

# Laserspektroskopie an GaAs Heterostrukturen

Wieland A Worthoff

7. Februar 2007

## 1 Vorschau

Dieses Skript soll einen Überblick über Spektroskopie von Halbleitern anhand von AlGaAs/GaAs Heterostrukturen geben. Der räumliche Einschluss von Teilchen in Quantentöpfen wird in Bezug auf die Bandstruktur der Halbleiter gebracht und die Erzeugung von Photolumineszenzspektren aus Exzitonzerfall erleutert. Ein mögliches Experiment zur Bestimmung eines solchen Spektrums wird vorgestellt.

## 2 Einschluß von Teilchen in einem Potential

### 2.1 Quantentöpfe

Ein Quantentopf ist ein Potential, welches zur Einschränkung der Beweglichkeit eines Teilchens im Raum führt. Im Idealfall lässt sich ein solcher Quantentopf als eine Region mit konstantem Potential, welche von einem unendlichen Potential umgeben ist, beschreiben. Die Randbedingungen führen bei der Lösung der Schrödinger Gleichung zu einer Quantisierung der erlaubten Energieniveaus, in denen sich ein Teilchen befinden darf. Diese Quantisierung ist abhängig von der Breite des Topfes. Die Differenz zwi-

schen zwei sogenannten Levels vergrößert sich mit steigender Quantenzahl  $n$ .

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \quad (1)$$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi = E\psi \quad (2)$$

Die Schrödinger Gleichung in der eindimensionalen Form reduziert nach Einsetzen des Potentials für die Wellenfunktion innerhalb des Topfs zu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi = E\psi \quad (3)$$

Bei einer stationären Lösung ergibt sich unter der Erwartung stehender Wellen eine Quantisierung der erlaubten Energie des Teilchens.

$$E_n = \frac{1}{2m} \left( \frac{n\pi\hbar}{L} \right)^2 \quad (4)$$

Bei einem sogenannten endlichen Quantentopf, wo das Potential zwar stufenförmig verläuft, aber ausserhalb des Intervalls  $\{0, L\}$  nicht unendlich ist, tritt die Diskretisierung auch auf, wenn die Teilchenenergie niedriger ist als das Potential ausserhalb des Intervalls. Durch das Erzwingen von

Kontinuität an den Rändern des Quantentopfs und des Streichens ungebundener Lösungen (die Wellenfunktion muss für  $x \rightarrow \pm\infty$  verschwinden) kann die Wellenfunktion in allen Abschnitten bestimmt werden. Interessant ist hier insbesondere der exponentielle Zerfall der Funktion in den Topfwänden und die daraus hervorgehende endliche Wahrscheinlichkeit das Teilchen auch dort vorzufinden sind (die Grundlage des Tunnelns).

## 2.2 Quantentopfähnliche Potentiale in höheren Dimensionen

Bei der zweidimensionalen Begrenzung eines Teilchens spricht man von einem Quantendraht. Diese Drähte sind unter anderem wegen ihrer elektrischen Eigenschaften interessant.

$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq L_x \\ & 0 \leq y \leq L_y \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \quad (5)$$

In einem 'Quantum dot' sind Teilchen in allen räumlichen Dimensionen eingeschränkt, das führt zu einer kompletten Diskretisierung der Energielevel. Ein 'dot' kann zwar von der Energielevelstruktur her mit einem Atom verglichen werden, allerdings ist eine Kugelsymmetrie meist nicht gegeben. Da man im Gegensatz zu Atomen, die Niveaus durch die Dimensionierung in der Fertigung eines solchen 'dot' bestimmen kann, ist es zum Beispiel möglich Lichtquellen unterschiedlicher Wellenlänge aus dem gleichen Material zu produzieren.

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq L_x \\ & 0 \leq y \leq L_y \\ & 0 \leq z \leq L_z \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \quad (6)$$

## 3 Heteroübergang und Andersons Regel

Bringt man zwei unterschiedliche Halbleiter zusammen spricht man von einem sogenannten Heteroübergang. Die Struktur der Energieniveaus ist nun ortsabhängig. Um die relative Lage der unteren Leitungsbandkante zu bestimmen, benötigt man lediglich die Elektronenaffinitäten<sup>1</sup> ( $\chi$ ) und die Bandlücken der beiden Halbleiter ( $E_g$ ). Andersons Regel besagt, dass die Differenz zwischen den Energien der Leitungsbandkanten  $\delta E_c$  der Differenz der Elektronenaffinitäten  $q\delta\chi$  entspricht:

$$\delta E_c = q(\chi_2 - \chi_1) \quad (7)$$

Ist  $\delta E_c$  bekannt, lässt sich hieraus auch die obere Valenzbandkante  $\delta E_v$  bestimmen.

