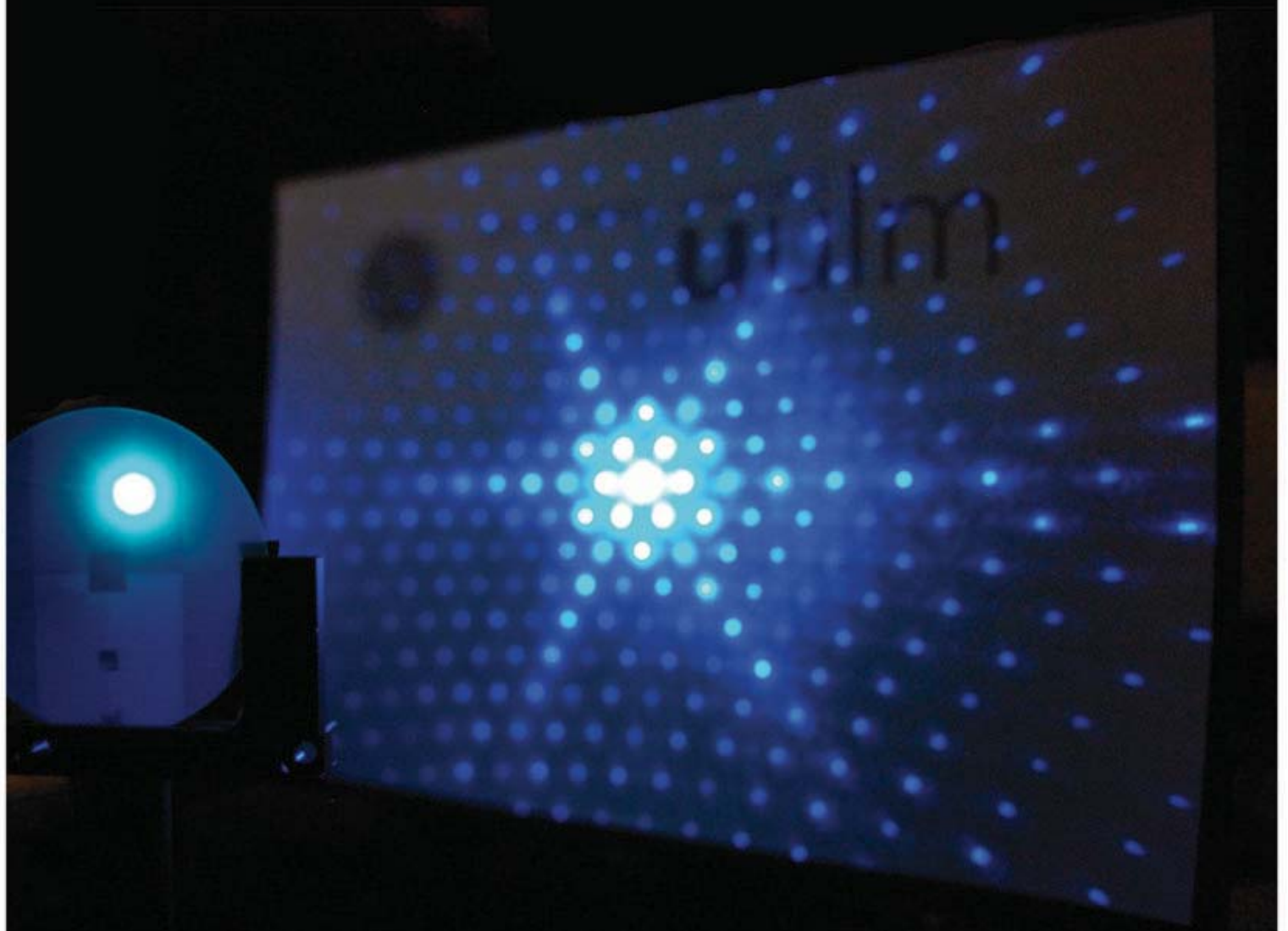


Thomas Wunderer

Dreidimensionale Licht emittierende GaInN/GaN-Strukturen mit reduziertem piezoelektrischen Feld



Cuvillier Verlag Göttingen
Internationaler wissenschaftlicher Fachverlag



ulm university universität
uulm

**Dreidimensionale Licht emittierende GaInN/GaN-Strukturen
mit reduziertem piezoelektrischen Feld**

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades eines

DOKTOR-INGENIEURS

(DR.-ING.)

der Fakultät für Ingenieurwissenschaften
und Informatik der Universität Ulm

von

DIPL.-ING. THOMAS WUNDERER

AUS IMMENSTADT

Gutachter:

Prof. Dr. rer. nat. Ferdinand Scholz

Prof. Dr. rer. nat. Michael Kneissl

Amtierender Dekan:

Prof. Dr.-Ing. Michael Weber

Ulm, 28.07.2010

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

1. Aufl. - Göttingen: Cuvillier, 2010

Zugl.: Ulm, Diss., Univ., 2010

978-3-86955-441-9

© CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2010

Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen

Telefon: 0551-54724-0

Telefax: 0551-54724-21

www.cuvillier.de

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche Genehmigung des Verlages ist es nicht gestattet, das Buch oder Teile daraus auf fotomechanischem Weg (Fotokopie, Mikrokopie) zu vervielfältigen.

