

kassel  
university



press

## **Piezoresistive Sensoren auf der Basis von III-V Halbleitern**

Sascha Neber

Die vorliegende Arbeit wurde vom Fachbereich Elektrotechnik der Universität Gesamthochschule Kassel als Inauguraldissertation zur Erlangung des Doktorgrades der Ingenieurwissenschaften (Dr.Ing.) angenommen.

Erster Gutachter: Prof.Dr.H.Hillmer  
Zweiter Gutachter: Prof.Dr.R.Kassing  
Prüfungsgremium: Prof.Dr.W.-J.Becker  
Prof. Dr. H. Früchting  
Prof. Dr. H. Hillmer  
Prof. Dr. R. Kassing

Disputation:

14. Februar 2000

Die Deutsche Bibliothek - CIP-Einheitsaufnahme

**Neber, Sascha**

Piezoresistive Sensoren auf der Basis von III-V Halbleitern / Sascha Neber. - Kassel : kassel univ. press, 2000. - IV, 105 S. : Ill.

Zugl.: Kassel, Univ., Diss. 2000

ISBN 3-933146-47-X

© 2000, kassel university press GmbH, Kassel

Das Werk einschließlich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung außerhalb der engen Grenzen des Urheberrechtsschutzgesetzes ist ohne Zustimmung des Verlags unzulässig und strafbar. Das gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen.

Umschlaggestaltung: 5 Büro für Gestaltung, Kassel

Druck und Verarbeitung: Zentraldruckerei der Universität Gesamthochschule Kassel

Printed in Germany

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Physikalische Grundlagen</b>	<b>5</b>
2.1	Elastomechanik . . . . .	6
2.1.1	Mechanik des Cantilevers . . . . .	9
2.2	Piezoresistivität . . . . .	10
2.3	Piezoelektrizität . . . . .	14
2.3.1	Physikalische Ursache der Piezoelektrizität . . . . .	15
2.4	Elektrischer Transport im Halbleiter . . . . .	20
2.4.1	Streumechanismen . . . . .	22
2.4.2	Effektive Masse . . . . .	24
<b>3</b>	<b>Modell der erhöhten Piezoresistivität</b>	<b>25</b>
<b>4</b>	<b>Berechnung der erhöhten Piezoresistivität</b>	<b>33</b>
4.1	Erweitertes Modell der erhöhten Piezoresistivität . . . . .	34
4.2	Numerische Umsetzung des Modells . . . . .	39

<b>5</b>	<b>Ergebnisse der Simulationsrechnungen</b>	<b>45</b>
5.1	Galliumarsenid Homostruktur . . . . .	45
5.2	HEMT-Struktur . . . . .	55
5.3	Optimierung des PER1-Effektes . . . . .	64
<b>6</b>	<b>Messung der erhöhten Piezoresistivität</b>	<b>71</b>
6.1	Meßaufbau . . . . .	71
6.2	Technologie . . . . .	76
6.3	Ergebnisse . . . . .	82
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>85</b>
<b>A</b>	<b>Symmetriebetrachtungen</b>	<b>87</b>
A.1	Spezifischer elektrischer Widerstand . . . . .	89
A.2	Mechanische Spannung und Verzerrung . . . . .	90
A.3	Piezoelektrischer Tensor . . . . .	90
A.4	Piezoresistiver Tensor . . . . .	91
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>93</b>
	<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>100</b>
	<b>Abkürzungen</b>	<b>103</b>
	<b>Abmessungen der Elektrodenkonfigurationen</b>	<b>104</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>105</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

Die Rasterkraftmikroskopie (RKM) ist ein Verfahren, mit dem die Eigenschaften einer Oberfläche mit extrem guter lateraler und vertikaler Auflösung abgebildet werden können. Typischerweise besteht ein RKM aus einem miniaturisierten, einseitig eingespannten Biegebalken, dem sogenannten Cantilever, der an seinem freien Ende eine feine Spitze trägt. Eine auf die Spitze ausgeübte Kraft wird durch Messung der Auslenkung des Cantilevers detektiert, daher der Name Kraftmikroskop. Meist wird die Auslenkung des Cantilevers mit einem Lichtzeigerverfahren gemessen. Durch Miniaturisierung des Cantilevers wird eine extrem hohe Kraftempfindlichkeit und vertikale Auflösung erreicht. Die laterale Auflösung wird durch die räumliche Ausdehnung der Wechselwirkung Probe/Spitze begrenzt, daher wird der Radius der Spitze möglichst klein gewählt. So kann eine atomare Auflösung erzielt werden [6]. Allerdings spielen für die Auflösung auch andere Faktoren eine Rolle, wie die mechanische Resonanzfrequenz des Cantilevers und das Signal-Rausch-Verhältnis (SNR). Letztlich ist es immer das SNR, welches die Meßauflösung, d.h. die kleinste meßbare Größe, limitiert [24, 47].

Der Cantilever und die Spitze werden mit den Methoden der Mikrosystemtechnik hergestellt, um die erforderliche Miniaturisierung zu erzielen. Um eine zweidimensionale Abbildung einer Oberfläche zu erhalten, wird die Probe mit Hilfe von Piezostellern unter dem Cantilever verfahren, daher der Name Rastermikroskop. Durch die reine Kraftmessung erhält man die Topographie der Probe und Informationen über die mechanischen Eigenschaften. Ein weiterer Aspekt, der die RKM so interessant macht, ist die Möglichkeit, die verschiedensten Wechselwirkungen mit der reinen Kraftmessung zu kombinieren. So kann beispielsweise eine Apertur in die Spitze eingebracht werden, mit der die optischen Eigenschaften der Probe simultan zur Topographie gemessen werden. Wenn die Apertur selbst und der Abstand der

Apertur zur Probe klein gegen die Wellenlänge des verwendeten Lichtes sind, wird die optische Auflösung nicht von der Wellenlänge, sondern von der Aperturgröße begrenzt (SNOM = scanning near field optical microscopy) [65]. Auch viele andere Größen können simultan mit entsprechenden Kraftmikroskopen gemessen werden. Beispiele sind Tunnelstrom [17, 66, 67], Temperatur [37], das elektrische Feld [56], die Magnetisierung [49, 68] und andere mehr.

Ein Nachteil der konventionellen RKM ist die Notwendigkeit, die Auslenkung per Lichtzeigerverfahren zu messen. Durch Integration der Kraft- oder Auslenkungsmessung in den Cantilever oder den Halter des Cantilevers werden wesentliche Vorteile erzielt. Zunächst entfällt die aufwendige Justage der Optik, so daß sich der Aufbau und die Messung vereinfachen. Die Integration eröffnet auch die Möglichkeit, die Signalauswertung auf dem Haltechip des Cantilevers zu integrieren, so daß man einen äußerst kompakten Sensor erhält. Dadurch kann der Sensor preisgünstig in hohen Stückzahlen hergestellt werden. Weiterer Vorteil der Integration ist, daß das RKM an Stellen betrieben werden kann, an denen aus verschiedenen Gründen die optische Detektion nicht benutzt werden kann. Das kann z.B. in einer UHV- oder Tieftemperaturumgebung oder auch in einer chemisch aggressiven Umgebung sein. Auch in Situationen, in denen sehr wenig Platz vorhanden ist, kann der integrierte Sensor benutzt werden. Bei Verwendung des integrierten Sensors kann auf einfache Weise der Cantilever über die Probe gerastert werden, während beim Lichtzeigerverfahren üblicherweise die Probe gerastert wird.

Die Integration der Kraftmessung auf dem Cantilever wird im wesentlichen durch zwei Ansätze verfolgt, nämlich durch Nutzung des piezoresistiven und des piezoelektrischen [27] Effektes. Beide Effekte reagieren auf die mechanische Spannung, die bei der Auslenkung des Cantilevers im Material auftritt. Auf die piezoelektrischen Sensoren soll hier nicht weiter eingegangen werden, es sei nur vermerkt, daß sie prinzipiell nicht für statische Messungen geeignet sind und damit nur für dynamische Betriebsmodi des RKM in Frage kommen. Auf Silizium basierende piezoresistive Cantilever wurden schon 1991 realisiert [38, 39, 60, 61]. Obwohl der piezoresistive Effekt in Silizium größer als in fast allen anderen Materialien ist, wird die Auflösung solcher Sensoren oft vom Widerstandsrauschen des Piezoresistors begrenzt und die durch das thermisch/mechanische Rauschen des Cantilevers vorgegebene Auflösung wird nicht erreicht. Ein weiterer Nachteil dieser Piezoresistoren ist, daß sie bei kryogenen Temperaturen nicht eingesetzt werden können, da die Ladungsträger des Siliziums bei sehr tiefen Temperaturen ausfrieren.

In dieser Arbeit werden die piezoresistiven Eigenschaften von dünnen III-V Halbleiterschichten untersucht. Zielsetzung ist der Einsatz als integrierter piezoresistiver

Sensor im Cantilever für die RKM, wobei integrierte piezoresistive Sensoren auch in anderen Bereichen eingesetzt werden [2]. Die Motivation dieser Untersuchung sind folgende Aspekte:

- Bestimmte, aus III-V Halbleitern bestehende Heterostrukturen, die sogenannten HEMT-Strukturen (high electron mobility transistor) weisen prinzipiell auch bei sehr tiefen Temperaturen (bis zum absoluten Nullpunkt) gute elektrische Leitfähigkeit auf [19]. Im Gegensatz dazu frieren die Ladungsträger bei Volumenmaterialien wie Silizium bei tiefen Temperaturen aus und werden so zu Isolatoren. Daher eignen sich HEMT- und ähnliche Strukturen als piezoresistive Sensoren für die RKM bei extrem tiefen Temperaturen [59]. Lichtzeigerverfahren scheiden in dieser Situation in der Regel aus.
- Die Auflösung piezoresistiver Silizium-Sensoren kann im wesentlichen nur durch die Geometrie des Cantilevers verbessert werden. Diese unterliegt aber gerade bei der RKM auch anderen Einschränkungen. So müssen auch Anforderungen bezüglich der Resonanzfrequenz und des thermisch/mechanischen Rauschens beachtet werden. Die Größe des piezoresistiven Effektes dagegen ist als Materialeigenschaft des Siliziums konstant. Obwohl der piezoresistive Effekt in GaAs und anderen III-V Halbleitern wesentlich kleiner als im Silizium ist (Tab. 2.2), treten an dünnen GaAs/AlGaAs-Heterostrukturen sehr große piezoresistive Effekte auf. Sie sind aus den Volumeneigenschaften dieser Schichten nicht zu erklären und werden deshalb in dieser Arbeit als „erhöhte Piezoresistivität“ bezeichnet. Da es sich um epitaktisch hergestellte Strukturen handelt, hat man bei den III-V Schichtstrukturen sehr viele Freiheitsgrade zur Optimierung und/oder Anpassung an die jeweiligen Erfordernisse. Insbesondere kann bei piezoresistiven Sensoren, deren Auflösung durch das Widerstandsrauschen begrenzt ist, durch Verwendung eines Materials mit größerem piezoresistiven Effekt die Auflösung verbessert werden.
- Die III-V Halbleiter werden immer dann verwendet, wenn optische Funktionen erforderlich sind. Insbesondere lichtemittierende Elemente, wie Leuchtdioden und Laserdioden, sind in Silizium nicht zu realisieren. Weiterhin zeigen III-V Halbleiter höhere elektronische Beweglichkeiten und weisen bessere Mikrowelleneigenschaften auf als Silizium. In Situationen, in denen integrierte piezoresistive Sensoren und eine oder mehrere der oben genannten Eigenschaften der III-V Halbleiter kombiniert werden sollen, ist natürlich die Benutzung eines Cantilevers im gleichen Materialsystem sinnvoll. Dieser Aspekt trifft insbesondere für SNOM [20] und die Detektion sehr schneller elektrischer Signale zu [31, 42, 55] zu.

In der vorliegenden Arbeit soll ein physikalisches Modell entwickelt werden, das die erhöhte Piezoresistivität in Schichtstrukturen erklärt, die aus III-V Halbleitern bestehen. Auf der Grundlage dieses Modells soll ein Programm geschaffen werden, mit dessen Hilfe es möglich ist, die Piezoresistivität von beliebigen III-V Schichtstrukturen zu berechnen. Mit diesem Programm soll die erhöhte Piezoresistivität quantitativ berechnet und optimiert werden. Weiterhin soll die erhöhte Piezoresistivität an GaAs- und AlGaAs-Schichtstrukturen experimentell untersucht werden. Dadurch soll die erhöhte Piezoresistivität dieser Materialien demonstriert werden und der Gültigkeitsbereich des zu entwickelnden Modells untermauert werden.

Der Hauptteil der Arbeit ist in fünf Teile strukturiert. In Kap. 2 werden die physikalischen Effekte, die für die weitere Betrachtung notwendig sind, erläutert. Auf diesen Grundlagen aufbauend wird in Kap. 3 ein Modell entwickelt, das die erhöhte Piezoresistivität in III-V Halbleiter-Schichtstrukturen durch die piezoelektrischen Eigenschaften dieser Materialien erklärt. Die gefundenen Effekte werden als PER-Effekte (piezoelektroresistive Effekte) bezeichnet, da sie sich in ihrer empirischen Beschreibung qualitativ von der „normalen Piezoresistivität“ unterscheiden. Die quantitative Berechnung der Widerstandsänderungen durch die PER-Effekte geschieht durch einen Algorithmus, der in Kap. 4 vorgestellt wird. In Kap. 5 werden die Simulationsrechnungen für drei Strukturen dargestellt und erläutert. Kap. 6 stellt den entwickelten Meßaufbau, die verwendete Technologie sowie Messungen an zwei der in Kap. 5 berechneten Strukturen vor. Die Messungen werden mit den Simulationsrechnungen verglichen. Es schließt sich eine Zusammenfassung an (Kap. 7).

# Kapitel 2

## Physikalische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die Elastomechanik, die „normale Piezoresistivität“ die Piezoelektrizität und der elektrische Transport in Halbleitern vorgestellt. Diese Effekte sind wichtig für das Verständnis der piezoresistiven Eigenschaften von III-V Halbleitern und der darauf basierenden Sensoren sowie für das Verständnis der in dieser Arbeit vorgestellten Rechnungen und Messungen. Diese Effekte können aber nicht die „erhöhte Piezoresistivität“, die in III-V Halbleiter-Schichtstrukturen auftritt, beschreiben. Dazu wird in Kap. 3 ein neues Modell entwickelt, das ein qualitativ und quantitativ von der normalen Piezoresistivität abweichendes Verhalten vorhersagt.

Einige Aspekte der Tensorrechnung und der Symmetriebetrachtungen, die zur Beschreibung dieser Effekte wichtig sind, werden im Anhang (A) dargestellt. Dazu gehören insbesondere die Koordinatentransformationen und die Erklärung der verkürzten Schreibweise.

Für die auftretenden Vektor- und Tensorgleichungen wird oft die Koeffizientenschreibweise gewählt. Dabei gilt immer die Einstein'sche Summenkonvention, d.h. über in einem Term doppelt auftretende Indizes ist von 1 bis 3 zu summieren. Die Ordnung des Tensors ist an der Anzahl der Indizes zu erkennen<sup>1</sup>. Da bei den auftretenden vektoriellen und tensoriellen Größen immer Bezug auf ein bestimmtes Koordinatensystem genommen wird, wird in dieser Arbeit einheitlich das sogenannte Kristall- und das Cantilever-Koordinatensystem nach Bild 2.1 a) benutzt. Wenn die Indexschreibweise nicht benutzt wird, sind Vektoren durch einen Pfeil ( $\vec{x}$ ), Tensoren zweiter Stufe durch einen Überstrich ( $\bar{x}$ ), Tensoren dritter Stufe durch Pfeil

---

<sup>1</sup>Das gilt nicht für die verkürzte Schreibweise.

und Überstrich ( $\bar{x}$ ) und Tensoren vierter Stufe durch zwei Überstriche ( $\bar{\bar{x}}$ ) gekennzeichnet.

## 2.1 Elastomechanik

Die Elastomechanik beschreibt die Verteilung der mechanischen Spannung  $\bar{\sigma}$  und der mechanischen Verzerrung  $\bar{\epsilon}$  in einem Körper unter dem Einfluß äußerer und innerer Kräfte im elastischen Bereich. Der elastische Bereich ist dadurch gekennzeichnet, daß keine bleibende Veränderung des Materials auftritt und daß  $\bar{\sigma}$  und  $\bar{\epsilon}$  linear zueinander sind. Dieses Kapitel folgt im wesentlichen [29, 44].

Wird ein Körper mechanisch verzerrt, wird jeder Punkt  $\vec{r}$  gegenüber der Gleichgewichtslage um  $\Delta\vec{r}$  verschoben. Die Verschiebung setzt sich lokal zusammen aus einer Translation, einer Rotation und einer Formänderung, der mechanischen Verzerrung  $\bar{\epsilon}$ . Die Definition der Verzerrung ist:

$$\epsilon_{ij} = \epsilon_{ji} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \Delta r_i}{\partial r_j} + \frac{\partial \Delta r_j}{\partial r_i} \right) \quad (2.1)$$

Die Verzerrung ist also ein symmetrischer Tensor zweiter Stufe mit sechs unabhängigen Koeffizienten. Die Koeffizienten auf der Diagonalen beschreiben relative Längenzu- (bei positivem Vorzeichen) bzw. -abnahmen (bei negativem Vorzeichen). Die Koeffizienten außerhalb der Diagonalen beschreiben Scherungen, sie können als der halbe Winkel (im Bogenmaß) interpretiert werden, um welchen sich der ursprünglich rechte Winkel zwischen den entsprechenden Koordinatenachsen ändert.

In einem Material treten i.A. innere Kräfte auf. Denkt man sich einen Körper im Inneren an einer Stelle aufgeschnitten oder betrachtet eine Oberfläche, so wird der Körper durch an diesen Flächen angreifende Kräfte im Gleichgewicht gehalten. Die mechanische Spannung  $\bar{\sigma}$  ist definiert durch:

$$d\vec{F} = \bar{\sigma} \vec{n} dA \quad \text{bzw.} \quad dF_i = \sigma_{ij} n_j dA \quad (2.2)$$

Dabei ist  $d\vec{F}$  die differentielle Kraft, die an der differentiellen Fläche  $dA$  angreift, deren Normalenvektor  $\vec{n}$  vom Körper nach außen zeigt. Die Diagonalelemente von  $\bar{\sigma}$  bedeuten Zugspannungen (bei positivem Vorzeichen) bzw. Druckspannungen (bei negativem Vorzeichen), während die Komponenten außerhalb der Diagonalen Scherspannungen darstellen. Aus der Forderung, daß die Summe der angreifenden Drehmomente an einem Volumenstück Null sein muß, folgt  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ .  $\bar{\sigma}$  ist also wie  $\bar{\epsilon}$  ein symmetrischer Tensor zweiter Stufe mit sechs unabhängigen Koeffizienten. Es

	$s_{11}$ [ $10^{-11}\text{Pa}^{-1}$ ]	$s_{12}$ [ $10^{-11}\text{Pa}^{-1}$ ]	$s_{44}$ [ $10^{-11}\text{Pa}^{-1}$ ]	$E_{011}$ [GPa]
$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	$1.17 + 0.03x$	$-0.37 - 0.02x$	$1.68 + 0.02x$	$80.6 - 0.9x$
Si	0.709	-0.273	1.26	118

Tabelle 2.1: Koeffizienten des elastischen Tensors  $\bar{s}$  und E-Modul in (011)-Richtung für  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  und Si [1, 36].

kann für symmetrische Tensoren zweiter Stufe immer ein Koordinatensystem gefunden werden, in dem alle Koeffizienten außerhalb der Diagonalen Null sind, daher sind die Begriffe „Scherspannung“ und „Zug“- bzw. „Druckspannung“ vom Koordinatensystem abhängig. Bildet man die Summe der angreifenden Kräfte an einem Volumenstück, erhält man:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial r_j} = \frac{dF_i}{dV} \quad (2.3)$$

Auf der rechten Seite dieser Gleichungen stehen Volumenkräfte (z.B. Schwerkraft oder Beschleunigungskraft), die im Rahmen dieser Arbeit immer vernachlässigt werden können.

Im Rahmen der Elastomechanik ist die mechanische Verzerrung eine lineare Funktion der mechanischen Spannung (Hook'sches Gesetz). Der Zusammenhang wird durch den elastischen Tensor  $\bar{s}$  hergestellt. Da  $\bar{\epsilon}$  und  $\bar{\sigma}$  Tensoren zweiter Stufe sind, ist  $\bar{s}$  ein Tensor vierter Stufe:

$$\bar{\epsilon} = \bar{s}\bar{\sigma} \quad \text{bzw.} \quad \epsilon_{ij} = s_{ijkl}\sigma_{kl} \quad (2.4)$$

GaAs und die meisten anderen III-V Halbleiter kristallisieren im Zinkblendegitter, und Si kristallisiert im Diamant-Gitter. In diesen beiden kubischen Gittertypen hat  $\bar{s}$  drei unabhängige Koeffizienten (Kap. A.4). Diese werden in verkürzter Schreibweise mit  $s_{11}$ ,  $s_{12}$  und  $s_{44}$  bezeichnet. Ihre Werte für AlGaAs und Si sind in Tab. 2.1 angegeben. Im Kristallsystem, d.h. dem Koordinatensystem, das aus (100), (010) und (001)-Achse gebildet wird (Bild 2.1 a), gelten folgende Zusammenhänge:

$$\begin{aligned} \epsilon_{11} &= s_{11}\sigma_{11} + s_{12}(\sigma_{22} + \sigma_{33}) \\ \epsilon_{22} &= s_{11}\sigma_{22} + s_{12}(\sigma_{11} + \sigma_{33}) \\ \epsilon_{33} &= s_{11}\sigma_{33} + s_{12}(\sigma_{11} + \sigma_{22}) \end{aligned} \quad (2.5)$$

und

$$\epsilon_{12} = s_{44}\sigma_{12} \quad \epsilon_{23} = s_{44}\sigma_{23} \quad \epsilon_{13} = s_{44}\sigma_{13} \quad (2.6)$$

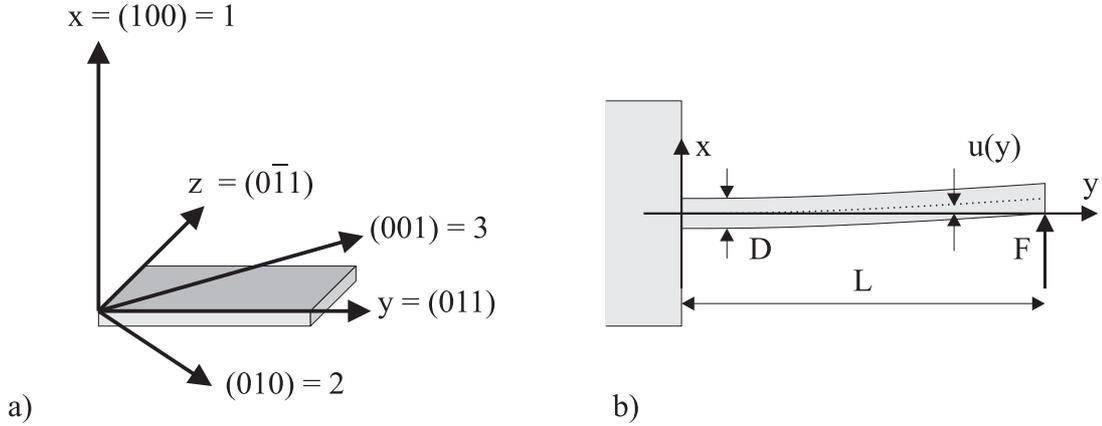


Abbildung 2.1: a) Orientierung des Kristall- und des Cantileversystems. Im Kristallsystem werden die Achsen mit 1, 2 und 3 bezeichnet, im Cantileversystem mit  $x$ ,  $y$  und  $z$ . b) Bezeichnungen am Cantilever.

Oft werden anstelle von  $\bar{s}$  auch die elastischen Konstanten  $\bar{c} = (\bar{s})^{-1}$  oder Schubmodul  $E$ , Schermodul  $G$  und Poisson-Zahl  $\mu$  verwendet. Im Kristallsystem ist der Zusammenhang  $1/E = s_{11}$ ,  $\mu/E = -s_{12}$  und  $1/G = 2s_{44}$ . Im allgemeinen sind  $E$ ,  $G$  und  $\mu$  richtungsabhängig, was insbesondere in kristallinen Materialien zu beachten ist. In isotropen Materialien hat  $s$  nur zwei unabhängige Koeffizienten, dort ist (richtungsunabhängig)  $s_{44} = s_{11} - s_{12}$  bzw.  $E = 2G(1 + \mu)$  [14].

Bei Transformation des Koordinatensystems ist zu beachten, daß  $\bar{s}$  ein Tensor 4. Stufe ist. In dieser Arbeit wird neben dem Kristallsystem insbesondere das sogenannte Cantileversystem benutzt, das sich aus dem Kristallsystem durch Drehung um  $45^\circ$  um die  $(100)$ -Achse ergibt, Bild 2.1 a). Im Cantileversystem werden die Achsen und Indizes mit  $x$ ,  $y$  und  $z$  bezeichnet, im Kristallsystem dagegen mit 1, 2 und 3. Das Cantileversystem ist deswegen so interessant, weil bei Cantilevern mit der in Bild 2.1 gezeigten Orientierung der piezoresistive Effekt besonders groß ist und weil derartige Cantilever mit naßchemischen Methoden einfach zu realisieren sind. Die Koeffizienten  $s_{11}$ ,  $s_{12}$  und  $s_{44}$  ändern sich bei Transformation des Koordinatensystems nicht. Bei uniaxialer mechanischer Spannung  $\sigma$  in  $y$ -Richtung ergeben sich die folgenden Verzerrungen und das E-Modul in  $y$ -Richtung (Gl. A.22):

$$\begin{aligned}
 \epsilon_{xx} &= s_{12}\sigma \\
 \epsilon_{yy} &= \frac{1}{2}(s_{11} + s_{12} + s_{44})\sigma \\
 \epsilon_{zz} &= \frac{1}{2}(s_{11} + s_{12} - s_{44})\sigma
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

$$\begin{aligned}\epsilon_{xy} &= \epsilon_{xz} = \epsilon_{yz} = 0 \\ E_{011} &= \left(\frac{1}{2}(s_{11} + s_{12} + s_{44})\right)^{-1}\end{aligned}\quad (2.8)$$

Dabei bedeutet uniaxiale Spannung  $\sigma$  in  $y$ -Richtung, daß  $\sigma := \sigma_{yy}$  ungleich Null ist und daß alle anderen Komponenten von  $\bar{\sigma}$  gleich Null sind<sup>2</sup>. Man beachte, daß uniaxiale Spannung in  $y$ -Richtung im Cantileversystem im Kristallsystem Scherkomponenten aufweist. Weiterhin bedeutet uniaxiale Spannung nicht, daß die Verzerrung ebenfalls uniaxial ist (Gl. 2.7). Die Werte für  $E_{011}$  sind in Tab. 2.1 aufgeführt.

Aus den Gleichungen 2.1, 2.3 und 2.4 kann prinzipiell bei gegebenen Randbedingungen die Verteilung der mechanischen Spannung und Verzerrung in einem Körper berechnet werden. Im allgemeinen wird eine Lösung numerisch, z.B. durch Finite-Elemente-Methoden berechnet. In vielen einfachen Fällen gibt es analytische Lösungen, wobei meist gewisse Näherungen gemacht werden. Im folgenden wird solch ein Ansatz für den Cantilever (einseitig eingespannter, dünner Biegebalken) dargestellt.

### 2.1.1 Mechanik des Cantilevers

Im folgenden soll die mechanische Spannung in einem dünnen Cantilever berechnet werden. Das Koordinatensystem wird so gelegt, daß sich der Cantilever der Länge  $L$ , der Breite  $B$  und der Dicke  $D$  von  $y = 0$  bis  $y = L$ , von  $z = 0$  bis  $z = +B$  und von  $x = -D/2$  bis  $x = +D/2$  erstreckt, siehe Bild 2.1 b). An der Spitze des Cantilevers bei  $y = L$  wirke eine Kraft  $F$  in  $x$ -Richtung. Wenn der Cantilever dünn ist ( $D \ll L$ ), kann man bei  $x = 0$  eine neutrale Faser annehmen, in der gilt  $\sigma_{yy} = 0$ . Weiterhin kann man die Verschiebung jedes Punktes des Cantilevers und damit die Verzerrung aus der Annahme berechnen, daß der Cantilever lokal als Kreissegment mit einem gewissen Krümmungsradius beschrieben werden kann.  $u$  sei die Auslenkung des Cantilevers aus der Ruhelage in  $x$ -Richtung, dann ist der Krümmungsradius  $(\partial^2 u / \partial y^2)^{-1}$ . Daraus folgt:

$$\epsilon_{yy}(x, y, t) = -x \frac{\partial^2 u(y, t)}{\partial y^2} \quad \Rightarrow \quad \sigma_{yy}(x, y, t) = -E x \frac{\partial^2 u(y, t)}{\partial y^2} \quad (2.9)$$

Dabei ist  $u$  im allgemeinen eine Funktion von  $y$  und von der Zeit  $t$ . Hier soll nur das statische Verhalten betrachtet werden, daher entfällt die Zeitabhängigkeit. Für  $E$  ist im Cantileversystem  $E_{011}$  einzusetzen (Gl. 2.8 und Tab. 2.1).  $\sigma_{xx}$  und  $\sigma_{zz}$  sind Null, da in  $x$ - und in  $z$ -Richtung keine Kräfte wirken. Auf die Oberflächen

---

<sup>2</sup>Wenn  $\bar{\sigma}$  durch Angabe nur eines Koeffizienten  $\sigma$  ausreichend beschrieben ist, wird  $\sigma$  auch als wirksame mechanische Spannung bezeichnet.

des Cantilevers wirken ebenfalls keine Kräfte (außer an der Spitze des Cantilevers), daher verschwinden die Scherspannungen an der Oberfläche. Zusammen mit Gl. 2.3 folgt daraus:

$$\sigma_{xy}(x, y) = \frac{1}{2}E \left[ -x^2 + \frac{D^2}{4} \right] \frac{\partial^3 u(y)}{\partial y^3} \quad (2.10)$$

Die am Ende des Cantilevers einwirkende Kraft muß in jedem Querschnitt durch die mechanische Spannung kompensiert werden, als Momentengleichung geschrieben lautet diese Forderung:

$$\begin{aligned} M(y) &= B \int_{-\frac{D}{2}}^{+\frac{D}{2}} \sigma_{yy}(x, y) x dx = -BE \frac{\partial^2 u(y)}{\partial y^2} \int_{-\frac{D}{2}}^{+\frac{D}{2}} x^2 dx = \\ &= -\frac{1}{12} BD^3 E \frac{\partial^2 u(y)}{\partial y^2} = F(L - y) \end{aligned} \quad (2.11)$$

Zur eindeutigen Lösung der Differentialgleichung 2.11 sind die Randbedingungen vorzugeben:

$$u(0) = 0 \quad \frac{\partial u}{\partial y}(0) = 0 \quad (2.12)$$

Die Differentialgleichung hat dann die Lösung:

$$\begin{aligned} u(y) &= \frac{12F}{BD^3 E} \left[ \frac{1}{2}Ly^2 - \frac{1}{6}y^3 \right] & u_{max} = u(L) &= \frac{4FL^3}{BD^3 E} \\ \sigma_{yy}(x, y) &= -\frac{12F}{BD^3} [L - y] x & \sigma_{yy,max} = \sigma_{yy}(0, \pm \frac{1}{2}D) &= \mp \frac{6FL}{BD^2} \\ \sigma_{xy}(y, z) &= \frac{6F}{BD^3} \left[ -x^2 + \frac{1}{4}D^2 \right] & \sigma_{xy,max} = \sigma_{xy}(0, y) &= \frac{3F}{2BD} \end{aligned} \quad (2.13)$$

## 2.2 Piezoresistivität

In piezoresistiven Materialien erzeugt eine mechanische Spannung  $\bar{\sigma}$  eine Änderung  $\Delta\bar{r}$  des spezifischen elektrischen Widerstandes  $\bar{r}$ . Der Zusammenhang wird durch den piezoresistiven Tensor  $\bar{\pi}$  beschrieben:

$$\begin{aligned} \vec{E} &= (r_0 + \Delta\bar{r})\vec{j} \quad \text{bzw.} \quad E_i = (r_0 + \Delta r_{ij})j_j \\ \bar{D} &:= \frac{\Delta\bar{r}}{r_0} = \bar{\pi}\bar{\sigma} \quad \text{bzw.} \quad D_{ij} = \pi_{ijkl}\sigma_{kl} \end{aligned} \quad (2.14)$$

	$\pi_{11}$ $10^{-11}\text{Pa}^{-1}$	$\pi_{12}$ $10^{-11}\text{Pa}^{-1}$	$\pi_{44}$ $10^{-11}\text{Pa}^{-1}$	Lit.
<i>n</i> -Si	-102.2	54.4	-13.6	[54]
<i>p</i> -Si	6.6	-1.1	+138.1	[54]
<i>n</i> -GaAs	-3.2	-5.4	-2.5	[69]
<i>p</i> -GaAs	-12	-0.6	+44	[57]

Tabelle 2.2: Piezoresistive Koeffizienten für Si und GaAs bei Raumtemperatur.

$\vec{E}$  ist das elektrische Feld,  $\vec{j}$  die elektrische Stromdichte,  $r_0$  der spezifische elektrische Widerstand ohne mechanische Spannung, und  $\bar{D}$  ist die relative Änderung des spezifischen Widerstandes.  $r_0$  ist in den hier betrachteten Materialien isotrop und damit ein Skalar (Kap. A.1).  $\bar{r}$  und  $\bar{D}$  dagegen können anisotrop sein und sind damit Tensoren zweiter Stufe. Daher ist  $\bar{\pi}$  ebenso wie  $\bar{s}$  ein Tensor vierter Stufe und aus den gleichen Symmetrieüberlegungen wie bei  $\bar{s}$  folgt, daß  $\bar{\pi}$  im Zinkblende-Gitter und im Diamant-Gitter drei unabhängige Koeffizienten hat, die in verkürzter Schreibweise mit  $\pi_{11}$ ,  $\pi_{12}$  und  $\pi_{44}$  bezeichnet werden (Kap. A.4). Im Kristallsystem ist (vgl. Gl. 2.5 und 2.6):

$$\begin{aligned}
D_{11} &= \pi_{11}\sigma_{11} + \pi_{12}(\sigma_{22} + \sigma_{33}) \\
D_{22} &= \pi_{11}\sigma_{22} + \pi_{12}(\sigma_{11} + \sigma_{33}) \\
D_{33} &= \pi_{11}\sigma_{33} + \pi_{12}(\sigma_{11} + \sigma_{22})
\end{aligned}
\tag{2.15}$$

und

$$D_{12} = \pi_{44}\sigma_{12} \quad D_{23} = \pi_{44}\sigma_{23} \quad D_{13} = \pi_{44}\sigma_{13}
\tag{2.16}$$

Die Werte für  $\pi_{11}$ ,  $\pi_{12}$  und  $\pi_{44}$  sind in Tab. 2.2 für Si und GaAs angegeben. Deren Größe ist abhängig von der Dotierung und der Temperatur, so daß die angegebenen Zahlen nur Richtwerte sind. Man erkennt, daß die normale Piezoresistivität in GaAs, insbesondere im *n*-GaAs, wesentlich kleiner als diejenige im Si ist.

Die relative Änderung des spezifischen Widerstandes auf dem Cantilever erhält man durch Transformation (Gl. A.22) des piezoresistiven Tensors in das Cantileversystem. Bei uniaxialer mechanischer Spannung  $\sigma$  in *y*-Richtung („Konfiguration A“, vgl. Gl. 2.7 und Bild 2.2), erhält man [15]):

$$\begin{aligned}
D_{yy} &= \frac{1}{2}(\pi_{11} + \pi_{12} + \pi_{44})\sigma =: \pi_L\sigma \\
D_{zz} &= \frac{1}{2}(\pi_{11} + \pi_{12} - \pi_{44})\sigma =: \pi_T\sigma \\
D_{yz} &= 0
\end{aligned}
\tag{2.17}$$

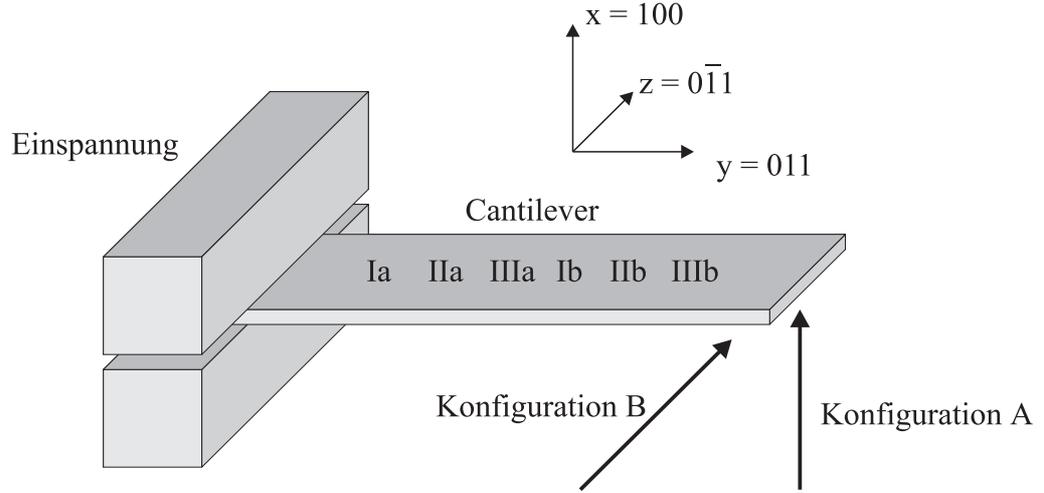


Abbildung 2.2: In der Konfiguration A wird die Probe mit einer Kraft in  $x$ -Richtung beaufschlagt, in Konfiguration B mit einer Kraft in  $z$ -Richtung. Auf der Oberfläche des Cantilevers befinden sich die piezoresistiven Widerstände Ia bis IIIb.

Bei uniaxialer Spannung in  $z$ -Richtung behält Gl. 2.17 ihre Form, nur daß der Index  $yy$  gegen den Index  $zz$  getauscht wird, d.h. longitudinale und transversale Piezoresistivität ( $\pi_L$  und  $\pi_T$ ) bleiben gleich. Nimmt man an, daß nur die Spannungskomponente  $\sigma_{yz}$  ungleich Null ist („Konfiguration B“, vgl. Bild 2.2), erhält man:

$$D_{yy} = 0 \quad D_{zz} = 0 \quad D_{yz} = \frac{1}{2}(\pi_{11} - \pi_{12})\sigma_{yz} \quad (2.18)$$

Der Formalismus der Transformation ist der gleiche wie beim elastischen Tensor.

