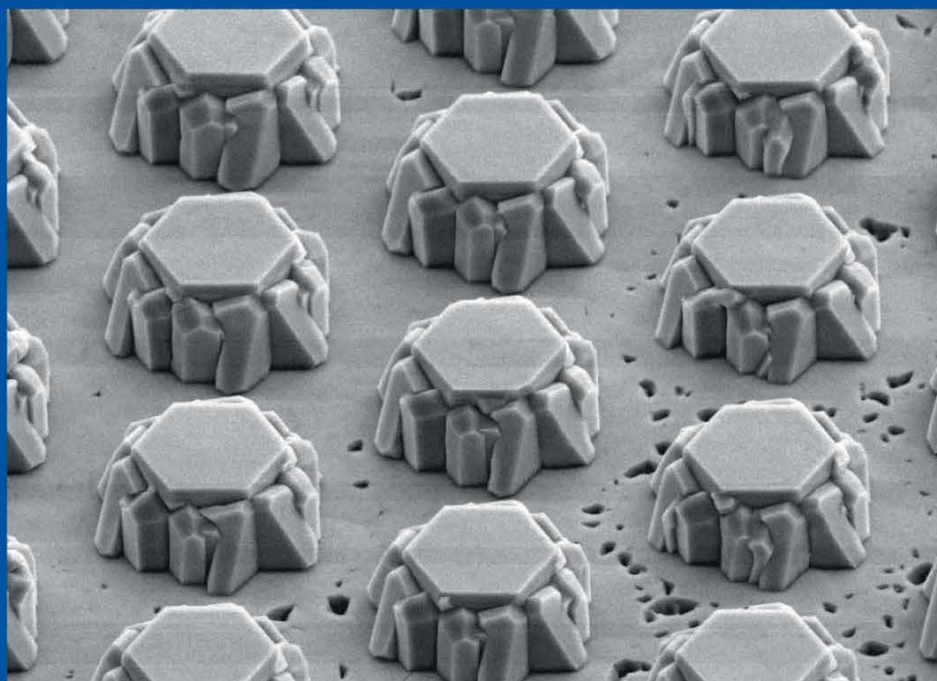


Forschungsberichte aus dem
Ferdinand-Braun-Institut,
Leibniz-Institut
für Höchstfrequenztechnik

Hydrid-Gasphasenepitaxie zur Herstellung von Aluminiumgalliumnitrid









aus der Reihe:

Innovationen mit Mikrowellen und Licht

**Forschungsberichte aus dem Ferdinand-Braun-Institut,
Leibniz-Institut für Höchstfrequenztechnik**

Band 33

Sylvia Hagedorn

Hybrid-Gasphasenepitaxie zur Herstellung von Aluminiumgalliumnitrid

Herausgeber: Prof. Dr. Günther Tränkle, Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Heinrich

Ferdinand-Braun-Institut
Leibniz-Institut
für Höchstfrequenztechnik (FBH)
Gustav-Kirchhoff-Straße 4
12489 Berlin

Tel. +49.30.6392-2600
Fax +49.30.6392-2602

E-Mail fbh@fbh-berlin.de
Web www.fbh-berlin.de



Innovationen mit Mikrowellen und Licht

Forschungsberichte aus dem Ferdinand-Braun-Institut,
Leibniz-Institut für Höchstfrequenztechnik

Vorwort der Herausgeber

Neue Ideen, Entwicklungen und Konzepte aus der Forschung sind die Basis von Fortschritt und Wettbewerbsfähigkeit. Als Inventionen erweitern sie den Stand des Wissens und der Technik, als innovative Produkte und Dienstleistungen schließlich findet ein Teil von ihnen Eingang in unsere Alltagswelt.

In diesem Sinne dokumentiert die Reihe „*Forschungsberichte aus dem Ferdinand-Braun-Institut, Leibniz-Institut für Höchstfrequenztechnik*“ aktuelle Forschungen und Entwicklungen aus dem Institut. Wir möchten Ihnen diese Ergebnisse zugänglich machen und zur weiteren Diskussion anregen – nicht zuletzt, damit möglichst viele Entwicklungen zu einem Teil unseres Alltags werden.

Im vorliegenden Beitrag beschreibt die Autorin die Herstellung dicker AlGaIn-Schichten, die als Unterlage für LEDs dienen, die im UV-B-Spektralbereich um 300 nm emittieren. Mittels Hydrid-Gasphasenepitaxie konnten dicke AlGaIn-Schichten im gesamten Zusammensetzungsbereich realisiert werden. Um Risse und fehlorientierte Kristalliten zu vermeiden, waren strukturierte Unterlagen notwendig. Die Arbeit zeigt einen Weg zu im UV-B-Bereich transparenten und leitfähigen Substraten mit geringen Versetzungsdichten. Solche Substrate versprechen effizientere LEDs, als sie heute mit Heteroepitaxie auf Fremdsubstraten möglich sind.