1. Auflage, 2010

Gedruckt auf säurefreiem Papier

978-3-86955-441-9

Three-dimensional light emitting InGaN/GaN structures with reduced piezoelectric field

In recent years, much attention has been paid to group III-nitrides due to their properties suited for the fabrication of efficient optoelectronic devices. High-performance InGaN/GaN based light emitting diodes (LEDs) with an emission wavelength in the blue/violet spectral region or in combination with phosphors for white light sources are going to revolutionize existing lighting techniques. However, for longer wavelengths the efficiency of devices grown in the commonly used *c*-direction of GaN is continuously decreasing with increasing indium content in the active region. Strong built-in electrical fields caused by biaxial compressive strain within the InGaN quantum wells (QWs) are thought to be the main cause for this behavior. These piezoelectric fields (PFs) lead to a local separation of electrons and holes within the QWs and consequently to less efficient device structures due to a reduced overlap of the electron and hole wave functions.

By suppressing these strong PFs it is expected that the efficiency of nitride-based devices can drastically be improved. That is the reason why many groups are currently dealing with the investigation of GaN and GaN-based devices with QWs grown along non- and semipolar crystal directions, where the PFs could be shown to be significantly reduced.

Nevertheless, one main problem is still limiting the use of non- or semipolar material for industrial production: The competition between material quality and sample size. Foreign substrates offer conventional sizes, but up to now only inferior material quality compared to *c*-plane growth can be achieved. Non-radiative recombination is then compensating the advantages of the reduced fields and leads to the bad performance of such devices. On the other hand, high quality substrates of non- and semipolar GaN can be obtained by cutting small pieces from HVPE (hydrid vapor phase epitaxy) grown

Abstract

c-plane GaN. These substrates provide a very low threading dislocation and stacking fault density which seem to be the key factor for the remarkable device performance. However, the sample size in the range of a few mm² and their high price are still limiting factors for any mass production.

In this thesis, we investigate the properties of InGaN/GaN QWs and LEDs emitting in the blue and green spectral region which were grown on the semipolar side facets of three-dimensional (3D) GaN structures. This approach can be realized on full two inch wafers or larger. First, the growth behavior and crystalline quality of the 3D GaN is studied in detail using different mask patterns for the selective area growth (SAG). The variation of typical growth parameters during the MOVPE (metal organic vapor phase epitaxy) growth showed that a moderate temperature (950 °C), a low V/III ratio (400) and an increased reactor pressure are preferable for the 3D deposition. Very high material quality could be demonstrated for semipolar GaN by forming inverse pyramids with $\{1\bar{1}01\}$ facets. The low threading dislocation density, small widths of XRD rocking curves (< 350 arcsec) as well as narrow luminescence linewidths ($D^0X = 2.2$ meV) confirm the advantages of this method.

When depositing an InGaN QW on such 3D structures the specific geometry of the 3D GaN has great influence on the structural properties of the QW. For a single facet type, e.g. a triangularly shaped GaN stripe with $\{1\bar{1}01\}$ or $\{11\bar{2}2\}$ facets, the QW properties can accurately be described by a gas phase diffusion model. For $\{1\bar{1}01\}$ facets we found a small $D/k = 0.1 \mu\text{m}$ in comparison to $D/k = 20 \mu\text{m}$ for $\{11\bar{2}2\}$ facets (with the diffusion constant D and rate constant k) which could be a hint for the higher In-incorporation efficiency on the $\{1\bar{1}01\}$ plane. Furthermore, it could be shown that a more homogenous QW emission can be achieved by a reduced reactor pressure during the active area growth. This can be understood by the increased diffusion length of the participating species.

Quantitative analyses showed a drastically reduced piezoelectric polarization on our facets. We determined a piezoelectric field of just 0.12 MV/cm for a QW with 15% indium on a strongly strained GaN template and about 1 MV/cm for 20% indium on a nearly unstrained underlayer. Furthermore, the carrier life time of 650 ps (at $T=4$ K) for a semipolar blue light emitting QW in comparison to more than 50 ns for the polar case confirms the theoretically predicted better overlap of electron and hole wavefunctions. Additionally, we found a less pronounced blue shift for increasing carrier density by a factor of three which is a further hint for the reduced internal fields.