$$\delta E_v = E_{g_1} - \delta E_c - E_{g_2} \quad (8)$$

In Abbildung 1 sind AlGaAs und GaAs, bevor sie zu einer Heterostruktur zusammengeführt werden, dargestellt. Da Andersons Regel in der Realität nur bedingt zutrifft, werden diese Werte meist experimentell ermittelt. So ist zum Beispiel bekannt, dass die Differenz der direkten Bandlücken von AlGaAs und GaAs in etwa zu einem Drittel im Valenzband untergebracht ist.

$$\begin{aligned} \delta E_c &= 2(E_{g_1} - E_{g_2})/3 \\ \delta E_v &= (E_{g_1} - E_{g_2})/3 \end{aligned} \quad (9)$$

Kommt es zum Kontakt zwischen zwei Halbleitern, gleichen sich die Fermienergien an. Das Kontaktpotential (korrespondierend zur Energiedifferenz der Fermienergien)

<sup>1</sup> Unter Elektronenaffinität versteht man die Energie, die benötigt wird, um ein Elektron eines einfach negativ geladenen Ions zu befreien. Sie ist eine Stoffeigenschaft.

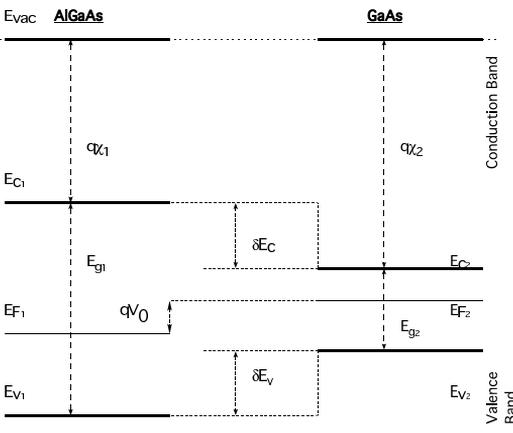


Abbildung 1: Die Bandstruktur der beiden Halbleiter AlGaAs und GaAs im Vergleich. Man beachte die unterschiedlichen Bandlücken und Fermienergien.

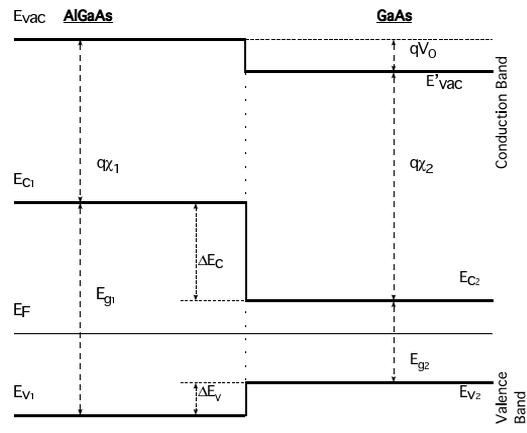


Abbildung 2: Eine schematische Darstellung der einer AlGaAs/GaAs Heterostruktur. Die Übergangsregion ist bewusst stufenförmig dargestellt.

führt im Gleichgewicht zur Bildung der Erschöpfungszone. Der Bandverlauf in dieser Region kann mit Hilfe der Poisson Gleichung bestimmt werden, wenn man kontinuierliche, elektrische Flussdichte berücksichtigt. Zur Vereinfachung wird an dieser Stelle auf eine detaillierte Ausführung verzichtet, zumal hier nur die resultierende Differenz zwischen den Valenzbändern (bzw. Leitungsbändern) von Bedeutung ist. Es genügt zusätzlich zu Andersons Regel noch die Kontaktenergie  $qV_0$  zu  $\delta E_c$  aufzuaddiert bzw. von  $\delta E_v$  abgezuziehen.

$$\begin{aligned}\Delta E_c &= \delta E_c + qV_0 \\ \Delta E_v &= \delta E_v - qV_0\end{aligned}\quad (10)$$

Abbildung 2 zeigt die Bandstruktur, die man erhält, wenn man die beiden Halbleiter aus Abbildung 1 verbindet. In Halbleitern ist die Bandlücke temperaturabhängig. Für AlGaAs bzw. GaAs kann folgende empirische Gleichung genutzt werden, um die

korrekten Bandlücken zu finden.

$$E_g(T) \approx E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (11)$$

Für GaAs zum Beispiel ist die minimale Bandlücke  $E_g(0) = 1,519\text{eV}$ , die Parameter  $\alpha = 8,95 \times 10^{-4}\text{eVK}^{-1}$  und  $\beta = 538\text{K}$ . Da Messungen in der Regel bei sehr niedrigen Temperaturen durchgeführt werden, braucht die Temperaturabhängigkeit hier nicht berücksichtigt zu werden.