Eine anregende Lektüre wünschen

Prof. Dr. Günther Tränkle
Direktor

Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Heinrich
stellvertretender Direktor

Das Ferdinand-Braun-Institut

Das Ferdinand-Braun-Institut erforscht elektronische und optische Komponenten, Module und Systeme auf der Basis von Verbindungshalbleitern. Diese sind Schlüsselbausteine für Innovationen in den gesellschaftlichen Bedarfsfeldern Kommunikation, Energie, Gesundheit und Mobilität. Leistungsstarke und hochbrillante Diodenlaser, UV-Leuchtdioden und hybride Lasersysteme entwickelt das Institut vom sichtbaren bis zum ultravioletten Spektralbereich. Die Anwendungsfelder reichen von der Medizintechnik, Präzisionsmesstechnik und Sensorik bis hin zur optischen Satellitenkommunikation. In der Mikrowellentechnik realisiert das FBH hocheffiziente, multifunktionale Verstärker und Schaltungen, unter anderem für energieeffiziente Mobilfunksysteme und Komponenten zur Erhöhung der Kfz-Fahrsicherheit. Kompakte atmosphärische Mikrowellenplasmaquellen mit Niederspannungsversorgung entwickelt es für medizinische Anwendungen, etwa zur Behandlung von Hauterkrankungen.

Das FBH ist ein international anerkanntes Zentrum für III/V-Verbindungshalbleiter mit allen Kompetenzen: vom Entwurf, über die Fertigung bis hin zur Charakterisierung von Bauelementen.

Seine Forschungsergebnisse setzt das FBH in enger Zusammenarbeit mit der Industrie um und transferiert innovative Produktideen und Technologien erfolgreich durch Spin-offs. In strategischen Partnerschaften mit der Industrie sichert es in der Höchstfrequenztechnik die technologische Kompetenz Deutschlands.



HYDRID-GASPHASENEPITAXIE ZUR HERSTELLUNG VON ALUMINIUMGALLIUMNITRID

VORGELEGT VON
DIPL.-PHYS.
SYLVIA HAGEDORN
GEB. IN POTSDAM

VON DER FAKULTÄT II - MATHEMATIK UND NATURWISSENSCHAFTEN
DER TECHNISCHEN UNIVERSITÄT BERLIN
ZUR ERLANGUNG DES AKADEMISCHEN GRADES

DOKTORIN DER NATURWISSENSCHAFTEN
- DR. RER. NAT. -

GENEHMIGTE DISSERTATION

PROMOTIONS AUSSCHUSS:

VORSITZENDE	PROF. DR. U. WOGGON
GUTACHTER	PROF. DR. M. KNEISSL
GUTACHTER	PROF. DR. F. SCHOLZ
GUTACHTER	PROF. DR. M. WEYERS

TAG DER WISSENSCHAFTLICHEN AUSSPRACHE: 14. JANUAR 2015

BERLIN 2015



Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

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

1. Aufl. - Göttingen: Cuvillier, 2015

Zugl.: (TU) Berlin, Univ., Diss., 2015

© CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2015

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, 2015

Gedruckt auf umweltfreundlichem, säurefreiem Papier aus nachhaltiger Forstwirtschaft.

ISBN 978-3-95404-985-1

eISBN 978-3-7369-4985-0



Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Aufgabenstellung	5
2	Eigenschaften und Charakterisierung von $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	8
2.1	Kristallstruktur	8
2.2	Epitaxiegesetze für das Wachstum auf Saphir	12
2.3	Versetzungen im c-planar orientierten AlGaIn	14
2.4	Methoden zur Materialcharakterisierung	15
2.4.1	Röntgendiffraktometrie	16
2.4.2	Rasterelektronenmikroskopie	20
2.4.3	Transmissionselektronenmikroskopie	21
3	Theoretische und experimentelle Grundlagen der Hydrid-Gasphasenepitaxie	25
3.1	Ausgangssituation: GaN-HVPE-Reaktor	25
3.2	Literaturrecherche zur AlGaIn-HVPE	27
3.3	Aufbau des AlGaIn HVPE-Reaktors	29
3.4	Abscheidung von AlGaIn mit Duschaufsatz und quasi-thermodynamische Beschreibung	30
3.5	Optimierung der Reaktorgeometrie	32
3.5.1	Anwendbarkeit der quasi-thermodynamischen Beschreibung auf das Gasleitkammersystem	34
3.5.2	Zusammensetzungshomogenität und Substratrotation	40
3.6	Eigenschaften der Al-Quelle	42
4	Planares Wachstum von $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ auf Saphir	45
4.1	Morphologiestörungen beim planaren Wachstum	48
4.2	Substratkonditionierung mit AlCl_3	50
4.3	Nitridierung der Saphiroberfläche	51
4.4	Einfluss eines AlN-Puffers	56
4.5	Einfluss von Wasserstoff im Trägergas	61
5	Epitaktisch laterales Überwachsen	65
5.1	Überwachsen WSiN-maskierter Substrate	67
5.2	Herstellung strukturierter Substrate	68
5.3	Überwachsen von Grabenstrukturen	70