For a 12 μm big inverse pyramid with $\{11\bar{2}2\}$ facets the influence of gas phase diffusion leads to an enormous shift of the QW emission wavelength from 380 nm till 530 nm along one single facet. This huge variation of parameters is ideally suited for a test sample wherefore a large number of samples would be necessary otherwise. Combining the gas phase diffusion model with the QW thickness determined by transmission electron microscopy, taking into account the emission energy and the carrier life times, obtained from cathodoluminescence measurements, we have been able to precisely identify the QW thickness, indium content and piezoelectric field for any position along the facet. This knowledge opens the possibility to estimate the internal quantum efficiency (IQE) for different In-compositions on this semipolar plane. We estimate a maximum IQE of about 90% for an emission wavelength of 390 nm, decreasing continuously reaching a value of about 25% for 525 nm. This result shows that the presented method is applicable for the fabrication of high quality semipolar light emitters on conventional substrate sizes. However, the internal fields still limit the efficiency for long wavelength emitters, although they could be reduced by approximately 2/3.

Finally, we showed that the 3D structures can be embedded into full LED device structures showing reasonable performance. We showed an on-wafer optical output power of 700 μW @ 20 mA and up to 3 mW @ 110 mA for a semipolar LED with $\{1\bar{1}01\}$ facets and an emission wavelength of 425 nm. Up to 1 mW @ 110 mA could be achieved for bluish-green emission at 495 nm. LEDs based on μm sized inverse pyramids exhibit a pretty broad emission spectrum due to the structural gradient of the QW along one facet. This fact could be advantageous for lighting applications where a high color rendering index is preferred whereas the use of smaller sized 3D structures feature narrow spectra suitable for possible laser applications.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen zu Gruppe III-Nitriden	5
2.1	Kristallstruktur	5
2.2	Bandstruktur	7
2.3	Mehrkomponentige Verbindungshalbleiter	9
2.3.1	Gitterkonstante	9
2.3.2	Bandlücke	9
2.4	Defekte	12
2.4.1	Punktdefekte	12
2.4.2	Liniendefekte	13
2.4.3	Flächendefekte	14
2.5	Verspannung und Verzerrung	14
2.5.1	Thermische Verspannung	15
2.5.2	Verspannung durch Gitterfehlانpassung	15
2.6	Polarisation	21
2.6.1	Spontane Polarisation	22
2.6.2	Piezoelektrische Polarisation	22
2.6.3	Elektrische Felder	23
3	Eigenschaften von GaInN-Quantenfilmen	27
3.1	<i>Die Farbe</i> - Übergangsenergie	27
3.1.1	Bandlücke	28
3.1.2	Quantisierung	28
3.1.3	Quantum Confined Stark Effekt, QCSE	30
3.1.4	Screening	31
3.2	Effizienz	31
3.2.1	IQE	32
3.2.2	Überlapp-Integral	32

3.2.3	Materialqualität	34
3.3	Problemdarstellung	34
4	Epitaxie von (Al)Ga(In)N	37
4.1	Methoden	37
4.1.1	MBE (molecular beam epitaxy)	38
4.1.2	HVPE (hydride vapor phase epitaxy)	39
4.1.3	MOVPE (metal organic vapor phase epitaxy)	39
4.2	Substrate	41
4.2.1	Saphir (Al_2O_3)	41
4.2.2	Siliziumkarbid (SiC)	43
4.2.3	Silizium (Si)	44
4.2.4	Zinkoxid (ZnO)	45
4.3	Heteroepitaxie von polarem GaN	45
4.4	Nicht-/semipolare Substrate aus c-GaN	46
4.5	Heteroepitaxie von nicht-/semipolarem GaN	47
4.5.1	a-GaN auf r-Saphir	47
4.5.2	m-GaN auf LiAlO_2	48
4.5.3	m-, a-GaN auf m-, a- SiC	48
4.5.4	$\{10\text{-}1\text{x}\}$ -GaN auf $(1\text{x}0)$ - MgAl_2O_4	49
4.5.5	$\{10\text{-}1\text{-}3\}$ -, $\{11\text{-}22\}$ - und $\{10\text{-}10\}$ -GaN auf $\{10\text{-}10\}$ -Saphir	49
4.5.6	$\{10\text{-}10\}$ -GaN auf strukturiertem $\{11\text{-}20\}$ -Saphir	49
4.6	GaInN-Wachstum	50
4.7	n-Dotierung	51
4.8	p-Dotierung	51
5	Selektive Epitaxie	53
5.1	Prozedur	53
5.2	Maske	54
5.2.1	Maskenmaterial	54
5.2.2	Maskendesign	55
5.2.3	Herstellung	57
5.3	Defektreduktion	57
5.3.1	ELO(G)	58
5.3.2	FACELo	59
5.3.3	PENDEO	60
5.4	3D-GaN-Strukturen	60