Die verhältnismäßig großen Werte im  $n$ -Si für  $\pi_{11}$  und  $\pi_{12}$  können im many-valley-Modell relativ einfach quantitativ erklärt werden [22, 23]. Das many-valley-Modell für Si besagt, daß es sechs äquivalente Minima des Leitungsbandes gibt. Die Minima liegen im  $\vec{k}$ -Raum im Abstand  $0.85 \cdot 2\pi/a_0$  vom Nullpunkt auf den Koordinatenachsen des Kristallsystems. Dabei ist  $a_0$  die Gitterkonstante. Die effektive Masse der Elektronen in den Leitungsbandtälern ist stark richtungsabhängig. In Richtung der Koordinatenachsen ist sie  $m_{\parallel}^* = 0.85m_0$  und senkrecht dazu  $m_{\perp}^* = 0.19m_0$ . Die effektiven Massen werden in Einheiten der freien Elektronenmasse gemessen. Durch mechanische Spannung verändern sich die Atomabstände und damit die Bandstruktur. Bei uniaxialer Zugspannung in Richtung einer Kristallachse ergibt sich eine energetische Anhebung der Täler entlang dieser Achse und eine Absenkung der Täler senkrecht zu dieser Achse. Es erfolgt ein Elektronentransfer in die energetisch tiefer liegenden Täler senkrecht zur Spannung. Die kleine effektive Masse dieser Täler in

Richtung der Spannung führt zu einer Verkleinerung des spezifischen Widerstandes in Richtung der Spannung und damit zu dem negativen Koeffizienten  $\pi_{11}$ . Der spezifische Widerstand senkrecht zur Spannung erhöht sich, da die stärker besetzten Täler in dieser Richtung eine hohe effektive Masse besitzen,  $\pi_{12}$  ist also positiv. Die Werte aus Tab. 2.2 werden durch diese Erklärung auch quantitativ richtig vorhergesagt.

Der Scherkoeffizient  $\pi_{44}$  kann durch den Elektronentransfer-Mechanismus nicht erklärt werden, da eine Scherspannung keine energetische Verschiebung der Leitungsbandtöler bewirkt. In diesem Fall werden die Massen der Leitungsbandtöler verändert [30].

Die Piezoresistivität von *p*-Si und *p*-GaAs wird verursacht durch die Aufhebung der Entartung der verschiedenen Valenzbänder am  $\Gamma$ -Punkt. Die unterschiedliche effektive Masse der beiden beteiligten Bänder (schwere und leichte Löcher) bewirkt zusammen mit der Aufhebung der Entartung die Widerstandsänderung. Für piezoresistive Si-Sensoren wird meist *p*-Si benutzt, weil hier auf einfache Weise Wheatstone-Brücken zur Nullpunktkompensation benutzt werden können [38].

GaAs und die meisten anderen III-V Halbleiter sind direkte Halbleiter, bei denen das Leitungsband nur ein Minimum bei  $\vec{k} = 0$  aufweist. Da in diesen Halbleitern bei *n*-Dotierung der oben beschriebene Mechanismus des Elektronentransfers nicht auftreten kann, ist die Piezoresistivität in *n*-GaAs relativ klein. Das gilt allerdings nicht für GaAs-Schichtstrukturen, die in dieser Arbeit untersucht werden. In diesen verursacht ein völlig neuer Mechanismus die Piezoresistivität (siehe Kap. 3).

In dieser Arbeit sollen dünne Schichten untersucht werden, bei denen sich der Ladungstransport nur innerhalb dieser Schichten (in der *y-z*-Ebene), nicht aber senkrecht dazu (in *x*-Richtung) abspielt. Daher ist es sinnvoll, den oben dargestellten Formalismus zur dreidimensionalen Beschreibung der Piezoresistivität auf eine zweidimensionale Beschreibung einzuschränken. Dazu werden die *x*-abhängigen Größen über *x* integriert. So entsteht z.B. aus der Stromdichte  $\vec{j}$  die Flächenstromdichte  $\vec{j}_S$ :

$$\vec{j}_S = \int \vec{j} dx \quad (2.19)$$

Die Flächenstromdichte hat die zwei Komponenten  $j_y$  und  $j_z$  und (abweichend von der Stromdichte) die Einheit [A/cm]. An den Gl. 2.14, 2.17 und 2.18 ändert sich nichts, außer daß alle beteiligten Größen zweidimensional sind. Insbesondere wird aus dem spezifischen Widerstand  $\bar{r}$  der Schichtwiderstand  $\bar{r}_S$ .

## 2.3 Piezoelektrizität

In piezoelektrischen Materialien erzeugt eine mechanische Spannung  $\bar{\sigma}$  eine elektrische Polarisation  $\vec{P}$ . Der Zusammenhang wird durch den piezoelektrischen Tensor  $\vec{d}$  beschrieben:

$$\vec{P} = \vec{d}\bar{\sigma} \quad \text{bzw.} \quad P_i = d_{ijk}\sigma_{jk} \quad (2.20)$$

Da die physikalische Ursache der Piezoelektrizität die mechanische Verzerrung  $\bar{\epsilon}$  des Festkörpers ist, daher schreibt man oft auch

$$\vec{P} = \vec{e}\bar{\epsilon} \quad \text{mit} \quad d_{ilm} = e_{ijk} \cdot s_{jklm} \quad (2.21)$$

Dabei wird  $\vec{e}$  als piezoelektrischer Modul bezeichnet. In dieser Arbeit wird aber der piezoelektrische Tensor  $\vec{d}$  verwendet, weil die mechanische Spannung gegenüber der mechanischen Auslenkung experimentell leichter zugänglich ist und weil bei den Anwendungen in der Regel an Kraftmessung und nicht an Auslenkungsmessung gedacht ist.

Bedingung für das Auftreten von Piezoelektrizität ist die Existenz polarer Richtungen bzw. das Fehlen einer Inversionssymmetrie. Das läßt sich anschaulich in einem eindimensionalen Beispiel verstehen: Anhand einer uniaxialen Zugspannung  $\sigma$  z.B. in  $y$ -Richtung läßt sich die  $+y$ -Richtung nicht von der  $-y$ -Richtung unterscheiden. Wenn also die Zugspannung eine gerichtete Größe wie die elektrische Polarisation erzeugt, dann muß anhand des Materials die  $+y$  von der  $-y$ -Richtung unterschieden werden können, was genau der Definition einer polaren Richtung entspricht. Diese Voraussetzung ist im Zinkblende-Gitter im Gegensatz zum Diamant-Gitter erfüllt. Daher sind GaAs und andere III-V Halbleiter im Gegensatz zu Si piezoelektrisch. Aus Symmetrieüberlegungen folgt ferner, daß  $\vec{d}$  im Zinkblende-Gitter nur einen unabhängigen Koeffizienten besitzt (Kap. A.3). Er wird in verkürzter Schreibweise mit  $d_{14}$  bezeichnet. Im Kristallsystem ist:

$$P_1 = d_{14}\sigma_{23} \quad P_2 = d_{14}\sigma_{13} \quad \text{und} \quad P_3 = d_{14}\sigma_{12} \quad (2.22)$$

In  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  ist [1]:

$$d_{14} = (-2.69 - 1.13x) \cdot 10^{-12} \frac{\text{As}}{\text{N}} \quad (2.23)$$

Daraus ergibt sich  $e_{14} = d_{14}/s_{44} = -0.161 - 0.065x \text{ As/m}^2$ . Dieser Wert liegt in etwa in der gleichen Größenordnung wie die Werte im bekanntesten piezoelektrischen Material, dem kristallinen Quarz, dort hat das piezoelektrische Modul zwei

unabhängige Koeffizienten, die in verkürzter Schreibweise lauten:  $e_{11} = 0.17 \text{ As/m}^2$  und  $e_{14} = 0.04 \text{ As/m}^2$  [21].

Durch Transformation (Gl. A.16) erhält man den Zusammenhang von  $\vec{P}$  und  $\vec{\sigma}$  im Cantilversystem, er lautet:

$$P_x = \frac{1}{2}d_{14}(\sigma_{yy} - \sigma_{zz}) \quad P_y = d_{14}\sigma_{xy} \quad P_z = -d_{14}\sigma_{xz} \quad (2.24)$$

Insbesondere führt die Komponente  $\sigma_{yy}$  der mechanischen Spannung zu einer Polarisation in  $x$ -Richtung, welche sich entscheidend auf den Bandverlauf in der Probe auswirkt (siehe Kap. 3). Weiterhin sieht man, daß die Komponente  $\sigma_{zz}$  der mechanischen Spannung eine Polarisation mit entgegengesetztem Vorzeichen erzeugt.

### 2.3.1 Physikalische Ursache der Piezoelektrizität

Die Piezoelektrizität im Zinkblende-Gitter läßt sich geometrisch erklären. Dazu betrachte man ein Atom  $B$  (z.B. Ga) des Gitters (Bild 2.3). Es ist von vier gleichartigen Atomen  $A$  (z.B. As) umgeben. Das Atom  $B$  trage eine positive Ladung  $+q$ , die Atome  $A$  tragen jeweils eine negative Ladung  $-q$ . Die Wahl des Koordinatensystems stimmt mit derjenigen in Bild 2.1 überein. Die Atome  $A_1$ ,  $A_2$  und  $B$  liegen in einer  $[0\bar{1}1]$ -Ebene. In dieser Ebene liegt der Winkel  $\varphi_1$  (Bild 2.4, obere Zeile), dessen Größe ohne mechanische Spannung  $\arctan \sqrt{1/2} = 35.3^\circ$  beträgt. Die Blickrichtung in der oberen Zeile von Bild 2.4 ist die  $(0\bar{1}1)$ -Richtung. Die Bindungslänge, d.h. der Abstand zwischen den Atomen  $A$  und  $B$ , ist  $l_0 = \frac{1}{4}\sqrt{3}a_0$ , wobei  $a_0$  die Gitterkonstante ist. Die Atome  $A_3$ ,  $A_4$  und  $B$  liegen in einer  $[011]$ -Ebene, die senkrecht zu der vorher beschriebenen Ebene liegt. In dieser Ebene liegt der Winkel  $\varphi_2$  (Bild 2.4, untere Zeile), dessen Größe ohne mechanische Spannung ebenfalls  $\arctan \sqrt{1/2} = 35.3^\circ$  beträgt. In der unteren Zeile von Bild 2.4 ist die Blickrichtung die  $(011)$ -Richtung, d.h. senkrecht zur Blickrichtung in der oberen Zeile. In der linken Spalte sind die Verhältnisse ohne mechanische Spannung dargestellt, das resultierende Dipolmoment ist Null. In der rechten Spalte sind die Atome unter dem Einfluß einer uniaxialer mechanischer Spannung  $\sigma$  in  $y$ -Richtung dargestellt. Dadurch verändern sich die Bindungswinkel und -längen und es entsteht ein resultierendes Dipolmoment in negative  $x$ -Richtung. Dieser Sachverhalt soll im folgenden genauer dargestellt und quantifiziert werden.

Die makroskopische Verzerrung  $\bar{\epsilon}$  kann durch mikroskopische Änderungen der Bindungswinkel und der Bindungslängen gegenüber dem Gleichgewichtszustand erklärt werden. Durch die mechanische Spannung wird der Winkel  $\varphi_1$  um  $\Delta\varphi_1$  verringert, der Winkel  $\varphi_2$  wird um  $\Delta\varphi_2$  erhöht, und die Bindungslänge zwischen  $B$  und  $A_1$

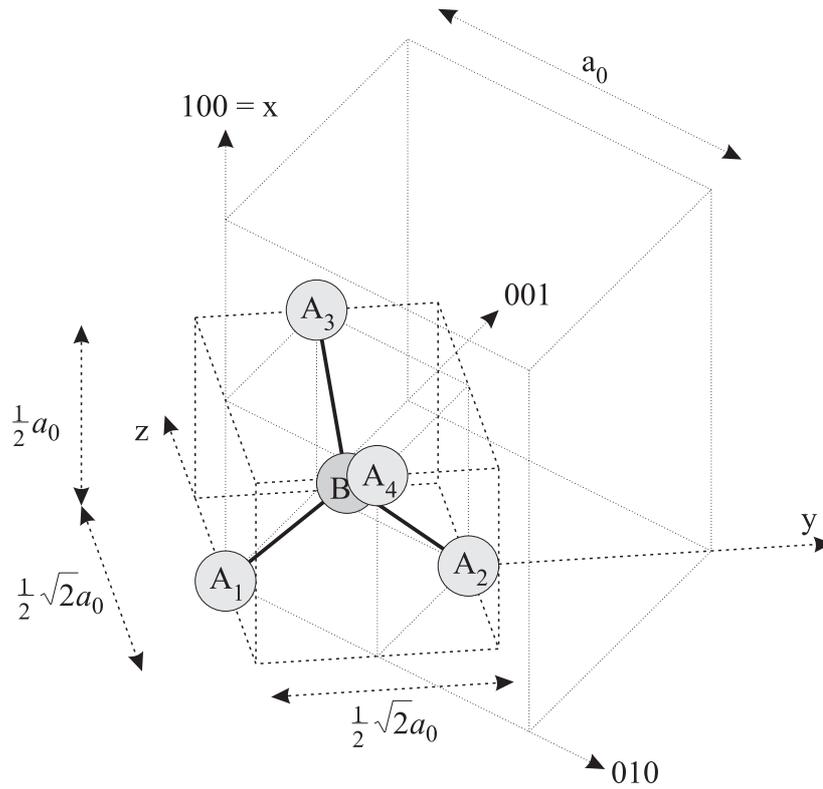


Abbildung 2.3: Lage der Atome im Zinkblende-Gitter. Der große Würfel (gepunktete Linien) ist die üblicherweise benutzte, kubische Elementarzelle des Zinkblende-Gitters und hat die Kantenlänge  $a_0$ . Die gestrichelten Linien stellen eine quaderförmige, primitive (d.h. kleinstmögliche [26]) Elementarzelle des Gitters dar. Dieser Quader ist in Bild 2.4 als Ansicht aus verschiedenen Blickrichtungen dargestellt.

sowie zwischen  $B$  und  $A_2$  wird um  $\Delta l$  verlängert. Die Bindungslänge zwischen  $B$  und  $A_3$  sowie zwischen  $B$  und  $A_4$  wird als konstant angenommen, da diese Bindungen senkrecht zur Richtung der mechanischen Spannung liegen.

Die Verzerrung  $\epsilon_{xx}$  ist die relative Längenänderung durch den Einfluß der mechanischen Spannung gegenüber dem Fall ohne mechanische Spannung und berechnet sich mit Hilfe von Bild 2.4:

$$\begin{aligned} \epsilon_{xx} &= \frac{l_0 \sin(\varphi_2 + \Delta\varphi_2) + (l_0 + \Delta l) \sin(\varphi_1 - \Delta\varphi_1)}{l_0 \sin \varphi_2 + l_0 \sin \varphi_1} - 1 \\ &= \frac{l_0 \sin \varphi_0 + \Delta\varphi_2 l_0 \cos \varphi_0 + l_0 \sin \varphi_0 - \Delta\varphi_1 l_0 \cos \varphi_0 + \Delta l \sin \varphi_0}{2l_0 \sin \varphi_0} - 1 \end{aligned}$$

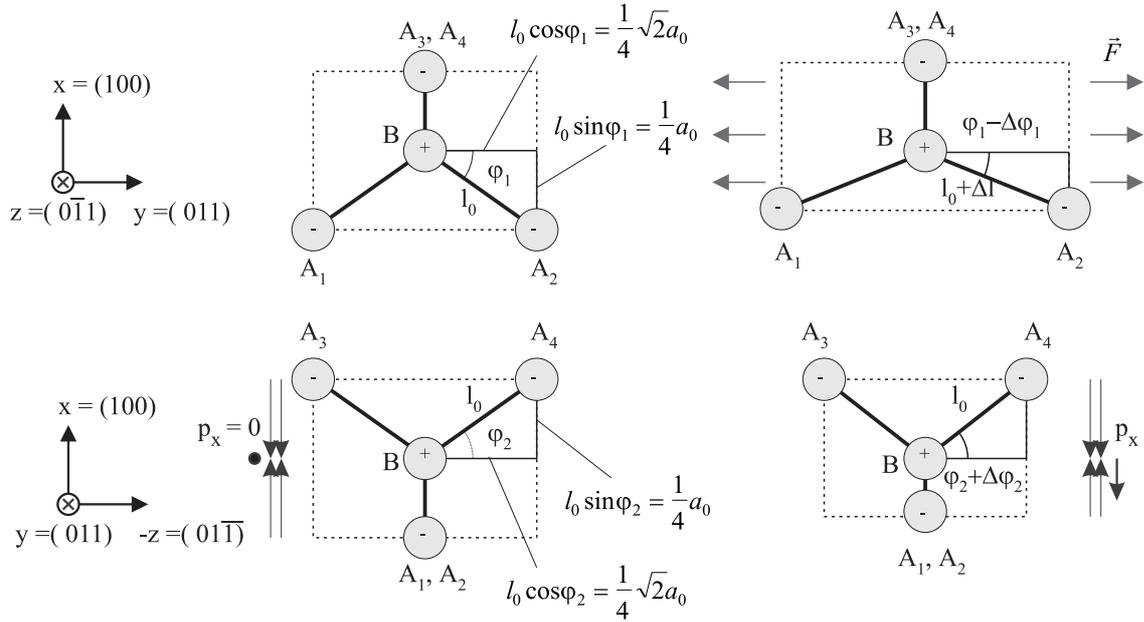


Abbildung 2.4: Geometrisches Modell der Piezoelektrizität im Zinkblende-Gitter. In der oberen Zeile geht die Blickrichtung in die  $(0\bar{1}1)$ -Richtung, in der unteren Zeile sind die gleichen vier Atome mit Blickrichtung in die  $(011)$ -Richtung dargestellt. Die linke Spalte stellt die Atome ohne mechanische Spannung dar, die rechte Spalte mit uniaxialer Spannung in  $(011)$ -Richtung. Durch die mechanische Spannung verändern sich die Bindungswinkel und Längen, so daß ein Dipolmoment  $p_x$  in  $(\bar{1}00)$ -Richtung entsteht.

$$= \frac{1}{2}\sqrt{2}(-\Delta\varphi_1 + \Delta\varphi_2) + \frac{1}{2}\frac{\Delta l}{l_0} \quad (2.25)$$

Dabei erhält man die zweite aus der ersten Zeile durch Entwicklung nach kleinen Größen bis zur ersten Ordnung und der Identität  $\varphi_1 = \varphi_2 = \varphi_0$ . Die dritte Zeile erhält man aus der zweiten durch Zusammenfassen von Termen und durch Einsetzen von  $\varphi_0 = \arctan \sqrt{1/2}$ . Analog berechnet man:

$$\epsilon_{yy} = \frac{1}{2}\sqrt{2}\Delta\varphi_1 + \frac{\Delta l}{l_0} \quad (2.26)$$

$$\epsilon_{zz} = -\frac{1}{2}\sqrt{2}\Delta\varphi_2 \quad (2.27)$$

Die Scherkomponenten  $\epsilon_{xy}$ ,  $\epsilon_{xz}$  und  $\epsilon_{yz}$  sind Null, weil keine Scherspannungen wirken (Gl. 2.7). Durch Auflösung der Gl. 2.25 bis 2.27 nach  $\Delta\varphi_1$ ,  $\Delta\varphi_2$  und  $\Delta l/l$  erhält man:

$$\Delta\varphi_1 = \frac{1}{3}\sqrt{2}(-2\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} - 2\epsilon_{zz})$$

$$\begin{aligned}\Delta\varphi_2 &= -\sqrt{2}\epsilon_{zz} \\ \frac{\Delta l}{l_0} &= \frac{2}{3}(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz})\end{aligned}\quad (2.28)$$

Setzt man als Zahlenbeispiel  $\sigma = 1 \text{ GPa}$  und nimmt als Material GaAs an, ergibt sich  $\bar{\epsilon}$  aus Gl. 2.7 und Tab. 2.1 zu  $\epsilon_{xx} = -0.37 \cdot 10^{-2}$ ,  $\epsilon_{yy} = +1.24 \cdot 10^{-2}$  und  $\epsilon_{zz} = -0.44 \cdot 10^{-2}$ . Daraus folgen nach Gl. 2.28 die mikroskopischen Größen  $\Delta\varphi_1 = 1.35 \cdot 10^{-2}$ ,  $\Delta\varphi_2 = 0.62 \cdot 10^{-2}$  (im Bogenmaß) und  $\Delta l/l_0 = 0.29 \cdot 10^{-2}$ . Die Verzerrung wird also im wesentlichen durch Änderung der Bindungswinkel verursacht, während die Bindungslänge annähernd konstant bleibt. Dadurch ist auch die Annahme einer konstanten Bindungslänge zwischen  $B$  und  $A_3$  sowie zwischen  $B$  und  $A_4$  im nachhinein gerechtfertigt. Würde man darüber hinaus die Konstanz der Bindungslänge zwischen  $B$  und  $A_1$  sowie zwischen  $B$  und  $A_2$  voraussetzen, würde man einen Zusammenhang der drei Größen  $s_{11}$ ,  $s_{12}$  und  $s_{44}$  erhalten. Das Dipolmoment  $\vec{p}$  einer Ladungsverteilung ist [21]:

$$\vec{p} = \sum_i q_i \vec{r}_i \quad (2.29)$$

Dabei sind  $q_i$  die Ladungen an den Orten  $\vec{r}_i$  und das Dipolmoment zeigt von der negativen zur positiven Ladung. Um das Dipolmoment der betrachteten Elementarzelle zu berechnen, wird der Koordinatenursprung in das Atom  $B$  gelegt. Ohne mechanische Spannung ist aus Symmetriegründen das Dipolmoment der fünf Atome Null. Bei uniaxialer mechanischer Spannung in  $y$ -Richtung ist aus Symmetriegründen ebenfalls  $p_y = p_z = 0$ , aber  $p_x$  wird ungleich Null und berechnet sich gemäß:

$$p_x = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 q x_i \quad (2.30)$$

Der Faktor  $\frac{1}{4}$  rührt daher, daß die Atome  $A$  vier Bindungen haben, aber nur eine in das betrachtete Volumen hineinragt. Man kann sich vorstellen, daß die Atome  $A$  nur zu einem Viertel zur betrachteten, primitiven Elementarzelle gehören.

$$\begin{aligned}p_x &= \frac{1}{4} 2q [(l_0 + \Delta l) \sin(\varphi_1 - \Delta\varphi_1) - l_0 \sin(\varphi_2 + \Delta\varphi_2)] \\ &= \frac{1}{2} q l_0 \left[ (-\Delta\varphi_1 - \Delta\varphi_2) \cos \varphi_0 + \frac{\Delta l}{l_0} \sin \varphi_0 \right]\end{aligned}\quad (2.31)$$

Dabei erhält man die zweite Zeile aus der ersten durch Entwicklung nach den kleinen Größen bis zur ersten Ordnung. Die Polarisation  $\vec{P}$  des Materials erhält man, indem man durch das Volumen  $V$  dividiert. Das Volumen ist das der in Bild 2.4 gezeigten primitiven Elementarzelle (gestrichelte Linien), nämlich  $V = \frac{1}{4} a_0^3$ . Damit ergibt sich  $P_y = P_z = 0$  (vgl. Gl. 2.24) und

$$P_x = \frac{p_x}{V} = -\frac{1}{2} \frac{q}{a_0^2} \left[ \sqrt{2}(\Delta\varphi_1 + \Delta\varphi_2) - \frac{\Delta l}{l_0} \right] \quad (2.32)$$

Dabei wurde  $l_0 \cos \varphi_0$  durch  $\frac{1}{4}\sqrt{2}a_0$  und  $l_0 \sin \varphi_0$  durch  $\frac{1}{4}a_0$  ersetzt.

Die Aussage der Gl. 2.32 ist, daß uniaxiale mechanische Spannung in  $y$ -Richtung - d.h. (011)-Richtung - im Zinkblende-Gitter eine Polarisierung in negative  $x$ -Richtung, d.h. in 100-Richtung, erzeugt. Die Atome  $A_1$  bis  $A_4$  werden nämlich relativ zu Atom  $B$  nach oben (in Bild 2.4) verschoben, so daß das Dipolmoment der Atome  $A_3$ ,  $A_4$  und  $B$  betragsmäßig größer wird als das Dipolmoment der Atome  $A_1$ ,  $A_2$  und  $B$ . So entsteht unter mechanischer Spannung ein resultierendes Dipolmoment, während sich ohne mechanische Spannung die Dipolmomente gerade zu Null aufheben. Ferner wird klar, warum bei dieser Spannung keine Polarisierung in  $y$ - oder  $z$ -Richtung auftritt und warum sich das Vorzeichen der Polarisierung bei uniaxialer Spannung in  $z$ -Richtung umkehrt.

Weiterhin liefert das Modell einen Wert für die Größe des piezoelektrischen Tensors  $\vec{d}$ , der nur eine unabhängige Komponente  $d_{14}$  besitzt. Dazu werden in Gl. 2.32 die mikroskopischen Größen  $\Delta\varphi_1$ ,  $\Delta\varphi_2$  und  $\Delta l/l_0$  gemäß Gl. 2.28 durch die makroskopischen Größen  $\epsilon_{xx}$ ,  $\epsilon_{yy}$  und  $\epsilon_{zz}$  ersetzt.  $\bar{\epsilon}$  wird wiederum gemäß Gl. 2.7 durch  $\bar{\sigma}$  und  $\sigma$  dargestellt, und man erhält:

$$P_x = \frac{q}{a_0^2}(\epsilon_{xx} + 2\epsilon_{zz}) \quad (2.33)$$

$$= \frac{q}{a_0^2}(s_{11} + 2s_{12} - s_{44})\sigma \quad (2.34)$$

Löst man Gl. 2.24 nach  $d_{14}$  auf und setzt Gl. 2.34 ein erhält man:

$$d_{14} = 2\frac{P_x}{\sigma} = 2\frac{q}{a_0^2}(s_{11} + 2s_{12} - s_{44}) \quad (2.35)$$

Nimmt man für  $q$  die Elementarladung  $e_0$  an, wie es bei rein ionischer Bindung auftreten würde, so erhält man aus dem Modell für GaAs  $d_{14} = -6.3 \cdot 10^{-12}$  As/N. Das liegt um einen Faktor 2.3 über dem Literaturwert. Trotz des relativ simplen Modells erhält man also ungefähr den richtigen Wert. Die Diskrepanz zwischen berechnetem und experimentellem Wert liegt an der Vereinfachung des Modells, die Raumladungverteilung durch Punktladungen am Ort der Atome zu beschreiben. Zwar können die Atomrümpfe gut als Punktladungen beschrieben werden, aber die Ladungsverteilung der Elektronen, die sich zwischen den Atomrümpfen befinden, wird dabei vernachlässigt. Diese müßte für eine genauere Berechnung berücksichtigt werden.

Es ist aber einleuchtend, daß die Beschreibung der Ladungsverteilung im Kristall durch Punktladungen am Ort der Atome um so eher zutrifft, je ionischer die Bindung ist. Das bedeutet, daß die Piezoelektrizität im Zinkblende-Gitter um so größer

ist, je größer die Differenz der Elektronegativitäten der beteiligten Elemente ist. Im AlAs ist die Differenz der Elektronegativitäten 0.5, während sie im GaAs 0.4 ist und tatsächlich ist die Piezoresistivität in AlAs größer als diejenige in GaAs (Gl. 2.23). Die anderen Größen in Gl. 2.35, nämlich die elastischen Konstanten und die Gitterkonstante sind für GaAs und AlAs nahezu gleich. Die Differenz der Piezoelektrizität zwischen GaAs und AlAs bzw. AlGaAs wird sich als eine der Ursachen der erhöhten Piezoresistivität in GaAs/AlGaAs-Heterostrukturen erweisen.

Im Vergleich zu GaAs und AlAs ist die Differenz der Elektronegativitäten bei den Nitriden unter den III-V Halbleitern besonders groß (1.2 für InN, 1.4 für GaN und 1.5 für AlN [46]). Tatsächlich wurde in verschiedenen GaN und GaN/AlN-Schichtstrukturen erhöhte Piezoresistivität beobachtet [8, 13]. Bei der Übertragung des Modells auf die Nitride muß allerdings beachtet werden, daß sie meist im Wurzit-Gitter kristallisieren.

## 2.4 Elektrischer Transport im Halbleiter

Ausgangspunkt zur theoretischen Behandlung des elektrischen Transportes in Halbleitern ist die Boltzmann-Gleichung [26, 41]. Sie beschreibt die Verteilungsfunktion  $f$  der Elektronen, die sich unter dem Einfluß eines elektrischen Feldes  $\vec{E}$  einstellt. In der sogenannten Relaxationszeitnäherung erhält man in linearisierter Form folgenden Ausdruck für die Verteilungsfunktion:

$$f(\vec{k}) = f_{fermi}(\vec{k}) + \frac{e_0}{\hbar} \tau(\vec{k}) \vec{E} \vec{\nabla}_{\vec{k}} f_{fermi}(\vec{k}) \quad (2.36)$$

$f(\vec{k})$  ist im Gegensatz zur Gleichgewichtsverteilung  $f_{fermi}(\vec{k})$  nicht symmetrisch bezüglich  $\vec{k}$  und daher erfolgt ein Nettotransport von Elektronen.

Die Relaxationszeitnäherung nimmt an, daß die Nichtgleichgewichtsverteilung  $f$  bei Abschalten der Störung in die Gleichgewichtsverteilung  $f_{fermi}$  übergeht und daß die Geschwindigkeit des Übergangs durch die energieabhängige Relaxations- oder Streuzzeit  $\tau$  beschrieben wird. Die Streuzzeit folgt in aus dem Matrixelement  $W_{\vec{k},\vec{k}'}$ , das die Übergangswahrscheinlichkeit eines Elektrons vom Zustand  $\vec{k}$  in den Zustand  $\vec{k}'$  beschreibt:

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} \sim \int W_{\vec{k},\vec{k}'} (1 - \cos \Theta) d\vec{k}' \quad (2.37)$$

Hierin ist  $\Theta$  der Winkel zwischen  $\vec{k}$  und  $\vec{k}'$ , um den das Elektron durch den Stoß aus seiner Bahn abgelenkt wird. Der Gewichtsfaktor  $(1 - \cos \Theta)$  beschreibt die Abnahme

des Impulses in  $\vec{k}$ -Richtung. Die Streuzeiten  $\tau_i$  für verschiedene Streumechanismen  $i$  können separat berechnet werden. Da sich die Streuwahrscheinlichkeiten addieren (Gl. 2.37), addieren sich die Kehrwerte der Streuzeiten:

$$\frac{1}{\tau} = \sum_i \frac{1}{\tau_i} \quad (2.38)$$

In guter Näherung wird aus den einzelnen Streuzeiten  $\tau_i$  der mit der Energie gewichtete Mittelwert gebildet und dann in Gl. 2.38 eingesetzt, bei exakter Rechnung wäre die Reihenfolge umgekehrt.

Für eine Abschätzung der Abhängigkeit der Streuzeit von der Temperatur oder anderen Parametern kann die Vorstellung der Streuzeit als mittlere Flugzeit zwischen zwei Stößen nützlich sein, für die gilt:

$$\tau \sim \frac{1}{\langle v \rangle \Sigma} \quad (2.39)$$

Dabei ist  $\Sigma$  der (totale) Streuquerschnitt des entsprechenden Streuprozesses und  $\langle v \rangle$  die mittlere Geschwindigkeit der Elektronen.

Aus der Verteilungsfunktion  $f$  kann die Dichte der Elektronen und der Netto-transport berechnet werden. Durch Anlegen des elektrischen Feldes ergibt sich in der betrachteten Näherung keine Änderung der Gesamt-Elektronendichte  $n$ . Wohl aber ergibt sich im Gegensatz zum Gleichgewichtsfall ( $f_{fermi}$ ) eine Stromdichte  $\vec{j}_n$

$$\vec{j}_n = \frac{1}{8\pi^3} \int_{1.BZ} v(\vec{k}) f(\vec{k}) d\vec{k} \neq 0 \quad (2.40)$$

Die Integration erstreckt sich über die erste Brillouin-Zone. Bei parabolischer Näherung des Leitungsbandverlaufes ist die Fermi-Funktion:

$$f_{fermi} = \frac{1}{1 + \exp \frac{E(\vec{k}) - E_C}{k_B T}} = \frac{1}{1 + \exp(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_n^*} - E_C)/k_B T} \quad (2.41)$$

Durch Einsetzen von Gl. 2.41 in 2.36 und 2.40 erhält man die einfache Formel

$$\frac{1}{r} = e_0 n \mu_n \quad \text{mit} \quad \mu_n = \frac{e_0 \tau}{m_n^*} \quad (2.42)$$

Dabei ist  $r$  der spezifische elektrische Widerstand,  $\mu_n$  die elektronische Beweglichkeit, die anschaulich der Quotient aus Driftgeschwindigkeit der Elektronen und elektrischem Feld ist, und  $m_n^*$  ist die effektive Masse der Elektronen an der Bandkante  $E_C$ . Es beeinflussen also drei Faktoren den elektronischen Transport im Halbleiter:

- Elektronendichte  $n$
- Streuzzeit  $\tau$
- effektive Masse  $m_n^*$

In folgenden Abschnitt sollen die verschiedenen Streumechanismen, d. h. der Einfluß der Streuzzeit, untersucht werden im Hinblick darauf, ob sie die erhöhte Piezoresistivität erklären können. Anschließend wird die Rolle der effektiven Masse betrachtet. Der Einfluß der Elektronendichte wird in den Kapiteln 3 und 4 genauer beleuchtet.

### 2.4.1 Streumechanismen

Bei Volumenhalbleitern und bei Raumtemperatur sind insbesondere die Streuung an akustischen und optischen Phononen und die Coulombstreuung, d.h. die Streuung an ionisierten Störstellen, relevant.

Für die Streuung an akustischen Phononen kann der Streuquerschnitt durch das Quadrat der mittleren Schwingungsamplitude eines Phonons abgeschätzt werden, es ist  $\Sigma \sim T$  und  $\langle v \rangle \sim \sqrt{T}$ , also nach Gl. 2.39  $\tau \sim T^{-3/2}$ . Die Piezoresistivität bei Streuung an akustischen Phononen ist klein ( $d(\ln r)/d(\ln V) = 1.4 \dots 1.7$ ), sodaß sie schon bei der Erklärung der Piezoresistivität keine Rolle spielt [54].

Die Streuung an optischen Phononen ist nicht so einfach abzuschätzen, da sie eine relativ hohe Energie besitzen und daher nur ungenügend in Relaxationszeitnäherung beschrieben werden können. Diese Art der Streuung liefert gerade in piezoelektrischen Halbleitern einen Beitrag. Man kann aber auf jeden Fall sagen, daß die Streuung an optischen Phononen mit sinkender Temperatur ebenfalls stark abnimmt, so daß bei tiefen Temperaturen ( $\leq 77$  K) die Phononenstreuung keine Rolle spielt und somit auch nicht für die bei diesen Temperaturen auftretende erhöhte Piezoresistivität ursächlich ist.

Die Coulombstreuung kann durch Rutherfordstreuung beschrieben werden, bei der  $\Sigma \sim \langle v \rangle^{-4} \sim T^{-2}$  [35]. Die Anzahl der Streuzentren ist die Dotierung  $N_D$ , aus Gl. 2.39 folgt  $\tau \sim T^{3/2}/N_D$ , d.h. bei hoher Dotierung und tiefer Temperatur wird die Coulombstreuung dominierend. Mechanische Spannung verändert nicht die Ladung der Streuzentren und ihre Dichte nur sehr wenig (siehe Tab. 2.1), daher ist die durch die Coulombstreuung verursachte Piezoresistivität sehr klein. Das wird durch

den experimentellen Befund bekräftigt, daß die gefundenen Piezoresistivitäten mit zunehmender Dotierung kleiner werden [15].

Bei quasi zweidimensionalen Elektronenstrukturen und tiefen Temperaturen, wie es z. B. in Kap. 5.2 und 5.3 behandelt wird, wirken sich die Streumechanismen anders aus und es werden neue Streumechanismen wichtig. Die Phononenstreuung spielt wie schon erwähnt, bei tiefen Temperaturen keine Rolle mehr. Die Coulombstreuung kann durch sogenannte Modulationsdotierung, wie sie in der HEMT-Struktur (siehe Bild 5.5) realisiert ist, wesentlich reduziert werden. Dabei bildet sich ein Kanal mit einem quasi zweidimensionalen Elektronegas (2DEG) aus, in dem sich die beweglichen Elektronen befinden und der nahezu frei von Störstellen ist. Die notwendige Dotierung befindet sich räumlich getrennt in einem Material mit energetisch höher liegender Leitungsbandkante.

Die beiden bisher diskutierten Streumechanismen sind also in diesem speziellen Fall wesentlich schwächer, stattdessen werden andere Streumechanismen wichtig, nämlich Legierungsstreuung, Streuung an Grenzflächenrauhigkeiten und Streuung an nicht ionisierten Störstellen.

Legierungsstreuung tritt in Mischkristallen wie  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  auf, weil der Kristall nicht streng periodisch aufgebaut ist. Im Beispiel von  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  wird der Gruppe-III-Platz statistisch mit Al- und Ga-Atomen besetzt, wobei der Anteil von Al im Mittel  $x$  ist, aber in kleinen Volumenbereichen von  $x$  abweichen kann. Die Streuzeit ist unabhängig von der Temperatur, aber  $\tau \sim 1/(x(1-x))$ . Die Streuzeit wird von mechanischer Spannung ebenfalls nicht beeinflusst. Bei GaAs/AlGaAs-HEMT-Strukturen ist die Legierungsstreuung kleiner als bei InGaAs/InP-HEMT-Strukturen, da sich im ersten Fall die Elektronen überwiegend im binären Material aufhalten und nur der abklingende Teil der Wellenfunktion in das ternäre Material eindringt. Dagegen halten sich im zweiten Fall die Elektronen überwiegend im ternären Material auf, weil InGaAs gegenüber InP die kleinere Bandlücke hat [3, 63].

Die Streuung an Grenzflächenrauhigkeiten wird vor allem durch die Glattheit der Grenzfläche bestimmt, bei AlGaAs/GaAs ist dies die Grenzfläche zwischen AlGaAs und GaAs. Bei den III-V-Heterostrukturen ist diese Grenzfläche in der Regel von sehr guter Qualität, die diese Materialien epitaktisch gewachsen werden, während sie bei MOS-Strukturen in der Regel die Beweglichkeit bei tiefen Temperaturen begrenzen, da das Oxid thermisch auf Si gebildet wird. Die Grenzflächenstreuung ist wie die Legierungsstreuung temperaturunabhängig, da sich die Morphologie der Grenzfläche nicht verändert. Ebenso kann argumentiert werden, daß mechanische Spannung keinen wesentlichen Einfluß auf die Grenzflächenstreuung hat, da auch sie die Morphologie der Grenzfläche nicht beeinflusst.

Die Streuung an Störstellen kann bei 2DEG's ebenfalls eine Rolle spielen, wobei jetzt ungewollte Störstellen im Kanal (ionisiert oder neutral) und die Streuung an der räumlich entfernten Dotierung relevant werden. Es gilt analog das für Volumenhalbleitern gesagte, daß nämlich diese Art der Streuung durch mechanische Spannung nicht beeinflußt wird und daher keine erhöhte Piezoresistivität verursacht. Die Temperaturabhängigkeit dieser Streuung ist allerdings bei 2DEG's fundamental anders als bei Volumenhalbleitern, da nicht mehr  $\langle v \rangle \sim \sqrt{T}$ , sondern  $\langle v \rangle$  wird im wesentlichen durch die Fermi-Geschwindigkeit, also das Fermi-Niveau  $E_F$  bestimmt. Das führt dazu, daß die Störstellenstreuung temperaturunabhängig wird [19].