## 4 Exzitonen in einer AlGaAs/GaAs Heterostruktur

### 4.1 Probenaufbau und Exzitonen

Gegeben ist eine Probe aus von AlGaAs umgebenen GaAs Schichten unterschiedlicher Dicke. Der Übergang von AlGaAs zu GaAs gestaltet sich wie im vorhergehenden Abschnitt besprochen. In erster Näherung bildet ein Übergang AlGaAs-GaAs-AlGaAs

Quantentöpfe für Elektronen im Leitungsband und Löcher im Valenzband. Die Tiefe ist gegeben durch  $\Delta E_c$  bzw.  $\Delta E_v$ . Die Quantentopfbreite  $L$  ist durch die Fertigung bestimmt und hat einen eingenen Wert für jeden Topf. Wie gezeigt, ist die Energiedifferenz der erlaubten Zustände der Teilchen von  $L$  abhängig. Die räumlich begrenzten Elektronen und Löcher gehen sogenannte Exziton Bindungen ein. Exzitonen sind gebundene Zustände von Elektronen und Löchern ähnlich zu Atome, allerdings auf Grund des geringen Masse (selbst im Vergleich zu Wasserstoff) und der Dielektrizität des Halbleiters sind sie bedeutend grösser als die Entfernung zwischen einzelnen Ionen im Gitter. Hier wird zunächst berechnet, welche Energie ein Exziton besitzt. Sie setzt sich zusammen aus der Energie der beiden Teilchen. Dazu verwendet man Ausdruck (4). Da dieser jedoch auf die jeweilige Bandkante, z.B. Valenzbandkante im Falle der Löcher, bezogen ist, muss dazu noch die Bandlücke  $E_g$  hinzutreten. Die Teilchenmassen müssen durch die effektive Masse<sup>2</sup> ersetzt werden, desweiteren muss zwischen schweren und leichten Löchern unterschieden werden.

$$E_{ex} = E_g + \Delta E_{n_e} - \Delta E_{n_h} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_{n_e} &= \frac{1}{2m_e^*} \left( \frac{n_e \pi \hbar}{L} \right)^2 && \text{Elektron} \\ \Delta E_{n_h} &= \frac{1}{2m_h^*} \left( \frac{n_h \pi \hbar}{L} \right)^2 && \text{Loch} \end{aligned} \quad (13)$$

Unter der Annahme, dass sowohl Loch als auch Elektron die gleiche Quantenzahlen besitzen, reduziert sich (12) nach dem Einsetzen zu:

<sup>2</sup>Die effektive Masse ist umgekehrt proportional zur Bandkrümmung ( $\frac{d^2 E}{dk^2}$ ). Sie kommt zustande durch Analogieschlüsse zwischen einem Ladungsträgers als freier Partikel und seinem Verhalten in einem Kristallgitter.

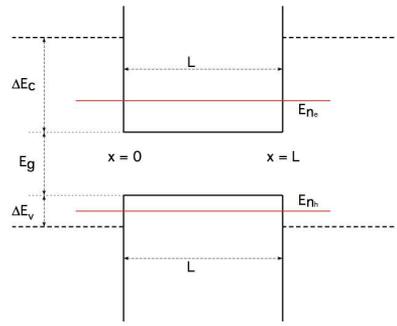


Abbildung 3: Zusammensetzung eines Exzitons aus Ladungsträgern in Quantentöpfen.

$$E_{ex} = E_g + \frac{1}{2} \left( \frac{n\pi\hbar}{L} \right)^2 \left[ \frac{1}{m_e^*} - \frac{1}{m_h^*} \right] \quad (14)$$

Diese Energie wird frei, wenn das Exziton durch Rekombination zerfällt. Die entstandene Strahlung wird als Photolumineszenz bezeichnet. Es wird ein Photon mit einer charakteristischen Wellenlänge erzeugt. Darum ist es möglich, den Quantentopf zu bestimmen in dem es entstanden ist. Hier sollte beachtet werden, dass die Energie eines Exzitons niedriger ist, als die eines freien Elektrons, das heißt, die Bildung von Exzitonen wird energetisch bevorzugt.