5.5	Modellierung	60
5.5.1	Gasphasen-Diffusion	61
5.5.2	Oberflächen-Migration	62
5.5.3	Wachstumsrate	62
6	3D-GaN mit semipolaren Oberflächen	65
6.1	Wachstum von 3D-Ga(In)N	65
6.1.1	Formation von Facetten	66
6.1.2	Variation des V/III-Verhältnisses	66
6.1.3	Variation der Temperatur	71
6.1.4	Variation des Drucks	73
6.1.5	Oberflächenoptimierung	75
6.1.6	Koaleszierte Strukturen	77
6.2	Defekte	78
6.2.1	Versetzungen	79
6.2.2	Stapelfehler	82
6.3	Anisotropie	85
6.3.1	Verspannung	85
6.3.2	Wingtilt	88
6.4	Zusammenfassung	91
7	Selektiv abgeschiedene GaInN-Quantenfilme	93
7.1	Einfluss der Wachstums-Parameter	93
7.1.1	Temperatur	94
7.1.2	TEGa/TMIn	94
7.1.3	Wachstumsrate	95
7.1.4	Trärgas	95
7.1.5	Ammoniak	95
7.1.6	Parameter	96
7.2	Einfluss der Geometrie	96
7.2.1	Dreieckförmiger Streifen	97
7.2.2	Inverse Pyramiden	102
7.3	Einfluss des Reaktor-Drucks	106
7.4	Einfluss benachbarter Facetten-Typen	107
7.5	Einfluss der Facetten-Orientierung	109
7.6	Effizienz	113
7.6.1	Piezoelektrisches Feld	113

7.6.2	Materialqualität	118
7.6.3	IQE	122
8	Semipolare Leuchtdioden	129
8.1	Dotierung	129
8.1.1	n-Dotierung	129
8.1.2	p-Dotierung	129
8.2	Prozessierung	133
8.3	Optoelektronische Eigenschaften	134
8.3.1	Streifen	134
8.3.2	Inverse Pyramiden	136
9	Zusammenfassung und Ausblick	139
	Literaturverzeichnis	143
	Publikationsliste	167
	Danksagung	173
	Lebenslauf	177

1 Einleitung

Die großen technischen Fortschritte der letzten Jahrzehnte auf dem Gebiet der III-V Halbleiter führten zur Realisierung und erfolgreichen Kommerzialisierung von Licht emittierenden Dioden (LEDs). Diese Bauelemente sind klein, leicht, robust, hell, zuverlässig und vor allem effizient. Denn im Gegensatz zu vielen anderen Lichtquellen haben Leuchtdioden das Potential, elektrische Energie beinahe verlustfrei in optische zu konvertieren [1].

Heute schon weit verbreitet sind deshalb die optischen Bauelemente beispielsweise als signalgebende Quellen, werden als Hintergrundbeleuchtung in Display-Anwendungen eingesetzt und sind in immer mehr Bereichen der Fahrzeugtechnik zu finden. Die effiziente Umwandlung der elektrischen Energie in Licht der erwünschten Farbe ist neben der absolut erzielbaren Ausgangsleistung die entscheidende Frage für den weiteren Siegeszug der LEDs und die Zielsetzung dieser Arbeit. Auf dem Materialsystem AlGaInP/GaP-basierende Bauelemente, die im infraroten bis gelben Spektralbereich strahlen, weisen schon eine vergleichsweise hohe Effizienz auf [2]. Auch sind GaInN/GaN-basierte Leuchtdioden mit einer Emissions-Wellenlänge im blau-violetten Farbspektrum und Effizienzen von über 60 % realisierbar und haben in Kombination mit Phosphoren für weiße Lichtquellen [3] schon zahlreiche Marktsegmente erobert. Die vergleichsweise hohen Anschaffungskosten im Vergleich zur Glühlampe oder Leuchtstoffröhre sind jedoch ein Grund, warum LEDs heute existierende Beleuchtungstechniken noch nicht vollständig abgelöst haben. Dennoch ist die im Betrieb eingesparte Energie sowie die Langlebigkeit der Dioden beachtlich und macht sie deshalb so attraktiv.

