

Charakterisierung von detektorfähigen II-VI Verbindungshalbleitern

Diplomarbeit
im Fach Physik

Fakultät für Mathematik und Physik

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Dominic Greiffenberg

Betreuer: Prof. Dr. Karl Jakobs

Freiburg, den 31.03.2007

Wesentliche Teile der Arbeit sind zur Veröffentlichung eingereicht:

D.Greiffenberg, R.Sorgenfrei, M.Fiederle, *Growth of CdTe thick films from the vapour phase*, IEEE Trans. Nucl. Sci.

E.Saucedo, D.Greiffenberg, E.Diéguez, *Bi doped and Bi:Yb co-doped CdTe*, Journal of Crystal Growth

meiner Familie gewidmet

INHALTSVERZEICHNIS

1	EINLEITUNG.....	8
2	THEORIE.....	11
2.1	HALBLEITERDETEKTOREN.....	11
2.2	HALBLEITERGRUNDLAGEN.....	13
2.2.1	<i>Der spezifische Widerstand ρ</i>	13
2.2.2	<i>Die Beweglichkeit μ</i>	14
2.2.3	<i>Die Lebensdauer τ</i>	14
2.2.4	<i>Das $\mu\tau$-Produkt</i>	14
2.2.5	<i>Störstellen</i>	16
2.2.6	<i>Kompensation</i>	17
2.3	KRISTALLZÜCHTUNG / -WACHSTUM.....	20
2.3.1	<i>Züchtung über gerichtetes Erstarren</i>	21
2.3.2	<i>Segregation</i>	22
2.3.3	<i>Dotierung mittels Diffusion</i>	24
2.3.4	<i>Wachstum mittels Molekularstrahlepitaxie</i>	24
2.4	CHARAKTERISIERUNG.....	25
2.4.1	<i>Photolumineszenz</i>	26
2.4.1.1	Rekombinationsmechanismen.....	26
2.4.1.2	Phononen-Replika.....	29
2.4.1.3	Temperaturabhängige Messungen.....	29
2.4.1.4	Emission in Abhängigkeit der Anregungsintensität.....	31
2.4.2	<i>CoReMa</i>	33
2.4.2.1	Dielektrische Relaxation.....	34
2.4.2.2	Messprinzip der CoReMa.....	36
2.4.3	<i>Photoleitfähigkeit</i>	37
3	EXPERIMENTELLER AUFBAU.....	39
3.1	PHOTOLUMINESZENZAUFBAU.....	39
3.2	CoReMa-AUFBAU.....	41
4	UNTERSUCHUNGEN AN DICKEN CdTe-SCHICHTEN.....	43
4.1	PHOTOLUMINESZENZ-TIEFTEMPERATURSPEKTRUM BEI 15 K FÜR DIE CdTe-SCHICHT MIT GAAS-SUBSTRAT.....	44
4.2	PL-MESSUNGEN AM INTERFACE ZWISCHEN SUBSTRAT UND SCHICHT.....	46
4.3	WEITERFÜHRENDE PL-MESSUNGEN DER CdTe-SCHICHT AUF GAAS-SUBSTRAT.....	50
4.4	PHOTOLUMINESZENZ-TIEFTEMPERATURSPEKTRUM AN DER DICKEN CdTe-SCHICHT NACH DER ENTFERNUNG DES GAAS-SUBSTRATES.....	54
4.5	STROM-SPANNUNGS-KENNLINIE.....	56
4.6	DETEKTORMESSUNGEN AN DER DICKEN CdTe-SCHICHT.....	57
4.7	ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK ZU DEN UNTERSUCHUNGEN AN DEN DICKEN CdTe- SCHICHTEN.....	58

5	UNTERSUCHUNG VON CDTE:BI UND CDTE:BI:YB	61
5.1	UNTERSUCHUNG DER PROBEN CdTe:Bi GESCHNITTEN SENKRECHT ZUR WACHSTUMSRICHTUNG (PROBE: CdTe:Bi 17-1)	62
5.2	UNTERSUCHUNG DER PROBEN CdTe:Bi GESCHNITTEN ENTLANG DER WACHSTUMSRICHTUNG (PROBE: CdTe:Bi 17-2)	68
5.3	UNTERSUCHUNG DER PROBEN CdTe:Bi:Yb (PROBE: CdTe:Bi:Yb)	70
5.4	ZUSAMMENFASSUNG	73
6	ZUSAMMENFASSUNG	74
7	AUSBLICK	75
ANHANG A: ZUSAMMENSTELLUNG DER IONISATIONSENERGIEN VON STÖRSTELLEN IN CDTE [SCHL01]		76
A.1	IONISATIONSENERGIEN DER ELEMENTE AUS DER I, III, IV, V UND VII HAUPT- BZW. NEBENGRUPPE	76
A.2	IONISATIONSENERGIEN DER ÜBERGANGSMETALLE	77
A.3	IONISATIONSENERGIEN VON INTRINSISCHEN DEFECTEN	78
ANHANG B: ABKÜRZUNGSVERZEICHNIS		79
LITERATURVERZEICHNIS		82
DANKSAGUNG		89
ERKLÄRUNG		90

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

Abbildung 2-1: Schematische Darstellung der e-h-Erzeugung bei Durchgang eines Gamma-Quants durch einen Halbleiter.....	11
Abbildung 2-2: Störstellenschema von CdTe (nicht maßstabsgetreu).....	16
Abbildung 2-3: Einfang- und Emissionsmechanismen an einer tiefen Störstelle.....	17
Abbildung 2-4: Abhängigkeit des spezifischen Widerstands von der Konzentration und energetischen Lage der tiefen Störstelle [Fie5].....	20
Abbildung 2-5: Kristallzüchtungsverfahren nach Bridgman-Stockbarger.....	22
Abbildung 2-6: Verlauf der relativen Konzentration $c_s/c_{l,0}$ einer gelösten Komponente mit verschiedenen effektiven Verteilungskoeffizienten k_{eff} für die Normalerstarrung eines stabförmigen Kristalls.....	23
Abbildung 2-7: Schemazeichnung der Molekularstrahlepitaxie (MBE).....	25
Abbildung 2-8: Schematische Darstellung der Rekombinationsmechanismen.....	26
Abbildung 2-9: Theoretische, relative PL-Intensität aufgetragen gegen die Temperatur für eine Bindungsenergie von $E_B=10, 50$ und 100 meV.....	31
Abbildung 2-10: Strahlende und nicht-strahlende Übergänge zur theoretischen Betrachtung der Intensitätsabhängigkeit [Sch92].....	32
Abbildung 2-11: Schematischer Aufbau der CoReMa.....	35
Abbildung 2-12: Schematische Darstellung des Auf- bzw. Entladevorgangs des Systems Kondensator- .. Halbleiter [Sti91].....	37
Abbildung 3-1: Schematische Darstellung des PL-Messplatzes.....	39
Abbildung 3-2: Schematischer Aufbau der CoReMa.....	41
Abbildung 4-1: Photolumineszenz-Tiefemperatur Spektrum der CdTe-Schicht auf GaAs-Substrat bei einer Temperatur von $T \sim 15$ K und einer Anregungsleistung von 170 mW.....	45
Abbildung 4-2: Blick auf die Spaltfläche der CdTe-Schicht (unten) und dem GaAs-Substrat (oben).	47
Abbildung 4-3: Linescan senkrecht zum Interface zwischen CdTe-Schicht und GaAs-Substrat	47
Abbildung 4-4: Intensitätsverlauf des A-Zentrums gegen Abstand zu CdTe-Kante.....	48
Abbildung 4-5: SIMS-Tiefenprofil der dicken Schicht CdTe auf GaAs-Substrat.....	49
Abbildung 4-6: Photolumineszenzspektrum der dicken CdTe-Schicht auf GaAs-Substrat bei 81 K.....	50
Abbildung 4-7: Doppellogarithmische Darstellung der Abhängigkeit von Lumineszenz zu Laserintensität des $1,570$ eV-Peaks bei einer Temperatur von 81 K.....	51
Abbildung 4-8: Temperaturabhängige PL-Spektren von 300 K bis 80 K der CdTe Schicht auf GaAs-Substrat	52
Abbildung 4-9: Intensität des $1,570$ eV-Peaks gegen die Temperatur . Anfitzen der Daten mit Formel 2.26 ergibt eine Aktivierungsenergie von $E_A=(85 \pm 5)$ meV.....	53
Abbildung 4-10: Temperaturabhängige PL-Spektren von der CdTe-Schicht ohne GaAs-Substrat von 300 K bis 80 K.....	55
Abbildung 4-11: Doppellogarithmische Darstellung der Abhängigkeit von Lumineszenzintensität der Peaks bei $E=1,584$ eV und bei $E=1,544$ eV gegen die Anregungsleistung bei einer Temperatur von $T=80$ K.....	55
Abbildung 4-12: Strom-Spannungs-Kennlinie für die CdTe-Schicht ohne Substrat von -5 V bis $+5$ V...	56
Abbildung 4-13: Detektormessungen mit der dicken CdTe-Schicht auf GaAs-Substrat mit einer angelegten Spannung in Sperrrichtung von 12 V bzw. 26 V.....	57
Abbildung 5-1: Schematische Darstellung des Schnittmusters der Proben entlang (Probe 2) und senkrecht (Probe 1) zur Wachstumsrichtung.....	62

<i>Abbildung 5-2: Tieftemperatur-Photolumineszenzspektrum von Bismut-dotierten CdTe-Proben mit Bismutkonzentrationen von $1 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ und $1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ bei $T=17 \text{ K}$ [Sau04]</i>	<i>63</i>
<i>Abbildung 5-3: Photolumineszenzmessung der Bismut-dotierten CdTe-Probe 17 bei einer Temperatur von $T=80 \text{ K}$.....</i>	<i>63</i>
<i>Abbildung 5-4: Photolumineszenz-Mapping der Probe CdTe:Bi 17-1 mit einer Konzentration von $1 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ bei einer Energie von $E=1555,8 \text{ meV}$ (oben links), $E=1347,8 \text{ meV}$ (unten links) und $E=1137,6 \text{ meV}$ (oben rechts) und die Verteilung des spezifischen Widerstands (unten rechts)</i>	<i>65</i>
<i>Abbildung 5-5: Verteilungen der Photosensitivität der Probe CdTe:Bi 17-1.....</i>	<i>66</i>
<i>Abbildung 5-6: Photolumineszenz-Mapping der Probe CdTe:Bi 17-2 bei einer Energie von $E=1553,9 \text{ meV}$ (oben) und $E=1347,8 \text{ meV}$ (Mitte), sowie die Verteilung des spezifischen Widerstands (oben rechts)</i>	<i>68</i>
<i>Abbildung 5-7: Die Verteilungen der Photosensitivität der Probe CdTe:Bi 17-2</i>	<i>69</i>
<i>Abbildung 5-8: Photolumineszenzspektrum der Probe CdTe:Bi:Yb bei einer Temperatur von 80 K.....</i>	<i>70</i>
<i>Abbildung 5-9: Photolumineszenz-Mapping der Probe CdTe:Bi:Yb bei einer Energie von $E=1577,6 \text{ meV}$ (oben links), $E=1409,1 \text{ meV}$ (unten links) und $E=1262,7 \text{ meV}$ (oben rechts), sowie die Verteilung des spezifischen Widerstands (unten rechts)</i>	<i>71</i>
<i>Abbildung 5-10: Die Verteilung der Photosensitivität der Probe CdTe:Bi:Yb.</i>	<i>72</i>

1 Einleitung

Die Charakterisierung von Halbleiterkristallen ermöglicht die Bestimmung des Einflusses von Defekten auf die Materialparameter. So können Aussagen über Kristalldefekte wie beispielsweise Verunreinigungen, Versetzungen oder intrinsische Defekte gemacht werden. Die Materialcharakterisierung ist daher elementar für die Kristallzüchtung und somit auch für die möglichen Anwendungsbereiche wie Sensoren und Detektoren. Durch die Erkenntnisse der Materialcharakterisierung können gezielt Veränderungen der Züchtungsparameter vorgenommen werden zur Optimierung des Kristallwachstums im Hinblick auf die potentiellen Anwendungen.

Ein aktuelles Beispiel stellt die Erforschung von digitalen Röntgendetektoren dar. Hier hat die Entwicklung durch die Erkenntnisse aus der Materialcharakterisierung in den letzten Jahren erhebliche Fortschritte erzielt. Besonders viel versprechend für die Anwendung als Detektormaterial ist der Verbindungshalbleiter CdTe, da er aufgrund seiner hohen Kernladungszahl über ein ausreichendes Absorptionsvermögen für Röntgenstrahlung in einem Energiebereich bis 150 keV verfügt. Weiterhin ermöglicht die Bandlücke von CdTe einen Einsatz der Detektoren bei Raumtemperatur.

Bei der Absorption von Röntgenstrahlung werden im Halbleiterkristall Elektron-Loch-Paare generiert. Allerdings wird für eine ausreichend hohe Absorptionswahrscheinlichkeit ein großes aktives Detektorvolumen benötigt.

Daher ist die Hochohmigkeit entscheidend für die Anwendung von CdTe als Detektormaterial. Aufgrund des hohen spezifischen Widerstands von intrinsischem CdTe von $\rho \sim 10^{10} \Omega\text{cm}$ können CdTe-Detektoren als Fotowiderstände betrieben werden. Somit steht der gesamte Kristall als aktives Detektorvolumen zur Verfügung. Restverunreinigungen sorgen jedoch durch das Einbringen zusätzlicher freier Ladungsträger für eine Verringerung des spezifischen Widerstands. Eine Erhöhung des spezifischen Widerstands wird durch die Reduktion der zusätzlichen freien Ladungsträger durch die gezielte Dotierung mit Störstellen erreicht, was als Kompensation bekannt ist.

Weiterhin sind für die Detektorqualität die Transporteigenschaften der Ladungsträger im Kristall, die Beweglichkeit μ und die Lebensdauer τ entscheidend. Das Ziel ist eine Maximierung dieser Materialeigenschaften, die durch eine Optimierung der Züchtungsparameter erreicht werden kann.

Die Anwendung von CdTe-Kristallen als Detektormaterial stellt hohe Anforderungen an die Materialqualität und deren elektronische Eigenschaften. Daher werden in aktuellen Arbeiten sowohl neue Dotierstoffe untersucht, um die gewünschten Eigenschaften zu

erreichen, [Sau04, Sau06] als auch neue Verfahren zur Herstellung intensiv erforscht. [Nir05, Koi01, Lov00, Sel06]

Da für die medizinische Röntgendiagnostik mit Energien der Röntgenstrahlung bis 70 keV bereits CdTe-Schichtdicken von 300 μm genügen, ist das Schichtwachstum mit einer modifizierten MBE-Anlage (Molekularstrahlepitaxie) eine Alternative zur Züchtung von Volumenkristallen. Das Wachstum mittels MBE ermöglicht ein Schichtwachstum nach Maß. Die Schichtdicke kann gut kontrolliert werden, weiterhin ermöglicht sie eine einfache und exakte Dotierung mit scharfen Dotierkanten. Da die Dotierstoffkonzentration exakt festgelegt wird, kann ein hoher spezifischer Widerstand beim Wachstum mittels MBE im Gegensatz zur Volumenkristallzüchtung auch über die Dotierung mit flachen Störstellen erreicht werden. Die Kompensation mit flachen Störstellen hat den Vorteil, dass das $\mu\tau$ -Produkt im Gegensatz zur Kompensation mit tiefen Störstellen nicht wesentlich reduziert wird. Das Ziel ist eine großflächige Abscheidung detektorfähiger CdTe-Schichten auf anderen Fremdsubstraten wie z.B. Quarz, Silizium oder im Idealfall eine direkte Abscheidung auf einer Ausleseelektronik.

Um eventuelle Vorteile von Schichten gegenüber Bulkmaterial zu untersuchen, wurden dicke Schichten CdTe aufgrund der guten Verfügbarkeit und Qualität von GaAs auf einem GaAs-Substrat gewachsen.

Es stellt sich die Frage, ob eine epitaktische Abscheidung von CdTe-Schichten auf einem Fremdsubstrat aufgrund der Gitterfehlpassung mit einer ausreichenden kristallinen Qualität möglich ist. Um festzustellen, ob die gewachsenen Schichten für Detektoranwendungen geeignet sind, werden der spezifische Widerstand ρ und die Transporteigenschaften über das $\mu\tau$ -Produkt bestimmt.

Ein weiterer wichtiger Punkt bei der Entwicklung von CdTe-Detektoren sind Untersuchungen zum Kompensationsverhalten von neuen, bisher unbekanntem Dotierstoffen. Durch die Dotierung mit Elementen, deren exakte Rolle beim Einbau in den CdTe-Kristall noch unbekannt ist, versucht man, die gewünschten Materialeigenschaften zu erhalten.

In Kooperation mit Prof. E. Diéguez der Universidad Autonoma de Madrid wurden CdTe-Volumenkristalle, die mit Bismut dotiert sind, untersucht. Die bismut-dotierten CdTe-Proben weisen einen hohen spezifischen Widerstand auf. Als Grund hierfür wird vermutet, dass Bismut ein amphoterer Verhalten bezüglich seines Einbaus als Störstelle zeigt. [Sau04] Eine Kontrolle des amphoterer Einbauverhaltens über eine Variation der Züchtungsparameter stellt beispielsweise eine Möglichkeit dar, pn-Übergänge bereits während des Kristallwachstums zu erhalten.

Nachfolgend wird kurz die Gliederung der Arbeit vorgestellt:

In Kapitel 2.1 wird ein Überblick über die Funktionsweise eines Halbleiterdetektors gegeben und die wichtigsten Eigenschaften werden vorgestellt. Die benötigten Halbleitergrundlagen werden in Kapitel 2.2 erläutert. In Kapitel 2.3 werden die relevanten Züchtungsmethoden und –technologien vorgestellt. Die Charakterisierungsmethoden werden ausführlich in Kapitel 2.4 besprochen.

Um einen Überblick über den experimentellen Aufbau zu geben, wird in Kapitel 3.1 auf den Photolumineszenz-Messplatz und in Kapitel 3.2 auf den CoReMa-Messplatz (contactless resistivity mapping) eingegangen.

In Kapitel 4 wird die Charakterisierung der dicken CdTe-Schichten präsentiert. Sie wurden mittels Photolumineszenz (PL) charakterisiert, um die Störstellen und deren Verteilung zu bestimmen. Zur Berechnung des spezifischen Widerstands wurden I-U-Kennlinien aufgenommen. Detektorspektren ermöglichten eine erste Abschätzung des $\mu\tau$ -Produkts. Ergänzend wurden SIMS-Messungen (Sekundärionenmassenspektroskopie) gemacht. Das Ziel der Arbeit war es, die Proben zerstörungsfrei zu charakterisieren, um so den Wachstumsprozess für eine Maximierung der Detektoreigenschaften wie den spezifischen Widerstand ρ , die Lebensdauer τ und die Beweglichkeit μ zu optimieren.

Kapitel 5 geht auf die Untersuchung des Einbaucharakters von Bismut in CdTe ein, sowie den Einfluss von Bismut auf den spezifischen Widerstand und die Photoleitfähigkeit. Es wurden CoReMa-Messungen mit und ohne Beleuchtung durchgeführt. Komplementäre Photolumineszenz-Messungen untersuchen den Einfluss der Störstellen auf den spezifischen Widerstand.

In Kapitel 6 werden die Ergebnisse zusammengefasst, in Kapitel 7 wird ein Ausblick gegeben.

2 Theorie

2.1 Halbleiterdetektoren

Im Gegensatz zu Szintillatoren erzeugt hochenergetische Strahlung in Halbleiterdetektoren direkt elektrische Signale. Auf seinem Weg durch einen Halbleiterkristall wechselwirkt ein Röntgen- oder γ -Quant mit der Materie und es bilden sich freie Elektronen, die wiederum ihre kinetische Energie durch die Erzeugung von Elektron-Loch-Paaren abgeben. (nachfolgend auch: e^-h^+ -Paare). (Abb.2-1)

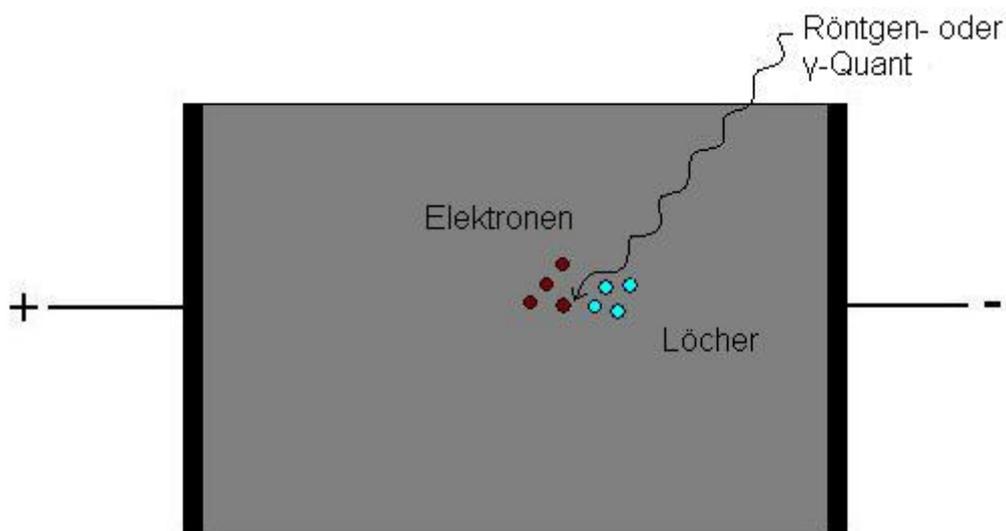


Abbildung 2-1: Schematische Darstellung der e-h-Erzeugung bei Durchgang eines Gamma-Quants durch einen Halbleiter

Die Wechselwirkung des Röntgen- oder γ -Quants mit dem Festkörper findet über den Photoeffekt, die Compton-Streuung und die Paarbildung statt. Während der Photoeffekt der dominierende Wechselwirkungsprozess bis ca. 200 keV ist, setzt die Paarbildung erst ab Photonenenergien von 1,022 MeV ein und dominiert bei Photonenenergien ab 3 MeV. [Mal73] Entscheidend für die Effizienz sind die Wirkungsquerschnitte der verschiedenen Absorptionseffekte im Hinblick auf die Kernladungszahl: [SchIJ]

- Photoeffekt: $\sigma_{Photo} \sim Z^n$ wobei $4 < n < 5$ (2.1)

- Compton-Effekt: $\sigma_{Compton} \sim Z^1$ (2.2)

- Paarbildung: $\sigma_{Paarbildung} \sim Z^2$ (2.3)

Es wird deutlich, dass besonders für medizinisch relevante Röntgenstrahlung mit Energien bis 100 keV, bei denen der Photoeffekt der dominierende Wechselwirkungs-

prozess ist, für eine gute Absorption Materialien mit einem hohen Z -Wert benötigt werden. Somit eignen sich die Materialsysteme CdTe ($Z=48/52$) und GaAs ($Z=31/33$) hervorragend.

CdTe und GaAs zeichnen sich weiterhin durch die Möglichkeit aus, aufgrund ihrer Bandlücke bei Raumtemperatur betrieben werden zu können. Da ein Teil der absorbierten Energie in Gitterschwingungen übergeht, beträgt die mittlere Energie zur Erzeugung eines Elektron-Loch-Paars ca. das 3fache der Bandlückenenergie. [Owe04] Diese mittlere Energie zur Erzeugung eines Elektron-Loch-Paares ist bei CdTe ~ 4.4 eV und bei GaAs ~ 4.2 eV.

Während für die Erzeugung von Elektron-Loch-Paaren die Wahl des Materials im Hinblick auf Kernladungszahl und Bandlücke entscheidend ist, braucht man für die Optimierung der Signalerzeugung aus den Elektron-Loch-Paaren, Detektoreigenschaften wie ein geringes Rauschen und eine hohe effektive Sammelgüte der erzeugten Ladungsträger.

Es existieren bei der Entwicklung eines Detektors zwei Möglichkeiten: Zur Detektion niederenergetischer elektromagnetischer Strahlung genügen kleine aktive Detektorvolumen. Dies wird über eine verarmte Zone im Kristall mit einem pn-Übergang realisiert. Für die Detektion hochenergetischer Strahlung sind jedoch größere Schichtdicken erforderlich. Eine Verarmung einer für die Absorption ausreichend dicken Schicht ist nicht mehr möglich. Durch das Anlegen einer äußeren Spannung wird der gesamte Kristall von einem homogenen E-Feld durchdrungen. Somit ist der gesamte Kristall die aktive Detektorfläche. Eine Voraussetzung hierfür sind ohmsche Kontakte.

In Abbildung 2-1 ist der typische Aufbau eines Halbleiterdetektors dargestellt. An den Halbleiterkristall wird eine Spannung angelegt, die dafür sorgt, dass die erzeugten Elektron-Loch-Paare aufgrund des elektrischen Feldes durch den Kristall driften und auf den Elektroden Ladung induzieren, die über eine ladungs- oder stromempfindliche Elektronik ausgelesen werden kann. In der Praxis treten bestimmte Einschränkungen auf:

- Jeder Halbleiter besitzt aufgrund der thermischen Anregung von Elektron-Loch-Paaren einen endlichen spezifischen Widerstand. Beim Anlegen einer Spannung an den Kristall fließt daher ein Dunkelstrom. Dieser Dunkelstrom liefert ein Rauschen, das das eigentliche Signal überlagert. Eine Reduktion des Dunkelstroms kann durch eine Erhöhung des spezifischen Widerstands erreicht werden.
- Defekte wie Störstellen und Versetzungen im Kristall sorgen dafür, dass die Elektron-Loch-Paare nur eine endliche Lebensdauer haben. Es kommt zum Einfang von Ladungsträgern an tiefen Störstellen und zu Ladungsträgerrekombinationen. Das sorgt für eine Abnahme der Signalhöhe. Ebenso verringern Störstellen, Versetzungen, aber

auch Phononen die Beweglichkeit der Ladungsträger. Ein wichtiger Richtwert für die Detektorqualität eines Kristalls liefert das $\mu\tau$ -Produkt, das in Kapitel 2.2.4 besprochen wird.

2.1.1 Einfluss des Dunkelstroms

Die Anforderung eines geringen Dunkelstroms und somit eines geringen Rauschens kann durch einen möglichst hohen spezifischen Widerstand ρ erreicht werden. Für ein SNR (Signal to noise ratio) von 10:1 bei einem deponierten Röntgen-Quant der Energie 100 keV (Detektorparameter: Material: CdTe, angelegte Spannung: $U=500$ V, Kontaktfläche: $A=3$ mm², Dicke: $d=1$ mm) müsste der spezifische Widerstand der aktiven Fläche CdTe ca. $\rho=8,3 \cdot 10^9$ Ωcm betragen. Ein spezifischer Widerstand von $\rho=3,3 \cdot 10^{10}$ Ωcm sorgt bei gleichen Parametern bereits für ein SNR von 40:1. Das SNR lässt sich einerseits über eine Reduktion des Rauschens oder über eine Erhöhung des Signals verbessern. Ein höherer spezifischer Widerstand sorgt für einen geringeren Dunkelstrom und daher für ein geringeres Rauschen. Das geringere Rauschen ermöglicht das Anlegen einer höheren Spannung, das durch die höhere Driftgeschwindigkeit für eine bessere Effizienz des Detektors sorgt und damit ein höheres Signal erzeugt. Zum Erreichen eines höheren spezifischen Widerstands werden freie Ladungsträger, die von ungewollten Verunreinigungen herrühren, durch das gezielte Einbringen von flachen oder tiefen Störstellen reduziert. Die Reduktion freier Ladungsträger durch gezieltes Dotieren wird Kompensation genannt; dies wird genauer in Kapitel 2.2.6 besprochen.

2.2 Halbleitergrundlagen

Aus den Anforderungen an den Detektor lassen sich Anforderungen an das Halbleitermaterial ableiten. So folgt aus der Minimierung des Dunkelstroms eine Maximierung des spezifischen Widerstands ρ . Weiterhin sorgen eine gute Beweglichkeit μ und eine lange Lebensdauer τ für eine Maximierung des Signals.

2.2.1 Der spezifische Widerstand ρ

In der Definition eines Halbleiters liegt eine für die Halbleiterdetektortechnologie wichtige Größe: der spezifische Widerstand. Halbleiter besitzen typischerweise einen spezifischen Widerstand zwischen 10^{-4} $\Omega\text{cm} < \rho < 10^{12}$ Ωcm . Die Definition des spezifischen Widerstands lautet:

$$\rho = \frac{1}{e(\mu_n \cdot n + \mu_p \cdot p)} \quad (2.4)$$

mit: ρ : spezifischer Widerstand

$\mu_{n,p}$: Beweglichkeit der Elektronen (n) bzw. der Löcher (p)

n,p : Konzentration der Elektronen (n) bzw. der Löcher (p)

Eine Erhöhung des spezifischen Widerstands ist durch die Reduktion von freien Ladungsträgern möglich. Die Reduktion von freien Ladungsträgern mittels Einbringen von Störstellen nennt man Kompensation.

2.2.2 Die Beweglichkeit μ

Nach der Erzeugung von Elektron-Loch-Paaren driften die Ladungen aufgrund des elektrischen Feldes zu den Elektroden. Durch die bewegten Ladungen werden auf den Elektroden Ladungen induziert. Ein wichtiger Materialparameter ist in diesem Zusammenhang die Beweglichkeit μ der Ladungsträger, welcher die Proportionalitätskonstante zwischen elektrischem Feld E und Driftgeschwindigkeit v_D ist: [Sze]

$$v_D = \mu \cdot E \quad (2.5)$$

mit: v_D : Driftgeschwindigkeit

E : elektrisches Feld

Die Beweglichkeiten in CdTe betragen für Elektronen $\mu_e=1150 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ und für Löcher $\mu_h=110 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ bei 300 K. [Fie5]

Die Beweglichkeit der Elektronen sinkt mit zunehmender Temperatur durch Streuung an optischen Photonen mit $T^{-3/2}$, und steigt durch die zunehmende Ionisierung von Störstellen mit $T^{3/2}$ [Fied01]. Die Beweglichkeit hat ihr Maximum bei ca. 100 K. Dort beträgt μ dann ca. $1600 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. [Suz02]

2.2.3 Die Lebensdauer τ

Wird ein Elektron-Loch-Paar erzeugt, existiert es nur für eine endliche Lebensdauer τ , bevor es wieder rekombiniert. Die Rückkehr ins thermische Gleichgewicht geschieht über Rekombinationen der angeregten Ladungsträger und wird durch Defekte im Kristall begünstigt.

Die Lebensdauern von Ladungsträgern in CdTe liegen bei Raumtemperatur in der Größenordnung von μs . [Fie2]

2.2.4 Das $\mu\tau$ -Produkt

Eine wichtige Anforderung an den Detektor stellt das $\mu\tau$ -Produkt dar, das Produkt aus Beweglichkeit μ und Lebensdauer τ der erzeugten Ladungsträger. Das $\mu\tau$ -Produkt geht in die Driftlänge ein und ist damit ein entscheidender Parameter, der Aussagen über die mittlere freie Weglänge der erzeugten Ladungsträger vor einer erneuten Rekombination macht. Die deutlich unterschiedlichen Beweglichkeiten von Elektronen und Löchern

sorgen für sehr unterschiedliche $\mu\tau$ -Produkte. So betragen die $\mu\tau$ -Produkte für CdTe für Elektronen $\mu\tau_n \sim 2 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{V}$ und für Löcher $\mu\tau_p \sim 3 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{V}$. [Acro]

Wie bereits oben erwähnt, geht in die Definition der Driftlänge (freie Weglänge) λ von Elektronen und Löchern im Halbleiterkristall die Beweglichkeit μ und die Lebensdauer τ ein:

$$\lambda_n = \mu_n \cdot \tau_n \cdot E(d) \quad (2.6)$$

$$\lambda_p = \mu_p \cdot \tau_p \cdot E(d) \quad (2.7)$$

mit: $\mu_{n,p}$: Beweglichkeit der Elektronen (n) bzw. der Löcher (p)

$\tau_{n,p}$: Lebensdauer der Elektronen (n) bzw. Löcher (p)

$E(d)$: elektrisches Feld

Der spezifische Widerstand ρ hat einen maßgeblichen Einfluss auf den Dunkelstrom, da der spezifische Widerstand das maximal anlegbare elektrische Feld begrenzt.

