Barbara Monika Neubert

GalnN/GaN LEDs auf semipolaren Seitenfacetten mittels selektiver Epitaxie hergestellter GaN-Streifen







1. Gutachter:	Prof. Dr. F. Scholz
2. Gutachter:	Prof. Dr. J. Christen
Amtierender Dekan:	Prof. Dr. H. Partsch
Datum der Promotion:	16. September 2008

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

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

1. Aufl. - Göttingen : Cuvillier, 2008 Zugl.: Ulm, Univ., Diss., 2008

978-3-86727-764-8

© CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2008 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, 2008

Gedruckt auf säurefreiem Papier

978-3-86727-764-8

GaInN/GaN LEDs on semipolar side facets of selectively grown GaN stripes

Group III nitrides are very important for the short wavelength region of the visible spectrum for light emitting devices and also for white light emitting diodes (LEDs) based on ultra violet emitters. Devices with visible light emission typically contain GaInN. But due to the lattice constant differences between the GaInN quantum wells (QWs) and the surrounding (Al)GaN layers, the QWs are compressively strained. When grown in the most common c-direction, this biaxial strain gives rise to a strong internal piezoelectric field, leading to a local separation of electrons and holes in these QWs due to the quantum confined Stark effect. Owing to the reduced overlap of the electron and hole wave function, their recombination probability decreases making device structures for the green spectral range less efficient.

Therefore, it is desirable to grow GaInN/GaN heterostructures with reduced or zero internal fields. This is possible by arranging the biaxial strain in planes other than the generally used $\{0001\}$ -crystal plane (*c*-plane). To obtain such crystal planes on high quality *c*-plane GaN, we start the epitaxial growth in the *c*-direction, followed by the selective growth of GaN stripes with triangular cross section. Other crystal planes form on the stripe facets, on which finally the QW structures are grown. Depending on the stripe orientation and the growth conditions, different crystal facets can be obtained which all possess reduced or even zero polarization fields. Such structures can be embedded in n- and p-type doped GaN layers to form LEDs.

First electroluminescence (EL) measurements show, that the emission intensity of stripes oriented along the $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -direction is much better than that of

Abstract

stripes along the $\langle 1\overline{1}00 \rangle$ -direction.

For a wide range of parameters, we achieved a smooth surface of the inclined facets of stripes oriented along $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -direction, while there are many inverted pyramid defects at the apex and a rough surface on the inclined facets for stripes oriented along $\langle 1\bar{1}00 \rangle$. Moreover, we found indications for a lower p-type conductivity for the Mg doped top layer grown on such stripes for the used growth parameters. The low vertical growth rate of Mg doped GaN can lead to a not completely closed top layer at the apex of our stripes causing shorts. To overcome this problem we used an isolation layer on the apex or pulsed precursor gas supply to improve this growth behavior.

Looking on the cross section of the selectively grown LEDs with SEM, we find the QWs as expected on the side facets of our stripes as well as on the top facet of the trapeze-like stripes. Systematic investigations of stripes with a different mask width but same opening gave information about the growth characteristics of these different facets. For comparison with the planar grown reference LED it is necessary to take the particular characteristics of the selective epitaxial growth process into account. The material gases arriving on the masked areas diffuse to the mask openings thus causing an enhanced local growth rate. In order to compare the results of our different samples, we have normalised the local growth rate by taking into account the ratio of open and masked area of our mask.

Regarding the thickness of the active region separately for top and side facets of trapezoid-like stripes, a drastic difference is found. The side QWs were typically 2 to 4 times thinner than the top QWs, obviously due to the strong influence by the crystal plane stabilities and the geometrical effects. Studies with TEM confirmed these findings. Similar results have been obtained by Nishizuka et al.

An interesting observation was made for samples with higher In content. We found obvious defects in the active region of the top facets for trapezoidal shaped stripes which look like holes in the crystal. We did find these defects in the active region neither on the side facets of selectively grown LEDs nor in the reference LED. We detected the same defects in an other planar grown LED with increased In content. Therefore we conclude, that the In content in these top facet QWs is much higher due to In migration than in a planar grown LED or the side facets of selectively grown LEDs. But also for a higher In-content of the QWs on stripes with a triangular cross section, no In-cluster formation was observed. The In-distribution on the side facet QWs looks more uniform than on the reference LEDs. The current dependent blueshift of the peak emission wavelength caused by screening effects of the piezoelectric field was only 1.5 nm for the selectively grown LEDs for currents between 1 and 50 mA. This is less than half the value measured on the reference LEDs and confirms the reduced piezoelectric field in these facet-LED structures.

