



(10) **DE 10 2010 008 905 B3** 2011.06.16

(12) **Patentschrift**

(21) Aktenzeichen: **10 2010 008 905.2**
(22) Anmeldetag: **23.02.2010**
(43) Offenlegungstag: –
(45) Veröffentlichungstag
der Patenterteilung: **16.06.2011**

(51) Int Cl.: **G01N 21/31 (2006.01)**
H01L 31/18 (2006.01)

Innerhalb von drei Monaten nach Veröffentlichung der Patenterteilung kann nach § 59 Patentgesetz gegen das Patent Einspruch erhoben werden. Der Einspruch ist schriftlich zu erklären und zu begründen. Innerhalb der Einspruchsfrist ist eine Einspruchsgebühr in Höhe von 200 Euro zu entrichten (§ 6 Patentkostengesetz in Verbindung mit der Anlage zu § 2 Abs. 1 Patentkostengesetz).

(73) Patentinhaber:
**Fraunhofer-Gesellschaft zur Förderung der
angewandten Forschung e.V., 80686 München, DE**

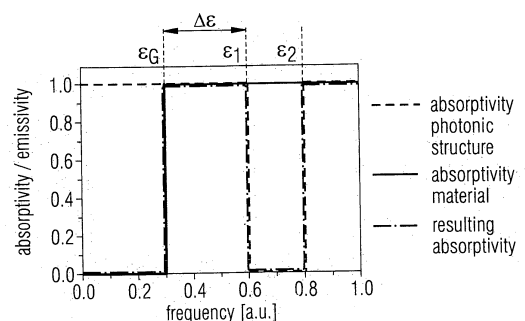
(72) Erfinder:
**Peters, Marius, 79110 Freiburg, DE; Bläsi,
Benedikt, 79104 Freiburg, DE; Goldschmidt, Jan
Christoph, 79100 Freiburg, DE**

(74) Vertreter:
**PFENNING MEINIG & PARTNER GbR, 80339
München**

(56) Für die Beurteilung der Patentfähigkeit in Betracht
gezogene Druckschriften:
siehe Folgeseiten

(54) Bezeichnung: **Verfahren zur Bestimmung einer Struktur eines Halbleitermaterials mit vordefinierten
elektrooptischen Eigenschaften sowie Verfahren zu dessen Herstellung**

(57) Zusammenfassung: Die vorliegende Erfindung betrifft ein Verfahren zur vordefinierten Einstellung von elektrooptischen Eigenschaften von Halbleitermaterialien, durch Bestimmung einer Gitterkonstante, die einer photonischen Strukturierung des Halbleitermaterials zugrunde gelegt wird. Die sich durch die photonische Strukturierung ergebende photonische Bandlücke korreliert dabei in vorbestimmter Weise mit der im Halbleitermaterial inhärent enthaltenen elektrischen Bandlücke. Weiterhin betrifft die vorliegende Erfindung ein Verfahren zur Herstellung eines entsprechenden Halbleitermaterials durch Einbringen einer photonischen Strukturierung mit der vorbestimmten Gitterkonstante in das Halbleitermaterial. Erfindungsgemäß werden ebenso Halbleitermaterialien, die die vorbestimmten elektrooptischen Eigenschaften aufweisen, angegeben.



(56) Für die Beurteilung der Patentfähigkeit in Betracht
gezogene Druckschriften:

DE 10 2008 056175 A1
US 2009/03 11 816 A1
US 2006/02 09 393 A1
EP 1 624 499 A2

**NODA, S. et al: Trapping and emission of
photons by a single defect in a photonic bandgap
structure**

Nature, Vol. 407, 2000, 608-610

**JONES, T. et al: Thermal emission by metallic
photonic crystal slabs**

**APPLIED PHYSICS LETTERS 89, 2006, 041915-
1, 041915-3**

**SONG, D. et al: Structural, electrical and
photovoltaic characterization of Si nanocrystals
embedded SiC matrix and Si nanocrystals/c-Si
heterojunction devices**

**Solar Energy Materials & Solar Cells 92 (2008)
474-481**

**FORBERICH, K.: Organische Photonische
Kristall-Laser**

**Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades
der Fakultät für Mathematik und Physik der
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg im Breisgau,
Mai 2005**

**JOHNSON, S. G. et al: Block-iterative
frequency-domain methods for Maxwell's
equations in a planewave basis**

OPTICS EXPRESS, Vol. 8, No. 3, 2001, 173-190

**JOANNOPOULOS, J.D. et al: Photonic
Crystals: Molding the Flow of Light, Princeton
University Press, 1995, ISBN13: 978-0-691-03744-
8**

Beschreibung

[0001] Die vorliegende Erfindung betrifft ein Verfahren zur vordefinierten Einstellung von elektrooptischen Eigenschaften von Halbleitermaterialien, durch Bestimmung einer Gitterkonstante, die einer photonischen Strukturierung des Halbleitermaterials zugrunde gelegt wird. Die sich durch die photonische Strukturierung ergebende photonische Bandlücke korreliert dabei in vorbestimmter Weise mit der im Halbleitermaterial inhärent enthaltenen elektrischen Bandlücke. Weiterhin betrifft die vorliegende Erfindung ein Verfahren zur Herstellung eines entsprechenden Halbleitermaterials durch Einbringen einer photonischen Strukturierung mit der vorbestimmten Gitterkonstante in das Halbleitermaterial.

[0002] Aus dem Stand der Technik ist bekannt, dass sich die Emission eines Materials durch eine photonische Struktur beeinflussen lässt (T. Jones, „Thermal emission by metallic photonic crystal slab“, APL 89, 041915 2006). Allerdings beschreibt diese Veröffentlichung weder die Möglichkeit der Beeinflussung der Bandlückenenergie, noch die Möglichkeit, hieraus eine Solarzelle oder ein sonstiges Bauelement mit einstellbaren Materialeigenschaften zu schaffen.