Daraus ergibt sich, dass die drei Parameter μ , τ und ρ die für den Detektor und seine Sammelgüte entscheidenden Parameter sind und die Aufgabe ist nun, diese Parameter zu maximieren. In diesem Zusammenhang sei kurz erwähnt, dass es schwierig ist, gleichzeitig alle Parameter zu optimieren. So bewirkt die Kompensation zur Erhöhung des spezifischen Widerstands meist eine Reduzierung der $\mu\tau$ -Produkte.

Tabelle 1 stellt die wichtigsten Materialparameter für GaAs und CdTe im Hinblick auf die Detektoreigenschaften dar.

<i>Material</i>	<i>GaAs</i>	<i>CdTe</i>
Ordnungszahl Z	31/33	48/52
Bandlücke E_g bei 300K [eV]	1.424	1.51
Bandlücke E_g bei 0K [eV]	1.52	1.606
Mittlere Energie zur Erzeugung eines e^-h^+-Paares [eV]	~4.2	~4.4
Beweglichkeit μ_e bei 300K [cm^2/Vs]	8500	1100
Beweglichkeit μ_h bei 300K [cm^2/Vs]	400	100
Lebensdauer τ_e bei 300K [μs]	2.5 - 5	2
Lebensdauer τ_h bei 300K [μs]	3	3
$\mu\tau$-Produkt für e^- [cm^2/V]	$(21-41) \cdot 10^{-3}$	$2.2 \cdot 10^{-3}$
$\mu\tau$-Produkt für h^+ [cm^2/V]	$12 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-4}$

Tabelle 1: Übersicht über die verschiedenen Materialeigenschaften [Acro, Iof, Lee94]

2.2.5 Störstellen

Im realen Kristall treten immer Störstellen auf, die teilweise ungewollt eingebaut werden, z.B. durch stöchiometrische Verhältnisse, die leicht vom Verhältnis 1:1 abweichen. Ein Beispiel ist GaAs, bei dem häufig Kristalle mit einem Arsenüberschuss gezüchtet werden. Die Folge daraus sind intrinsische Störstellen wie z.B. Gallium-Vakanzen V_{Ga} , As-Antisitedefekte As_{Ga} oder Arsen auf Zwischengitterplätzen As_i . Der Antisitedefekt As_{Ga} ist als EL2-Defekt im GaAs bekannt, und ist für die semiisolierenden Eigenschaften von GaAs durch Kompensation verantwortlich. [Bro96]

Störstellen verändern die elektrischen Eigenschaften eines Kristalls. Das gewünschte Einbringen von Verunreinigungen, das Dotieren, wird daher genutzt, um die elektrischen Eigenschaften gezielt zu verändern.

Werden Verunreinigungen in einen Halbleiter eingebracht, entstehen zusätzliche Energieniveaus innerhalb der Bandlücke, wie in Abbildung 2-2 dargestellt:

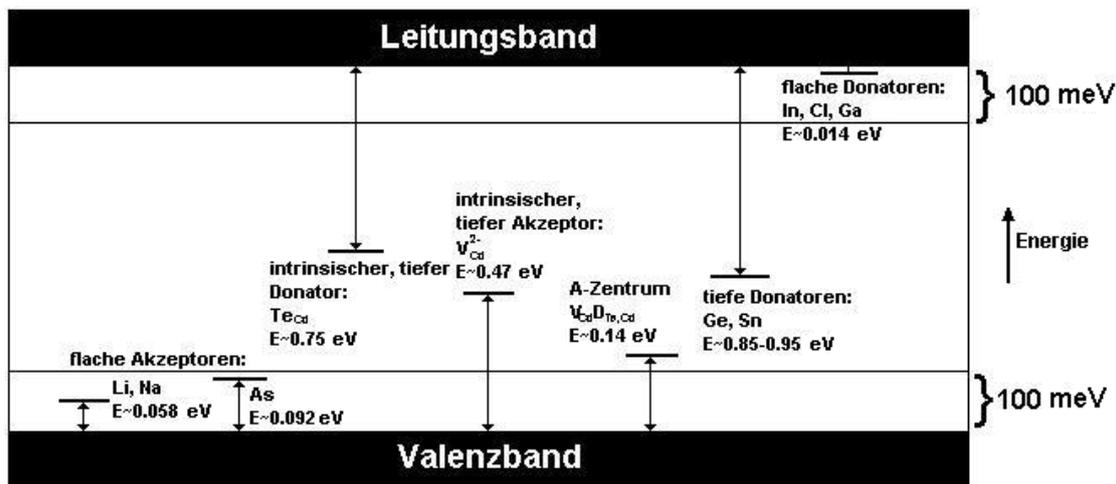


Abbildung 2-2: Störstellenschema von CdTe (nicht maßstabsgetreu)

Wird ein Donator in den Halbleiter eingebracht, entsteht ein Energieniveau innerhalb der Bandlücke unterhalb des Leitungsbandes, dessen energetischer Abstand zum Leitungsband abhängig von der Art der Störstelle und dem beteiligten Element ist. Beim Einbringen eines Akzeptors entstehen Niveaus oberhalb des Valenzbandes.

Liegt das eingebrachte Energieniveau nahe der Bandkante ($\Delta E < 100 \text{ meV}$), spricht man von einer flachen Störstelle. Das Coulombpotential des Atomrumpfes des Dotieratoms wird durch die Valenzelektronen der benachbarten Gitteratome teilweise abgeschirmt. Daher können flache Störstellen mit einem wasserstoffähnlichen Modell beschrieben werden [Sze, YuCa] und liegen bereits bei vergleichsweise geringen Temperaturen ionisiert vor. Die dabei entstehenden freien Ladungsträger werden entweder an das Leitungsband (bei Donatoren) oder an das Valenzband (bei Akzeptoren) abgegeben. Die

zusätzlich eingebrachten freien Ladungsträger verändern die energetische Lage des Fermi-niveaus.

Bilden die Störstellen Energieniveaus aus, die mehr als 100 meV von den Bandkanten entfernt liegen, spricht man von tiefen Störstellen. Tiefe Störstellen lassen sich nicht mehr mit dem wasserstoffähnlichen Modell beschreiben.

Übersteigt die Konzentration der tiefen Störstelle in der Bandmitte die Konzentration der Hintergrundverunreinigung flacher Störstellen, so befindet sich das Fermi-niveau in der Bandmitte. Bei weiterer Zugabe dieser tiefen Störstelle verändert sich die energetische Lage des Fermi-niveaus nur noch schwach in Abhängigkeit der Konzentration dieser Störstelle.

Die Einfang- und Emissionsmechanismen sind in Abbildung 2-3 dargestellt. Aufgrund der geringeren Ionisationswahrscheinlichkeit gegenüber flachen Störstellen fungieren tiefe Störstellen als Einfangzentren für freie Ladungsträger. Nach einer bestimmten Verweildauer τ entlassen die Fallen die Ladungsträger wieder. Werden die gefangenen Ladungsträger hauptsächlich wieder in das ursprüngliche Band entlassen, spricht man von Fallen. Werden die Ladungsträger mehrheitlich in das andere Band emittiert, spricht man von Rekombinationszentren.

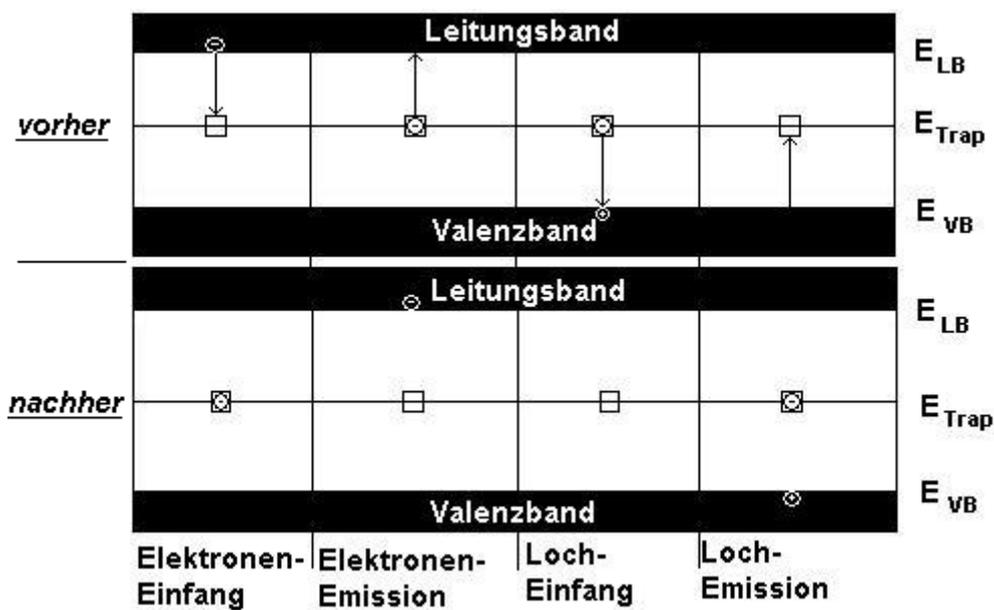


Abbildung 2-3: Einfang- und Emissionsmechanismen an einer tiefen Störstelle.

2.2.6 Kompensation

Die Kompensation von überschüssigen freien Ladungsträgern wird über das gezielte Einbringen von Störstellen erreicht. Ziel der Kompensation ist es, die Konzentration der

freien Ladungsträger in den Bereich der intrinsischen freien Ladungsträgerkonzentration zu bringen. Im Falle des intrinsischen Halbleiters gilt:

$$n_i^2 = n \cdot p \quad \text{d.h.} \quad n_i = n = p \quad (2.8)$$

mit: n_i : intrinsische Ladungsträgerkonzentration

n, p : Elektronen- bzw. Löcherkonzentration

Bei einem intrinsischen Halbleiter liegt das Fermi-niveau nahe der Mitte der Bandlücke. Die thermische Anregung von Ladungsträgern in das Valenz- und Leitungsband wird mit der Fermi-statistik beschrieben. Die energetische Lage des Fermi-niveaus in der Bandmitte erlaubt die Näherung der Fermi-statistik mit der Boltzmann-näherung ($E - E_F \gg k_B T$). Die Konzentration von Elektronen und Löchern ist damit:

$$n = N_{LB} \cdot \exp\left(-\frac{E_{LB} - E_F}{k_B T}\right) \quad (2.9)$$

$$p = N_{VB} \cdot \exp\left(-\frac{E_F - E_{VB}}{k_B T}\right) \quad (2.10)$$

mit: N_{LB}, N_{VB} : effektive Zustandsdichte der Leitungsbandkante bzw. der Valenzbandkante

E_F : energetische Lage der Fermi-niveaus

E_{LB}, E_{VB} : energetische Lage von Leitungsband und Valenzband

Im Falle eines extrinsischen Halbleiters mit flachen Akzeptoren und Donatoren, sowie einem tiefen Donator, der nur einfach ionisiert vorliegen kann, lautet Ladungsneutralitätsbedingung:

$$p + N_D^+ + N_{DD}^+ = n + N_A^- \quad (2.11)$$

mit: N_D^+ : Konzentration von flachen Donatoren

N_{DD}^+ : Konzentration von tiefen Donatoren

N_A^- : Konzentration von flachen Akzeptoren

Die Neutralitätsbedingung beschreibt die Tatsache, dass der Halbleiter elektrisch neutral ist und somit die Konzentration von Ladungsträgern und ionisierten Störstellen gleich groß ist. Die Konzentration der ionisierten Störstellen ist gemäß der Fermi-statistik: [Sze]

$$N_{D,DD}^+ = \frac{N_{D,DD}}{1 + g \cdot \exp\left(-\frac{E_{D,DD} - E_F}{k_b T}\right)} \quad (2.12)$$

$$N_A^- = \frac{N_A}{1 + g \cdot \exp\left(\frac{E_A - E_F}{k_B T}\right)} \quad (2.13)$$

mit: g : Entartungsfaktor (Für das Leitungsband $g=2$, da es Elektronen mit Spin up oder Spin down annehmen kann, für das Valenzband $g=4$, da Löcher mit Spin up oder Spin down angenommen werden können bei zusätzlicher Entartung des Valenzbandes (light hole, heavy hole))

$E_{D,DD}$, E_A : Energieniveaus der Störstellen

Eine theoretische Betrachtung der Kompensation ist nun durch Einsetzen der Konzentrationen und der Energieniveaus von Akzeptoren bzw. Donatoren zu erreichen. Dazu wird die Neutralitätsbedingung (2.11) mit den Formeln (2.9, 2.10, 2.12, 2.13) verknüpft. Durch numerisches Lösen des Gleichungssystems (Newton-Raphson-Verfahren) kann in Verbindung mit der Formel (2.4) der spezifische Widerstand in Abhängigkeit der Konzentrationen und der energetischen Lage der Störstellen bestimmt werden.

Eine Möglichkeit zur Kompensation überzähliger freier Ladungsträger ist die Dotierung über andersartige flache Störstellen, wobei hierbei die Konzentration der Kompensationsstörstelle bis auf 10^6 cm^{-3} genau stimmen müsste, was in der Praxis beim Kristallwachstum unmöglich bzw. nur punktuell zu realisieren ist. Beim Wachstum von Schichten mittels Molekularstrahlepitaxie (MBE) ist eine exaktere Dosierung der Kompensationskonzentration möglich, somit ist über die MBE eine Kompensation über flache Störstellen möglich. Ein Vorteil der Kompensation mit flachen Störstellen ist im Falle von CdTe zusätzlich die Erhöhung des $\mu\tau$ -Produkts gegenüber dem intrinsischen bzw. bewusst undotierten $\mu\tau$ -Produkt aufgrund der Umwandlung von Cadmium-Vakanzen in A-Zentren, die das $\mu\tau$ -Produkt nicht wesentlich beeinflussen. Cadmium-Vakanzen als tiefe Akzeptoren reduzieren das $\mu\tau$ -Produkt. [Fie5]

Eine weitere Möglichkeit ist die Kompensation über eine tiefe Störstelle in der Mitte der Bandlücke, wobei freie Ladungsträger in der Störstelle getrappt werden. Die tiefe Störstelle in der Bandmitte erzeugt ein so genanntes Fermi-Level-Pinning, d.h. das Fermi-niveau wird durch die tiefe Störstelle in der Mitte der Bandlücke gehalten und sorgt somit für quasi-intrinsische Verhältnisse. Allerdings sorgt das Trappen der Ladungsträger für eine Verschlechterung des $\mu\tau$ -Produkts.

CdTe hat typischerweise Restverunreinigungen von Akzeptoren im Bereich von 10^{15} cm^{-3} , was durch Spuren von Na, K und Mg aus der Rohstoffgewinnung von Cd und Te zu erklären ist [Fie4]. Eine stabile Kompensation von CdTe ist daher nur durch einen

tiefen Donator zu gewährleisten, wie in Abbildung 2-4 dargestellt ist [Fie1]. Es wird vermutet, dass ein Tellur-Antisite Defekt (Te_{Cd}) mit einem Energieniveau bei $E=E_{\text{LB}}-0.75$ eV, der als Donator fungiert, für den Kompensationseffekt in CdTe verantwortlich ist. [Fie3]

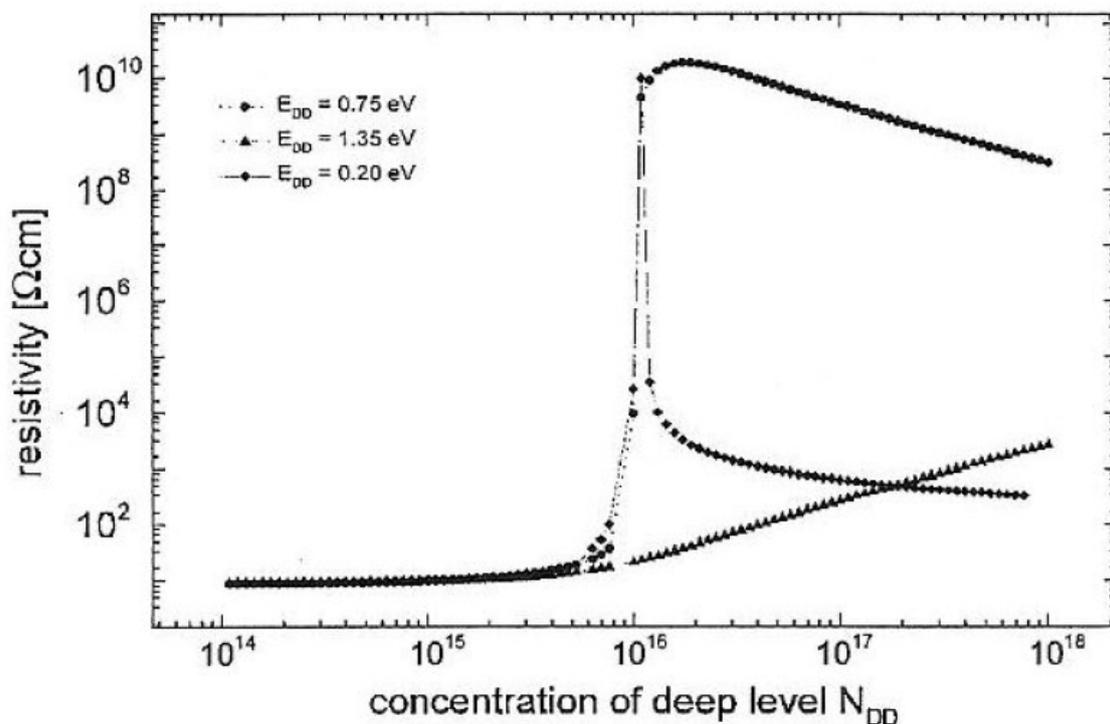


Abbildung 2-4: Abhängigkeit des spezifischen Widerstands von der Konzentration und energetischen Lage der tiefen Störstelle [Fie5]

2.3 Kristallzüchtung / -wachstum

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, Halbleiterkristalle zu erhalten. Bei der Herstellung von Volumenkristallen spricht man von Kristallzüchtung. Bekannte Beispiele der Kristallzüchtung sind das Czochralski-Verfahren oder das Bridgman-Verfahren. Werden epitaktische Halbleiterschichten abgeschieden, spricht man hingegen vom Kristallwachstum. Ein bekanntes Beispiel ist die bereits erwähnte Molekularstrahlepitaxie (MBE).

Das gezielte Einbringen von Verunreinigungen in einen Halbleiterkristall zur Veränderung der physikalischen und elektrischen Eigenschaften nennt man Dotierung. Eine Dotierung kann nach dem eigentlichen Kristallwachstum erfolgen, indem der gewünschte Dotierstoff beispielsweise durch Diffusion in den Kristall eingebracht wird. Eine weitere Möglichkeit stellt die Dotierung eines Kristalls während des Wachstums dar, indem der Dotierstoff bereits während des Wachstumsprozesses zugeführt wird.

2.3.1 Züchtung über gerichtetes Erstarren

Das Bridgman-Verfahren stellt eine Möglichkeit dar, Kristalle über gerichtetes Erstarren aus der Schmelze zu züchten. Die Schmelze befindet sich in einer beheizten, feststehenden Ampulle. Die Erstarrung gelingt über das Anlegen eines Temperaturgradienten. Damit die gesamte Ampulle den Temperaturgradienten durchläuft, kann entweder die Ampulle durch den Temperaturgradienten gezogen werden (Bridgman-Stockbarger-Verfahren), oder es kann mittels eines Mehrzonenofens das Temperaturprofil über die Ampulle hinweg verändert werden (Vertical Gradient Freeze). In beiden Fällen beginnt die Kristallisation mit Unterschreiten der Schmelztemperatur in der Tiegelspitze. Die Geschwindigkeit der Kristallisation lässt sich über die Geschwindigkeit regulieren, mit der der Temperaturgradient durchfahren wird. Der Züchtungsaufbau ist in Abbildung 2-5 dargestellt. Es existieren zwei möglichst scharf getrennte Temperaturzonen. Während im oberen Bereich die Temperatur (T_2) über der Schmelztemperatur liegt, liegt im unteren Bereich die Temperatur (T_1) darunter. Der Temperaturgradient zwischen den zwei Zonen wird über ein Strahlungsschild möglichst hoch gehalten. Die Erstarrung erfolgt beim Durchgang vom oberen in den unteren Temperaturbereich. Zum Ausgleich von Asymmetrien des Temperaturfeldes ist es zusätzlich möglich, die Ampulle während des Wachstums zu rotieren.

Die Form der Phasengrenze zwischen Schmelze und Kristall ist abhängig von den Temperaturen T_1 und T_2 , den Wärmeleitfähigkeiten von Kristall und Schmelze, sowie den Wärmeübergängen zwischen Heizelementen, Schmelze und Kristall. Abhängig vom Verlauf der Isothermen ändert sich die Gestalt der Wachstumsfront von einer konvexen hin zu einer konkaven Form.

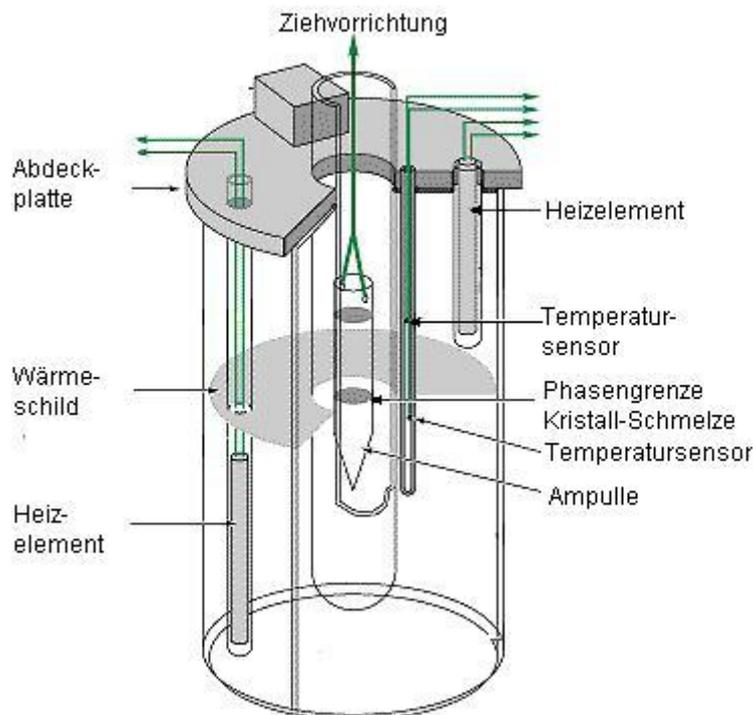


Abbildung 2-5: Kristallzüchtungsverfahren nach Bridgman-Stockbarger [Entnommen aus www.Nasatech.com]

Das Bridgman-Verfahren ist eines der state-of-the-art Verfahren zur Züchtung hoch-ohmiger CdTe-Kristalle. [Sau04, Fie2]

2.3.2 Segregation

Eine entscheidende Frage während der Züchtung eines Kristalls ist der Konzentrationsverlauf der beigemengten Komponenten. Die Zusammensetzung in der Anfangsphase wird vom Züchter vorgegeben, die Zusammensetzung des Kristalls wird durch den Verteilungskoeffizienten oder Segregationskoeffizienten vorgegeben.

Segregation bedeutet allgemein die Konzentrationsänderung eines oder mehrerer Elemente entlang einer gegebenen Richtung des Kristalls. Der Einbau der Komponenten wird durch die Wachstumskinetik bestimmt. Zum Vergleich der Konzentration einer bestimmten Komponente in ihrer Ausgangsphase mit der Konzentration, mit der diese Komponente in den Kristall eingebaut wird, wird der effektive Verteilungskoeffizient k_{eff} eingeführt:

$$k_{eff} = \frac{c_s}{c_{l,0}} \quad (2.14)$$

mit: c_s : Konzentration der Komponente im wachsenden Kristall

$c_{l,0}$: Konzentration der Komponente in der Ausgangsphase

Ist der effektive Verteilungskoeffizient $k_{\text{eff}}=1$, bedeutet das, dass die Konzentration des Stoffes in der Schmelze und im Kristall konstant bleibt. Gilt $k_{\text{eff}} \neq 1$, reichert sich der Stoff entweder im Kristall ($k_{\text{eff}} > 1$), oder in der Schmelze ($k_{\text{eff}} < 1$) an. Eine Folge der Anreicherung ist, dass für das weitere Kristallwachstum nicht mehr die gleiche Konzentration des Stoffes zur Verfügung steht. Im Falle einer gewollten Dotierung sorgt die Segregation somit für einen inhomogenen Einbau des Dotierstoffs entlang der Wachstumsrichtung.

Für den Konzentrationsverlauf einer gerichteten Erstarrung entlang der Wachstumsrichtung gilt die Scheil-Pfann-Gleichung: [Boh88]

$$c_s(x) = k_{\text{eff}} c_{l,0} (1-x)^{(k_{\text{eff}}-1)} \quad (2.15)$$

mit: $c_{l,0}$: Anfangskonzentration in Schmelze

x : relative Länge des gewachsenen Kristalls

Abbildung 2-6 stellt die Konzentrationsverläufe für verschiedene effektive Verteilungskoeffizienten dar:

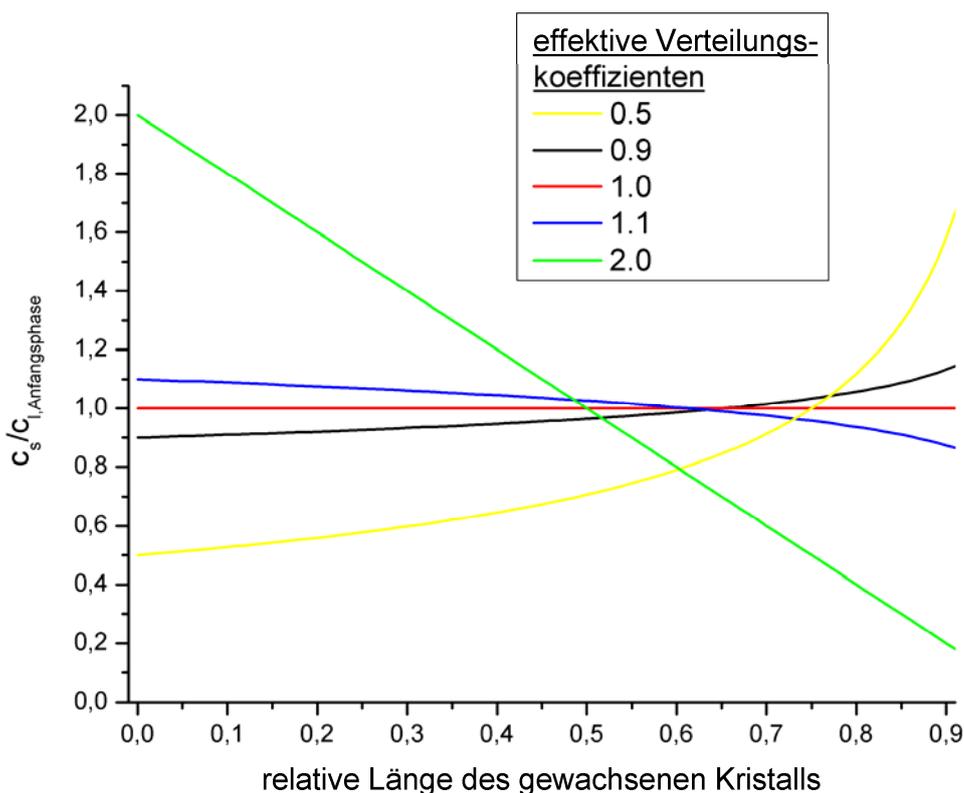


Abbildung 2-6: Verlauf der relativen Konzentration $c_s/c_{l,0}$ einer gelösten Komponente mit verschiedenen effektiven Verteilungskoeffizienten k_{eff} für die Normalerstarrung eines stabförmigen Kristalls

2.3.3 Dotierung mittels Diffusion

Das nachträgliche Einbringen von Dotierstoffen in einen bereits gewachsenen Kristall gelingt durch verschiedene Techniken. Ein häufig genutztes Verfahren ist die Dotierung mittels Diffusion, bei der der Dotierstoff auf den Halbleiterkristall aufgebracht wird. Ein Effekt, bei dem ungewollt Dotierstoff in das Halbleitermaterial eindiffundiert, nennt man Autodoping. Durch Verunreinigungen beispielsweise in der Wachstumskammer bei der MBE gelangt Material an den wachsenden Kristall und diffundiert ein. Die Diffusion gleicht die vorhandenen Konzentrationsunterschiede aus und das Material diffundiert in das Innere des Kristalls. Abhängig von der Art der Bereitstellung des Dotierstoffs ändert sich auch das Dotierungsprofil in den Kristall hinein. Im Falle einer endlichen Dotierstoffquelle auf dem Kristall, z.B. durch das Aufbringen einer dünnen Schicht von Dotierstoff auf die Oberfläche, entspricht das Dotierungsprofil einem „halben“ Gaußprofil mit seinem Maximum an der Oberfläche des Kristalls. Man spricht von einem Dotierstoffprofil einer Diffusion aus einer begrenzten Quelle: [Rug91]

$$c(x, t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt}} e^{-(x/2\sqrt{Dt})^2} \quad (2.16)$$

mit: c: Konzentration

D: Diffusionskonstante

Q: Oberflächenbelegung

2.3.4 Wachstum mittels Molekularstrahlepitaxie

Die Molekularstrahlepitaxie (MBE= molecular beam epitaxy) ermöglicht das Wachstum von einkristallinen, epitaktischen Halbleiterschichten auf einem Substrat und ist ein Verfahren der physikalischen Abscheidung aus der Gasphase (PVD). Epitaxie bedeutet das gerichtete Aufwachsen auf einem vororientiertem Substrat.

Das Substrat befindet sich in einer Wachstumskammer, in der ein Ultrahochvakuum herrscht. Das Substrat ist von Effusionszellen umgeben, in der durch eine hohe Temperatur das zu epitaxierende Material verdampft wird. Als gerichteter Molekularstrahl gelangt das Material zum Substrat, wo es epitaktisch aufwächst. Das Ultravakuum in der Wachstumskammer sorgt dafür, dass die Molekularstrahlen nicht an Restgas streuen. Das Substrat wird ebenfalls beheizt, um eine weitere Atombewegung auf der Oberfläche zu ermöglichen. Die Diffusion der Oberflächenatome sorgt für ein am Substrat orientiertes Aufwachsen der Halbleiterschicht.

Der Materialfluss der Effusionszellen wird mittels eines Shutters gesteuert. Daher ermöglicht die MBE das Wachstum von Stapeln von verschiedenen Halbleiterschichten, sowie scharfe Dotierkanten. Weiterhin ermöglicht die MBE eine gute Kontrolle der Dicke der gewachsenen Schicht.