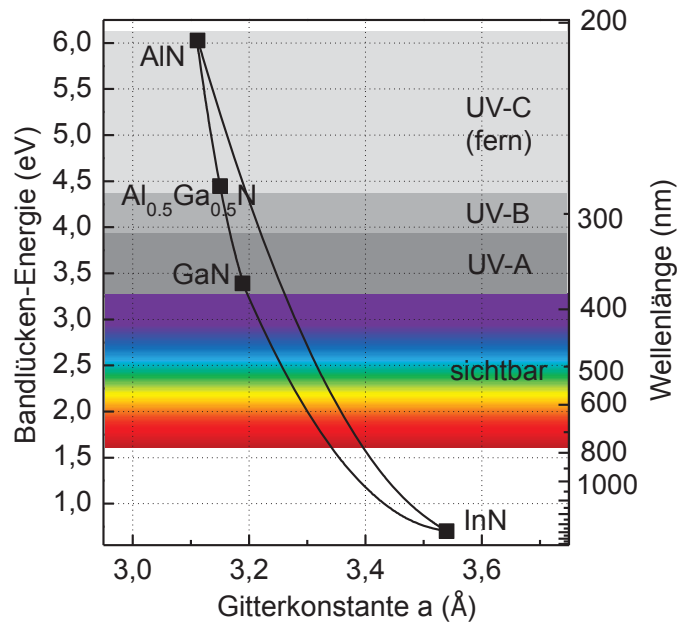
5.3.1	Gräben entlang $[1-100]_{\text{Saphir}}$	71
5.3.2	Gräben entlang $[11-20]_{\text{Saphir}}$	83
6	Parameterstudien zum Wachstum von c-planarem AlGa_N auf Grabenstrukturen	86
6.1	Einfluss eines AlN-Puffers	88
6.2	Einfluss des Gesamtdrucks	89
6.3	Einfluss des V/III-Verhältnisses	92
6.4	Einfluss des Substratfehlschnitts	94
6.5	Variation der Wachstumstemperatur	102
7	Materialeigenschaften von c-planarem ELO-Al_xGa_{1-x}N	106
7.1	Strukturelle Eigenschaften	106
7.2	Optische Eigenschaften	108
7.3	Bestimmung der Versetzungsdichte	111
7.4	Erhöhung der AlGa _N -Schichtdicke auf grabenstrukturierten PSS	116
8	Variation der Substratstruktur für ELO von Al_xGa_{1-x}N	120
8.1	ELO von AlGa _N auf Saphir mit Säulen- und Wabenstruktur	120
8.2	AlGa _N -Wachstum auf verschieden orientierten Saphirfacetten	124
9	Zusammenfassung	134
	Abbildungsverzeichnis	137
	Tabellenverzeichnis	141
A	Tabellierung verwendeter Materialparameter	143
B	Gravimetrische Bestimmung der Wachstumsrate	145
C	Bestimmung des Al-Gehalts	146
D	Berechnung der Gleichgewichtspartialdrücke in der Substratzone	147
	Liste eigener Veröffentlichungen	153
	Literaturverzeichnis	155

1 Einleitung und Aufgabenstellung

Seit 1993 durch Nakamura et al.¹ der Prototyp einer hell leuchtenden blauen lichtemittierenden Diode (LED) auf Galliumnitridbasis demonstriert wurde, ist weltweit das Interesse am Wachstum von Galliumnitrid (GaN) und verwandten Nitridhalbleitern wie Aluminiumnitrid (AlN) und Indiumnitrid (InN) und deren Legierungen rapide gestiegen. Die graphische Darstellung in Abb. 1.1 zeigt die elektronischen Bandlückenenergien dieser kristallinen Halbleitermaterialien aufgetragen über der Gitterkonstanten.^{2–4} Der Wellenlängenbereich elektromagnetischer Strahlung, in dem aufgrund der Bandlückenenergie eine Wechselwirkung mit den Nitriden stattfindet, zeigt, dass mittels AlInGaN-basierten opto-elektronischen Bauelementen der gesamte Anwendungsbereich vom sichtbaren bis zum ultravioletten (UV) Spektralbereich abgedeckt werden kann. Bauelemente wie AlGaN-basierte LEDs, die Licht im UV Spektralbereich emittieren, können die gegenüber LEDs vergleichsweise großen, umweltschädlichen Quecksilberdampflampen in Bereichen der Wasseresinfektion, der Lackhärtung und in der medizinischen Therapie zur Behandlung von Hauterkrankungen ersetzen.

Zur Erzeugung der aktiven Bereiche optoelektronischer Bauelemente werden einige Nanometer dicke kristalline Nitridschichten gleichmäßig geordnet (epitaktisch) auf einem Substrat abgeschieden. Die Rolle des Substrats ist entscheidend, denn es gibt die Ordnung des darauf abgeschiedenen Materials vor und hat somit direkten Einfluss auf die Entstehung von Materialdefekten, die die Effizienz der Bauelemente drastisch verringern können.⁵ AlN-, GaN- oder AlGaN sind den aktiven Bereichen der optoelektronischen Bauelemente von der Kristallstruktur und den thermischen Ausdehnungskoeffizienten her am ähnlichsten, und somit die Substratmaterialien, die die Ordnung für die aufzuwachsenden Schichten am besten vorgeben. Diese Art des Wachstums wird als homoepitaktisch bezeichnet, da im Idealfall keine Gitterfehlانpassung gegenüber dem aufgewachsenen Material auftritt. In der Realität sind AlN- und GaN-Substrate aufgrund der aufwendigen Herstellungsprozesse teuer und freistehende AlGaN-Substrate momentan nicht verfügbar. Übliche Züchtungsprozesse, wie z.B. das für Galliumarsenid verwendete Ziehen aus der Schmelze waren bisher aufgrund der hohen benötigten Drücke und Temperaturen, um Stickstoff in den Metallschmelzen zu lösen, für ausreichend große GaN- und AlN-Einkristalle nicht erfolgreich.⁶ Ein alternatives Verfahren zur Herstellung von GaN-Kristallen ist das ammonothermale Wachstum unter Verwendung von überkritischem Ammoniak. Aufgrund des Mangels an geeigneten Substratmaterialien für nitridbasierte Halbleiterbauelemente wurde in den letzten 10 Jahren die Entwicklung dieses Verfahrens vorangetrieben, und es konnten GaN-Substrate von bis zu 2 Zoll Durchmesser bei Wachstumsraten von bis zu $10 \mu\text{m/h}$ ⁷ gewachsen werden. Die Herstellung von AlN-Volumenkristallen kann durch Sublimation von AlN-Pulver und Rekristallisation auf einem AlN-Keim erfolgen. Die so gewachsenen, relativ kleinen AlN-Substrate von bis zu 0,5 Zoll Durchmesser weisen jedoch Absorptionsbanden im Wellenlängenbereich von UV-B-Strahlung