[0003] Bekannt sind ferner andere Möglichkeiten, die elektrischen Eigenschaften eines Halbleiters zu beeinflussen. Diese zielen z. B. auf Quanteneffekte ab. Diese Quanteneffekte werden verwendet, um die Ausbreitung der Elektron-Wellenfunktion einzuschränken, wodurch sich die energetischen Zustände in den Strukturen verändern. Dies erfolgt in einer (quantum wells), zwei oder drei (quantum dots) Dimensionen (z. B. Song, „Structural, electrical and photovoltaic characterization of Si nanocrystals embedded SiC matrix and Si nanocrystals/c-Si heterojunction-devices“, Solar Energy Materials and Solar Cells 92 (2008) 474–481. Es gibt auch andere Möglichkeiten, die elektrischen Eigenschaften zu ändern, etwa durch Materialkomposition oder auch Dotierung. Der Vorteil gegenüber Quantenstrukturen ist die größere Strukturgröße und damit die potentiell bessere Herstellbarkeit, der Vorteil gegenüber anderen Methoden ist die zu erwartende gewonnene Designfreiheit (Materialkompositionen können nur begrenzt die gewünschten Effekte liefern).

[0004] Ebenso sind photonische Kristalllaser bekannt. Hierbei werden photonische Strukturen verwendet, um die spontane Emission des Halbleitermaterials zu beeinflussen und eine niedrigere Laserschwelle zu erreichen (siehe etwa K. Forberich, „Organische Photonische Kristall-Laser, Dissertation Freiburg 2005).

[0005] Aus der US 2006/0209393 ist ein Verfahren zur Herstellung von photonischen Bandlückenmaterialien bekannt. Das Verfahren zeichnet sich durch

hohe Qualität aus und kann in großem Maßstab durchgeführt werden.

[0006] Die US 2009/0311816 sind Halbleitermaterialien mit einer elektrischen Bandlücke eines Energiebetrags bekannt, die eine vorbestimmte photonische Strukturierung mit einer photonischen Bandlückenenergie zwischen zwei Energieniveaus aufweisen.

[0007] Die DE 10 2008 056 175 betrifft ein Verfahren zur Herstellung eines strahlungsemitternden Dünnschichtbauelements, bei dem Nanostäbe auf einem Substrat aufgewachsen werden.

[0008] Zudem betrifft die EP 1 624 499 eine lichtemittierende Halbleiteranordnung, die auf einem photonischen Kristall mit multiplen Gitterkonstanten basiert.

[0009] Im Artikel von S. Noda et al. (Nature, Vol. 407, 2000, 608–610) sind die Auswirkungen von künstlich eingebrachten Defekten und/oder Lichtemittern in photonische Bandgapstrukturen zur Manipulation von Photonen beschrieben.

[0010] Allerdings ist keiner der bisher erschienenen Publikationen eine gezielte Vorgehensweise zu entnehmen, mit der die photonische Strukturierung eines Halbleitermaterials insofern genau auf die Art des Halbleitermaterials abgestimmt werden kann, dass sich eine genau vorbestimmte Korrelation der Lage der photonischen Bandlücke und der elektrischen Bandlücke ergibt.

[0011] Ausgehend hiervon ist es somit Aufgabe der vorliegenden Erfindung, ein Verfahren bereitzustellen, das die genaue Bestimmung der Gitterkonstante einer photonischen Strukturierung eines Halbleitermaterials ermöglicht, wodurch die energetische Lage der photonischen Bandlücke genau auf die energetische Lage der elektrischen Bandlücke abgestimmt werden kann. Weiter ist es Aufgabe der vorliegenden Erfindung, ebenso ein Fertigungsverfahren für ein derart abgestimmtes Halbleitermaterial anzugeben.

[0012] Bezüglich des Verfahrens zur Bestimmung der Gitterkonstante wird diese Aufgabe mit den Merkmalen des Patentanspruches 1 gelöst. Patentanspruch 8 betrifft ein Verfahren zur Herstellung eines Halbleitermaterials.

[0013] Erfindungsgemäß wird somit ein Verfahren zur Bestimmung einer Gitterkonstante a einer ein-, zwei- oder dreidimensionalen photonischen Strukturierung eines Halbleitermaterials mit einer vorgegebenen photonischen Bandlücke mit vordefinierter energetischer Lage und Breite zwischen zwei Energieniveaus ε_1 und ε_2 mit $\varepsilon_1 < \varepsilon_2$, in Abhängigkeit von der energetischen Lage und Breite der elektrischen

Bandlücke des dem Halbleitermaterial zu Grunde liegenden Halbleiters mit einer elektrischen Bandlücke des Energiebetrags ε_G , das die folgenden Schritte umfasst:

- a) Wahl des Halbleitermaterials,
- b) Wahl der energetischen Position (d. h. der relativen Position zur elektrischen Bandlücke) und/oder der Breite (d. h. des Betrags der Differenz $\varepsilon_2 - \varepsilon_1$) der photonischen Bandlücke in Bezug auf die elektrische Bandlücke des Halbleiters,
- c) Wahl der Art der vorzunehmenden photonischen Strukturierung, sowie
- d) Ermittlung der Gitterkonstante a der photonischen Bandlücke aus den in den Schritten a) bis c) vorgegebenen Parametern.

[0014] Der im Folgenden beschriebenen Erfindung liegt somit die Idee, einen Halbleiter in Form einer photonischen Struktur zu realisieren, zugrunde. Daraus resultiert eine neue Klasse von Materialien mit variablen Materialeigenschaften. Diese werden im Folgenden als Meta-Halbleiter bezeichnet. Dieses Materialprinzip eignet sich insbesondere zur Anwendung für eine Solarzelle, weswegen häufig auf dieses Beispiel zurückgegriffen wird. Es wird jedoch betont, dass das beschriebene Konzept nicht auf Solarzellen beschränkt ist, sondern abstrakt zu verstehen ist.