Nachdem 1969 zum ersten Mal GaN epitaktisch auf Saphir abgeschieden [4] und 1971 auch Elektrolumineszenz erzielt wurde [5], war es lange Zeit ruhig um dieses Materialsystem aufgrund seiner bis dahin schlechten kristallinen Qualität. Erst als diese durch einen zweistufigen Prozess deutlich verbessert [6], 1989 von Amano *et al.* [7] durch Magnesium als Dotierstoff wirkliche p-Leitfähigkeit realisiert und auch die Möglichkeit einer thermischen Aktivierung erkannt wurde [8], war der Durchbruch für den

1 Einleitung

erfolgreichen Einsatz GaN-basierender Leuchtdioden erreicht. Mit einer neuartigen Anlagentechnik folgten zahlreiche Errungenschaften von der Gruppe um Shuji Nakamura wie die ersten blauen, grünen und gelben GaInN-Doppelheterostruktur-LEDs [9, 10], sowie der erste blaue GaInN/GaN Laser [11].

Heute kommerziell erhältliche GaInN/GaN-basierende optische Bauelemente besitzen trotz ihrer ordentlichen Ausgangsleistung noch ungelöste Probleme. Zwei Hauptaspekte können genannt werden. Einerseits ist eine Abhängigkeit der Effizienz von der Wellenlänge zu beobachten, andererseits eine Abhängigkeit von der eingepprägten Stromdichte. Die stetige Abnahme der Effizienz für langwelligere Emission, die mit einem Anstieg des In-Gehalts einhergeht, wird hauptsächlich auf zwei Ursachen zurückgeführt. Die Schwierigkeit besteht darin, hochqualitatives GaInN mit hoher Indium-Konzentration abzuscheiden. Desweiteren wird die strahlende Rekombination durch hohe innere Felder innerhalb der Quantenfilme (engl.: quantum wells, QWs) erschwert. Diese resultieren aus dem polaren Charakter von GaN, das typischerweise in der hexagonalen Wurtzit-Struktur kristallisiert. Die am besten kontrollierbare Wachstumsrichtung (c-Richtung), in der die bis heute höchste Materialqualität erreicht wird, weist jedoch die größte Polarität auf. Die biaxiale Verspannung eines GaInN-Films, der auf der polaren Oberfläche abgeschieden wird, führt zu einer asymmetrischen Ladungsverschiebung und damit zur Entstehung eines piezoelektrischen Feldes innerhalb des QWs. Durch das hohe innere Feld werden Elektronen und Löcher lokal getrennt und die strahlende Rekombinations-Wahrscheinlichkeit dadurch reduziert, was besonders bei langwelliger Emission problematisch ist. Die Untersuchung von weniger polaren Kristall-Orientierungen scheint unter diesem Gesichtspunkt besonders interessant, da eine höhere Quantenausbeute zu erwarten ist [12, 13]. Eine weitere, bedeutsame Problematik für die Allgemein-Beleuchtung mittels GaN-basierter LEDs, wo hohe Stromstärken für eine hohe Licht-Intensität notwendig werden, stellt die Stromabhängigkeit der Effizienz dar. Bei kleinen Stromdichten, typischerweise um die 10 A/cm^2 , wird die höchste Effizienz erreicht und nimmt dann kontinuierlich mit der Stromdichte ab. Die Ursache für die als sogenannter Droop bekannt gewordene Eigenschaft wird heute kontrovers diskutiert und scheint noch nicht endgültig geklärt [14, 15]. Auger- [16] bzw. Phononen- oder Defekt-aktivierte Auger-Rekombination [17] werden neben Ladungsträger-Verlust [18] als mögliche Ursachen genannt. Praktisch hat sich gezeigt, dass sowohl durch eine Reduzierung der Stromdichte in einer Doppel-Hetero-Struktur [19] oder mit homogen gepumpten Mehrfach-QWs (engl.: multi quantum wells, MQWs) [17, 20] als auch durch Reduktion von Polarisations-Einflüssen [21] eine Verbesserung des Droop-Verhaltens erzielt werden kann. Unter Berücksichtigung dieser

Tatsachen erscheinen weniger polare Kristall-Orientierungen auch für dieses Problem vorteilhaft.

Parallel zu den Untersuchungen in dieser Arbeit entstanden intensive weltweite Forschungsaktivitäten mit Bezug auf nicht- und semipolare Gruppe III-Nitride [22, 23]. Zunächst wurden hauptsächlich Schichten untersucht, die auf Fremdsubstraten abgeschieden werden können, wie beispielsweise a-GaN auf r-Saphir. Trotz des reduzierten piezoelektrischen Feldes und des Einsatzes von Defekt-reduzierenden Maßnahmen konnte jedoch nur eine vergleichsweise zurückhaltende Ausgangsleistung im Bauelement demonstriert werden [24]. Der Grund ist in der hohen Anzahl an Defekten und Stapelfehlern zu finden, was auch heute eine anhaltende Problematik darstellt. Alternativ wurden deshalb nicht-/semipolare Probenstücke präpariert, die durch geschicktes Sägen aus einem in c-Richtung gewachsenen GaN-Substrat gewonnen werden können [25]. Aufgrund der hohen materiellen Güte konnten auf diesen Substraten die bisher besten Bauelement-Resultate erzielt werden [23]. Doch der hohe Preis und die stark limitierte Proben-Größe stellen bisher ein Hindernis für die kommerzielle Nutzung dar [26].