Abbildung 1.1: Energie der elektronischen Bandlücke der Halbleiter AlN, GaN, InN und deren Legierungen in Abhängigkeit von der a-Gitterkonstante.²⁻⁴ UV-A-, UV-B-, UV-C und sichtbarer Spektralbereich farblich gekennzeichnet.



auf.⁸ Durch das Fehlen geeigneter Verfahren zur preisgünstigen Herstellung großer GaN- und AlN-Einkristalle rückte neben dem Ammonothermal- und Sublimationsverfahren auch das epitaktische Wachstum dicker GaN- und AlN-Schichten auf Fremdsubstraten zur Herstellung von freistehenden Substraten (Fremdsubstrat abgelöst) bzw. zur Herstellung von Pseudosubstraten (GaN bzw. AlN auf Fremdsubstrat) in den Fokus wissenschaftlicher Forschung. Aufgrund der hohen erreichbaren Wachstumsraten ist die Hydrid-Gasphasenepitaxie (HVPE) vielfach die Methode der Wahl zur Abscheidung dicker GaN- und AlN-Schichten in der Substratherstellung. Es wurde gezeigt, dass mit zunehmender Schichtdicke die durch das Aufwachsen auf einem Fremdsubstrat erzeugte Defektdichte im GaN verringert wird.⁹ Die Abscheidung einkristalliner Schichten mit Wachstumsraten von einigen 100 $\mu\text{m/h}$ für GaN¹⁰ und 50 $\mu\text{m/h}$ für AlN¹¹ wurden für die Herstellung freistehender Substrate demonstriert. Da die Gitterfehlانpassung beim Wachstum von $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ im mittleren Kompositionsbereich ($x \approx 0,5$) auf GaN und AlN 1,2% beträgt, wächst das AlGaN-Kristallgitter auf diesen Substratmaterialien verspannt auf und relaxiert ab einer kritischen Schichtdicke über die Bildung von Kristalldefekten. Daher ist beispielsweise die Realisierung eines defektarmen AlGaN-Substrats im mittleren Kompositionsbereich für die Verwendung als gitterangepasstes UV-B LED Substrat sinnvoll. Da mittels HVPE das Wachstum der binären Komponenten GaN und AlN bei hohen Wachstumsraten erfolgen kann, ist diese Wachstumsmethode für die Abscheidung dicker AlGaN-Schichten als Pseudosubstrat oder freistehendes Substrat von großem Interesse. Dies zeigt sich nicht zuletzt durch die aktuellen Forschungsaktivitäten auf dem Gebiet der AlGaN HVPE des Substratherstellers „Kyma“.¹²

Die vorliegende Doktorarbeit hat das Wachstum von AlGaN mittels HVPE zum Thema. Die Arbeit ist in zwei Hauptteile gegliedert. Der erste Aufgabenteil bestand darin, einen vorhandenen Aixtron GaN HVPE-Reaktor an das HVPE-Wachstum von AlGaN anzupassen, so dass die Abscheidung möglichst dicker AlGaN-Schichten realisiert wird. Im Zusammenhang mit

der Reaktorkonfiguration sollte des Weiteren überprüft werden, ob das Kristallwachstum im Rahmen eines quasi-thermodynamischen Modells beschrieben werden kann. Der zweite Teil dieser Arbeit befasst sich mit der Abscheidung von AlGa_N-Schichten unter Verwendung der zuvor festgelegten Konfiguration des HVPE-Reaktors, insbesondere mit der Optimierung der AlGa_N-Materialqualität in Hinblick auf eine potentielle Verwendung des Materials als Substrat für die Herstellung von UV-LEDs.

Im folgenden Kapitel wird zunächst kurz ausgeführt werden, welche für diese Doktorarbeit relevanten Eigenschaften AlGa_N und der als Substrat verwendete Saphir aufweisen (Kapitel 2). Es folgt die Beschreibung der verwendeten Verfahren zur Materialcharakterisierung, um beispielsweise den Al-Gehalt zu ermitteln und die strukturellen Eigenschaften des abgeschiedenen Materials zu bestimmen. Die Anpassung des HVPE-Reaktors an die teilweise dem Literaturstudium entnommenen Wachstumsbedingungen und die damit verknüpfte quasi-thermodynamische Beschreibung des AlGa_N-Wachstums folgt in Kapitel 3. Dort wird auch die Verwendung der endgültigen Reaktorkonfiguration motiviert, die zur Abscheidung der in den nachfolgenden Kapiteln untersuchten AlGa_N-Schichten verwendet wurde. Der Einfluss von Wachstumsparametern und der Einfluss der Substratkonditionierung auf die Qualität der abgeschiedenen AlGa_N-Schichten wurden untersucht. Es wurde die Notwendigkeit eines Prozesses zum Verspannungsabbau der heteroepitaktisch gewachsenen Schichten gefunden (siehe Kapitel 4) und die Anwendung des epitaktisch lateralen Überwachsens zur Abscheidung dicker AlGa_N-Schichten in diesem Zusammenhang untersucht (siehe Kapitel 5). Die Wachstumsexperimente zur Optimierung der Materialqualität der abgeschiedenen AlGa_N-Schichten mit Fokus auf Wachstumsparameter wie das V/III-Verhältniss der Ausgangsstoffe, Gesamtdruck und Temperatur, sowie Substrateigenschaften wie Fehlschnitt und die Strukturierung der Substratoberfläche sind in Kapitel 6-8 dargestellt.