## 4.2 Spinpolarisierung

Wie in einer früheren Vorlesung bereits erwähnt, überträgt ein zirkular polarisiertes Photon einen Drehimpuls<sup>3</sup> von  $\pm 1$ . Wird die Probe mit einem Laser bestrahlt, der mit einem Übergang resonant ist, muss bei der Absorption des Photons sowohl Drehimpuls als auch Energie erhalten bleiben. Dies wird anhand eines Beispiels am besten deutlich: Man nehme an, der Laser strahlt

<sup>3</sup>Hier hat Drehimpuls Einheiten von  $\hbar$ .

resonant für einen Übergang vom Band eines schweren Lochs in das Leitungsband und überträgt einen Drehimpuls von  $+1$  ( $\sigma^+$ ). Es gibt zwei Zustände des schweren Lochs,  $J = \pm\frac{3}{2}$ , die ohne der Wirkung eines externen magnetischen Feldes entartet sind. Die Zustände im Leitungsband wiederum haben entweder einen Drehimpuls  $+\frac{1}{2}$  oder  $-\frac{1}{2}$  (ebenfalls entartet). Nur der Übergang mit Drehimpulsänderung von  $-\frac{3}{2}$  zu  $-\frac{1}{2}$  ist bei dieser Anregung erlaubt. Konkret bedeutet dies, dass die Spinpopulation im Leitungsband polarisiert wird. Analog gilt: die Photonen, die durch Rekombination erzeugt werden, sind entgegengesetzt zirkular polarisiert. Also ist es möglich, anhand der Polarisierung der als Signal empfangenen Photolumineszenz, den Polarisierungsgrad der Ladungsträger zu bestimmen.

## 5 Experimentelle Aspekte

### 5.1 Photolumineszenz-Spektrum

Der Aufbau kann grob in drei Komponenten unterteilt werden, der Anregungsweig, ein Kryostat, in dem sich die Probe befindet, und der Detektionsweig. Zur Anregung wird der Strahl einer Laserdiode benutzt (z.B. mit einer Leistung von  $1\text{ mW}$  bei einer Wellenlänge von  $640\text{ nm}$ ). Dieser wird mit Hilfe der Linse 'L1' auf die Probe fokussiert. Experimentell ist hier vor allem darauf zu achten, dass der Strahl die Probe trifft und nicht etwa vom Kryostaten reflektiert wird. Der Detektionsweig fängt das emittierte Licht der Probe mit Hilfe der konvexen Linse 'L2' auf. Entspricht die Entfernung zur Probe genau der Brennweite, erhält man für eine punktförmige Lichtquelle parallele Strahlen. In einiger Entfernung refokussiert 'L3' das Licht zur Einführung in das Spektrometer. Dieses Vorgehen wird oft angewandt um Entfernungen

zwischen einzelnen optischen Systemen zu überwinden. Würde auf das Parallelisieren des Strahls durch 'L2' verzichtet, wäre die Fläche des Strahls, der die selbe Leistung liefert in Höhe von 'L3' so groß, dass es nahezu unmöglich wäre ihn in Gänze zu refokussieren. Das liegt daran, dass Linsen mit zunehmendem Durchmesser sehr schwierig herzustellen sind. Bei Verwendung einer kleineren Linse wäre aber der Intensitätsverlust (Leistung pro Fläche) sehr groß, weil nur ein kleiner Bruchteil des Lichtes nutzbar gemacht würde. Zum Beispiel nehme man an, die Linsen 'L2' und 'L3' hätten einen nutzbaren Durchmesser von  $5\text{ cm}$  und eine Brennweiten von  $30\text{ cm}$ . Die Leistung die an 'L2' in Form von Licht aufgefangen wird wäre  $P_0$  und die Entfernung zwischen den beiden Linsen sei  $50\text{ cm}$ . Ignoriert man sonstige Verluste ist die Intensität des Lichts bei 'L2' und 'L3' gleich. Entfernt man nun 'L2', divergiert das Licht weiter. Mit Hilfe des Strahlensatzes kann man den Radius der Fläche, die das Licht mit Leistung  $P_0$  bei 'L3' aufspannt, berechnen. Sie ist gut siebenmal größer als zuvor und die Intensität hat sich auf  $14\%$  des Ursprungswertes reduziert. Um ähnliche Leistung zu erhalten bräuchte man also eine Linse mit dreifachem Durchmesser.