In dieser Arbeit wird deshalb ein anderer Weg gewählt, weniger polares GaN in hoher Materialqualität auf großflächigen Substraten abzuscheiden. Durch selektives Wachstum werden dreidimensionale GaN-Strukturen erzeugt, deren Seitenflächen semipolare Kristall-Orientierungen aufweisen. Auf diese Facetten kann anschließend eine vollständige LED-Schichtstruktur abgeschieden und deren Eigenschaften analysiert werden. Dass die Methodik geeignet ist, hochqualitative semipolare GaInN/GaN-Schichten auf konventioneller Substrat-Größe zu realisieren, wird intensiv diskutiert und durch verschiedene strukturelle und optische Messmethoden belegt. Es zeigt sich, dass die strukturierte 3D-Oberfläche erheblichen Einfluss auf Komposition und Schichtdicke von darauf abgeschiedenen Filmen, wie beispielsweise eines GaInN-QW, hat. Örtlich hochauflösende Untersuchungsmethoden helfen, ein Modell für die Wachstums-Charakteristik zu finden.

Bezüglich der Gliederung dieser Arbeit erhält der Leser zunächst eine Einführung zu grundlegenden Eigenschaften von Gruppe III-Nitriden und den daraus resultierenden Konsequenzen auf die optischen Eigenschaften von GaN-basierten, Licht emittierenden Bauelementen. Es folgt ein Kapitel über die Herstellungsverfahren, in dem epitaktische Wachstumsmethoden vorgestellt und mögliche Substrat-Typen diskutiert werden, die insbesondere auch die Möglichkeit bieten, nicht- und semipolare Schichten zu realisieren. Es wird auf die Schwierigkeiten des GaInN-Wachstums eingegangen und es werden Probleme bei der Dotierung behandelt. Anschließend folgt eine detaillierte Dis-

1 Einleitung

kussion über das selektive Wachstum, wobei zunächst auf die historische Entwicklung bezüglich der Defektreduktion eingegangen wird, bevor intensiv die Ergebnisse zum 3D-Wachstum von hochqualitativem GaN erörtert werden. Daran anknüpfend werden strukturelle sowie optische Eigenschaften von semipolaren GaInN-Quantenfilmen behandelt, die auf den 3D-Strukturen abgeschieden wurden. In diesem Zusammenhang wird versucht zu klären, inwiefern die Reduktion des piezoelektrischen Feldes und die erzielbare Material-Qualität Vorteile gegenüber konventionellen Techniken bieten. Schließlich werden die gefundenen Erkenntnisse in LED-Teststrukturen erprobt und deren Kenndaten näher vorgestellt.

2 Was ist GaN? - Grundlagen zu Gruppe III-Nitriden

Im ersten Kapitel soll der Leser darauf vorbereitet werden, warum es in einer konventionellen GaInN-LED zu einer örtlichen Trennung von Elektronen- und Löcher-Wellenfunktion im Quantenfilm kommt, wodurch die strahlende Rekombinations-Wahrscheinlichkeit beeinträchtigt wird. Dazu wird die Kristall- und Bandstruktur von Gruppe III-Nitriden vorgestellt und die Polarisations-Eigenschaften werden diskutiert. Es zeigt sich, dass nicht- und semipolare Kristall-Orientierungen ein reduziertes internes Feld aufweisen, was zu einer Verbesserung der Effizienz in einer Leuchtdiode führen sollte.

2.1 Kristallstruktur

Die stabilste Kristallstruktur von Gruppe III-Nitriden ist die hexagonale Wurtzit-Struktur. Sie wird bei Gruppe III-Nitriden auch α -Phase genannt. Daneben existiert die weniger stabile β -Phase, bei der sich die Atome in einer Zinkblende-Kristallstruktur anordnen. Auf diese wird aber nur indirekt bei der Beschreibung von kubischen Stapelfehlern eingegangen.

Für die hexagonale Grundstruktur des Wurtzit-Typs ist eine Beschreibung des Raumgitters mit vier Indizes ($hkil$) sinnvoll, mit $i = -(h + k)$. Die Basisvektoren a_1 , a_2 und a_3 haben dabei jeweils einen Winkel von 120° zueinander und stehen alle senkrecht zum vierten Basisvektor a_4 , der in die sogenannte c-Richtung zeigt.