[0015] Grundlagen der vorliegenden Erfindung bilden das Verständnis von Metamaterialien und photonischen Kristallen. Metamaterialien sind eine bestimmte Klasse von künstlich erzeugten Strukturen, bei denen bestimmte Materialeigenschaften durch die Struktur definiert sind. Ein prominentes Beispiel hier sind Materialien mit negativem Brechungsindex. Die Materialeigenschaft die hierbei beeinflusst wird, ist die magnetische Permeabilität.

[0016] Photonische Kristalle können in diesem Sinne als Metamaterialien verstanden werden, bei denen die Dispersionsrelation der Photonen im Material durch die Struktur definiert wird. Die Effekte, die für Photonen im photonischen Kristall auftreten, sind vergleichbar denen von Elektronen in einem Halbleiterkristall. Aus dieser Analogie bezieht der photonische Kristall seinen Namen als auch seine physikalische Beschreibung. Ähnlich wie für die Elektronen im Halbleiter bildet sich für die Photonen im photonischen Kristall eine photonische Bandstruktur aus. Ein photonisches Band bezeichnet eine Region von Photonen bestimmter Energien und bestimmter Richtungen, die innerhalb des photonischen Kristalls nicht existieren können. Dies führt dazu, dass innerhalb des Bandes keine Photonen von außen in den Kristall hinein können (er reflektiert perfekt) und dass von innen keine Photonen hinaus können (die Emission ist unterdrückt). Unterschieden wird zwischen vollständigen und unvollständigen photonischen Bändern. In einem vollständigen photonischen Band sind für Photonen bestimmter Energien alle Richtungen ausge-

schlossen, in einem unvollständigen photonischen Band sind manche Richtungen erlaubt, andere nicht. Ein photonischer Kristall kann sowohl vollständige als auch unvollständige photonische Bänder enthalten.

[0017] In einer Solarzelle werden elektrische und optische Eigenschaften miteinander verknüpft, weswegen eine Beeinflussung optischer Eigenschaften Konsequenzen auf die elektrischen Eigenschaften haben kann (und umgekehrt).

[0018] Wesentlich für den mit einer Solarzelle erreichbaren Wirkungsgrad ist die elektrische Bandlücke des Halbleitermaterials, aus dem die Solarzelle besteht. Dies gilt sowohl für Einzel- als auch für Mehrfachszellen. Die elektrische Bandlücke definiert, bis zu welcher Energie ε_G Photonen von der Solarzelle absorbiert oder emittiert werden können. Je niedriger diese Energie ist, desto mehr Photonen können verwendet werden. Die Leerlaufspannung der Solarzelle ist jedoch umso größer, je höher die elektrische Bandlückenenergie ε_G ist. Für den maximalen Wirkungsgrad ergibt sich deshalb ein theoretisches Maximum für eine elektrische Bandlückenenergie von etwa 1.1 eV für eine Einzelsolarzelle, was sehr nahe an der Bandlückenenergie von Silizium liegt. Die Bandlückenenergie ε_G ist eine Materialeigenschaft. Insbesondere für Mehrfachszellen ist die Möglichkeit diese zu wählen und nicht auf die von der Natur vorgegebenen Energien beschränkt zu sein von Vorteil.

[0019] Die erfindungswesentlichen Schritte des erfindungsgemäßen Verfahrens werden in den nachfolgenden Ausführungen näher erläutert.

1. Schritt a): Wahl des Halbleiters

[0020] Als erster Schritt muss der Halbleiter gewählt werden, der durch die Strukturierung beeinflusst werden soll. Die Wahl des Halbleiters legt die Materialparameter fest, die zur Bestimmung der Gitterkonstante a benötigt werden. Im Prinzip liegen hier keinerlei Einschränkungen bezüglich der Wahl des Basismaterials vor.

2. Schritt b): Wahl der Position der photonischen Bandlücke

[0021] Diese Wahl hängt vom verwendeten Basishalbleitermaterial ab, sowie vom vorgesehenen Zweck. Möchte man etwa die photonische Bandlücke direkt an die elektrische anschließen lassen, so wird die Frequenz, die dem Bandabstand zwischen Valenz- und Leitungsband ε_G entspricht, gleich oder größer der Frequenz, welche die untere Grenze des photonischen Bandes ε_1 markiert. Gleichzeitig kann die Frequenz, welche die obere Grenze des photonischen Bandes markiert ε_2 oberhalb von ε_G liegen (Überlapp der Bänder). Für andere Zwecke kann es

jedoch auch vorteilhaft sein, wenn ϵ_1 bereits oberhalb von ϵ_G liegt (Separation der Bänder). Wichtig ist hier nur, dass die Position des photonischen Bandes für jeden Zweck eindeutig festgelegt werden kann.

3. Schritt c): Wahl des photonischen Kristalls

[0022] Für bestimmte Zwecke werden definierte Breiten der photonischen Bandlücken benötigt. Die Breite einer solchen Bandlücke hängt von der Geometrie der Struktur sowie von den Materialparametern des Basismaterials ab. Sie ist damit im Prinzip durch die Schritte a) und b) bereits weitestgehend festgelegt. Die einzige Wahlmöglichkeit besteht in der Geometrie des photonischen Kristalls. Eine Beschränkung besteht somit lediglich in den zur Verfügung stehenden Geometrien. Eine Wahl des photonischen Kristalls hat zudem Auswirkungen auf mögliche Herstellungsprozesse und hängt somit auch in dieser Hinsicht vom verwendeten Halbleitermaterial ab.

4. Schritt d): Bestimmung der photonischen Bandlücke und Wahl der benötigten Periodengröße

[0023] Mit den Informationen aus Schritt a) und c) lässt sich bereits die Charakteristik des photonischen Kristalls, seine Bandstruktur, bestimmen. Die Berechnung der Bandstruktur kann dabei über das Programm MPB (MIT Photonic-Bands, Version 1.4.2, erhältlich über das Massachusetts Institute of Technology) erfolgen. Eine detaillierte Beschreibung, wie dies zu erfolgen hat, kann in der Literatur gefunden werden:

S. G. Johnson, J. D., Joannopoulos, "Block-iterative frequency-domain methods for Maxwell's equations in a planewave basis", *Optics Express*, vol. 8, No. 3, pp. 173–190, Jan. 29, 2001.