Zusammenfassend kann man sagen, daß die Streumechanismen den elektrischen Widerstand von Halbleitern und seine Temperaturabhängigkeit maßgeblich bestimmen, daß sie aber die erhöhte Piezoresistivität nicht erklären können.

### 2.4.2 Effektive Masse

Die effektive Masse der Elektronen beschreibt die Bandkrümmung des Leitungsbandes im  $k$ -Raum in parabolischer Näherung:

$$m_n^* = \hbar^2 \left( \frac{d^2 E_C}{d k^2} \right)^{-1} \quad (2.43)$$

Die effektive Masse geht direkt in den spezifischen elektrischen Widerstand ein (Gl. 2.42), wobei diese Beschreibung bei komplizierteren Bandstrukturen und bei stark gefüllten Bändern (Stichwort Nichtparabolizität) unzureichend ist und die rechte Seite von Gl. 2.41 nicht benutzt werden kann. Mechanische Spannung bzw. mechanische Verzerrung beeinflußt die Bandstruktur und damit ist die Veränderung der effektiven Masse eine mögliche Erklärung der erhöhten Piezoresistivität. Allerdings ist dieser Einfluß unabhängig von davon, ob Heterostrukturen eingesetzt werden oder nicht. Das bedeutet, daß die erhöhte Piezoresistivität auch in Volumenhalbleitern auftreten müsste, wenn die Änderung der effektiven Masse die Ursache wäre. Das tritt aber nicht auf (Tab. 2.2) und die Ursache der erhöhten Piezoresistivität muß woanders gesucht werden.

# Kapitel 3

## Modell der erhöhten Piezoresistivität in piezoelektrischen Halbleitern

In diesem Kapitel wird ein Modell aufgestellt, welches die erhöhte Piezoresistivität in GaAs/AlGaAs-Heterostrukturen im besonderen und in piezoelektrischen Halbleitern allgemein erklärt. Dabei wird die Piezoelektrizität als indirekte Ursache der Piezoresistivität identifiziert. Zunächst wird die Poisson-Gleichung für piezoelektrische Materialien hergeleitet. Anhand dieser Gleichung wird dargestellt, wie eine mechanische Spannung den Bandverlauf in einem Halbleiter und damit seinen spezifischen Widerstand modifizieren kann. Die quantitative Berechnung erfolgt in Kap. 4.

Es werden zeitlich konstante Felder vorausgesetzt. Die erste Maxwell-Gleichung lautet dann:

$$\operatorname{rot}\vec{E} = 0 \quad (3.1)$$

Mit  $\vec{E}$  ist das makroskopische elektrische Feld in einem Festkörper gemeint. Makroskopische Größen sind hier und im folgenden Größen, die über ein räumliches Gebiet gemittelt sind, das groß gegen die Atomabstände ist, das aber klein ist gegenüber Abmessungen, auf welchen sich diese Größen ändern. Im Halbleiter ist  $\vec{E}$  das interne elektrische Feld. Aus Gl. 3.1 folgt, daß  $\vec{E}$  durch ein skalares Potential  $U$  dargestellt werden kann:

$$\vec{E} = -\operatorname{grad}U \quad (3.2)$$

Auch  $U$  ist eine makroskopische Größe. Die Potentialdifferenz zwischen zwei Punkten ist die elektrische Spannung. Die zweite Maxwell-Gleichung lautet im zeitunabhängi-

gen Fall:

$$\operatorname{div} \vec{D} = \rho \quad (3.3)$$

Dabei ist  $\rho$  die makroskopische Raumladungsdichte und  $\vec{D}$  die elektrische Flußdichte, die sich aus dem elektrischen Feld und der elektrischen Polarisation  $\vec{P}$  zusammensetzt:

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} \quad (3.4)$$

$\vec{P}$  ergibt sich aus der mikroskopischen Raumladungsdichte  $\rho_{mikro}$  (vgl. Gl. 2.29):

$$\vec{P} = \langle (\rho_{mikro} - \rho) \vec{r} \rangle \quad (3.5)$$

Dabei ist  $\vec{r}$  der Ortsvektor und  $\rho_{mikro}$  die tatsächliche, nicht gemittelte Raumladungsdichte. Die spitzen Klammern bedeuten Mittelwertbildung über einen räumlichen Bereich, der groß ist gegen die Atomabstände und klein gegen das Gebiet, über das sich  $\rho$  ändert. Dieses ist die einzige Stelle, an der die mikroskopischen Größen berücksichtigt werden. Weil die mikroskopische Raumladungsdichte sehr schwierig zu erfassen ist, wird  $\vec{P}$  nicht explizit durch Gl. 3.5, sondern implizit über die Materialgleichungen 3.6 und 3.7 berechnet. Bis hier lehnt sich die Darstellung an das übliche Vorgehen in den Lehrbüchern an, z.B. [16].

In einem dielektrischen Material induziert die elektrische Flußdichte die dielektrische Polarisation  $\vec{P}_{diel} = \epsilon_0(\epsilon_r - 1)\vec{E}$  bzw.:

$$\vec{P}_{diel} = \left(1 - \frac{1}{\epsilon_r}\right) \vec{D} \quad (3.6)$$

Dabei ist die relative Dielektrizitätskonstante  $\epsilon_r$  im Zinkblende-Gitter aufgrund von Symmetrieüberlegungen ein Skalar (Kap. A). In einem piezoelektrischen Material erzeugt eine mechanische Spannung  $\vec{\sigma}$  zusätzlich eine piezoelektrische Polarisation  $\vec{P}_{Piezo}$  (Gl. 2.20):

$$\vec{P}_{Piezo} = \vec{d}\vec{\sigma} \quad (3.7)$$

In Materialien, die gleichzeitig dielektrisch und piezoelektrisch sind, lautet Gl. 3.4 also:

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}_{diel} + \vec{P}_{Piezo} \quad (3.8)$$

Setzt man hier Gl. 3.7 und 3.6 ein und löst nach  $\vec{E}$  auf erhält man:

$$\vec{E} = \frac{\vec{D}}{\epsilon_0 \epsilon_r} - \frac{\vec{d}\vec{\sigma}}{\epsilon_0} \quad (3.9)$$

Diese Gleichung soll anhand eines Kondensatormodells erläutert werden. Man stelle sich einen Plattenkondensator mit Plattenabstand  $L$  und Fläche  $A$  vor, der mit

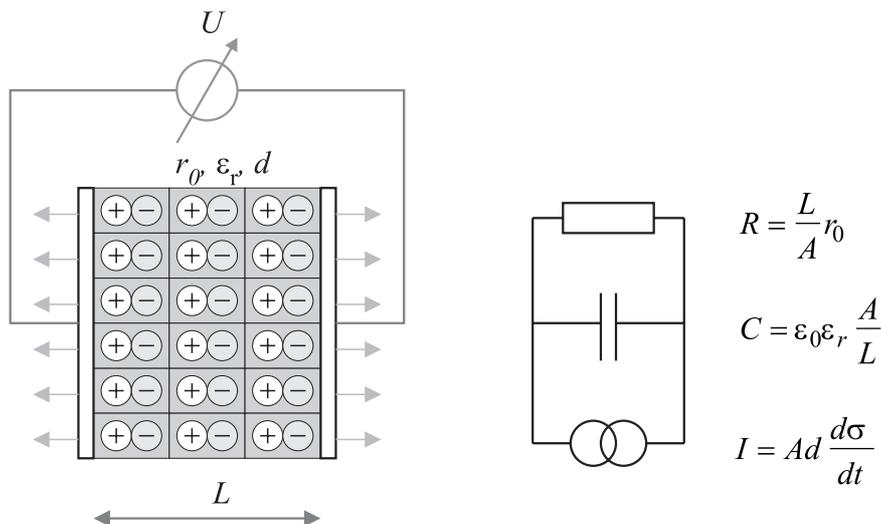


Abbildung 3.1: Ersatzschaltbild für das zeitliche Verhalten eines piezoelektrischen Materials.

einem Material gefüllt ist, das den spezifischen Widerstand  $r_0$ , die wirksame Piezoelektrizität  $d$  und die relative Dielektrizitätskonstante  $\epsilon_r$  habe (Bild 3.1). Auf den Kondensator und das enthaltene Material kann eine uniaxiale mechanische Spannung  $\sigma$  in Richtung senkrecht zu den Platten ausgeübt werden. Die wirksame Piezoelektrizität  $d$  ist in diesem Fall der Faktor zwischen  $\sigma$  und der piezoelektrischen Polarisation  $P_{Piezo}$  in der Richtung senkrecht zu den Platten. Im Gleichgewicht, d.h. ohne mechanische Spannung, sei keine Ladung auf den Kondensatorplatten vorhanden. Bei einem idealen Isolator bleibt beim Anlegen einer mechanischen Spannung die makroskopische Ladung auf den Platten 0 und damit bleibt auch  $\vec{D} = 0$  (Gl. 3.3). Das elektrische Feld ist dann  $\vec{E} = -d\sigma/\epsilon_0$  und die Spannung am Kondensator ist  $U = -Ld\sigma/\epsilon_0$ . Man kann sich die Situation durch ein Modell veranschaulichen, bei dem sich auf den Platten des Kondensators eine Flächenladung der Größe  $P_{Piezo}$  befindet und dessen Inneres frei von (piezoelektrischer und dielektrischer) Polarisation ist.

Ein Leiter verhält sich beim Anlegen einer mechanischen Spannung anders. Es wird solange ein Strom fließen, bis im Inneren des Leiters kein elektrisches Feld mehr vorhanden ist. Durch diesen Strom fließt eine makroskopische Flächenladung auf die Kondensatorplatten, welche den Effekt der piezoelektrischen Polarisation gerade kompensiert. Das elektrische Feld und die Spannung über dem Kondensator werden Null.

Nun sind die Begriffe „Isolator“ und „Leiter“ natürlich Idealisierungen. Jedes Material hat einen endlichen spezifischen Widerstand  $r_0$ . Man kann sich das piezoelektrische Material als einen mechanisch-elektrischen Wandler vorstellen, der eine Ladung erzeugt, die proportional dem Produkt aus mechanischer Spannung und Fläche ist. Das bedeutet, daß der erzeugte Strom proportional der zeitlichen Ableitung der mechanischen Spannung ist. Durch die dem Material inhärenten spezifischen Leitfähigkeit und Kapazität verhält sich der Wandler wie ein Hochpaß erster Ordnung. Dabei ist die Zeitkonstante die dielektrische Relaxationszeit  $\tau$  [52]:

$$\tau = \epsilon_0 \epsilon_r r_0 \quad (3.10)$$

Die Grenzfrequenz ist  $f_{3dB} = (2\pi\tau)^{-1}$ . Dieses Verhalten läßt sich durch das in Bild 3.1 gezeigt Ersatzschaltbild beschreiben. Für semiisolierendes GaAs (s.i. GaAs) sei ein Zahlenbeispiel eingefügt. Hier ist  $r_0 = 10^7 \Omega\text{cm}$  und  $\epsilon_r = 12$ , daraus folgt  $\tau = 10 \mu\text{s}$  bzw.  $f_{3dB} = 16 \text{kHz}$ . Bei dotiertem GaAs ist der spezifische Widerstand und damit die dielektrische Relaxationszeit um Größenordnungen kleiner. Zusammenfassend kann man sagen, daß sich GaAs und andere III-V Halbleiter zur direkten, sensorischen Nutzung des piezoelektrischen Effektes aufgrund des Hochpaßverhaltens bei statischen Messungen oder bei niedrigen Frequenzen nicht eignen.

Für den dynamischen Modus bei der RKM kann der piezoelektrische Effekt des semiisolierenden GaAs aber sehr wohl auch direkt zu Sensorzwecken genutzt werden. Insbesondere wäre es denkbar, anstatt semiisolierendem Material einen pn-Übergang als piezoelektrisch aktives Material zu benutzen. Vorteilhaft sind piezoelektrisch aktive Schichten auch als Aktoren einsetzbar [40]. Bisher werden für beide Zwecke spezielle piezoelektrische Schichten aufgebracht, in der Regel anisotrop gesputtertes ZnO [27].

In piezoelektrischen Schichtstrukturen bewirkt die piezoelektrisch induzierte Polarisation eine Veränderung des Bandverlaufs. Im allgemeinen ergeben sich dreidimensionale Bandverlaufsänderungen [10], aber in Schichtstrukturen kann man die Betrachtung auf eine Dimension reduzieren, da sich die Größen nur senkrecht zur Schichtebene (der  $x$ -Richtung) ändern. Dann ist nur die piezoelektrische Polarisation in  $x$ -Richtung für den Bandverlauf interessant, sie ist  $P_{x,Piezo} = d\sigma$ , wobei  $d$  und  $\sigma$  die bei der jeweiligen Geometrie wirksame Piezoelektrizität bzw. die wirksame mechanische Spannung sind. Bei uniaxialer Spannung in  $y$ -Richtung ist beispielsweise  $d = \frac{1}{2}d_{14}$  (Gl. 2.24) und  $\sigma = \sigma_{yy}$ . Man erhält eine modifizierte, eindimensionale Poisson-Gleichung indem man Gl. 3.9 nach  $D$  auflöst, die Ableitung nach  $x$  bildet,  $D'$  durch  $\rho$  (Gl. 3.3) und  $E$  durch  $-U'$  (Gl. 3.2) ersetzt. Außerdem ersetzt man das Potential  $U$  im Halbleiter durch die Leitungsbandkante  $E_C = -U/e_0$ , wobei das

negative Vorzeichen durch die negative Ladung der Elektronen verursacht wird. Die modifizierte Poisson-Gleichung lautet:

$$E_C'' = \underbrace{\frac{e_0 \rho}{\epsilon_0 \epsilon_r}}_I - \underbrace{\frac{e_0 d}{\epsilon_0}}_{II} \sigma' - \underbrace{\frac{\epsilon_r' E_C'}{\epsilon_r}}_{III} - \underbrace{\frac{e_0 d'}{\epsilon_0}}_{IV} \sigma \quad (3.11)$$

Der Strich bedeutet Ableitung nach der Ortskoordinate  $x$ . In dieser Gleichung ist das Auftreten von sogenannten Band-Offsets, d.h. die sprungartige Änderung der Leitungsbandkante an der Grenzfläche zwischen zwei Halbleitern mit unterschiedlicher Bandlücke, noch nicht berücksichtigt. Die übliche Schreibweise der Poisson-Gleichung ist [16, 28]:

$$\Delta U = -\frac{\rho}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad (3.12)$$

Der Term I von Gl. 3.11 entspricht dem Term auf der rechten Seite von Gl. 3.12. Das unterschiedliche Vorzeichen und der Faktor  $e_0$  wird durch die Substitution des Potentials durch die Leitungsbandkante verursacht. Berücksichtigt man auf der rechten Seite von Gl. 3.11 nur Term I, kann man den Bandverlauf in einem Material mit konstantem  $\epsilon_r$  ohne mechanische Spannung berechnen. Ein bekanntes Beispiel dafür ist die Berechnung des Bandverlaufes im abrupten  $pn$ -Übergang im Rahmen des Schottky-Modells [26].

An der Grenzfläche zwischen zwei Materialien, die unterschiedliche Dielektrizitätskonstanten haben, ist die Normalkomponente des elektrischen Feldes diskontinuierlich. Dieser Effekt wird durch den Term III auf der rechten Seite von Gl. 3.11 ausgedrückt. An der Grenzfläche ist nämlich  $\epsilon_r' = \Delta\epsilon_r \delta(x_G)$ , dabei ist  $\Delta\epsilon_r$  der Unterschied der relativen Dielektrizitätskonstanten in den beiden Materialien,  $x_G$  ist der Ort der Grenzfläche und  $\delta$  ist die Dirac-Distribution. Wenn die zweite Ableitung von  $E_C$  einer Dirac-Distribution folgt, ist die erste Ableitung und damit das interne elektrische Feld an dieser Stelle stufenförmig, was gerade der obigen Aussage entspricht. Wenn  $\epsilon_r$  in der gesamten Schicht konstant ist, ist der Term III identisch Null.

Die Terme II und IV von Gl. 3.11 enthalten den Einfluß der mechanischen Spannung auf den Bandverlauf. Der Bandverlauf wiederum bestimmt die Besetzung des Bandes mit Elektronen und hat damit entscheidenden Einfluß auf den Schichtwiderstand, daher sind die Terme II und IV in dieser Arbeit von zentralem Interesse: Durch sie wird die erhöhte Piezoresistivität in piezoelektrischen Halbleitern erklärt. Weitergehende Aussagen zur Berechnung des Schichtwiderstandes folgen in Kap. 4.

Der Term IV in Gl. 3.11 ist proportional zur Ableitung des wirksamen piezoelektrischen Koeffizienten  $d$ . Analog der Betrachtung zu Term III liefert Term IV

also nur dann einen Beitrag, wenn  $d$  nicht konstant ist. Das ist bei Schichtstrukturen insbesondere an Grenzflächen der Fall, an denen zwei Materialien mit unterschiedlichem  $d$  benachbart sind. Dort ist nämlich  $d' = \Delta d \delta(x_G)$ . Dabei ist  $\Delta d$  der Unterschied der wirksamen Piezoelektrizität der beiden Schichten und  $x_G$  ist wieder der Ort der Grenzfläche. Eine solche Grenzfläche bewirkt eine sprungartige Änderung der Ableitung von  $E_C$ , d.h. eine sprungartige Änderung des internen elektrischen Feldes. Man kann sich diesen Term durch eine mechanisch induzierte Flächenladung an der Grenzfläche veranschaulichen. Diese mechanisch induzierte Änderung des Bandverlaufs beeinflusst den Schichtwiderstand. Der Term IV ist proportional zur wirksamen mechanischen Spannung, daher ist die durch diesen Term beschriebene Widerstandsänderung in linearer Näherung ebenfalls proportional der mechanischen Spannung. Die durch den Term IV beschriebene Piezoresistivität wird als PER1-Effekt bezeichnet. „PER“ steht dabei für piezoelektroresistiv.

Der Term II in Gl. 3.11 beschreibt den sogenannten „PER2“-Effekt. Man kann sich diesen Term anschaulich als eine zusätzliche, piezoelektrisch induzierte Raumladung  $\rho_{Piezo}$  bzw. eine piezoelektrische Dotierung vorstellen [25, 32]:

$$\rho_{Piezo} = -d\epsilon_r\sigma' \quad (3.13)$$

Diese modifiziert den Bandverlauf und damit den Schichtwiderstand. Der PER2-Effekt unterscheidet sich von der normalen Piezoresistivität insbesondere dadurch, daß die Widerstandsänderung nicht proportional der mechanischen Spannung, sondern proportional ihrer Ableitung nach  $x$  ist. Um die durch die beiden PER-Effekte erzielten Widerstandsänderungen vergleichen zu können, muß eine Relation zwischen  $\sigma$  und  $\sigma'$  vorgegeben werden. Da die erhöhte Piezoresistivität im Hinblick auf die Anwendung als Piezoresistor im Cantilever eines Kraftmikroskopes untersucht wird, werden die beiden PER-Effekte für einen Cantilever eines Kraftmikroskopes betrachtet. Dort ist  $\sigma \sim D^{-2}$  und  $\sigma' \sim D^{-3}$  (Gl. 2.13), und die gesuchte Relation ist

$$\sigma' = \frac{\sigma}{D} \quad (3.14)$$

Dabei ist  $D$  die Dicke des Cantilevers. Diese Relationen gelten sinngemäß aber auch für andere mikromechanische Elemente, wie z.B. dünne Platten oder beidseitig eingespannte dünne Balken. Das bedeutet, daß der PER2-Effekt bei Miniaturisierung der mechanischen Elemente stärker wächst als die normale Piezoresistivität. Daher ist der PER2-Effekt besonders geeignet für die Nutzung in der Mikrosystemtechnik.

Beide PER-Effekte unterscheiden sich von der normalen Piezoresistivität in der Richtungsabhängigkeit. Bei beiden PER-Effekten wird der Bandverlauf senkrecht

zur Schichtebene geändert, während der Stromfluß innerhalb der Schichtebene stattfindet. Daher ist die durch mechanische Spannung hervorgerufene Widerstandsänderung richtungsunabhängig. Im Bild der normalen Piezoresistivität sind longitudinale und transversale Piezoresistivität ( $\pi_L$  und  $\pi_T$ ) gleich. Die Widerstandsänderung ist aber abhängig von der Richtung der mechanischen Spannung. Bei uniaxialer Spannung in  $y$ -Richtung ist die Widerstandsänderung gerade entgegengesetzt der Widerstandsänderung bei uniaxialer Spannung in  $z$ -Richtung (Gl. 2.24). Dieses Verhalten tritt auch bei anderen Effekten auf, die durch die Piezoelektrizität verursacht werden. Ein Beispiel wird in [9] beschrieben. Bei resonanten GaAs/AlGaAs-Tunneldioden tritt in der  $I/U$ -Kennlinie ein charakteristischer Peak auf. Dieser wird durch mechanische Spannung verschoben. Dabei geht die Verschiebung bei Spannung in (011)-Richtung in entgegengesetzte Richtung verglichen mit der Verschiebung bei Spannung in (0 $\bar{1}$ 1)-Richtung und bei Spannung in (010)-Richtung tritt überhaupt keine Peakverschiebung auf. Dieser Effekt wird ebenfalls durch den Einfluß der Piezoelektrizität auf den Bandverlauf erklärt. Bei „normaler“ Piezoresistivität dagegen erwartet man für mechanische Spannung in (011)- und (0 $\bar{1}$ 1)-Richtung die gleiche longitudinale Piezoresistivität mit gleichem Vorzeichen, aber eine Abhängigkeit der Piezoresistivität von der Richtung des Stromflusses relativ zur mechanischen Spannung (Gl. 2.17). Dieses unterschiedliche Verhalten ist im Endeffekt dadurch zu erklären, daß die „normale“ Piezoresistivität ein Tensor vierter Stufe ist, während die Piezoelektrizität ein Tensor dritter Stufe ist.

Die Piezoresistivität in piezoelektrischen Halbleitern setzt sich zusammen aus der normalen Piezoresistivität, dem PER1- und dem PER2-Effekt, die den Termen IV und II in Gl. 3.11 entsprechen. Die PER-Effekte werden auch als „erhöhte Piezoresistivität“ bezeichnet, da sie sehr viel größer werden können als die „normale Piezoresistivität“, die in homogenem Volumenmaterial und homogener mechanischer Spannung auftritt. Die PER-Effekte verhalten sich gegenüber der normalen Piezoresistivität qualitativ verschieden und können deshalb nicht in den piezoresistiven Tensor  $\bar{\pi}$  integriert werden.



# Kapitel 4

## Quantitative Berechnung der erhöhten Piezoresistivität

Es wurden Simulationsrechnungen durchgeführt, um aus dem in Kap. 3 aufgestellten Modell quantitative Aussagen über die erhöhte Piezoresistivität in piezoelektrischen Halbleiterschichten zu erhalten. Zunächst wird in Kap. 4.1 das Modell so erweitert, daß aus ihm die Piezoresistivität direkt berechnet werden kann. Mit dem Modell kann die Piezoresistivität nicht analytisch, sondern nur numerisch berechnet werden. In Kap. 4.2 wird beschrieben, nach welchem Algorithmus die Rechnung durchgeführt wird und welche numerischen Verfahren benutzt werden. In Kap. 5 werden die Ergebnisse der Rechnungen für drei spezielle Strukturen vorgestellt, von denen zwei auch vermessen wurden (Kap. 6).

Das Ziel der Simulationsrechnungen ist, die Größe der Piezoresistivität für beliebige Halbleiter-Schichtfolgen zu berechnen. Eine Genauigkeit des Schichtwiderstandes im Prozentbereich kann die Simulation allerdings nicht liefern. Das hat im wesentlichen zwei Ursachen: Zum einen werden bei der Berechnung des Schichtwiderstandes einige Vereinfachungen gemacht, um die Anzahl der Parameter zu beschränken und um den numerischen Aufwand in einem sinnvollen Rahmen zu halten. Insbesondere geht das Modell davon aus, daß die Piezoresistivität allein durch die Piezoelektrizität verursacht wird. Das heißt, es wird nur die „erhöhte“, nicht aber die „normale“ Piezoresistivität, berücksichtigt. Das ist immer dann sinnvoll, wenn die erhöhte Piezoresistivität auch tatsächlich deutlich größer als die normale Piezoresistivität ist, so wie es bei den in Kap. 5 vorgestellten Strukturen der Fall ist. Der zweite Punkt, der zu Abweichungen zwischen Experiment und Simulationen führt, ist, daß die in das Modell eingehenden Parameter nicht exakt bekannt sind. Das liegt einerseits an Toleranzen bei der Epitaxie der Schichten. Andererseits sind

einige der relevanten Materialparameter nur ungenau bekannt, das betrifft insbesondere die Hintergrunddotierung des nominal undotierten epitaktischen Materials und die Dotierung des semiisolierenden Substrates mit tiefen und flachen Störstellen. Trotz dieser Einschränkung lassen sich relative Widerstandsänderungen und damit die Piezoresistivität genügend genau berechnen.

Dies ist vor dem Hintergrund zu sehen, daß bisher noch kein Modell für die erhöhte Piezoresistivität in III-V Halbleiter-Schichtstrukturen existiert. Durch Vergleich von Simulationsrechnung und Messungen kann der Gültigkeitsbereich des Modells abgesteckt werden. Weiterhin können Optimierungen der Schicht- und Materialfolge durchgeführt werden.

## 4.1 Erweitertes Modell der erhöhten Piezoresistivität

An der Grenzfläche zweier Halbleiter mit unterschiedlicher Bandlücke treten Diskontinuitäten im Leitungsband  $E_C$  auf, die sogenannten Leitungsband-Offsets. Analog treten im Valenzband Valenzband-Offsets auf. Für ein gegebenes Paar von Halbleitern ist der Leitungsband-Offset eine feste Größe [34]. Um die Leitungsband-Offsets in Gl. 3.11 zu berücksichtigen wird in ihr  $E_C$  durch die Energie  $\Phi$  ersetzt. In GaAs sind  $E_C$  und  $\Phi$  identisch, in anderen Materialien unterscheiden sie sich um den Leitungsband-Offset  $\Delta E_C$ :

$$E_C = \Phi + \Delta E_C \quad (4.1)$$

Der Leitungsband-Offset  $\Delta E_C$  ist also immer relativ zu GaAs definiert und kann daher sowohl positiv (z.B. für AlGaAs) als auch negativ (z.B. für InGaAs) sein. Bei dieser Definition wurde benutzt, daß die Band-Offsets verschiedener Materialien assoziativ sind [34]. Die Lage des Valenzbandes  $E_V$  ergibt sich dabei implizit aus der Bandlücke  $E_g$ :

$$E_V = E_C - E_g \quad (4.2)$$

Dieser Sachverhalt ist in Bild 4.1 veranschaulicht.

Mit dieser Definition kann man die modifizierte Poisson-Gleichung 3.11 schreiben als:

$$\Phi'' = \underbrace{\frac{e_0 \rho}{\epsilon_0 \epsilon_r}}_I - \underbrace{\frac{e_0 d}{\epsilon_0}}_{II} \sigma' - \underbrace{\frac{\epsilon_r'}{\epsilon_r}}_{III} \Phi' - \underbrace{\frac{e_0 d'}{\epsilon_0}}_{IV} \sigma \quad (4.3)$$

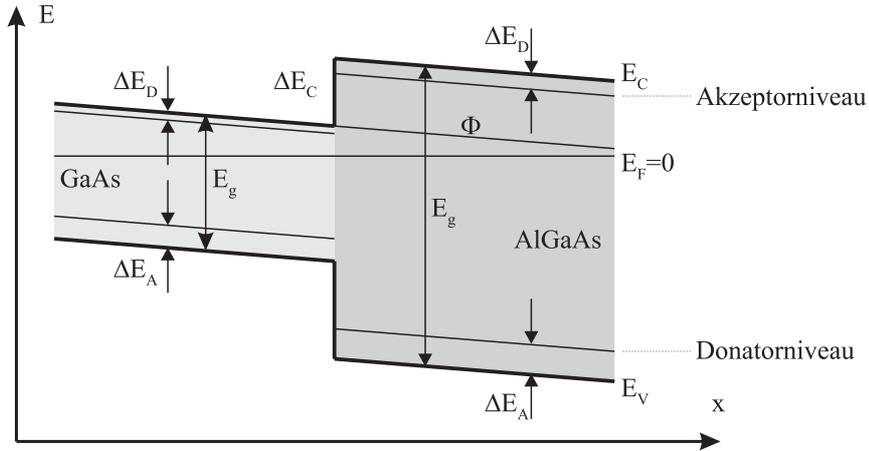


Abbildung 4.1: Bezeichnungen der Energieniveaus und der Energiedifferenzen im Bändermodell am Beispiel einer GaAs/AlGaAs-Grenzfläche. Die Raumladungsdichte in diesem Bild ist vernachlässigbar, so daß keine Krümmung der Bänder auftritt.

Der Strich bedeutet Ableitung nach der Ortskoordinate  $x$ .  $\rho$  ist die makroskopische Raumladungsdichte,  $d$  die wirksame Piezoelektrizität und  $\sigma$  die wirksame mechanische Spannung (vgl. Kap. 3).

Die makroskopische Raumladungsdichte  $\rho$  in Gl. 4.3 setzt sich aus vier Anteilen zusammen:

$$\rho = e_0(p - n + N_D^+ - N_A^-) \quad (4.4)$$

Dabei sind  $p$  und  $n$  die Löcher- und die Elektronendichte,  $N_D^+$  die Dichte der (einfach positiv) ionisierten Donatoren und  $N_A^-$  die Dichte der (einfach negativ) ionisierten Akzeptoren. Die Ladungsträgerdichten  $n$  und  $p$  werden semiklassisch in parabolischer Bandnäherung und mit Hilfe der Fermi-Verteilung berechnet [53, 64]:

$$p = N_V \frac{2}{\sqrt{\pi}} f_{FI} \left( -\frac{E_F - E_V}{k_B T} \right) \quad (4.5)$$

$$n = N_C \frac{2}{\sqrt{\pi}} f_{FI} \left( -\frac{E_C - E_F}{k_B T} \right) \quad (4.6)$$

$$f_{FI}(\eta_F) = \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\eta} d\eta}{1 + \exp(\eta - \eta_F)} \quad (4.7)$$

$f_{FI}(\eta_F)$  ist dabei das Fermi-Halbintegral und  $E_F$  ist das Fermi-Niveau. Das Fermi-Niveau ist konstant, da in  $x$ -Richtung kein Stromfluß stattfindet. Die Bedeutung von

$\eta_F$  ist dem Argument von Gl. 4.5 bzw. 4.6 zu entnehmen. Es gehen nur Energiedifferenzen und keine absoluten Energien ein, daher kann man den Energienullpunkt frei wählen. Im Rahmen dieser Arbeit wird  $E_F = 0$  gesetzt. Für betragsmäßig große, negative  $\eta_F$  kann die Boltzmann-Näherung  $f_{FI}(\eta_F) \approx \frac{\sqrt{\pi}}{2} \exp(\eta_F)$  verwendet werden.  $N_V$  und  $N_C$  sind die Entartungsgrade der Bandkanten, die sich temperaturabhängig aus den jeweiligen effektiven Massen  $m_n^*$  und  $m_p^*$  ergeben [53]:

$$N_C = 2 \left( \frac{m_n^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad \text{und} \quad N_V = 2 \left( \frac{m_p^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (4.8)$$

Die Dichte der ionisierten Donatoren wurde aus der Annahme berechnet, daß das Donatorniveau energetisch um  $\Delta E_D$  unterhalb des Leitungsbandes liegt, und daß die Donatoren gemäß der Fermi-Verteilung  $f_{Fermi}$  mit Elektronen besetzt werden. Der Abstand  $\Delta E_D$  wird bei flachen Donatoren im Rahmen des Modells des Wasserstoffatoms berechnet [50]. Analog wird angenommen, daß sich das Akzeptorniveau energetisch um  $\Delta E_A$  oberhalb des Valenzbandes befindet (Bild 4.1). Daraus ergeben sich die Dichte einfach positiv ionisierten Donatoratome  $N_D^+$  und der einfach negativ ionisierten Akzeptoratomme  $N_A^-$  zu:

$$N_D^+ = N_D \left( 1 - f_{Fermi} \left( \frac{E_C - \Delta E_D - E_F}{k_B T} \right) \right) \quad (4.9)$$

$$N_A^- = N_A \left( 1 - f_{Fermi} \left( \frac{E_F + \Delta E_A - E_V}{k_B T} \right) \right) \quad (4.10)$$

$$f_{Fermi}(\eta) = \frac{1}{1 + \exp \eta} \quad \text{mit} \quad \eta = \frac{E}{k_B T} \quad (4.11)$$

Wenn die Elektronenverteilung auf eine sehr dünne Schicht begrenzt ist, treten Quantisierungseffekte auf. „Sehr dünn“ heißt in diesem Zusammenhang, daß die Ausdehnung der Elektronen in einer Richtung auf eine Länge begrenzt ist, die in der Größenordnung der de Broglie-Wellenlänge  $\lambda = h/p$  [12, 3] liegt, dabei sind  $h$  das Planck'sche Wirkungsquantum und  $p$  der Kristallimpuls der Elektronen. Diese dünnen Schichten treten z.B. bei der in Kap. 5.2 behandelten HEMT-Struktur auf. Es bilden sich diskrete Zustände, die durch die zugehörigen diskreten Wellenfunktionen und die zugehörigen diskreten Energieniveaus gekennzeichnet sind. Die einzelnen Zustände bilden sogenannte quasi zweidimensionale Elektronengase, da sich die Elektronen nur in zwei Raumrichtungen frei bewegen können. Eine besondere Eigenschaft dieser quasi zweidimensionalen Elektronengase ist, daß die Zustandsdichte oberhalb des zugehörigen Energieniveaus konstant ist, während im dreidimensionalen Fall die Zustandsdichte proportional zu  $\sqrt{E - E_C}$  ist [19]. Wenn man viele, energetisch dicht zusammen liegende Zustände hat, gehen die Zustandsdichten ineinander über (Bild 4.2). Es hat sich gezeigt, daß die quantenmechanisch richtige

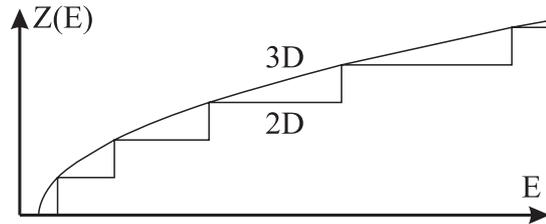


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung der Zustandsdichte  $Z(E)$  für diskrete Zustände in einer „dünnen“ (2D) und einer „dicken“ Schicht (3D). Je breiter die Schicht, desto dichter liegen die Zustände energetisch zusammen und desto mehr ähneln sich die beiden Zustandsdichten. Dabei ist mit der 3D-Zustandsdichte strenggenommen die über die Schicht integrierte Zustandsdichte gemeint, da die beiden aufgetragenen Zustandsdichten sonst unterschiedliche Einheiten hätten.

Berechnung der Elektronendichte wenig Einfluß auf das Ergebnis hat, nämlich die berechnete Piezoresistivität. Daher wurde zugunsten eines einfacheren Modells und einer schnelleren Simulation auf die explizite Berücksichtigung der Quantenmechanik verzichtet und das oben beschriebene semiklassische Modell verwendet.

Um die Poisson-Gleichung zu lösen, müssen die Randbedingungen festgelegt werden. Man geht davon aus, daß weit im Inneren des Halbleiters (im Substrat, der sogenannte rechte Rand) die Bandkanten konstant sind. Ihre Lage ergibt sich aus der Forderung nach Ladungsneutralität. An der Oberfläche des Halbleiters (der sogenannte linke Rand) liegt das Fermi-Niveau etwa in der Mitte der Bandlücke, dieser Effekt wird als „Pinning“ bezeichnet [53]. Das Pinning wird durch die hohe Dichte an Oberflächenzuständen verursacht: Die Oberfläche ist mit einer (negativen) Flächenladung belegt, die für den Sprung des elektrischen Feldes zwischen dem Außen- und dem Innenraum sorgt. Diese Flächenladung wird von Elektronen in Oberflächenzuständen gebildet, die sich energetisch innerhalb der Bandlücke befinden. Da die Zustandsdichte der Oberflächenzustände sehr groß ist, wirkt sich eine Änderung der Oberflächenladung nur sehr wenig auf die Lage des Fermi-Niveaus an der Oberfläche aus. Empirisch wurde gefunden, daß die Leitungsbandkante an der Oberfläche von GaAs ungefähr in der Mitte der Bandlücke liegt, daher lautet die Randbedingung  $E_C(0) - E_F = E_g/2$ .

Die Lösung des Systems der Gleichungen 4.1 bis 4.11 unter den gegebenen Randbedingungen enthält den Bandverlauf  $E_C(x)$  bzw.  $E_V(x)$  und die Ladungsträgerdichten  $n(x)$  und  $p(x)$ . Der spezifische Schichtwiderstand  $r_S$  wird daraus folgendermaßen

berechnet (siehe Gl. 2.42):

$$r_S = \frac{1}{e_0 \left[ \int n(x) \mu_n(x) dx + \int p(x) \mu_p(x) dx \right]} \quad (4.12)$$

$\mu_n$  und  $\mu_p$  sind die elektronischen Beweglichkeiten der Elektronen und der Löcher.  $r_S$  ist isotrop und kann damit als Skalar dargestellt werden (vgl. Kap. 3). Der Einfluß der mechanischen Spannung auf den Schichtwiderstand wird auf die Änderung der Ladungsträgerdichten beschränkt. Änderungen der Beweglichkeit und damit auch Änderungen der effektiven Masse, die bei der „normalen“ Piezoresistivität eine entscheidende Rolle spielen, werden dagegen vernachlässigt, wie im Kapitel 2.4 ausgeführt. Im Rahmen dieser Arbeit wurden nur  $n$ -leitende Strukturen berechnet. In den Simulationen wurde daher der Löcheranteil an der Leitfähigkeit vernachlässigt. In  $p$ -leitenden Strukturen ist es sinnvoll, das Modell weiter zu differenzieren, weil die Entartung der Valenzbandkante (der „leichten“ und „schweren“ Löcher nämlich) unter mechanischer Spannung aufgehoben wird.