2 Eigenschaften und Charakterisierung von $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

Dieses Kapitel beschreibt die Materialeigenschaften von $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ und dem als Substratmaterial gewählten Saphir ($\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$). Des Weiteren werden die in dieser Doktorarbeit verwendeten Methoden zur Materialcharakterisierung beschrieben.

An dieser Stelle soll kurz die Wahl von Saphir als Substratmaterial motiviert werden. Typische Substratmaterialien für die Abscheidung von AlGa_N sind neben Saphir auch 6H-SiC, Si, GaN- und AlN-Substrate. Von diesen Substraten weisen lediglich Saphir und AlN die für die Transmission von UV-Strahlung nötige Transparenz auf und sind so in Hinblick auf die Bereitstellung eines Pseudosubstrats für vertikal emittierende UV-LEDs die nahe liegenden Kandidaten. AlN-Substrate wären aufgrund der geringen Unterschiede in Materialeigenschaften wie Gitterkonstante und thermischen Ausdehnungskoeffizienten eigentlich das ideale Substrat für das Wachstum von AlGa_N. Aber mittels HVPE gewachsene freistehende AlN-Substrate und durch Sublimation gewachsenes AlN-Volumenmaterial sind im Vergleich zu Saphir teuer und kommerziell kaum verfügbar. Daher wurde der Fokus dieser Doktorarbeit ausschließlich auf Saphir als Substratmaterial für die HVPE-AlGa_N-Abscheidung ausgerichtet.

2.1 Kristallstruktur

Sowohl AlGa_N als auch der als Substrat verwendete Saphir ($\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$) können der hexagonalen Kristallfamilie zugeordnet werden. Abb. 2.1 zeigt schematisch die Gitterzelle in Form eines hexagonalen Prismas. Die Einheitszelle des Gitters hat die Form des in Abb. 2.1 rot gekennzeichneten Parallelepipeds und wird durch die drei Basisvektoren $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ und $\vec{c}$ aufgespannt. Die Basisvektoren $\vec{a}_1$ und $\vec{a}_2$ liegen in der hexagonalen Basalebene und schließen einen Winkel von 120° ein. Der Basisvektor $\vec{c}$ steht senkrecht auf $\vec{a}_1$ und $\vec{a}_2$ und verläuft dabei entlang der Drehachse mit höchster Zähligkeit. Für den trigonalen Saphir ist diese Drehachse dreizählig ($\blacktriangle$). D.h. bei einer Drehung von 360° um die Drehachse wird der Saphirkristall drei Mal mit sich selbst zur Deckung gebracht. AlGa_N besitzt eine sechszählige Schraubenachse ($\blacklozenge$). D.h. bei einer Drehung von 360° um die in Abb. 2.1 gezeigte Drehachse und entsprechender Translation entlang $\vec{c}$ wird der AlGa_N Kristall sechs Mal mit sich selbst zur Deckung gebracht. Zur räumlichen Orientierung im hexagonalen und trigonalen Kristallsystem wird in dieser Arbeit die Bravais-Indizierung mit vier Indizes, der Konvention von Kleber et al.¹³ folgend, verwendet. Es wird dazu entsprechend Abb. 2.1 ein vierter, zu $\vec{a}_1$ und $\vec{a}_2$ gleichwertiger Basisvektor $\vec{a}_3$ eingeführt. Zur Darstellung von Flächen und Richtungen im Kristall werden die in Tabelle 2.1 aufgelisteten viergliedrigen Bravais-Indizes mit entsprechenden Klammern verwendet. Für die Darstellung von Flächen ergibt sich durch die Einführung von $\vec{a}_3$ ein zusätzlicher Index i .