For light emitting diodes grown on the facets of $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ oriented stripes, this results in good electroluminescence with 3 mW optical output power at 111 mA under DC conditions on-wafer. For stripes oriented along $\langle 1\bar{1}00 \rangle$, only poor electroluminescence was achieved.

Inhaltsverzeichnis

1	Ein	leitung	r 5	1	
2	Kris	Kristallstruktur und Eigenschaften			
	2.1	Krista	llstruktur	5	
	2.2	Stickst	toff-bedingte Eigenschaften von Nitriden	8	
	2.3	Bandli	ücken der Gruppe-III-Nitride	9	
	2.4	Verspa	annungen durch Gitterfehlanpassung	11	
	2.5	Polaris	sation von Gruppe-III-Nitriden	14	
		2.5.1	Spontane Polarisation (\vec{P}_{sp})	14	
		2.5.2	Piezoelektrische Polarisation (\vec{P}_{pz})	15	
		2.5.3	Piezoelektrische Felder	19	
3	GaI	nN-Le	uchtdioden	23	
	3.1	Grund	llagen zu Leuchtdioden	23	
	3.2	GaInN	${\tt I-Leuchtdioden} $	27	
	3.3	Auswi	rkungen der Piezofelder auf AlGaInN-Heterostrukturen	27	
	3.4	Einflus	ssparameter auf die Emissionswellenlänge	30	
4	Epi	taxie		31	
	4.1	Epitax	kieverfahren für optoelektronische Bauelemente	31	
		4.1.1	Gasphasen-Epitaxie	32	
			4.1.1.1 Hydrid-Gasphasen-Epitaxie	32	
			4.1.1.2 Metallorganische Gasphasen-Epitaxie	33	
		4.1.2	Molekularstrahlepitaxie	38	
	4.2	Polare	e, semipolare und nichtpolare Kristallebenen	39	
		4.2.1	GaN-Substrate	40	
		4.2.2	Kristallabscheidung von GaN auf Fremdsubstraten	41	

			4.2.2.1	Entlang a -Richtung orientiertes GaN auf r -	
				orientiertem Saphir	41
			4.2.2.2	Entlang <i>a</i> -Richtung orientiertes GaN auf <i>a</i> -	
				orientiertem Siliziumkarbid	43
			4.2.2.3	Entlang m -Richtung orientiertes GaN auf m -	
				orientiertem Siliziumkarbid	44
			4.2.2.4	Entlang <i>m</i> -Richtung orientiertes GaN auf $\langle 001 \rangle$ -	
				orientiertem γ -Lithiumaluminat	44
			4.2.2.5	Semipolare GaN-Kristallebenen auf Spinell	45
		4.2.3	Verschie	dene Kristallebenen durch selektive Epitaxie	46
	4.3	Selekt	ive Epita	xie von GaN	46
		4.3.1	Abschei	deraten und Füllfaktor	47
		4.3.2	Oberfläc	cheneigenschaften verschiedener Kristallebenen	49
		4.3.3	Selektiv	e Epitaxie und Ga-Quelle	53
5	Hor	stallur	ng und F	Prozessierung von GaInN-LEDs	55
0	5.1 Canzflächig abgeschiedene CalmN I FDg				55
	0.1	511	Enitakti	sche Herstellung der Referenz-LEDs	55
		5.1.1	Besonde	rheiten der Epitaxie von GaInN	58
		5.1.2	Besonde	rheiten der Epitaxie von Mg-dotiertem GaN	60
		5.1.4	Prozessi	erung der Referenz-LEDs	61
	5.2	Selekt	iv abgesc	hiedene GaInN-LEDs	63
	0.2	5.2.1	Herstell	ung der selektiv abgeschiedenen LEDs	63
		5.2.2	Prozessi	erung der selektiv abgeschiedenen LEDs	66
~	a 1				
6	Gal	nN-LE	Ds auf :	semipolaren Seitenfacetten	69 69
	6.1	Prinzi	pieller Fu	nktionsnachweis	69
	6.2	Unters	suchunger	1 zum Nachweis des reduzierten piezoelektrischen	co
		Feldes	•••••	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	69 70
		0.2.1	Vergleic	h der Emissionswellenlangen	70
			0.2.1.1	Einfluss des Fullfaktors	11
			0.2.1.2	Vergieich der Spektren Findum der labelen Abschriftenten	(4 70
			0.2.1.3	Linnuss der lokalen Abscheiderate	70 70
			0.2.1.4	Unterschiede der Quantenfilmdicken	(8
		C 0 0	0.2.1.5	Unterschiede beim In-Anteil	88
		0.2.2	Emissio	aswellenlange und Plezofeldstarke	91