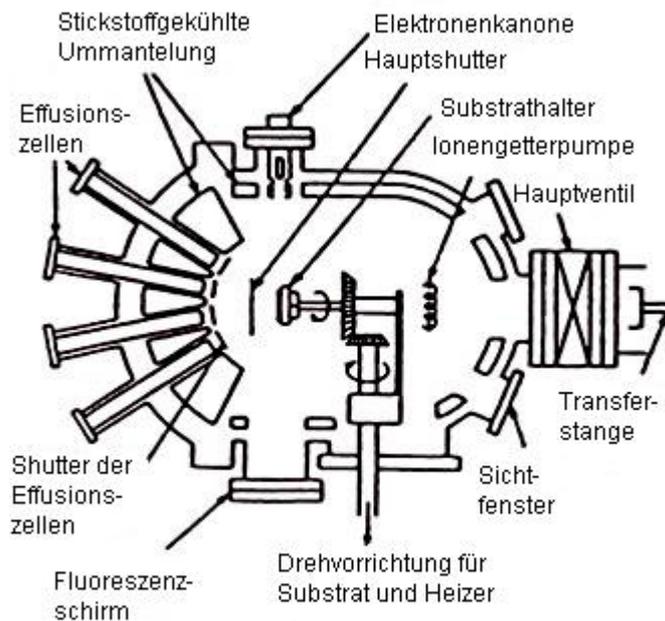


Abbildung 2-7: Schemazeichnung der Molekularstrahlepitaxie (MBE)

2.4 Charakterisierung

Ziel der hier vorgestellten Charakterisierung ist eine möglichst zerstörungsfreie Untersuchung der Proben. Dazu ist eine hohe Genauigkeit und Empfindlichkeit der Charakterisierungsmethoden wünschenswert. Einerseits ist es somit möglich, einen gezüchteten Kristall auf die Detektortauglichkeit vor der weiteren Verarbeitung zu überprüfen, andererseits kann durch die Verknüpfung verschiedener Charakterisierungsmethoden versucht werden, ein tieferes Verständnis sowohl von der Funktionsweise gezielt eingebauter Verunreinigungen, als auch von ungewollt eingebauten Verunreinigungen zu erhalten. Im nachfolgenden Kapitel werden verschiedene Charakterisierungsmethoden, wie beispielsweise die Photolumineszenz (PL) vorgestellt, die es ermöglicht, Arten von Übergängen und die daran beteiligten Störstellen, sowie deren Verteilung über den Kristall zu ermitteln. In Verbindung mit CoReMa (contactless resistivity mappings), die den spezifischen Widerstand und seine Verteilung bestimmen und darstellen kann, kann versucht werden, eine Korrelation einer Störstelle und der Störstellenkonzentration mit dem spezifischen Widerstand zu erhalten. Über SIMS-Messungen (secondary ion mass spectroscopy) wird die Elementenzusammensetzung einer Probe festgestellt. Die Probe wird jedoch durch das Sputtern zerstört, daher wurden die SIMS-Messungen hier lediglich zur Überprüfung der zerstörungsfreien Messungen hinzugezogen.

2.4.1 Photolumineszenz

Bei der Photolumineszenz (PL) handelt es sich um eine zerstörungsfreie und schnelle Methode zur Untersuchung von Halbleitern. Die Empfindlichkeit der Photolumineszenz wird in der Literatur mit einer Verunreinigungskonzentration von bis zu $c=5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ angegeben [Schr90]. Durch Anregung mit einem Laser einer Energie, die größer als die Energie der Bandlücke ist, werden Elektron-Loch-Paare erzeugt. Die erzeugten Elektron-Loch-Paare relaxieren zunächst unter der Abgabe ihrer Energie als Phononen an die Leitungsband-Unterkante (im Falle von Elektronen) und an die Valenzband-Oberkante (im Falle von Löchern). Da sich das System nicht im thermischen Gleichgewicht befindet, relaxiert das System über verschiedene Rekombinationsmechanismen zurück ins thermische Gleichgewicht, wie in Kapitel 2.4.1.1 beschrieben ist.

Tiefe Störstellen rekombinieren meist nichtstrahlend, d.h. sie thermalisieren über die Abgabe der Energie als Phononen. Photolumineszenz ist nur bei strahlenden Übergängen zu beobachten, daher sind tiefe Störstellen i.A. nur schwer zu detektieren. Allerdings sind die meisten Rekombinationsmechanismen an denen flache Störstellen beteiligt sind, strahlend, was eine Identifikation der Art des Übergangs und der daran beteiligten Verunreinigung ermöglicht. Die Messmethoden und die daraus resultierenden Möglichkeiten werden in den Abschnitten 2.4.1.2 bis 2.4.1.3 besprochen. [Schr90]

2.4.1.1 Rekombinationsmechanismen

Die Relaxation des mit einem Laser angeregten Systems zurück ins thermische Gleichgewicht geschieht über verschiedene Rekombinationsmechanismen, die schematisch in Abbildung 2-8 dargestellt sind:

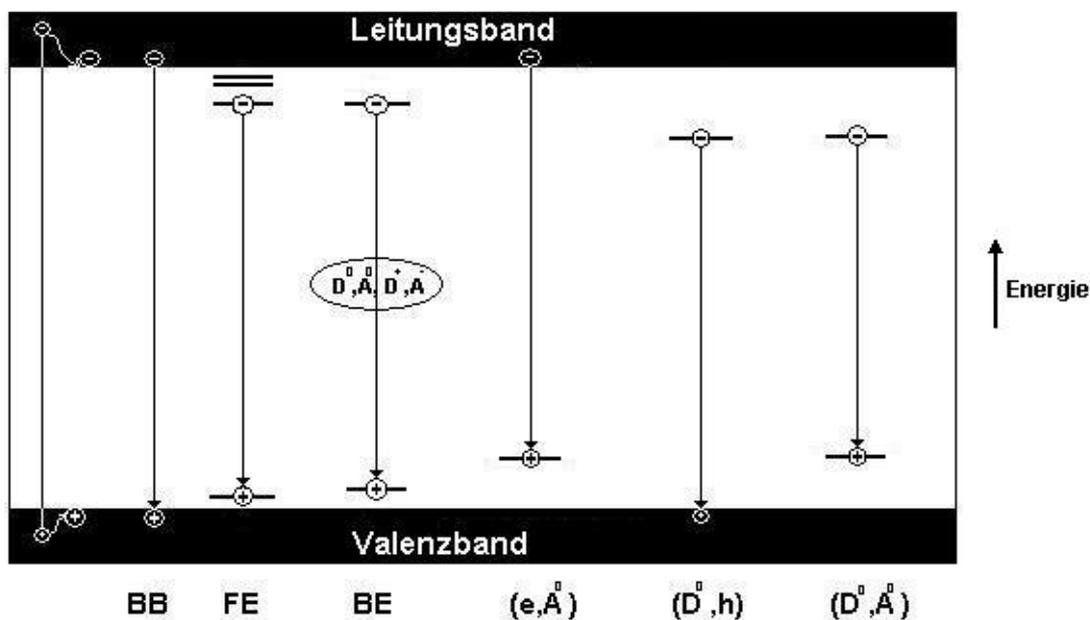


Abbildung 2-8: Schematische Darstellung der Rekombinationsmechanismen

Die Energie der Übergänge nimmt in dieser Schemazeichnung von links nach rechts ab. Nachfolgend werden die einzelnen Rekombinationsmechanismen ausführlich erläutert:

- Band-Band-Rekombination (BB): Rekombiniert ein Elektron aus dem Leitungsband mit einem Loch aus dem Valenzband, handelt es sich um eine Band-Band-Rekombination. Da mit steigender Temperatur die Störstellen ionisiert werden und somit mehr Ladungsträger in Valenz- und Leitungsband angeregt werden, sowie Rekombinationen über konkurrierende Rekombinationspfade reduziert sind, nimmt die Band-Band-Rekombination mit wachsender Temperatur zu. Band-Band-Rekombinationen treten bei tiefen Temperaturen nicht auf, da hier andere Rekombinationsprozesse energetisch günstiger sind. Die freiwerdende Energie beträgt:

$$E = E_G \quad (2.17)$$

mit: E_G : Bandlückenenergie

- Freies Exziton (FE): Bei einem freien Exziton handelt es sich um ein Quasiteilchen, das aus einem Elektron-Loch-Paar besteht, das über die Coulomb-Wechselwirkung aneinander gebunden ist. Die quantenmechanische Betrachtung des freien Exzitons ähnelt der Behandlung des Wasserstoffatoms. So existieren auch verschiedene angeregte Zustände unterhalb des Leitungsbandes [CoTa77].

$$E_n^{exz} = -\frac{\mu_r e^4}{8\epsilon^2 \epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad \text{mit} \quad \mu_r = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*} \quad (2.18)$$

mit: μ_r : reduzierte Masse von Elektron und Loch

m_e^*, m_h^* : effektive Masse von Elektron und Loch

ϵ : Dielektrizitätskonstante des Kristalls

Die Ionisationsenergie des Grundzustandes beträgt in CdTe ca. 10 meV [Kit89]. Die geringe Ionisationsenergie und die Erhöhung der Besetzungszahl von Phononen mit höherer Temperatur sorgen dafür, dass Exzitonen nur bei Temperaturen <100 K zu beobachten sind. Das freie Exziton wandert lokalisiert durch den Kristall, transportiert daher also keine Ladung im Kristall, dafür jedoch Energie. Es rekombiniert nach einer charakteristischen Lebensdauer unter Aussendung von Photonen. Die Rekombination wird begünstigt durch das Vorhandensein von Versetzungen und Störstellen im Kristall, daher ist die Existenz eines freien Exzitons ein Hinweis auf eine hohe kristalline Qualität. Die Energie des ausgesandten Photons beträgt:

$$E = E_G - E_{FE} \quad (2.19)$$

mit: E_{FE} : Energie des Grundzustandes des freien Exzitons

- Gebundenes Exziton (BE): Bildet sich ein Exziton aus einem freien Ladungsträger und einem an eine Störstelle gebundenen Elektron oder Loch, so spricht man von einem gebundenen Exziton (D^0, X), (A^0, X). Ebenso kann ein freies Exziton an einer ionisierten Störstelle haften bleiben (A^-, X), (D^+, X). Die Bindung an die Störstelle sorgt für eine Lokalisierung des Exzitons, da sich das gebundene Exziton in einem weiteren Orbit um die Störstelle aufhält. Daher sind gebundene Exzitonen auch Hinweise auf eine gute kristalline Qualität, allerdings aufgrund der Lokalisierung nicht im gleichen Maße wie ein freies Exziton. Die Rekombinationsenergie ist zusätzlich um die Bindungsenergie an die Haftstelle reduziert:

$$E = E_G - E_{FE} - E_B \quad (2.20)$$

mit: E_B : Bindungsenergie von freiem Exziton an Haftstelle

- Band-Störstellen-Übergang (e, A^0), (D^0, h): Rekombinationen von freien Ladungsträgern mit Störstellenladungsträgern heißen Band-Störstellen-Übergänge. Man unterscheidet zwischen der Rekombination eines freien Elektrons mit einem Loch, das an einen Akzeptor gebunden ist ((e, A^0) -Übergang) und der Rekombination eines Elektrons, das an einen neutralen Donator gebunden ist mit einem freien Loch (D^0, h). Nach der Abgabe eines Photons verbleibt eine ionisierte Störstelle.

Die Energie eines ausgesandten Photons beträgt:

$$E = E_G - E_{D,A} \quad (2.21)$$

mit: $E_{D,A}$: Ionisationsenergie von Donator bzw. Akzeptor

- Donator-Akzeptor-Paarübergänge (D^0, A^0) bzw. DAP-Übergang: Beim DAP handelt es sich um die Rekombination eines Elektrons eines Donators mit einem Loch eines Akzeptors. Die bei diesem Übergang freiwerdende Energie beträgt:

$$E = E_G - E_D - E_A + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0|\vec{r}|} \quad (2.22)$$

mit: $\frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0|\vec{r}|}$: Coulombwechselwirkungsterm

Sind ein Donator- und Akzeptoratom räumlich nahe benachbart, tritt bei der Besetzung der ionisierten Donatoren bzw. Akzeptoren mit zuvor angeregten Ladungsträgern eine Coulombwechselwirkung zwischen den dann besetzten Donatoren und Akzeptoren auf. Die Energie der Coulombwechselwirkung wird daher bei diesem Übergang zusätzlich frei, da die Dotierstoffatome anschließend wieder ionisiert vorliegen. Die Übergangswahrscheinlichkeit eines DAP-Übergangs ist exponentiell abhängig vom Abstand zwischen dem Donator- und Akzeptoratom. [Ble86]

Der Paarabstand r zwischen Donator und Akzeptor ist durch die Gitterstruktur und Gitterkonstante vorgegeben. Dadurch kann r nur diskrete Werte annehmen und das DAP-Spektrum hat demnach eine diskrete Verteilung der Peaks. [Bau00]

2.4.1.2 Phononen-Replika

Es ist weiterhin möglich, dass bei einem Übergang ein oder mehrere Phononen erzeugt werden. Dabei wird ein Teil der Übergangsenergie in Form von Gitterschwingungen an den Kristall abgegeben. Dieser Energieanteil steht bei der strahlenden Rekombination nicht mehr zur Verfügung, was zu einer Verringerung der Emissionsenergie sorgt:

$$E = E_{NPL} - n \cdot E_{LO} - m \cdot E_{TO} \quad (2.23)$$

mit: E_{NPL} : Null-Phononen-Linie, d.h. die gesamte Energie der Rekombination wird in ein Photon umgesetzt.

E_{LO}, E_{TO} : Energie eines longitudinal-optischen bzw. transversal-optischen Phonons

$n, m \in \mathbb{N}$

Die Reduktion der Energie sorgt für das Entstehen weiterer Photolumineszenz-Peaks, die jedoch dem gleichen Übergang und somit derselben Störstelle zuzuordnen sind. Diese niederenergetischen Peaks nennen sich Phononenreplika. Die Energie eines LO-Phonons in CdTe beträgt $E_{LO, CdTe} \sim 21$ meV [Nim82], was somit der Energiedifferenz zwischen zwei Phononenreplika entspricht. Die Intensitätsverteilung der Phononenreplika lässt sich mit einer Poissongleichung beschreiben, die Intensität des n -ten Phonons beträgt: [StHo95]

$$I(n) = I_0 \cdot e^{-S} \frac{S^n}{n!} \quad (2.24)$$

mit: S : Huang-Rhys-Parameter, der der mittleren Phononenanzahl eines Übergangs entspricht.

2.4.1.3 Temperaturabhängige Messungen

Mit temperaturabhängigen Photolumineszenzmessungen können Bindungsenergien von Störstellen bestimmt werden. Das ermöglicht durch einen Vergleich mit Literaturwerten eine Identifikation der Störstellen.

Eine Erhöhung der Temperatur sorgt z.B. dafür, dass exzitonische Übergänge aufgrund ihrer niedrigen Bindungsenergie und durch zunehmende Gitterschwingungen dissoziieren oder Störstellen ionisiert werden und das entsprechende Energieniveau für Rekombinationen nicht mehr zur Verfügung steht. Das Temperaturverhalten der verschiedenen

Übergänge ermöglicht eine Identifikation der beteiligten Störstellen. Hierbei bieten sich insbesondere Band-Störstellen-Übergänge an.

Eine Störstelle wird mit zunehmender Temperatur gemäß der Fermistatistik zunehmend ionisiert und die Ladungsträger der Störstelle werden an das Valenz- bzw. Leitungsband abgegeben (siehe Formeln 2.12 und 2.13). Die Reduktion von Ladungsträgern, die an Störstellen gebunden sind, „deaktiviert“ die Störstellen für Band-Störstellen-Rekombinationen. Die Möglichkeit der Rekombination hängt von der Wahrscheinlichkeit ab, ob eine Störstelle besetzt ist. Daher hängt die Rekombinationswahrscheinlichkeit über Band-Störstellen-Übergänge auch von der Fermistatistik ab. Konkurrierend wirkt der Effekt der reduzierten Anzahl freier Ladungsträger für den Band-Störstellen-Übergang bei Verringerung der Temperatur. Die Intensität des Band-Störstellen-Übergangs ist proportional zu den entsprechenden Übergangswahrscheinlichkeiten: [Sch92]

$$I_{hD^0, eA^0} \sim n \cdot N_{D^0, A^0} \quad (2.25)$$

mit: I_{hD^0, eA^0} : Intensität des Band-Störstellen-Übergangs

n : Konzentration freier Ladungsträger

N_{D^0, A^0} : Konzentration neutraler Donatoren bzw. Akzeptoren

Es wird angenommen, dass der Laser deutlich mehr freie Ladungsträger anregt als durch die thermische Anregung vorhanden sind und somit eine Veränderung der freien Ladungsträger durch die Veränderung der thermischen Anregung kompensiert. Somit gilt die Annahme, dass die Konzentration freier Ladungsträger n durch die Anregung durch den Laser konstant und ausreichend ist, daher gilt $I_{\text{Band-Störstellen-Übergang}} \sim N_{D^0, A^0}$. Somit lautet die Intensitätsabhängigkeit für den Band-Störstellen-Übergang in Abhängigkeit von der Temperatur: [UYu99]

$$I(T) = \frac{I_0}{1 + C \cdot \exp\left(-\frac{E_B}{k_B T}\right)} \quad (2.26)$$

mit: I_0 : Photolumineszenzintensität bei 0K

C : Fitparameter

E_a : Bindungsenergie der beteiligten Störstelle

In Abbildung 2-9 ist der theoretische, relative Intensitätsverlauf gegen die Temperatur aufgetragen. Es ist ein Sättigungsbereich bei niedrigen Temperaturen zu erkennen, der daher rührt, dass alle Störstellen neutral sind, daher können alle flache Störstellen zur Rekombination beitragen. Bei höheren Temperaturen beginnt die Ionisation der Störstellen und die Rekombinationswahrscheinlichkeit sinkt, bis schließlich alle Störstellen

ionisiert sind und keine Band-Störstellen-Rekombination mehr stattfinden kann. Wie an den theoretischen Verläufen für verschiedene Bindungsenergien zu erkennen ist, kann aufgrund des Intensitätsverlaufs auf die zugehörige Störstelle geschlossen werden.

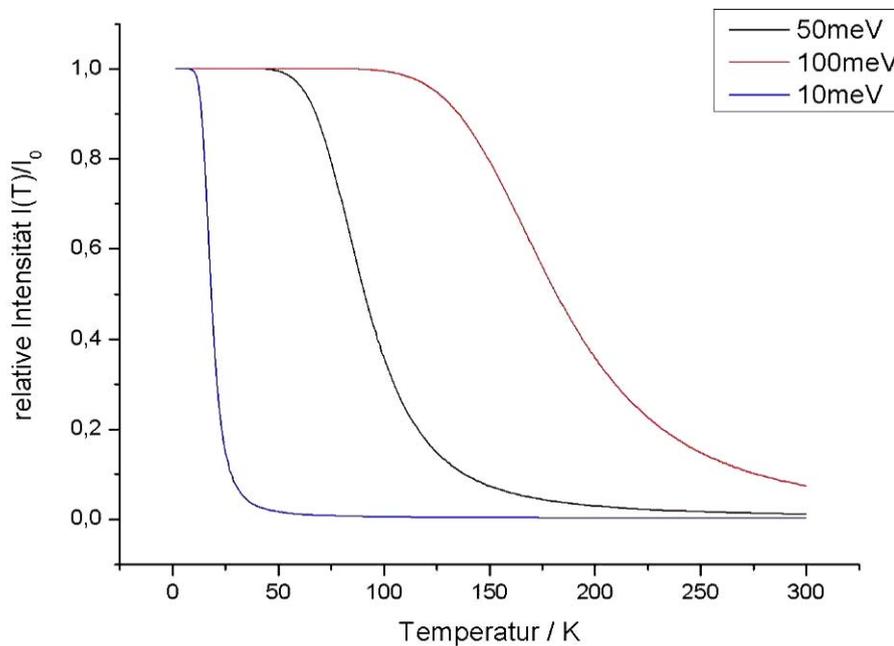


Abbildung 2-9: Theoretische, relative PL-Intensität aufgetragen gegen die Temperatur für eine Bindungsenergie von $E_B=10, 50$ und 100 meV

2.4.1.4 Emission in Abhängigkeit der Anregungsintensität

Die Art eines Übergangs kann mittels der Variation der Laserintensität identifiziert werden. Bei der theoretischen Betrachtung der Intensitätsabhängigkeit werden die verschiedenen Rekombinations- und Anregungsmöglichkeiten betrachtet und in einer Differentialgleichung dargestellt.

Abbildung 2-10 stellt die betrachteten Übergänge dar. Nachfolgend werden zur Vereinfachung nur exzitonische und Band-Störstellen-Übergänge betrachtet.

Unter der Annahme der Ladungsträgerneutralitätsbedingung $n=p$ und der Vernachlässigung der thermischen Dissoziation von freien und gebundenen Exzitonen gilt die gekoppelte Differentialgleichung:

$$\frac{dn}{dt} = iL - an^2 - gnN_{D^0} - enN_{A^0} \quad (2.27)$$

mit: i, a, g, e : Übergangsraten der Übergänge

L : Anregungsleistung

N_{D^0}, N_{A^0} : Konzentration von neutralen Donatoren und Akzeptoren

Gleichung 2.27 beschreibt die Änderung der Gesamtladungsträgerkonzentration, da einerseits durch den Laser Ladungsträger angeregt werden (L) und andererseits die erzeugten Elektron-Loch-Paare über verschiedene Mechanismen rekombinieren. Der Term n^2 ist exzitonischen Übergängen zuzuordnen, da die Übergangswahrscheinlichkeiten proportional zum Produkt der Ladungsträgerkonzentrationen sind. Die Terme proportional zu n sind Band-Störstellen-Übergängen zuzuordnen, da sich hier die Übergangswahrscheinlichkeit proportional zu dem Produkt der freien Ladungsträgerkonzentration n und der Konzentration der neutralen Störstellen N_{D0} bzw. N_{A0} bildet. Für die weiteren Betrachtungen gilt jeweils, dass die Konzentration der neutralen Störstellen konstant angenommen wird und diese nicht zusätzlich durch den Laser angeregt werden.

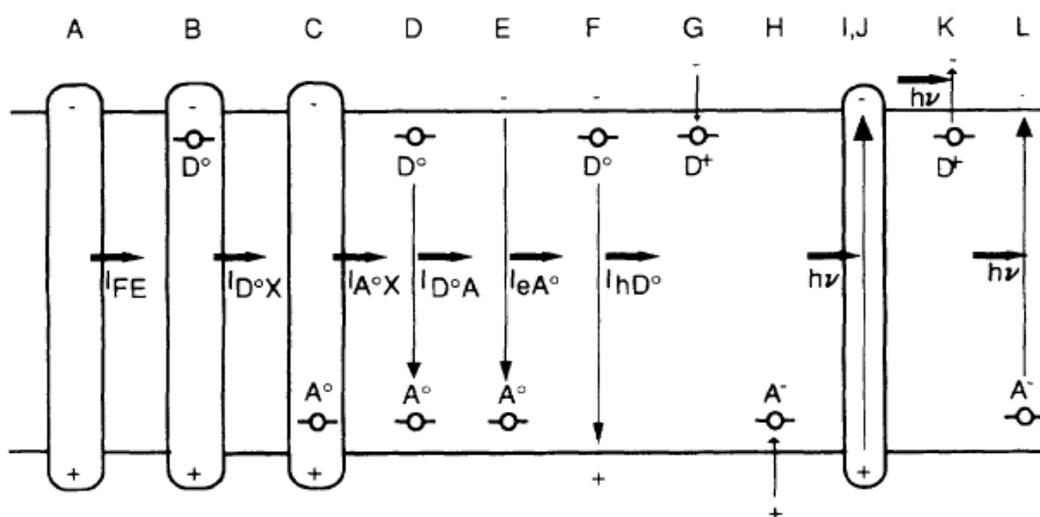


Abbildung 2-10: Strahlende und nicht-strahlende Übergänge zur theoretischen Betrachtung der Intensitätsabhängigkeit mit folgenden Bezeichnungen: A: Rekombination über freies Exziton, B,C: Rekombination über Donator- oder Akzeptor-gebundene Exzitonen, D: DAP-Übergänge, E,F: Band-Störstellen-Übergänge, G,H: nichtstrahlende Übergänge von freien Ladungsträgern zu ionisierten Störstellen, I: Anregung von e^+h^- -Paaren für $E_{\text{Laser}} > h\nu$, J: Anregung von e^+h^- -Paaren für $E_{\text{Laser}} = h\nu$, K,L: Anregung von neutralen Störstellen mittels Laser [Sch92]

Anschließend werden zwei Grenzfälle betrachtet:

- Band-Störstellen-dominierte Übergänge: Im Falle Band-Störstellen-dominierten Übergänge verschwindet der Rekombinationsterm an^2 aus Formel 2.27. Somit gilt im Gleichgewichtsfall:

$$L \sim n \quad (2.28)$$

mit: L: Laserleistung

n: Konzentration freier Ladungsträger

Unter zu Hilfenahme der Formel 2.25 und 2.27 ist somit die Intensität exzitonsischer Übergänge:

$$I \sim L^2 \quad (2.29)$$

mit: I: Lumineszenzintensität

Für Band-Störstellen-Übergänge gilt die Abschätzung:

$$I \sim L^1 \quad (2.30)$$

- Exzitonen-dominierte Übergänge: Bei Exzitonen-dominierten Übergängen werden die Rekombinationsterme proportional zu n vernachlässigt. Es gilt im Gleichgewichtsfall:

$$L \sim \sqrt{n} \quad (2.31)$$

Somit ergibt sich für exzitonsische Übergänge eine Abhängigkeit:

$$I \sim L^1 \quad (2.32)$$

Und für Band-Störstellen-Übergänge:

$$I \sim L^{1/2} \quad (2.33)$$

Die Betrachtung der beiden Grenzfälle schränkt die Abhängigkeiten für Band-Störstellen-Übergänge und für exzitonsische Übergänge ein. So gilt für die Abhängigkeit von Anregungsleistung zu Lumineszenzintensität:

$$I \sim L^k \quad (2.34)$$

Für exzitonsische Übergänge gilt: $1 < k < 2$

Für Band-Störstellen-Übergänge gilt: $0,5 < k < 1$

Für den vorliegenden Aufbau ergeben sich in der Praxis für Übergänge exponentielle Abhängigkeiten für k -Werte im Bereich von: [Sch92]

Für gebundene Exzitonen gilt: $1,4 < k < 1,7$

Für Band-Störstellen-Übergänge gilt: $0,85 < k < 1,1$

2.4.2 CoReMa

Bei der CoReMa (contactless resistivity mappings) handelt es sich um eine zerstörungsfreie Charakterisierungsmethode zur Bestimmung des spezifischen Widerstands. Die Methode ist auch als TDCM (Time dependent Charge Measurements) bekannt. Dabei wird der Halbleiter als Dielektrikum verstanden und in einen Kondensator eingebracht. Grundlegend für die Berechnung des spezifischen Widerstands mit der CoReMa ist das Verständnis der dielektrischen Relaxation. An den Kondensator mit eingebrachter

Halbleiterprobe wird eine Rechtecksspannung angelegt und mittels des Aufladungsverhaltens des Systems der spezifische Widerstand berechnet. Der Messbereich der Co-ReMa liegt im Bereich $10^6 \Omega\text{cm} < \rho < 10^{12} \Omega\text{cm}$. [Sti91]

2.4.2.1 Dielektrische Relaxation

Befindet sich der Halbleiter in einem äußeren elektrischen Feld, so werden an der Oberfläche des Halbleiters Ladungsträger induziert. Aufgrund des spezifischen Widerstands werden die lokalen Änderungen der Ladungsträgerkonzentration ausgeglichen. [Mül95]

Es gilt die Maxwellgleichung:

$$\text{div } \vec{D} = n - n_0 \quad (2.35)$$

mit: \vec{D} : dielektrische Verschiebung

$n - n_0$: Abweichung der Ladungsträgerdichte von der Gleichgewichtskonzentration

Weiterhin gilt die Kontinuitätsgleichung:

$$\text{div } \vec{J} = -\frac{\partial(n - n_0)}{\partial t} \quad (2.36)$$

mit: \vec{J} : Stromdichte

Ersetzt man die elektrische Flussdichte in Gleichung (2.35) mit:

$$\vec{D} = \epsilon\epsilon_0 \vec{E} \quad (2.37)$$

mit: \vec{E} : elektrische Feldstärke

ϵ_0 : Dielektrizitätskonstante im Vakuum

ϵ : Dielektrizitätskonstante des Halbleiters

ergibt sich:

$$\text{div } \vec{E} = \frac{(n - n_0)}{\epsilon\epsilon_0} \quad (2.38)$$

Setzt man weiterhin das ohmsche Gesetz:

$$\vec{J} = \sigma \cdot \vec{E}, \quad (2.39)$$

mit: σ : Leitfähigkeit

in die Kontinuitätsgleichung (2.36) ein, erhält man:

$$\operatorname{div} \vec{E} = -\frac{1}{\sigma} \frac{\partial(n - n_0)}{\partial t} \quad (2.40)$$

In Verbindung mit Gleichung (2.38) bekommt man:

$$\frac{\partial(n - n_0)}{\partial t} + \frac{\sigma}{\varepsilon\varepsilon_0} (n - n_0) = 0 \quad (2.41)$$

Die Lösung der Differentialgleichung lautet:

$$(n - n_0)(t) = (n - n_0)_{t=0} \cdot e^{-\frac{t}{\tau_D}} \quad (2.42)$$

mit: τ_D : Zeitkonstante

Die Zeitkonstante τ_D ist die dielektrische Relaxationszeit, die die Zeit beschreibt, ab der die Differenz zwischen der Ladungsträgerkonzentration und der Gleichgewichtskonzentration auf den Faktor $1/e$ abgefallen ist:

$$\tau_D = \frac{\varepsilon\varepsilon_0}{\sigma} = \varepsilon\varepsilon_0\rho \quad (2.43)$$

Die Zeitkonstante tritt beispielsweise bei der Auf- bzw. Entladung von Kondensatoren über einen Widerstand auf.