### 5.2 Spektrometer

Ein Spektrometer dient ganz allgemein dazu, Licht auf seine Wellenlängen (oder Frequenzen) hin zu analysieren. Beim Gitterspektrometer nutzt man dabei beispielsweise die Abhängigkeit des Beugungswinkels von der Wellenlänge bei gegebenen Gitter aus. Da verschiedene Wellenlängen unterschiedlich stark gebeugt werden, kann man bei Kenntnis der Funktion  $\lambda(\alpha)$  nach Messung des Beugungswinkels  $\alpha$  die zugehörige Wellenlänge  $\lambda$  ermitteln: z.B. gilt für ein

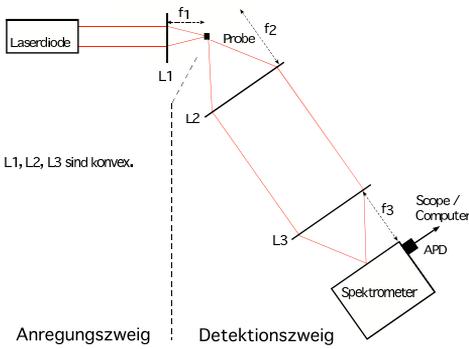


Abbildung 4: Schema des Versuchaufbaus zur Bestimmung eines Photolumineszenzspektrums

sogenanntes Streifen- oder Strichgitter mit äquidistanten Spalten die Bedingung

$$m\lambda = g \sin \alpha \quad \text{mit } m = 1, 2, 3... \quad (15)$$

für die Beugungsmaxima am Gitter mit Gitterkonstante  $g$  (abhängig vom Abstand der Gitterdrähte). In der Praxis sind Gitterspektrometer mit lichtstarken Reflexionsgittern ausgestattet.

### 5.3 Spektrales Auflösungsvermögen

Eine wichtige Größe eines Gitters ist das spektrale Auflösungsvermögen  $A$ . Sie beschreibt die optische Trennmöglichkeit benachbarter Spektrallinien. Besteht das Gitter z.B. aus  $p$  Spalten, dann sind zwei Nachbarlinien mit den Wellenlängen  $\lambda$  und  $\lambda + d\lambda$  in erster Ordnung trennbar, wenn gilt:

$$\begin{aligned} (\lambda + d\lambda) - \lambda &\geq \lambda/p \\ \rightarrow d\lambda &\geq \lambda/p \end{aligned} \quad (16)$$

Dieser Ungleichung liegt die Vorstellung zu Grunde, dass zwei benachbarte Linien in einem Spektrum dann gut voneinander getrennt erkannt werden können, wenn sie

mindestens um die Halbwertsbreite gegeneinander verschoben sind (Rayleigh Kriterium). In Analogie gilt in  $m$ 'ter Ordnung:

$$\begin{aligned} m(\lambda + d\lambda) - m\lambda &\geq \lambda/p \\ \rightarrow md\lambda &\geq \lambda/p \end{aligned} \quad (17)$$

Definiert man  $A$  als Verhältnis von  $\lambda/d\lambda$ , dann folgt aus (17)

$$A = mp \quad (18)$$

$p$  wird auch als Strichzahl bezeichnet.

### 5.4 Bruchteil der durch Photolumineszenz entstandenen Strahlung, die aus der Probe ins Freie gelangt

Die Probe besteht im optischen Sinne aus mehreren Lagen mit unterschiedlichem refraktiven Index  $n$ . Dieser wechselt für infrarote Strahlung zwischen 3,3 in GaAs und 3,1 in  $\text{Al}_{0,38}\text{Ga}_{0,62}\text{As}$ . Beim Austritt aus der Probe in Vakuum sogar zwischen 3,1 und 1. Zur Bestimmung des Bruchteils des gesamt eingestrahlteten Lichtes, das einen Quantentopf verlässt, muss zunächst die Fläche ermittelt werden, auf die Strahlung gelangt. Diese wird von einem Winkel begrenzt, der zunächst ermittelt wird. Allgemein gilt nach Snell für die Brechung an Grenzflächen der Stoffe  $m$  und  $n$  (mit Einfallswinkel  $\theta_m$  bzw. Ausfallswinkel  $\theta_n$ ):

$$n_m \sin \theta_m = n_n \sin \theta_n \quad (19)$$

Im vorliegenden Fall besteht die Probe aus zwei Schichten, die alternierend aufgebaut sind, und es gelten somit die Beziehungen:

$$\begin{aligned} n_{\text{GaAs}} \sin \theta_{\text{GaAs}} &= n_{\text{AlGaAs}} \sin \theta_{\text{AlGaAs}} \\ n_{\text{AlGaAs}} \sin \theta_{\text{AlGaAs}} &= n_{\text{Vak}} \sin \theta_{\text{Vak}} \end{aligned} \quad (20)$$