		6.2.3	Stromab	hängige Wellenlängenverschiebung	95
	6.3	Quant	tenausbeute		
		6.3.1	Problem	e der Prozessierung und Lösungen	97
			6.3.1.1	Wahl der Maskierungsschicht	97
			6.3.1.2	Mesa-Strukturierung	98
			6.3.1.3	Zusammensetzung und Leitfähigkeit	100
			6.3.1.4	Schichtdicken der p-dotierten Schicht	102
			6.3.1.5	Untersuchungen zum Einfluss der Quellen TEGa	
				und TMGa	104
			6.3.1.6	Abscheidecharakteristik von Mg-dotiertem GaN	
				bei selektiver Epitaxie	106
			6.3.1.7	Thermische Belastungen	113
			6.3.1.8	Oberflächenbeschaffenheit	115
		6.3.2	Ausgang	sleistungen bis $3 \mathrm{mW}$	115
7	Zus	ammer	nfassung		119
\mathbf{A}	For	melzeio	chen und	l Abkürzungen	123
Б	.				
В	Not	ation of	der Klan	nmersymbole	127
\mathbf{C}	Voig	gt-Not	ation: R	eduktion der Anzahl unabhängiger Kompo	-
	nen	ten			129
	C.1	Für Te	ensoren di	ritten Ranges	129
	C.2	Für Te	ensoren vi	ierten Ranges	131
$\mathbf{Li}^{\mathbf{r}}$	terat	urverz	eichnis		135
Vo	orver	öffentl	ichunger	1	147

Kapitel 1

Einleitung

Im blauen Spektralbereich emittierende LEDs auf dem AlGaInN-basierenden Materialsystem sind bereits kommerzialisiert und gut etabliert. Trotzdem weisen sie noch immer einen Nachteil auf: Das bevorzugt in Wurtzitstruktur ausgebildete Gruppe-III-Nitrid ist in der bislang am häufigsten für die Kristallabscheidung genutzten Richtung entlang der $\langle 0001 \rangle$ -Achse polar [1]. Dies wirkt sich insbesondere negativ bei dickeren Quantenfilmen und höheren In-Anteilen aus, wie sie für die längerwellige Emission notwendig sind, wie beispielsweise im grünen Spektralbereich. Durch das anliegende Feld werden die Ladungsträger räumlich getrennt. Dadurch sinkt die strahlende Rekombination und somit die Ausgangsleistung und Effizienz dieser Leuchtdioden erheblich [2].

Nur Ebenen senkrecht zur $\{0001\}$ -Ebene sind unpolar und es liegt kein Feld an. Entlang von Kristallrichtungen, die zur $\langle 0001 \rangle$ -Richtung um einen Winkel Θ geneigt sind, ist die Feldstärke deutlich redzuiert [3].

Die Lösung zu dem Problem klingt einfach: den Kristall auf solchen unpolaren Ebenen abzuscheiden. Dies hat sich jedoch als schwierig erwiesen: Da GaN-Substrate bisher nur in $\langle 0001 \rangle$ -Orientierung erhältlich sind, ist man auf Fremdsubstrate angewiesen, die sich für die Abscheidung entlang anderer, weniger polarer oder unpolarer Kristallrichtungen eignen [4–12]. Hierbei wirkt sich die unterschiedliche Polarität der Wurtzitstruktur negativ aus. Die unterschiedlichen Wachstumsraten der Ga- und N-Polarität der $\langle 0001 \rangle$ -Richtung bzw. $\langle 000\bar{1} \rangle$ -Richtung führen zu Kristalldefekten [8], die als nichtstrahlende Rekombinationszentren wirken können und somit den Vorteil, dass kein Polarisationsfeld anliegt, wieder kompensieren.