2.4.2.2 Messprinzip der CoReMa

Liegt ein Halbleiter zwischen zwei Kondensatorplatten, kann der Halbleiter als Dielektrikum verstanden werden. Im Ersatzschaltbild wird der Halbleiter als Parallelschaltung zwischen Kondensator und Widerstand dargestellt. [Sti91] (Abbildung 2-11)

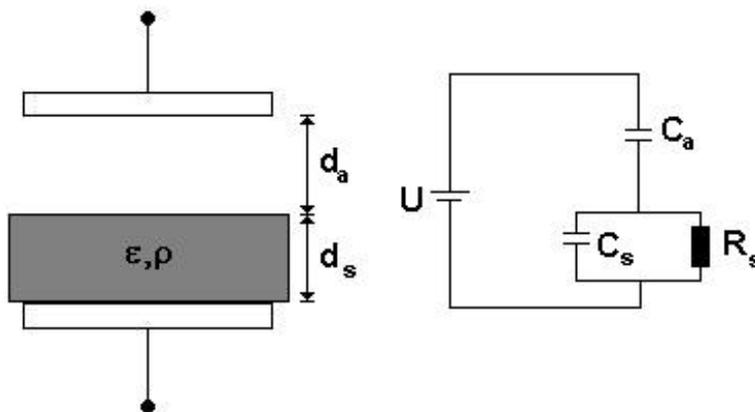


Abbildung 2-11: Schematischer Aufbau der CoReMa. Der Halbleiter ist grau dargestellt mit den Parametern Dielektrizitätskonstante ε und dem spezifischen Widerstand ρ . C_a entspricht der Kapazität des Plattenkondensators mit Abstand d_a und C_s bzw. R_s entsprechen der Kapazität und dem Widerstand der Halbleiterprobe

Die Gesamtkapazität der Schaltung ergibt sich aus der Kapazität C_a aus dem Luftspalt zwischen Kondensatorplatte und Halbleiterprobe und der Kapazität C_s der Halbleiterprobe selbst. Für die Reihenschaltung von Kondensatoren gilt:

$$C_{ges} = \frac{C_a C_s}{C_a + C_s} \quad (2.44)$$

Für die einzelnen Kapazitäten gilt:

$$C_a = \varepsilon_0 \frac{A}{d_a} \quad (2.45)$$

$$C_s = \varepsilon \varepsilon_0 \frac{A}{d_s} \quad (2.46)$$

Die Dielektrizitätskonstante von CdTe beträgt $\varepsilon_{CdTe}=10,36$ und von GaAs $\varepsilon_{GaAs}=13,1$. [Sze, Cap94]

Für die weitere Berechnung müssen zwei Grenzfälle betrachtet werden. Zum Zeitpunkt $t=0$ wird eine Rechtecksspannung angeschlossen, die das Kondensator-Halbleiter-System auflädt. Die Ladung fließt auf die beiden Kondensatoren und bringt die Ladung $Q(0)$ auf:

$$Q(0) = C_{ges} \cdot U \quad (2.47)$$

Der Kondensator C_s wird über den Widerstand R_s entladen, bis der Halbleiter feldfrei ist. Zum Zeitpunkt $t \rightarrow \infty$ liegt die gesamte Ladung des Systems auf dem Kondensator C_a :

$$Q(\infty) = C_a \cdot U \quad (2.48)$$

Unter Beachtung der Maschenregel erhält man für die Zeitabhängigkeit der auf den Kondensatorplatten deponierten Energie:

$$Q(t) = \frac{C_a^2}{C_a + C_s} U \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_D}}\right) + Q(0) \quad (2.49)$$

Der theoretisch berechnete Ladungsverlauf des Systems wird schematisch in Abbildung 2-12 dargestellt. [Sti91]

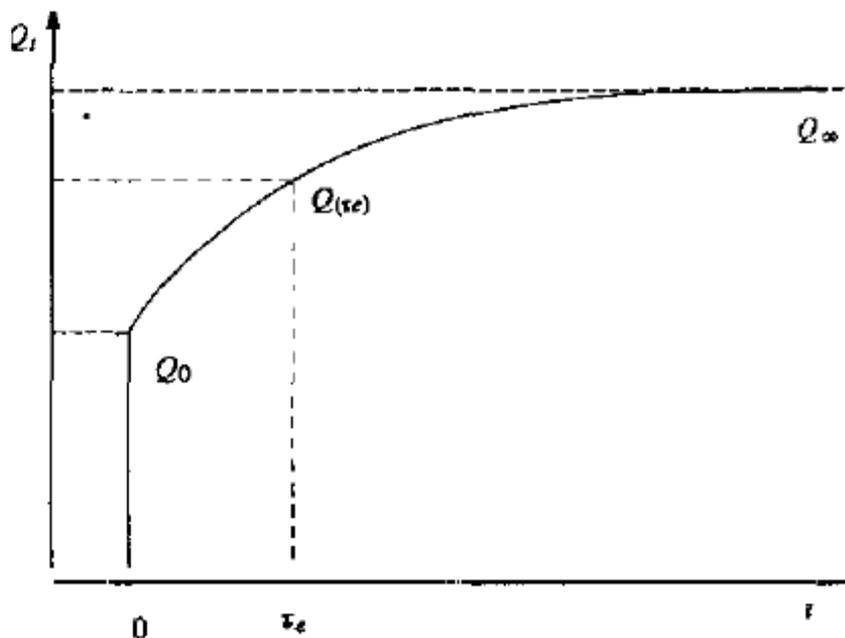


Abbildung 2-12: Schematische Darstellung des Auf- bzw. Entladevorgangs des Systems Kondensator-Halbleiter [Sti91]

Mit der Definition der Relaxationszeit τ durch $\tau = R_s(C_s + C_a)$ und Formel 2.43 erhält man:

$$\rho = \frac{C_s \tau_d}{(C_a + C_s) \epsilon \epsilon_0} = \frac{Q(0) \tau_d}{Q(\infty) \epsilon \epsilon_0} \quad (2.50)$$

Durch Anfitzen von $Q(0)$, $Q(\infty)$ und der Zeitkonstanten τ_d lässt sich der spezifische Widerstand errechnen.

2.4.3 Photoleitfähigkeit

Die Photoleitfähigkeit ist eng mit dem $\mu\tau$ -Produkt verknüpft [Bub92] und eignet sich zur Identifikation der Energie von photoaktiven Störstellen durch eine Variation der Beleuchtungswellenlänge. Weiterhin ist die Photosensitivität ein Maß für die Lebensdauer von photoinduzierten Ladungsträgern. Zur Bestimmung der Photoleitfähigkeit wird eine Probe mit einer Lichtquelle beleuchtet und Ladungsträger werden angeregt. Wird die Probe mit Licht einer Energie größer der Bandlückenenergie beleuchtet, werden Elektronen aus dem Valenzband angeregt und es bilden sich Elektron-Loch-Paare. Ist die Energie kleiner als die Bandlückenenergie, erhöht sich die Photoleitfähigkeit ebenso aufgrund der Anregung von Ladungsträgern aus tiefen Störstellen. Flache Störstellen werden bei Raumtemperatur als vollständig ionisiert angesehen und tragen somit nicht zur Photoleitfähigkeit bei.

Der Zusammenhang zwischen Leitfähigkeit und Ladungsträgerkonzentration ergibt sich aus der reziproken Abhängigkeit von Leitfähigkeit σ und spezifischem Widerstand ρ :

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = e(n\mu_n + p\mu_p) \quad (2.51)$$

Wird die Probe zusätzlich beleuchtet, werden zusätzliche Ladungsträger angeregt und es erhöht sich die Leitfähigkeit der Probe um die Photoleitfähigkeit $\Delta\sigma$ gegenüber dem Leitfähigkeitswert im Dunkeln σ_0 . Wird nur eine Ladungsträgerart betrachtet, gilt:

$$\sigma_0 + \Delta\sigma = e\mu_n(n_0 + \Delta n) \quad (2.52)$$

mit: Δn : photoinduzierte Ladungsträger

Da sich das System jedoch nicht im thermischen Gleichgewicht befindet, rekombinieren die Elektron-Loch-Paare nach einer bestimmten Lebensdauer τ_n . Somit gilt für die Anzahl der photoinduzierten Ladungsträger:

$$\Delta n = G \cdot \tau_n \quad (2.53)$$

mit: G : Generationsrate

Man erhält somit für die Photoleitfähigkeit:

$$\Delta\sigma = e\mu_n\tau_n G \quad (2.54)$$

Durch Umstellen von Gleichung 2.54 erkennt man, dass das $\mu\tau$ -Produkt ein Maß für die Empfindlichkeit des Halbleiters für Photoanregung und damit für die Photoleitfähigkeit ist:

$$\frac{\Delta\sigma}{eG} = \mu_n\tau_n \quad (2.55)$$

Die Photoempfindlichkeit eines Halbleiters wird mit dem Verhältnis von Photoleitfähigkeit $\Delta\sigma$ zu der Leitfähigkeit unter Beleuchtung angegeben:

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma_0 + \Delta\sigma} = \frac{\sigma_{hell} - \sigma_{dunkel}}{\sigma_{hell}} = \frac{\tau_n G}{n_0 + \tau_n G} \quad (2.56)$$

3 Experimenteller Aufbau

In Kapitel 3 wird ein Überblick über die experimentelle Umsetzung der in Kapitel 2 besprochenen Charakterisierungsmethoden gegeben werden.

3.1 Photolumineszenzaufbau

Es wurden einige Veränderungen am bestehenden Photolumineszenzaufbau vorgenommen. Für eine bessere Kompatibilität wurde eine Messumgebung mittels Labview programmiert. Um die Steifigkeit des Aufbaus zu verbessern und um Platz für die Erweiterung zu schaffen, wurde der optische Aufbau neu konzipiert. Zur Verbesserung des Auflösungsvermögens wurde ein Mikroskop in den Strahlengang eingebaut, das es nun ermöglicht, orts aufgelöst Messungen mit einer Fokusgröße von $<15\ \mu\text{m}$ bei $T=77\ \text{K}$ durchzuführen. Für einen Kühkopf Model 21 der Firma CTI Cryogenics wurde ein Kälteschild und ein Rezipient konstruiert, der es erlaubt Tieftemperaturspektren bei $T\sim 15\ \text{K}$ aufzunehmen. Abbildung 3-1 stellt den gesamten Photolumineszenzaufbau dar:

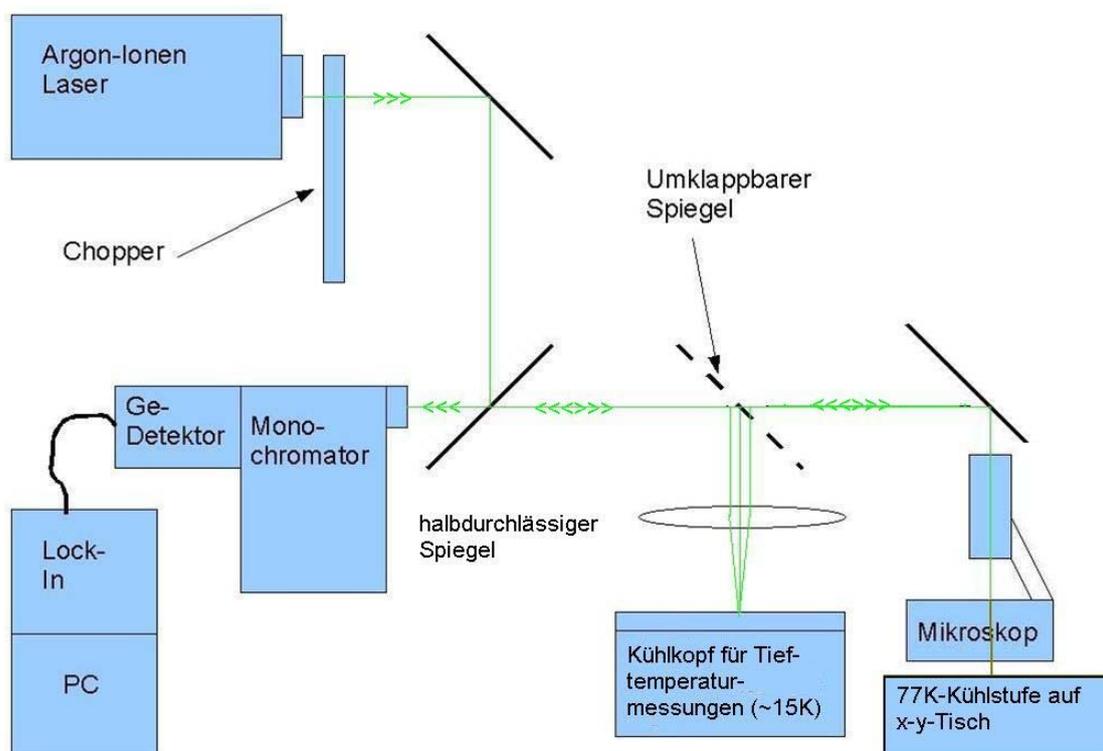


Abbildung 3-1: Schematische Darstellung des PL-Messplatzes

Für die Erzeugung von Elektron-Loch-Paaren steht ein luftgekühlter Argon-Ionen Laser der Firma Spectra Physics mit einer Ausgangsleistung von 10 mW bis 170 mW zur

Verfügung. Direkt nach dem Laser folgt ein 488 nm-Passfilter. Das Laserlicht wird mit einem Chopper zerhackt, um so eine periodische Modulation der Lumineszenz zu erreichen. Das Choppersignal wird als Triggersignal direkt an den Lock-In-Verstärker ausgegeben. Nach Reflexion an einem Spiegel trifft das Laserlicht auf einen halbdurchlässigen Spiegel mit einer guten Reflexion von grün-blauem Licht und einer guten Transmission von gelb-rot-infrarotem Licht. Die Wahl des Transmissions-Reflexions-Verhaltens des halbdurchlässigen Spiegels reduziert die Verluste durch die ungewollte Auskopplung von Laserlicht. Der Zweck dieses halbdurchlässigen Spiegels ist die Einkoppelung des Laserstrahls in die optische Achse des Monochromators. Die Intensität des Laserlichts auf der Probe wurde mit einem Fieldmaster der Firma Laser 2000 bestimmt und ergab eine Abschwächung der Anfangsleistung durch Filter, Chopper etc. auf ca. 2,8 % der angezeigten, emittierten Laserleistung. Durch die Kenntnis der Abschwächung kann durch Ablesen der Ausgangsleistung des Lasers die Laserleistung bestimmt werden, die auf die Probe fällt.

Durch die Wahl der Position eines verschiebbaren Spiegels kann zwischen zwei Experimentiereinheiten gewählt werden:

- Tiefemperaturkühlkopf: Das Laserlicht wird mittels eines handelsüblichen Photoobjektivs auf die Probe fokussiert. Erreichbare Fokusgrößen liegen im Bereich von 200 μm . Die Probe befindet sich in einem Rezipienten, in dem ein Vakuum von 10^{-6} Pa herrscht. Der Rezipient wird mittels eines Kühlkopfes auf eine Temperatur von $T \sim 15$ K heruntergekühlt. Der Rezipient und der Kühlkopf befinden sich auf einem separaten Lasertisch zur Abkopplung der Stöße und Vibrationen des Kühlkopfes.
- Mikroskopoptik: Die zweite Möglichkeit besteht im Durchgang des Laserlicht durch ein Mikroskop, das Fokusgrößen von < 15 μm ermöglicht. Die Proben befinden sich in einem Flüssigstickstoff-Durchflusskryostat der Firma CryoVac, das die Proben auf bis zu 77 K herunterkühlen kann. Die Temperatur wird mittels einer Si-Diode gemessen. Eine manuelle Regulierung des Stickstoffflusses ermöglicht es, die Temperatur über eine längere Zeit konstant zu halten. Durch die Variation des Stickstoffflusses wird es somit möglich, temperaturabhängige Spektren aufzunehmen. Der Rezipient ist auf einem computergesteuerten xy-Tisch montiert, der eine Verschiebegenauigkeit von 0,5 μm aufweist.

Nach der Anregung der Probe durch den Laser sendet die Probe Lumineszenzlicht aus, das mittels der Optik parallelisiert wird und über den Spiegel wieder in die optische Achse des Monochromators gebracht wird. Da das Lumineszenzlicht eine deutlich größere Wellenlänge im Bereich von rotem bis infrarotem Licht hat, wird die Signalintensität durch den halbdurchlässigen Spiegel nur unwesentlich reduziert. Eine weitere Linse, die in der Schemazeichnung nicht vorhanden ist, sorgt für eine Fokussierung des

Signals auf den Eingangspalt des Monochromators. Der Monochromator SpectraPro 750 der Firma Acton Research Corporation hat ein Gitter zur spektralen Zerlegung des Lumineszenzlichtes mit einer Auflösung von 0,1 nm. Das Gitter ist auf einem Turm angebracht, auf dem sich zwei weitere Gitter mit einem veränderten Wellenlängenbereich befinden, die bei Bedarf das aktive Gitter ersetzen. Nach spektraler Zerlegung des Lumineszenzlichts wird die Intensität der aktuellen Wellenlänge an einem stickstoffgekühlten Germanium-Detektor der Firma North Coast Scientific gemessen und über den oben genannten Lock-In Verstärker an den PC ausgegeben.

Der Messaufbau ermöglicht folgende Messmethoden:

- Messung von Energie-Intensitätsabhängigen PL-Spektren für Temperaturen von 15 K bzw. 77 K bis 300 K.
- Störstellenmappings mit einer Ortsauflösung von 10 μm zur Betrachtung der Homogenität einer Probe
- Linescans, d.h. orts aufgelöste Energie-Intensitäts-Spektren
- Intensitätsabhängige Photolumineszenz-Spektren durch Variation der Laserleistung zur Bestimmung der Übergangsart
- Temperaturabhängige PL-Spektren mit einer Temperaturgenauigkeit von ca. 5 K zur Bestimmung von Bindungsenergien von Störstellen

3.2 CoReMa-Aufbau

Zur Bestimmung des spezifischen Widerstands werden CoReMa-Messungen durchgeführt (vgl. Kapitel 2.4.2). Der benutzte Aufbau ist in Abbildung 3-2 skizziert:

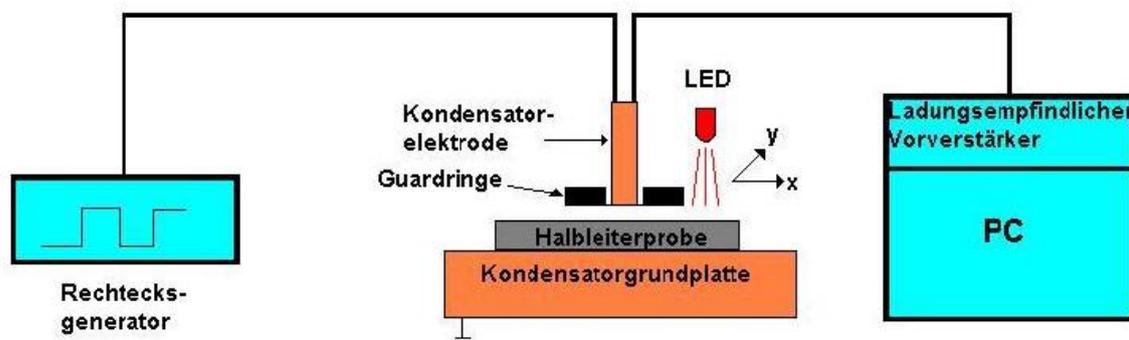


Abbildung 3-2: Schematischer Aufbau der CoReMa

Über einen Rechtecksgenerator wird eine Rechtecksspannung mit einer Amplitude von 5 V angelegt, die für eine Auf- und Entladung des Systems, bestehend aus Kondensator

und Halbleiter als Dielektrikum sorgt. Ein ladungsempfindlicher Vorverstärker registriert die Ladung auf den Kondensatorplatten, welche auf einem PC dargestellt und vollständig ausgewertet wird. An die Kondensatorgrundplatte (unten) wird eine Rechteckspannung angelegt. Die obere Kondensatorelektrode, die eine Grundfläche von ca. 1 mm^2 hat, liegt auf Masse. Guardringe um die obere Elektrode schirmen die elektrischen Felder nach außen ab. Dadurch wird sichergestellt, dass lediglich die Halbleiterprobe unterhalb der oberen Elektrode von dem elektrischen Feld durchdrungen wird. Dadurch erreicht die CoReMa eine Ortsauflösung von 1 mm^2 . Zusätzlich ist die obere Elektrode auf einer verschiebbaren x-y-Einheit fixiert, was es ermöglicht, über die Probe zu rastern. Zur Bestimmung der Photoleitfähigkeit steht eine LED mit einer Wellenlänge von $\lambda=0,95\text{ }\mu\text{m}$ zur Verfügung.

Es sind somit die folgenden Messmethoden möglich:

- Quantitative Bestimmung des spezifischen Widerstands
- Das Abrastern der Probe mit gleichzeitiger Bestimmung des spezifischen Widerstands mit einer Ortsauflösung von 1 mm^2 ermöglicht eine ortsaufgelöste Darstellung des spezifischen Widerstands (Mapping)
- Bestimmung und Mapping der Photoleitfähigkeit

4 Untersuchungen an dicken CdTe-Schichten

Für die medizinische Diagnostik mit verwendeter Röntgenstrahlung einer Energie von ca. 70 keV genügt für eine ausreichende Absorptionseffizienz bereits eine Schichtdicke von 300 μm . Daher stellt die großflächige, schnelle Abscheidung von dicken CdTe-Schichten eine interessante Alternative zur Züchtung von Volumenkristallen bei der Herstellung von Röntgendetektoren dar. [Sel06] Ebenso ermöglicht die Abscheidung ein gezieltes Schichtdickenwachstum mit Eigenschaften, die nach Maß kontrolliert werden können (Dotierung). Durch die Möglichkeit einer exakten Dotierung kann ein hoher spezifischer Widerstand über die Kompensation mit flachen Störstellen erreicht werden. Der Vorteil gegenüber einer Kompensation mit tiefen Störstellen liegt darin, dass das $\mu\tau$ -Produkt nicht wesentlich reduziert wird.

Es wurde untersucht, ob ein Wachstum von epitaktischen CdTe-Schichten auf einem Fremdsubstrat mit einer ausreichenden kristallinen Qualität möglich ist. Weiterhin wurden die für Detektoranwendungen relevanten Parameter wie der spezifische Widerstand ρ und das $\mu\tau$ -Produkt bestimmt. Es wurden zudem die Verunreinigungen und deren Verteilungen untersucht, sowie der Einfluss auf die Materialparameter für die Detektoranwendung.

Die vorliegenden CdTe-Schichten wurden mittels einer modifizierten MBE-Anlage auf einem GaAs-Substrat aufgewachsen. Als Quellenmaterial wurde vorsynthetisiertes, polykristallines, undotiertes CdTe verwendet, das auf ein semi-isolierendes, epitaxievorbereitetes LEC (liquid encapsulated Czochralski) GaAs-Substrat mit (100)-Orientierung abgeschieden wurde. GaAs zeichnet sich durch die gute Verfügbarkeit, sowie die gute Oberflächenqualität für die Epitaxie aus. Die Quelltemperatur betrug 640 $^{\circ}\text{C}$, was einem Teilchenfluss von 10^{-3} BEP (beam equivalent pressure) entspricht; die Substrattemperatur betrug 375 $^{\circ}\text{C}$. Die CdTe Schichtdicke beträgt 100 μm , was einer mittleren Wachstumsgeschwindigkeit von 10 $\mu\text{m}/\text{h}$ entspricht. Typischerweise werden bei der epitaktischen Abscheidung mittels MBE Schichtdicken von kleiner als 1 μm als dünn bezeichnet und Schichtdicken größer als 1 μm werden als dicke Schichten bezeichnet.

Im Zuge der Charakterisierung wurde das Substrat mittels einer Ätze entfernt, um einen Vergleich der Schichteigenschaften mit und ohne Substrat zu erhalten. Weiterhin wurden intensitätsabhängige und temperaturabhängige PL-Spektren aufgenommen, um so die Übergangsarten und die daran beteiligten Ionisations- bzw. Aktivierungsenergien zu bestimmen. Ein Vergleich der Ionisationsenergien mit Werten aus der Literatur ermöglicht eine Identifikation der beteiligten Störstellen. Zur Bestimmung des spezifischen Widerstands wurde das Substrat entfernt und I-U-Kennlinien wurden aufgenom-

men. Das $\mu\tau$ -Produkt wurde mit der Hecht Relation aus Detektorspektren eines α -Strahlers (^{241}Am) der CdTe-Schicht mit GaAs-Substrat bestimmt.

4.1 Photolumineszenz-Tieftemperaturspektrum bei 15K für die CdTe-Schicht mit GaAs-Substrat

Tieftemperaturspektren bieten ein hohes Maß an Informationen, da wie in der Kapitel 2.4.1.1 erwähnt, aufgrund der geringen Temperatur, Exzitonen nicht thermisch dissoziieren und Störstellen nicht vollständig ionisiert vorliegen. Aus diesem Grund haben sich Photolumineszenz-Tieftemperaturspektren zu einem Standardwerkzeug der optischen Untersuchungen entwickelt.

In Abbildung 4-1 ist ein PL-Spektrum der dicken CdTe-Schicht mit darunterliegendem GaAs-Substrat dargestellt. Die Probentemperatur während der Messung betrug ca. 15 K. Das Photolumineszenzsignal der CdTe-Schicht ist sehr hoch und das Spektrum entspricht dem von CdTe Bulkmaterial. Das Spektrum lässt sich in drei Bereiche einteilen:

- Exzitonischer Bereich von ca. 1,56 eV bis 1,60 eV. Ein Vergleich mit der Literatur [Nir04] ordnet die Peaks bei $E=1581,6$ meV (A^0, X) und bei $E=1589,7$ meV (D^0, X) gebundenen Exzitonen zu. Haftstellen sind die Verunreinigungen flacher Störstellen wie As, Ga und In.
- Der Bereich von 1,50 eV bis 1,56 eV wird Übergängen mit direkter Beteiligung flacher Störstellen, wie Band-Störstellen-Übergängen oder Donator-Akzeptor-Paarübergängen zugewiesen. Hier handelt es sich um einen Band-Störstellen-Übergang von einem Elektron zu einem neutralen Akzeptor (As). Der Nachweis des flachen Akzeptors As wird in Kapitel 4.1.1.3 geführt. Es sind noch zwei Phononenreplika des zugehörigen Übergangs vorhanden. Die Energiedifferenz zwischen den einzelnen Peaks beträgt jeweils ca. 21 meV, was der Energie von longitudinal-optischen Phononen im CdTe entspricht.
- Die Bande im Energiebereich von 1,30 eV bis 1,50 eV wird einem $[D^0, A^0]$ -Übergang mit Beteiligung eines A-Zentrums zugeordnet. [Hof92] Ein A-Zentrum ist ein Komplex, der sich aus einer Cd-Vakanz und einem Donator (Halogen auf nächstem Te-Platz oder III-Element auf nächstem Cd-Platz) bildet. Somit bildet das A-Zentrum ($[V_{\text{Cd}}{}^2\text{D}_{\text{Te}}{}^+]^-$ (mit D:Donator)) einen Akzeptor aus. Die Bildung von A-Zentren durch die Zugabe von flachen Donatoren sorgt aufgrund der Reduktion der Cadmium-Vakanzen, die als tiefe Akzeptoren als Einfangzentren wirken, zu einer Erhöhung des $\mu\tau$ -Produkts [Fie5]. Man erkennt die Nullphononen-Linie bei $E=1457,1$ meV, sowie vier Phononenreplika im Abstand von ca. $\Delta E=21$ meV.

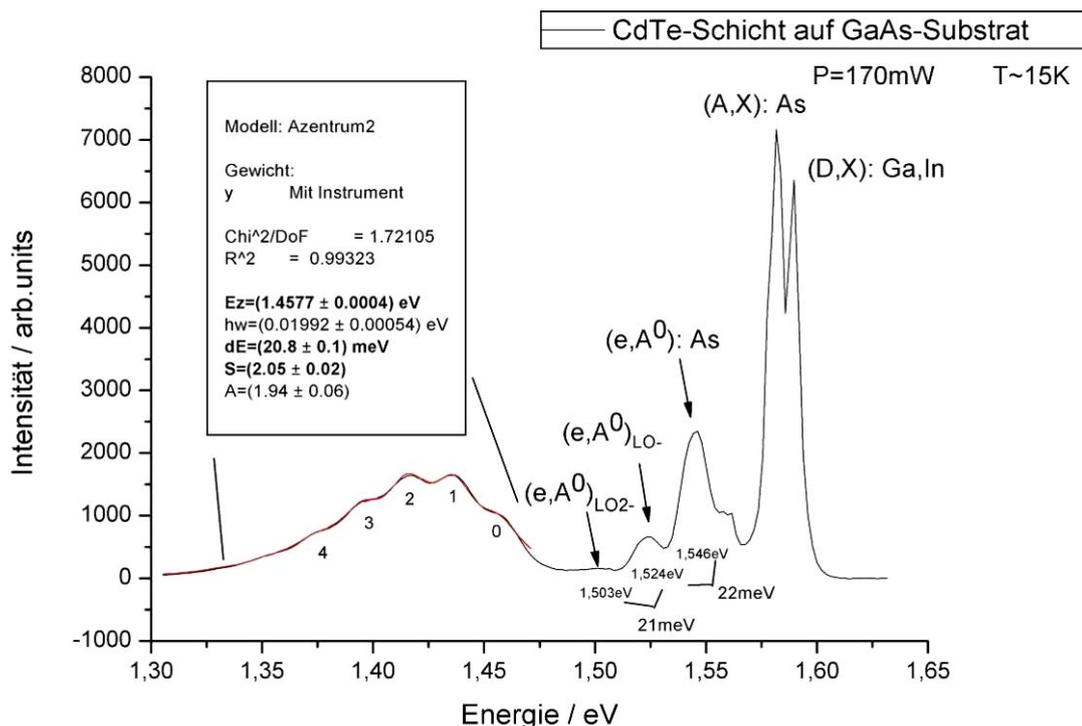


Abbildung 4-1: Photolumineszenz-Tieftemperatur Spektrum der 100 μm dicken CdTe-Schicht auf einem GaAs-Substrat bei einer Temperatur von $T \sim 15$ K und einer Anregungsleistung von 170 mW

Zur Bestimmung des Huang-Rhys-Parameters wurde der Übergang mit Beteiligung des A-Zentrums angefitet. Als Fitfunktion wurde die Intensitätsabhängigkeit für Phononenübergänge nach Formel 2.24 mit fünf gaußförmigen Peaks überlagert. Der Fehler der Intensität beträgt 5 % und wurde in den Fit miteinbezogen, jedoch nicht dargestellt. Der Fit ergibt für das A-Zentrum folgende Werte:

Nullphononenlinie: $E=(1457,7 \pm 0,4)$ meV

Phononenenergie: $E_{\text{LO}}= (20,8 \pm 0,1)$ meV

Huang-Rhys-Parameter: $S= 2,05 \pm 0,02$

Aus der energetischen Lage der Nullphononenlinie lässt sich die Bindungsenergie des A-Zentrums bestimmen. Die Energie eines emittierten Photons bei einem $[D^0, A^0]$ -Übergang ergibt sich nach Formel 2.22. Da der am Übergang beteiligte Donator nicht bekannt ist, werden die zwei möglichen vorhandenen Donatoren (Ga, In) und deren energetische Lage betrachtet (siehe Anhang A.1). Der Fehler ergibt sich aus der Mittelung der beiden energetischen Lagen. Man erhält $E_D=(14,0 \pm 0,1)$ meV. Es wird die Bandlückenenergie bei 0 K von $E=1606$ meV angenommen. Der Fehler der Bandlückenenergie ergibt sich aus der Ungenauigkeit der Temperatur ($s_T=20$ K) zu $s_{Eg}=6$ meV.

Nach Vernachlässigung der Coulomb-Wechselwirkung ergibt sich eine Ionisationsenergie des A-Zentrums von:

$$E_{A\text{-Zentrum}} = (134 \pm 6) \text{ meV}$$

In Tabelle 2 sind die charakteristischen Werte des A-Zentrums für verschiedene, zur Bildung mögliche Donatoren aufgelistet:

Tabelle 2: Charakteristische Werte wie Ionisationsenergie, Huang-Rhys-Parameter und Phononenenergie für die möglichen am A-Zentrum beteiligten Donatoren [StHo95]

<i>Donator</i>	<i>Hauptgruppe</i>	<i>Ionisationsenergie / meV</i>	<i>Huang-Rhys-Parameter</i>	<i>Phononenenergie / meV</i>
F	VII	116	3,2	20,9
Cl	VII	125	2,2	20,6
Br	VII	119	2,6	20,0
I	VII	128	1,5	19,2
Ga	III	131	1,7	20,9
In	III	142	1,8	20,5

Ein Vergleich mit den gemessenen Werten legt nahe, dass es sich bei dem A-Zentrum um eine Überlagerung von zwei verschiedenen Arten von A-Zentren handelt: die dominierende Art, gebildet unter Beteiligung von Gallium und die andere Art unter Beteiligung von Indium.

4.2 PL-Messungen am Interface zwischen Substrat und Schicht

Zur Untersuchung der Schichteigenschaften wurde ein Linescan senkrecht zum Interface zwischen Substrat und Schicht gemacht. Ziel der Untersuchung ist es, den Verlauf der Photolumineszenz-Spektren von CdTe-Kante zu GaAs-Substrat zu verfolgen. Die Beobachtung des Verlaufs der einzelnen Peaks liefert Rückschlüsse auf den Fremdstoffeinbau in die Schicht.