Der Einfluß der mechanischen Spannung auf den Bandverlauf und den Schichtwiderstand steckt im zweiten und im vierten Term in Gl. 4.3. Es wird von uniaxialer Spannung in  $y$ -Richtung ausgegangen, deren einzige nichtverschwindende Komponente  $\sigma_{yy}$  ist. Dann ist  $\sigma = \sigma_{yy}$  und  $d = \frac{1}{2}d_{14}$ . Bei uniaxialer Spannung in  $z$ -Richtung ist  $\sigma = \sigma_{zz}$  und  $d = -\frac{1}{2}d_{14}$ , d.h. man erhält das entgegengesetzte Vorzeichen für die Widerstandsänderung. Die Widerstandsänderung ist sowohl von  $\sigma$  (PER1-Effekt, Term IV in Gl. 4.3), als auch von  $\sigma'$  (PER2-Effekt, Term II in Gl. 4.3) abhängig, weiterhin ist die Widerstandsänderung nicht abhängig von der Richtung des Stromflusses in der  $y/z$ -Ebene, wohl aber von der Richtung der mechanischen Spannung (vgl. Kap. 3). Daher ist es nicht sinnvoll, die erhöhte Piezoresistivität durch einen piezoresistiven Tensor  $\bar{\pi}$  zu beschreiben. Statt dessen wurden die Koeffizienten  $\Pi_1$  und  $\Pi_2$  definiert, die den PER1- und den PER2-Effekt beschreiben:

$$\Pi_1 = \left[ \frac{\partial(r_S/r_{S0})}{\partial\sigma} \right]_{\sigma'=0} \quad (4.13)$$

$$\Pi_2 = \left[ \frac{\partial(r_S/r_{S0})}{\partial\sigma'} \right]_{\sigma=0} \quad (4.14)$$

$r_{S0}$  ist dabei der Schichtwiderstand bei  $\sigma = 0$  und  $\sigma' = 0$ . Es wurde Großschreibung für  $\Pi_1$  und  $\Pi_2$  gewählt, um die Koeffizienten vom üblichen piezoresistiven Tensor  $\bar{\pi}$  abzusetzen. Es handelt sich um skalare Größen, die Richtungsabhängigkeit steckt bei vorgegebener Geometrie in  $d$  und  $\sigma$ .  $\Pi_1$  hat die gleiche Einheit wie die normale Piezoresistivität ( $\text{Pa}^{-1}$ ), während  $\Pi_2$  die Einheit  $\text{m}/\text{Pa}$  bzw.  $\mu\text{m}/\text{MPa}$  hat. Stellt man sich eine Schichtstruktur vor, die aus homogenen Schichten und abrupten Übergängen zwischen den Schichten besteht, enthält  $\Pi_1$  den Einfluß der Grenzflächen, während

$\Pi_2$  den Einfluß des Volumens auf den Schichtwiderstand enthält. Da kleine Änderungen  $\Delta r_S$  des Schichtwiderstandes betrachtet werden, genügt es, die Abhängigkeit linear anzusetzen.

In einem mikromechanischen Bauelement sind in der Regel sowohl  $\sigma \neq 0$  als auch  $\sigma' \neq 0$ . Um die Piezoresistivität in einem Bauelement durch einen einzigen Koeffizienten darzustellen, muß also eine feste Beziehung zwischen  $\sigma$  und  $\sigma'$  bestehen. Wie in Kap. 3 motiviert wurde, ist es sinnvoll  $\sigma' = \sigma/D$  (Gl. 3.14) anzunehmen, so wie es im Cantilever der Dicke  $D$  der Fall ist. Unter dieser Voraussetzung können die beiden PER-Effekt zur wirksamen Piezoresistivität  $\Pi_3$  zusammengefaßt werden:

$$\Pi_3 = \Pi_1 + \frac{\Pi_2}{D} = \left[ \frac{\partial(r_S/r_{S0})}{\partial\sigma} \right]_{\sigma'=\sigma/D} \quad (4.15)$$

Die wirksame Piezoresistivität entspricht also derjenigen, die man bei einem Experiment mit einem Cantilever der Dicke  $D$  messen wird.

## 4.2 Numerische Umsetzung des erweiterten Modells zur Berechnung der erhöhten Piezoresistivität

Ausgangspunkt jeder Simulationsrechnung ist die Schichtstruktur. Jede Struktur besteht aus verschiedenen Schichten und jede Schicht hat gewisse Eigenschaften, die in Material- und Schichteigenschaften unterteilt sind. Materialeigenschaften sind  $E_g, \Delta E_C, \Delta E_D, \Delta E_A, \epsilon_r, m_n^*, m_p^*, d_{14}$  und  $\mu_n$  ( $\mu_p$  wird nicht benötigt, da von  $n$ -leitenden Schichten ausgegangen wird). Schichteigenschaften sind die Dicke der Schicht sowie die Dotierungen  $N_D$  und  $N_A$ . Außerdem wird die Temperatur vorgegeben. Jede Schicht wird in Punkten mit äquidistantem Abstand  $\Delta$  abgetastet. An jedem dieser Punkte werden die folgenden Größen berechnet:  $E_C, E_V, n, p, N_D^+, N_A^-, \rho$  und  $\rho_{Piezo}$ .

Wenn die Anfangsbedingungen vorgegeben sind, läßt sich die Integration numerisch durchführen. Dazu wurde der Numerov-Algorithmus gewählt, der auf einer Reihenentwicklung beruht. Es ist:

$$\Phi(x + \Delta) = \Phi(x) + \Delta\Phi'(x) + \frac{1}{2}\Delta^2\Phi''(x) + \dots \quad (4.16)$$

$$\Phi(x - \Delta) = \Phi(x) - \Delta\Phi'(x) + \frac{1}{2}\Delta^2\Phi''(x) \mp \dots \quad (4.17)$$

Wenn man von den Grenzflächen absieht, dann sind die Terme III und IV in Gl. 4.3 identisch Null und die zweite Ableitung von  $\Phi$  ist gegeben durch:

$$\Phi''(x) = \frac{\epsilon_0}{\epsilon_0 \epsilon_r} [\rho(x) + \rho_{Piezo}(x)] \quad \text{mit} \quad \rho_{Piezo} = -d\epsilon_r \sigma \quad (4.18)$$

Durch Summieren von Gl. 4.16 und 4.17, Einsetzen von Gl. 4.18 und Vernachlässigung von Termen vierter und höherer Ordnung ergibt sich:

$$\Phi(x + \Delta) = 2\Phi(x) - \Phi(x - \Delta) + \Delta^2 \frac{\epsilon_0}{\epsilon_0 \epsilon_r} [\rho(x) + \rho_{Piezo}(x)] \quad (4.19)$$

Es handelt sich um ein einstufiges Zweischrittverfahren der Fehlerordnung 4, da nur Größen in 4. und höherer Ordnung von  $\Delta$  vernachlässigt werden [51]. Der Numerov-Algorithmus ist also gegenüber z.B. einem Runge-Kutta-Verfahren gleichzeitig sehr effizient und sehr genau. Diese Vorteile werden dadurch erreicht, daß der Algorithmus dem Typ der Differentialgleichung und der äquidistanten Schrittweite sehr gut angepaßt ist.

An den Grenzflächen der Schichten können Sprünge in der Ableitung von  $\Phi$  auftreten. Außerdem kann die Diskretisierungsweite in den verschiedenen Schichten unterschiedlich sein. Durch Verallgemeinerung des Verfahrens auf Grenzflächen und unterschiedliche Schrittweiten erhält man:

$$\begin{aligned} \Phi(x_G + \Delta_1) &= \frac{\Delta_1 + \Delta_2}{\Delta_2} \Phi(x_G) - \frac{\Delta_1}{\Delta_2} \Phi(x_G - \Delta_2) + \\ &\Delta_1 S + \frac{1}{2} \Delta_1^2 \frac{\rho + \rho_{Piezo}}{\epsilon_0 \epsilon_r}(x_G^+) + \frac{1}{2} \Delta_1 \Delta_2 \frac{\rho + \rho_{Piezo}}{\epsilon_0 \epsilon_r}(x_G^-) \end{aligned} \quad (4.20)$$

Dabei befindet sich die Grenzfläche bei  $x_G$ ,  $\Delta_1$  und  $\Delta_2$  sind die Weite der Diskretisierung links und rechts der Grenzfläche,  $S$  ist der Sprung von  $\Phi'$  bei  $x_G$  und  $x_G^-$  bzw.  $x_G^+$  bezeichnet den linken bzw. den rechten Rand der Grenzfläche. Für  $\Delta_1 = \Delta_2$  und  $S = 0$  geht Gl. 4.20 natürlich in Gl. 4.19 über.  $S$  ergibt sich aus den Termen III und IV der Gl. 4.3 zu:

$$S = \Phi'(x_G^+) - \Phi'(x_G^-) = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \frac{\Delta \epsilon_r}{\epsilon_r(x_G^+)}} \left[ \Phi'(x_G^-) \left( 1 - \frac{1}{2} \frac{\Delta \epsilon_r}{\epsilon_r(x_G^-)} \right) - \frac{\Delta d e_0 \sigma}{\epsilon_0} \right] \quad (4.21)$$

Dabei ist  $\Delta \epsilon_r = \epsilon_r(x_G^+) - \epsilon_r(x_G^-)$  und  $\Delta d_S = d_S(x_G^+) - d_S(x_G^-)$ .

Um die Poisson-Gleichung zu integrieren, müssen die Anfangsbedingungen am „linken Rand“, nämlich  $\Phi(0)$  und  $\Phi'(0)$  bekannt sein, d.h. in der Diskretisierung die beiden ersten Punkte  $\Phi(0)$  und  $\Phi(\Delta)$ . Tatsächlich ist von diesen beiden Bedingungen aber nur die erste bekannt. Zusätzlich sind  $\Phi$  und  $\Phi'$  am „rechten Rand“ bekannt.

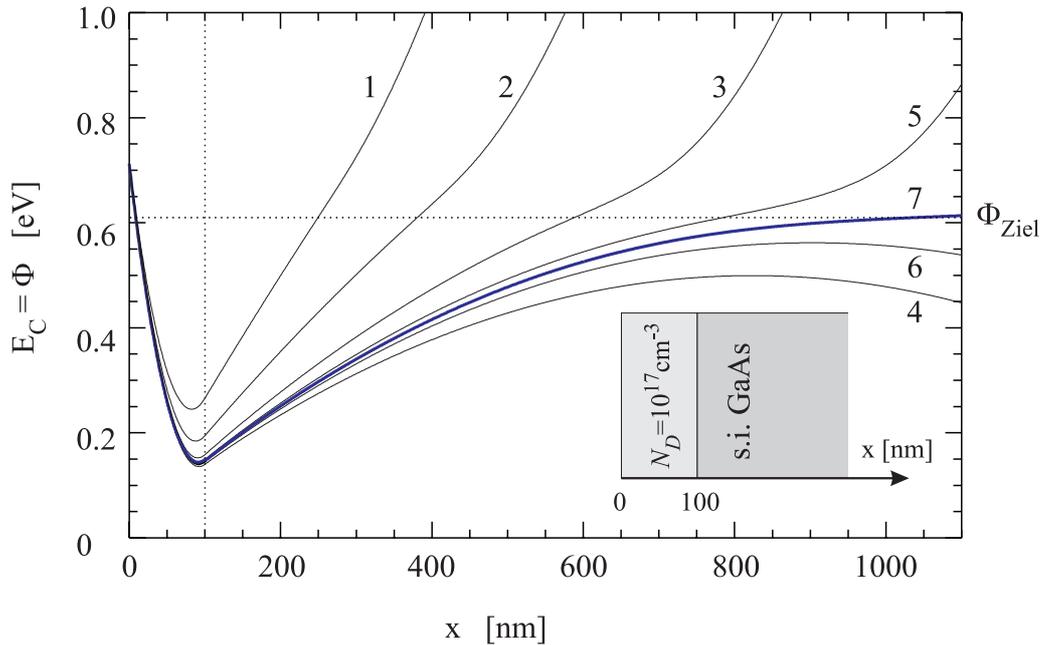


Abbildung 4.3: Bei der Integration der Poisson-Gleichung 4.3 besteht ein monotoner Zusammenhang zwischen der Startbedingung  $\Phi(0)'$  und  $\Phi(x)$  für beliebige  $x > 0$ . Daher kann die richtige Startbedingung durch Intervallschachtelung gefunden werden. Die Energien sind relativ zum Fermi-Niveau angegeben. Weitere Erläuterungen siehe Text.

Diese Randbedingungen können aber im Algorithmus Gl. 4.19 und 4.20 nicht vorausgesetzt werden. Um die gewünschten rechten Randbedingungen zu erhalten, muß die richtige linke Randbedingung  $\Phi'(0)$  gewählt werden. Glücklicherweise ist es so, daß ein streng monotoner Zusammenhang besteht zwischen der Startbedingung  $\Phi'(0)$  und dem Potential  $\Phi(x)$  für beliebige  $x > 0$ . Daher kann die Startbedingung durch Intervallschachtelung gefunden werden. Wird nämlich  $\Phi'(0)$  zu groß gewählt, wird  $\Phi$  am rechten Rand zu groß und umgekehrt, wird  $\Phi'(0)$  zu klein gewählt, wird  $\Phi$  am rechten Rand zu klein.

Diese Intervallschachtelung wird in Bild 4.3 an einer einfachen Struktur dargestellt. Die Struktur besteht aus einer 100 nm dicken GaAs-Schicht mit einer  $n$ -Dotierung in Höhe von  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  auf semiisolierendem GaAs-Substrat. Die Struktur ist im Einschub von Bild 4.3 dargestellt. Es wird Raumtemperatur ( $T = 300 \text{ K}$ ) vorgegeben. Die genauen Materialparameter sind hier nicht wichtig, sie können den Tab. 5.1 und 5.2 entnommen werden. Wichtig ist aber, daß das semiisolierende Material eine große Anzahl tiefer Donatoren und eine kleinere Menge flacher Akzeptoren

enthält<sup>1</sup>. Die tiefen Störstellen im semiisolierenden Material sorgen dafür, daß das Fermi-Niveau ungefähr in der Mitte der Bandlücke liegt und damit die Dichte der freien Ladungsträger sehr klein wird. Die gepunktete Linie stellt diese Lage  $\Phi_{Ziel}$  der Leitungsbandkante tief im Substrat dar. Sie wird durch die Forderung nach Ladungsneutralität errechnet. Da es sich um eine GaAs-Homostuktur handelt, tritt kein Leitungsband-Offset auf und  $E_C$  ist identisch mit  $\Phi$ . Die dicke durchgezogene Linie stellt den „richtigen“ Leitungsbandverlauf relativ zum Fermi-Niveau dar, er ist das Ergebnis der Intervallschachtelung. Man erkennt das pinning an der Oberfläche ( $x = 0$ ). Im  $n$ -dotierten Bereich ( $0 < x < 100$  nm) ist  $E_C$  positiv gekrümmt (d.h.  $\Phi'' > 0$ ), weil es in diesem Bereich eine positive Raumladung gibt, die durch die ionisierten (flachen) Donatoren erzeugt wird. Trotz  $n$ -Dotierung ist die Elektronendichte vernachlässigbar klein, da der Abstand  $E_C - E_F$  überall wesentlich größer als  $k_B T$  ist. Im Bereich  $100 \text{ nm} < x \lesssim 1000 \text{ nm}$  ist die Krümmung von  $E_C$  negativ, es muß also eine negative Raumladung vorliegen. Diese wird durch die  $p$ -Hintergrunddotierung des Substrates verursacht. Die flachen Störstellen sind nahezu vollständig ionisiert. Bei  $x \lesssim 1000 \text{ nm}$  liegt das Leitungsband so hoch, daß ein Teil der tiefen Donatoren ionisiert wird und die Ladung der flachen Akzeptoren kompensiert.

Die durchgezogenen Linien 1 bis 7 sind Leitungsbandverläufe, die in den aufeinanderfolgenden Schritten der Intervallschachtelung berechnet wurden<sup>2</sup>. Die Integration wird dann abgebrochen, wenn im Substrat  $\Phi < \Phi_{Ziel}$  und  $\Phi' < 0$  oder wenn im Substrat  $\Phi > \Phi_{Ziel}$  und  $\Phi' > 0$ .  $\Phi_{Ziel}$  ist die Lage des Potentials weit innerhalb Substrates und ist dort ortsunabhängig. In Bild 4.3 sind die Leitungsbandverläufe zur Veranschaulichung komplett dargestellt. Ferner wird die Integration abgebrochen, wenn der Betrag von  $\Phi$  ein sinnvolles Maß (10 eV) überschreitet. Die Intervallschachtelung ihrerseits wird abgebrochen, wenn sich der ergebende Schichtwiderstand  $r_S$  wenig genug vom Schichtwiderstand der vorhergehenden Iteration unterscheidet. Diese Grenze wird bei  $\frac{1}{3}$  der geforderten Genauigkeit des Schichtwiderstandes angesetzt.

Da die Widerstandsänderungen sehr klein sein können, ist es wichtig, die numerische Genauigkeit der Rechnung zu kennen. Die Genauigkeit der Berechnung von  $r_S$  muß deutlich besser sein als die Abweichungen in  $r_S$ , die sich durch die Piezoresistivität ergeben. Die Genauigkeit wird dadurch abgeschätzt, daß die Rechnung mit halbiertes Schrittweite erneut durchgeführt wird. Dadurch erhält man zwei Werte

---

<sup>1</sup>„Tiefe“ Störstellen liegen weit weg von den Bandkanten, d.h. mehr in der Mitte der Bandlücke, während „flache“ Donatoren sehr dicht unterhalb der Leitungsbandkante und „flache“ Akzeptoren sehr dicht oberhalb der Valenzbandkante liegen.

<sup>2</sup>Die Startbedingungen der Iterationen 1 bis 7 waren  $\Phi'(0) = -11.967, -12.323, -12.501, -12.412, -12.456, -12.434$  und  $-12.445 \text{ eV}/\mu\text{m}$

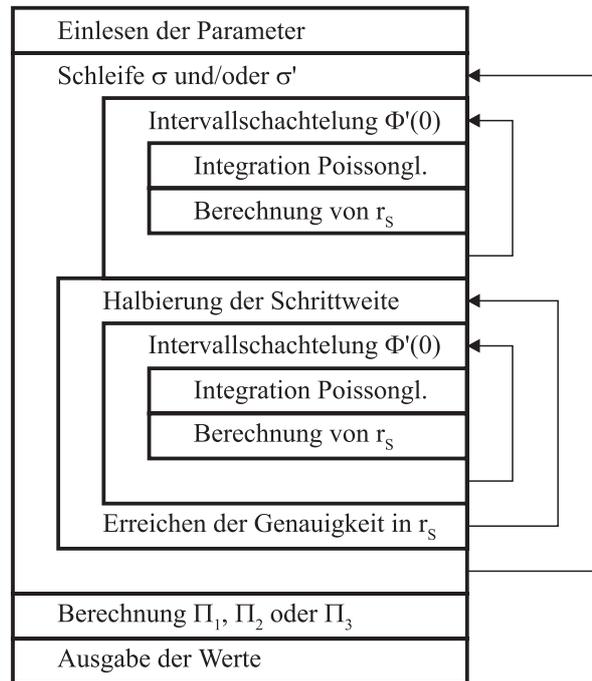


Abbildung 4.4: Schematisches Ablaufdiagramm des Programms „piezo“.

für  $r_S$  und die Differenz der zwei Werte ist der Schätzwert der Genauigkeit. Falls die Genauigkeit nicht ausreicht, wird die Schrittweite weiter verkleinert. Obwohl das Modell den Schichtwiderstand  $r_S$  absolut nicht auf einige Prozent genau berechnen kann (siehe Bemerkung oben), ist es möglich, sehr kleine Änderungen in  $r_S$  und damit die Koeffizienten  $\Pi_1$ ,  $\Pi_2$  und  $\Pi_3$  zu berechnen.

Wenn die richtigen Startbedingungen gefunden sind, ist durch die Integration der Bandverlauf und die Elektronendichte als Funktion von  $x$  bekannt. Daraus wird nach Gl. 4.12 der spezifische Widerstand  $r_S$  berechnet. Diese Prozedur wird für verschiedene Werte für  $\sigma$  und/oder  $\sigma'$  wiederholt. So erhält man  $r_S$  als Funktion von  $\sigma$  bzw.  $\sigma'$ . Durch lineare Regression über einen kleinen Bereich erhält man  $\Pi_1$  bzw.  $\Pi_2$  und damit auch  $\Pi_3$  (Gl. 4.13, 4.14 und 4.15).

Der beschriebene Algorithmus wurde im Programm „piezo“ implementiert, das in C++ geschrieben wurde. Das Ablaufdiagramm des Programms ist in Bild 4.4 dargestellt. Die Eingabe der Material- und Schichtparameter sowie der Optionen und die Ausgabe der Ergebnisse erfolgt durch Einlesen bzw. Ausgabe von ASCII-Dateien.

Es gibt eine Situation, in welcher der Algorithmus nicht konvergiert, nämlich wenn sich die Größen über große Strecken nicht ändern (z.B. Volumenmaterial, Substrat). Das läßt sich anschaulich am Beispiel einer homogen  $n$ -dotierten Schicht erklären. Die Lage der Leitungsbandkante ergibt sich daraus, daß die Dichten der Elektronen und der ionisierten Donatoren gleich sind und so die Raumladung Null wird. Die Leitungsbandkante ist konstant. Führt man in dieser Situation den Algorithmus durch, verursacht eine minimal erhöhte Leitungsbandkante eine kleinere Elektronendichte, das führt zu positiver Raumladung, die wiederum eine positivere Krümmung des Leitungsbandes erzeugt, welche die Leitungsbandkante erhöht usw., die Leitungsbandkante läuft gegen  $+\infty$ . Entsprechend kann man überlegen, daß eine minimal erniedrigte Leitungsbandkante dazu führt, daß diese gegen  $-\infty$  läuft. Dieses Verhalten ist auch gut in Bild 4.3 zu erkennen. Aus diesem Grund wurde die Abbruchbedingung für die Integration der Poisson-Gleichung in der beschriebenen Art und Weise gewählt. Außer im Substrat kommen größere Volumenschichten in den durchgeführten Simulationsrechnungen nicht vor, da nur dünne Schichten betrachtet werden. Wenn man mit dem Algorithmus Strukturen berechnen will, die größere Volumenschichten enthalten, muß man die Struktur so in Unterstrukturen aufsplitten, daß die Volumenschichten immer am Rand der jeweiligen Unterstruktur liegen. Innerhalb der Volumenschichten ergeben sich die gesuchten Größen aus der Forderung nach Neutralität und sind örtlich konstant.

# Kapitel 5

## Ergebnisse der Simulationsrechnungen

### 5.1 Galliumarsenid Homostruktur

Um mit einem einfachen Fall zu beginnen, wird zunächst die Simulation einer GaAs-Homostruktur dargestellt. Ihre Schichtparameter sind in Tab. 5.1 und ihre Materialparameter in Tab. 5.2 angegeben. Diese Struktur wird als Struktur A bezeichnet. Da die Dichte der Dotieratome im Verhältnis zur Dichte der Gitteratome insgesamt immer sehr klein ist, hat die Dotierung keinen Einfluß auf die Piezoelektrizität  $\vec{d}$ . Dadurch ist der Term IV in Gl. 4.3 identisch Null<sup>1</sup>. Das bedeutet, daß in dieser Struktur der PER1-Effekt nicht auftritt und man den ungestörten PER2-Effekt untersuchen kann, der durch den Term II in Gl. 4.3 verursacht wird.

Die in Tab. 5.2 angegebenen Beweglichkeiten sind nach [45] abgeschätzt. Das semiisolierende (s.i.) GaAs des Substrates enthält tiefe Störstellen von Typ EL2, deren Dichte als  $1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  und deren Tiefe als 0.67 eV unter der Leitungsbandkante angenommen wird. Zusätzlich wird angenommen, daß das s.i. GaAs eine Hintergrunddotierung enthält, die aus flachen Akzeptoren der Dichte  $1 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  besteht [50]. In Tab. 5.2 sind neben den Materialparametern von GaAs auch diejenigen von  $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$  und AlAs angegeben. Diese Daten werden erst in den Kapiteln 5.2 und 5.3 benötigt. Die Leitungsband-Offsets  $\Delta E_C$  sind [58] entnommen, die restlichen Materialdaten entstammen [1].

---

<sup>1</sup>Aus der gleichen Überlegung folgt, daß die relative Dielektrizitätskonstante  $\epsilon_r$  unabhängig von der Dotierung ist und somit der Term III in Gl. 4.3 ebenfalls identisch Null ist.

Material	Dicke [nm]	$N_D$ [cm <sup>-3</sup> ]	$N_A$ [cm <sup>-3</sup> ]
GaAs	200	-	-
GaAs	22.3	$1 \cdot 10^{17}$	-
GaAs	400	-	-
GaAs	4.6	$1 \cdot 10^{17}$	-
GaAs	1000	-	-
s.i. GaAs	Substrat	$1 \cdot 10^{16}$	$1 \cdot 10^{15}$

Tabelle 5.1: Schichtparameter der Struktur A.  $N_D$  und  $N_A$  sind die Dichte der Donatoren bzw. der Akzeptoren. Das GaAs der oberen fünf Schichten unterscheidet sich vom semiisolierenden (s.i.) GaAs des Substrates vor allem durch die Tiefe der Störstellen (siehe Tab. 5.2).

Die Struktur wurde an der TU Darmstadt von Herrn J. Sigmund am Lehrstuhl von Prof. Hartnagel epitaktisch hergestellt. Messungen an dieser Probe werden in Kap. 6 vorgestellt.

Das piezoresistive Verhalten bei Raumtemperatur soll anhand des Bildes 5.1 diskutiert werden. In Teil a) ist der Verlauf der Leitungsbandkante für die drei Werte  $\sigma' = -2, 0$  und  $+2$  MPa/ $\mu\text{m}$  dargestellt. Diese Darstellung zeigt, wie der Bandverlauf durch den Term II in Gl. 4.3 verändert wird. Die Werte für  $\sigma'$  wurden sehr groß gewählt, um den Einfluß des PER2-Effektes auf die Struktur zu verdeutlichen. Das Fermi-Niveau  $E_F$  wurde als Nullpunkt gewählt. Die senkrechten, punktierten Linien zeigen die Lage der Grenzflächen.

Zunächst wird der Bandverlauf ohne mechanische Spannung (mittlere Linie) diskutiert. Es bildet sich eine Art Kanal zwischen den beiden  $n$ -dotierten Schichten bei  $x \approx 200$  nm und  $x \approx 627$  nm. Die dotierten Schichten bewirken (bei grober Betrachtung) einen Knick im Leitungsband. Die „Stärke des Knicks“, d.h. die Änderung der inneren Feldstärke, ist proportional der Flächendotierung. Unter der Flächendotierung versteht man die gesamte Anzahl der Dotieratome in einer Schicht pro Flächeneinheit. In diesem Fall hat die obere dotierte Schicht (bei  $x \approx 200$  nm) die Flächendotierung  $2.23 \cdot 10^{11}$  cm<sup>-2</sup> und die untere dotierte Schicht (bei  $x \approx 627$  nm) die Flächendotierung  $4.6 \cdot 10^{10}$  cm<sup>-2</sup>. Daher ist der Knick der Leitungsbandkante an der oberen Dotierung stärker als der Knick an der unteren Dotierung. Bei  $x = 0$  befindet sich die Oberfläche des Halbleiters. Man erkennt das pinning des Leitungsbandes bei  $E_C - E_F = E_g/2 = 0.712$  eV. Im Substrat wird die Lage der Leitungsbandkante durch das Niveau der tiefen Störstellen ( $\Delta E_D = 0.67$  eV) und das Verhältnis von tiefen ( $n$ -) zu flachen ( $p$ -) Störstellen festgelegt, in der vorliegenden Struktur ist im Substrat  $E_C - E_F = 0.613$  eV.

Größe	Einheit	GaAs	s.i. GaAs	Al <sub>0.4</sub> Ga <sub>0.6</sub> As	AlAs
$E_g$	[eV]	1.424	1.424	1.923	2.168
$\Delta E_C$	[eV]	0	0	0.391	0.18
$\Delta E_D$	[meV]	5.2	0.67	9.5	20
$\Delta E_A$	[meV]	48.5	48.5	64.3	102
$\epsilon_r$	[1]	13.18	13.18	11.93	10.06
$m_n^*$	$m_0$	0.067	0.067	0.100	0.150
$m_p^*$	$m_0$	0.642	0.642	0.706	0.804
$d_{14}$	[10 <sup>-12</sup> As/N]	-2.69	-2.69	-3.14	-3.82
$\mu_{77}$ (1)	[cm <sup>2</sup> /Vs]	$2.3 \cdot 10^5$	$2.3 \cdot 10^5$	4800	1200
$\mu_{77}$ (2)	[cm <sup>2</sup> /Vs]	6500	6500	800	800
$\mu_{300}$ (1)	[cm <sup>2</sup> /Vs]	9600	9600	1300	800
$\mu_{300}$ (2)	[cm <sup>2</sup> /Vs]	4800	4800	800	500

Tabelle 5.2: Eigenschaften der verwendeten Materialien. Es sind  $E_g$  die Bandlücke,  $\Delta E_C$  der Leitungsband-Offset gegen GaAs (Gl. 4.1),  $\Delta E_D$  und  $\Delta E_A$  die Abstände der Störstellenniveaus von den Bandkanten (Bild 4.1),  $\epsilon_r$  die relative Dielektrizität,  $m_n^*$  und  $m_p^*$  die effektiven Massen der Elektronen und der Löcher, die für die Berechnung der Entartungsgrade  $N_C$  und  $N_V$  der Bandkanten benötigt werden (Gl. 4.8),  $d_{14}$  der Koeffizient der Piezoelektrizität und  $\mu_{77}$  bzw.  $\mu_{300}$  sind die elektronischen Beweglichkeiten der Elektronen bei  $T = 77$  K bzw. bei  $T = 300$  K. Die (1) bei den Beweglichkeiten steht für undotiertes oder schwach dotiertes Material, die (2) für dotiertes Material. Dabei ist beim GaAs eine Dotierung von  $1 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  und beim AlGaAs und beim AlAs eine Dotierung von  $2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  gemeint.

Man kann sich die Wirkung der mechanischen Spannung (genauer gesagt der Ableitung der mechanischen Spannung) so vorstellen, daß in der Poisson-Gleichung 4.3 neben der normalen, makroskopischen Raumladung  $\rho$  eine zusätzliche, mechanisch induzierte piezoelektrische Raumladung  $\rho_{Piezo}$  auftritt (Gl. 3.13). Diese zusätzliche Raumladung bewirkt eine zusätzliche Krümmung des Leitungsbandes. Man erkennt, daß die Lage des Leitungsbandes an der Oberfläche der Struktur und weit im Inneren des Substrates durch die mechanische Spannung nicht bzw. nur wenig beeinflusst wird. Größere Änderungen treten im Bereich dazwischen auf. In einer vorläufigen Betrachtung wird angenommen, daß Änderungen des Bandverlaufes allein durch die piezoelektrische Raumladung und nicht durch die Änderung der normalen, makroskopischen Raumladung verursacht wird. Positives  $\sigma'$  verursacht eine positive piezoelektrische Raumladung<sup>2</sup> (unterer Graph in Bild 5.1 a)). Das führt über Gl. 4.3 zu

<sup>2</sup>Das negative Vorzeichen in Gl. 3.13 hebt sich in der betrachteten Geometrie mit dem ebenfalls negativen Vorzeichen von  $d = \frac{1}{2}d_{14}$  (Tab. 5.2) auf.

positiverer Krümmung des Leitungsbandes. Ob dadurch eine Absenkung oder Anhebung des Leitungsbandes gegenüber dem Fall ohne mechanische Spannung erzielt wird, hängt von den Randbedingungen ab. Im vorliegenden Fall ist die Lage des Leitungsbandes an den Rändern (nahezu) fix, daher erzielt die zusätzliche, positive Krümmung eine Absenkung des Leitungsbandes.

Die Elektronendichte reagiert sehr empfindlich auf die Lage des Leitungsbandes (Gl. 4.6), was in Bild 5.1 b) zu sehen ist. Das durch  $\sigma' > 0$  tiefer liegende Leitungsband bewirkt eine höhere Elektronendichte und damit eine Abnahme des Schichtwiderstandes. Dieses ist die prinzipielle Erklärung des PER2-Effektes. Die Änderung der Elektronendichte kann größer sein als die durch die Elementarladung dividierte piezoelektrische Raumladung, die in Bild 5.1 als gestrichelte Linie eingezeichnet ist. Bei  $\sigma' = -2 \text{ MPa}/\mu\text{m}$  beträgt die durch die Elementarladung dividierte piezoelektrische Raumladung hier  $-2.2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  und bei  $\sigma' = +2 \text{ MPa}/\mu\text{m}$  beträgt sie  $-2.2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ .

Die Verschiebung der Leitungsbandkante unter dem Einfluß mechanischer Spannung wurde bisher unter der Annahme erklärt, daß die normale makroskopische Raumladung  $\rho$  unverändert bleibt. Das ist natürlich im allgemeinen nicht richtig. Es ist ja gerade gewünscht, die Elektronendichte zu ändern und diese geht direkt in die Raumladungsdichte ein (Gl. 4.4). In Bild 5.1 c) ist die durch die Elementarladung dividierte makroskopische Raumladung dargestellt. Im Kanal wird die makroskopische Raumladung gerade um den Beitrag der geänderten Elektronendichte erhöht bzw. erniedrigt. Auch die Besetzung der Donatoren mit Elektronen verändert sich zum Teil. Eine positive piezoelektrische Raumladungsdichte führt zu höherer Elektronendichte und damit zu niedrigerer makroskopischer Raumladungsdichte. Das bedeutet, daß die gewünschte Änderung in der Elektronendichte der Ursache, nämlich der Verschiebung der Leitungsbandkante, entgegenwirkt. Es besteht eine Art Gegenkopplung. Die Ursachenkette und die Gegenkopplung sind in Bild 5.3 schematisch dargestellt. Die Verschiebung der Leitungsbandkante ist wegen der Gegenkopplung nicht so groß, wie es sich allein unter Berücksichtigung der piezoelektrischen Raumladung ergeben würde. Diese Gegenkopplung ist um so größer, je größer die Elektronendichte ist. Man sieht in Bild 5.1 a), daß die Verschiebung des Leitungsbandes im Kanal nach oben (für negatives  $\sigma'$ ) größer ist, als die Verschiebung nach unten (durch positives  $\sigma'$ ). Der Gegenkopplungsmechanismus zeigt sich auch in der Tatsache, daß die Verschiebung der Leitungsbandkante sehr groß sein kann, wenn die Elektronendichte sehr klein ist (In diesem Fall ist die Verschiebung am größten bei  $x \approx 1200 \text{ nm}$ ). Der Grund für die Zunahme der Gegenkopplung mit zunehmender Elektronendichte ist folgender: Die piezoelektrische Raumladungsdichte bewirkt zunächst eine feste Verschiebung des Leitungsbandes. Diese Verschiebung

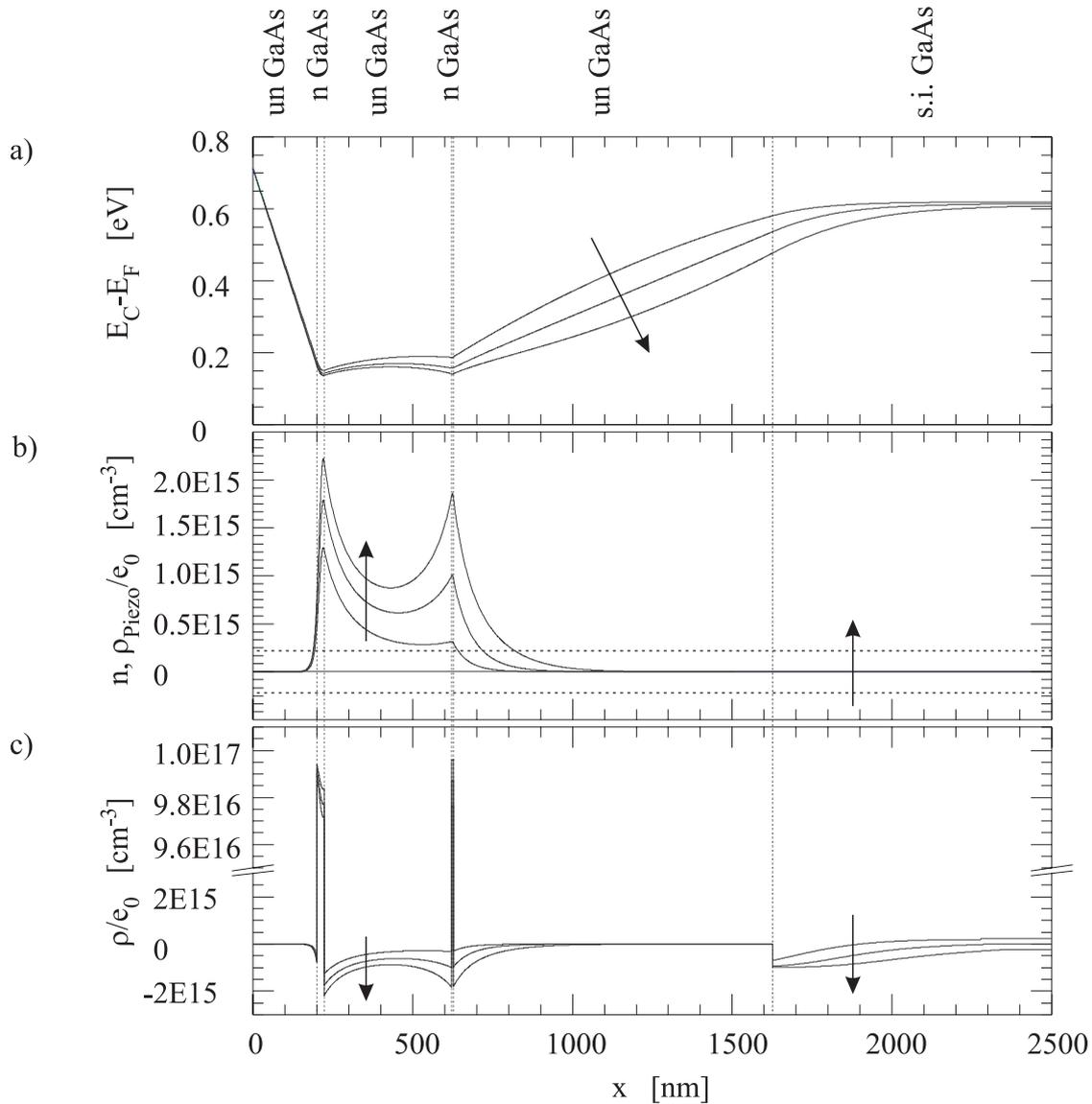


Abbildung 5.1: Struktur A bei Raumtemperatur ( $T = 300$  K). Dargestellt sind in a) die Lage der Leitungsbandkante  $E_C$  relativ zum Fermi-Niveau  $E_F$ , in b) die Elektronendichte  $n$  (durchgezogene Linie) sowie die durch die Elementarladung dividierte piezoelektrische Raumladung ( $\rho_{Piezo}/e_0$ , gestrichelte Linien) und in c) die durch die Elementarladung dividierte makroskopische Raumladung ( $\rho/e_0$ ). Die Division der Raumladungen durch  $e_0$  bewirkt, daß sie direkt mit den Teilchendichten ( $n, N_D, N_A$ ) verglichen werden können. Alle Größen sind für  $\sigma' = -2, 0$  und  $+2$  MPa/ $\mu\text{m}$  dargestellt, dabei deuten die Pfeile jeweils die Richtung an, in der  $\sigma'$  zunimmt. Die senkrechten, gepunkteten Linien stellen die Grenzflächen zwischen den Schichten dar. Oben im Bild ist angedeutet, welche Schichten sich wo befinden.