Gut etabliert ist dagegen die Methode der selektiven Epitaxie auf $\langle 0001 \rangle$ -

1. Einleitung

orientiertem Material, das eine gute Qualität aufweist. Die Wahl der Epitaxie-Parameter läßt Kristallebenen entstehen, die zwar nicht unpolar sind, bei denen das Polarisationsfeld jedoch stark reduziert ist [3].

In dieser Arbeit wurden solche schwach polaren Kristallebenen mit selektiver Epitaxie als schräge Seitenfacetten von GaN-Streifen mit dreieckigem Querschnitt hergestellt. Auf diese semi-polaren Kristallebenen wurde anschließend die LED-Struktur abgeschieden. Nach dem Nachweis der prinzipiellen Funktion der LEDs wurden verschiedene Untersuchungen zum Nachweis des reduzierten Piezofeldes durchgeführt. Dies waren insbesondere der Vergleich der Spektren mit einer regulären LED auf der polaren c-Ebene mit Lumineszenzmessungen in Bezug auf die durch den Quantum Confined Stark Effect verursachte Rotverschiebung, wie sie im folgenden Abschnitt "Gliederung der Arbeit" in Bezug auf Kap. 6 genannt sind und die Anpassung der Prozessierung an die neuartigen LED-Strukturen um eine verbesserte Ausgangsleistung zu überprüfen.

Gliederung der Arbeit

Zunächst wird auf die Eigenschaften von Gruppe-III-Nitriden eingegangen. Diese werden mit den Eigenschaften des kubischen Verbindungshalbleiters GaAs verglichen. Weiterhin werden die entstehenden Verspannungen beschrieben und auf die spontane und piezoelektrische Polarisation eingegangen (Kap. 2).

Kapitel 3 stellt kurz die Grundlagen zu den LEDs vor und beschreibt die Auswirkungen durch das anliegende Piezofeld auf deren Funktion. Die durch das Feld bedingte räumliche Trennung der angeregten Ladungsträger verlängert deren Lebensdauer und reduziert die strahlende Rekombination. Außerden wird durch die räumliche Trennung eine Grenzflächenladung aufgebaut, die wiederum eine Reduktion der Energielücke durch Verbiegen der Energiebänder und somit eine Rotverschiebung der Emissionswellenlänge zur Folge hat. Mit zunehmenden Strom stehen jedoch freie Ladungsträger zur Abschirmung des Feldes zur Verfügung, was die Rotverschiebung teilweise aufhebt.

Im Anschluß werden die Epitaxieverfahren vorgestellt und insbesondere das angewandte Verfahren der metallorganischen Gasphasen-Epitaxie beschrieben (Kap. 4). In diesem Kapitel werden außerdem mögliche Fremdsubstrate zur Abscheidung auf nicht- und semi-polaren Kristallebenen genannt. Die Ergebnisse, die andere Forschungsgruppen damit erzielten, werden vorgestellt. Es wird auf die Schwierigkeiten und Probleme bei der Abscheidung auf semi- und nicht-polaren Kristallebenen dieser Substrate eingegangen. Weiterhin wird in dem Kapitel die selektive Epitaxie beschrieben. Die Eigenschaften der unterschiedlichen Kristallebenen nehmen Einfluss, indem die Abscheidung auf bestimmten Ebenen bevorzugt erfolgt. Die wichtigste Rolle spielt dabei die Anordnung der Metall- und Stickstoffatome der Lagen der Kristallebene entlang einer bestimmten Richtung (Polarität). Diese besitzt einen starken Einfluss auf die bevorzugte Ausbildung bestimmter Ebenen.

In Kapitel 5 wird die Herstellung und Prozessierung von LEDs auf üblicherweise genutztem polaren, $\langle 0001 \rangle$ -orientierten Saphir vorgestellt. Diese in dieser Arbeit als Referenz-LEDs bezeichneten Bauteile dienen als Vergleich zu den selektiv abgeschiedenen LEDs. Im Anschluss daran wird die Herstellung und Prozessierung der selektiv abgeschiedenen LEDs beschrieben. Dabei wird auf die Besonderheiten der Abscheidung von GaInN- und Mg-dotierten Schichten eingegangen.