Abbildung 4-2 zeigt ein Bild der Spaltfläche der CdTe-Schicht und dem GaAs-Substrat. Beginnend von der CdTe-Kante aus wurden im Abstand von 10 μm Photolumineszenz-Spektren bis tief in das GaAs-Substrat aufgenommen. Insgesamt wurden 16 Spektren

aufgenommen. Die Messtemperatur betrug 80 K, der Spotdurchmesser wurde auf <math><15 \mu\text{m}</math> eingestellt.

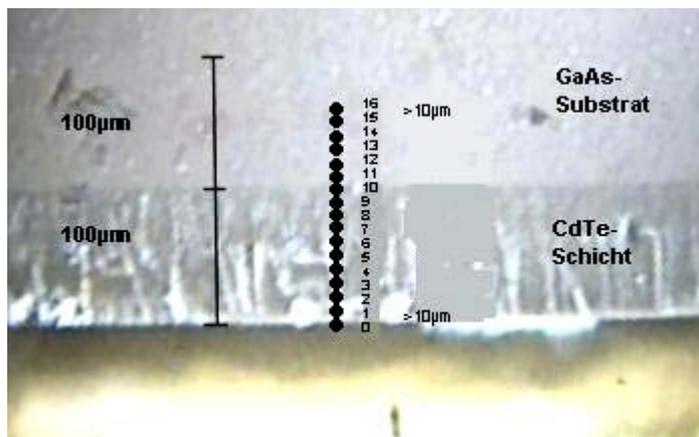


Abbildung 4-2: Blick auf die Spaltfläche der CdTe-Schicht (unten) und dem GaAs-Substrat (oben). Die 16 Messpunkte mit 10 μm Abstand sind durchnummeriert dargestellt.

Der Linescan ist in Abbildung 4-3 dargestellt. Der blau-markierte Bereich entspricht Messungen der CdTe-Schicht, der grüne Bereich entspricht Messungen des GaAs-Substrates. Rot stellt der Übergangsbereich zwischen der Schicht und dem Substrat dar.

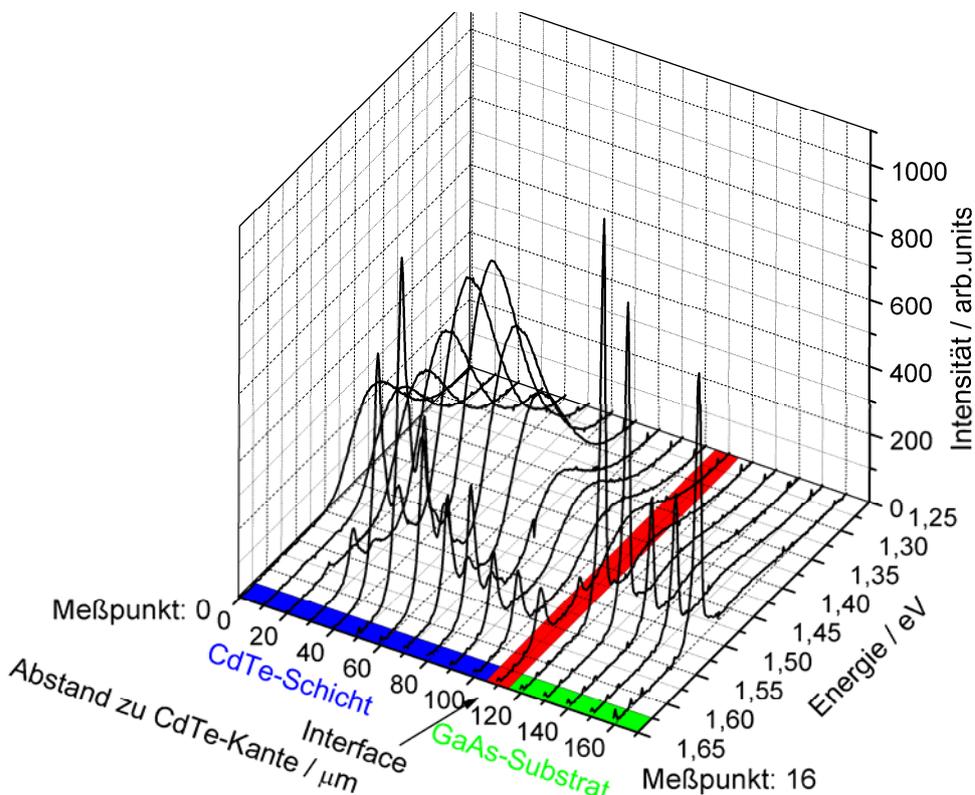


Abbildung 4-3: Linescan senkrecht zum Interface zwischen CdTe-Schicht und GaAs-Substrat bei 80 K. Der blau-markierte Bereich entspricht Messungen an der CdTe-Schicht, der grüne Bereich an dem GaAs-Substrat. Rot markiert ist der Übergangsbereich zwischen Schicht und Substrat.

Deutlich ist der scharfe Übergang von Schicht und Substrat im rot-markierten Übergangsbereich zu erkennen. Man erkennt eine asymmetrische Intensitätsverteilung des A-Zentrums. Zur Untersuchung der Vermutung, dass an der Bildung des A-Zentrums zwei verschiedene Donatoren beteiligt sind, wurden die Intensitäten des A-Zentrums gegen den Abstand zur CdTe-Kante aufgetragen. (Abbildung 4-4)

Als Einbaumodell der zwei Donatoren wurde der Einbau eines Donators mit dem Profil einer Diffusion aus einer begrenzten Quelle an der Oberfläche (Kapitel 2.3.3) angenommen. Aufgrund des Verlaufs der Intensität des A-Zentrums, wird weiterhin eine gaußförmige Anhäufung des Dotierstoffs in der Mitte der Schicht angenommen. Die Fitfunktion lautet:

$$I(x) = I_0 + \frac{A_0}{\omega_0 \sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{(x-x_{c0})^2}{\omega_0^2}\right) + \frac{A_1}{\omega_1 \sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{(x-x_{c1})^2}{\omega_1^2}\right) \quad (4.1)$$

mit: x_{c0}, x_{c1} : Position des maximalen Intensität

ω_0, ω_1 : Standardabweichung

Da angenommen wird, dass es sich um Diffusion aus einer begrenzten Quelle an der Oberfläche handelt und daher das Maximum der Konzentration immer an der Oberfläche der Schicht liegt, wird $x_{c0}=0$ gesetzt.

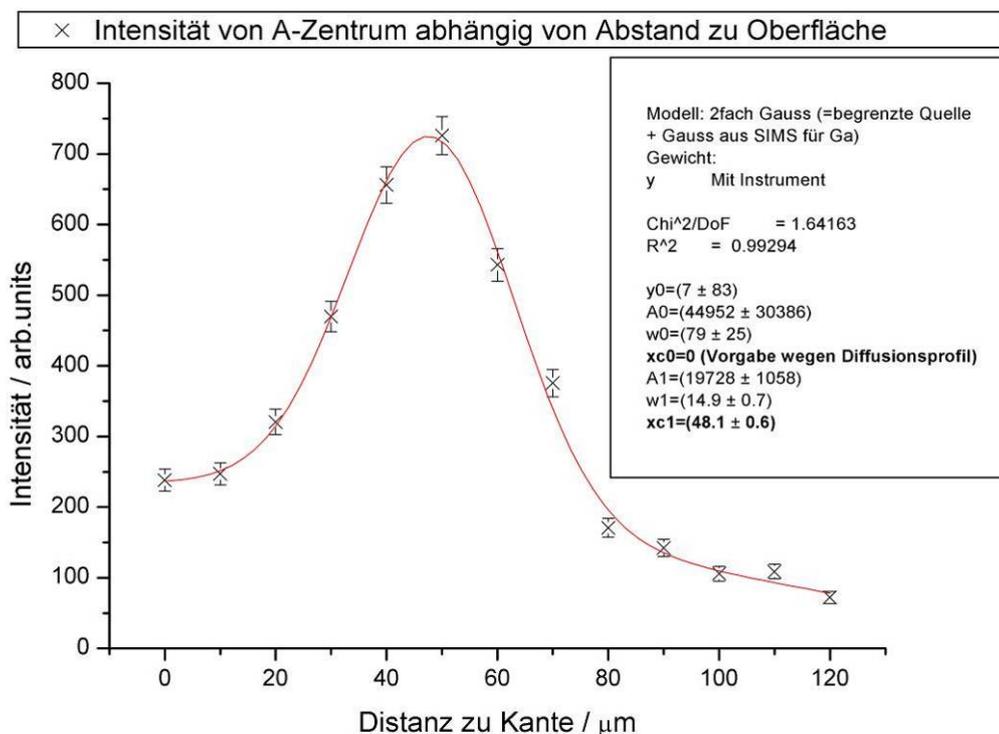


Abbildung 4-4: Intensitätsverlauf des A-Zentrums gegen Abstand zu CdTe-Kante. Die Intensitäten wurden den PL-Spektren am entsprechenden Meßpunkt entnommen. Die rote Linie stellt die angefitzte Funktion dar.

Die Überlagerung der beiden Konzentrationsprofile stimmt sehr gut mit den experimentell bestimmten Intensitätshöhen überein. In Verbindung mit den Ergebnissen aus Abschnitt 4.1.1.1 erkennt man, dass das A-Zentrum mit dem Donator Ga und dem Donator In gebildet wird, wobei der eine Donator aus der Oberfläche eindiffundiert ist und der andere Donator sich in der Mitte der Schicht anhäuft.

Zur weiteren Untersuchung wurden SIMS-Messungen (Sekundärionenmassenspektroskopie) der Schicht am Fraunhofer-Institut für angewandte Festkörperphysik (IAF), Freiburg von Herrn Dr. Kirste durchgeführt. Für die SIMS-Messung wird die Oberfläche einer Probe mittels Primärionen eines Plasmas abgesputtert, daher sind SIMS-Messungen nicht zerstörungsfrei. Als Primärionen wurden Cs⁺-Ionen verwendet. Das abgesputterte Material besteht aus neutralen und geladenen Anteilen. Die ionischen Anteile des gesputterten Materials werden in einem Massenspektrometer analysiert. Die Empfindlichkeit von SIMS liegt bei einer Konzentration von $c=10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

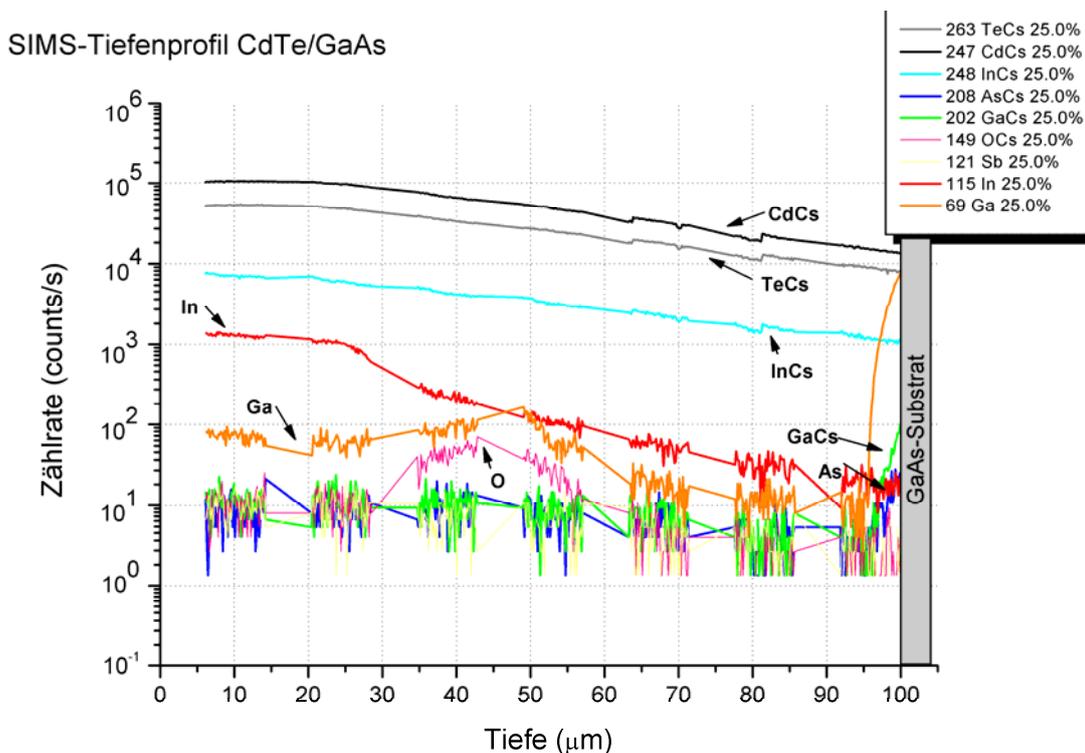


Abbildung 4-5: SIMS-Tiefenprofil der dicken Schicht CdTe auf GaAs-Substrat. Die Konzentrationen sind nur qualitativ, da die Apparatur nicht auf CdTe geeicht ist.

Das SIMS-Profil ist in Abbildung 4-5 dargestellt. Da die SIMS Apparatur am IAF nicht für CdTe geeicht ist, sind die Intensitätsverläufe qualitativ zu verstehen. Das ist deutlich zu erkennen an der As-Konzentration im GaAs-Substrat. Während die Konzentration von Ga zum Substrat hin deutlich ansteigt, steigt die Intensität des As-Peaks nur ver-

gleichsweise langsam an. Der Grund hierfür sind die verschiedenen Ionisationswahrscheinlichkeit der einzelnen Elemente in CdTe.

Abbildung 4-5 ist zu entnehmen, wie sich In von der Oberfläche aus monoton fallend in die Schicht hinein einbaut. Ebenso kann man erkennen, wie sich Ga in der Mitte der Schicht anhäuft. Das bestätigt, dass das A-Zentrum gemischt mit Ga und In gebildet ist. Möglicherweise ist In von der Oberfläche aus in den Kristall eindiffundiert, was dem Modell der Diffusion von der Oberfläche aus entsprechen würde. Die Anhäufung von Ga in der Mitte der Schicht ist jedoch nicht mit Diffusionstheorien zu erklären.

Die SIMS-Messung zeigt weiterhin Restverunreinigungen von Sauerstoff, das vom Restdruck in der Wachstumskammer herrührt.

4.3 Weiterführende PL-Messungen der CdTe-Schicht auf GaAs-Substrat

Zur Bestimmung von Art des Übergangs, sowie der beteiligten Störstellen wurden intensitäts- und temperaturabhängige Photolumineszenz-Messungen an der dicken CdTe-Schicht auf dem GaAs-Substrat durchgeführt. Diese wurden im Stickstoffdurchflossenen Kryostat durchgeführt.

In Abbildung 4-6 ist ein Photolumineszenz-Spektrum der CdTe-Schicht bei 80 K dargestellt.

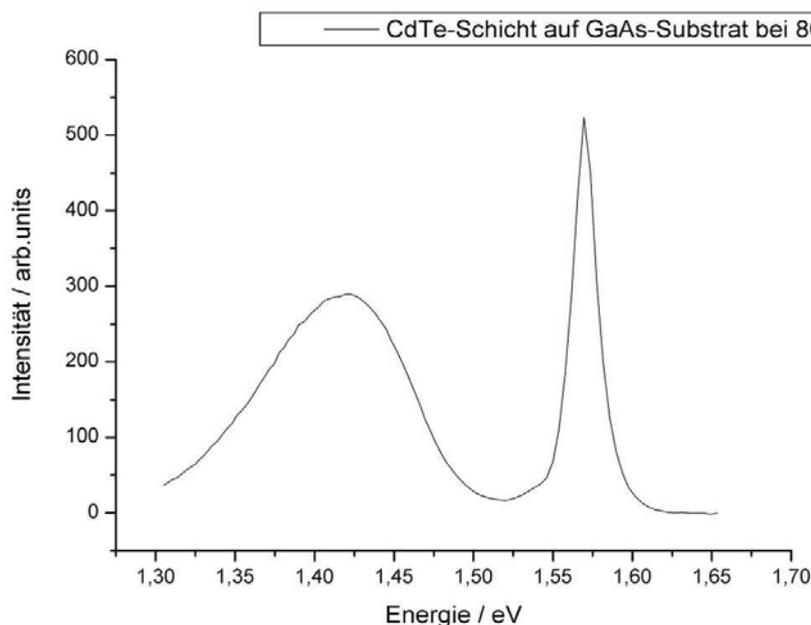


Abbildung 4-6: Photolumineszenzspektrum der dicken CdTe-Schicht auf GaAs-Substrat bei 80 K

Wie bei den Tieftemperaturspektren ist auch bei einer Temperatur von $T=81$ K der $[D^0, A^0]$ -Übergang mit Beteiligung des A-Zentrums bei einer Energie von 1,30 eV bis 1,50 eV zu erkennen. Zusätzlich existiert ein scharfer Peak bei einer Energie von $E=1,570$ eV.

Eine nähere Analyse soll die Identität des 1,570 eV-Peaks klären. Für die dazu benutzten intensitätsabhängigen Messungen wurde der Laserspot auf eine Größe von ca. 200 μm eingestellt, um in einem Leistungsdichtebereich von 0.4-10 W/cm^2 zu bleiben [Sch92]. Die Laserleistung wurde direkt oberhalb des Mikroskops mit einem Intensitätsmessgerät gemessen und ergab Leistungsdichten zwischen 0.8-13 W/cm^2 . Die Laserleistung wurde zwischen 10 mW bis 170 mW variiert. Es wurden PL-Spektren aufgenommen und die Intensität des 1,570 eV-Peaks gegen die Laserleistung aufgetragen.

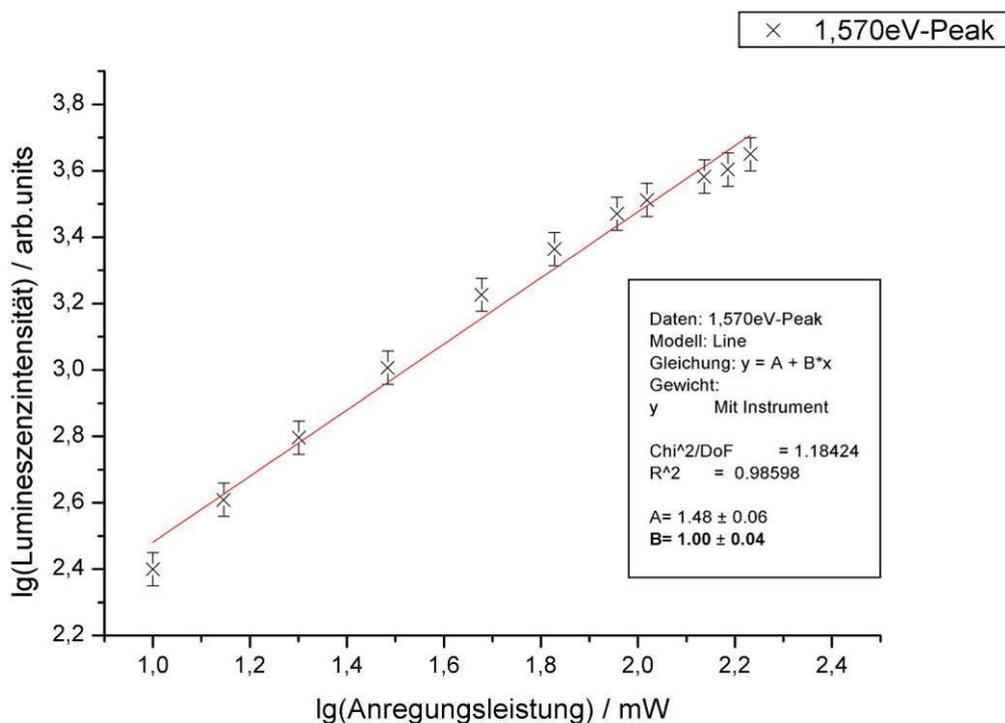


Abbildung 4-7: Doppellogarithmische Darstellung der Abhängigkeit von Lumineszenz zu Laserintensität des 1,570 eV-Peaks bei einer Temperatur von 81 K

Abbildung 4-7 stellt in doppellogarithmischer Auftragung den exponentiellen Zusammenhang zwischen Anregungsleistung und Lumineszenzintensität dar. Eine Fitangabe der Daten nach $I \sim L^k$ (Formel 2.34) ergibt einen k -Wert von $k=(1,00 \pm 0,04)$. Der k -Wert von $k=1.0$ deutet nach [Sch92] auf einen Band-Störstellen-Übergang hin. Eine Identifikation der beteiligten Störstelle wird ermöglicht durch die Betrachtung des Intensitätsverlaufs des 1.570 eV-Peaks mit abnehmender Temperatur.

Dazu wurden temperaturabhängige PL-Spektren aufgenommen. (Abbildung 4-8) Zu diesem Zweck wurde der Stickstofffluss manuell reguliert, bis sich eine konstante Temperatur eingestellt hat. Es ist deutlich zu erkennen, wie die Lumineszenz mit abnehmender Temperatur zunimmt:

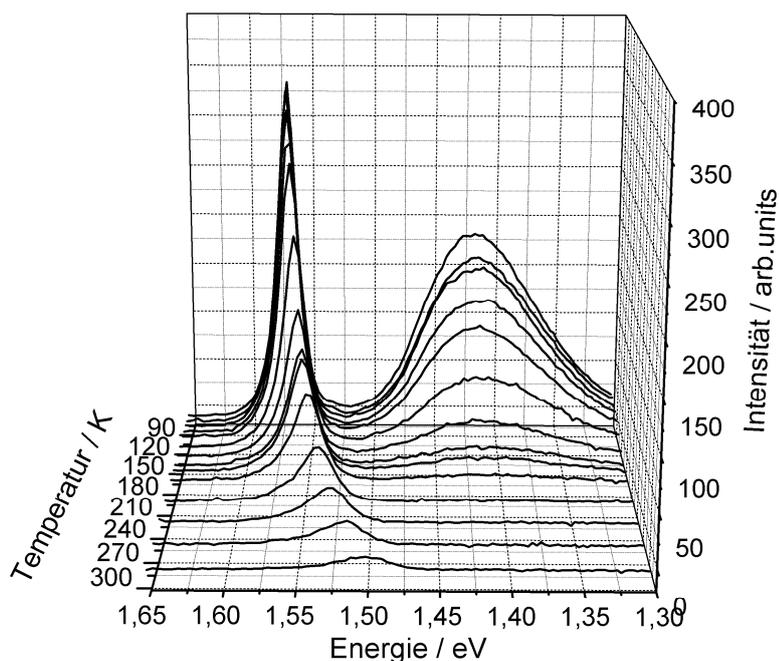


Abbildung 4-8: Temperaturabhängige PL-Spektren von 300 K bis 80 K der CdTe Schicht auf GaAs-Substrat. Die Anregungsleistung beträgt $P=11$ mW.

Zur weiteren Untersuchung wurde die Intensität des 1,570 eV-Peaks abgelesen und gegen die Temperatur aufgetragen. (Abbildung 4-9). Die Abhängigkeit von Intensität und Temperatur eines Band-Störstellen-Übergangs lautet (Formel 2.26):

$$I(T) = \frac{I_0}{1 + C \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right)}$$

Ein Anpassen der Intensitäten des 1,570 eV-Peaks bei verschiedenen Temperaturen (Abbildung 4-9) ergibt sich eine Aktivierungsenergie der an dem Übergang beteiligten Störstelle von $E_A=(85 \pm 5)$ meV. Ein Vergleich der Aktivierungsenergie mit der Literatur [Schl01] ermöglicht die Identifikation von As mit einer Aktivierungsenergie von $E_A=92.0$ meV, welches als Akzeptor eingebaut wird.

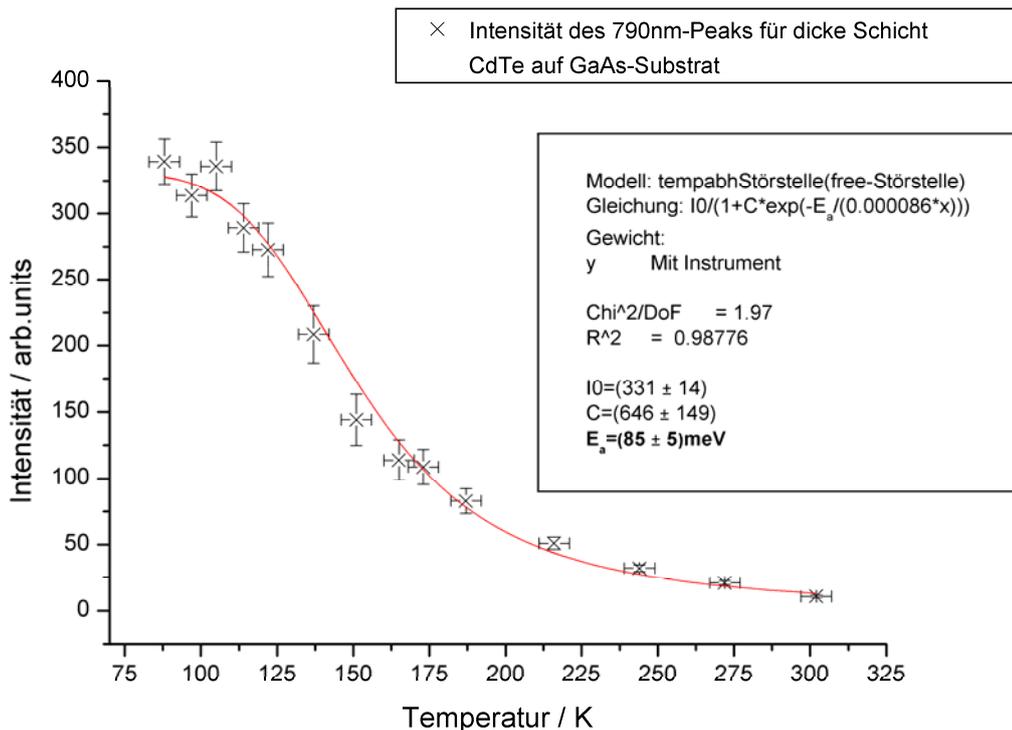


Abbildung 4-9: Intensität des 1.570 eV-Peaks gegen die Temperatur . Anfitzen der Daten mit Formel 2.26 ergibt eine Aktivierungsenergie von $E_A=(85 \pm 5)$ meV.

Zur Fehlerbetrachtung:

Zur Abschätzung des statistischen Fehlers der Intensität wurde bei gleichen äußeren Bedingungen wie Anregungsleistung und Temperatur 200mal im zeitlichen Abstand von 100 μ s die Intensität gemessen. Aus den Daten werden der Mittelwert und der statistische Fehler des Mittelwertes berechnet. Es ergibt sich ein relativer, statistischer Fehler des Mittelwerts von ca. 5 %. Daher wird der statistische Fehler der Intensität mit 5 % relativem Fehler angenommen.

Der Fehler der Temperaturmessung wird mit 5K absolutem Fehler abgeschätzt. Somit ergibt sich ein direkter Fehler auf die Intensität, sowie ein Fehler, der sich über die Temperaturungenauigkeit auf die Intensität weiterfortpflanzt. Die Berechnung des Gesamtfehlers auf die Intensität errechnet sich nach dem Gauß'schen Fehlerfortpflanzungsgesetz:

$$\sigma_{I,ges} = \sqrt{\sigma_{I,stat}^2 + \left(\frac{\partial I}{\partial T} \cdot \Delta T\right)^2} \tag{4.2}$$

Zunächst wurden die Daten ohne zusätzliche Miteinbeziehung des Temperaturfehlers gefittet. Die erhaltenen Parameter wurden als Initialisierungsparameter verwendet. Mit den Initialisierungswerten wurde in einer ersten Iteration der Gesamtfehler $\sigma_{I,ges1}$ berechnet. Die Parameter der ersten Iteration wurden verwendet, um mittels des Gauß'schen Fehlerfortpflanzungsgesetzes einen neuen Gesamtfehler $\sigma_{I,ges2}$ zu errechnen.

nen, mit dem eine weitere Iteration durchgeführt wurde. Die errechneten Parameter der zweiten Iteration stimmten bis auf 0,2 % Abweichung mit den Werten der ersten Iteration überein, so dass die Iteration abgebrochen wurde.

Eine systematische Fehlerquelle liegt in der Laserintensität des Ar^+ -Lasers, der mit zunehmender Betriebsdauer zu höheren Leistungen driftete. Eine Erhöhung der Laserintensität führt zu einer Erhöhung der Anzahl der erzeugten Ladungsträger. Die Drift der Laserleistung beträgt ca. 0,3 %/h, daher wurde dieser Effekt als so gering eingeschätzt, dass er in den Berechnungen vernachlässigt wurde.

4.4 Photolumineszenz-Tiefemperaturspektrum an der dicken CdTe-Schicht nach der Entfernung des GaAs-Substrates

Zur Untersuchung des Einflusses des GaAs-Substrates auf die CdTe-Schicht wurde das Substrat mit einer $\text{NH}_4\text{OH}:\text{H}_2\text{O}_2$ Ätzlösung entfernt.

Es wurden ebenfalls temperatur- und intensitätsabhängige Messungen im Temperaturbereich von 80 K bis 300 K und im Intensitätsbereich von 10 mW bis 170 mW durchgeführt.

In Abbildung 4-10 sind die temperaturabhängigen PL-Spektren für eine Temperatur von 300 K bis 80 K dargestellt. Es ist im Vergleich zu den temperaturabhängigen PL-Spektren mit Substrat zu erkennen, dass die Intensität deutlich größer ist. Weiterhin ist ein hoher Peak bei ca. 1,584 eV zu erkennen, der im Vergleich zu dem Peak mit Substrat zu höheren Energien verschoben ist und zudem eine geringere Halbwertsbreite hat. Auf der niederenergetischen Flanke dieses Peaks erscheint noch zusätzlich ein kleinerer Peak bei einer Energie von ca. 1,544 eV.

Zur Identifikation der beiden schmalen Peaks wurden intensitätsabhängige PL-Spektren aufgenommen.

In Abbildung 4-11 ist doppelt logarithmisch die $I \sim L^k$ -Abhängigkeit dargestellt. Es ergeben sich k-Werte von $k=1,54$ für den Peak bei $E=1,584$ eV und $k=1,47$ für den Peak bei 1,544 eV. Es handelt sich daher in beiden Fällen um Übergänge von gebundenen Exzitonen, die an die Haftstellen Ga, In oder As gebunden sind.

Die Existenz von gebundenen Exzitonen bei der Schicht ohne Substrat im Vergleich zur Schicht auf dem Substrat bei 80 K erklärt sich mit der hohen Gitterfehlpassung von CdTe auf GaAs von 14,6 %. [Kol86] Die dadurch erzeugte Verspannung im Kristall sorgte für eine rasche Dissoziation der Exzitonen vor einer Rekombination. Nach Entfernung des Substrates konnte das CdTe Gitter relaxieren, was die Existenz von gebundenen Exzitonen ermöglicht hat. Insgesamt deutet das Vorhandensein von gebundenen Exzitonen auf eine geringe Versetzungsdichte in der Schicht hin.