Da nur Licht ins Freie und zur Analyse gelangen kann, dessen Einfallswinkel  $\theta_{AlGaAs}$  kleiner ist, als der Ausfallswinkel im Vakuum, der zur Totalreflexion führt, gilt:

$$n_{AlGaAs} \sin \theta_{AlGaAs} \leq \sin 90^\circ \quad (21)$$

$$\theta_{AlGaAs} \leq \sin^{-1} \left( \frac{1}{n_{AlGaAs}} \right) \quad (22)$$

$$\rightarrow \theta_{AlGaAs \text{ crit}} = 18,8^\circ$$

entsprechend:

$$\theta_{GaAs} \leq \sin^{-1} \left( \frac{n_{AlGaAs}}{n_{GaAs}} \right) \quad (23)$$

$$\rightarrow \theta_{GaAs \text{ crit}} = 70,0^\circ$$

Welcher Einfallswinkel  $\theta_{GaAs}^*$  führt nun zu dem Wert für  $\theta_{AlGaAs \text{ crit}} = 18,8^\circ$ ?  $\theta_{GaAs}^*$  steht mit  $\theta_{AlGaAs \text{ crit}}$  in folgender Beziehung:

$$n_{GaAs} \sin \theta_{GaAs}^* = n_{AlGaAs} \sin \theta_{AlGaAs \text{ crit}} \quad (24)$$

$$\theta_{GaAs}^* \leq \sin^{-1} \left\{ \left( \frac{n_{AlGaAs}}{n_{GaAs}} \right) \sin \theta_{AlGaAs \text{ crit}} \right\} \quad (25)$$

$$\rightarrow \theta_{GaAs}^* = 17,6^\circ$$

Da  $\theta_{GaAs}^* \leq \theta_{GaAs \text{ crit}}$  ist, wird die nutzbare Austrittsfläche also weiter reduziert. Die Austrittsfläche errechnet sich somit zu

$$A = \int_0^{2\pi} \int_0^{17,6^\circ} \{r^2 \sin \theta\} d\theta d\varphi \quad (26)$$

$$\rightarrow A = 2\pi \cdot 0,04 r^2$$

Die totale bestrahlte Fläche  $A_T$  ist die Ku-

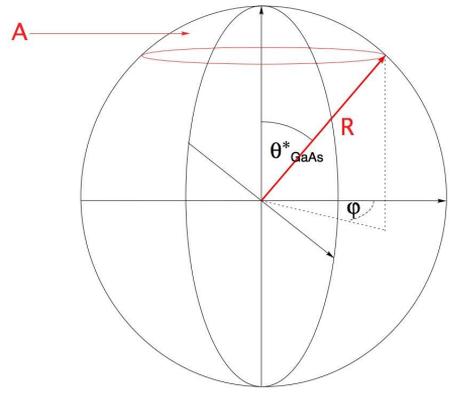


Abbildung 5: Der Oberflächennormale soll die Vertikale sein, der Übergang befindet sich demnach an der Spitze der Kugel. Die Fläche  $A$  soll nach unten von der in rot eingezeichneten Linie begrenzt sein.

gelfläche

$$A_T = 4\pi r^2 \quad (27)$$

Somit ergibt sich als Bruchteil der Leistung der Strahlung, die aus einem Quantentopf ins Freie gelangt:

$$\frac{A}{A_T} = 0,02 = 2\% \quad (28)$$

Es ist einfach zu sehen, dass dieses Ergebnis für Exzitonzerfälle in allen Quantentöpfen gilt. Die Brechung, die beim Übergang von GaAs zu AlGaAs die Winkeländerung zur Folge hat, wird beim Übergang von AlGaAs zurück zu GaAs rückgängig gemacht, es ist lediglich eine Seitwärtsverschiebung zu bemerken, welche unter der Annahme einer sehr breiten Probe zu vernachlässigen ist.