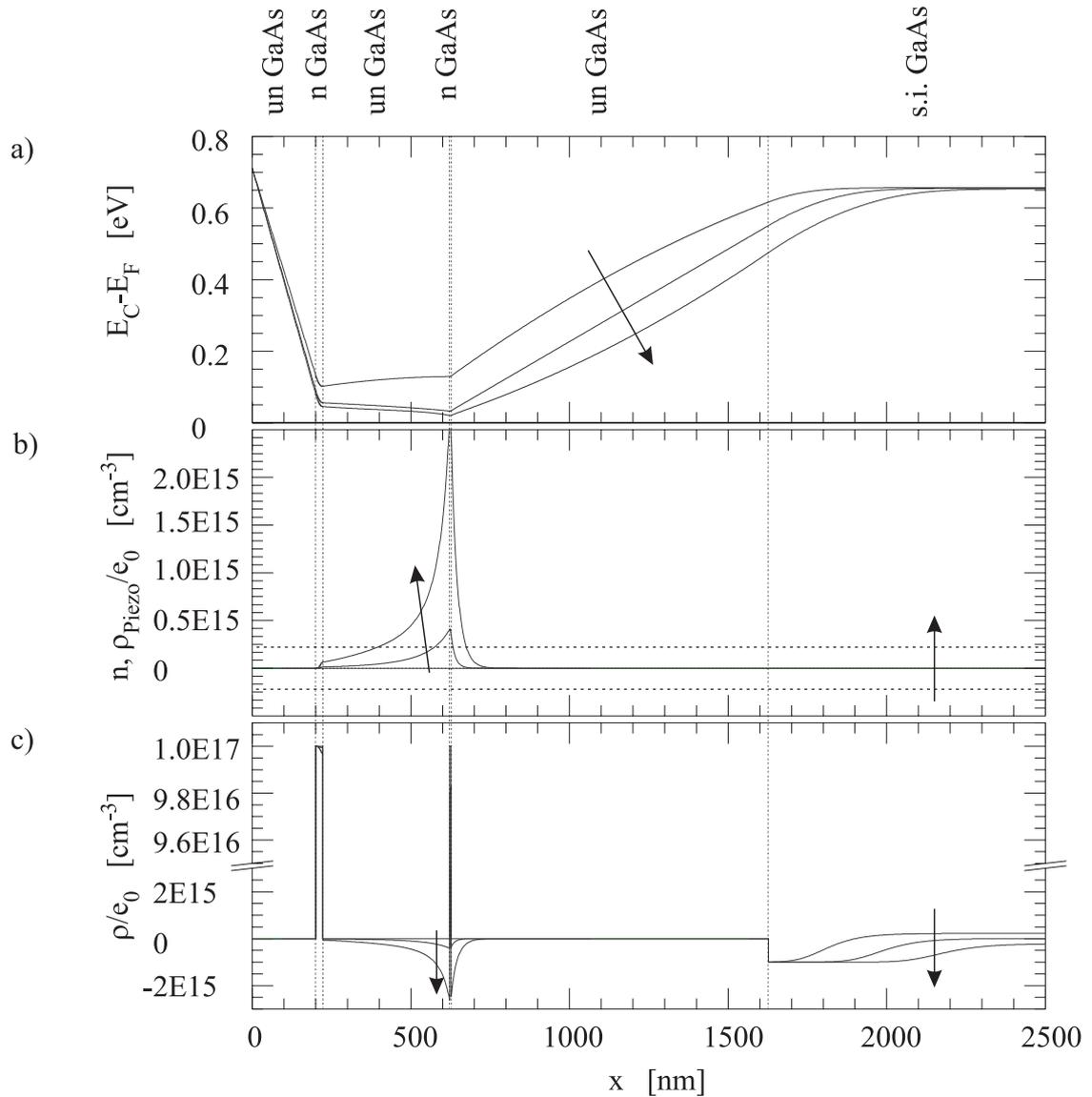


Abbildung 5.2: Zu Bild 5.1 analoge Darstellung für  $T = 77$  K. Die Werte für  $\sigma'$  sind in diesem Bild ebenfalls -2, 0 und 2 MPa/ $\mu\text{m}$  (jeweils in Pfeilrichtung). Die Elektronendichte und damit der Schichtwiderstand werden bei tiefen Temperaturen deutlich stärker beeinflusst als bei Raumtemperatur.

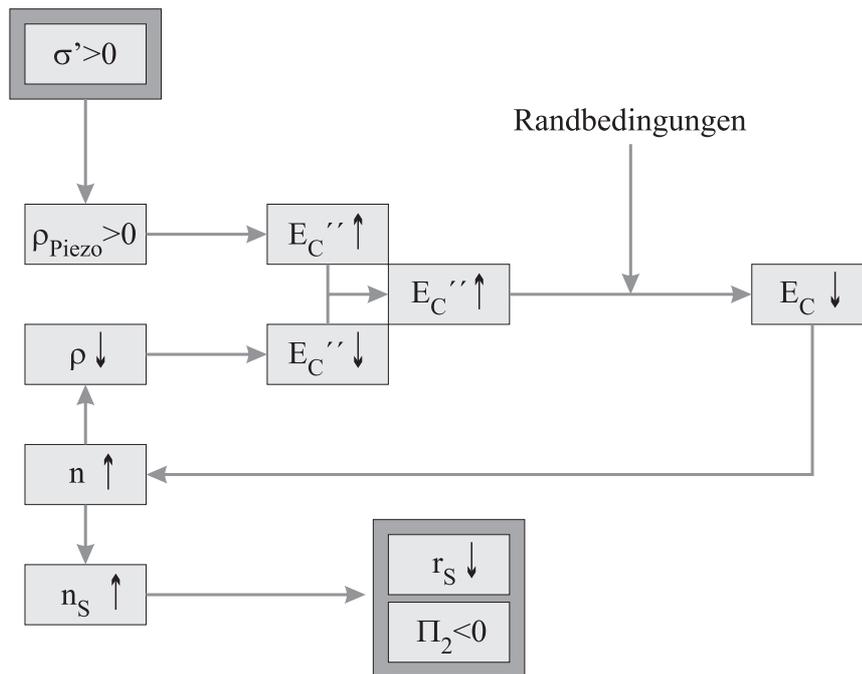


Abbildung 5.3: Schematische Darstellung der Ursachenkette und der Gegenkopplung beim PER2-Effekt.

bewirkt eine Änderung der Elektronendichte, die um so größer ist, je kleiner  $E_C - E_F$  (Gl. 4.6) ohne mechanische Spannung ist, d.h. je größer die Elektronendichte ohne mechanische Spannung ist. Eine große Änderung der Elektronendichte und damit der makroskopischen Raumladung wirkt der ursprünglichen Verschiebung der Leitungsbandkante stark entgegen. Das Leitungsband verhält sich so, als ob es sich dagegen wehrt, nach unten in die Nähe des Fermi-Niveaus geschoben zu werden.

Zusammenfassend kann man sagen, daß aufgrund der Gegenkopplung  $\Pi_2$  um so größer ist, je kleiner die Elektronendichte im Kanal (ohne mechanische Spannung) ist.

Auffällig an Bild 5.1 c) ist die Raumladungsdichte im s.i. GaAs bei  $x > 1627$  nm. Die flachen Akzeptoren im Substrat sind nahezu vollständig ionisiert und bilden daher eine negative Raumladung. Die tiefen Störstellen dagegen werden erst dann ionisiert, wenn das Fermi-Niveau ihnen energetisch nahe genug (wenige  $k_B T$ ) liegt. Das ist dann der Fall, wenn  $E_C - E_F \approx \Delta E_D$ . Die tiefen Donatoren bilden dann eine positive Raumladung. Die Differenz dieser beiden Raumladungen kompensiert weit im Inneren des Substrates gerade die piezoelektrische Raumladung, so daß im

Substrat keine Krümmung der Bandkanten auftritt und ihre Lage konstant ist.

Parameter, die üblicherweise in der Bauelementsimulation keine große Beachtung finden, sind bei der Berechnung der Piezoresistivität durchaus wichtig: die Hintergrunddotierung des nominal undotierten Materials (die hier als vernachlässigbar angesetzt wurde) und die Parameter  $N_A, N_D, \Delta E_D, \Delta E_A$  des semiisolierenden Substrates.

Anzumerken bleibt noch, daß  $\Pi_1$  im Rahmen des aufgestellten Modells der erhöhten Piezoresistivität Null ist. Das liegt daran, daß auf der rechten Seite von Gl. 4.3 die Terme III und IV identisch Null sind, da es sich bei Struktur A um eine Homostruktur handelt. Daher sind die hier berechneten Änderungen des Schichtwiderstandes unabhängig von  $\sigma$ .

Bei tiefer Temperatur ( $T = 77$  K) verhält sich die Struktur ähnlich wie bei Raumtemperatur. Allerdings ist die thermische Energie  $k_B T$  kleiner, was weitreichende Konsequenzen hat. Die Verhältnisse sind in Bild 5.2 dargestellt, es wurden die gleichen Auftragungen und die gleichen Skalierungen wie in Bild 5.1 gewählt. Ohne mechanische Spannung liegt das Leitungsband im Kanal tiefer gegenüber Raumtemperatur, trotzdem ist die Elektronendichte im Kanal stark reduziert (ohne mechanische Spannung liegt sie in der Größenordnung  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$  gegenüber  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  bei Raumtemperatur). Die höhere Beweglichkeit überkompensiert die niedrige Elektronendichte, so daß der Schichtwiderstand sogar etwas kleiner wird. Die relative Änderung der Elektronendichte ist deutlich größer als bei Raumtemperatur. Im gewählten Maßstab ist bei  $\sigma'_S = -2 \text{ MPa}/\mu\text{m}$  die Elektronendichte vernachlässigbar klein und der Schichtwiderstand sehr groß. An der unterschiedlich starken Verschiebung des Leitungsbandes für positive und negative  $\sigma'_S$  ist der Einfluß der Gegenkopplung und ihre Abhängigkeit von der Elektronendichte sehr gut zu sehen.

In Bild 5.4 ist gezeigt, wie Elektronenflächendichte  $n_S$  und Schichtwiderstand  $r_S$  von  $\sigma'_S$  abhängen. Die Elektronenflächendichte  $n_S$  ist analog zu Gl. 2.19 definiert:

$$n_S = \int n(x) dx \quad (5.1)$$

Die Darstellung deutet an, daß die Änderung des Schichtwiderstandes durch die Änderung der insgesamt in der Struktur enthaltenen Elektronen, d.h. der Elektronenflächendichte, verursacht wird. Die Kreise sind die Werte bei  $T = 300$  K. Im dargestellten Bereich sind die Relationen  $n_S(\sigma')$  und  $r_S(\sigma')$  linear. Durch lineare Regression im dargestellten Bereich wurde gefunden  $\Pi_2 = -0.269 \pm 0.006 \mu\text{m}/\text{MPa}$ .

Die Quadrate stellen die gleichen Relationen für  $T = 77$  K dar. Die Änderung des Schichtwiderstandes ist deutlich größer und im dargestellten Bereich auch deut-

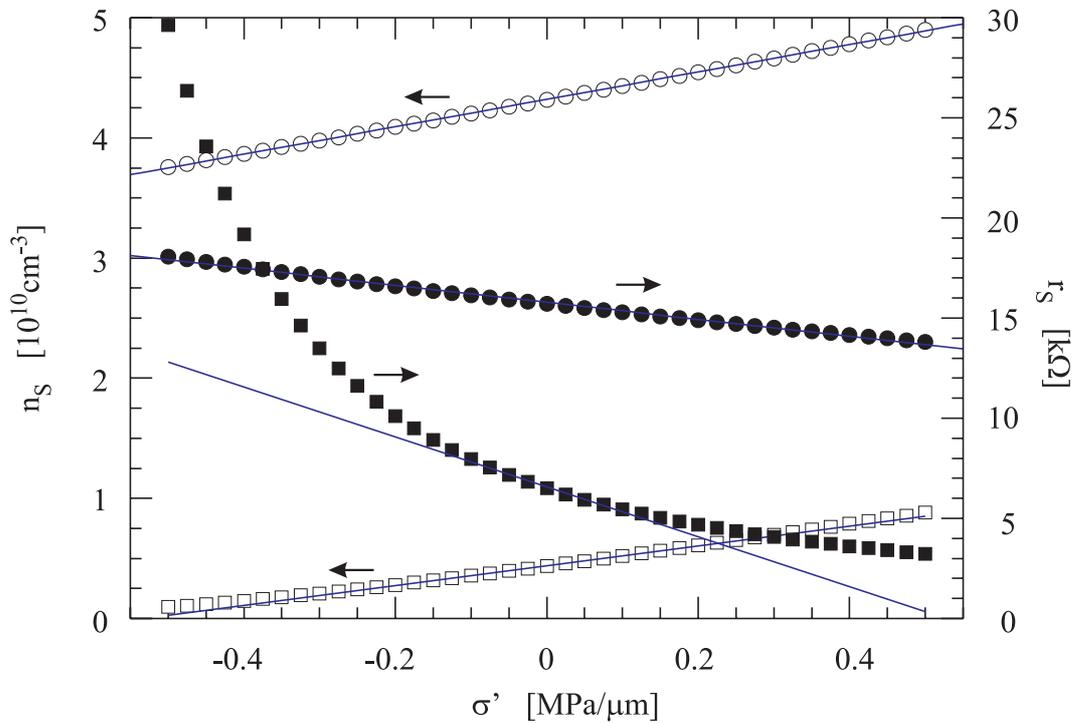


Abbildung 5.4: Elektronenflächendichte  $n_S$  (offene Symbole, linke Achse) und Schichtwiderstand  $r_S$  (geschlossene Symbole, rechte Achse) als Funktion der Ableitung der mechanischen Spannung  $\sigma'_S$  in der Struktur A bei  $T = 300$  K (Kreise) und bei  $T = 77$  K (Quadrate). Die Regressionsgeraden wurden für  $T = 77$  K im Bereich  $\sigma' = -0.1$  bis  $+0.1$  MPa/ $\mu$ m angepaßt, die Geraden für  $T = 300$  K wurden über den ganzen dargestellten Bereich angepaßt. Die relative Änderung des Schichtwiderstandes mit  $\sigma'$  ist bei tiefer Temperatur etwa sieben mal größer als bei Raumtemperatur. Die niedrigere Elektronenflächendichte bei  $T = 77$  K gegenüber Raumtemperatur wird durch die höhere Elektronenbeweglichkeit mehr als kompensiert, so daß der Schichtwiderstand bei  $T = 77$  K kleiner als bei Raumtemperatur ist.

T	Bereich	$\Pi_2$	$\Pi_3$ $D = 350 \mu\text{m}$	$\Pi_3$ $D = 10 \mu\text{m}$
[K]	[MPa/ $\mu\text{m}$ ]	[ $\mu\text{m}/\text{MPa}$ ]	[ $10^{-11} \text{Pa}^{-1}$ ]	[ $10^{-11} \text{Pa}^{-1}$ ]
77	-0.1 ... +0.1	$-1.90 \pm 0.02$	-543	-19000
300	-0.5 ... +0.5	$-0.269 \pm 0.006$	-76.9	-2960

Tabelle 5.3: Ergebnisse der Simulationsrechnungen für die Struktur A. Die Fehler beziehen sich nur auf die Numerik. In der zweiten Spalte ist angegeben, für welchen Bereich  $\Pi_2$  berechnet wurde, in diesem Bereich ist die Widerstandsänderung proportional zu  $\sigma'_S$ . Die beiden letzten Spalten bezeichnen die wirksame Piezoresistivität  $\Pi_3$  in einem Cantilever der Dicke  $D$ .

lich nichtlinear. Die Größe des PER2-Effektes bei  $T = 77 \text{ K}$  wurde durch lineare Regression im Bereich  $-0.1 \text{ MPa}/\mu\text{m} \leq +0.1 \text{ MPa}/\mu\text{m}$  berechnet und ergibt sich zu  $\Pi_2 = -1.90 \pm 0.02 \mu\text{m}/\text{MPa}$ , also etwa dem siebenfachen Wert wie bei Raumtemperatur. In Bild 5.4 sind die Regressionsgeraden eingezeichnet. Die angegebenen Fehler beziehen sich nur auf die Numerik.

Für  $T = 4 \text{ K}$  ist die Struktur A nicht geeignet, weil die Elektronendichte praktisch Null und der Schichtwiderstand sehr groß wird.

Der Betrag des PER2-Effektes läßt sich nicht direkt mit der normalen Piezoresistivität vergleichen, weil die beiden Größen unterschiedliche Einheiten haben. Wenn man aber annimmt, daß sich die Schichtstruktur an der Oberfläche eines Cantilevers befindet, dann läßt sich abhängig von der Dicke  $D$  des Cantilevers die wirksame Piezoresistivität  $\Pi_3$  berechnen (Gl. 4.15), welche direkt mit der normalen Piezoresistivität vergleichbar ist. Es wurden zwei Beispiele berechnet: ein Cantilever mit der Dicke  $D = 350 \mu\text{m}$  und einer mit der Dicke  $10 \mu\text{m}$ . Der erste Fall dient als Vergleich für die in Kap. 6 dargestellten Messungen, der zweite entspricht mehr der Anwendung in einem Kraftmikroskop. Die Ergebnisse der Simulationsrechnungen für die Struktur A sind in Tab. 5.3 zusammengefaßt. Die wirksame Piezoresistivität ist bemerkenswert groß: Sie ist bei Raumtemperatur im dünnen Cantilever um gut eine Größenordnung höher als die normale Piezoresistivität in Si und um drei Größenordnungen höher als die normale Piezoresistivität in GaAs (vgl. Tab. 2.2). Der Wert bei  $T = 77 \text{ K}$  ist noch einmal siebenmal größer. Die Bezeichnung „erhöhte“ Piezoresistivität für den PER2-Effekt ist also mithin gerechtfertigt.

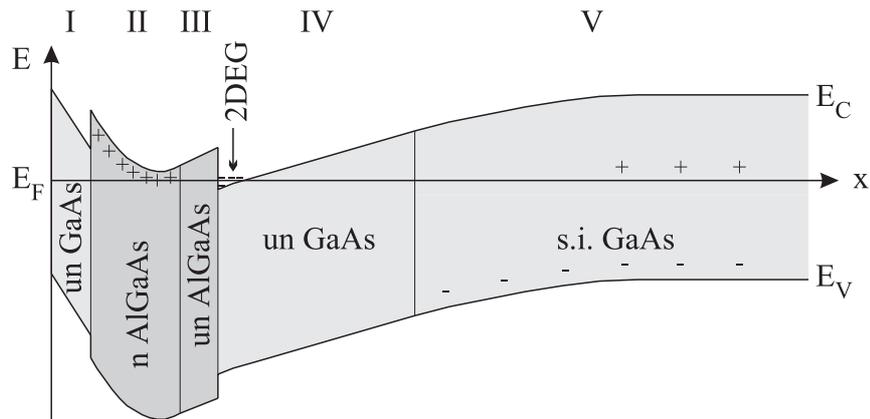


Abbildung 5.5: Schematische Darstellung des Leitungs- und Valenzbandverlaufes  $E_C$  und  $E_V$  in einer HEMT-Struktur. An der GaAs/AlGaAs-Grenzfläche bildet sich ein Potentialtopf, in dem die Elektronen gebunden sind. Da sie sich nur innerhalb der Schichtebene frei bewegen können, bezeichnet man sie als zweidimensionales Elektronengas (2DEG).

## 5.2 HEMT-Struktur

Nachdem im Kap. 5.1 die Piezoresistivität einer Homostruktur simuliert wurde, wird in diesem Kapitel die Piezoresistivität in einer typischen Heterostruktur, nämlich einer sogenannten HEMT-Struktur (high electron mobility transistor) berechnet. Die Heterostruktur enthält Grenzflächen, an denen Materialien mit unterschiedlicher Piezoelektrizität<sup>2</sup> aneinander grenzen. Daher wird in diesen Strukturen im Gegensatz zur Homostruktur und zusätzlich zum PER2-Effekt auch der PER1-Effekt erwartet, welcher durch den Term IV in Gl. 4.3 verursacht wird.

Zunächst soll der prinzipielle Aufbau einer HEMT-Struktur anhand von Bild 5.5 beschrieben werden [19]. Auf undotiertem GaAs wird eine n-dotierte AlGaAs-Schicht aufgebracht. AlGaAs hat eine höhere Bandlücke als GaAs, es bilden sich Band-Offsets an der Grenzfläche. Die Elektronen, welche der dotierten AlGaAs-Schicht entstammen, werden in das GaAs transferiert, weil sie dort energetisch niedrigere Zustände besetzen können. Dadurch verbleibt in der dotierten AlGaAs-Schicht die positive Raumladung der ionisierten Donatoren. Die positive Raumladung führt gemäß Poisson-Gleichung 4.3 zu einer positiven Bandkrümmung. Durch das Zusammenwirken der Bandverbiegung und des Leitungsband-Offsets entsteht ein dreieckiger Potentialtopf, in dem die Elektronen gebunden sind. Die HEMT-Struktur zeichnet sich durch zwei herausragende Eigenschaften aus:

- Im Potentialtopf an der GaAs/AlGaAs-Grenzfläche bildet sich ein sogenanntes zweidimensionales Elektronengas (2DEG). Das bedeutet, daß die Elektronen sich nur in zwei Raumrichtungen innerhalb der Schichtebene frei bewegen können. Senkrecht dazu ist ihre Bewegung durch den Potentialtopf begrenzt. Da die Ausdehnung des Potentialtopfes in der Größenordnung der de Broglie-Wellenlänge liegt, entstehen diskrete Wellenfunktionen mit diskreten Energieniveaus. Sie können im Rahmen der Quantenmechanik durch die Schrödinger-Gleichung berechnet werden [3].
- Durch den Leitungsband-Offset werden die Elektronen räumlich von der Dotierung getrennt, der sie entstammen (Modulationsdotierung). Dadurch entfällt die Streuung an Störstellen, welche die Beweglichkeit bei tiefen Temperaturen limitiert, weitgehend (Kap. 2.4). Dieser Effekt wird durch eine undotierte AlGaAs-Schicht (Schicht III in Bild 5.5), die zwischen  $n$ -dotiertem AlGaAs und GaAs eingebracht wird, noch erhöht. Bei tiefen Temperaturen entfällt außerdem die Streuung an Phononen, so daß in HEMT-Strukturen extrem hohe Elektronenbeweglichkeiten erreicht werden können ( $3 \cdot 10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  bei  $T = 4.2 \text{ K}$  [19]).

Die Elektronendichte in HEMT-Strukturen kann bei geeignetem Design auch bei sehr kleinen Temperaturen (bis herunter zu  $T = 0 \text{ K}$ ) groß sein, weil die Elektronen nicht thermisch aus den Donatorniveaus aktiviert werden müssen, sondern in den energetisch tiefer liegenden Potentialtopf transferiert werden. Daher sind HEMT-Strukturen auch bei extrem tiefen Temperaturen gute elektrische Leiter und bieten so die Möglichkeit, für diesen Temperaturbereich piezoresistive Kraftsensoren zu realisieren. Man hat viele Freiheitsgrade beim Design der HEMT-Strukturen (Schichtdicken, Al-Gehalt, Dotierung), die man auch dazu nutzen kann, die Piezoresistivität zu optimieren.

In Bild 5.5 ist an der Oberfläche der Struktur (Schicht I) eine dünne GaAs-Schicht auf der AlGaAs-Schicht eingezeichnet. Diese Schicht wird aufgebracht, um das AlGaAs vor Oxidation an Luft zu schützen. Sie hat also nur eine technologische Bedeutung. Weiterhin sieht man in Bild 5.5 im Substrat (Schicht V), das aus semiisolierendem GaAs besteht, positive und negative Raumladungen. Sie werden von den flachen Akzeptoren und den tiefen Donatoren in diesem Material gebildet und sorgen dafür, daß das Fermi-Niveau  $E_F$  im Substrat ungefähr in der Mitte der Bandlücke liegt (vgl. Kap. 5.1).

Die Anwendung der HEMT-Strukturen liegt, wie der Name schon andeutet, vor allem in sehr schnellen Transistoren [43]. Auf die oben beschriebene Struktur bringt

	Material	Dicke [nm]	$N_D$ [ $\text{cm}^{-3}$ ]	$N_A$ [ $\text{cm}^{-3}$ ]
I	GaAs	6	-	-
II	$\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$	22	$2 \cdot 10^{18}$	-
III	$\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$	10	-	-
IV	GaAs	2200	-	-
	20x (Übergitter)			
	AlAs	5	-	-
	GaAs	15	-	-
	GaAs	1000	-	-
	s.i. GaAs	Substrat	$1 \cdot 10^{16}$	$1 \cdot 10^{15}$

Tabelle 5.4: Schichtaufbau der HEMT-Struktur B. Es bildet sich ein Potentialtopf an der unteren GaAs/AlGaAs-Grenzfläche. Die Bezeichnung der Schichten mit römischen Ziffern entspricht den Bezeichnungen in Bild 5.5.

man ein Metallisierung auf, die als Gate-Elektrode fungiert. Durch Anlegen einer elektrischen Spannung an der Gate-Elektrode gegen das Substrat kann die Elektronenflächendichte im Potentialtopf und damit der Strom im Transistor gesteuert werden. Aber auch für die Grundlagenforschung sind die HEMT-Strukturen sehr interessant. An ihr können quantenmechanische Effekte gut beobachtet werden. Als Beispiele seien der ganzzahlige und der gebrochenzahlige Quanten-Hall-Effekt genannt, für deren Entdeckung es 1985 und 1998 die Physiknobelpreise für von Klitzing sowie für Laughlin, Störmer und Tsui gab [33, 62].

Im folgenden wird die Simulation der Piezoresistivität in der im Rahmen dieser Arbeit benutzte HEMT-Struktur beschrieben. Ihr Schichtaufbau ist in Tab. 5.4 angegeben, sie wird als Struktur B bezeichnet. Diese Struktur wurde von G. Böhm am Lehrstuhl von Prof. Amann (Walter Schottky Institut, München) hergestellt. Die Hintergrunddotierung der nominal undotierten Bereiche wurde als vernachlässigbar angesetzt, die Parameter der Dotierung des s.i. Substrates wurden wie bei Struktur A angenommen. Die Materialdaten sind Tab. 5.2 aufgeführt. Messungen an dieser Probe werden in Kap. 6 vorgestellt. Der für den Elektronentransport interessante Bereich beschränkt sich auf den Potentialtopf, der sich an der Grenzfläche zwischen Schicht III und IV befindet. Weit entfernt von dieser Grenzfläche liegt ein Übergitter. Es wird aus technologischen Gründen eingebaut und hat zunächst keine Einfluß auf das Verhalten der Struktur.

In der Struktur B treten prinzipiell beide PER-Effekte auf. Die Wirkungsweise des PER2-Effektes wurde in Kap. 5.1 anhand der Struktur A erklärt. Sie läßt sich auf die Struktur B übertragen, daher wird auf den PER2-Effekt hier nicht näher ein-

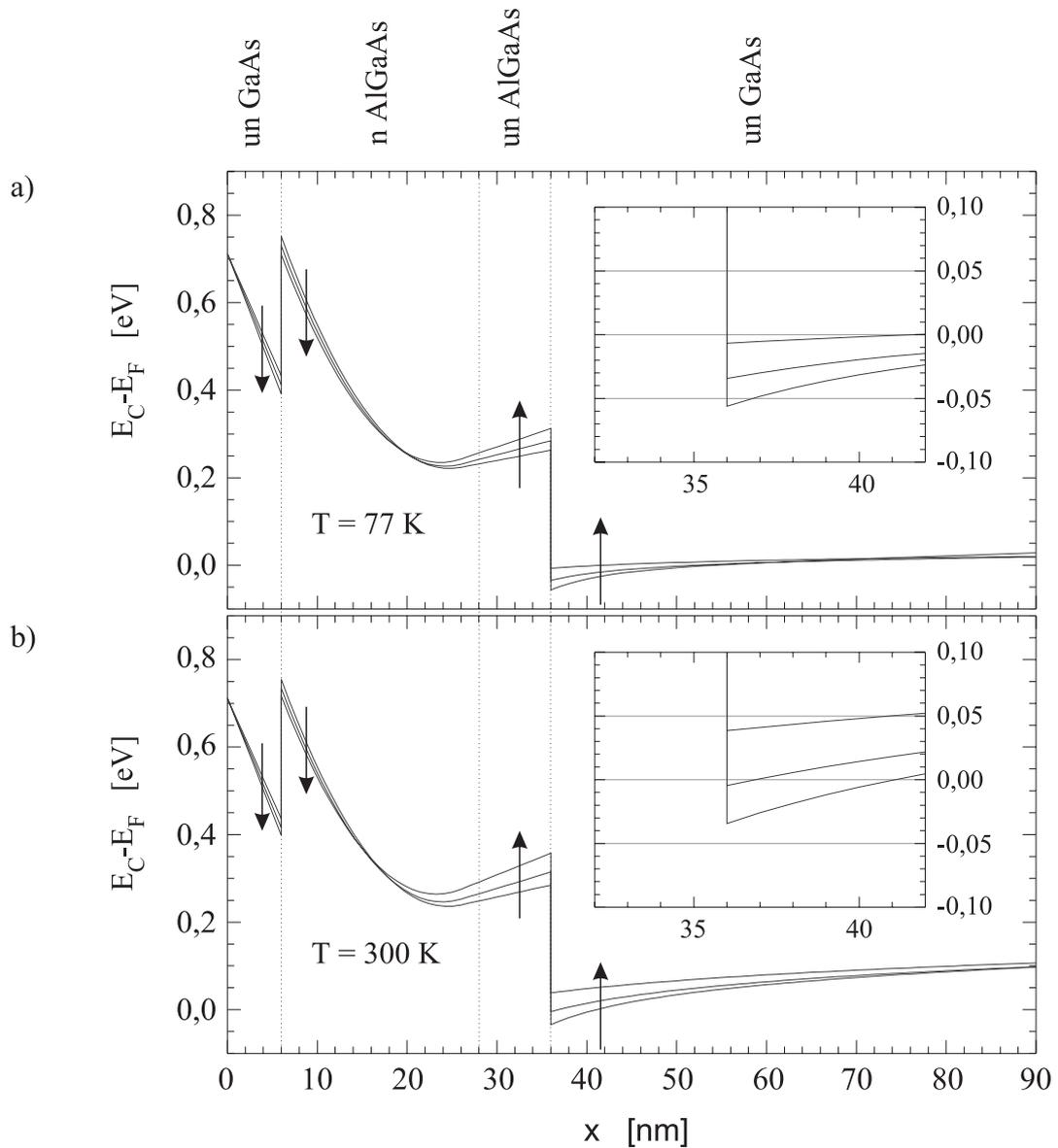


Abbildung 5.6: Lage der Leitungsbandkante  $E_C$  relativ zum Fermi-Niveau  $E_F$  in der HEMT-Struktur B. Die Leitungsbandkante ist für die mechanischen Spannungen  $\sigma = -200$ ,  $0$  und  $+200$  MPa dargestellt.  $\sigma$  nimmt jeweils in Pfeilrichtung zu.  $\sigma'$  ist Null, d.h. es ist der PER1-Effekt dargestellt. In Bild a) sind die Verhältnisse für  $T = 77$  K und in Bild b) für  $T = 300$  K gezeigt. Im Einschub ist jeweils der Potentialtopf vergrößert dargestellt. Oben im Bild ist angedeutet, welche Schicht sich wo befindet. Die senkrechten, gepunkteten Linien stellen die Grenzflächen dar.

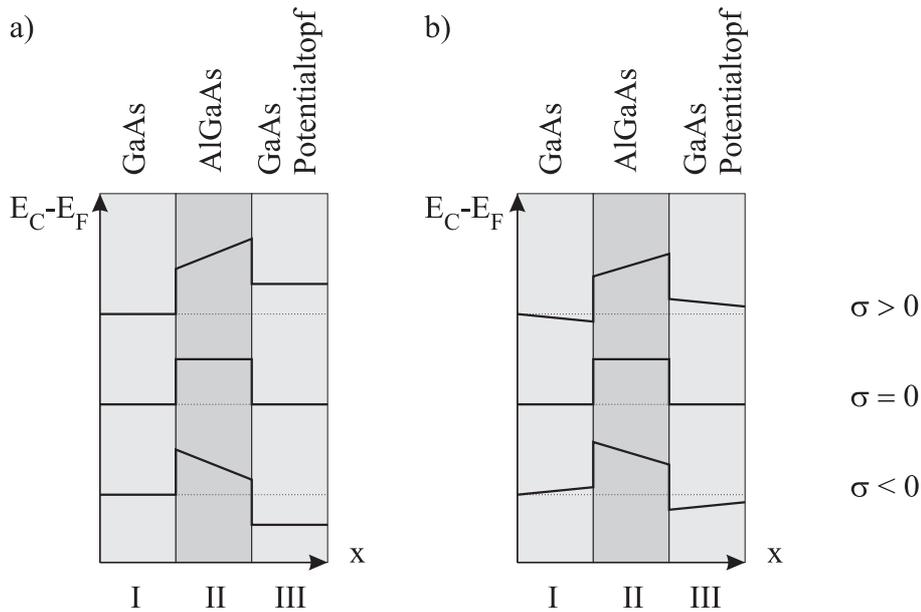


Abbildung 5.7: Schematische Darstellung des Einfluß des PER1-Effektes auf das Leitungsband bei einer HEMT-, d.h. einer einfachen Heterostruktur. In Bild a) ist die Gegenkoppelung vernachlässigt, in Bild b) ist ihr Einfluß berücksichtigt. Erläuterungen siehe Text.

gegangen. Der PER1-Effekt wird anhand von Bild 5.6 beschrieben. Gezeigt ist der Bandverlauf bei verschiedenen mechanischen Spannungen. Die Ableitung der mechanische Spannung ist dabei Null. Das Bild a) zeigt die Verhältnisse bei  $T = 77\text{ K}$  und das Bild b) bei Raumtemperatur. Die Änderung des internen elektrischen Feldes an den Grenzflächen wird durch mechanische Spannung vergrößert bzw. verkleinert. Dieses Verhalten wird durch den Term IV in Gl. 4.3 bewirkt. Durch die Bandkrümmung ist die Wirkungsweise des PER1-Effektes etwas schwer zu sehen, daher ist in Bild 5.7 der Einfluß der mechanischen Spannung auf den Bandverlauf sehr schematisch ohne Bandkrümmung dargestellt.

Am linken Rand der Heterostruktur liegt die Oberfläche, dort ist  $E_C$  durch Pinning festgelegt. In Bild a) ist angenommen, daß das interne elektrische Feld an der Oberfläche unabhängig von der mechanischen Spannung ist. Positive mechanische Spannung führt an der Grenzfläche zwischen Schicht I und II zu einer Zunahme der Steigung von  $E_C$ . An der zweiten Grenzfläche führt der umgekehrte Übergang zu einer Abnahme der Steigung von  $E_C$ . In der inneren GaAs-Schicht ist die Ableitung von  $E_C$  wieder Null,  $E_C$  selber aber liegt energetisch höher. Umgekehrt führt negative mechanische Spannung zu einer Absenkung des Leitungsbandes in der inneren GaAs-Schicht.

Aus Bild 5.6 kann man entnehmen, daß die Steigung von  $E_C$  bei  $x = 0$  aber nicht unabhängig von der mechanischen Spannung ist. Vielmehr gibt es eine Gegenkopplung, die derjenigen beim PER2-Effekt ähnelt (vgl. Kap. 5.1). Die durch die Verschiebung des Leitungsbandes erzeugte Raumladung wirkt ihrer Ursache, nämlich der Verschiebung selbst, entgegen. Dieses Verhalten ist in Bild 5.7 b) dargestellt.

Man kann sich das Verhalten der in GaAs eingebetteten AlGaAs-Schicht so vorstellen, als ob man einen mechanisch abstimmbaren Leitungsband-Offset vorliegen hat, der allerdings nicht abrupt, sondern verteilt über die AlGaAs-Schicht ist. Die Verschiebung der Leitungsbandkante führt zu einer Änderung der Elektronendichte (Gl. 4.6) und damit zu einer Änderung des Schichtwiderstandes (Gl. 4.12).

In Bild 5.8 ist die relative Änderung des Schichtwiderstandes  $\Delta r_S/r_{S,0}$  als Funktion der mechanischen Spannung für  $T = 4.2\text{ K}$ ,  $T = 77\text{ K}$  und  $T = 300\text{ K}$  aufgetragen. Dabei wurden für  $T = 4.2\text{ K}$  die gleichen elektronischen Beweglichkeiten wie bei  $T = 77\text{ K}$  angenommen. Der PER1-Koeffizient  $\Pi_1$  ist die Steigung der Graphen. Man erkennt, daß  $\Pi_1$  für die drei Temperaturen nur wenig differiert. Die Zahlenwerte ergeben sich durch lineare Regression zu 330, 332 und  $252 \cdot 10^{-12}\text{ Pa}^{-1}$ . Die Regression wurde dabei über einen kleinen Bereich durchgeführt ( $\sigma = -10\text{ MPa}$  bis  $+10\text{ MPa}$ ). Die Werte sind direkt mit der normalen Piezoresistivität vergleichbar. Sie liegen ungefähr um den Faktor zwei über der normalen Piezoresistivität im Si und um ungefähr zwei Größenordnungen über der normalen Piezoresistivität im GaAs (vgl. Tab. 2.2). Die Widerstandsänderung ergibt sich aus der Änderung der Elektronenflächendichte  $n_S$ , die ebenfalls in Bild 5.8 dargestellt ist.  $n_S$  ist in der Nähe von  $\sigma = 0$  in guter Näherung eine lineare Funktion von  $\sigma$ , daher ist  $r_S$  in guter Näherung proportional zu  $\sigma^{-1}$ . Bei betragsmäßig großen mechanischen Spannung  $|\sigma| \gtrsim 200\text{ MPa}$  zeigen die Kurven qualitativ davon abweichendes Verhalten. Dieses wird durch das Übergitter (siehe Tab. 5.4) verursacht. Es modifiziert ebenfalls den Bandverlauf unter mechanischer Spannung. Dieser Einfluß wirkt sich aber nur bei betragsmäßig sehr großen mechanischen Spannungen auf den Schichtwiderstand aus, weil das Leitungsband im Bereich des Übergitters weit entfernt vom Fermi-Niveau liegt.