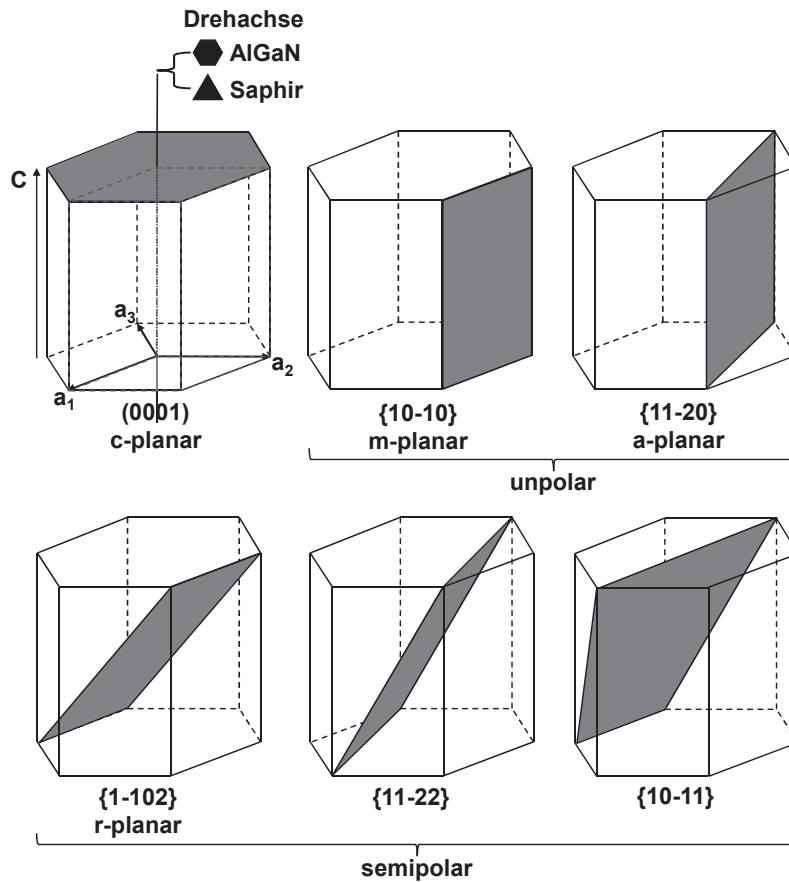


Abbildung 2.1: Bezeichnung von Kristallflächen und ihre Ausrichtung in der hexagonalen Gitterzelle der hexagonalen Kristallfamilie. Die durch $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ und $\vec{c}$ aufgespannte Einheitszelle des Kristallgitters ist rot gekennzeichnet. Die hexagonale Symmetrie des AlGaIn und die trigonale Symmetrie des Saphirs zeichnen sich durch die respektive sechszählige Schraubenachse und dreizählige Drehachse aus.

Notation	Bedeutung
$(hkil)$	Fläche
$[\hat{u}\hat{v}\hat{w}]$	Richtung
$\{hkil\}$	äquivalente Flächen
$\langle\hat{u}\hat{v}\hat{w}\rangle$	äquivalente Richtungen

Tabelle 2.1: Notation von Richtungen und Flächen mittels Bravais-Indizierung (Viererindizierung).

2 Eigenschaften und Charakterisierung von $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

Aufgrund der Symmetrie des Gitters erfüllt dieser die Bedingung:

$$i = -(h + k). \quad (2.1)$$

Zur Darstellung von Richtungen wird durch die Einführung von $\vec{a}_3$ ein zusätzlicher Index $\hat{i}$ so gewählt, dass dieser die Bedingung

$$\hat{i} = -(\hat{u} + \hat{v}) \quad (2.2)$$

erfüllt. Der große Vorteil der Viererindizierung gegenüber der Verwendung von drei Indizes ist, dass die Symmetrieeigenschaften eines trigonalen und hexagonalen Kristalls direkt aus der Indizierung ersichtlich sind. D.h. äquivalente Flächen und Richtungen lassen sich durch zyklische Permutation der jeweils ersten drei Flächen- bzw. Richtungs-Indizes beschreiben. Äquivalente Flächen und Richtungen werden wie in Tabelle 2.1 angegeben, zusammengefasst. Entsprechend der Konvention in der Fachliteratur erhalten einige dieser äquivalenten Flächen spezielle Bezeichnungen. Die durch zyklische Permutation der ersten drei Flächenindizes entstehenden, jeweils drei äquivalenten $\{10\cdot10\}_{\text{AlGa}\text{N}}$ - und $\{-1010\}_{\text{AlGa}\text{N}}$ -Flächen werden beispielsweise als m-planar orientierte Flächen bezeichnet. Abb. 2.1 zeigt exemplarisch die Lage verschiedener Flächen in der hexagonalen Gitterzelle mit entsprechender Indizierung und Bezeichnung.

Abb. 2.2 zeigt die hexagonale Gitterzelle von AlGa_N mit der Position der tetraedrisch gebundenen Ga- bzw. Al- und N-Atome. Die Richtung, in die der Basisvektor $\vec{c}$ zeigt, ist so definiert, dass dieser senkrecht auf der hexagonalen Basalebene steht und in Richtung der Bindung vom Ga-Atom bzw. Al-Atom zum N-Atom verläuft. Die Gitterkonstanten in c- und a-Richtung sowie weitere physikalische Größen sind im Anhang A Tabelle A.1 zusammengestellt. In dieser Arbeit erfolgte die Ermittlung der $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ -Gitterkonstanten aus den Gitterkonstanten der binären Komponenten GaN und AlN unter Verwendung der in Anhang A dargestellten Vegard'schen Formel A.1. Eine AlGa_N-Schicht, die entsprechend der Pfeile in Abb. 2.2 in $\vec{c}$ -Richtung gewachsen wurde, wird als Gruppe-III-polar bezeichnet, eine in $-\vec{c}$ -Richtung gewachsene Schicht entsprechend als N-polar. Beim Vergleich von Ga-polar gewachsenem und N-polar gewachsenem GaN findet man im N-polar gewachsenen Material eine höhere Dichte an Punktdefekten in Form von Verunreinigungen und Ga-Fehlstellen.¹⁴ Zudem weist das Ga-polare Wachstum eine höhere Wachstumsrate als das N-polare Wachstum auf.¹⁵ In Hinblick auf eine möglichst hohe Materialqualität und Wachstumsrate des AlGa_N wird daher Gruppe-III-polares Wachstum angestrebt.