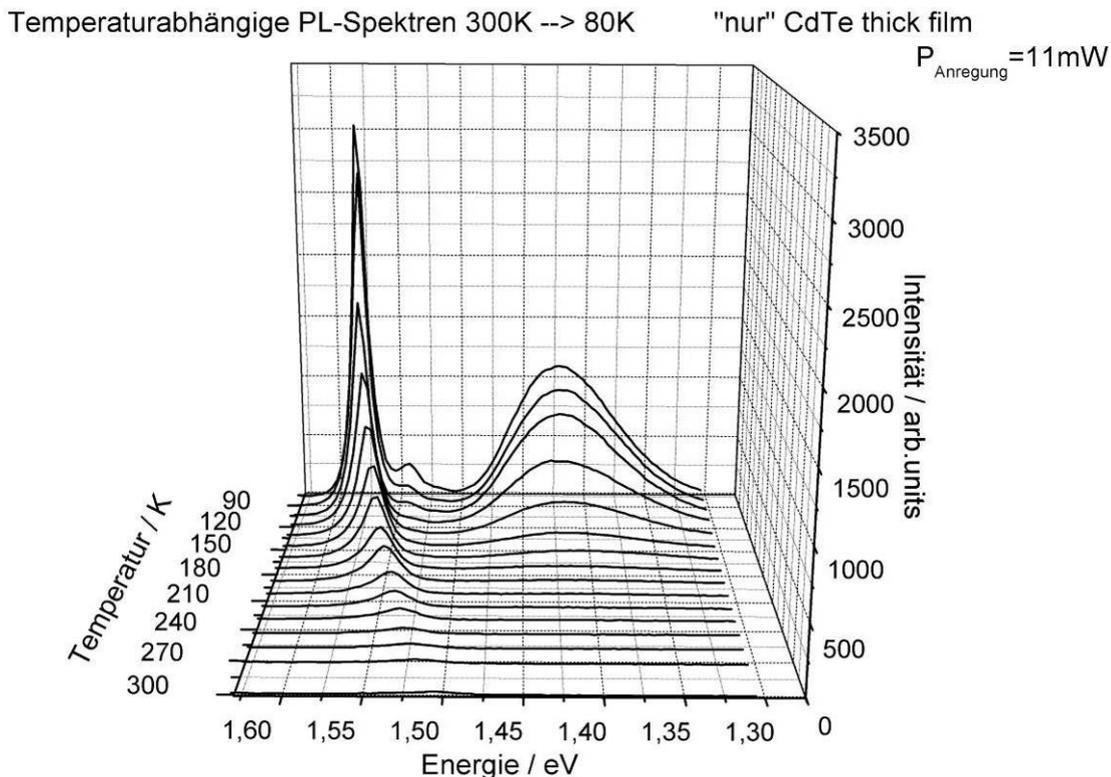


Abbildung 4-10: Temperaturabhängige PL-Spektren von der CdTe-Schicht ohne GaAs-Substrat von 300 K bis 80 K

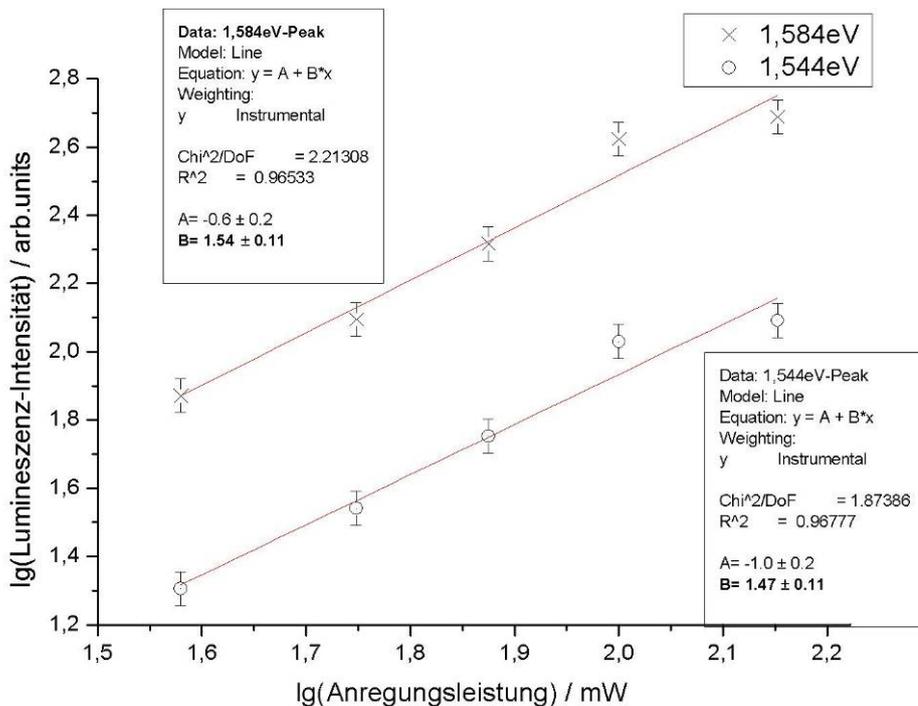


Abbildung 4-11: Doppellogarithmische Darstellung der Abhängigkeit von Lumineszenzintensität der Peaks bei E=1,584 eV und bei E=1,544 eV gegen die Anregungsleistung bei einer Temperatur von T=80 K

4.5 Strom-Spannungs-Kennlinie

Zur Bestimmung des spezifischen Widerstands wurde das GaAs-Substrat mit einer Ätzlösung entfernt. Weiterhin wurden mittels einer Gold-Bromid-Lösung Gold-Kontakte auf die CdTe-Schicht gebracht. Anschließend wurde eine Strom-Spannungs-Kennlinie für Spannungen zwischen -5 V bis +5 V aufgenommen.

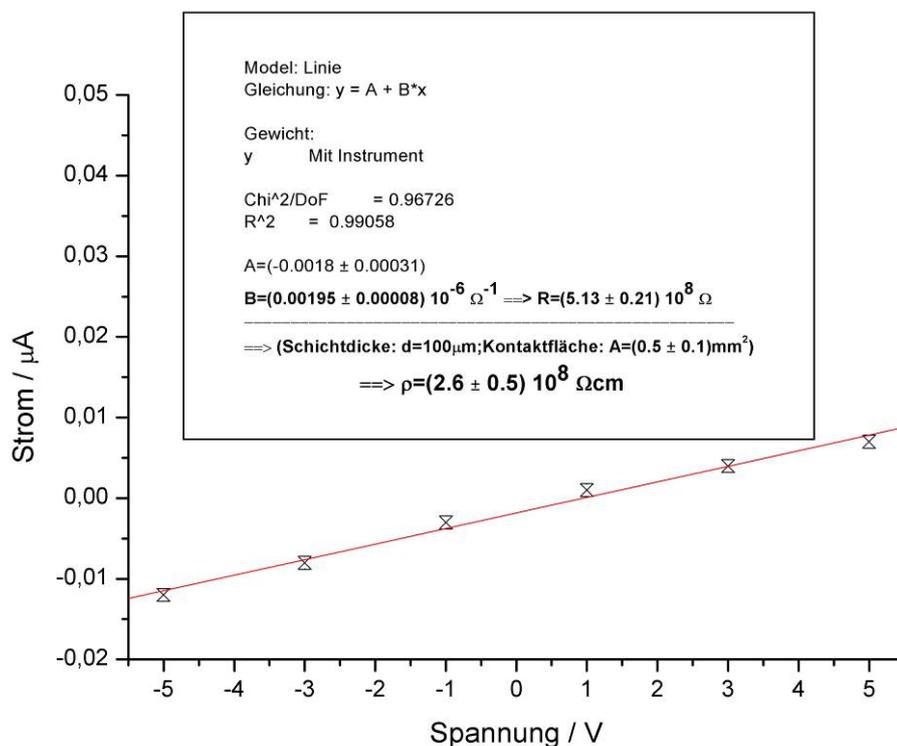


Abbildung 4-12: Strom-Spannungs-Kennlinie für die CdTe-Schicht ohne Substrat von -5 V bis +5 V

Die Strom-Spannungs-Charakteristik ist in Abbildung 4-12 dargestellt. Die Messgenauigkeit bei der Bestimmung des Stroms beträgt $\sigma_I = 0,8$ nA. Der Fehler der Kontaktfläche wird mit 20 % relativem Fehler geschätzt, der Fehler der Schichtdicke von $1\ \mu\text{m}$ wurde daher vernachlässigt. Der spezifische Widerstand der CdTe-Schicht beträgt $\rho = (2,6 \pm 0,5) \cdot 10^8 \ \Omega\text{cm}$. Der hohe spezifische Widerstand wurde durch Kompensation mit flachen Donatoren (In, Ga) erreicht. Der spezifische Widerstand von $\rho = 2,6 \cdot 10^8 \ \Omega\text{cm}$ entspricht einer Restkonzentration freier Ladungsträger im Falle eines Löcherüberschuss von $p = 2,2 \cdot 10^8 \ \text{cm}^{-3}$ bzw. bei einem Überschuss freier Elektronen von $n = 2,1 \cdot 10^7 \ \text{cm}^{-3}$.

Zur weiteren Erhöhung des spezifischen Widerstands können die Schichten gezielt mit flachen Störstellen dotiert werden. Der ungewollte Einbau von Verunreinigungen muss jedoch für eine exakte Kontrolle der Konzentrationen von Verunreinigungen und Störstellen im Kristall reduziert werden. (siehe Kapitel 4.1.1.1, 4.1.1.2 und 4.1.1.3)

4.6 Detektormessungen an der dicken CdTe-Schicht

Um zu überprüfen, ob die CdTe-Schicht auf radioaktive Strahlung reagiert, wurde die CdTe-Schicht mit GaAs-Substrat auf einen Testaufbau aufgebracht. Es wurden Spannungen von 12 V und 26 V in Sperrrichtung angelegt, um die CdTe-Schicht zu verarmen. Der Aufbau wurde mit einer α -Strahlungsquelle (^{241}Am) bestrahlt. Die CdTe-Seite war in Richtung der α -Strahlungsquelle ausgerichtet und als Kathode beschaltet.

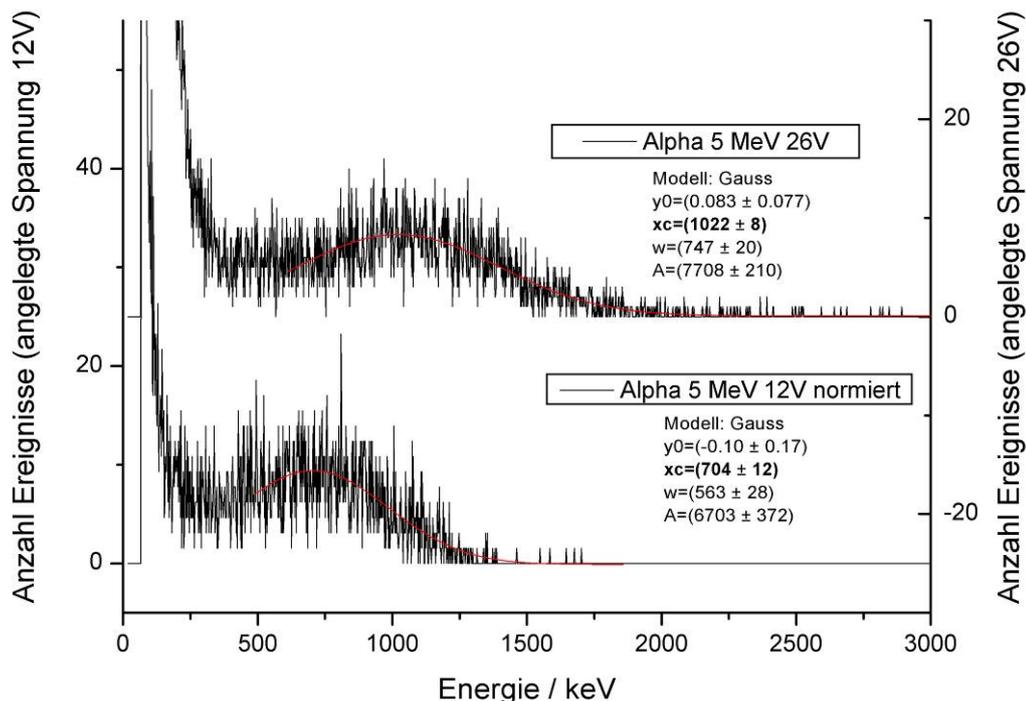


Abbildung 4-13: Detektormessungen mit der dicken CdTe-Schicht auf GaAs-Substrat mit einer angelegten Spannung in Sperrrichtung von 12 V bzw. 26 V

Abbildung 4-13 zeigt die gemessenen Detektorspektren der dicken CdTe-Schicht. Man erkennt den α -Peak bei einer Energie von 704 keV bei 12 V bzw. bei 1022 keV bei einer angelegten Spannung von 26 V. Das entspricht einer Charge-Collection-Efficiency von 14 % bzw. 20 %.

Aufgrund des zu geringen spezifischen Widerstands war das Anlegen höherer Spannungen nicht mehr möglich. Dieser geringe spezifische Widerstand ist auf die zu hohe Konzentration an Restverunreinigung im Material zurückzuführen. Bereits bei den angelegten Spannungen war das Rauschen relativ hoch, was sich in der Breite der Peaks niederschlägt.

Die Charge-Collection-Efficiency ermöglicht eine Abschätzung des $\mu\tau$ -Produkts mittels der Hecht-Relation. [Hec32] Die Ladung Q , die bei einer planaren Detektorgeometrie auf einer Elektrode induziert wird, ist abhängig vom Wechselwirkungsort x_0 :

$$Q(x_0) = Q_0 \cdot \left\{ \frac{\lambda_n}{d} (1 - \exp(-x_0 / \lambda_n)) + \frac{\lambda_p}{d} (1 - \exp(-(d - x_0) / \lambda_p)) \right\} \quad (4.3)$$

mit: Q_0 : ursprünglich erzeugte Ladung im Halbleiterkristall

$\lambda_{n,p}$: freie Weglänge von Elektronen bzw. Löchern

d : Detektordicke

x_0 : Wechselwirkungsort, abhängig vom Abstand zur Anode

Zur Bestimmung des $\mu\tau$ -Produkts wird vorausgesetzt, dass nur Elektronen zur Signalerzeugung beitragen. Da die gesamte Wechselwirkung des α -Teilchens innerhalb der ersten μm der CdTe-Schicht stattfinden, gilt $x_0 \gg \lambda_n$:

$$\frac{Q(x_0)}{Q_0} = \frac{\lambda_n}{d} \quad (4.4)$$

Die Elektronen müssen zur Signalerzeugung durch die CdTe-Schicht und das GaAs-Substrat hindurchdriften. Die Dicke des Detektors beträgt $700 \mu\text{m}$ ($100 \mu\text{m}$ CdTe, $600 \mu\text{m}$ GaAs).

Die mittlere Driftlänge bei einer angelegten Spannung von 12 V beträgt $\lambda_n=98 \mu\text{m}$, bei 26V $\lambda_n=140 \mu\text{m}$. Somit bewegen sich die Elektronen näherungsweise nur in der CdTe-Schicht und es kann angenommen werden, dass sich das $\mu\tau$ -Produkt auf CdTe bezieht. Mit diesen Voraussetzungen erhält man für das $\mu\tau$ -Produkt der Elektronen in der CdTe-Schicht einen Wert von $\mu\tau_n=(4,8 \pm 1,3) 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{V}$.

Wie in Kapitel 4.1.1.4 festgestellt wurde, befindet sich insbesondere im Bereich zwischen CdTe-Schicht und GaAs-Substrat aufgrund der Gitterfehlpassung eine hohe Anzahl von Versetzungen. Da diese Kristalldefekte das $\mu\tau$ -Produkt reduzieren, ist eine Möglichkeit zur Verbesserung desselben das Einfügen einer Pufferschicht z.B. aus ZnTe.

4.7 Zusammenfassung und Ausblick zu den Untersuchungen an den dicken CdTe-Schichten

Es wurden dicke Schichten CdTe untersucht. Mittels I-U-Kennlinien und Detektorspektren wurde der spezifische Widerstand ρ und das $\mu\tau$ -Produkt berechnet. In Verbindung mit den Ergebnissen der vorangegangenen Photolumineszenz- und SIMS-Messungen werden im Anschluss an die Zusammenfassung Vorschläge zur weiteren Optimierung der Schichten gemacht.

Im Rahmen der Untersuchungen an dicken Schichten von CdTe konnte gezeigt werden:

- Der Einbau der Verunreinigungen von Ga, In und As konnte nachgewiesen werden. Während In und Ga für die Bildung des A-Zentrums verantwortlich sind, baut sich As als flacher Akzeptor ein.
- Die Existenz von gebundenen Exzitonen deutet auf eine geringe Anzahl Versetzungen im Kristall hin.
- Trotz der hohen Gitterfehlpassung von 14,6 % ist es möglich, dicke Schichten von CdTe auf einem Fremdsubstrat abzuscheiden.
- Die CdTe Schicht reagiert trotz niedriger angelegter Spannung auf Strahlung.
- Der spezifische Widerstand beträgt $\rho = (2,6 \pm 0,5) \cdot 10^8 \Omega\text{cm}$
- Das $\mu\tau$ -Produkt beträgt ca. $\mu\tau_n = (4,8 \pm 1,3) \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{V}$ in der CdTe-Schicht

Mit MOVPE (Metallorganische Gasphasenepitaxie) gewachsene CdTe-Schichten auf GaAs-Substraten von Niraula [Nir98], [Nir04] haben zum Vergleich spezifische Widerstände von $\rho = 10^5 - 10^7 \Omega\text{cm}$. Mittels VPE (Gasphasenepitaxie) gewachsene dicke CdTe-Schichten auf GaAs von Lovergine [Lov00] bei einer Wachstumstemperatur von $T < 650 \text{ }^\circ\text{C}$ haben einen spezifischen Widerstand von $\rho = 10^5 - 10^6 \Omega\text{cm}$. Lovergine et al. konnten eine Elektronenbeweglichkeit von $\mu_n = 45 - 60 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ bestimmen, was bei einer angenommenen Lebensdauer von $\tau_n = 2 \text{ }\mu\text{s}$ einem $\mu\tau$ -Produkt von $\mu\tau_n = (9 - 12) \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{V}$ entspricht.

P. Sellin berichtet von 300 μm dicken, polykristallinen CdTe-Schichten, die mit CSS (Closed Space Sublimation) gewachsen wurden. [Sel06] Die Substrattemperatur betrug 520 $^\circ\text{C}$, die Wachstumsrate 4,5 $\mu\text{m}/\text{min}$. Die Schichten wurden nicht bewusst dotiert und weisen einen spezifischen Widerstand von $\rho = 10^{10} \Omega\text{cm}$ mit einer leichten p-Leitung auf. Allerdings zeigen die Schichten keine Reaktion auf Strahlung.

Von Niraula [Nir06] mittels MOVPE gewachsene dicke CdTe-Schichten auf Si erreichen einen spezifischen Widerstand von $\rho > 10^6 \Omega\text{cm}$. Weiterhin wird die Möglichkeit aufgezeigt, trotz der Gitterfehlpassung von ca. 20 % zwischen CdTe und Si, dicke Schichten CdTe auf Si abzuscheiden. Die gewachsene Schichtdicke beträgt 200 μm .

Der Vergleich der erzielten Ergebnisse mit Ergebnissen aus der Literatur zeigt, dass der spezifische Widerstand der am FMF gewachsenen dicken Schicht CdTe einen außerordentlich hohen Wert aufweist. Über eine weitere Erhöhung des spezifischen Widerstands ließe sich die anlegbare Spannung weiter erhöhen. Aufgrund der Resultate ergeben sich als Aufgaben für die Zukunft:

- Reduktion des Einbaus von Verunreinigungen

- Reduktion von Kristalldefekten durch Variation der Substrattemperatur oder einfügen einer Pufferschicht z.B. aus ZnTe
- Abscheidung von CdTe auf anderen Fremdsubstraten wie z.B. Quarz, Si oder direkt auf einer Ausleseelektronik
- Gezielte Dotierung der Schichten zur Erhöhung des spezifischen Widerstands

5 Untersuchung von CdTe:Bi und CdTe:Bi:Yb

Der Kompensationsmechanismus spielt bei der Verwendung von CdTe als Detektormaterial eine überragende Rolle. Das Erreichen eines hohen spezifischen Widerstands kann durch Dotierung mit einer tiefen Störstelle erreicht werden (siehe Kapitel 2.2.6). Zur Optimierung der Kompensation und der Transporteigenschaften wird versucht, mittels Dotierung mit Schwermetallen, die typischerweise als tiefe Störstellen eingebaut werden, hochohmige Probe zu erhalten. Die Hochohmigkeit der Proben durch eine Kompensation über tiefe Störstellen reduziert das $\mu\tau$ -Produkt gegenüber intrinsischem CdTe. Ziel ist es, einen Dotierstoff zu finden, der einen hohen spezifischen Widerstand ermöglicht und das $\mu\tau$ -Produkt möglichst wenig reduziert. Dabei werden auch Dotierstoffe verwendet, deren exakte Rolle beim Einbau in CdTe noch relativ unbekannt ist. Durch Dotierung mit dem Schwermetall Bismut werden CdTe-Kristalle mit einem hohen spezifischen Widerstand gezüchtet. [Sau04] Bismut ist ein Element der fünften Hauptgruppe und wird als tiefer Akzeptor auf einem Te-Platz mit einer Ionisationsenergie von $E_B = E_{VB} + 300 \text{ meV}$ eingebaut. [Wei01] Das Erreichen eines hohen spezifischen Widerstands ist mit einem tiefen Akzeptor im Falle von p-leitendem CdTe nicht möglich. Es wird vermutet [Sau04], dass Bi ein amphoterer Verhalten bezüglich seines Einbaus als Donator oder Akzeptor zeigt. Diéguez et al. [Sau04] schlagen vor, dass Bi auf einem Cd-Platz eingebaut wird und dort als tiefer Donator fungiert ($\text{Bi}_{\text{Cd}}^{3+}$). Die mögliche Kontrolle des amphoterer Verhaltens über die Variation von Wachstumsparametern während der Züchtung ermöglicht beispielsweise eine direkte Züchtung von pn-Übergängen. Ein bekanntes Beispiel hierfür ist das amphotere Störstellenverhalten von Si in GaAs. [Geb00]

Die nachfolgenden Untersuchungen sollen die Rolle von Bi im Hinblick auf den spezifischen Widerstand und die Photoleitfähigkeit überprüfen. Um die Einflüsse von Störstellen und Verunreinigungen miteinzubeziehen, werden ergänzend Photolumineszenzuntersuchungen gemacht und mit den Ergebnissen von CoReMa- und Photoleitfähigkeitsmessungen verglichen.

Weiterhin werden CdTe-Proben, die mit Ytterbium kodotiert sind, hinsichtlich Photoleitfähigkeit und spezifischem Widerstand untersucht.

Die untersuchten CdTe:Bi und CdTe:Bi:Yb Proben sind hochohmig und sehr photosensitiv. Die Proben wurden mit der Vertikal-Bridgman-Methode aus der Schmelze gezüchtet. Die Temperatur der Schmelze betrug $1110 \text{ }^\circ\text{C}$ mit einem Temperaturgradienten von 5 K/cm im Kristallisationsbereich. Die Wachstumsrate betrug $0,4 \text{ mm/h}$.

Die Bismut-dotierten Proben enthielten eine Bismut-Konzentration von $6 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, die Ytterbium-dotierten Proben eine Yb-Konzentration von $1 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

Zur Untersuchung wurden die Proben senkrecht und parallel der Wachstumsrichtung geschnitten, anschließend mit Al_2O_3 Microgrid mechanisch poliert und mit Chlor-Ethylen, Aceton und Methanol gereinigt. (Abbildung 5-1)

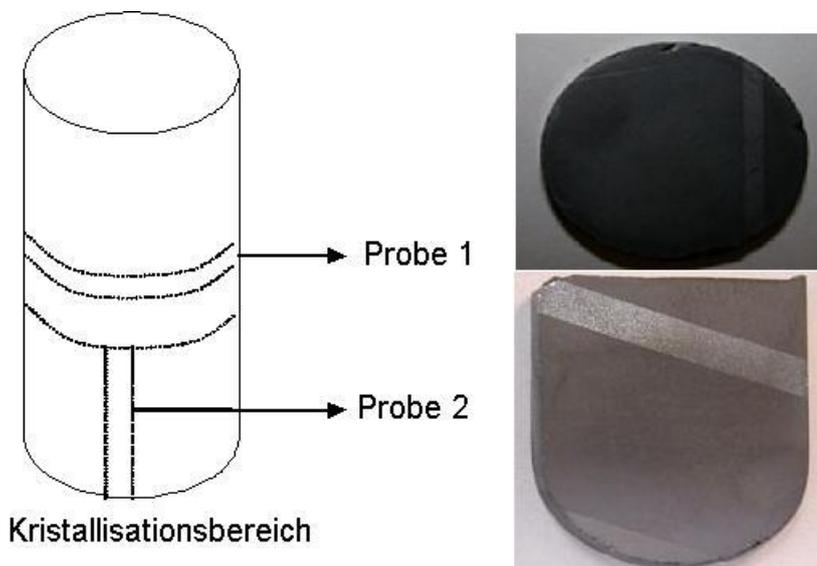


Abbildung 5-1: Schematische Darstellung des Schnittmusters der Proben entlang (Probe 2) und senkrecht (Probe 1) zur Wachstumsrichtung

5.1 Untersuchung der Proben CdTe:Bi geschnitten senkrecht zur Wachstumsrichtung (Probe: CdTe:Bi 17-1)

Zuvor in Madrid durchgeführte Charakterisierungen der Probe (PICTS, Optische Absorptionsmessungen) von der Abteilung für Materialwissenschaften der Universidad Autonoma de Madrid von Edgardo Saucedo deuten auf ein Loch-Einfang-Zentrum (d.h. ein Donatorniveau) mit einer Energie von $E_B = E_{LB} - 730$ meV hin. Der Vergleich mit undotierten Proben zeigt, dass es sich bei der Störstelle nicht um eine intrinsische Störstelle handelt. Weiterführende Untersuchungen weisen der Störstelle eine bedeutende Funktion als tiefer Donator bei der Kompensation der Proben zu.

Abbildung 5-2 zeigt das Photolumineszenzspektrum des exzitonischen Bereichs bei $T=17$ K. Die Spektren stammen von Bismut-dotierten Proben mit Konzentrationen von $1 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ und $1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Bei der Probe mit einer Bismutkonzentration von $1 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ erkennt man einen komplexen exzitonischen Bereich, eine Entfaltung ergibt drei Peaks: ein Donator-gebundenes Exziton bei $E=1591,0$ meV, ein Akzeptor-gebundenes Exziton bei $E=1585,8$ meV und einen Donator-Akzeptor-Paarübergang bei $E=1566,9$ meV. [Hal00]

Die Probe mit einer Bismutkonzentration von $1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ zeigt vier Peaks: Der Peak bei $E=1588,7$ meV ist einem Akzeptor-gebundenen Exziton (Bindungsstörstellen: V_{Cd} , Na,

Li) zuzuordnen, der Peak bei $E=1567,4$ meV einem Donator-Akzeptor-Paarübergang (DAP). Der Peak bei einer Energie von $E=1553,1$ meV wird ebenso einem Donator-Akzeptor-Übergang zugewiesen. Der Peak bei $1534,2$ meV ist unbekannter Herkunft. [Sau04, Hal00]

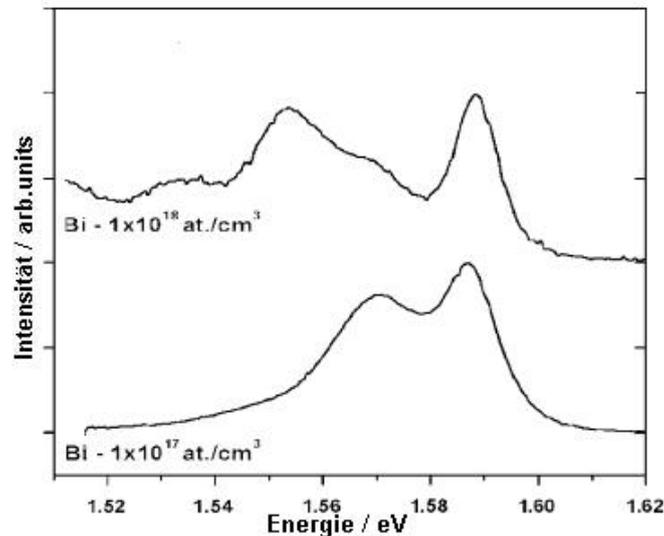


Abbildung 5-2: Tieftemperatur-Photolumineszenzspektrum von Bismut-dotierten CdTe-Proben mit Bismutkonzentrationen von $1 \cdot 10^{17}$ cm⁻³ und $1 \cdot 10^{18}$ cm⁻³ bei $T=17$ K [Sau04]

Da die Versuchsanordnung nur Photolumineszenzmappings bei Stickstofftemperaturen ermöglicht, wurden bei einer Temperatur von $T=80$ K erneut Photolumineszenzspektren vermessen. Die vorhergehenden PL-Spektren bei 17 K ermöglichen eine Identifikation der Peaks im Energiebereich von 1,56 eV bis 1,60 eV. Abbildung 5-3 zeigt ein Photolumineszenzspektrum der Bismut-dotierten CdTe-Probe.

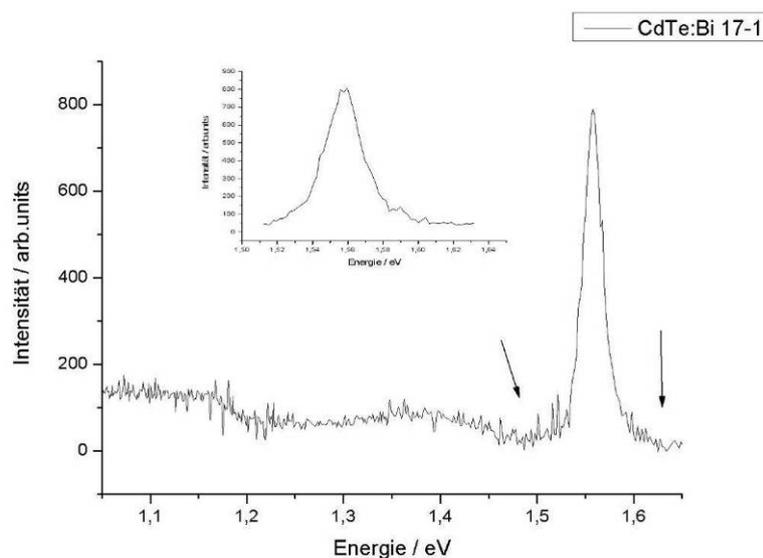


Abbildung 5-3: Photolumineszenzmessung der Bismut-dotierten CdTe-Probe 17 bei einer Temperatur von $T=80$ K

Bei den PL-Spektren bei $T=80$ K sind drei verschiedene Peaks zu erkennen:

- Eine starke Emission bei einer Energie von $E=1555,8$ meV, die aus einer Überlagerung der Peaks der gebundenen Exzitonen und des Donator-Akzeptor-Paarübergangs herrührt, die bei dem Photolumineszenz-Tiefemperaturspektrum (Abbildung 5-2) zu sehen sind. Somit entspricht diese Emission einer sehr bandkantennahen Emission, die flachen Störstellen zugewiesen wird.
- Eine schwache Lumineszenzbande bei $E=1,4$ eV, die einem Donator-Akzeptor-Paarübergang mit Beteiligung des A-Zentrums (Cd-Vakanz mit Donator auf benachbartem Gitterplatz) zuzuordnen ist.
- Eine schwache Lumineszenzbande bei $E=1,1$ eV, die als Tellurvakanz (V_{Te}) identifiziert wurde. [Schl01]

Es wurden Photolumineszenz-Mappings mit einer örtlichen Auslösung von $200 \mu\text{m} \times 200 \mu\text{m}$ aufgenommen, um den Störstelleneinbau und die Homogenität der Probe zu untersuchen.

In Abbildung 5-4 sind die räumlichen Verteilungen der einzelnen Peaks dargestellt:

Die bandkantennahen Emissionen mit Beteiligungen flacher Störstellen bei einer Energie von $E=1555,8$ meV weisen ein Maximum im unteren linken Bereich und ein Minimum im unteren rechten Bereich auf. Die Verteilung des A-Zentrums bei $E=1347,8$ meV zeigt ein Maximum im linken Bereich und ein Minimum im mittleren und unteren Bereich. Die Verteilung der Tellurvakanz bei einer Energie von $E=1137,6$ meV hat ein Maximum im oberen und linken Bereich und ein Minimum im unteren Teil.

