen Zusammenhang des Widerstandes mit der Leitfähigkeit entspricht.

Das Endresultat für die Intensität des Stomrauschens eines Widerstandes, genannt das Johnson Rauschen, ist also zusammengefaß

$$I_R(\nu) = \frac{4kT}{R(\nu)} \tag{127}$$

Die Näherungen, die für dieses Ergebnis gemacht wurden, waren:

- * $\omega \tau_0 \ll 1$ in Gleichung (115)
- * au_0 und v_x sind nicht miteinander korreliert (vergleiche Fußote auf Seite (22))

Stromschwankungen drücken sich unmittelbar auch in Spannungsschwankungen aus. Für das Rauschquadrat der Spannung ergibt sich

$$u^{2} = (i R)^{2} = I_{R}(\nu) \cdot R^{2} = 4kT R(\nu)$$
(128)

Das Ersatzschaltbild sowohl für das Stromrauschen als auch für das Spannungsrauschen ist in Abb. 73 gegeben. Es sei betont, daßdiese äquivalent sind. Sie stellen ja auch den gleichen physikalischen Sachverhalt dar. $\Delta \nu$ steht für den Frequenzbereich der angeschlossenen Elektronik.



Ersatzschaltbild für Spannungsrauschen eines Widerstandes



Ersatzschaltbild für Stromrauschen eines Widerstandes

Abb. 73: Ersatzschaltbilder für Widerstandsrauschen

Kapitel 10 Literaturverzeichnis

Die Referenznamen auf die jeweilige Literatur wurden so gewählt, daßsie möglichst aussagekräftig waren. Sie stellen daher stets eine Kombination des Namens des Autors mit der Jahreszahl der Veröffentlichung dar.

- [Allen76] S. J. Allen, Jr. and D. C. Tsui, On the absorption of infrared radiation by electrons in semiconductor inversion layer, Solid State Communications 20, 425 (1976)
- [AshMerm76] Neil W. Ashcroft, N. David Mermin, Solid State Physics, Verlag Holt, Rinehart and Winston, 1976
 - [Burt88] M. G. Burt, An exact formulation of the envelope function method for the determination of electronic states in semiconductor microstructructures, Semicond. Sci. Technol. **3**, 739 (1988)
- [Callaway64] Joseph Callaway, Energy Band Theory, Academic Press, 1964
 - [DST91] O. Madelung and R. Poerschke, Data in Science and Technology, Semiconductors - Group IV Elements and III-V Compounds, Springer Verlag, 1991
 - [Fick68] Eugen Fick, Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie, Akademische Verlagsgesellschaft Frankfurt am Main, 1968
- [FromDiss94] T. Fromherz, Infrared Spectroscopy of Electronic and Vibrational Excitations in Semiconductor Quantum Wells an Superlattices, Dissertation, 1994
 - [From94] T. Fromherz, E. Koppensteiner, M. Helm, G. Bauer, J. F. Nützel and G. Abstreiter, Hole energy levels and intersubband absorption in modulation-doped $Si / Si_{1-x}Ge_x$ multiple quantum wells, Phys. Rev. B **50**, 15073 (1994)
 - [From96] T. Fromherz, P. Kruck, M. Helm, G. Bauer, J. F. Nützel and G. Abstreiter, Transverse magnetic and transverse electric polarized intersubband absorption and photoconductivity in p-type SiGe quantum wells, Appl. Phys. Lett. 68, 3611 (1996)