J. D. Joannopoulos, R. D. Meade, J. N. Winn *Photonic Crystals, "Molding the Flow of Light"*, Princeton University Press 1995.

[0024] Die berechnete Bandstruktur wird dabei in normierten Frequenzen angegeben. Diese Angabe ist der Tatsache geschuldet, dass die Charakteristik eines photonischen Kristalls bezüglich seiner Wellenlänge mit der Periodengröße skaliert wird (Verdoppelt man z. B. die Strukturgröße des photonischen Kristalls, erhält man einen Kristall mit unveränderten Eigenschaften, die nun jedoch bei einer doppelt so großen Wellenlänge auftreten). Die benötigte Periodengröße des Kristalls ist also an dieser Stelle noch nicht festgelegt. Eine eindeutige Festlegung ist aber dadurch gegeben, dass in Schritt b) die absolute Position des Bandes festgelegt wurde. Dadurch lässt sich nun auch die Periodengröße des photonischen Kristalls eindeutig festlegen.

[0025] Mit dieser Rechnung ist nun auch die Breite der photonischen Bandlücke bekannt. Sollte diese

nun nicht den Anforderungen genügen, muss gegebenenfalls Schritt c) und d) wiederholt werden.

[0026] Das erfindungsgemäße Verfahren ermöglicht es somit, gezielt einen Meta-Halbleiter mit vorgegebenen elektrooptischen Eigenschaften zu kreieren. Dieser Meta-Halbleiter besteht z. B. aus herkömmlichen Halbleitermaterialien. Zusätzlich wird dieser Halbleiter photonisch strukturiert, wobei diese Struktur derart gestaltet ist, dass die photonische Bandlücke der photonischen Struktur und die elektrische Bandlücke des Matrixmaterials aufeinander abgestimmt sind. Diese Abstimmung und der angestrebte Effekt, der mit der Kombination bezweckt werden, definieren die Strukturgröße der photonischen Struktur Λ sowie deren Form (also die Art des photonischen Kristalls). Entscheidend sind dabei zwei Parameter, die zentrale Wellenlänge λ_0 der photonischen Bandlücke des Bandes, welches verwendet werden soll und die Breite Δ des photonischen Bandes. Die zentrale Wellenlänge λ_0 definiert bei einer bekannten photonischen Struktur die Strukturgröße Λ , die Breite kann bei bekanntem Matrixmaterial durch die Wahl der verwendeten Struktur beeinflusst werden, hängt aber auch von Λ ab.

[0027] Im Folgenden wird nun das Vorgehen in konkreten Schritten für bestimmte Randbedingungen beschrieben.

[0028] Im ersten Szenario soll folgendes erreicht werden: Es sei ein Halbleitermaterial gegeben mit einer elektrischen Bandlücke, welche durch eine Wellenlänge λ_E gekennzeichnet ist. Ziel ist es nun, dieses Material in eine photonische Struktur zu bringen, so dass die Struktur eine photonische Bandlücke aufweist, welche einen Bereich umschließt, der λ_E enthält und weiter bis zu einer Wellenlänge λ_{OE} geht, wobei gilt $\lambda_{OE} < \lambda_E$. Der Bereich zwischen λ_{OE} und λ_E gibt die Breite an, die die photonische Bandlücke mindestens haben muss, um für diese Anwendung geeignet zu sein. Für ein gegebenes Matrixmaterial und für einen gegebenen Bereich $[\lambda_{OE}, \lambda_E]$ kann berechnet werden, welche photonischen Strukturen für diese Aufgabe in Frage kommen. Eine Beschreibung der dazu notwendigen Methode findet sich in *Photonic Crystals – "Molding the Flow of Light"* von John D. Joannopoulos (Princeton University Press (ISBN 0-691-03744-2)).

[0029] Konkret kann dazu das Programm MIT Photonic Bands (MPB) verwendet werden, welches frei zugänglich ist. Alternativ können Eigenschaften von photonischen Kristallen auch in der Fachliteratur eingesehen werden, so dass auch hier eine Auswahl möglicher Strukturen erfolgen kann.

[0030] Über die Wahl der photonischen Struktur und des Matrixmaterials ist weiterhin die photonische Bandstruktur des Meta-Halbleiters vollständig defi-

niert. Diese kann ebenfalls über das Programm MPB berechnet werden. In diesem Programm wird die Bandstruktur in normierten Frequenzen angegeben. Die Berechnung der Gitterkonstanten a kann, wenn λ_{OE} und λ_E bekannt sind, aus diesen Angaben berechnet werden.

[0031] Dieses Vorgehen lässt sich auch auf andere mögliche Anwendungen übertragen, etwa wenn ein Bereich $[\lambda_1, \lambda_2]$ gewählt werden soll, in welchem die photonische Bandlücke aktiv sein soll, dieser Bereich sich aber bei Wellenlängen befindet, die sich unterhalb von λ_E befinden.

[0032] Eine bevorzugte Ausführungsform der Erfindung sieht vor, dass in Schritt b) die photonische Bandlücke so gewählt wird, dass die Bedingung $\epsilon_G < \epsilon_2$ gilt. Gemäß dieser Ausführungsform wird die photonische Bandlücke so gewählt, dass die energetische Lage der Oberkante der photonischen Bandlücke auf einem energetischen höheren Niveau liegt als die energetische Obergrenze der elektrischen Bandlücke.