Der reale AlGa_N-Kristall weist eine räumliche Abweichung von der idealen tetraedrischen Bindung auf. Bedingt durch das große Atomvolumen von Ga bzw. Al gegenüber N und die hohe Elektronegativität von N wird der ideale Kristall in der hexagonalen Basalebene gestreckt und in $\vec{c}$ -Richtung gestaucht. Eine spontane Polarisation P_{sp} des Materials entsteht mit Orientierung der Polarisation parallel zu $[0001]_{\text{AlGa}\text{N}}$. Daher werden AlGa_N-Kristallflächen mit Indizes $(000l)$ als polar, mit $(hki0)$ als unpolar und alle übrigen Flächen als semipolar bezeichnet.

Wie AlGa_N, gehört auch der in dieser Arbeit als Substratmaterial verwendete Saphir zur hexagonalen Kristallfamilie. Es ist jedoch zu beachten, dass der Saphirkristall im Gegensatz zur hexagonalen Symmetrie des AlGa_N-Kristalls nur eine trigonale Symmetrie aufweist. Deutlich wird dies auch aus der Darstellung der Lage der verschiedenen Netzebenen im Saphir-Kristall in Abb. 2.3.¹⁶ Daher sind beispielsweise, anders als im AlGa_N, die drei $\{1\cdot100\}_{\text{Saphir}}$ -Flächen nicht äquivalent zu den drei $\{-1100\}_{\text{Saphir}}$ -Flächen.

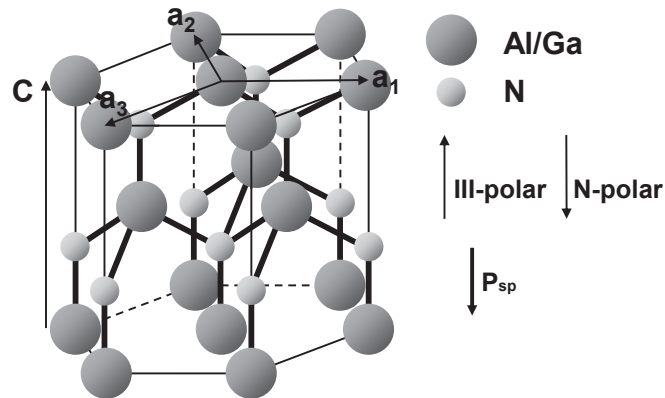


Abbildung 2.2: Schrägansicht der Struktur der hexagonalen Gitterzelle von AlGaIn. Die Lage und Richtung der vier Basisvektoren $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$, $\vec{a}_3$ und $\vec{c}$, sowie die positive bzw. negative Richtung von $\vec{c}$, die der III- bzw. N-Polarität entsprechen sind angegeben. Die spontane Polarisation erfolgt entlang P_{sp} .

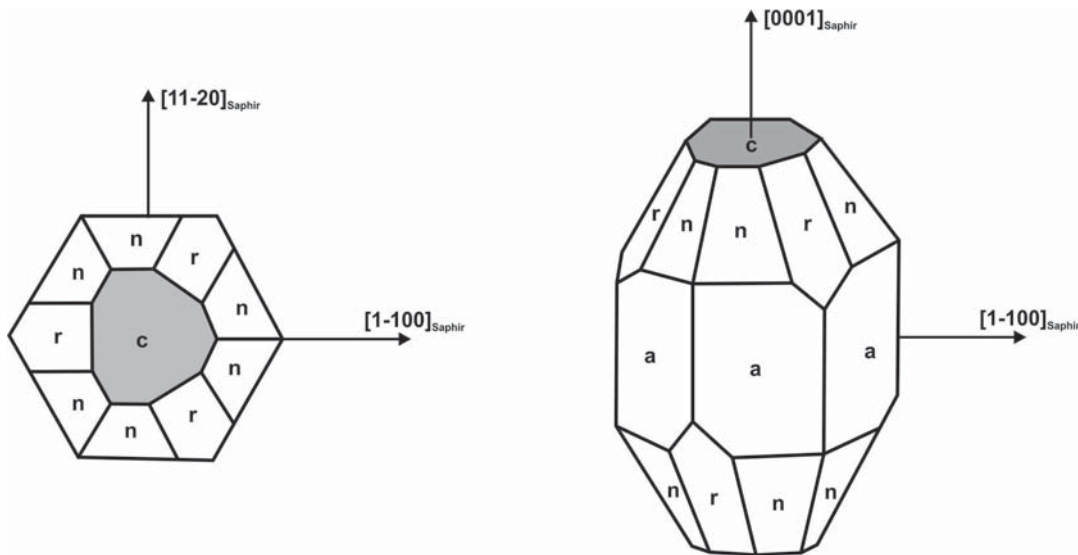


Abbildung 2.3: Lage der Facetten im Saphirkristall.^{16, 17}

2.2 Epitaxiegesetze für das Wachstum auf Saphir

C-planar orientierter Saphir ist eines der am häufigsten für die $\text{Al}(\text{Ga})\text{N}$ -Abscheidung verwendeten Substrate. C-planar orientiertes AlN bzw. GaN wächst typischer Weise um 90° gedreht um die sechszählige Schraubenachse auf c-planar orientiertem Saphir auf. Die sich daraus ergebende Epitaxiebeziehung für c-planares Wachstum zeigt Tabelle 2.2. An dieser Stelle sei angemerkt, dass von Krost et al.¹⁸ für $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ mit $x = 0,18$ bis $0,25$ auch c-planares Wachstum ohne Verdrehung gegenüber der Orientierung des c-planaren Saphirsubstrats beobachtet wurde. Die Gitterfehlانpassung f , die durch den Unterschied zwischen der effektiven a-Gitterkonstanten des Substrats $a_{\text{Saphir}}/\sqrt{3}$ und eines um 90° um die sechszählige Schraubenachse gedrehten AlGaN -Kristalls $a_{\text{Al}(\text{Ga})\text{N}}$ entsteht, ergibt sich aus

$$f = \frac{a_{\text{Saphir}}/\sqrt{3} - a_{\text{Al}(\text{Ga})\text{N}}}{a_{\text{Saphir}}/\sqrt{3}} \quad (2.3)$$

und beträgt 16% für GaN und 13% für AlN .