Insgesamt zeigt sich eine sehr inhomogene Verteilung von flachen Störstellen und A-Zentren. Die Verteilung der Tellurvakanz ist dagegen relativ homogen.

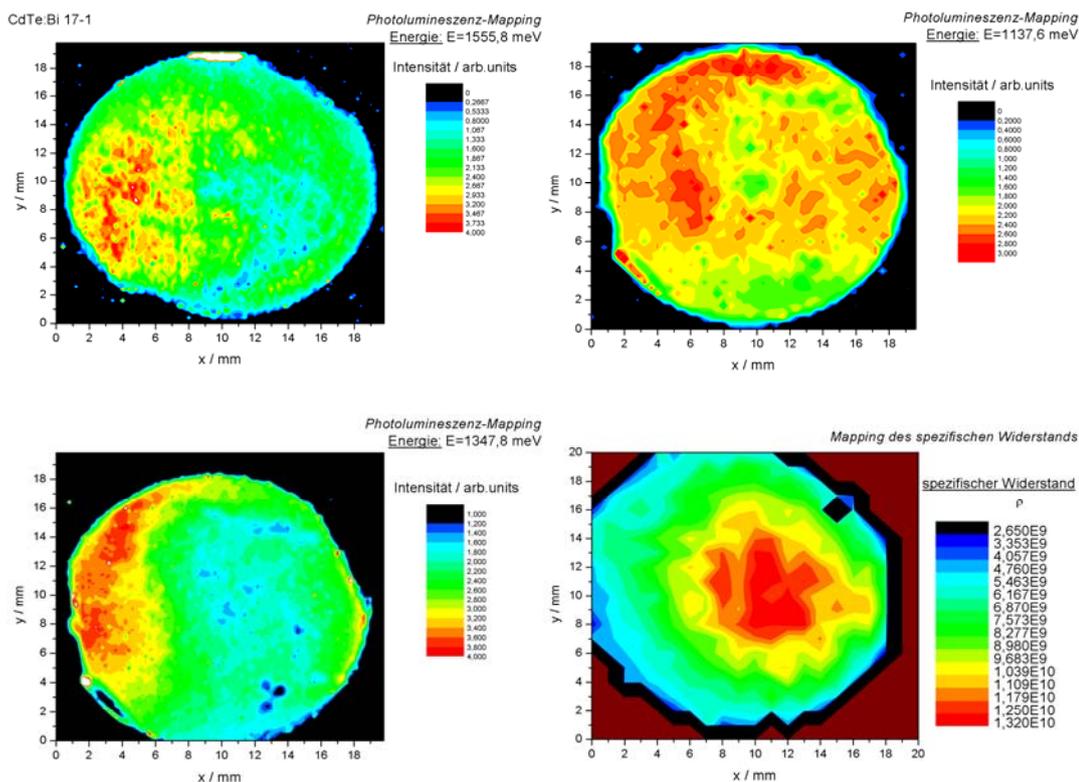


Abbildung 5-4: Photolumineszenz-Mapping der Probe CdTe:Bi 17-1 mit einer Konzentration von $1 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ bei einer Energie von $E=1555,8 \text{ meV}$ (oben links), $E=1347,8 \text{ meV}$ (unten links) und $E=1137,6 \text{ meV}$ (oben rechts) und die Verteilung des spezifischen Widerstands (unten rechts)

In Abbildung 5-4 ist die Verteilung des spezifischen Widerstands mit einer Ortsauflösung von $1 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$ zu sehen. Die Probe hat einen spezifischen Widerstand im Bereich zwischen $\rho=3 \cdot 10^9 \text{ } \Omega\text{cm}$ und $\rho=1,3 \cdot 10^{10} \text{ } \Omega\text{cm}$. Ein Großteil der Probe zeigt einen hohen spezifischen Widerstand, der größer als $7 \cdot 10^9 \text{ } \Omega\text{cm}$ ist, mit einem Maximum von $1,3 \cdot 10^{10} \text{ } \Omega\text{cm}$ in der Mitte der Probe. Ein spezifischer Widerstand in der Größenordnung von $\rho=7 \cdot 10^9 - 1,3 \cdot 10^{10} \text{ } \Omega\text{cm}$ über einen so großen Bereich ist nur über die Kompensation mit tiefen Störstellen möglich.

Es ist keine Korrelation des spezifischen Widerstands mit der räumlichen Verteilung den Photolumineszenz-Peaks bei $E=1555,8 \text{ meV}$ und $E=1137,6 \text{ meV}$ zu erkennen. Die fehlende Korrelation der Verteilung des spezifischen Widerstands mit der Intensitätsverteilung des Peaks bei $1555,8 \text{ meV}$ schließt eine dominierende Beteiligung der flachen Störstellen an der Kompensation aus.

Es sind Gemeinsamkeiten in den Mappings des Photolumineszenz-Peaks bei $E=1347,8 \text{ meV}$ und dem spezifischen Widerstand zu erkennen. Erklärbar ist das durch das Einwirken des A-Zentrums, das aus einer Cd-Vakanz und dem Donator Bi besteht. Im Falle eines homogenen Bi-Einbaus ist in Bereichen mit einer geringen Intensität des

A-Zentrums (bestehend aus Cd-Vakanz und Bi_{Cd}), die Konzentration von Bi auf einem Cd-Platz größer. Somit erhöht sich der spezifische Widerstand aufgrund einer erhöhten Konzentration des tiefen Donators Bi. Die inhomogene Verteilung des A-Zentrums bzw. des spezifischen Widerstands sorgt für inhomogene Detektoreigenschaften hinsichtlich des spezifischen Widerstands und damit des Dunkelstroms.

Wird die Probe beleuchtet, verringert sich der spezifische Widerstand durch die zusätzlich eingebrachten Ladungsträger aufgrund der optischen Anregung. Als Anregungsquelle wurde eine Leuchtdiode mit einer Wellenlänge von $\lambda=935$ nm verwendet, was einer Energie von ca. $E=1,326$ eV entspricht. Die Leuchtintensität kann durch Variation des Stroms verändert werden. Der Strom durch die LED betrug bei den Messungen $I=1$ mA.

Unter der Beleuchtung der Leuchtdiode sinkt der spezifische Widerstand auf Werte zwischen $\rho=5,0 \cdot 10^8 \Omega\text{cm}$ und $\rho=4,0 \cdot 10^9 \Omega\text{cm}$.

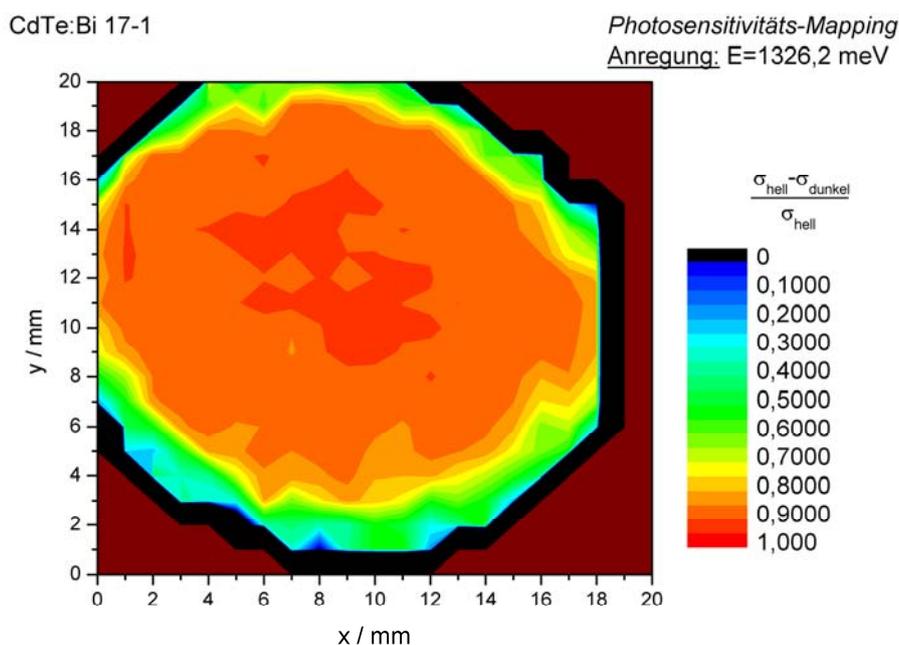


Abbildung 5-5: Verteilungen der Photosensitivität der Probe CdTe:Bi 17-1. Die Photoanregungsenergie betrug $E=1326,2$ meV bei einem Strom durch die LED von 1 mA

Ein Mapping der Photosensitivität ist in Abbildung 5-5 dargestellt. Die Probe ist sehr photosensitiv auf einer großen Fläche. Die hohe Photosensitivität der Probe von 0,8 bis 0,9 deutet auf eine lange Lebensdauer der erzeugten Ladungsträger hin, erschwert jedoch eine Anwendung von bismut-dotierten CdTe-Detektoren bei Lichtbestrahlung.

Die photosensitiven Bereiche stimmen mit den Bereichen des hohen spezifischen Widerstands überein. Da die Photoanregung mit einer Energie kleiner der Bandlückenenergie stattgefunden hat, müssen die zusätzlich eingebrachten Ladungsträger von einem tiefen Störstellenniveau herrühren. Zusätzlich scheint das photosensitive Zentrum maßgeblich am Kompensationsmechanismus beteiligt sein.

Tabelle 3: Übersicht der Verunreinigungen der Probe CdTe:Bi 17 gemessen mit einem Massenspektrometer ICP-MS

<i>Verunreinigung</i>	<i>Konzentration (at./cm³)</i>	<i>Einbauart</i>
Li	5,2·10¹⁶	Flacher Akzeptor
Na	4,1·10¹⁶	Flacher Akzeptor
Mg	5,4·10¹⁵	Flacher Akzeptor
Al	5·10¹⁵	Flacher Donator
K	2·10¹⁵	Flacher Akzeptor
Ca	3,6·10¹⁵	Flacher Akzeptor
Cu	9,3·10¹⁶	Tiefer Akzeptor
Ag	1,2·10¹⁵	Flacher Akzeptor
In	5,7·10¹⁵	Flacher Donator
Ga	3,4·10¹⁶	Flacher Donator
Bi	5,8·10¹⁷	Tiefer Donator (?)

In Tabelle 3 wurden die mit einem Massenspektrometer festgestellten Verunreinigungen, deren Konzentrationen und ihr Einbaucharakter als Störstelle zusammengefasst. Die Summe der Konzentrationen der flachen Donatoren (In, Ga, Al) liegt mehr als eine Größenordnung unter der Konzentration des tiefen Donators Bismut. Die Konzentrationen von anderen tiefen Donatoren wie V, Ge und Sn liegen unterhalb des Detektionslimits.

Zusammenfassend deutet vieles darauf hin, dass Bismut für den hohen spezifischen Widerstand der Probe verantwortlich ist. Mit der Annahme, dass Bismut als tiefer Donator in die Bandlücke eingebaut wird, erklärt sich die Korrelation von spezifischem Widerstand und der Photoleitfähigkeit, da aufgrund der Anregungsenergie kleiner der Bandlückenenergie nur Ladungsträger von einem Störstellenniveau innerhalb der Bandlücke angeregt werden können. Es konnte keine Korrelation der flachen Störstellen

mit dem spezifischen Widerstand gefunden werden. Die Gemeinsamkeiten der Konzentrationsverteilung des A-Zentrums und der Verteilung des spezifischen Widerstands deuten weiterhin auf den Einbau von Bismut in das A-Zentrum hin.

5.2 Untersuchung der Proben CdTe:Bi geschnitten entlang der Wachstumsrichtung (Probe: CdTe:Bi 17-2)

Zur Untersuchung der Verteilung des spezifischen Widerstands entlang der Wachstumsrichtung wurden die gleichen Messungen wie für die Probe 1 durchgeführt.

In Abbildung 5-6 sind die Photolumineszenzmappings für den exzitonischen Peak bei einer Energie von $E=1553,9$ meV und den Bereich des A-Zentrums bei $E=1347,8$ meV dargestellt.

Es fällt auf, dass im Gegensatz zur Probe CdTe:Bi 17-1 die Verteilung der Störstellen sehr unterschiedlich ist. Während sich die flachen Störstellen im rechten Bereich anhäufen, häuft sich die Konzentration des A-Zentrums im linken Bereich des Mappings. Die Verteilung der Störstellen des Kristalls ist erneut sehr inhomogen.

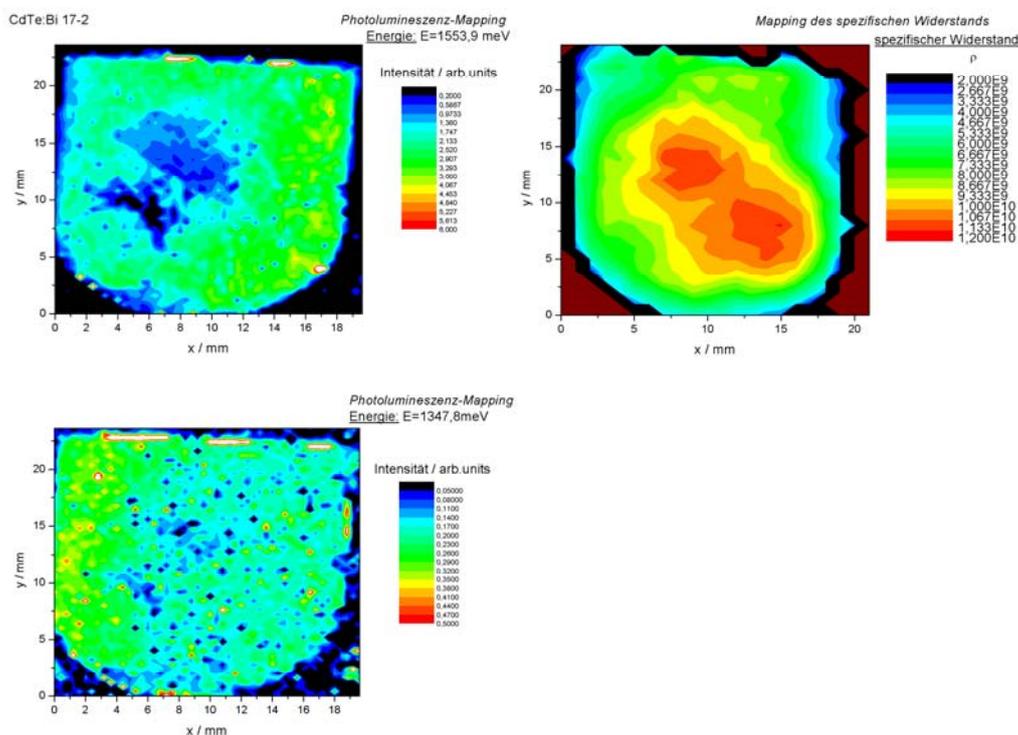


Abbildung 5-6: Photolumineszenz-Mapping der Probe CdTe:Bi 17-2 bei einer Energie von $E=1553,9$ meV (oben) und $E=1347,8$ meV (Mitte), sowie die Verteilung des spezifischen Widerstands (oben rechts)

Der spezifische Widerstand (Abbildung 5-6) liegt im Bereich zwischen $\rho=2 \cdot 10^9 \Omega\text{cm}$ und $\rho=1,2 \cdot 10^{10} \Omega\text{cm}$. Der spezifische Widerstand hat ein deutliches Maximum in der Mitte der Probe und im unteren rechten Bereich.

Erneut erkennt man keine Korrelation zur Verteilung der flachen Störstellen, die somit nicht dominierend zum Kompensationsmechanismus beitragen.

Wie bei Probe 17-1 ergeben sich Gemeinsamkeiten in der Verteilung der Konzentrationen des A-Zentrums aus den Photolumineszenzmessungen mit der Verteilung des spezifischen Widerstands, die im Bereich eines hohen spezifischen Widerstands eine geringe Konzentration aufweist.

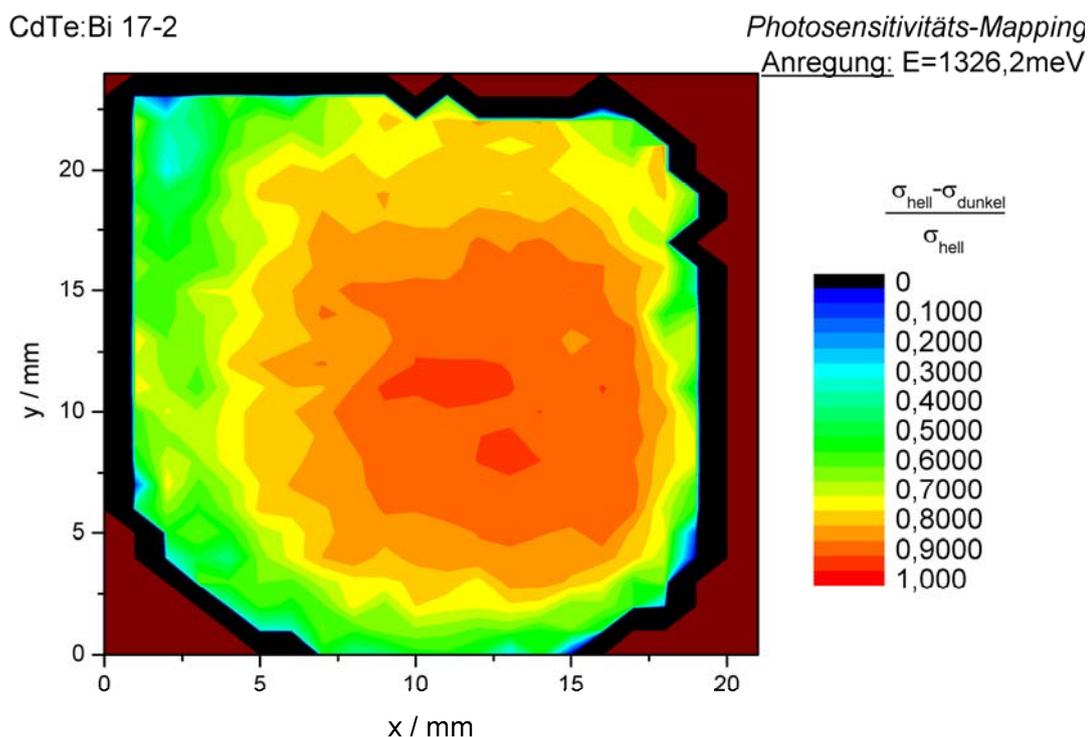


Abbildung 5-7: Die Verteilungen der Photosensitivität der Probe CdTe:Bi 17-2 bei einer Anregungsenergie von $E=1326,2 \text{ meV}$ und einem Strom durch die LED von 1 mA

Die Verteilung des spezifischen Widerstands unter Beleuchtung ändert sich bei Beleuchtung zu Werten von $\rho=8 \cdot 10^8 \Omega\text{cm}$ bis zu $\rho=3,3 \cdot 10^9 \Omega\text{cm}$. Der spezifische Widerstand sinkt besonders stark in Bereichen mit einem hohen spezifischen Dunkelwiderstand.

Die Probe zeigt eine hohe Photosensitivität von 0,7 bis 0,9 in einem großen Bereich. (Abb. 5-7) Erneut korreliert die Photoleitfähigkeit mit dem spezifischen Widerstand. Es besteht keine Korrelation zwischen der Verteilung der flachen Störstellen und dem spezifischen Widerstand. Da die Photoanregungsenergie erneut unter der Bandlückenenergie lag, müssen die Ladungsträger somit von einer Störstelle tief aus der Bandlücke

kommen. Die Verteilung des A-Zentrums mit der Photoleitfähigkeit weist ebenso wie der spezifische Widerstand eine hohe Ähnlichkeit auf. Wiederum ist im Bereich einer hohen Konzentration des A-Zentrums die Photoleitfähigkeit sehr gering. So ändert sich der spezifische Widerstand in den Bereich einer hohen Konzentration des A-Zentrums kaum. Grund hierfür ist die geringe Konzentration von Bi_{Cd} , die keinen mit einer Cd-Vakanz bilden.

Die Untersuchungen an der Probe CdTe:Bi 17-2 bestätigen die Ergebnisse der Probe CdTe:Bi 17-1.

5.3 Untersuchung der Proben CdTe:Bi:Yb (Probe: CdTe:Bi:Yb)

Zur Untersuchung des Einflusses von Yb auf den spezifischen Widerstand und die Photoleitfähigkeit wurden CdTe-Proben untersucht, die sowohl mit Bi als auch mit Yb dotiert waren. Die Konzentrationen von Bi beträgt $1 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ und die Konzentration von Yb ebenfalls $1 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

Das Photolumineszenzspektrum der Probe CdTe:Bi:Yb ist in Abbildung 5-8 zu sehen. Es sind zwei Peaks zu erkennen:

- Eine starke Emission bei einer Energie von $E=1577,6 \text{ meV}$, die einem gebundenen Exziton zugeordnet wird. Die Verschiebung zu einer höheren Energie im Vergleich zum Photolumineszenzspektrum der Probe CdTe:Bi 17 deutet aufgrund der geringeren Dissoziationsenergie auf ein Donator-gebundenes Exziton hin.
- Eine sehr starke Emission bei einer Energie von $E=1,4 \text{ eV}$, die einem $[\text{D}^0, \text{A}^0]$ -Übergang unter Beteiligung eines A-Zentrums zugewiesen wird.

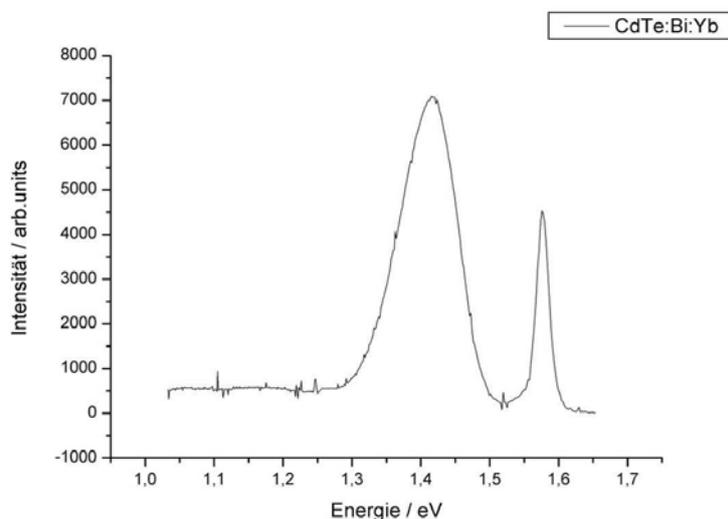


Abbildung 5-8: Photolumineszenzspektrum der Probe CdTe:Bi:Yb bei einer Temperatur von 80 K

Die Photolumineszenz-Mappings zeigen sehr unterschiedliche Störstellenverteilungen. Während die bandkantennahe und damit die den flachen Störstellen zugewiesene Intensität bei einer Energie von 1577,6 meV ein Intensitätsmaximum im unteren linken Bereich und ein Minimum im rechten Bereich aufweist, ist die Konzentration des A-Zentrums im rechten Bereich sehr hoch im Vergleich zum linken Bereich. Insgesamt zeigt die Probe erneut eine inhomogene Störstellenverteilung, allerdings mit großen relativ homogenen Bereichen.

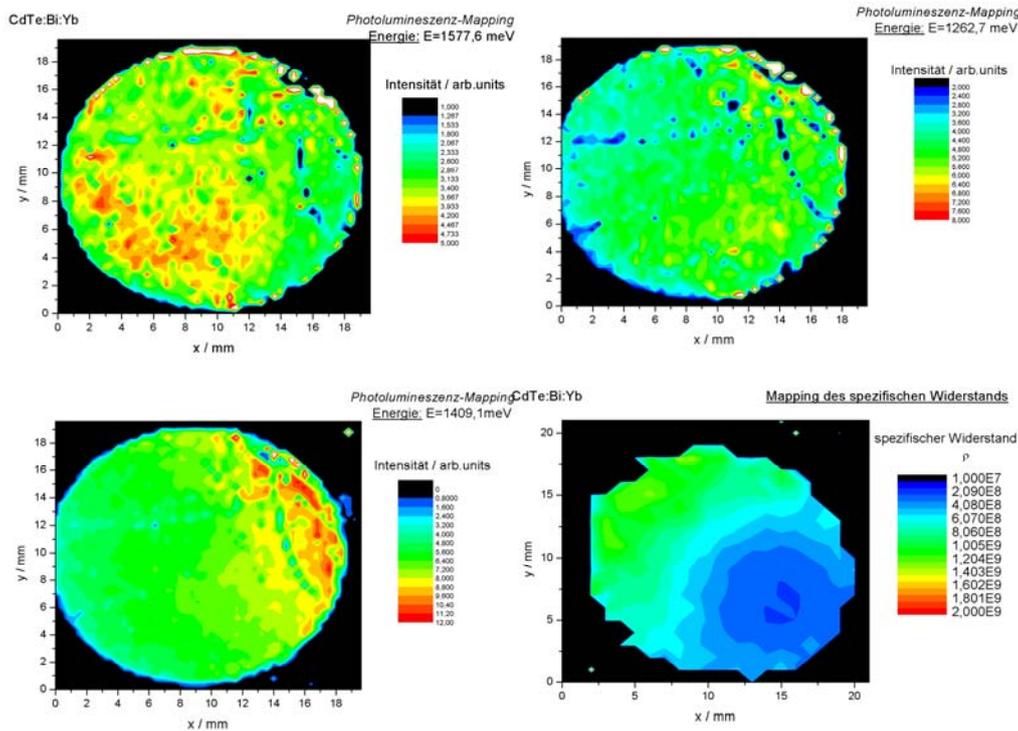


Abbildung 5-9: Photolumineszenz-Mapping der Probe CdTe:Bi:Yb bei einer Energie von E=1577,6 meV (oben links), E=1409,1 meV (unten links) und E=1262,7 meV (oben rechts), sowie die Verteilung des spezifischen Widerstands (unten rechts)

In Abbildung 5-9 ist die Verteilung des spezifischen Widerstands dargestellt. Bei den mit Yb kodotierten Proben sinkt der spezifische Widerstand im Vergleich zu der Probe CdTe:Bi 17 um eine Größenordnung auf Werte zwischen $\rho=1,0 \cdot 10^8 \Omega\text{cm}$ und $\rho=1,3 \cdot 10^9 \Omega\text{cm}$. Erneut weist der spezifische Widerstand kleine Werte im Bereich einer hohen Intensität des A-Zentrums auf. Allerdings ist die Korrelation von A-Zentrums-Intensität und hohem spezifischen Widerstand durch den Einfluss von Yb deutlich geringer. Die hohe Intensität des A-Zentrums deutet auf eine hohe Kompensation der Cd-Vakanzen durch die Bildung eines A-Zentrums hin. Die Cd-Vakanzen senken als tiefer Akzeptor das $\mu\tau$ -Produkt, daher ist eine Kompensation erwünscht. [Fie5] Andererseits bedeutet es eine Reduktion des tiefen Donators Bi_{Cd} , das keinen Komplex

mit Cd-Vakanzen eingeht, was für den kleineren spezifischen Widerstand mitverantwortlich ist.

Die Beleuchtung erfolgte wiederum durch eine LED mit einer Energie von $E=1326,2$ meV und einem Strom von 1mA.

Durch die Beleuchtung der Probe sinkt der spezifische Widerstand auf Werte zwischen $\rho=1,0 \cdot 10^7 \Omega\text{cm}$ und $\rho=1,5 \cdot 10^8 \Omega\text{cm}$. Allerdings verändert sich der spezifische Widerstand in Bereich mit einem hohen spezifischen Widerstand kaum. Besonders stark sinkt der spezifische Widerstand in Bereichen mit einem relativ kleinen spezifischen Widerstand. Erklärbar ist das durch das zusätzlich Einbringen freier Ladungsträger durch den tiefen Donator Yb in der Bandmitte.

Die Photoleitfähigkeit ändert sich in Bereichen mit einem hohen spezifischen Widerstand kaum. Die Photosensitivität der Probe ist in Abbildung 5-10 dargestellt. Die Photosensitivität ist deutlich geringer als bei CdTe:Bi mit Werten zwischen 0 und 0,5.

Zusammenfassend verringert der Einbau von Yb den spezifischen Widerstand im Vergleich zu den Bi-dotierten Proben um ca. eine Größenordnung. Insgesamt hat die Photosensitivität deutlich auf Werte zwischen 0 bis 0,5 abgenommen und die Probe zeigt ein deutlich inhomogeneres Verhalten als rein bismut-dotierte Proben. Weiterhin hat die Korrelation von spezifischem Widerstand und der Intensität des A-Zentrums abgenommen. Ein Grund hierfür könnte ein konkurrierender Effekt von Yb auf den Einbau von Bi auf Cd-Plätzen sein.

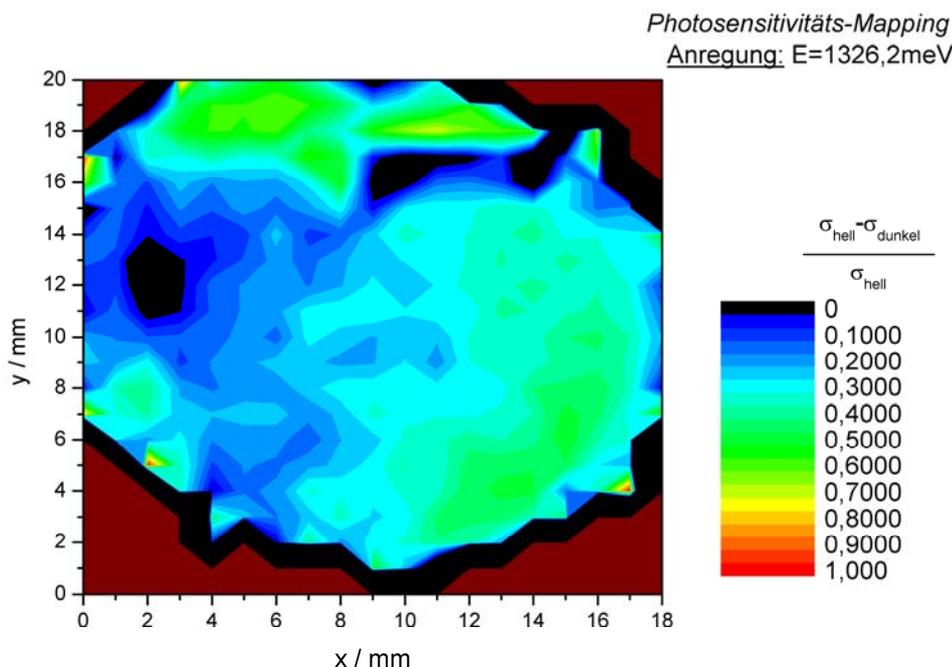


Abbildung 5-10: Die Verteilung der Photosensitivität der Probe CdTe:Bi:Yb bei einer Beleuchtung einer Energie von $E=1326,2$ meV und einem Strom durch die LED von 1 mA.