[0033] Für diesen Fall sind zwei Spezialfälle denkbar, die beide bevorzugte Ausführungsformen der Erfindung darstellen. In einem ersten Fall wird die photonische Bandlücke so arrangiert, dass sie energetisch teilweise mit der elektrischen Bandlücke überlappt. In dieser Ausführungsform wird also die elektrische Bandlücke so angelegt, dass die folgende Bedingung gilt: $\epsilon_1 \leq \epsilon_G < \epsilon_2$

[0034] Hierbei wird also ein Halbleitermaterial erzeugt, das gegenüber Licht veränderte absorptive Eigenschaften aufweist. Die effektive Bandlücke eines derartigen Materials ergibt sich somit aus der elektrischen Bandlücke ϵ_G in Kombination mit dem Teil der photonischen Bandlücke, der energetisch mit der elektrischen Bandlücke überlappt. Somit kann ein Halbleitermaterial erhalten werden, dessen elektrooptische Bandlücke (d. h. der Bandlücke, die durch Kombination der elektrischen mit der optischen Bandlücke resultiert) im Vergleich zur elektrischen Bandlücke (d. h. der Abstand von Valenz- und Leitungsband) des unstrukturierten Halbleitermaterials vergrößert ist. Mit anderen Worten wird die Absorptionskante eines derartigen Halbleitermaterials zum blauen Ende des optischen Spektrums hin verschoben.

[0035] Eine weiter bevorzugte Ausführungsform sieht vor, dass die photonische Bandlücke energetisch separiert von der elektrischen Bandlücke angelegt wird. Dabei wird die photonische Bandlücke energetisch über die bestehende elektrische Bandlücke gesetzt. Bei dieser Ausführungsform der Erfindung gilt die Bedingung: $\epsilon_G < \epsilon_1$.

[0036] Auch durch diese Ausführungsform lassen sich Materialien erhalten, die eine veränderte Absorp-

tivität gegenüber Licht verglichen mit dem unstrukturierten Ausgangsmaterial aufweisen, da in einem höher energetischen Bereich eine verbotene Zone für Photonen ein gerichtet wird, so dass eine Absorption von Photonen definierter Wellenlänge in einem bestimmten Bereich verboten ist. Im idealen Fall gilt Absorptivität = Emissivität. Eine Einschränkung der Absorption ist also auch gleich eine Einschränkung der Emission.

[0037] Das erfindungsgemäße Verfahren eignet sich prinzipiell mit allen Halbleitern, bevorzugt sind die verwendeten Halbleiter, die in Schritt a) ausgewählt werden, jedoch ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus IV-Halbleitern, III-V-Halbleitern, II-VI-Halbleitern, III-VI-Halbleitern, I-III-VI-Halbleitern, IV-IV-Halbleitern und/oder Kombinationen hieraus.

[0038] Besonders bevorzugt werden folgende Halbleiter verwendet:

- a) IV-Halbleiter aus Si und/oder Ge,
- b) III-V-Halbleiter aus GaP, GaAs, InP, InSb, InAs, GaSb, GaN, AlN, InN, $Al_xGa_{1-x}As$, $In_xGa_{1-x}N$, und/oder Kombinationen hieraus,
- c) II-VI-Halbleiter aus ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdS, CdSe, CdTe, $Hg_{(1-x)}Cd_xTe$, BeSe, BeTe, HgS und/oder Kombinationen hieraus,
- d) III-VI-Halbleiter aus GaS, GaSe, GaTe, InS, InSe, InTe und/oder Kombinationen hieraus,
- e) I-III-VI-Halbleiter aus $CuInSe_2$, $CuInGaSe_2$, $CuInS_2$, $CuInGaS_2$ und/oder Kombinationen hieraus,
- f) IV-IV-Halbleiter aus SiC und/oder SiGe und/oder
- g) chemischen Verbindungen der zuvor genannten Halbleitermaterialien, insbesondere ternäre oder quaternäre Halbleiter aus den zuvor genannten Materialien.

[0039] Bevorzugte photonische Strukturen, die in Schritt c) gewählt werden können, sind dabei ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Bragg-Stapel, 2D- oder 3D-photonischen Kristallen, insbesondere invertierten Opalen. Dabei sind dreidimensionale photonische Kristalle, insbesondere invertierte Opale, besonders bevorzugt.

[0040] Erfindungsgemäß wird ebenso ein Verfahren zur Herstellung eines Halbleitermaterials mit einer vordefinierten energetischen elektrooptischen Bänderstruktur bereitgestellt, bei dem die folgenden Schritte durchgeführt werden:

- a) Bestimmung einer Gitterkonstante a einer ein-, zwei- oder dreidimensionalen photonischen Strukturierung eines Halbleitermaterials nach einem der vorhergehenden Ansprüche, sowie
- b) Fertigung der photonischen Struktur mit Gitterkonstante a im Halbleiter.

[0041] Wurden die Schritte a) bis d) des eingangs beschriebenen erfindungsgemäßen Bestimmungs-

verfahrens ausgeführt, liegen alle Informationen vor, die benötigt werden, um den entsprechenden photonischen Kristall zu fertigen. Um daraus in einem weiteren Schritt ein elektrisches Halbleiterbauelement zu fertigen, sind weitere Fertigungsschritte nötig, die je nach Element unterschiedlich sein können.

[0042] Bevorzugt kann die Fertigung der photonischen Struktur in oder aus einem jeweiligen Halbleitermaterial dabei durch lithographische Prozesse, Ätzen, holographische Methoden, Selbstorganisation, nanorobotische Methoden, Ionenbohren, gerichtetes Abscheiden, direktes Laserschreiben und/oder Inversionsprozesse erfolgen.

[0043] Zudem wird ein Halbleitermaterial beschrieben, das eine elektrische Bandlücke des Energiebetrags ε_G , das eine vorbestimmte photonische Strukturierung mit einer photonischen Bandlücke zwischen zwei Energieniveaus ε_1 und ε_2 aufweist, wobei $\varepsilon_1 < \varepsilon_2$ gilt.

[0044] Es wird somit ein Halbleitermaterial angegeben, das eine genau vorbestimmte und auf die elektrische Bandlücke abgestimmte Lage einer photonischen Bandlücke aufweist.