Im Verlauf dieser Arbeit wurden auch semi- und unpolar orientiertes AlGaN untersucht, das beispielsweise beim Wachstum auf strukturierten, c-planar orientierten Saphirsubstraten beobachtet wurde (Kapitel 5, Kapitel 6). Die entsprechend aus der Literatur bekannten Epitaxiegesetze zur Abscheidung von AlN und GaN wurden in Tabelle 2.2 zusammengefasst. Für das Wachstum auf Saphir lassen sich in der Literatur eine Vielzahl von Epitaxiegesetzen finden. Diese beschreiben, in welcher Ausrichtung ein Kristallsystem beim heterogenen epitaktischen Wachstum relativ zum Substrat abgeschieden wird.

Aufgrund des gestiegenen Interesses an semipolaren und unpolaren AlN - und GaN -Substraten erfolgten in den letzten Jahren eine Vielzahl von Untersuchungen zum Wachstum auf nicht c-planar orientierten Saphiroberflächen.

Beim epitaktischen Wachstum auf m-planar orientiertem Saphir beobachteten Stellmach et al.²¹ sowohl für AlN als auch für GaN das semipolare Wachstum von (11-22) planar orientiertem Material. Stellmach et al.³⁰ konnten dieses Epitaxiegesetz ebenfalls für AlGaN im mittleren Kompositionsbereich bestätigen. Die Gruppe fand auch, dass bei Verringerung des V/III-Verhältnisses während des Wachstums (1-103) und m-planar orientiertes AlN auf m-planar orientiertem Saphir abgeschieden wird.²² Für das HVPE-Wachstum von GaN auf m-planar orientiertem Saphir konnten Baker et al.²⁰ unter Verwendung eines Hochtemperatur-Nitridierungsschrittes vor dem Wachstum semipolares (1-103)-orientiertes GaN abscheiden. Armitage et al.²³ zeigten, dass mittels metallorganischer Gasphasenepitaxie (MOVPE) bei geeigneter Vorbehandlung des Substrats das Wachstum von m-planar orientiertem GaN auf m-planar orientiertem Saphir möglich ist.

Untersuchungen zum Wachstum von GaN auf a-planar orientiertem Saphir von Paskova et al.²⁶ ergaben für das HVPE- und MOVPE-Wachstum unterschiedliche Ausrichtungen der c-planar gewachsenen Schicht hinsichtlich der Drehung um die c-Achse. Dabei war für das HVPE-Wachstum $[11-20]_{\text{GaN}}$ parallel zu $[0001]_{\text{Saphir}}$ orientiert, während für das MOVPE-Wachstum $[1-100]_{\text{GaN}}$ eine Orientierung parallel zu $[0001]_{\text{Saphir}}$ zeigte. Als mögliche Ursache wurde die unterschiedliche Vorbehandlung der Saphiroberfläche vor dem Wachstum diskutiert. Paskova et al.²⁶ schlussfolgerten, dass zwischen Saphirsubstrat und GaN in der HVPE O-N-Bindungen



2.2 Epitaxiegesetze für das Wachstum auf Saphir

Saphir	(Al,Ga)N
(0001) c-planar	(0001) c-planar [11-20] _{Saphir} [1-100] _{(Al,Ga)N} , [1-100] _{Saphir} [-1-120] _{(Al,Ga)N} ¹⁹
(10-10) m-planar	(11-22) [0001] _{Saphir} [-1-123] _{(Al,Ga)N} , [1-210] _{Saphir} [1-100] _{(Al,Ga)N} ^{20,21} (1-103) [0001] _{Saphir} [1-210] _{(Al,Ga)N} , [1-210] _{Saphir} [30-3-2] _{(Al,Ga)N} ^{20,22} (1-100) m-planar [0001] _{Saphir} ⊥ [0001] _{(Al,Ga)N} ^{22,23}
(11-20) a-planar	(0001) c-planar [0001] _{Saphir} [-1100] _{(Al,Ga)N} , [1-100] _{Saphir} [-1-120] _{(Al,Ga)N} ^{19,24-26} oder [0001] _{Saphir} [11-20] _{(Al,Ga)N} , [1-100] _{Saphir} [1-100] _{(Al,Ga)N} ²⁴⁻²⁶
(1-102) r-planar	(1-210) a-planar [-1101] _{Saphir} [0001] _{(Al,Ga)N} , [11-20] _{Saphir} [10-10] _{(Al,Ga)N} ^{27,28}
(11-23) n-planar	(0001) c-planar [1-100] _{Saphir} ∧ [1-100] _{AlN} 15° ^{25,29}

Tabelle 2.2: Epitaxiegesetze für das Wachstum von AlN und GaN auf Saphir.