In Bild 5.9 ist die zu Bild 5.8 analoge Darstellung für den PER2-Effekt gezeigt.  $\Pi_2$  ist im Vergleich zur Struktur A sehr viel kleiner, bei  $T = 77\text{ K}$  z.B. beträgt  $\Pi_2 = -0.0631\text{ }\mu\text{m/MPa}$ . Bei den anderen Temperaturen sind die Werte ähnlich, die genauen Daten sind mit den Werten für  $\Pi_1$  in Tab. 5.5 zusammengefaßt. Auffällig ist, daß die durch  $\sigma$  und durch  $\sigma'$  verursachten Piezoresistivitäten entgegengesetztes Vorzeichen haben. Stellt man sich einen Piezoresistor auf einem Cantilever vor, können die PER1- und PER2-Effekte je nach Lage des Piezoresistors auf der Ober- oder

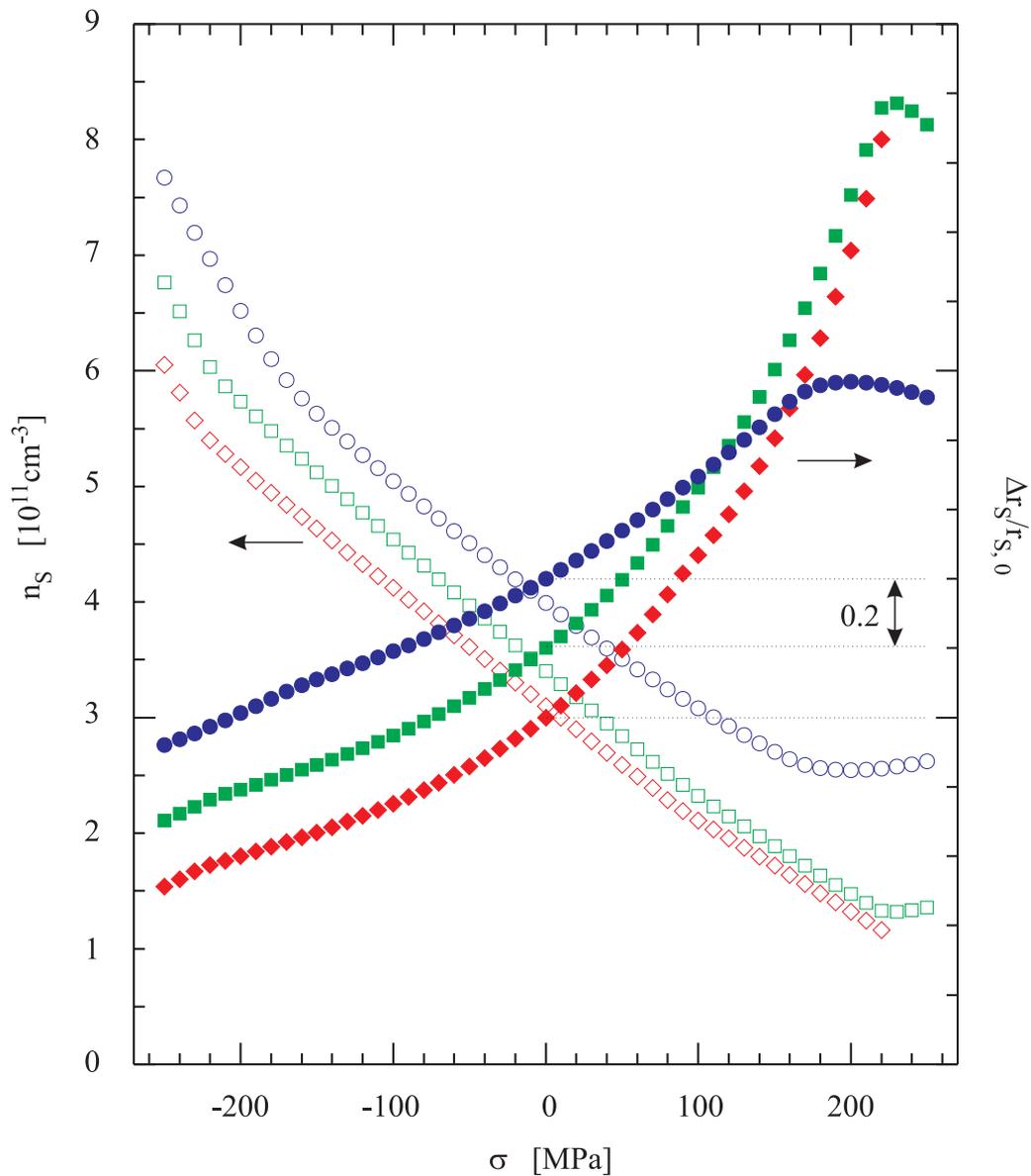


Abbildung 5.8: PER1-Effekt der Struktur B. Dargestellt sind die Elektronenflächendichte  $n_S$  (offenen Symbole, linke Achse) und die relative Änderung des Schichtwiderstandes  $\Delta r_S/r_{S,0}$  (geschlossene Symbole, rechte Achse) als Funktion der mechanischen Spannung  $\sigma$ . Die Werte sind für  $T = 4.2$  K (stehende Quadrate), für  $T = 77$  K (liegende Quadrate) und für  $T = 300$  K (Kreise) dargestellt. Die drei Kurven für  $\Delta r_S/r_{S,0}$  sind um je 0.2 Einheiten versetzt dargestellt, die gepunkteten Linien geben jeweils den Nullpunkt an.

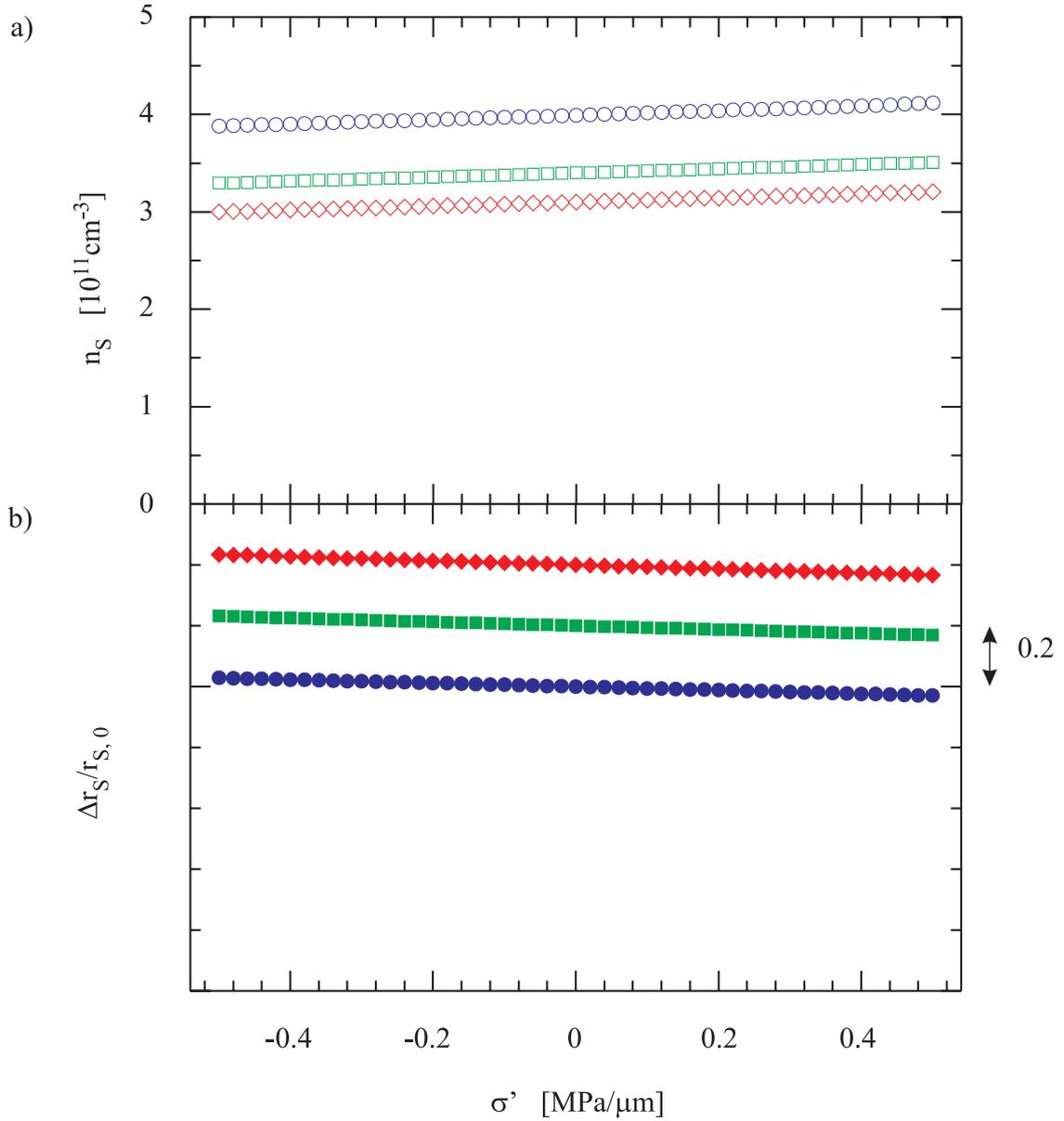


Abbildung 5.9: PER2-Effekt der Struktur B. In Bild a) sind die Elektronenflächendichten  $n_S$  für  $T = 4.2 \text{ K}$  (stehende Quadrate), für  $T = 77 \text{ K}$  (liegende Quadrate) und für  $T = 300 \text{ K}$  (Kreise) als Funktion der Ableitung der mechanischen Spannung  $\sigma'$  dargestellt. In Bild b) ist die relative Änderung des Schichtwiderstandes  $\Delta r_S / r_{S,0}$  für die drei Temperaturen jeweils um 0.2 Einheiten versetzt ebenfalls als Funktion von  $\sigma'$  dargestellt. Der PER2-Effekt in Struktur B ist wesentlich kleiner als der PER2-Effekt in Struktur A (vgl. Bild 5.4).

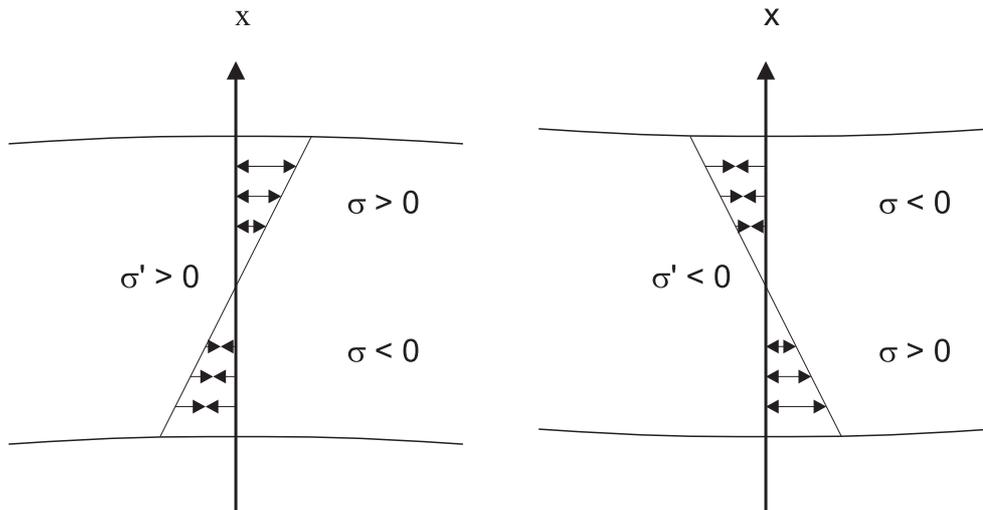


Abbildung 5.10: Verteilung der mechanischen Spannung in einem Ausschnitt des Cantilevers. Auf der Oberseite haben Spannung  $\sigma$  und Ableitung der Spannung  $\sigma'$  gleiches Vorzeichen, auf der Unterseite haben sie unterschiedliches Vorzeichen. Das ist unabhängig davon, in welche Richtung der Cantilever ausgelenkt wird (linkes und rechtes Bild). Zugspannung (positiv) ist durch nach außen weisende Doppelpfeile gekennzeichnet, Druckspannung (negativ) durch nach innen weisende Doppelpfeile.

Unterseite also gegensinnig oder in gleiche Richtung wirken (Bild 5.10). Dadurch kann die wirksame Piezoresistivität  $\Pi_3$ , je nach Anordnung des Piezoresistors und Dicke des Cantilevers, positiv, negativ oder im ungünstigsten Fall auch Null sein. Um gleichsinnigen Effekt zu erzielen, sollte der Piezoresistor bei der Geometrie nach Bild 2.1 auf der Unterseite des Cantilevers liegen. In Tab. 5.5 sind die wirksamen Piezoresistivitäten  $\Pi_3$  angegeben, die sich aus  $\Pi_1$ ,  $\Pi_2$  und der Dicke  $D$  des Cantilevers ergeben. Hierbei muß unterschieden werden, ob der Piezoresistor an der Ober- oder an der Unterseite des Cantilevers liegt. Es wurden wieder zwei Beispiele berechnet, nämlich  $D = 500 \mu\text{m}$  und  $D = 10 \mu\text{m}$ . Der erste Fall dient dem Vergleich mit den Messungen (Kap. 6), während der zweite Fall mehr der Anwendung im RKM entspricht.

Die Temperaturabhängigkeit der Piezoresistivität ist bei Struktur B im Gegensatz zur Struktur A klein. Wie man in den beiden Einschüben von Bild 5.6 sieht, liegt die Leitungsbandkante im Potentialtopf unterhalb des Fermi-Niveaus, d.h. die Boltzmann-Näherung kann nicht verwendet werden. Vielmehr kann man sich vorstellen, daß das Band bis zum Fermi-Niveau mit Elektronen gefüllt und darüber „leer“ ist. Dadurch sind auch die Elektronenflächendichten bei Raumtemperatur und bei

$T$ [K]	$\Pi_1$ [ $10^{-11} \text{ Pa}^{-1}$ ]	$\Pi_2$ [ $\mu\text{m}/\text{MPa}$ ]	$\Pi_3$ ( $D = 500 \mu\text{m}$ ) [ $10^{-11} \text{ Pa}^{-1}$ ] Ober-/Unterseite	$\Pi_3$ ( $D = 10 \mu\text{m}$ ) [ $10^{-11} \text{ Pa}^{-1}$ ] Ober-/Unterseite
4.2	$330 \pm 3$	$-0.0672 \pm 0.0001$	+317/+343	-342/+1002
77	$332 \pm 3$	$-0.0631 \pm 0.0004$	+319/+344	-299/+969
300	$252 \pm 5$	$-0.0581 \pm 0.0003$	+240/+264	-329/+833

Tabelle 5.5: Ergebnisse der Simulationsrechnungen für die HEMT-Struktur B. Die Fehlerangaben beziehen sich nur auf die Numerik.

tiefer Temperatur nur wenig unterschiedlich (Bild 5.8 und 5.9). Die etwas stärkere Abhängigkeit der Elektronendichte von den Lage der Bandkante bei tiefer Temperatur wird nahezu kompensiert durch die etwas größere Verschiebung der Bandkante mit der mechanischen Spannung bei Raumtemperatur. Vereinfachend kann man sagen, daß die geringe Temperaturabhängigkeit beider PER-Effekte in Struktur B von der tiefen energetischen Lage des Potentialtopfes verursacht wird.

### 5.3 Optimierung des PER1-Effektes

Im letzten Kapitel wurde anhand der Struktur B beschrieben, daß eine in GaAs eingebettete AlGaAs-Schicht wie ein verteilter, mechanisch abstimmbarer Band-Offset wirkt und so den PER1-Effekt verursacht. Allerdings war die Struktur B nicht für optimale Piezoresistivität entwickelt worden, sondern für hohe elektronische Tieftemperatur-Beweglichkeit. In diesem Abschnitt soll eine Struktur entwickelt werden, mit der ein möglichst hoher PER1-Effekt erzielt werden soll.

Dazu wurde die in Bild 5.11 a) dargestellte Schichtstruktur verwendet. In Bild b) ist der zugehörige Leitungsbandverlauf gezeigt. Wie in Kap. 5.2 ausgeführt wurde, ist die Gegenkopplung beim PER1-Effekt um so größer, je höher die Elektronendichte ist. Wenn die Elektronenflächendichte insgesamt aber zu klein gewählt wird, erhält man ein hochohmige Schicht. Der beste Kompromiß ist ein rechteckiger Potentialtopf, bei dem die Elektronendichte ungefähr konstant ist. Daher wurde eine Doppelheterostruktur gewählt, die im Gegensatz zum dreieckigen Potentialtopf in Struktur B einen solchen rechteckigen Potentialtopf ausbildet (Schicht IV in Bild 5.11). Dabei wurde für die Schichten II und III  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  mit  $x = 1$  gewählt, d.h., diese Schichten bestehen aus AlAs. So wird die maximale Differenz der Piezoelektrizität zu GaAs erreicht (Gl. 2.23), und damit wird der Term IV in Gl. 4.3, der

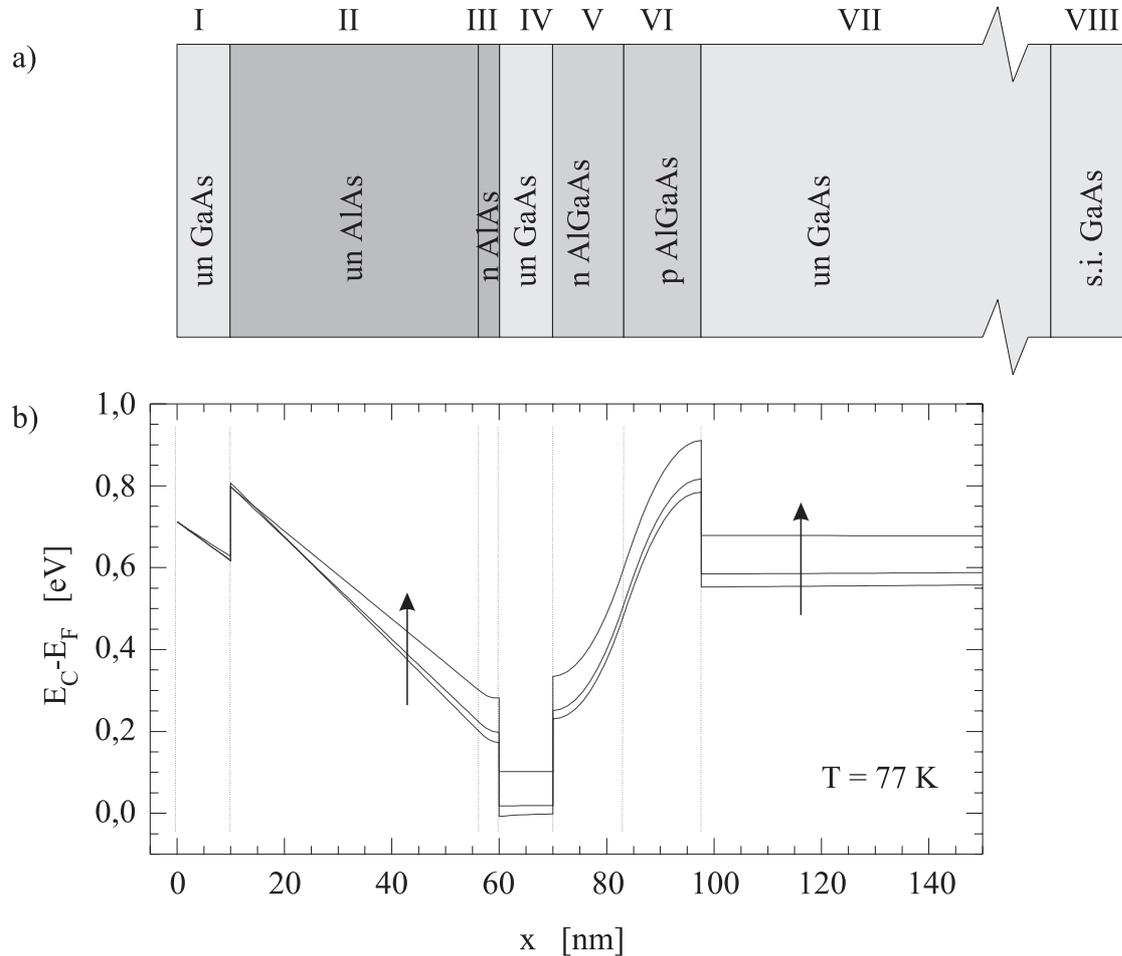


Abbildung 5.11: In Bild a) ist der Schichtaufbau der in diesem Kapitel untersuchten Struktur gezeigt, und in Bild b) ist der Bandverlauf  $E_C - E_F$  bei  $T = 77\text{ K}$  bei den drei mechanischen Spannungen  $\sigma = -25, 0$  und  $+25\text{ MPa}$  dargestellt. Die mechanische Spannung nimmt dabei in Richtung der eingezeichneten Pfeile zu. Die Ableitung der mechanischen Spannung ist Null. Die Schichten II und III wirken wie ein mechanisch abstimmbarer Band-Offset, daher wird der Potentialtopf mit zunehmender Spannung energetisch nach oben verschoben, wodurch die Elektronendichte drastisch ab- und der Schichtwiderstand zunimmt.

den PER1-Effekt bewirkt, maximiert. Eine symmetrische Heterostruktur, bei der das Leitungsband an beiden Seiten fix liegt, würde nur wenig Verschiebung des Leitungsbandes mit mechanischer Spannung aufweisen, was in Bild 5.12 a) schematisch dargestellt ist (vgl. auch Bild 5.7). Vielmehr ist es sinnvoll, daß das Leitungsband auf der einen Seite möglichst konstant liegt, aber auf der anderen Seite möglichst frei beweglich ist. Dieses Verhalten ist in Bild 5.12 b) gezeigt. In der Struktur nach Bild 5.11 ist dieser zweite Fall näherungsweise realisiert. In der Darstellung in Bild 5.12 ist der Einfluß des PER2-Effektes und allgemein der Raumladungen vernachlässigt. Die Struktur nach Bild 5.11 ist unsymmetrisch zum Potentialtopf, schon weil auf der Oberseite (Schicht I) die Oberfläche des Halbleiters liegt und an der Unterseite (Schicht V) das Substrat (Schicht VIII). Das Leitungsband im Substrat liegt aufgrund der Dotierung mit tiefen Störstellen zwar nahezu konstant, aber das Substrat wird durch Schicht VII von der Doppelheterostruktur getrennt. So ist das Leitungsband am rechten Rand von Schicht VI nur sehr schwach an das Leitungsband im Substrat gekoppelt. Die AlGaAs-Schicht (Schicht V und VI) hat zwei Aufgaben. Einerseits bildet sie die zweite Grenzfläche des Potentialtopfes. Andererseits überwindet sie die Differenz in der Lage des Leitungsbandes zwischen Potentialtopf und Schicht VII. Die zweite Aufgabe wird erfüllt durch die  $n$ -Dotierung von Schicht V und die  $p$ -Dotierung von Schicht VI. Dieser Dotierungsverlauf sorgt für eine positive Krümmung des Leitungsbandes in Schicht V und eine negative Krümmung des Leitungsbandes in Schicht VI, so daß sich der in Bild 5.11 gezeigte Bandverlauf ergibt.

Zur vollständigen Beschreibung der Struktur fehlt noch die Angabe ihrer Parameter, nämlich der Schichtdicken und gegebenenfalls der Dotierungen der Schichten. Da die Anzahl der Parameter sehr groß ist, wurden einige von ihnen sinnvoll gewählt. Vorgegeben wurden die Dicken der Schicht I (10 nm), der Schicht II und III zusammen (50 nm), der Schicht IV (10 nm) und der Schicht VII (1000 nm). Die Dotierungen wurden zu  $2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  gewählt. Als noch freie Parameter verbleiben die Dicke der Schicht III, aus der sich dann implizit die Dicke der Schicht II ergibt, sowie die Dicken der Schichten V und VI. Diese wurden so gewählt, daß der „Boden“ des Potentialtopfes möglichst eben ist, und daß (ohne mechanische Spannung) das Leitungsband am linken Rand von Schicht VII möglichst auf dem Niveau des Leitungsbandes im Substrat liegt. Ferner sollte die Elektronenflächendichte möglichst klein, der Schichtwiderstand aber auch nicht zu groß sein. Es wurde willkürlich vorgegeben, daß der Schichtwiderstand ohne mechanische Spannung im Temperaturbereich von 4.2 K bis 300 K nicht wesentlich größer als  $10 \text{ k}\Omega$  sein soll. Aus diesen Forderungen ergibt sich die Dicke der Schicht III zu 3.5 nm und die Dicke der Schichten V und VI jeweils zu 13.8 nm. Diese Struktur wird als Struktur C bezeichnet, ihre Parameter sind in

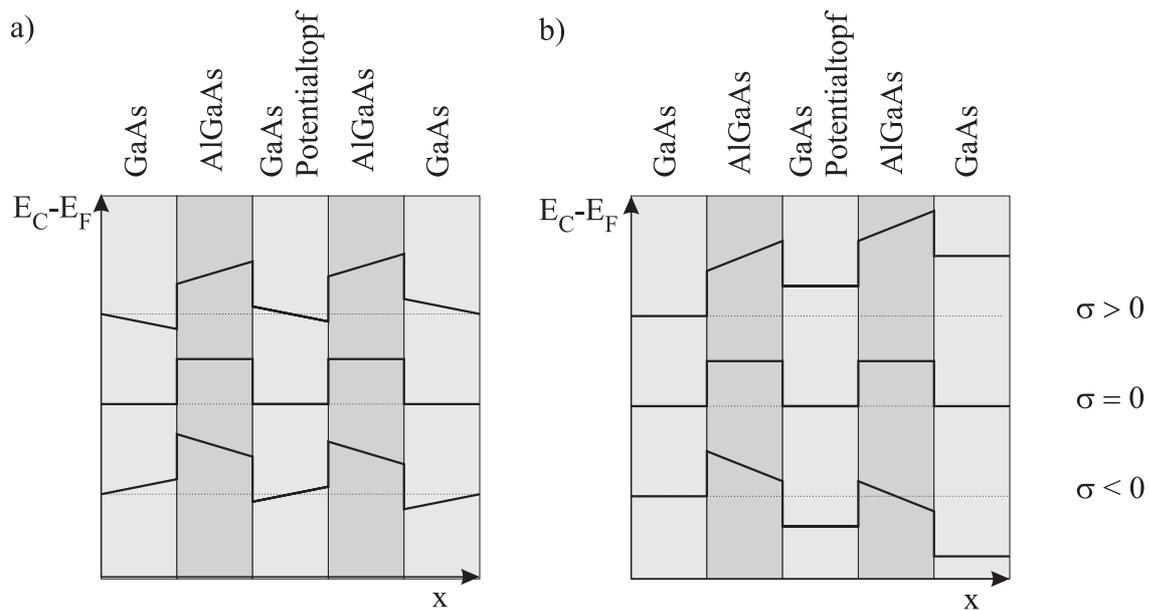


Abbildung 5.12: Schematische Darstellung des PER1-Effektes auf eine Doppelheterostruktur. In Bild a) ist der Fall einer symmetrischen Struktur dargestellt, bei der das Leitungsband an beiden Rändern fix liegt. In Bild b) ist der unsymmetrische Fall dargestellt, bei dem das Leitungsband nur am linken Rand fest liegt, während es am rechten Rand frei verschiebbar ist. Im linken Fall ist der Bodens des Potentialtopfes nahezu konstant, im rechten Fall wird er durch mechanische Spannung verschoben. Der Effekt der Bandkrümmung und der Gegenkopplung ist hier vernachlässigt.

Tab. 5.6 zusammengefaßt.

Die Materialparameter sind in Tab. 5.2 angegeben. Die Höhe der Dotierung des semiisolierenden Substrates ist wie bei den Strukturen A und B angenommen.

In Bild 5.13 sind die Ergebnisse der Simulationsrechnung für den PER1-Effekt, nämlich die Elektronenflächendichte und der Schichtwiderstand als Funktion der mechanischen Spannung, für verschiedene Temperaturen aufgetragen. Dabei wurde der Wertebereich der Abszissenachse wesentlich kleiner als in Bild 5.8 gewählt. Die Änderung des Schichtwiderstandes wird bewirkt durch die Änderung der Elektronenflächendichte, die wiederum durch die energetische Verschiebung des Leitungsbandes (Bild 5.11) erzeugt wird. Der Koeffizient des PER1-Effektes  $\Pi_1$  ist die Ableitung der Graphen für  $r_S$  bei  $\sigma = 0$ , er ergibt sich zu  $91400$ ,  $16600$  und  $4080 \cdot 10^{-11} \text{ Pa}^{-1}$  bei  $T = 4.2$ ,  $77$  und  $300 \text{ K}$ . Die Werte sind wiederum direkt mit der normalen Piezoresistivität vergleichbar, sie liegen um Größenordnungen über den Werten von Si

Material	Dicke [nm]	$N_D$ [cm <sup>-3</sup> ]	$N_A$ [cm <sup>-3</sup> ]
GaAs	10	-	-
AlAs	46.5	-	-
AlAs	3.5	$2 \cdot 10^{18}$	-
GaAs	10	-	-
Al <sub>0.3</sub> Ga <sub>0.4</sub> As	13.8	$2 \cdot 10^{18}$	-
Al <sub>0.3</sub> Ga <sub>0.4</sub> As	13.8	-	$2 \cdot 10^{18}$
GaAs	1000	-	-
s.i. GaAs	Substrat	$1 \cdot 10^{16}$	$1 \cdot 10^{15}$

Tabelle 5.6: Parameter der Struktur C, die auf maximalen PER1-Effekt optimiert ist.

$T$ [K]	$\Pi_1$ [10 <sup>-11</sup> Pa <sup>-1</sup> ]	$\Pi_2$ [μm/MPa]
4.2	91400 ± 2600	-1.84 ± 0.02
77	16600 ± 380	-0.348 ± 0.005
300	4080 ± 60	-0.0797 ± 0.0066

Tabelle 5.7: Ergebnisse der Simulationsrechnungen für Struktur C. Der PER1-Effekt ist extrem groß, insbesondere bei tiefen Temperaturen. Aber auch der PER2-Effekt ist nicht zu vernachlässigen.

(Tab. 2.2). Der PER1-Effekt nimmt mit abnehmender Temperatur stark zu, weil die Verschiebung der Leitungsbandkante bei tieferen Temperaturen aufgrund der kleineren thermischen Energie  $k_B T$  eine stärkere Änderung der Elektronendichte bewirkt (Gl. 4.6).

Zwei wesentliche Motivationen dieser Arbeit waren die Entwicklung von Schichtstrukturen für Piezoresistoren, die gegenüber Si-Sensoren eine größere Empfindlichkeit zeigen und die bei sehr tiefen Temperaturen einsetzbar sind. Beide Anforderungen erfüllt die Struktur C in ausgezeichneter Weise.

Die Struktur C zeigt auch den PER2-Effekt, der bei tiefen Temperaturen vergleichbar groß ist wie bei Struktur A. Die Erklärung für diesen Effekt ist analog wie bei der Struktur A, sie wurde schon in Kap. 5.1 erläutert. Die Werte für  $\Pi_2$  sind mit denen für  $\Pi_1$  in Tab. 5.7 zusammengefaßt.

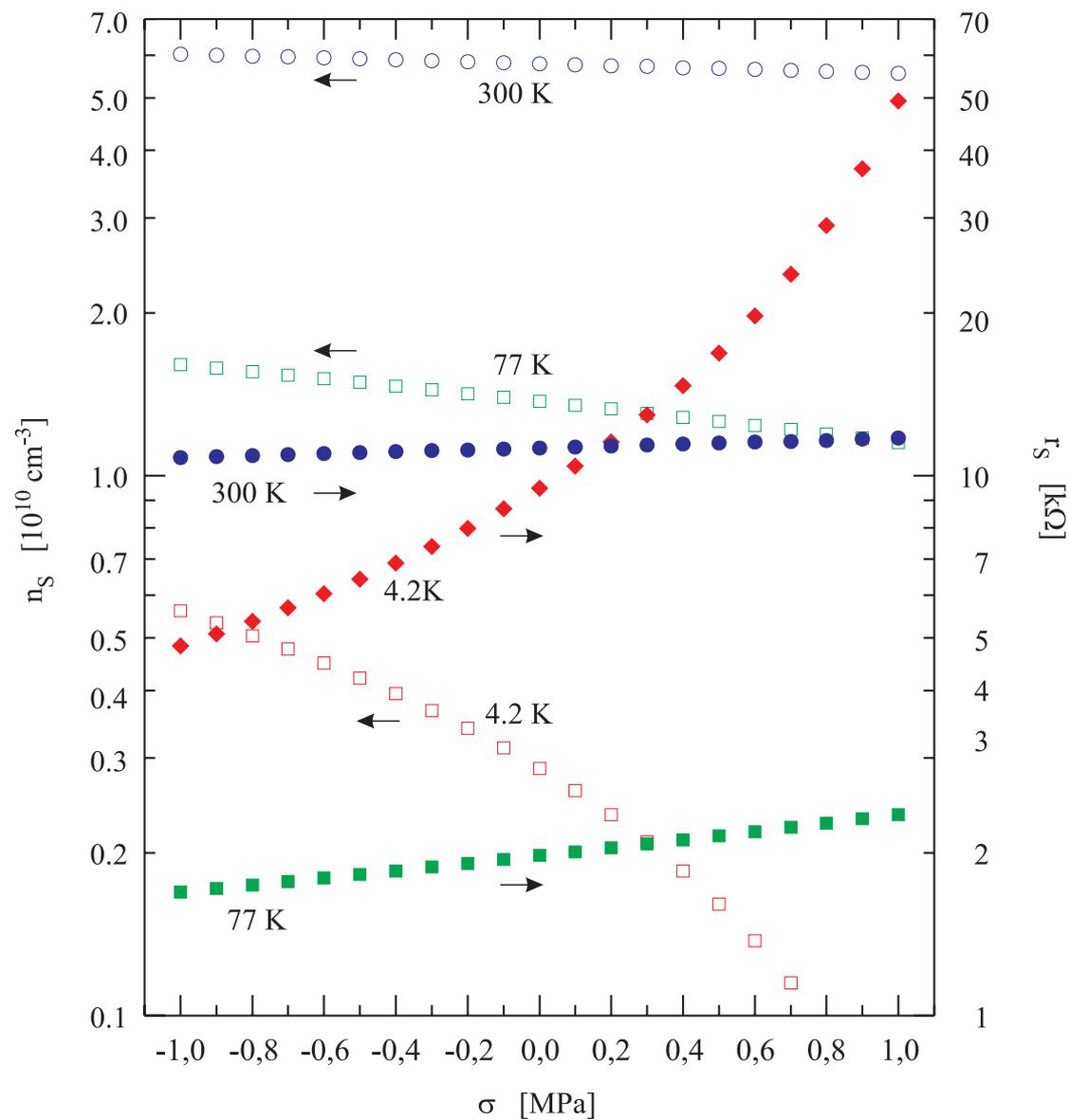


Abbildung 5.13: Änderung der Flächenelektronendichte  $n_S$  (offene Symbole) und des Schichtwiderstandes  $r_S$  (geschlossene Symbole) als Funktion der mechanischen Spannung  $\sigma$  in Struktur C bei  $T = 4.2 \text{ K}$  (stehende Quadrate),  $T = 77 \text{ K}$  (liegende Quadrate) und  $T = 300 \text{ K}$  (Kreise). Die Ableitung der mechanischen Spannung ist 0. Die Steigung der Graphen für  $r_S$  entspricht aufgrund der logarithmischen Auftragung direkt dem PER1-Effekt  $\Pi_1$ . Dieser ist, verglichen mit der Piezoresistivität in Si, um Größenordnungen höher und nimmt zu niedrigeren Temperaturen stark zu.



# Kapitel 6

## Messung der erhöhten Piezoresistivität

Die erhöhte Piezoresistivität in III-V Halbleiterschichten sollte durch Messungen experimentell bestätigt werden. Für den Meßaufbau wurde das Funktionsprinzip eines RKM als Anregung aufgegriffen. Die Messungen wurden an Cantilevern der Dimension  $20 \times 5 \times 0.5$  mm durchgeführt, die damit viel größer sind als die in der RKM verwendeten Cantilever. Das hat den Vorteil, daß die mechanische Spannung und ihre Ableitung, deren Kenntnis für den PER2-Effekt wichtig ist, gut bekannt sind. Ferner wird die technologische Realisierung der Cantilever wesentlich vereinfacht.

### 6.1 Meßaufbau

Es wurde ein Versuchsaufbau entworfen und realisiert, um die piezoresistiven Koeffizienten bzw. die PER-Effekte zu messen. An diese Messung waren folgende Anforderungen gestellt:

- Es sollen Absolut- und nicht Relativgrößen gemessen werden. Nur so sind die Ergebnisse mit den Simulationsrechnungen (Kap. 5) und mit den Literaturwerten der normalen Piezoresistivität vergleichbar.
- Neben der mechanischen Spannung selbst soll die räumliche Ableitung<sup>1</sup> der Spannung im Halbleiter bekannt sein, da der PER1-Effekt proportional zur

---

<sup>1</sup>Damit ist gemeint, daß bei uniaxialer Spannung  $\sigma$  in  $y$ -Richtung und der Geometrie nach Bild 2.1 die Ableitung  $\partial\sigma/\partial x$  bekannt sein soll.

mechanischen Spannung und der PER2-Effekt proportional zur Ableitung der mechanischen Spannung sind.

- Es sollen Messungen bei Raumtemperatur und bei tieferen Temperaturen durchgeführt werden, weil eine Motivation der Arbeit die Entwicklung von Sensoren für tiefe Temperaturen ist.
- Es sollen Messungen für verschiedene Geometrien durchgeführt werden. Wenn die normale Piezoresistivität gegenüber den PER-Effekten überwiegt, sollen die drei Koeffizienten  $\pi_{11}$ ,  $\pi_{12}$  und  $\pi_{44}$  unabhängig voneinander bestimmt werden können.
- Die piezoresistiven Widerstände müssen kontaktiert werden. Die Kontakte auf GaAs können erhebliche Kontaktwiderstände aufweisen, diese sollen in den Messungen nicht enthalten sein.

Die Messungen wurden im Rahmen einer Diplomarbeit durchgeführt [5].

Der prinzipielle Versuchsaufbau ist in Bild 2.2 gezeigt. Ein Halbleiterchip mit den oben angegebenen Dimensionen wird auf der linken Seite eingespannt und kann auf der rechten Seite mit einer Kraft beaufschlagt werden. Die Dicke des Chips ist die Substratdicke<sup>2</sup>, die bei den in dieser Arbeit verwendeten Proben  $500\ \mu\text{m}$  bzw.  $350\ \mu\text{m}$  war. Die zu messenden Widerstände liegen auf der Oberseite des Cantilevers. Es wurden zwei Meßkonfigurationen benutzt, die als „Konfiguration A“ und „Konfiguration B“ bezeichnet werden. In der Konfiguration A wird die Kraft  $F$  in  $x$ - d.h. (100)-Richtung ausgeübt und an der Oberfläche des Cantilevers herrscht uniaxiale Spannung in  $y$ -Richtung (Kap. 2.1.1). Dort ist (Gl. 2.13):

$$\sigma = \sigma_{yy} = -\frac{6F(L-y)}{BD^2} \quad (6.1)$$

Dabei ist  $L - y$  der Abstand des Punktes der Krafteinleitung vom jeweiligen Widerstand. In der Konfiguration B wird die Kraft in  $z$ -, d.h. (0 $\bar{1}$ 1)-Richtung ausgeübt und die Widerstände liegen in der neutralen Faser, wo  $\sigma_{zz}$  verschwindet und nur die Komponenten  $\sigma_{yz}$  des Spannungstensors ungleich Null ist. Durch Messung der Widerstände bei verschiedenen ausgeübten Kräften wird die Piezoresistivität des Halbleiters bestimmt.

