Magnetische Resonanz in den Verbindungshalbleitern Galliumnitrid, Zinkoxid und Siliziumkarbid an flachen Donatoren zwischen Lokalisation und Delokalisation

Von der Fakultät Physik der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines Doktors der
Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von
Daniel C. Reiser
aus Stuttgart

Hauptberichter:	Prof. Dr. G. Denninger
Mitberichter:	Prof. Dr. M. Cardona
Tag der mündlichen Prüfung:	30. März 1998

2. Physikalisches Institut der Universität Stuttgart
1998

Inhaltsverzeichnis

I	Allgemeine Grundlagen	9
1	Einleitung	11
2	Der flache Donator	15
2.1	Effektive-Massen-Theorie (EMT)	15
2.1.1	Quantenmechanische Beschreibung	16
2.1.2	Anwendbarkeit des Modells	18
2.2	$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Theorie	21
2.2.1	Drei-Band $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Theorie für kubische Symmetrie	21
2.2.2	Fünf-Band $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Theorie für kubische Symmetrie	21
2.2.3	g-Faktoren in Kristallen mit hexagonaler Symmetrie	23
2.3	Ladungsträgerstatistik	26
2.3.1	Nicht entartete Halbleiter	26
2.3.2	Entartete Halbleiter	28
2.3.3	Mott-Kriterium	29
2.4	Elektrische Leitfähigkeit von Halbleitern	29
3	Experimentelle Methoden: Beschreibung und Theorie	31
3.1	Grundlagen der ESR	31
3.1.1	Allgemeine Prinzipien	31
3.1.2	Hyperfineinwechselwirkung (HFW)	33
3.1.3	Dynamische Kernspin Polarisation (DNP)	34
3.1.4	ESR an Halbleitern	36
3.2	Magnetische Doppelresonanz	38
3.2.1	ENDOR	39
3.2.2	Overhauser-Verschiebungsspektroskopie	40
3.2.3	Der Core-Faktor C	42
3.2.4	Quadrupolwechselwirkung	43
3.2.5	Spin-Gitter Relaxation in Halbleitern	45

3.3	Experimentelles	46
II	ESR-Messungen und Diskussion	51
4	Galliumnitrid (GaN)	53
4.1	Physikalische Eigenschaften	53
4.2	ESR-Untersuchungen an GaN	56
4.2.1	X-Band (9,6 GHz) Messungen	57
4.2.2	Q-Band (34,1 GHz) Messungen	58
4.2.3	W-Band (93,9 GHz) Messungen	61
4.2.4	Diskussion der Ergebnisse	64
5	Zinkoxid (ZnO)	69
5.1	Physikalische Eigenschaften	69
5.2	ESR-Untersuchungen an ZnO	71
5.2.1	ESR Messungen an der Probe blau1	71
5.2.2	ESR Messungen an der Probe zno_19/1	76
5.2.3	Diskussion der Ergebnisse von blau1 und zno_19/1	78
5.2.4	ESR-Messungen an der Probe zno20	81
6	Siliziumkarbid (SiC)	85
6.1	Physikalische Eigenschaften	85
6.2	ESR-Messungen an SiC bei verschiedenen Dotierungen	86
7	Silizium phosphordotiert (Si:P)	91
7.1	Physikalische Eigenschaften	91
7.2	ESR Messungen an Si:P	92
III	Doppelresonanz-Messungen und Diskussion	93
8	Si:P	95
8.1	Messungen an Si:P	95
8.2	Modell und Rechnung	98
8.2.1	Verfahren	99
8.2.2	Vergleich der Rechnungen mit dem Experiment	101

9 GaN	107
9.1 Messungen an GaN	107
9.2 Vergleich der Messungen mit der Simulation	112
9.2.1 ^{71}Ga	112
9.2.2 ^{14}N	117
9.3 Quadrupolwechselwirkung	119
10 ZnO:Ga	121
10.1 Messungen an ZnO	121
10.2 Vergleich der Messungen mit der Simulation	128
10.2.1 ^{67}Zn	128
10.2.2 ^{17}O	132
10.3 Quadrupolwechselwirkung	134
11 SiC:N	135
11.1 Messungen an SiC	135
11.2 Vergleich der Messungen mit der Simulation	140
IV Abschließende Diskussion und Zusammenfassung	143
12 Diskussion der Messungen	145
12.1 ESR	145
12.2 Doppelresonanz	146
12.3 Bewertung	146
13 Der flache Donator in GaN, ZnO, SiC und Si:P	149
14 Zusammenfassung	155