Darauf folgen die Untersuchungen zum Nachweis des reduzierten Piezofeldes (Kap. 6). Dies ist als erstes der Vergleich der Emissionswellenlängen zwischen der Referenz-LED und semipolaren LEDs, um die reduzierte Rotverschiebung festzustellen. Hierbei wirken sich aber durch die Epitaxie bedingte weitere Faktoren aus, wie eine andere Quantenfilmdicke und auch ein veränderter In-Anteil. Diese Einflüsse wurden mit folgenden Methoden genauer anlysiert:

- Foto-, Kathodo- und Elektrolumineszenz in Abhängigkeit von den Epitaxie-Einflüssen, wie z. B. dem Füllfaktor und der damit zusammenhängenden lokalen Abscheiderate bei der selektiven Epitaxie. Die Kathodolumineszenzmessungen wurden in Kooperation mit dem Institut für Experimentelle Physik der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg durchgeführt.
- Raster- und Transmissionselektronenmikroskopie. Die Transmissionselektronenmikroskopie erfolgte in Kooperation mit dem Labor für Elektronenmikroskopie der Universität in Regensburg.
- ortsaufgelöste Röntgendiffraktometrie wurde in Kooperation mit dem Department of Physics des New Jersey Institute of Technology in Newark am Cornell High Energy Synchrotron Source (CHESS) an der Cornell Universität in Ithaca in New York, U. S. A durchgeführt.

1. Einleitung

• Sekundär-Ionen-Massenspektroskopie erfolgte in Kooperation mit der Arbeitsgruppe des Kristall-Labors am 4. Physikalischen Institut der Universität Stuttgart.

Außerdem wurden theoretische Überlegungen zum Zusammenhang von In-Anteil der Quantenfilme, Piezofeld, Quantisierung und Emissionswellenlänge durchgeführt. Messungen der stromabhängigen Emissionswellenlänge bestätigen eindeutig das reduzierte Piezofeld der semipolaren LEDs.

Zum Nachweis einer verbesserten Effizienz wurden die auftretenden Prozessierungsprobleme behoben und Ausgangsleistungen von $700\,\mu\text{W}$ bei $20\,\text{mA}$ bzw. $3\,\text{mW}$ bei $110\,\text{mA}$ erzielt.

Kapitel 2

Kristallstruktur und Eigenschaften von Gruppe-III-Nitriden

2.1 Kristallstruktur

Gruppe-III-Nitride können in drei verschiedenen Kristallgitterstrukturen kristallisieren. Am häufigsten liegt die bei Normalbedingungen (Raumtemperatur und Normaldruck) thermodynamisch stabile hexagonale Wurtzitstruktur vor. Außerdem tritt GaN auch mit kubischem Kristallgitter in Zinkblendestruktur auf und bei sehr hohem Druck ab $\approx 70 \,\mathrm{GPa}$ auch in Steinsalzstruktur [13]. In dieser Arbeit werden ausschließlich Nitrid-Halbleiter mit hexagonalem Kristallgitter behandelt.



Abb. 2.1: Hexagonales Gitter der Wurtzit-Kristallstruktur.

Die Wurtzitstruktur besteht aus einem sechseckigen Prisma, dessen Basalebene durch die Vektoren $\vec{a_1}$ und $\vec{a_2}$ aufgespannt wird. Die Höhe des Prismas entspricht der Gitterkonstanten c (Abb. 2.1). Die Netzebenen und Richtungen eines Kristalls werden durch die Millerschen Indizes (h, k, l) angegeben. Für Kristalle des hexagonalen Kristallsystems liefern die Millerschen Indizes für gleichwertige



Abb. 2.2: Schematische Darstellung des GaN-Kristalls mit den Hauptkristallachsen und -ebenen.

Netzebenen unter Umständen Ausdrücke von unterschiedlichem Typ, die aber äquivalent sind. Um bei dem hexagonalen Kristallgitter mehr Eindeutigkeit der Bezeichnungen zu erhalten, wird noch eine weitere Achse $\vec{a_3}$ eingeführt. Die vier Indizes (h, k, i, l) erhält man in gewohnter Weise, wobei der Wert von i von hund k mit i = -(h + k) linear abhängig ist [14]. Abb. 2.2 zeigt schematisch die Hauptebenen und Richtungen des GaN-Kristalls.