Der Chip wird direkt aus dem epitaxierten Wafer abgespalten. Dadurch ist er nahezu exakt quaderförmig und seine Abmessungen sind genau meßbar. Daher ist

---

<sup>2</sup>Genaugenommen ist die Dicke des Chips gegeben durch die Substratdicke plus der Dicke der durch Epitaxie aufgetragenen Schicht.

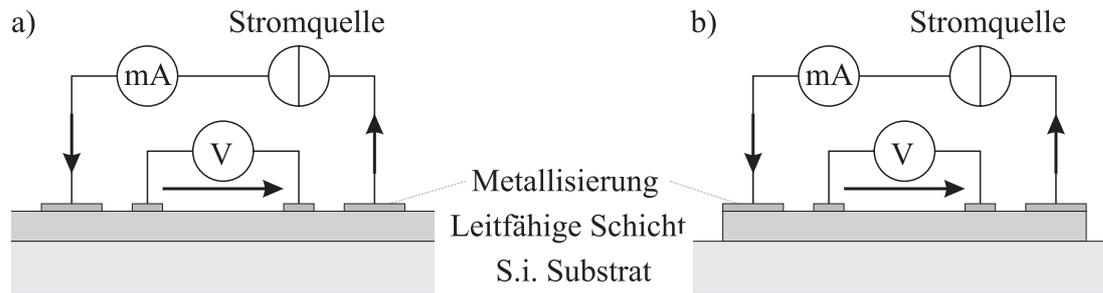


Abbildung 6.1: Prinzip der Vierpunktmessung. Da die Spannung stromlos gemessen wird, werden die Kontakt- und Zuleitungswiderstände aus der Messung eliminiert. In Bild a) sind die Elektroden ohne weitere Strukturierung des Halbleiters aufgebracht, in Bild b) ist die oberste Schicht des Halbleiters durch Mesa-Ätzung strukturiert.

auch die Berechnung der mechanischen Spannung und ihrer Ableitung nach Gl. 2.13 sehr genau. Auf die Oberfläche des Chips werden strukturierte Metallelektroden aufgebracht, über die der Schichtwiderstand gemessen wird. Die Widerstandsmessung erfolgt in Vierpunkttechnik, deren Prinzip in Bild 6.1 dargestellt ist. Bei der Vierpunktmessung entfallen die Zuleitungs- und Kontaktwiderstände. Insbesondere die Eliminierung der Kontaktwiderstände ist wichtig, da ihre Größe ebenfalls von der mechanischen Spannung abhängig sein kann [11].

Die Elektroden bestehen aus einer dünnen ( $\sim 500$  nm) Metallisierung, die direkt auf die oberste, leitfähige Schicht des Wafers aufgebracht wird. Diese oberste Schicht des Wafers wurde durch Epitaxie auf das semiisolierenden (s.i.) Substrat hergestellt. Auf eine Strukturierung der Epitaxieschicht selbst wurde ganz verzichtet (Bild 6.1 a)). So wird der Verlauf der mechanischen Spannung im Halbleiter, wie er durch Gl. 2.13 gegeben ist, möglichst wenig beeinflusst. In früheren Versuchen wurden die oberste, leitfähige Schicht des Halbleiters durch Mesa-Ätzung<sup>3</sup> strukturiert (Bild 6.1 b)). Der Vorteil dabei ist, daß die Stromrichtung in den so definierten Widerständen exakt definiert ist. Das wurde aber mit dem Nachteil erkauft, daß die Geometrie der Widerstände, insbesondere an ihren Rändern, nicht exakt definiert und somit die mechanische Spannung und ihre Verteilung im Widerstand nicht bekannt war. Selbst wenn eine quaderförmige Geometrie der Widerstände angenommen wird, ist die Berechnung der Verteilung der mechanischen Spannung in ihnen nur numerisch möglich und erschwert die Interpretation der Meßergebnisse [25].

<sup>3</sup>Die Bezeichnung Mesa-Ätzung ist von der spanischen Bezeichnung Mesa für Tafelberg abgeleitet.



aufgehoben und es entsteht eine elektrische Spannung quer zur Stromrichtung. Die in der Elektrodenanordnung III gemessene relative Widerstandsänderung, die durch die mechanische Spannung in Konfiguration B induziert wird, entspricht daher der Messung des Scherkoeffizienten der Piezoresistivität  $\pi_S$  (Gl. 2.18). Durch die drei unabhängigen Messungen von  $\pi_L$ ,  $\pi_T$  und  $\pi_S$  können die Koeffizienten  $\pi_{11}$ ,  $\pi_{12}$  und  $\pi_{44}$  abgeleitet werden (Gl. 2.17 und 2.18).

Die Kreise links auf der Probe (Bild 6.2) dienen der groben Bestimmung des spezifischen Kontaktwiderstandes. Weiterhin sind die Justiermarken für die Lithografie, für die Einspannung des Cantilevers und für die Krafteinleitung zu sehen.

Die Kraft auf den Cantilever wurde mit einem Permanentmagneten und einer Spule erzeugt. So konnte die Kraft beliebig eingestellt und die Messung automatisiert werden. Da die Abhängigkeit der Kraft vom Spulenstrom nicht von vornherein bekannt war, mußte eine Eichkurve erstellt werden. Zu diesem Zweck wurde die Auslenkung  $u$  des Cantilevers als Funktion des Spulenstromes  $I$  gemessen. Es ergibt sich  $du/dI = 0.57 \pm 0.09 \mu\text{m}/\text{mA}$  für eine Waferdicke von  $500 \mu\text{m}$  und  $du/dI = 0.81 \pm 0.02 \mu\text{m}/\text{mA}$  für eine Waferdicke von  $350 \mu\text{m}$ . Die Federkonstante  $k$  des Cantilevers kann aus seinen Dimensionen berechnet werden, es ist in Konfiguration A (Gl. 2.13):

$$k = \frac{F}{u} = \frac{BD^3E}{4L^3} \quad (6.2)$$

Das E-Modul in  $y$ -Richtung ist  $80.6 \text{ GPa}$  (Tab. 2.1), die Abmessungen sind  $L = 16 \text{ mm}$ ,  $B = 5 \text{ mm}$  und  $D = 500 \mu\text{m}$  bzw.  $D = 350 \mu\text{m}$ . Daraus ergibt sich  $k = 3.07 \cdot 10^{-3} \text{ N}/\mu\text{m}$  bzw.  $k = 1.05 \cdot 10^{-3} \text{ N}/\mu\text{m}$ . Aus der gemessenen  $u/I$ -Relation und Gl. 6.2 ergibt sich die Eichung zu  $dF/dI = 1.75 \cdot 10^{-3} \text{ N}/\text{mA}$  für  $D = 500 \mu\text{m}$  und  $dF/dI = 0.85 \cdot 10^{-3} \text{ N}/\text{mA}$  für  $D = 350 \mu\text{m}$ .

Der gesamte Aufbau steht in einem selbstgebauten Dewar, der es erlaubt, die Umgebungstemperatur zwischen  $77\text{K}$  (Temperatur des flüssigen Stickstoffs) und Raumtemperatur einzustellen. Die Temperaturmessung erfolgt mit einem Widerstandsthermometer (Pt 100).

Die Messung wird von einem PC gesteuert. Dabei geschieht die Vierpunktmessung über ein digitales Multimeter (Keithley 2000), das mit dem PC über einen IEEE-Bus kommuniziert. Die verschiedenen Elektrodenanordnungen werden über Relais mit dem DVM verbunden, wobei die Relais wiederum vom PC gesteuert werden.

## 6.2 Technologie

Bevor die Proben im Aufbau vermessen werden können, müssen sie prozessiert werden. Die Prozessierung besteht aus folgenden Schritten, die in Bild 6.3 veranschaulicht sind:

- Epitaxie
- Spalten
- Fotolithografie
- Metallisierung
- Lift-Off
- Tempern
- Einbau in Probenhalter
- Bonden

Die Epitaxie wurde von Partneruniversitäten durchgeführt, in allen Fällen wurde Molekularstrahlepitaxie (MBE) benutzt. Die Epitaxieschichten wurden auf semiisolierende (100)-GaAs-Wafer aufgebracht. Die Struktur A wurde an der TU Darmstadt von J. Sigmund am Lehrstuhl von Prof. Hartnagel, die Struktur B am Walter Schottky Institut von G. Böhm unter Leitung von Prof. Amann hergestellt. Die Proben werden mit einem Skalpell auf die erforderliche Größe (20 x 5 mm) gespalten. Dabei spaltet die Probe entlang der (011)- oder äquivalenter Achsen, weil so am wenigsten Bindungen aufgebrochen werden müssen. Die so entstehenden Chips sind nahezu ideal quaderförmig.

Mit dem Lithografieschritt werden die Elektrodenanordnungen definiert. Die Lithografie besteht aus folgenden Einzelschritten: Belacken des Waferstücks, Tempern, Belichten, Entwickeln. Zum Belacken wird der Wafer auf einen Vakuum-Chuck gelegt und in schnelle Rotation versetzt (typisch 4000 Upm). Dann wird eine kleine Menge Fotolack auf den Wafer getropft und der Lack bildet durch die Fliehkraft eine dünne (typisch  $1\ \mu\text{m}$ ), homogene Schicht. Die nicht vom Waferstück bedeckten Ansaugkanäle des Vakuum-Chucks werden mit einer Folie abgedeckt, ohne die das Waferstück nicht auf dem Chuck gehalten würde. Es wird Positivlack AZ1518 verwendet. Problematisch bei kleinen Waferstücken ist, das am Rand des Stücks

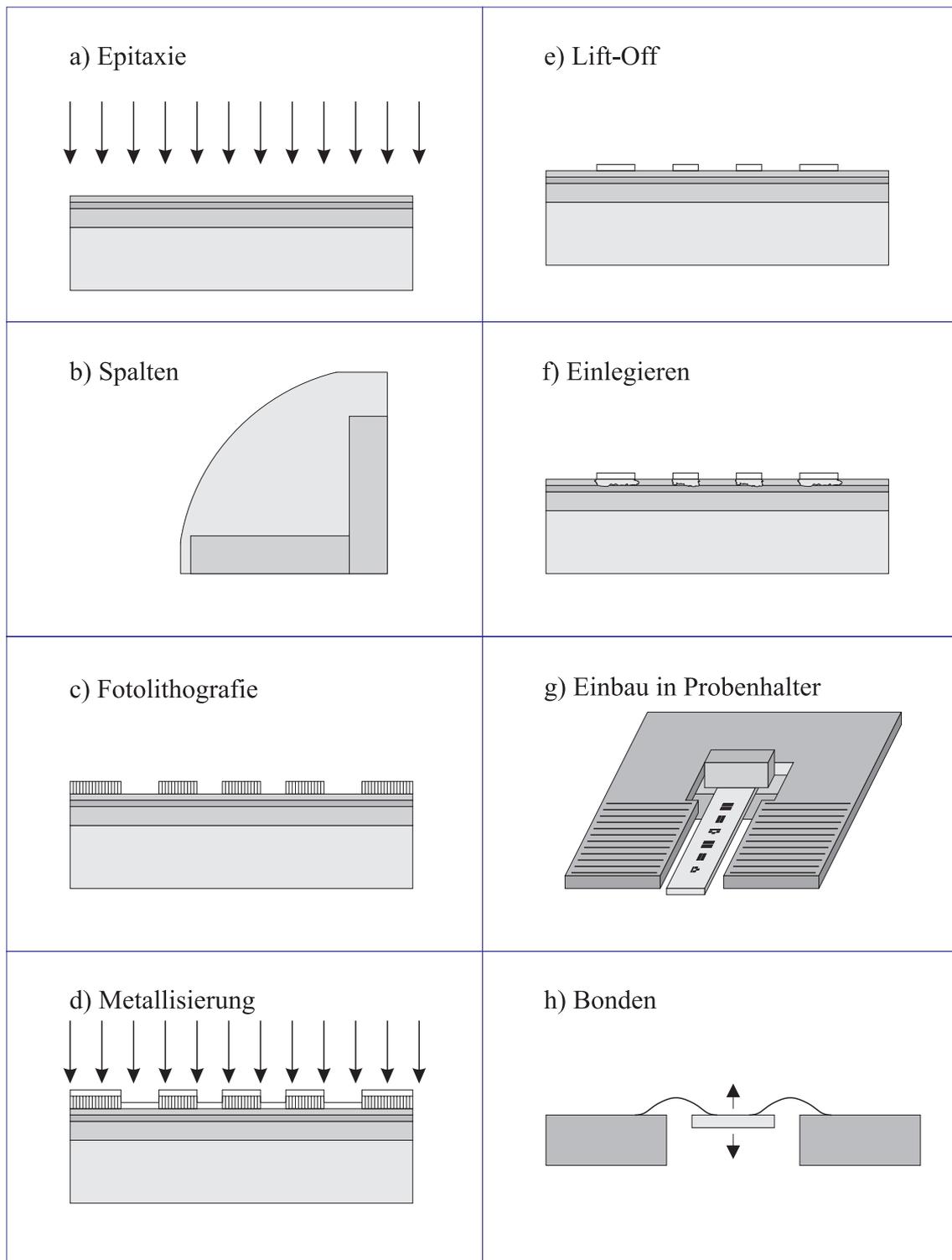


Abbildung 6.3: Prozessierung im Überblick.

(ca. 0.5 bis 1 mm) Lacküberhöhungen entstehen. An diesen Stellen wird der Lack nicht durchentwickelt. Bei der vorliegenden Struktur (Bild 6.2) ist das Problem aber unkritisch, da am Rand des Waferstücks keine Elektroden liegen. Das Waferstück wird vor dem Belichten 5 min. bei 90° getempert, um den Lack zu trocknen. Durch Kontaktbelichtung mit UV-Licht im sogenannten Mask-Aligner wird die Struktur von der Maske in den Fotolack übertragen. Dabei werden nur die Stellen belichtet, an denen später die Metallisierung stehen bleiben soll. Damit die Maske überall auf dem Waferstück plan aufliegt, werden weitere Waferstücke mit exakt der gleichen Dicke seitlich neben das zu belichtende Stück gelegt. Anschließend wird der Lack in 1:4 verdünnter 4%-iger Kalilauge entwickelt. Dabei löst sich der belichtete Lack in der Lauge, während der nicht belichtete Lack unlöslich ist und somit auf dem Waferstück verbleibt.

Beim Entwickeln verbleiben meistens einige Reste des Lacks auch auf den belichteten Flächen. Diese Reste werden im Plasmaverascher entfernt. Dabei wird durch das Sauerstoffplasma der Fotolack homogen um ca. 100 nm abgetragen. Dadurch ist gewährleistet, daß auf den entwickelten Flächen keinerlei Reste verbleiben. Auf den nicht entwickelten Flächen wird der Lack zwar auch etwas dünner, er bleibt aber noch dick genug, um seine Funktion zu erfüllen.

Auf die strukturierte Fotolackschicht wird die Metallisierung durch Vakuum-Aufdampfen aufgebracht. Wichtig ist, daß die Metallisierung mit dem Halbleiter einen Ohm'schen Kontakt bildet. Bei Halbleitern mit großer Barriere wie dem GaAs sind dazu besondere Prozessschritte einzuhalten (siehe unten). Die Prozessierung der Ohm'schen Kontakte wurde im Rahmen einer Diplomarbeit entwickelt [48]. Im folgenden wird kurz das Prinzip Ohm'scher Kontakte auf Halbleitern dargestellt, um die Problematik zu erläutern.

An der Oberfläche des Halbleiters ist das Fermi-Niveau an einer bestimmten Stelle relativ zur Leitungsbandkante gepinnt, beim GaAs in der Mitte der Bandkante (vgl. Kap. 4.1). Es entsteht eine Potentialbarriere der Höhe  $\Phi_B$  zwischen Halbleiter und Metall (Bild 6.4). Bei einem  $n$ -dotierten Halbleiter der Dotierung  $N_D$  ist die Weite  $W$  der Raumladungszone gegeben durch:

$$W = \sqrt{\frac{2\epsilon_0\epsilon_r}{e_0} \Phi_B \frac{1}{N_D}} \quad (6.3)$$

Die Raumladungsdichte in der Raumladungszone ist  $+e_0N_D$ . Die Anzahl der Elektronen, welche die Raumladungszone vom Metall in den Halbleiter überwinden, ist unabhängig von der anliegenden elektrischen Spannung, da die zu überwindende

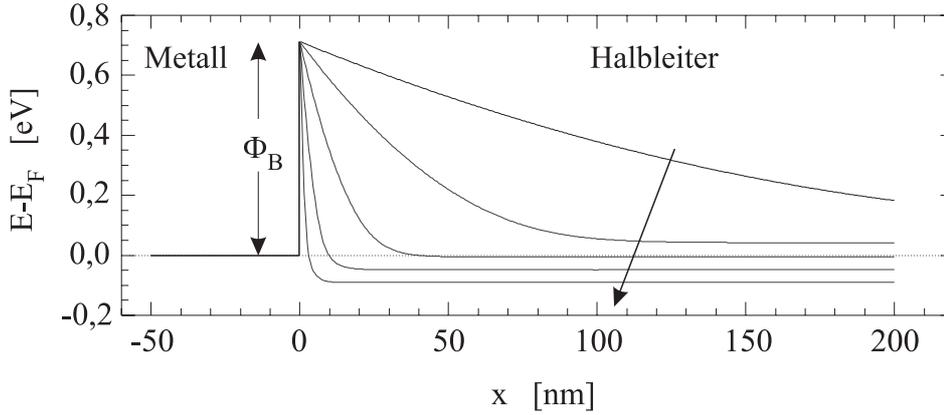


Abbildung 6.4: Bandverlauf bei Metall-Halbleiter-Übergang für die Dotierungen  $N_D = 10^{16}, 10^{17}, 10^{18}, 10^{19}$  und  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$  (in Pfeilrichtung). Links von  $x = 0$  befindet sich das Metall, rechts davon der Halbleiter ( $n$ -GaAs). Bei üblicher Dotierung entsteht eine Schottky-Diode, erst bei sehr hohen Dotierungen fangen die Elektronen an, die Barriere zu durchtunneln. Dann bildet sich ein Ohm'scher Kontakt mit linearer Kennlinie und niedrigem spezifischen Kontaktwiderstand aus.

Barriere  $\Phi_B$  durch die Spannung nahezu unverändert bleibt. Die Anzahl der Elektronen, welche die Barriere vom Halbleiter in das Metall überwinden ist dagegen stark von der anliegenden Spannung  $U$  abhängig, weil die von den Elektronen zu überwindende Potentialdifferenz um  $U$  abgeflacht bzw. erhöht wird. Es ergibt sich im Schottky-Modell analog wie beim abrupten  $pn$ -Übergang eine Dioden-Kennlinie [53]:

$$j(U) = j_0 \left( \exp \frac{U}{U_T} - 1 \right) \quad \text{mit} \quad j_0 = R^* T^2 \exp \left( -\frac{\Phi_B}{U_T} \right) \quad (6.4)$$

Dabei sind  $j$  die Stromdichte,  $j_0$  die Sperrstromdichte,  $U_T = k_B T / e_0$  die Thermospannung und  $R^*$  die Richardson-Konstante:

$$R^* = \frac{m_n^* e_0 k_B^2}{2\pi^2 \hbar^3} = 120 \frac{m_n^*}{m_0} \frac{\text{A}}{\text{cm}^2 \text{K}^2} \quad (6.5)$$

Nur die Elektronen, welche genügend hohe thermische Energie haben, können die Barriere überwinden.

Bei einem Ohm'schen Kontakt möchte man aber eine lineare, möglichst steile  $I - U$  Kennlinie haben. Um das zu erreichen, muß der Stromfluß durch einen anderen physikalischen Mechanismus erfolgen, nämlich durch Tunneln durch die Raumladungszone. Dazu muß die Raumladungszone sehr schmal werden, was nach Gl. 6.3 durch eine sehr hohe Dotierung erreicht werden kann. Weiterhin geht beim

Tunneln natürlich auch die Höhe der Barriere ein. Wenn man davon ausgeht, daß der Stromfluß überwiegend durch Tunneln verursacht wird, ergibt sich eine lineare Kennlinie mit einem spezifischen Kontaktwiderstand  $r_c$  [53]:

$$r_c := RA \quad r_c \sim \exp \frac{\Phi_B}{\sqrt{N_D}} \quad (6.6)$$

Dabei ist  $R$  der Kontaktwiderstand und  $A$  die Fläche des Kontaktes. Es ergeben sich zwei Strategien zur Erzielung eines guten Ohm'schen Kontaktes: eine hohe Oberflächendotierung  $N_D$  und eine niedrige Potentialbarriere  $\Phi_B$ . Eine niedrigere Potentialbarriere wird in der Regel durch Halbleiter mit kleiner Bandlücke erreicht, für GaAs eignet sich (verspanntes) InGaAs. Eine sehr hohe Oberflächendotierung wird in der Regel eingebracht, indem die Metallisierung selbst als Dotierquelle benutzt wird.

Dazu wird in dieser Arbeit eine eutektische Au/Ge-Mischung (Massenanteil 12 % Ge) verwendet [18]. Die eutektische Mischung wird durch Tempern in den Halbleiter einlegiert. Dabei wird der Wafer der Schmelztemperatur des Eutektikums (360°C) ausgesetzt und die Schmelze löst den Halbleiter an. Dabei entsteht eine Ge/GaAs-Legierung, die man als sehr hoch Ge-dotierte GaAs-Schicht auffassen kann. Ge baut sich im GaAs bevorzugt auf Ga-Plätze ein und wirkt somit als Donator. Das wird durch Zugabe von Ni unterstützt, das die Diffusion des Ga begünstigt. Die Kristallstruktur des Halbleiters wird an den Kontakten massiv gestört, während der Halbleiter an den nicht metallisierten Stellen ungestört bleibt. Es ist sehr wichtig, die Probe „richtig“ zu Tempern. Je nach verwendetem Temperprozess kann die Kennlinie des Kontaktes komplett sperrend, diodenartig oder mehr oder wenig gut Ohm'sch sein. Wird die Probe bei zu hoher Temperatur getempert, kann die Epitaxieschicht degradiert werden.

Im Sauerstoffplasma oder einfach an Luft kann sich ein dünnes Oxid auf der Halbleiteroberfläche gebildet haben. Dieses Oxid wird direkt vor dem Einbringen der Probe in die Aufdampfanlage weggeätzt, weil es den Ohm'sche Kontakt verhindern würde. Bei GaAs-Strukturen wird dazu konz. Salzsäure benutzt, sie ätzt selektiv das Oxid und stoppt auf dem GaAs [7].

Die Metallisierung für die  $n$ -Kontakte besteht aus 10 nm Cr, 100 nm Au/Ge, 28 nm Ni und 400 nm Au. Die Schichten werden im Vakuum aufgedampft. Dabei werden Au/Ge und Au thermisch verdampft, während Cr und Ni durch Elektronenstrahlheizung verdampft werden. Die Chromschicht dient als Haftvermittler, ohne sie würde die Metallisierung beim nachfolgenden Lift-Off-Prozess abplatzen. Die Funktion der Au/Ge-Schicht wurde schon erläutert. Das Ni dient als Flußmittel und

sorgt dafür, daß Ge/GaAs-Legierung sich gleichmäßig über den Kontakt erstreckt. Außerdem beschleunigt Ni die Diffusion von Ga im GaAs, so daß das Ge effektiver auf den Ga-Plätzen eingebaut werden kann. Die abschließende Goldschicht hat zwei Aufgaben: Sie sorgt einerseits dafür, daß der Kontakt gut gebondet werden kann, weil Gold sehr duktil ist. Andererseits wird eine gute laterale Leitfähigkeit des Kontaktes erzielt, da Gold im Gegensatz zur Au/Ge-Legierung ein sehr guter elektrischer Leiter ist (spezifischer Widerstand  $r = 2 \cdot 10^{-6} \Omega\text{cm}$ ). Auf noch dickere Goldschichten wurde verzichtet, da man dann Probleme mit der Zuverlässigkeit des Lift-Off-Prozesses bekommt.

Nach dem Aufdampfen bedeckt die Metallisierung den Wafer mit dem strukturierten Photolack ganzflächig. Durch den sogenannten Lift-Off-Prozess werden die Strukturen in die Metallisierung übertragen. Dabei wird das Waferstück unter Ultraschall in ein Aceton-Bad gelegt. Das Aceton löst den Photolack (unabhängig davon, ob er belichtet wurde) und schwemmt dadurch die darüber liegende Metallisierung weg. An den Kanten der Strukturierung reißt die Metallisierung, daher ist es wichtig, daß sie nicht zu dick ist. Nach Literaturangaben [4] ist es günstiger, für den Lift-Off Negativlack anstelle von Positivlack zu verwenden, da dieser überstehende Kanten erzeugt und so die Metallisierung definierter abreißt. Bei den durchgeführten Versuchen wurde aber festgestellt, daß in diesem Fall das Arbeiten mit Positivlack bezüglich Zuverlässigkeit und Kantenschärfe die besseren Ergebnisse liefert.

Das Tempern geschieht in einem Ofen, in dem die Probe in einer Formiergasatmosphäre (5 % H<sub>2</sub>, 95 % N<sub>2</sub>) über Lampenheizer sehr schnell erhitzt werden kann. Das Formiergas verhindert die Oxidation des Halbleiters, der Wasserstoffanteil wirkt reduzierend. Dabei liegt die zu tempernde Probe auf einem 4"-Si-Wafer, der nur als Träger dient. Der Si-Wafer seinerseits liegt auf zwei Thermoelementen. Die Thermoelemente reagieren relativ träge auf Temperaturänderungen (Reaktionszeit ca. 2 s), was in der thermischen Masse des Si-Wafers und der Thermoelemente selbst begründet liegt. Es hat sich gezeigt, daß es sehr wichtig ist, den Temperprozess kurz zu halten und trotzdem die Temperatur möglichst genau einzuhalten. Andererseits darf man auch nicht zu schnelle Temperaturrampen fahren, weil dann die Differenz zwischen wahrer Temperatur und gemessener Temperatur zu groß werden. Optimale Ergebnisse wurden mit dem in Tab. 6.1 gezeigten Temperprozess erzielt.

Die Probe wird in den Probenhalter eingespannt, wodurch ein Cantilever entsteht, der einer definierten mechanischen Spannung ausgesetzt werden kann. Auf dem Probenhalter ist eine Platine integriert, deren Leiterbahnen durch IC-Steckerleisten einfach kontaktiert werden können.

Rampe	Dauer [s]	Rate [°C/s]	Start [°C]	Ende [°C]
1	30	10	0	300
2	6	5	300	330
3	5	2	330	340
4	5	1	340	345
5	7.5	0.4	345	348
6	10	0.2	348	350
7	10	0	350	350
8	0	-	350	0

Tabelle 6.1: Thermische Behandlung der Kontakte zur Einlegierung der Au/Ge-Metallisierung in  $n$ -GaAs.

Die Elektroden wurden mit der Platine durch sogenannte Bond-Drähte verbunden. Dabei handelt es sich um Au-Drähte mit einem Durchmesser von  $25\ \mu\text{m}$ , die sich unter dem Einfluß von Druck und Ultraschall mit der metallenen Unterlage verbinden. Die Kontaktierung durch Mikromanipulatoren scheidet aus, da so eine zusätzliche, undefinierte Kraft auf den Cantilever ausgeübt würde. Da die gebondeten Verbindungen sehr lang sind (3-5 mm) und auf Biegung beansprucht werden, ist die Kraft, welche die Bond-Drähte auf den Cantilever ausüben, vernachlässigbar.

### 6.3 Ergebnisse

Von der Struktur A sind zwei Proben vorhanden, deren Längsachse mit der (011)-Richtung (Probe #A1) bzw. der (0 $\bar{1}$ 1)-Richtung (Probe #A2) zusammenfallen. Es wurden Messungen bei  $T = 77\ \text{K}$  und bei  $T = 300\ \text{K}$  durchgeführt. Die Waferdicke beträgt  $350\ \mu\text{m}$ . Die Ergebnisse sind in Tab. 6.2 dargestellt.

Die Messungen bestätigen die grundsätzlichen Aussagen der Simulation. Insbesondere zeigen sich die folgenden drei Punkte:

- Die absolute Größe der Piezoresistivität bei  $T = 77\ \text{K}$  wird von der Simulation ungefähr richtig berechnet.
- Die Piezoresistivität nimmt mit abnehmender Temperatur stark zu.
- Das Vorzeichen der Widerstandsänderung ist bei  $T = 77\ \text{K}$  in Probe #A1 und #A2 gerade entgegengesetzt.

	$\Pi_3$ #A1 [ $10^{-11}$ Pa $^{-1}$ ] $T = 77$ K	$\Pi_3$ #A2 [ $10^{-11}$ Pa $^{-1}$ ] $T = 77$ K	$\Pi_3$ #A1 [ $10^{-11}$ Pa $^{-1}$ ] $T = 300$ K	$\Pi_3$ #A2 [ $10^{-11}$ Pa $^{-1}$ ] $T = 300$ K
Ia	+360	-	+16	+1
IIa	+390	-1450	-	-
Ib	+250	-400	-	+1
IIb	+490	-890	-	-
	$+372 \pm 86$	$-910 \pm 430$	+16	+1
Simulation	+540	-540	+53.8	-53.8

Tabelle 6.2: Ergebnisse der Messungen an Struktur A im Vergleich mit den Ergebnissen der Simulationsrechnungen (Kap. 5.1).

Allerdings streuen die Meßergebnisse sehr stark. Das wird auf variierende Schichtparameter über den Wafer zurückgeführt. In den Simulationen wurde festgestellt, daß kleine Änderungen in den Schichtparametern große Änderungen in der Piezoresistivität bewirken können. Insbesondere bei der Probe #A2 sind die Variationen vermutlich darauf zurückzuführen, daß Elektrodenanordnungen sehr nahe am Rand des Wafers liegen. Es werden keine meßbaren Werte für den Scherwiderstand  $r_{yz}$  gefunden, der mit den Elektrodenkonfigurationen III gemessen werden sollte. Diese Feststellung steht in voller Übereinstimmung mit dem Modell. Eine signifikante Abhängigkeit der Piezoresistivität von der Richtung des Stromes wird nicht gefunden, allerdings scheint die transversale Piezoresistivität (Elektrodenkonfiguration II) etwas größer als die longitudinale Piezoresistivität (Elektrodenkonfiguration I) zu sein. Der Meßwert bei Raumtemperatur bleibt hinter dem berechneten Wert zurück. Da dieser Wert verhältnismäßig klein ist, können hier andere Beiträge zur Piezoresistivität wirksam werden, die im Modell vernachlässigt wurden. Die Tatsache, daß das Vorzeichen der Widerstandsänderung bei den Proben #A1 und #A2 bei  $T = 77$  K entgegengesetztes Vorzeichen hat, ist ein eindeutiger qualitativer Beweis dafür, daß die Widerstandsänderungen durch piezoelektrische Effekte verursacht werden.

Von der Struktur B ist eine Probe vorhanden, deren Längsachse die  $(0\bar{1}1)$ -Richtung ist. Die Waferdicke beträgt  $500 \mu\text{m}$ . In Tab. 6.3 sind die Meßergebnisse zusammengefaßt. Hier zeigt sich bei  $T = 77$  K eine befriedigende Übereinstimmung der Messungen mit der Simulation. Bei Raumtemperatur allerdings ergeben die Messungen gegenüber der Simulation sehr viel kleinere Werte mit entgegengesetztem Vorzeichen, die Ursache der Abweichung ist unbekannt.

Beide Messungen zeigen, daß die Piezoresistivität in dünnen Schichten piezoelek-

	$\Pi_3$ [ $10^{-11} \text{ Pa}^{-1}$ ] $T = 77 \text{ K}$	$\Pi_3$ [ $10^{-11} \text{ Pa}^{-1}$ ] $T = 300 \text{ K}$
Ia	-113	+17
IIa	-519	+12
Ib	-214	+14
IIb	-129	-
	$-240 \pm 160$	$+14 \pm 2$
Simulation	-319	-240

Tabelle 6.3: Ergebnisse der Messungen an Struktur B im Vergleich mit den Ergebnissen der Simulationsrechnungen (Kap. 5.2).

trischer Halbleiter deutlich über derjenigen in den entsprechenden Volumenschichten liegen können. Dieser Vorteil zeigt sich vor allem bei tiefen Temperaturen, so daß diese Schichten insbesondere für Anwendungen in diesem Temperaturbereich geeignet sind.

# Kapitel 7

## Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden die piezoresistiven Eigenschaften von III-V Halbleiter-Schichtstrukturen untersucht. Durch Messungen und Simulationsrechnungen wurde festgestellt, daß die Piezoresistivität in diesen Strukturen um Größenordnungen höher als diejenige in Volumen-Silizium sein kann. Durch Nutzung dieses Effektes werden neue Anwendungen für die Rasterkraftmikroskopie erschlossen, bei denen hohe Empfindlichkeit, hohe Auflösung, Tauglichkeit für tiefe Temperaturen und kompakte Sensoren gefordert sind. Zur Erklärung dieser „erhöhten Piezoresistivität“ wurde ein physikalisches Modell aufgestellt, das die piezoelektrischen Eigenschaften der III-V Halbleiter als Ursache des Effektes identifiziert. Auf diesem Modell aufbauend wurde ein Programm entwickelt, mit dem die Piezoresistivität in beliebigen piezoelektrischen Halbleiter-Schichtstrukturen berechnet werden kann.

Es wurden zwei Mechanismen identifiziert, die in piezoelektrischen Halbleitern die Piezoresistivität erhöhen. Sie werden als PER-Effekte (piezoelektroresistive Effekte) bezeichnet. Bei beiden Effekten modifiziert die mechanische Spannung den Bandverlauf im Halbleiter durch piezoelektrisch induzierte Polarisierung senkrecht zur Schichtebene. Der modifizierte Bandverlauf bewirkt eine erhöhte bzw. erniedrigte Ladungsträgerdichte und damit einen neuen Mechanismus der Piezoresistivität.

Der PER1-Effekt tritt an Grenzflächen zweier Materialien auf, die unterschiedliche Piezoelektrizität aufweisen, z.B. an GaAs/AlGaAs-Grenzflächen. Er ermöglicht insbesondere piezoresistive Sensoren bei kryogenen Temperaturen. Der PER2-Effekt wird durch Gradienten der mechanischen Spannung im Halbleiter verursacht und nimmt daher bei Miniaturisierung stärker zu als die normale Piezoresistivität. Er ist damit optimal zur Realisierung mikromechanischer Bauelemente geeignet.

Aus dieser theoretischen Beschreibung des PER1- und des PER2-Effektes lassen sich quantitative Aussagen über die Widerstandsänderung durch mechanische Spannung treffen, wenn man den Bandverlauf und die Ladungsträgerdichten in den Halbleiterschichten berechnet. Dazu wurde ein Algorithmus aufgestellt, der diese selbstkonsistente Rechnung durchführt. Da der Algorithmus relativ aufwendige numerische Rechnungen beinhaltet, wurde er in einem Programm namens „piezo“ realisiert. Somit steht ein leistungsfähiges Werkzeug zur quantitativen Berechnung der „erhöhten Piezoresistivität“ zur Verfügung.

Die Simulationsrechnungen für drei Strukturen wurden ausführlich dargestellt und zwei davon anschließend mit Messungen verglichen. Generell führt eine niedrige Ladungsträgerdichte zu hoher Piezoresistivität, was aber einen hohen Schichtwiderstand nach sich zieht. Weiterhin nehmen die PER-Effekte mit abnehmender Temperatur stark zu, da die Ladungsträgerdichten dann aufgrund der verringerten thermischen Energie stärker auf Modifikationen des Bandverlaufs reagieren.

Die erste vorgestellte Struktur (Struktur A) ist eine GaAs-Homostuktur, die zwei dünne, dotierte Schichten enthält. Mit ihr wurde der reine PER2-Effekt demonstriert. Die wirksame Piezoresistivität ist (im Vergleich zu allen anderen bekannten piezoelektrischen Materialien) extrem groß. Bei einer Cantileverdicke von  $10\ \mu\text{m}$  und einer Temperatur von  $77\ \text{K}$  liegt sie zwei Größenordnungen über der „normalen Piezoresistivität“ des Siliziums und um vier Größenordnungen über der normalen Piezoresistivität des GaAs. Bei Raumtemperatur ist der PER2-Effekt in Übereinstimmung mit der Simulation deutlich kleiner als bei  $T = 77\ \text{K}$ .

Die zweite vorgestellte Struktur (Struktur B) ist eine HEMT-Struktur. In ihr treten beide PER-Effekte auf. Die beiden Effekte können sich je nach Anordnung des Piezoresistors verstärken oder abschwächen. Die HEMT-Struktur ist prinzipiell für Temperaturen bis zum absoluten Nullpunkt als Piezoresistor geeignet. Auch die Struktur B zeigt gegenüber der normalen Piezoresistivität des Siliziums oder GaAs deutlich erhöhte Piezoresistivität.

Mit einer AlAs/GaAs/AlGaAs-Doppelheterostruktur (Struktur C) wurden die theoretischen Möglichkeiten des PER1-Effektes ausgelotet. Diese Struktur zeigt gegenüber der Struktur B nochmals deutlich höhere Piezoresistivität. Die Wirkungsweise beruht auf einer Verschiebung des Leitungsbandes, die in dieser Struktur sehr effektiv durch mechanische Spannung induziert wird.

# Anhang A

## Symmetriebetrachtungen, verkürzte Schreibweise und Koordinatentransformation

Die Anzahl der unabhängigen und von Null verschiedenen Koeffizienten eines Tensors läßt sich allein durch Symmetriebetrachtungen z. T. erheblich reduzieren. Wird nämlich die Darstellung eines Tensors einer Symmetrietransformation unterzogen, dürfen sich die Koeffizienten nicht ändern. Dadurch ist es oft sinnvoll, eine verkürzte Schreibweise zu verwenden. In diesem Abschnitt werden die Symmetrietransformationen für das Zinkblende-Gitter und das Diamant-Gitter behandelt (Bild 2.3). Dann werden die Symmetrietransformationen auf die in dieser Arbeit vorkommenden Tensoren angewendet, und die sich jeweils ergebende verkürzte Schreibweise wird erläutert. Außerdem wird die Koeffizientendarstellung im Cantileversystem gezeigt (Bild 2.1). Die Symmetrietransformationen sind ein Spezialfall von kartesischen Koordinatentransformationen, d.h. der Übergang von einem kartesischen Koordinatensystem in ein anderes. Sie werden durch eine  $3 \times 3$ -Matrix dargestellt. Die Symmetrietransformationen für ein Gitter zeichnen sich dadurch aus, daß sie das Gitter in sich selbst überführen.