5.4 Zusammenfassung

Mittels CoReMa-, Photoleitfähigkeits- und Photolumineszenzuntersuchungen wurde der Einbaumechanismus von Bi und Yb in CdTe untersucht. Dabei konnte gezeigt werden:

- Bismut-dotierte Proben haben einen hohen spezifischen Widerstand in einem großen Bereich von $\rho > 7 \cdot 10^9 \Omega\text{cm}$ bis zu $\rho = 1,3 \cdot 10^{10} \Omega\text{cm}$.
- Die Störstelle, die für den hohen spezifischen Widerstand verantwortlich ist, sorgt auch für eine hohe Photosensitivität zwischen 0,7 und 0,9.
- Die hohe Photosensitivität deutet auf eine hohe Lebensdauer der erzeugten Ladungsträger und damit auf ein hohes $\mu\tau$ -Produkt hin. In Verbindung mit dem hohen spezifischen Widerstand, der im Anwendungsfall auf einen geringen Dunkelstrom hinweist, sind die Grundvoraussetzungen für eine Anwendung von CdTe:Bi als Detektormaterial gegeben.
- Aufgrund der Photoanregung mit einer Energie, die kleiner als die Bandlückenenergie ist, müssen die zusätzlichen Ladungsträger von einer Störstelle innerhalb der Bandlücke herrühren.
- Es konnte kein Zusammenhang zwischen dem hohen spezifischen Widerstand und den flachen Störstellen gefunden werden.
- Bismut ist an der Bildung des A-Zentrums als Donator beteiligt.
- Eine zusätzliche Kodotierung mit Ytterbium reduziert den spezifischen Widerstand auf Werte zwischen $\rho = 1 \cdot 10^8 \Omega\text{cm}$ und $\rho = 1 \cdot 10^9 \Omega\text{cm}$.
- Durch die Yb-Kodotierung sinkt die Photosensitivität deutlich.
- Aufgrund des reduzierten spezifischen Widerstands und der geringen Photosensitivität sind die Grundvoraussetzungen für den Detektoranwendung, wie einem geringen Dunkelstrom und ein hohes $\mu\tau$ -Produkt, von Ytterbium kodotiertem CdTe:Bi nicht ideal erfüllt.

Es konnte somit gezeigt werden, dass Bismut als tiefer Donator in CdTe eingebaut wird und für die Kompensation verantwortlich ist.

Ziel für weitere Untersuchungen ist:

- Überprüfung der Detektorfähigkeit von CdTe:Bi und CdTe:Bi:Yb
- Feststellen der Parameter, die das amphotere Verhalten von Bismut kontrollieren
- Versuch eines homogeneren Störstelleneinbaus für eine homogene Verteilung des spezifischen Widerstands
- Weitere Untersuchung des Einfluss von Yb auf CdTe:Bi

6 Zusammenfassung

Ziel der Arbeit war es, durch den Einsatz von zerstörungsfreien Charakterisierungsverfahren dotierte Volumenkristalle und undotierte dicke Schichten zu untersuchen, um weitere Möglichkeiten zur Entwicklung von detektorfähigen CdTe-Kristallen aufzuzeigen.

Im Rahmen der Arbeit wurde gezeigt, dass die Abscheidung von dicken Schichten CdTe mittels einer modifizierten MBE eine Alternative für die Herstellung von hochohmigem Halbleitermaterial zur Züchtung von Bulkmaterial darstellt.

Die Untersuchungen der auf GaAs-Substraten abgeschiedenen dicken CdTe-Schichten ergeben, dass Ga und As vom GaAs-Substrat sowie In in die CdTe-Schicht miteingebaut wurden. Nach Entfernung des Substrats konnten exzitonische Übergänge beobachtet werden, die auf eine geringe Versetzungsdichte in der Schicht schließen lassen. Es wurde ein spezifischer Widerstand von $\rho=(2,6 \pm 0,5) 10^8 \Omega\text{cm}$ bestimmt, der im Vergleich mit CdTe-Schichten anderer Gruppen sehr hoch ist. Weiterhin war es möglich, das Spektrum des α -Strahlers ^{241}Am aufzunehmen. Das $\mu\tau$ -Produkt wurde mit $\mu\tau_n=(4,8 \pm 1,3) 10^{-5} \text{cm}^2/\text{V}$ abgeschätzt. Die Resultate zeigen, dass es möglich ist, mittels einer modifizierten MBE detektorfähige CdTe-Schichten auf einem GaAs-Substrat abzuscheiden.

Zur Untersuchung des Einflusses von Bismut auf den Kompensationsmechanismus wurden bismut-dotierte CdTe-Bulkkristalle charakterisiert. Weiterhin wurde ein amphoterer Charakter von Bismut bezüglich seines Störstellencharakters untersucht.

Die Messungen an den bismut-dotierten CdTe-Kristallen zeigen einen hohen spezifischen Widerstand, der über große Bereiche der Proben zwischen $6 \cdot 10^9 \Omega\text{cm}$ und $1,4 \cdot 10^{10} \Omega\text{cm}$ liegt. Weiterhin konnte gezeigt werden, dass flache Störstellen nicht dominierend am hohen spezifischen Widerstand der Proben beteiligt sind. Die Probe zeigt eine hohe Photosensitivität, die eindeutig mit dem hohen spezifischen Widerstand verknüpft ist. Photolumineszenzmappings zeigen die Beteiligung von Bismut an der Bildung des A-Zentrums. Die Messungen bestätigen die Vermutung aus der Literatur [Sau04], dass Bismut als Donator eingebaut wird und somit ein amphoterer Charakter zeigt. Bei einer Kodotierung der Proben mit Yb sinkt der spezifische Widerstand deutlich auf Werte zwischen $1 \cdot 10^8 \Omega\text{cm}$ und $1,3 \cdot 10^9 \Omega\text{cm}$ und das photosensitive Verhalten ändert sich deutlich.

7 Ausblick

Zur Weiterentwicklung der dicken CdTe Schichten kann in Zukunft versucht werden, durch gezielte Dotierung den spezifischen Widerstand weiter zu erhöhen. Dazu muss der ungewollte Einbau von Verunreinigungen wie Ga, In und As und Defekten reduziert werden. Es bietet sich eine Variation der Wachstumstemperatur an, sowie das Einbringen einer Diffusionsbarriere z.B. aus ZnTe an. Das Einbringen einer Pufferschicht hätte zudem den Vorteil einer geringeren Gitterfehlانpassung, die dadurch die Transporteigenschaften des Kristalls verbessern würde. Nachdem die Machbarkeit der Abscheidung von CdTe auf GaAs gezeigt wurde, kann nun versucht werden, dicke Schichten CdTe auf anderen Fremdsubstraten wie z.B. Si oder direkt einer Ausleseelektronik abzuscheiden.

Zur weiteren Untersuchung des Einflusses einer Bismutdotierung mit einer eventuellen Ytterbiumdotierung auf CdTe sollten weiterführende Experimente durchgeführt werden, um die energetische Lage von Bismut in der Bandmitte zu verifizieren. Weiterführende Untersuchungen sollten die Rolle von Yb untersuchen. Weiterhin bleibt zu klären, ob es durch Variation der Wachstumsbedingungen möglich ist, das amphotere Verhalten von Bismut zur Erzeugung von n- bzw. p-Leitung gezielt zu kontrollieren. Die Anwendung von CdTe:Bi und CdTe:Bi:Yb als Detektor sollte untersucht werden. Zu diesem Zweck muss die Homogenität der Proben hinsichtlich ihrer Störstellenverteilung verbessert werden.

Zum weiteren Ausbau der zerstörungsfreien Materialcharakterisierung bietet sich beispielsweise eine Erweiterung des Photolumineszenzmessplatzes an. So kann über die Erweiterung mit einem CCD-Sensor nachgedacht werden. Der CCD-Sensor ersetzt den Monochromator und den Germanium-Detektor und kann über die spektrale Zerlegung mit einem Gitter direkt Spektren aufnehmen. Nach dem Einbau des Tieftemperaturkühlkopfes soll der Aufbau weiterhin so verändert werden, dass es möglich ist, temperaturabhängige Photolumineszenzspektren bis zu einer Tieftemperatur von $T=15$ K zu erhalten. Dies ermöglicht es, zusätzliche Informationen wie beispielsweise die Dissoziationsenergien von Exzitonen zu erhalten.

Anhang A: Zusammenstellung der Ionisationsenergien von Störstellen in CdTe [Schl01]

A.1 Ionisationsenergien der Elemente aus der I, III, IV, V und VII Haupt- bzw. Nebengruppe

<i>Element</i>	<i>Photoionisations- energie / meV</i>	<i>Thermische Ionisa- tionsenergie / meV</i>	<i>Methode</i>	<i>Referenz</i>
Li	Akzeptor: 58,0		PL	[Mol84]
Na	Akzeptor: 58,7		PL	[Mol84]
N	Akzeptor: 56,0		PL	[Mol83]
P	Akzeptor: 68,2		PL	[Mol83]
As	Akzeptor: 92,0		PL	[Mol83]
Cl	Donator: 14			[Sta95]
Cl	Donator: 14,48		PL	[Fra90]
Cl-V _{Cd}	Akzeptor: 120		PL,ODMR	[Hof92]
Cl DX1		Donator: 220	Theorie	[Kha89]
Cl DX2		Donator: 470	Theorie	[Kha89]
Cl DX3		Donator: 210	Theorie	[Kha89]
Al	Donator: 14,05		PL	[Fra90]
F	Donator: 13,71		PL	[Fra90]
Ga	Donator: 13,83		PL	[Fra90]
In	Donator: 14,08		PL	[Fra90]
In DX		Donator: 300	Theorie für Cd _{0,8} Zn _{0,2} Te	[Kha89]
Ge	Donator: 950	Akzeptor: 730	Photo-EPR	[Jan86]
Sn	Donator: 900		DLTS	Kremer et al. (1988)
Sn	Donator: 850		Photo-EPR	[Jan86]
Sn	Donator: 890, 430		QTS	[Ye90]
Pb	Donator: 1280		Photo-EPR	[Jan86]

A.2 Ionisationsenergien der Übergangsmetalle

<i>Element</i>	<i>Photoionisations- energie / meV</i>	<i>Thermische Ionisa- tionsenergie / meV</i>	<i>Methode</i>	<i>Referenz</i>
Sc	Donator: 10,5		PL	[Bab90]
Ti	Donator: 8	Donator: 730	PL, TDH	[Bab90]
Ti	Donator: 830		DLTS, photo-DLTS	[Zer98]
V	Donator: 670		Photo-EPR	[Chr96]
V		Donator: 950	DLTS, photo-DLTS	[Zer00]
V		Akzeptor: 740	Theorie	[Cal84]
V		Akzeptor: 510	TSC	[Mor93]
Cr	Akzeptor: 1340		EPR, ODMR, PL	[God80]
Mn		Donator: 50, 730	Hall	[Dey82]
Fe	Donator: 1450		Photo-EPR	[Lis85]
Fe	Akzeptor: 350		EPR, ODMR, PL	[Jan86]
Fe		Akzeptor: 430	TSC	[Mor93]
Fe	Akzeptor: 150		SPS	[Sar91]
Fe	Akzeptor: 200		CPM	[Stad95]
Co	Akzeptor: 1250		EPR, ODMR, PL	[Han88]
Ni	Akzeptor: 920		EPR, ODMR, PL	[Jan86]
Ni	Donator: 760		CPM	[Stad95]
Cu	Akzeptor: 360; unbekannt: 600		PICTS	[Ton98]
Cu		Akzeptor: 146	PL	[Mol83]
Cu	Akzeptor: 370		PICTS	[Fie6]
Ag	Akzeptor: 107,5		PL	[Mol82b]
Au	Akzeptor: 263		PL	[Mol84b]

A.3 Ionisationsenergien von intrinsischen Defekten

<i>Element</i>	<i>Photoionisations- energie / meV</i>	<i>Thermische Ionisations- energie / meV</i>	<i>Methode</i>	<i>Referenz</i>
V_{cd}		Akzeptor: <470	Photo-EPR	[Stad95]
V_{cd}	Akzeptor: 780		PICTS	[SchlJ]
V_{cd}		Akzeptor: 200, 800	Theorie	[Ber99]
V_{cd}		Akzeptor: 100, 400, 760	DLTS, PICTS	[Cas98]
V_{cd}		Akzeptor: 100	Theorie	[Cha99]
V_{cd}		Akzeptor: 430	TEES	[Szel97]
V_{Cd}		Akzeptor: 210 Donator: 730	TEES	[Hua95]
Te_{Cd}		Donator: 0, 400	Theorie	[Ber99]
Te_I		Donator	Theorie	[Ber99]
$Te_{Cd}-V_{Cd}$		Neutral	Theorie	[Ber99]
V_{Te}	Donator: 1400		Photo-EPR	[Cor93]
V_{Te}		Donator: 1100	DLTS, PICTS	[Cas98]
V_{Te}		Donator: 400, 500	Theorie	[Ber99]
Cd_I		Donator: 640	DLTS, PICTS	[Cas98]
Cd_I		Donator: 540	PICTS	[Fie6]
Cd_I		Donator: 500	Theorie	[Cha99]
Cd_I		Donator: 0, 200	Theorie	[Ber99]

Anhang B: Abkürzungsverzeichnis

<i>Abkürzung</i>	<i>Bedeutung</i>
A	Fläche
A_{SGa}	Antisitedefekt (hier: As auf Ga-Platz)
A_{SI}	Zwischengitterplatzdefekt (hier: As auf Zwischengitterplatz)
BEP	<u>B</u> eam <u>e</u> quivalent <u>p</u> ressure
C	Kondensator
c	Konzentration
CoReMa	<u>C</u> ontactless <u>r</u> esistivity <u>m</u> apping
c_s, c_l	Konzentration in Festkörper, Konzentration in Schmelze
CSS	<u>C</u> losed <u>s</u> pace <u>s</u> ublimation
d	Abstand, Detektordicke
\bar{D}	Dielektrische Verschiebung
E	Elementarladung
E, \vec{E}	Elektrisches Feld
E_a	Bindungs- bzw. Ionisationsenergie
E_F	Fermienergie
E_G	Bandlückenenergie
e^-h^+ -Paare	Elektron-Loch-Paare
$E_{\text{LO}}, E_{\text{TO}}$	Energie von longitudinal-optischem bzw. transversal-optischem Phonon
E_{NPL}	Energie der Nullphononenlinie
ϵ, ϵ_0	Dielektrizitätskonstante von Materie bzw. Dielektrizitätskonstante im Vakuum
g	Entartungsfaktor
I	Lumineszenzintensität
I_0	Maximalintensität bzw. Intensität bei 0K
\vec{J}	Stromdichte

k_B	Boltzmannkonstante
k_{eff}	Effektiver Verteilungskoeffizient
L	Anregungsleistung des Laser
LB	Leitungsband
LEC	<u>L</u> iquid <u>e</u> ncapsulated <u>C</u> zochralski
λ	Freie Weglänge bzw. Wellenlänge
MBE	<u>M</u> olecular <u>b</u> eam <u>e</u> pitaxy
m_e^*, m_h^*	effektive Masse von Elektron und Loch
μ	Beweglichkeit
μ_r	reduzierte Masse von Elektron und Loch
n	Elektronenkonzentration bzw. im Index Bezeichnung für Elektron
$n-n_0$	Abweichung der Ladungsträgerdichte zur Gleichgewichtskonzentration
N	Effektive Zustandsdichte
N_D, N_A	Donator-, Akzeptorkonzentration
n_i	Intrinsische Ladungsträgerkonzentration
p	Löcherkonzentration bzw. im Index Bezeichnung für Loch
PICTS	<u>P</u> hoto <u>i</u> nduced <u>c</u> urrent <u>t</u> ransient <u>s</u> pectroscopy
PL	<u>P</u> hoto <u>l</u> umineszenz
q	Ladung
Q	Oberflächenbelegung bzw. Gesamtladung
R	Widerstand
$ \vec{r} $	Betrag des Ortsvektors
ρ	spezifischer Widerstand
S	Huang-Rhys-Parameter
SIMS	<u>S</u> ekundär <u>i</u> onen <u>m</u> assenspektroskopie
S_{Index}	Fehler auf Größe im Index
SNR	Signal-to-noise ratio, Signal zu Rausch Verhältnis
σ_{Index}	Fehler auf Messwert im Index

σ_0, σ	Leitfähigkeit
$\sigma_{\text{Photo, Compton, Paarbildung}}$	Wechselwirkungsquerschnitte
T	Temperatur
τ	Lebensdauer
τ_D	Dielektrische Relaxationszeit
TDCM	<u>T</u> ime <u>d</u> ependent <u>c</u> harge <u>m</u> easurements
U	Spannung
VB	Valenzband
v_D	Driftgeschwindigkeit
V_{Ga}	Vakanz (hier: Ga-Vakanz)
ω	Halbwertsbreite
x	Relative Länge bzw. Abstand zu Wechselwirkungsort
Z	Kernladungszahl

Literaturverzeichnis

- [Acro] www.acrorad.co.jp
- [Bab90] P.I. Babii, O.A. Parfenyuk, *Sov. Phys. Semicond.* 24, p.904 (1990)
- [Bau00] Andreas Bauknecht, *CuGaSe₂ für die Anwendung in der Photovoltaik*,
Dissertation FU Berlin (2000)
- [Ber99] M.A. Berding, *Annealing conditions for intrinsic CdTe*, *Appl. Phys. Lett.*
74, p.552 (1999)
- [Ble86] M. Bleicher, *Halbleiter-Optoelektronik*, Hüthig Verlag Heidelberg (1986)
- [Boh88] K.-Th. Wilke, J. Bohm, *Kristallzüchtung*, Verlag Harri Deutsch Thun
Frankfurt/Main, (1988)
- [Bro96] M.R. Brozel, *Properties of GaAs, third edition* (1996)
- [Bub92] R.H. Bube, *Photoelectronic Properties of Semiconductors*, Cambridge
University Press (1992)
- [Cal84] M.J. Caldas, Z. Fazzio, Z. Zunger, A universal trend in the binding energies
of deep impurities in semiconductors, *Appl. Phys. Lett.* 45 p.671 (1984)
- [Cap94] P. Capper Editor, *Properties of Narrow Gap Cadmiumbased Compounds*
Emis Data Reviews Series Vol. 10 (1994)
- [Cas98] A. Castaldini, J. Piqueras, *Deep energy levels in CdTe and CdZnTe*, *J.*
Appl. Phys. 83, p.2121 (1998)
- [Cha99] Y.C. Chang, R.B. James, in: R.B. James, R.C. Sherato (Eds.), *Hard X-ray,*
Gamma-ray and Neutron Detector Physics and Applications, Vol. 3768,
SPIE, Bellingham, WA (Phys. Rev. B) p. 381 (1999)
- [Chr96] P. Christman, B.K. Meyer, J. Kreissl, R. Schwarz, K.W. Benz, *Vanadium*
in CdTe, *J. Crystal Growth* 161, p.259 (1996)
- [Cor93] C. Corbel, R. Triboulet, *Positron trapping at native vacancies in CdTe*
crystals: In doping effect, *Mater. Sci. Eng. B* 16, p.134 (1993)

- [CoTa77] C. Cohen-Tannoudji, *Quantum Mechanics*, Band I+II (1977)
- [Dey82] V.G. Deybuk et al., *Izv. Vuzov. Fizika* 4, p.24 (1982)
- [Fie1] M. Fiederle, C. Eiche, *Modified compensation model of CdTe*, *Journal of Applied Physics*, Vol.84, No.12 (1998)
- [Fie2] M. Fiederle, *State of the art of (Cd,Zn)Te as gamma detector*, *Journal of Crystal Growth* 197, p.635-640 (1999)
- [Fie3] M.Fiederle, A.Fauler, *Comparison of undoped and doped high resistivity CdTe and (Cd,Zn)Te detector crystals*, *Trans. Nucl. Sci.* (2003)
- [Fie4] Habilitationsschrift Michael Fiederle (2004)
- [Fie5] M. Fiederle, W. Stadler, *Modified Compensation Model of CdTe*, *Journal of applied physics*, Vol.84, No.12, (1998)
- [Fie6] M. Fiederle, D. Ebling, *Comparison of CdTe, Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te and CdTe_{0.9}Se_{0.1} crystals: application for γ - and X-ray detectors*, *J. Cryst. Growth* 138, p.529 (1994)
- [Fied01] U. Fiedeler, *Rekombination und Diffusion in CuGaSe₂ – Solarzellen*, Dissertation FU Berlin (2001)
- [Fra90] J.M. Francou, J.L. Pautrat, *Shallow donors in CdTe*, *Phys. Rev. B* 41, p.12035 (1990)
- [Geb00] J. Gebauer, *Native Leerstellen in GaAs - der Einfluß von Stöchiometrie und Dotierung*, Dissertation Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg (2000)
- [God80] M. Godlewski, J.M. Baranowski, *EPR Measurements of Chromium Impurity Photoionization Transitions in CdTe*, *Phys. Stat. Sol. (b)* 97 p. 281 (1980)
- [Hal00] D.P. Halliday, M.D.G. Potter, *Photoluminescence study of a bulk vapour grown CdTe crystal*, *J. Crystal Growth* (2000)
- [Hec32] K. Hecht, *Zum Mechanismus des lichtelektrischen Primärstromes in isolierenden Kristallen*, *Zeitschrift für Physik* 77, p.235 (1932)

- [Hen88] G. Hendorfer, G. Brunthaler, W. Jantsch, J. Reisinger, H. Sitter, *Photo-EPR and DLTS of CdTe: CO*, J. Cryst. Growth 86, p.497 (1988)
- [Hof92] D.M. Hofmann, D. Sinerius, K.W. Benz, *Identification of the chlorine A center in CdTe*, Phys. Rev. B 45, p.6247 (1992)
- [Hua95] Z.C. Huang, E. Eissler, C.R. Wie, *Role of cadmium vacancy-related defects in CdTe nuclear detectors*, Nucl. Instrum. Methods B100, p.507 (1995)
- [Iof] Semiconductors on NSM <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM//Semicond/>
- [Jan86] W. Jantsch, G. Hendorfer, *Cadmium telluride (CdTe) impurities and defects: ionization*, Mater. Sci. Forum 10-12, p.515 (1986)
- [Joe97] W. Joerger, M.Laasch, M.Fiederle, *Der photorefraktive Effekt in vanadiumdotierten CdTe- und (Cd, Zn) Te-Kristallen*, Cryst. Res. Technol. 32, (1997)
- [Kha89] K. Khachaturyan, R.A. Street, *Lattice relaxation of DX-like donors in $Zn_xCd_{1-x}Te$* , Phys. Rev. B 40, p.6304 (1989)
- [Kit89] C. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik*, 8. Auflage, R. Oldenbourg Verlag (1989)
- [Koi01] K. Koike, T. Tanaka, *High-quality CdTe growth in the (100)-orientation on (100)-GaAs substrates by molecular beam epitaxy*, Journal of Crystal Growth, Vol. 227-228, p.671-676 (2001)
- [Kol86] L.A. Kolodziejski, N. Otsuka, *Epitaxial growth of CdTe on GaAs by molecular beam epitaxy*, J. Vac. Sci. Technol. A4 (1986)
- [Lee94] J.Lee, *Room-temperature band-edge photoluminescence from cadmium telluride*, Phys. Rev. B, Vol. 49, No. 3, p.1668 (1994)
- [Lis85] K. Lischka, G. Brunthaler, W. Jantsch, *Deep donor levels due to isolated Fe in CdTe*, J. Cryst. Growth 72, p.355 (1985)

- [Lov00] N. Lovergine, M. Bayhan, *Structural and electrical properties of CdTe layers grown on ZnTe/GaAs by hydrogen transport VPE*, Journal of Crystal Growth, No.214/125, p.229-233 (2000)
- [Mal73] H.L. Malm, T.W. Raudorf, M. Martini, K.R. Zanio, *Gamma Ray Efficiency Comparisons for Si(Li), CdTe, and HgI₂ Detectors*, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-20, p.500 (1973)
- [Mol82] E. Molva, J.P. Chamonal, J.L. Paustrat, *Shallow Acceptors in Cadmium Telluride*, Phys. Stat. Sol. (b) 109, p.635 (1982)
- [Mol82b] E. Molva, J.P. Chamonal, *Excited states of Ag and Cu acceptors in CdTe*, Solid State Commun. 44, p.351 (1982)
- [Mol83] E. Molva, E. Ligeon, *Photoluminescence studies in N, P, As implanted cadmium telluride*, Solid State Commun. 48, p.955 (1983)
- [Mol84] E. Molva, N. Magneat, *Acceptor states in CdTe and comparison with ZnTe. General trends*, Phys. Rev. B 30, p.3344 (1984)
- [Mol84b] E. Molva, J.M. Francou, *Electrical and optical properties of Au in cadmium telluride*, J. Appl. Phys. 56, p.2241 (1984)
- [Mor93] P. Moravec, M. Hage-Ali, L. Chibani, P. Siffert, *Deep levels in semi-insulating CdTe*, Mater. Sci. Eng. B 16, p.223 (1993)
- [Mül95] R. Müller, *Grundlagen der Halbleiter-Elektronik*, Springer-Verlag Berlin (1995)
- [Nim82] Nimtz, Landolt-Bornstein, *Group 3 Crystal and Solid State Physics, Semiconductors Physics of II-VI Compounds*, Springer, Berlin (1982)
- [Nir04] M. Niraula, K. Yasuda, *Growth of thick CdTe Epilayers on GaAs Substrates and Evaluation of CdTe/n⁺-GaAs Heterojunction Diodes for an X-ray Imaging Detector*, Journal of Electronic Materials, Vol. 33, No.6 (2004)
- [Nir05] M. Niraula, K. Yasuda, *Development of Nuclear Radiation Detectors with Energy Resolution Capability based on CdTe-n⁺-GaAs Heterojunction Diodes*, IEEE Electron Device Letters, Vol.26, No.1 (2005)

- [Nir06] M. Niraula, K. Yasuda, *Characterization of CdTe/n⁺-Si Heterojunction Diodes for Nuclear Radiation Imaging Detectos*, IEEE (2006)
- [Nir98] M. Niraula, T. Aoki, *Radical assisted metalorganic chemical vapor deposition of CdTe on GaAs and carrier transport mechanism in CdTe/n-GaAs heterojunction*, Journal of Applied Physics, Vol. 83, No.5 (1998)
- [Owe04] A. Owens, A. Peacock, *Compound Semiconductor Radiation Detectors*, Nucl. Instr. Meth. A 351, p.18 (2004)
- [Rug91] I. Ruge, H. Mader, *Halbleiter-Technologie*, Springer Verlag (1991)
- [Sar91] A. Sarem, B.A. Orłowski, S. Kuzminski, Acta Phys. Pol. A 79, p.183 (1991)
- [Sau04] E. Saucedo, E. Dieguez, *Heavy Metal doping of CdTe crystals*, IEEE Trans. Nucl. Sci. 51 (2004)
- [Sau06] E. Saucedo, E. Dieguez, *Growth and properties of CdTe:Bi-doped crystals*, Journal of Crystal Growth, Vol. 291, p.416-423 (2006)
- [Sch92] T. Schmit, K. Lischka, *Excitation-power dependence of the near-band-edge photoluminescence of semiconductors*, Physical Review B, Vol.45, No.16, (1992)
- [Schl01] T.E. Schlesinger, R.B. James, *Cadmium zinc telluride and its use as a nuclear radiation detector material*, Materials Science and Engineering, 32, pp.103-189 (2001)
- [SchlJ] T.E. Schlesinger, R.B. James, *Semiconductors for Room Temperature Nuclear Detector Applications*, Semiconductors and Semimetals, Vol.43
- [Schr90] D.K. Schroder, *Semiconductor Material and Device Charakterization*, Wiley Interscience Publication (1990)
- [Sel06] P.J. Sellin, *Thick film compound semiconductors for X-ray imaging applications*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, Volume 563, Issue 1, p. 1-8 (2006)

- [Sta95] W.Stadler, M. Azoulay, *Compensation models in chlorine doped CdTe based on positron annihilation and photoluminescence spectroscopy*, Acta Phys. Pol. A88, p.921 (1995)
- [StHo95] W.Stadler, D.M. Hofmann, *Optical Investigation of defects in Cd_{1-x}Zn_xTe*, Physical Review B, Vol. 51, No. 16 (1995)
- [Sti91] R. Stibal, J. Windschleif, *Contactless evaluation of semi-insulating GaAs wafer resistivity using the timedependent charge measurement*, Semicond. Sci. Technol. 6, p. 995-1001 (1991)
- [Suz02] K. Suzuki, *Carrier Properties of HPB CdZn:Te and THM CdTe:Cl*, IEEE Transactions on Nuclear Science, Vol.49, No.3 (2002)
- [Sze] Sze, *Physics of Semiconductors Devices* (1981)
- [Sze197] C. Szeles, Y.Y. Shan, K.G. Lynn, A.R. Moodenbaugh, E.E. Eissler, *Trapping properties of cadmium vacancies in Cd_{1-x}Zn_xTe*, Phys. Rev. B 55, p. 6945 (1997)
- [Ton98] J.E. Toney, B.A. Brunett, T.E. Schlesinger, E. Cross, F.P. Doty, R.B. James, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 487, p.59 (1998)
- [UYu99] Sh.U. Yuldashev, *The behaviour of the shallow donor-band-recombination in In-doped CdTe expitaxial films grown on p-CdTe (211) substrates*, Solid State Communications, No. 110 (1999)
- [Wei01] S.H. Wei, S.B. Zhang, *Theoretical study of doping limits of CdTe*, Conference Paper NCPV program review meeting in Lakewood, Colorado(2001)
- [Ye90] Ch. Ye, J.H. Chen, *Studies of defects in n-type CdTe by charge transient spectroscopy*, J. Appl. Phys. 67, p.2475 (1990)
- [YuCa] P. Yu, M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors*, Springer Verlag (1996)

- [Zer00] A. Zerrai, G. Marrakchi, G. Bremond, Electrical and optical characteristics of deep levels in vanadium-doped $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$ materials by photoinduced current, capacitance, and photocapacitance transient spectroscopies, *J. Appl. Phys.* 87 p.4293 (2000)
- [Zer98] A. Zerrai, G. Bremond, *Properties of the titanium related level in $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$ crystals*, *J. Appl. Phys.* 84, p.5554 (1998)

Danksagung

Für das Gelingen der Diplomarbeit waren eine ganze Reihe Personen mitverantwortlich, denen ich an dieser Stelle ausdrücklich danken möchte:

Herrn Prof. Dr. Karl Jakobs für die Möglichkeit, in seiner Gruppe mitzuarbeiten, sowie für sein stetiges Interesse am Fortschreiten der Arbeit,

Herrn PD Dr. Michael Fiederle für die Vergabe des Themas und der guten Betreuung der Diplomarbeit,

Herrn Dr. Alex Fauler dafür, dass er immer einen passenden Ratschlag und ein offenes Ohr hatte,

Herrn Dr. Edgardo Saucedo für die tolle Zusammenarbeit und Bereitstellung der CdTe:Bi und CdTe:Bi:Yb Proben

Der Mechanikwerkstatt des physikalischen Instituts und der Mechanikwerkstatt des kristallographischen Instituts, insbesondere Herrn Drayer, für die stets schnelle und perfekte Ausführung,

Der Verwaltung des Freiburger Materialforschungszentrums (FMF),

Herrn Dr. Lutz Kirste (IAF) für die Durchführung der SIMS Messungen,

Herrn Andreas Zwerger und Herrn Markus Dambacher für die Durchführung der Detektormessungen,

Herrn Ralf Sorgenfrei für die gute Zusammenarbeit,

Frau Tina Trautnitz, Herrn Andreas Ehler, Herrn Simon Procz und Herrn Raimund Boger für die nette Arbeitsatmosphäre,

Ebenso möchte ich meinen ehemaligen Kollegen Christoph Strauss und Johannes Gregori danken.

Weiterhin möchte ich allen danken, die mich während der Arbeit unterstützt haben, die ich hier nicht explizit erwähnt habe.

Die Arbeit ist meiner Familie gewidmet, daher gilt mein besonderer Dank meinen Eltern Brigitte und Ernst Greiffenberg für die finanzielle und moralische Unterstützung, sowie meinem Bruder Raffael Greiffenberg.

(Nur in der Aufzählung zuletzt) meiner Freundin Stephanie Kossow! Danke!

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Diplomarbeit selbständig angefertigt habe. Es wurden nur die in der Arbeit ausdrücklich benannten Quellen und Hilfsmittel benutzt. Wörtlich oder sinngemäß übernommenes Gedankengut habe ich als solches kenntlich gemacht.

Ort, Datum

Unterschrift