[0045] Das Halbleitermaterial kann selbstverständlich gemäß den weiter aus dem Stand der Technik bekannten Vorgehensweisen weiter verarbeitet werden, z. B. dotiert werden und/oder auf der Vorder- und/oder Rückseite elektrisch kontaktiert werden, so dass sich daraus Solarzellen, Dioden, Leuchtdioden oder Laserdioden herstellen lassen.

[0046] Systeme, für die diese Technik interessant ist, sind Einfach- und Mehrfachsolarzellen mit einstellbarer Bandlücke zu, sowie z. B. auch LED's oder Lasersysteme. Des weiteren unterscheiden sich die bekannten physikalischen Effekte, mit denen die Bandstruktur-Architektur erreicht werden soll, von dem hier beschriebenen Effekt wesentlich. Dadurch ist zu erwarten, dass auch die Randbedingungen, unter denen sich der beschriebene Effekt auswirkt, wesentlich unterschiedlich zu den bekannten sein werden. Denkbar sind Anwendungen in allen Bereichen in der Elektrik und Optik, also auch z. B. Informations- und Datentechnik, Detektoren etc.

[0047] Die vorliegende Erfindung wird anhand der nachfolgenden Ausführungen näher beschrieben, ohne den Gegenstand der Erfindung auf die speziellen Parameter zu beschränken.

[0048] Gegenstand der Erfindung ist ein Verfahren zur Erzeugung eines Meta-Materials mit einstellbarer elektrooptischer Bandlückenenergie. Dies wird erreicht, indem ein klassischer Halbleiter mit einer photonischen Struktur kombiniert wird. Die photonische Struktur soll dabei im Prinzip eine vollständige pho-

tonische Bandlücke aufweisen. Diese Bandlücke verhindert die Absorption und Emission von Photonen mit Energien $\varepsilon_1 < hv < \varepsilon_2$ innerhalb der photonischen Bandlücke. Für einen klassischen Halbleiter mit der elektrischen Bandlückenenergie ε_G ist die Absorption und Emission von Photonen für alle Energien $\varepsilon < \varepsilon_G$ verboten. Durch eine Kombination eines klassischen Halbleiters mit einer photonischen Struktur kombinieren sich auch diese Absorptions- und Emissionseigenschaften. Ein besonders illustrativer Fall tritt ein, wenn die elektrische Bandlückenenergie innerhalb der photonischen Bandlücke liegt $\varepsilon_1 < \varepsilon_G < \varepsilon_2$. Gemessen an den Absorptions- und Emissionseigenschaften ist eine solche Struktur von einem klassischen Halbleiter mit der elektrischen Bandlückenenergie ε_2 nicht zu unterscheiden. In diesem Sinne können die elektrische und die optische Bandlücke nicht sinnvoll getrennt werden, wodurch sich eine neue, elektrooptische Bandlücke ergibt. Da über die photonische Struktur ε_2 mit großer Freiheit gewählt werden kann, ergibt sich dadurch eine Designfreiheit der elektrischen Eigenschaften, die für einen klassischen Halbleiter nicht existiert.

[0049] Im letzten Abschnitt wird ein vergleichsweise einfacher Fall geschildert, mit nur einer photonischen Bandlücke und dem Beispiel, dass sich diese mit der elektrischen Bandlücke überschneidet. Es können sich jedoch interessante Materialien mit mehreren Bandlücken an verschiedenen Stellen ergeben. Im Hinblick auf eine Solarzelle können derartig angelegte Zwischenbänder dazu verwendet werden, die Absorptivität einer Solarzelle gezielt zu beeinflussen.

[0050] Abgesehen von Solarzellen beschreibt diese Erfindung im Allgemeinen eine neue Materialklasse, einen neuen Halbleitertypus, der überall dort Relevanz beanspruchen kann, wo die Bandlückenenergie des Halbleiters wichtig ist.

[0051] Eine mögliche Realisierung eines Meta-Halbleiters kann z. B. so aussehen, dass ein Halbleitermaterial, welches ein hohes Maß an strahlender Rekombination aufweist (etwa GaAs), in die Form eines invertierten Opals gebracht wird. Die Abmessungen des Opals sind so zu wählen, dass die vollständige optische Bandlücke mit der elektrischen Bandlücke überlappt (Periode der Opalstruktur ca. 350 nm). Dies ergibt den Meta-Halbleiter.

[0052] Um daraus weiterhin eine Solarzelle zu fertigen, müssen entsprechende Dotierungsschritte sowie eine Kontaktierung durchgeführt werden.

[0053] Neu an der vorliegenden Erfindung ist die Art und Weise, wie eine Einstellung der Bandlücke eines Halbleiters erreicht werden soll. Erreicht wird diese über die Kopplung elektrischer- und photonischer Effekte, wodurch ein Material entsteht, welches sich von einem klassischen Halbleiter deutlich unterscheidet.

det und welches einer physikalisch neuen Beschreibung bedarf. Dieses neue Material wird sowohl durch seine elektrischen Eigenschaften wie auch durch seine (photonische) Struktur bestimmt, weswegen man von Meta-Halbleiter (in Anlehnung an Metamaterialien) spricht. Mögliche Einsatzgebiete dieses neuen Materials finden sich überall dort, wo auch klassische Halbleiter eingesetzt werden.

[0054] Ebenso sind Ausführungen eines Halbleitermaterials in Form einer photonischen Struktur, welches eine vollständige photonische Bandlücke aufweist und elektrisch kontaktiert ist, oder einer Solarzelle/LED/Sensor in Form einer photonischen Struktur mit einer vollständigen Bandlücke möglich.