Jede beliebige Kristallebene ist somit durch die vier Millerschen Indizes eindeutig definiert. Exemplarisch sind die in dieser Arbeit wichtigsten Ebenen in Abbildung 2.1 dargestellt. Dies sind die polare (0001)-Ebene, auch c-Ebene genannt, die nicht-polaren $\{1\bar{1}00\}$ - oder m-Ebenen und $\{11\bar{2}0\}$ - oder a-Ebenen und die semipolaren $\{1\bar{1}01\}$ und $\{11\bar{2}2\}$ -Ebenen. Über die Größe einer Einheitszelle bzw. den Abstand zweier Atome des selben Typs in einer Einheitszelle gibt die Gitterkonstante Auskunft. Die Größe

2 Grundlagen zu Gruppe III-Nitriden

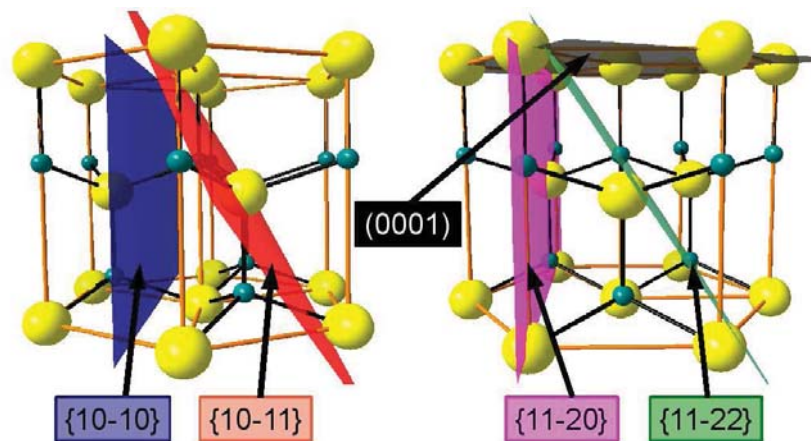


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung ausgewählter nicht- und semipolarer Ebenen innerhalb der Wurtzit-Struktur. Zu beachten gilt, dass die zwei Hexagone zur besseren Darstellung um 30° zueinander verdreht abgebildet sind.

der Gitterkonstanten für die Gruppe III-Nitride ist in Tabelle 2.1 aufgeführt. Die Gitterkonstante in der Basalebene wird dabei typischerweise mit a bezeichnet, die dazu senkrechte mit c . Das Verhältnis der Konstanten c/a beträgt für die ideale Wurtzit-Struktur $\sqrt{8/3} = 1,633$ und steht bei Abweichung vom Idealfall in Zusammenhang mit Polarisations-Eigenschaften, wie in Abschnitt 2.6 gezeigt wird.

Die Metall- und Stickstoffatome bilden in der Kristallstruktur des Wurtzit-Typs jeweils eine hexagonal dichteste Kugelpackung. Dabei sind die beiden Teilgitter entlang der $[0001]$ -Richtung so verschoben, dass gegenseitig die Tetraederlücken besetzt werden, wie in Darstellung 2.2 zu sehen ist. Dabei befindet sich die jeweils übernächste Wachstumsschicht wieder am gleichen Gitterplatz, was einer A-B-A-B-Folge entspricht. Man erhält eine Oberfläche, die entweder nur von Metall- oder von Stickstoff-Atomen terminiert ist. Hiervon zu unterscheiden ist die Polarität des Kristalls. Sie beschreibt die Abfolge der Bindungen und wirkt sich daher auf die Polarisation des Kristalls aus (siehe Abschn. 2.6).

	Gitterkonstanten		Verhältnis c/a
	a [Å]	c [Å]	
AlN	3.112	4.982	1.601
GaN	3.189	5.185	1.626
InN	3.545	5.703	1.651

Tabelle 2.1: Gitterkonstanten der Gruppe III-Nitride [27].

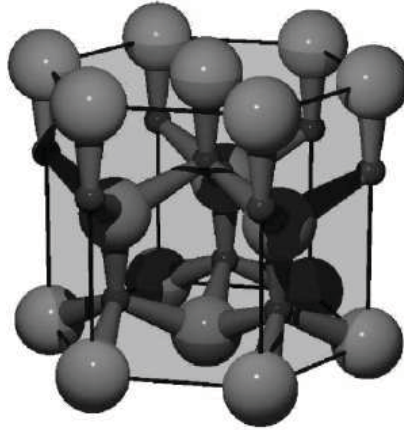


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung der Einheitszelle der hexagonalen Wurtzit-Struktur.