Im Zinkblende-Gitter (z.B. GaAs) und im Diamant-Gitter (z.B. Si) sind die Spiegelungen an den folgenden Ebenen Symmetrietransformationen:  $[1\bar{1}0] \rightarrow (S_1)$ ,  $[110] \rightarrow (S_2)$ ,  $[10\bar{1}] \rightarrow (S_3)$ ,  $[101] \rightarrow (S_4)$ ,  $[01\bar{1}] \rightarrow (S_5)$ ,  $[011] \rightarrow (S_6)$ . Diese Spie-

gelungen werden durch folgende Matrizen dargestellt:

$$\begin{aligned}
 S_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & S_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 S_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & S_4 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 S_5 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & S_6 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

Durch Nacheinanderausführen dieser Operationen kann auch die Drehung um eine Raumdiagonale um  $120^\circ$  erreicht werden, welche damit auch Symmetrietransformationen sind.

Im Diamant-Gitter, nicht aber im Zinkblende-Gitter ist zusätzlich die Inversion  $I$  eine Symmetrietransformation. Das Inversionszentrum liegt dabei in der Mitte zwischen zwei benachbarten Atomen (Bild 2.3). Die Inversion wird durch folgende Matrix dargestellt:

$$I = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{A.2}$$

Die Transformation des Kristallsystems in das Cantileversystem wird durch eine Drehung um  $45^\circ$  um die  $x$ -Achse erreicht (Bild 2.1 a)). Diese Drehung wird durch folgende Matrix dargestellt:

$$T_{KC} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{1/2} & \sqrt{1/2} \\ 0 & -\sqrt{1/2} & \sqrt{1/2} \end{pmatrix} \tag{A.3}$$

Die im folgenden hergeleiteten Koordinatentransformationen für Tensoren werden von der Koordinatentransformation für Vektoren abgeleitet. Die Transformation eines Vektors  $\vec{v}$  lautet:

$$v'_i = T_{ij} v_j \tag{A.4}$$

Dabei ist  $T$  die Transformationsmatrix. Die Größen ohne Strich bezeichnen die Darstellung im ursprünglichen System, die gestrichenen Größen bezeichnen die Darstellung im transformierten System. Es sei nochmals darauf hingewiesen, daß die Einstein'sche Summenkonvention benutzt wird. Für die Rücktransformation ist anstelle von  $T_{ij}$  die inverse Matrix  $T_{ij}^{-1}$  zu verwenden:

$$v_i = T_{ij}^{-1} v'_j \tag{A.5}$$

## A.1 Spezifischer elektrischer Widerstand

Der spezifische elektrische Widerstand  $\bar{r}$  verknüpft die elektrische Stromdichte  $\vec{j}$  mit dem elektrischen Feld  $\vec{E}$ :

$$E_i = r_{ij} j_j \quad (\text{A.6})$$

Um die Transformation von  $\bar{r}$  zu berechnen, wird  $\vec{E}'$  nach Gl. A.4 durch  $\vec{E}$  ausgedrückt,  $\vec{E}$  wird durch Gl. A.6 als Funktion von  $\vec{j}$  dargestellt und  $\vec{j}$  wiederum wird durch Gl. A.5 als Funktion von  $\vec{j}'$  dargestellt. So erhält man  $\vec{E}'$  als Funktion von  $\vec{j}'$ , und der sich ergebende Faktor ist der transformierte spezifische Widerstand  $\bar{r}'$ .  $T$  ist dabei die Matrix, welche die Transformation darstellt.

$$E'_i = T_{ij} E_j = T_{ij} r_{jk} j_k = T_{ij} r_{jk} T_{kl}^{-1} j'_l \quad (\text{A.7})$$

Zusammengefaßt lautet die Transformationsformel:

$$r'_{il} = T_{ij} r_{jk} T_{kl}^{-1} \quad (\text{A.8})$$

Die Rücktransformation kann analog berechnet werden:

$$E_i = T_{ij}^{-1} E'_j = T_{ij}^{-1} r'_{jk} j'_k = T_{ij}^{-1} r'_{jk} T_{kl} j_l \quad (\text{A.9})$$

Zusammengefaßt lautet die Rücktransformation:

$$r_{il} = T_{ij}^{-1} r'_{jk} T_{kl} \quad (\text{A.10})$$

Die beiden Transformationsformeln A.8 und A.10 gelten entsprechend auch für andere Tensoren zweiter Stufe, insbesondere für die mechanische Verzerrung  $\bar{\epsilon}$  und die mechanische Spannung  $\bar{\sigma}$ .

Durch die Forderung, daß bei Anwendung der Symmetrioperationen  $S_1$  bis  $S_6$  auf  $\bar{r}$  die Koeffizientendarstellung von  $\bar{r}$  nicht ändern darf, verbleibt im Zinkblende-Gitter und im Diamant-Gitter nur ein unabhängiger, von Null verschiedener Koeffizient, der mit  $r_0$  bezeichnet wird:

$$\bar{r} = \begin{pmatrix} r_0 & 0 & 0 \\ 0 & r_0 & 0 \\ 0 & 0 & r_0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.11})$$

Der spezifische Widerstand  $\bar{r}$  ist also im Zinkblende-Gitter und im Diamant-Gitter isotrop. Die Schreibweise als Skalar  $r_0$  entspricht einer verkürzten Schreibweise. Im Cantileversystem bleibt die Koeffizientendarstellung von  $\bar{r}$  aufgrund der Isotropie unverändert. Wird die Symmetrie gestört (z.B. durch mechanische Spannung oder durch ein Magnetfeld), wird  $\bar{r}$  wieder tensoriell. Die gleichen Symmetrieüberlegungen treffen auf andere Materialeigenschaften zu, die Tensoren zweiter Stufe sind, insbesondere ist die relative Dielektrizitätskonstante  $\epsilon_r$  in diesen Gittertypen isotrop.

## A.2 Mechanische Spannung und Verzerrung

Für die mechanische Spannung  $\bar{\sigma}$  gilt aufgrund des Gleichgewichtes aller Drehmomente  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ , damit hat  $\bar{\sigma}$  6 unabhängige Koeffizienten [29]. Die in Kap. A.1 angestellten Symmetrieüberlegungen lassen sich nicht auf  $\bar{\sigma}$  übertragen, weil  $\bar{\sigma}$  keine Materialeigenschaft ist.  $\bar{\sigma}$  kann in verkürzter Schreibweise als 6-komponentiger Vektor nach folgendem Schlüssel dargestellt werden:

$$\bar{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5, \sigma_6) = \begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & \sigma_4 \\ \sigma_5 & \sigma_4 & \sigma_3 \end{pmatrix} \quad (\text{A.12})$$

Durch Drehung um die  $x$ -Achse um  $45^\circ$  (Gl. A.3 und A.8) erhält man die ins Cantileversystem transformierte Darstellung der Spannung:

$$\bar{\sigma}' = \begin{pmatrix} \sigma_1 & \sqrt{\frac{1}{2}}(\sigma_5 + \sigma_6) & \sqrt{\frac{1}{2}}(\sigma_5 + \sigma_6) \\ \sqrt{\frac{1}{2}}(\sigma_5 + \sigma_6) & \frac{1}{2}(\sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4) & \frac{1}{2}(-\sigma_2 - \sigma_3) \\ \sqrt{\frac{1}{2}}(\sigma_5 + \sigma_6) & \frac{1}{2}(-\sigma_2 - \sigma_3) & \frac{1}{2}(\sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4) \end{pmatrix} \quad (\text{A.13})$$

Die mechanische Verzerrung  $\bar{\epsilon}$  ist aufgrund seiner Definition (Gl. 2.1) ebenfalls ein symmetrischer Tensor 2. Stufe. Gleiches gilt für den spezifischen Widerstand  $\bar{r}$  bzw. die relative Widerstandsänderung  $\bar{D}$  unter dem Einfluß mechanischer Spannung. Daher gelten die Gl. A.12 und A.13 für  $\bar{\epsilon}$  und  $\bar{r}$  bzw.  $\bar{D}$  analog.

## A.3 Piezoelektrischer Tensor

Der piezoelektrische Tensor  $\vec{d}$  verknüpft die mechanische Spannung  $\bar{\sigma}$  und piezoelektrische Polarisation  $\vec{P}$ .

$$P_i = d_{ijk}\sigma_{jk} \quad (\text{A.14})$$

Die Vorgehensweise bei der Berechnung der Transformation in ein anderes Koordinatensystem ist wie bei der Berechnung der Transformationsformel für Tensoren zweiter Stufe (Gl. A.7).  $\vec{P}'$  wird nach Gl. A.4 durch  $\vec{P}$  ausgedrückt,  $\vec{P}$  wird nach Gl. A.14 als Funktion von  $\bar{\sigma}$  dargestellt und  $\bar{\sigma}$  wiederum wird nach Gl. A.10 als Funktion von  $\bar{\sigma}'$  dargestellt. So erhält man  $\vec{P}'$  als Funktion von  $\bar{\sigma}'$ , und der sich ergebende Faktor ist der transformierte piezoelektrische Tensor  $\vec{d}'$ :

$$P'_i = T_{ij}P_j = T_{ij}d_{jkl}\sigma_{kl} = T_{ij}d_{jkl}T_{km}^{-1}\sigma'_{ml}T_{nl} \quad (\text{A.15})$$

Zusammengefaßt lautet die Transformationsformel:

$$d'_{iml} = T_{ij}T_{km}^{-1}T_{nl}d_{jkl} \quad (\text{A.16})$$

Im Diamant-Gitter ist wegen der Inversionssymmetrie  $\vec{d} = 0$ . Im Zinkblende-Gitter verbleibt aufgrund der Symmetrien  $S_1$  bis  $S_6$  ein unabhängiger Koeffizient, der mit  $d_{14}$  bezeichnet wird:

$$d_{ijk} = d_{ikj} = \frac{1}{2}d_{14} \quad \text{für } i \neq j, i \neq k \text{ und } j \neq k \quad (\text{A.17})$$

In verkürzter Schreibweise wird  $\vec{\sigma}$  als 6-komponentiger Vektor geschrieben (Gl. A.12), dadurch wird  $\vec{d}$  in verkürzter Schreibweise eine 3x6-Matrix. Unter Berücksichtigung von Gl. A.17 erhält man:

$$\begin{pmatrix} P_1 \\ P_2 \\ P_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{14} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} \quad (\text{A.18})$$

Aus dieser Darstellung wird deutlich, warum der Koeffizient  $d_{14}$  mit dem Index 14 belegt wird. Gl. A.18 entspricht der Gl. 2.22.

Durch Drehung um die  $x$ -Achse um  $45^\circ$  (Gl. A.3 und A.16) und unter Berücksichtigung der Symmetrieeigenschaften des Zinkblende-Gitters erhält man die ins Cantileversystem transformierte Darstellung des piezoelektrischen Tensors in verkürzter Schreibweise:

$$\vec{d}' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -d_{14} & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}d_{14} & -\frac{1}{2}d_{14} & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.19})$$

Aus diese Gl. ergibt sich Gl. 2.24.

## A.4 Piezoresistiver Tensor

Der piezoresistive Tensor  $\bar{\pi}$  verknüpft die mechanische Spannung  $\vec{\sigma}$  mit der relativen Widerstandsänderung  $\bar{D}$ :

$$D_{ij} = \pi_{ijkl}\sigma_{kl} \quad (\text{A.20})$$

Die Vorgehensweise bei der Berechnung der Transformation in ein anderes Koordinatensystem ist wieder wie bei der Berechnung der Transformationsformel für Tensoren zweiter Stufe (Gl. A.7).  $\bar{D}'$  wird nach Gl. A.8 durch  $\bar{D}$  ausgedrückt,  $\bar{D}$  wird nach Gl. A.20 als Funktion von  $\bar{\sigma}$  dargestellt und  $\bar{\sigma}$  wiederum wird nach Gl. A.10 als Funktion von  $\bar{\sigma}'$  dargestellt. So erhält man  $\bar{D}'$  als Funktion von  $\bar{\sigma}'$ , und der sich ergebende Faktor ist also der transformierte piezoresistive Tensor  $\bar{\pi}'$ :

$$D'_{il} = T_{ij}T_{kl}^{-1}D_{jk} = T_{ij}T_{kl}^{-1}\pi_{jkmn}\sigma_{mn} = T_{ij}T_{kl}^{-1}\pi_{jkmn}T_{mo}^{-1}T_{pn}\sigma'_{op} \quad (\text{A.21})$$

Zusammengefaßt lautet die Transformationsformel:

$$\pi'_{ilop} = T_{ij}T_{kl}^{-1}T_{mo}^{-1}T_{pn}\pi_{jkmn} \quad (\text{A.22})$$

Sowohl im Diamant- als auch im Zinkblende-Gitter verbleiben aufgrund der Symmetrieeigenschaften  $S_1$  bis  $S_6$  nur drei unabhängige und von Null verschiedene Koeffizienten, nämlich:

$$\pi_{iii} = \pi_{11} \quad \pi_{ijj} = \pi_{12} \quad \pi_{ijj} = \pi_{jji} = \frac{1}{2}\pi_{44} \quad \text{für } i \neq j \quad (\text{A.23})$$

In verkürzter Schreibweise werden  $\bar{\sigma}$  und  $\bar{D}$  als 6-komponentige Vektor geschrieben (Gl. A.12), dadurch wird  $\bar{\pi}$  eine 6x6-Matrix. Unter Berücksichtigung von Gl. A.23 erhält man:

$$\begin{pmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ D_4 \\ D_5 \\ D_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{12} & & & \\ \pi_{12} & \pi_{11} & \pi_{12} & & & \\ \pi_{12} & \pi_{12} & \pi_{11} & & & \\ & & & \pi_{44} & & \\ & 0 & & & \pi_{44} & \\ & & & & & \pi_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} \quad (\text{A.24})$$

Dabei steht an den freigelassenen Stellen jeweils eine Null. Aus dieser Darstellung wird die Wahl der Indizes bei den Koeffizienten  $\pi_{11}$ ,  $\pi_{12}$  und  $\pi_{44}$  deutlich. Die Gl. A.24 entspricht den Gl. 2.5 und 2.6 bzw. 2.15 und 2.16.

Durch Drehung um die  $x$ -Achse um  $45^\circ$  (Gl. A.3 und A.22) und unter Berücksichtigung der Symmetrieeigenschaften des Diamant- bzw. Zinkblende-Gitters (Gl. A.23) erhält man die ins Cantileversystem transformierte Darstellung des piezoresistiven Tensors in verkürzter Schreibweise:

$$\pi' = \begin{pmatrix} \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{12} & & & \\ \pi_{12} & \frac{1}{2}(\pi_{11} + \pi_{12} + \pi_{44}) & \frac{1}{2}(\pi_{11} + \pi_{12} - \pi_{44}) & & & \\ \pi_{12} & \frac{1}{2}(\pi_{11} + \pi_{12} - \pi_{44}) & \frac{1}{2}(\pi_{11} + \pi_{12} + \pi_{44}) & & & \\ & & & \pi_{11} - \pi_{12} & & \\ & 0 & & & \pi_{44} & \\ & & & & & \pi_{44} \end{pmatrix} \quad (\text{A.25})$$

Die Transformationsformel A.22, die verkürzte Schreibweise A.24 und die Darstellung im Cantileversystem A.25 gelten entsprechend auch für andere Tensoren vierter Stufe, insbesondere für den elastischen Tensor  $\bar{\bar{s}}$ .



# Literaturverzeichnis

- [1] S. Adachi. GaAs, AlAs, and  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ : Material parameters for use in research and device application. *Z. Phys. B*, 58:R1, 1985.
- [2] I. Aller, C. Lang, G. Schweeger, H. L. Hartnagel, R. Dolt, and G. Hohenberg. Gallium arsenide piezotransistor for dynamic pressure measurements at high temperature. *Appl. Phys. Lett.*, 69(3):403–405, 1996.
- [3] G. Bastard. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*. Les Ed. de physique, 1992.
- [4] H. Beneking. *Halbleiter-Technologie: Eine Einführung in die Prozesstechnik von Silizium und III-V-Verbindungen*. Teubner, 1991.
- [5] T. Berger. Messung der piezoresistiven Eigenschaften von GaAs-Heterostrukturen. Master’s thesis, Universität Gesamthochschule Kassel, 2000.
- [6] G. Binnig, C. F. Quate, and C. Gerber. Atomic force microscope. *Phys. Rev. Lett.*, 56:930, 1986.
- [7] A. F. Bogenschütz. *Ätzpraxis für Halbleiter*. Carl Hansen, 1967.
- [8] A. D. Bykhovski, V. V. Kaminski, M. S. Shur, Q. C. Chen, and M. A. Khan. Piezoresistive effect in wurtzite n-type GaN. *Appl. Phys. Lett.*, 68(6):818–819, 1996.
- [9] L. Cong, J. D. Albrecht, M. I. Nathan, P. P. Ruden, and D. L. Smith. Piezoelectric effects in (001)-oriented double barrier resonant tunneling structures. *Appl. Phys. Lett.*, 66:1358, 1995.
- [10] G. Fierling, X. Letartre, P. Viktorovitch, J. P. Lainé, and C. Priester. Piezoelectrically induced electronic confinement obtained by three-dimensional elastic relaxation in III-V semiconducting overhanging beams. *Appl. Phys. Lett.*, 74(14):1990–1992, 1999.

- [11] A. K. Fung, J. D. Albrecht, M. I. Nathan, P. P. Ruden, and H. Shtrikman. In-plane uniaxial stress effects of AlGaAs/GaAs modulation doped heterostructures characterized by the transmission line method. *J. Appl. Phys.*, 84(7):3741–3746, 1998.
- [12] S. Gasiorowicz. *Quantenphysik*. Oldenbourg, 6 edition, 1996.
- [13] R. Gaska, A. D. Bykhovski, M. S. Shur, V. V. Kaminskii, and S. M. Soloviov. Piezoresistive effect in AlN/GaN short range superlattice structures. *J. Appl. Phys.*, 85(9):6932–6934, 1999.
- [14] Gerthsen and Vogel. *Physik*. Springer, 19 edition, 1997.
- [15] W. Göpel, J. Hesse, and J. N. Zemel, editors. *Sensors*, volume 7. VCH, 1994.
- [16] W. Greiner. *Klassische Elektrodynamik*. Harri Deutsch, 5 edition, 1991.
- [17] H.-J. Güntherodt and R. Wiesendanger, editors. *Scanning Tunneling Microscopy I*. Springer series in surface sciences. Springer, 1992.
- [18] M. Hansen. *Constitution of binary alloys*. McGraw-Hill, 1958.
- [19] J. J. Harris, J. A. Pals, and R. Woltjer. Electronic transport in low-dimensional structures. *Rep. Prog. Phys.*, 52:1217, 1989.
- [20] S. Heisig, H.-U. Danzebrink, A. Leyk, W. Mertin, S. Münster, and E. Oesterschulze. Monolithic gallium arsenide cantilever for scanning near-field microscopy. *Ultramicroscopy*, 71:99–105, 1998.
- [21] K. H. Hellwege. *Einführung in die Festkörperphysik*. Springer, 1988.
- [22] C. Herring. *Bell Syst. Tech. J.*, 34:237, 1955.
- [23] W. Heywang. *Sensorik*. Springer, 4 edition, 1993.
- [24] F. Ho and Y. Yamamoto. Analysis and optimization of force sensitivity in atomic force microscopy using optical and electrical detection. *J. Vac. Sci. Technol. B*, 16:43–50, 1998.
- [25] Y. W. Hsu, S. S. Lu, and P. Z. Chang. Piezoresistive response induced by piezoelectric charges in n-type GaAs mesa resistors for application in stress transducers. *J. Appl. Phys.*, 85:333–340, 1999.
- [26] Ibach and Lüth. *Festkörperphysik*. Springer, 3 edition, 1990.

- [27] T. Itoh and T. Suga. Scanning force microscope using a piezoelectric micro-cantilever. *J. Vac. Sci. Technol. B*, 12:1581–1585, 1994.
- [28] J. D. Jackson. *Classical electrodynamics*. Wiley, 1975.
- [29] G. Joos. *Lehrbuch der theoretischen Physik*. Aula, 1989.
- [30] Y. Kanda and K. Suzuki. Origin of the shear piezoresistance coefficient  $\pi_{44}$  of n-type silicon. *Phys. Rev. B*, 43:6754–6756, 1991.
- [31] U. Keil, J. R. Jensen, and J. M. Hvam. *Appl. Phys. Lett.*, 72(13):1644–1646, 1998.
- [32] M. A. Khan, J. W. Yang, G. Simin, R. Gaska, M. S. Shur, and A. D. Bykhovski. Piezoelectric doping in AlInGaN/GaN heterostructures. *Appl. Phys. Lett.*, 75(18):2806–2808, 1999.
- [33] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper. *Phys. Rev. Lett.*, 45:494, 1980.
- [34] M. P. C. M. Krijn. Heterojunction band offsets and effective masses in III-V quaternary alloys. *Semicond. Sci. Technol.*, 6:27, 1991.
- [35] L. D. Landau and F. M. Lifshitz. *Lehrbuch der theoretischen Physik*, volume I. Akademie Verlag Berlin, 4 edition, 1987.
- [36] Landolt and Börnstein. *Semiconductors: Physics of group IV and III-V Compounds*, volume III 17a. Springer-Verlag Berlin, 1991.
- [37] T. Leinhos, M. Stopka, and E. Oesterschulze. *Appl. Phys. A*, 66:65–69, 1998.
- [38] R. Linnemann. *Integrierte Sensoren für die Raster-Kraft-Mikroskopie - Entwurf, Charakterisierung und Anwendungen*. Dissertation, Universität Gesamthochschule Kassel, November 1995.
- [39] R. Linnemann, T. Gotszalk, L. Hadjiiski, and I. W. Rangelow. Characterization of a cantilever with an integrated deflector sensor. *Thin Solid Films*, 72:159–164, 1995.
- [40] S. C. Minne, S. R. Manalis, and C. F. Quate. Parallel atomic force microscopy using cantilevers with integrated piezoresistive sensors and integrated piezoelectric actuators. *Appl. Phys. Lett.*, 67:3918–3920, 1995.
- [41] S. Müller. Persistente Photoleitfähigkeit und Elektronendichteabhängigkeit der Transporteigenschaften in InGaAs/InP-Quantenfilmen. Diplomarbeit, Universität Hamburg, 1994.

- [42] S. Münster. Dissertation, Universität Gesamthochschule Kassel, 1997.
- [43] L. D. Nguyen, L. E. Larson, and U. K. Mishra. *Proc. IEEE*, 80:494, 1992.
- [44] Nonnenmacher. *Integrierte Sensoren für die Raster-Kraft-Mikroskopie*. Dissertation, Universität Gesamthochschule Kassel, 1990.
- [45] E. H. C. Parker, editor. *The technology and physics of molecular beam epitaxy*. Plenum Press, 1988.
- [46] E. Riedel. *Allgemeine und Anorganische Chemie*. Walter de Gruyter, 1988.
- [47] D. Sarid. *Scanning Force Microscopy*. Oxford series in optical and imaging sciences. Oxford, 1991.
- [48] M. Schmidt. Optimierung Ohm'scher Kontakte auf Galliumarsenid. Diplomarbeit, Universität Gesamthochschule Kassel, 2000. In Vorbereitung.
- [49] C. Schönenberger and S. F. Alvarado. Understanding magnetic force microscopy. *Z. Phys. B*, 1990.
- [50] E. F. Schubert. *Doping in III-V Semiconductors*. Cambridge, 1993.
- [51] H. R. Schwarz. *Numerische Mathematik*. B.G. Teubner, 1993.
- [52] K. Seeger. *Semiconductor Physics*. Springer, 3 edition, 1989.
- [53] J. Singh. *Semiconductor Devices*. McGraw-Hill, 1994.
- [54] C. S. Smith. Piezoresistance effect in germanium and silicon. *Phys. Rev.*, 94:42–49, 1954.
- [55] W. Steffens. Dissertation, Universität Gesamthochschule Kassel, 1999.
- [56] J. E. Stern, B. D. Terris, H. J. Mamin, and D. Rugar. Deposition and imaging of localized charge in insulator surfaces using a force microscope. *Appl. Phys. Lett.*, 53:2717, 1988.
- [57] A. Sugar. *Phys. Rev.*, 1:450, 1958.
- [58] S. M. Sze. *High-speed semiconductor devices*. Wiley, 1990.
- [59] R. E. Thomson. Low-temperature atomic force microscope using piezoresistive cantilevers. *Rev. Sci. Inst.*, 70:3369–3372, 1999.
- [60] M. Tortonese, , H. Yamada, R. C. Barrett, and C. F. Quate. Atomic force microscopy using a piezoresistive cantilever. *IEEE*, 91CH2817-5:448, 1991.

- [61] M. Tortonese, R. C. Barrett, and C. F. Quate. Atomic resolution with an atomic force microscope using piezoresistive detection. *Appl. Phys. Lett.*, 62:834–836, 1993.
- [62] D. C. Tsui, H. L. Störmer, and A. C. Gossard. *Phys. Rev. Lett.*, 48:1559, 1982.
- [63] W. Walukiewicz, H. E. Rude, J. Lagowski, and H. C. Gatos. Electron mobility in modulation-doped heterostructures. *Phys. Rev. B*, 30:4571, 1994.
- [64] J. P. Weber. Optimization of the carrier-induced effective index change in InGaAsP waveguide - application to tunable Bragg filters. *IEEE J. Quant. Elec.*, 30:1801, 1994.
- [65] S. Werner, O. Rudow, C. Mihalcea, and E. Oesterschulze. Cantilever probes with aperture tips for polarisation sensitive scanning near-field optical microscopy. *Appl. Phys. A*, 66:367–370, 1998.
- [66] R. Wiesendanger and H.-J. Güntherodt, editors. *Scanning Tunneling Microscopy II*. Springer series in surface sciences. Springer, 1992.
- [67] R. Wiesendanger and H.-J. Güntherodt, editors. *Scanning Tunneling Microscopy III*. Springer series in surface sciences. Springer, 1993.
- [68] M. Willemin, C. Rossel, J. Brugger, M. H. Despont, H. Tothuisen, P. Vettiger, J. Hofer, and H. Keller. Piezoresistive cantilever designed for torque magnetometry. *J. Appl. Phys.*, 83:1163–1170, 1998.
- [69] M. Zerbst. Piezowiderstandseffekt in Galliumarsenid. *Z. Naturforsch.*, 17a:649, 1962.

## Symbolverzeichnis

Einige Symbole sind doppelt verwendet, die Bedeutung ist aber im Zusammenhang jeweils klar.

Symbol	Größe	Einheit
$A$	Fläche	$\text{cm}^2$
$a_0$	Gitterkonstante	$\text{Å}$
$B$	Breite des Cantilevers	mm
$\bar{c}$	Elastische Konstanten	$\text{N/m}^2 = \text{Pa}$
$C$	Kapazität	F
$\vec{d}$	Piezoelektrischer Tensor	$\text{As/N} = \text{m/V}$
$d_{14}$	Koeffizient des piezoelektrischen Tensors	$\text{As/N} = \text{m/V}$
$d$	Wirksame Piezoelektrizität	$\text{As/N} = \text{m/V}$
$d$	Abstand der Nachbaratome im Gitter	$\text{Å}$
$\bar{D}$	Relative Änderung des spez. Widerstandes	1
$D$	Dicke des Cantilevers	$\mu\text{m}$
$\vec{D}$	Elektrische Flußdichte	$\text{As/m}^2$
$\vec{e}$	Piezoelektrischer Modul	$\text{As/m}^2$
$\vec{E}$	Elektrisches Feld	$\text{V/m}$
$e_0$	Elementarladung	$1.602 \cdot 10^{-19} \text{ As}$
$E$	Energie	eV
$E_g$	Bandlücke	eV
$E_F$	Fermi-Niveau	eV
$E_V$	Valenzbandkante	eV
$E_C$	Leitungsbandkante	eV
$\Delta E_C$	Leitungsband-Offset gegen GaAs	eV
$\Delta E_A$	Abstand Akzeptorniveau - Valenzbandkante	eV
$\Delta E_D$	Abstand Donatorniveau - Leitungsbandkante	eV
$\vec{F}$	Kraft	N
$f_{fermi}$	Fermi-Verteilung	1
$f_{FI}$	Fermi-Halbintegral	1
$h$	Planck'sches Wirkungsquantum	$6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
$\hbar$	$h/2\pi$	$1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
$I$	Strom	mA
$I$	Inversion	-
$\vec{j}$	Elektrische Stromdichte	$\text{A/cm}^2$
$\vec{j}_S$	Schichtstromdichte	$\text{A/cm}$

$j_0$	Sperrstromdichte	A/cm <sup>2</sup>
$k$	Federkonstante des Cantilvers	N/ $\mu$ m
$\vec{k}$	Wellenvektor des Elektrons im Halbleiter	m <sup>-1</sup>
$k_B$	Boltzmann-Konstante	1.38 · 10 <sup>-23</sup> J/K
$L$	Länge des Cantilever	mm
$L$	Abstand Kondensatorplatten	cm
$l_0$	Bindungslänge	Å
$m_0$	Masse des freien Elektrons	9.109 · 10 <sup>-31</sup> kg
$m_n^*$	Effektive Masse der Elektronen	$m_0$
$m_p^*$	Effektive Masse der Löcher	$m_0$
$m_{  }$	Longitudinale effektive Masse (im Si)	$m_0$
$m_{\perp}$	Transversale effektive Masse (im Si)	$m_0$
$n$	Elektronendichte	cm <sup>-3</sup>
$\vec{n}$	Normalenvektor	1
$n_S$	Elektronenflächendichte	cm <sup>-2</sup>
$N_A$	Akzeptordichte	cm <sup>-3</sup>
$N_A^-$	Dichte der ionisierten Akzeptoren	cm <sup>-3</sup>
$N_D$	Donatordichte	cm <sup>-3</sup>
$N_D^+$	Dichte der ionisierten Donatoren	cm <sup>-3</sup>
$N_C$	Entartungsgrad Leitungsbandkante	cm <sup>-3</sup>
$N_V$	Entartungsgrad Valenzbandkante	cm <sup>-3</sup>
$p$	Löcherdichte	cm <sup>-3</sup>
$p$	Kristallimpuls der Elektronen	kg m/s
$\vec{P}$	Elektrische Polarisierung	As/m <sup>2</sup>
$\vec{P}_{diel}$	Dielektrische Polarisierung	As/m <sup>2</sup>
$\vec{P}_{Piezo}$	Piezoelektrische Polarisierung	As/m <sup>2</sup>
$q$	Ladung	As
$\bar{r}$	Spezifischer elektrischer Widerstand	$\Omega$ cm
$\bar{r}_S$	Schichtwiderstand	$\Omega$
$R$	Widerstand	$\Omega$
$r_c$	Spezifischer Kontaktwiderstand	$\Omega$ cm <sup>2</sup>
$R^*$	Richardson-Konstante	A/cm <sup>2</sup> K <sup>2</sup>
$\bar{s}$	Elastischer Tensor	m <sup>2</sup> /N = Pa <sup>-1</sup>
$s_{11}, s_{12}, s_{44}$	Koeffizienten des elastischen Tensors	m <sup>2</sup> /N = Pa <sup>-1</sup>
$S$	Sprung der Ableitung von $E_C$	eV/cm
$S_1$ bis $S_6$	Spiegelungen	-
$t$	Zeit	s
$T$	Temperatur	K
$u$	Auslenkung des Cantilevers	$\mu$ m

$U$	Elektrisches Potential, elektrische Spannung	V
$U_T$	$k_B T / e_0$ Thermospannung	V
$V$	Volumen	cm <sup>3</sup>
$W$	Weite der Raumladungszone	cm
$W_{\vec{k}, \vec{k}'}$	Matrixelement Übergangswahrscheinlichkeit	s <sup>-1</sup>
$x$	Legierungsanteil	1
$x, y, z$	Ortskoordinaten im Cantilversystem	cm
$x_G$	Lage der Grenzfläche	nm
$Z$	2D-Zustandsdichte	1/cm <sup>2</sup> eV
$\Delta$	Diskretisierungsweite	nm
$\delta$	$\delta$ -Distribution	abh. v. Arg.
$\bar{\epsilon}$	Mechanische Verzerrung	1
$\epsilon_0$	Absolute Dielektrizitätskonstante	$8.854 \cdot 10^{12}$ As/Vm
$\epsilon_r$	Relative Dielektrizitätskonstante	1
$\varphi$	Winkel	rad
$\Phi$	Energie der Elektronen im Halbleiter	eV
$\Phi_B$	Potentialbarriere	V
$\lambda$	de Broglie-Wellenlänge	m
$\mu$	Poissonzahl	1
$\mu_n$	Beweglichkeit der Elektronen	cm <sup>2</sup> /Vs
$\mu_p$	Beweglichkeit der Löcher	cm <sup>2</sup> /Vs
$\bar{\pi}$	Piezoresistiver Tensor	10 <sup>-11</sup> Pa <sup>-1</sup>
$\pi_{11}, \pi_{12}, \pi_{44}$	Koeffizienten des piezoresistiven Tensors	10 <sup>-11</sup> Pa <sup>-1</sup>
$\pi_L, \pi_T$	Longitudinale und transversale Piezoresistivität	10 <sup>-11</sup> Pa <sup>-1</sup>
$\Pi_1$	PER1-Koeffizient	10 <sup>-11</sup> Pa <sup>-1</sup>
$\Pi_2$	PER2-Koeffizient	$\mu\text{m}/\text{MPa}$
$\Pi_3$	Wirksame Piezoresistivität	10 <sup>-11</sup> Pa <sup>-1</sup>
$\rho$	(Makroskopische) Raumladungsdichte	As/cm <sup>3</sup>
$\rho_{Piezo}$	Piezoelektrische Raumladung	As/cm <sup>-3</sup>
$\bar{\sigma}$	Mechanische Spannung	N/m <sup>2</sup> = Pa
$\sigma$	Wirksame mechanische Spannung	N/m <sup>2</sup> = Pa
$\Sigma$	Streuquerschnitt	cm <sup>2</sup>
$\tau$	Dielektrische Zeitkonstante	s
$\tau$	Streu- bzw. Relaxationszeit	s

## Abkürzungen

Ia, Ib, IIa, IIb, IIIa, IIIb	Bezeichnungen der Elektrodenanordnungen
2D	Zweidimensional
2DEG	Zweidimensionales Elektronengas
3D	Dreidimensional
HEMT	High electron mobility transistor
MBE	Molekularstrahlepitaxie (molecular beam epitaxy)
PER	Piezoelektroresistiv
RKM	Rasterkraftmikroskop
s.i.	Semiisolierend
SNOM	Scanning near field optical microscopy
SNR	Signal-Rausch-Verhältnis (signal to noise ratio)
UHV	Ultrahochvakuum
Upm	Umdrehungen pro Minute

## Abmessungen der Elektrodenkonfigurationen

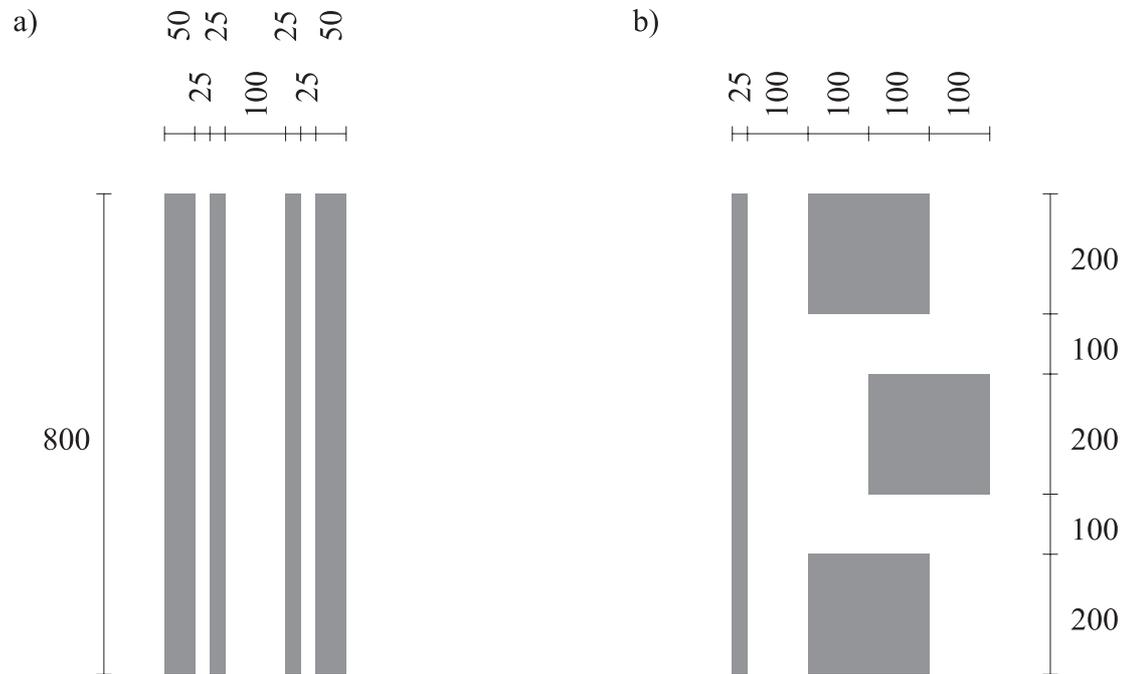


Abbildung A.1: Abmessungen der Elektrodenkonfigurationen I und II (a) und III (b) in  $\mu\text{m}$ . Die Darstellung ist maßstäblich.

## Danksagung

Ganz besonders möchte ich Herrn Dr. E. Oesterschulze für die Anregung zu dieser Arbeit danken, ebenso wie für seine stete Diskussionsbereitschaft und Förderung des Fortgangs der Arbeit sowie für die kritische Durchsicht des Manuskripts.

Ich danke den Herren Prof. H. Hillmer und Prof. R. Kassing, die mir die Durchführung der Arbeit am Institut für Mikrostrukturtechnologie und Analytik ermöglicht haben, für die konstruktive Unterstützung und Betreuung der Arbeit.

Für die Bereitstellung von Epitaxieproben danke ich Herrn Dr. D. Reuter von der Ruhr-Universität Bochum, den Herren J. Sigmund und Prof. H. L. Hartnagel vom Institut für Hochfrequenztechnik der TU Darmstadt und den Herren G. Böhm und Dr. R. Meyer vom Walter Schottky Institut, München.

Meinen Kollegen, insbesondere Frau C. Prott und den Herren S. Heisig, M. Nöding und W. Steffens danke ich für die angenehme Zusammenarbeit und die vielen fruchtbaren Diskussionen. Frau H. Hohmann danke ich für die außergewöhnliche Einsatzfreude, mit der sie mich bei der Prozessierung der Proben tatkräftig unterstützt hat. Weiterhin möchte ich mich für die Unterstützung bei vielen praktischen und technischen Arbeiten bedanken bei den Herren A. Malkomes, W. Scholz und S. Bertram. Frau I. Wensch danke ich für die Unterstützung bei der Bewältigung verwaltungstechnischer Hürden. Allen namentlich hier nicht erwähnten Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern der Fachgebiete Technische Elektronik und Technische Physik sei gedankt für das sehr gute Arbeitsklima und die Hilfsbereitschaft.

Besonders wichtig für mich war auch die Anteilnahme, das Verständnis und die Ermutigung meiner Frau Ulrike, die mir während der nicht immer leichten Zeit die Kraft zur Fortführung der Arbeit gegeben hat.