[0055] In [Fig. 1a](#) sowie [Fig. 1b](#) ist das Absorptions- und Emissionsverhalten eines klassischen Halbleiters dargestellt, der eine photonische Strukturierung aufweist. In [Fig. 1a](#) sind die elektrooptischen Eigenschaften eines Halbleitermaterials angegeben, das eine von der elektrischen Bandlücke separierte photonische Bandlücke aufweist. Die photonische Bandlücke ist dabei energetisch höher angelegt als die elektrische Bandlücke, d. h. $\epsilon_G < \epsilon_1$, wobei ϵ_G die Energie der Bandlücke darstellt. Zwischen den einzelnen Bändern liegt ein energetischer Bereich $\Delta\epsilon$, in dem der Halbleiter normal absorbiert. Der Halbleiter kann jedoch weder im Bereich der elektrischen Bandlücke noch im Bereich der photonischen Bandlücke Strahlungsenergie absorbieren, so dass hier die Absorptivität eines derartigen Halbleitermaterials idealerweise auf Null fällt. In den zwischen den Bändern liegenden „erlaubten“ Bereichen ist eine Absorption möglich.

[0056] In [Fig. 1b](#) ist ein alternativer photonisch strukturierter Halbleiter dargestellt, wobei hier die photonische Bandlücke so angelegt ist, dass sie mit der elektrischen Bandlücke überlappt, d. h. es gilt $\epsilon_1 < \epsilon_G < \epsilon_2$. Dies resultiert effektiv in einer vergrößerten elektrooptischen Bandlücke der Größe ϵ_2 , so dass der minimal mögliche Energiegehalt von Photonen, die der Halbleiter absorbieren kann, vergrößert wird.

[0057] In [Fig. 2](#) ist eine mögliche Strukturierung zur Erzeugung einer photonischen Bandlücke dargestellt, dies ist im vorliegenden Fall ein invertierter Opal, wobei [Fig. 2](#) einen zweidimensionalen Ausschnitt bzw. einen Schnitt durch einen eigentlich dreidimensionalen photonischen Kristall darstellt.

[0058] [Fig. 2](#) zeigt einen Meta-Halbleiter bestehend aus GaAs, mit der photonischen Struktur eines invertierten Opals. Licht mit Energien in der elektrischen Bandlücke kann keine Elektronen in das Leitungsband anheben und kann deshalb weder absorbiert noch emittiert werden. Einfallendes Licht wird transmittiert. Licht in der photonischen Bandlücke kann im photonischen Kristall nicht existieren und kann eben-

falls nicht emittiert werden. Einfallendes Licht wird reflektiert und kann deshalb auch nicht absorbiert werden.

Patentansprüche

1. Verfahren zur Bestimmung einer Gitterkonstante a einer ein-, zwei- oder dreidimensionalen photonischen Strukturierung eines Halbleitermaterials mit einer vorgegebenen photonischen Bandlücke mit vordefinierter energetischer Lage und Breite zwischen zwei Energieniveaus ϵ_1 und ϵ_2 mit $\epsilon_1 < \epsilon_2$, in Abhängigkeit von der energetischen Lage und Breite der elektrischen Bandlücke des dem Halbleitermaterial zu Grunde liegenden Halbleiters mit einer elektrischen Bandlücke des Energiebetrags ϵ_G mit folgenden Schritten:

a) Wahl des Halbleitermaterials,
b) Wahl der energetischen Position und/oder der Breite der photonischen Bandlücke in Bezug auf die elektrische Bandlücke des Halbleiters,
c) Wahl der Art der vorzunehmenden photonischen Strukturierung, sowie
d) Ermittlung der Gitterkonstante a der photonischen Bandlücke aus den in den Schritten a) bis c) vorgegebenen Parametern.

2. Verfahren nach Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass in Schritt b) die photonische Bandlücke so gewählt wird, dass die Bedingung $\epsilon_G < \epsilon_2$ gilt.

3. Verfahren nach einem der vorhergehenden Ansprüche, dadurch gekennzeichnet, dass, in Schritt b) ϵ_2 so gewählt wird, dass $\epsilon_1 \leq \epsilon_G < \epsilon_2$ gilt.

4. Verfahren nach Anspruch 1 oder 2, dadurch gekennzeichnet, dass ϵ_2 so gewählt wird, dass $\epsilon_G < \epsilon_1$ gilt.

5. Verfahren nach einem der vorhergehenden Ansprüche, dadurch gekennzeichnet, dass in Schritt a) ein Halbleiter ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus IV-Halbleitern, III-V-Halbleitern, II-VI-Halbleitern, III-VI-Halbleitern, I-III-VI-Halbleitern, IV-IV-Halbleitern und/oder Kombinationen hieraus ausgewählt wird.

6. Verfahren nach vorhergehendem Anspruch, dadurch gekennzeichnet, dass die

a) IV-Halbleiter ausgewählt sind aus der Gruppe bestehend aus Si und/oder Ge,
b) III-V-Halbleiter ausgewählt sind aus der Gruppe bestehend aus GaP, GaAs, InP, InSb, InAs, GaSb, GaN, AlN, InN, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, und/oder Kombinationen hieraus,
c) II-VI-Halbleiter ausgewählt sind aus der Gruppe bestehend aus ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdS, CdSe, CdTe, $\text{Hg}_{(1-x)}\text{Cd}_{(x)}\text{Te}$, BeSe, BeTe, HgS und/oder Kombinationen hieraus,

- d) III-VI-Halbleiter ausgewählt sind aus der Gruppe bestehend aus GaS, GaSe, GaTe, InS, InSe, InTe und/oder Kombinationen hieraus,
- e) I-III-VI-Halbleiter ausgewählt sind aus der Gruppe bestehend aus CuInSe_2 , CuInGaSe_2 , CuInS_2 , CuInGaS_2 und/oder Kombinationen hieraus,
- f) IV-IV-Halbleiter ausgewählt sind aus der Gruppe bestehend aus SiC und/oder SiGe und/oder
- g) chemischen Verbindungen der zuvor genannten Halbleitermaterialien, insbesondere ternären oder quaternären Halbleitern aus den zuvor genannten Materialien.