- [Kingston78] R. H. Kingston, Detection of Optical and Infrared Radiation, Springer Verlag, 1978
 - [Kittel91] Ch. Kittel, Einführung in die Festkörperphysik, 9. Auflage, Verlag Oldenbourg, 1991
 - [Kruck96] P. Kruck, A. Weichselbaum, M. Helm, T. Fromherz, G. Bauer, J. F. Nützel and G. Abstreiter, Polarization dependent intersubband absorption and normal-incidence infrared detection in p-type Si/SiGe quantum wells, Superlattices and Microstructures (accepted for publication)
 - [Levine91] B. F. Levine, S. D. Gunapala, J. M. Kuo, S. S. Pei and S. Hui, Normal incidence hole intersubband absorption long wavelength GaAs / $Al_xGa_{1-x}As$ quantum well infrared detectors, Appl. Phys. Lett. **59**, 1864 (1991)
 - [Levine93] B. F. Levine, Quantum well infrared photodetectors, J. Appl. Phys. **74**, R1 (1993)
 - [Li96] Daniel C. Wang, Gijs Bosman and Sheng S. Li, Noise characterization and device parameter extraction of a p-type strained layer quantum-well infrared photodetector, J. Appl. Phys. **79**, 1486 (1996)
 - [Liu96] H. C. Liu, The Basic Physics of Photoconductive Quantum Well Infrared Detectors, book chapter in Longwavelength Infrared Detectors, edited by M. Razeghi, K. Ploog, Gordon and Breach, 1996
- [LuttKohn55] J. M. Luttinger, W. Kohn, Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields, Phys. Rev. 97, 869 (1955)
 - [Merz70] Eugen Merzbacher, Quantum Mechanics (2nd edition), Verlag Wiley, 1970
 - [MilEber88] Milonni und Eberly, Lasers, A Wiley Interscience Publication, 1988
 - [Peet93] F. M. Peeters, A. Matulis, M. Helm, T. Fromherz, W. Hilber, Oscillator strength and sum rule for intersubband transitions in a superlattice, Phys. Rev. B 48, 12008 (1993)
 - [People90] R. People and S. K. Sputz, Band nonparabolicities in latticemismatch-strained bulk semiconductor layers, Phys. Rev. B 41, 8431 (1990)
 - [People92] R. People, Broadband ($8-14 \mu m$), normal incidence, pseudomorphic Ge_xSi_{1-x} / Si strained-layer infrared photodetector operating between 20 and 77K, Appl. Phys. Lett. **61**, 1122 (1992)

- [Rieger93] M. M. Rieger and P. Vogl, Electronic-band parameters in strained $Si_{1-x}Ge_x$ alloys on $Si_{1-y}Ge_y$ substrates, Phys. Rev. B 48, 14276 (1993)
- [Rieke94] G. H. Rieke, Detection of Light from the Ultraviolet to the Submillimeter, Cambridge University Press, 1994
- [Schwabl93] F. Schwabl, Quantenmechanik, 4. Auflage, Springer Verlag, 1993
 - [Yariv85] A. Yariv, Optical Electronics, 3rd edition, Verlag Wiley, 1985
 - [Yariv89] A. Yariv, M. A. Kinch, Performance limitations of GaAs/AlGaAs infrared superlattices, Appl. Phys. Lett. 55, 2093 (1989)
 - [Zan95] S. Zanier, J.M. Berroir, Y. Guldner, J. P. Vieren, I. Sagnes, F. Glowacki, Y. Campidelli and P. A. Badoz, Free-carrier and intersubband infrared absorption in p-type $Si_{1-x}Ge_x / Si$ multiple quantum wells, Phys. Rev. B **51**, 14311 (1995)

Lebenslauf

geboren	22. Juli 1972
in	Steyr
Heimatort	Pierbach
1978 - 1982	Volksschule in Pierbach
1982 - 1990	Humanistisches Gymnasium Petrinum in Linz
1990	Matura
1990 - 1996	Studium der 'Technischen Physik' an der Johannes Kepler Universität in Linz

Danke



 $\overline{)}$

An dieser Stelle sei ein Dankeschön gesagt all jenen, die meine bisherige Ausbildung ermöglicht haben, allen voran, meinen Eltern. Ebenfalls aber auch ein Danke an alle, die mich bei dieser Diplomarbeit begleitet und mit Rat und Tat unterstützt haben, meinen Betreuern Hrn. Manfred Helm und Hrn. Peter Kruck, und anderen Diplomanden und Angestellten am Halbleiterinstitut der Uni Linz. DANKE.