Desweiteren weisen die Stickstoff-Atome im GaN-Kristall eine deutlich größere Elektronegativität als die Gallium-Atome auf, was zur erhöhten Aufenthalts-Wahrscheinlichkeit der Elektronen in der Nähe des Stickstoffs führt. Der aus dieser Tatsache resultierende hohe ionische Bindungsanteil spiegelt sich in kleinen Bindungslängen und großen Bindungsenergien wider. Den erwünschten Eigenschaften wie der hohen mechanischen Härte und der thermischen Stabilität stehen allerdings unvorteilhafte elektronische Eigenschaften entgegen. Die Folgen dieser starken Polarität und schließlich die Motivation dieser Arbeit, durch das Wachstum auf weniger polaren Kristallflächen die nachteiligen Einflüsse zu reduzieren, werden in Abschnitt 2.6 geklärt.

2.2 Bandstruktur

Zur Beschreibung der optoelektronischen Eigenschaften eines Halbleiters kommt dem Energieband-Modell eine besondere Rolle zu. Der linke Teil von Abbildung 2.3 zeigt die nach der Pseudopotential-Methode berechnete Bandstruktur von GaN innerhalb der ersten Brillouin-Zone [30]. Als Brillouin-Zone wird, analog zur primitiven Wigner-Seitz-Zelle im realen Gitter, eine Elementarzelle mit nur einem Gitterpunkt im Zentrum im reziproken Gitter bezeichnet.

Dabei wird die Energiedifferenz zwischen dem untersten Leitungsbandzustand und dem obersten Valenzbandzustand als Energielücke E_g (engl. *energy gap*) bezeichnet. Die Größe der Bandlücke E_g ist eine der wichtigsten Kenngrößen in der Optoelektronik,

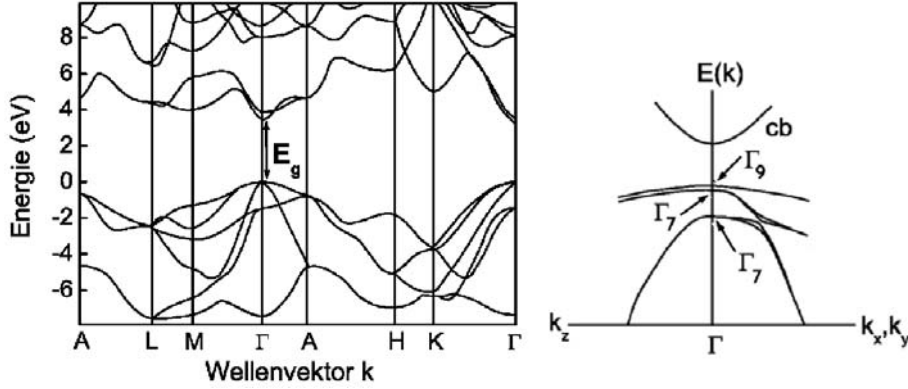


Abbildung 2.3: Bandstruktur von GaN berechnet nach der Pseudopotential-Methode, rechts in der Nähe des Γ -Punktes [28]. Man erkennt die Aufspaltung des Valenzbandes aufgrund der Unsymmetrie der Wurtzit-Struktur [29].

da sie über

$$E_g = \frac{h c_0}{\lambda} \quad (2.1)$$

direkt mit der Wellenlänge der elektromagnetischen Strahlung im Vakuum λ verknüpft ist. Dabei sind h das Plancksche Wirkungsquantum und c_0 die Vakuum-Lichtgeschwindigkeit. Für reines GaN wurde die Bandlücke bei 300 K zu rund 3.44 eV bestimmt [27] und entspricht damit einer Wellenlänge von 361 nm.

Die elektrischen Eigenschaften von Halbleitern werden hauptsächlich durch Elektronen in der Nähe des Leitungsband-Minimums und des Valenzband-Maximums bestimmt, weshalb es meist ausreichend ist, den Bandverlauf in diesen Extrema zu betrachten. Auf der rechten Seite von Abbildung 2.3 ist der schematische Bandverlauf in der Nähe des Γ -Punktes zu sehen. Während das Leitungsband sehr gut durch eine parabolische Dispersionsrelation angegeben werden kann, kommt es sowohl bei der kubischen Kristallstruktur als auch bei der hexagonalen zu einer Aufspaltung der Valenzbänder. Die Aufspaltung erfolgt bei der kubischen Phase in 2 Subbänder, Schwerloch- (heavy hole, HH) und Leichtlochband (light hole, LH), in der hexagonalen Phase zu insgesamt 3 Subbändern. Ursachen sind die bei beiden Modifikationen vorhandene Spin-Bahn-Kopplung und bei der hexagonalen Phase zudem die Kristallfeld-Aufspaltung (Kristalllochband (crystal hole, CH)). Desweiteren erkennt man eine Abhängigkeit der Bandstruktur von der Raumrichtung (k_x, k_y, k_z) , was an der geringen Symmetrie der Wurtzit-Struktur liegt. Die Indizes x, y beschreiben hierbei Richtungen in der c-Ebene, z ist gleich zu setzen mit der c-Richtung.