7. Verfahren nach einem der vorhergehenden Ansprüche, dadurch gekennzeichnet, dass die photonische Struktur ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus Bragg-Stapeln, 2D oder 3D photonischen Kristallen, insbesondere invertierten Opalen.

8. Verfahren zur Herstellung eines Halbleitermaterials mit einer vordefinierten energetischen elektrooptischen Bänderstruktur, bei dem die folgenden Schritte durchgeführt werden:

- a) Bestimmung einer Gitterkonstante a einer ein- oder dreidimensionalen photonischen Strukturierung eines Halbleitermaterials nach einem der vorhergehenden Ansprüche, sowie
- b) Fertigung der photonischen Struktur mit Gitterkonstante a im Halbleiter.

9. Verfahren nach vorhergehendem Anspruch, dadurch gekennzeichnet, dass die Fertigung der photonischen Struktur durch lithographische Prozesse, Ätzen, holographische Methoden, Selbstorganisation, nanorobotische Methoden, Ionenbohren, gerichtetes Abscheiden, direktes Laserschreiben und/oder Inversionsprozesse erfolgt.

Es folgen 2 Blatt Zeichnungen

Anhängende Zeichnungen

FIG 1a

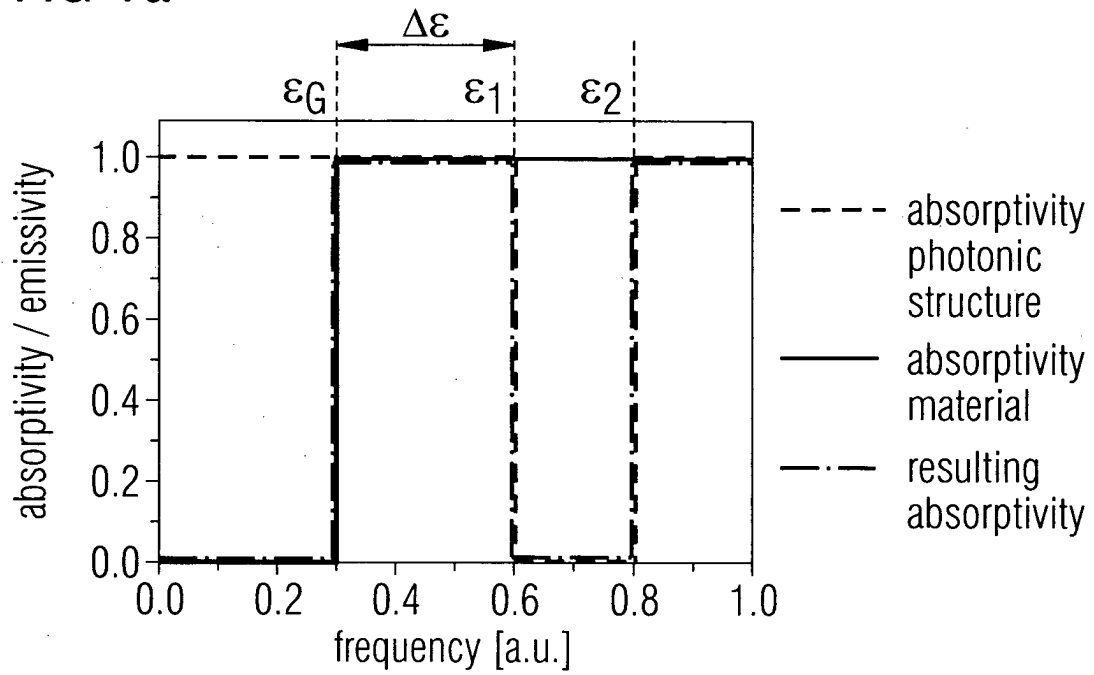


FIG 1b

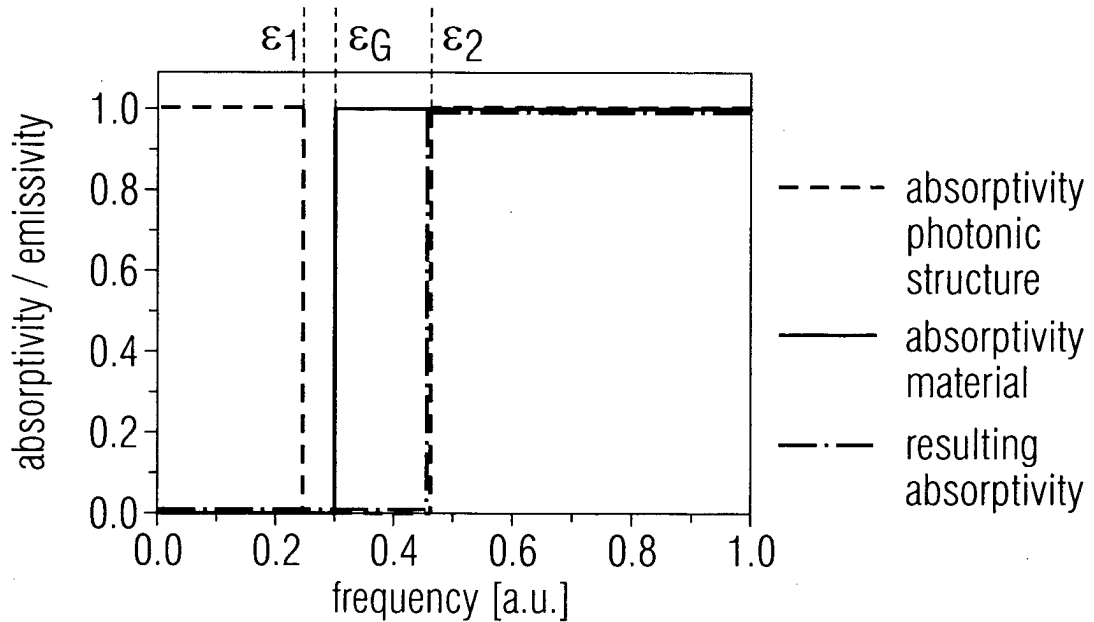


FIG 2