Das Wurtzitgitter ist aus zwei hexagonalen Untergittern zusammengesetzt, die um den Wert $u_0 \cdot c_0$ entlang der $\langle 0001 \rangle^1$ -Kristallachse (*c*-Achse) gegeneinander verschoben sind. Die Werte für die Gitterkonstanten *a*, *c*, das Gitterkonstantenverhältnis c/a und den Parameter *u* gibt Tabelle 2.1 wieder. Im idealen Wurtzitkristall ist das Verhältnis $c_0/a_0 = \sqrt{8/3} \approx 1,633$ und der ideale Wert des internen Parameters $u_0 = 3/8$. Abweichungen vom idealen Wert des Parameters *u* wirken sich auf die Eigenschaften von GaN aus, insbesondere auf die Polarisation (Kap. 2.2).

Die Punktgruppe (Kristallklasse) 6mm [17,18] der Wurtzitstruktur weist keine Inversionssymmetrie auf [19]. Die Symmetrie-Eigenschaften der Kristallklasse wirken sich auf die Polarisation des Kristalls aus, die bei Wurtzit-GaN eine besondere Rolle spielt (Kap. 2.4).

¹Erklärung zur Notation und Wahl der Klammersymbole siehe Anhang B.

	Gitterko	nstanten	Verhältnis	int. Para-
	a [nm]	c [nm]	c/a	meter u
AlN	0,3112 [15]	0,4982 [15]	1,6009	0,382 [16]
GaN	0,3189 [15]	0,5185 [15]	$1,\!6259$	0,377 [16]
InN	0,3545 [15]	0,5703 [15]	1,6087	0,379 [16]

Tab. 2.1: Gitterkonstanten und deren Verhältnis der Gruppe-III-Nitride.

Aufgrund der unterschiedlichen Abmessungen der Al-, Ga- und In-Atome besitzen die binären und ternären Verbindungen mit N unterschiedliche Gitterkonstanten. Die Gitterkonstanten a der Basalebene und c senkrecht zur Basalebene der ternären Verbindungen können dabei nach Vegards Gesetz über die Anteile x der Metalle A und B, die für Al, Ga und In stehen, berechnet werden [20]:

$$a_{A_x B_{1-x} N} = x a_{AN} + (1-x) a_{BN}$$
 und (2.1)

$$c_{A_x B_{1-x} N} = x c_{AN} + (1-x) c_{BN} \quad . \tag{2.2}$$

Wie beim GaAs die Polarität entlang der $\langle 111 \rangle$ -Richtung unterschiedlich sein kann (Ga- oder As-Polarität), gibt es auch bei den Gruppe-III-Nitriden entlang der $\langle 0001 \rangle$ -Richtung wegen der fehlenden Punktsymmetrie zwei unterschiedliche Polaritäten: Metall- und N-Polarität. Dabei weisen Oberflächen von Galliumnitrid mit Metall-Polarität eine größere chemische Stabilität auf als Oberflächen mit N-Polarität [21]. Außerdem beeinflußt die Polarität das Abscheideverhalten auf nicht- und semipolaren Kristallebenen [8,9,22]. Um die Polarität zu beschreiben, wird die Stapelfolge ABABAB des Kristalls betrachtet. Wird die jeweilige Lage aus Stickstoffatomen mit 1 und die Lage aus Metallatomen mit 2 indiziert, so ergibt sich für die Metall-Polarität die Atomlagenfolge $A_1A_2B_1B_2$ (Abb. 2.3 (a)) und für die N-Polarität die Atomlagenfolge $B_2B_1A_2A_1$ (Abb. 2.3 (b)).

Die Polarität ist dabei nicht mit der Oberflächenterminierung zu verwechseln. Die Oberflächenterminierung beschreibt nur die oberste Lage des Kristalls, während die Polarität eine Eigenschaft des Volumenkristalls ist [21, 23]. Denkt man sich in Abb. 2.3 (a) den Kristall beispielsweise zwischen den Atomlagen B_1 und B_2 durchgespalten, so besteht zwar die oberste Lage des einen Teils aus N-Atomen, es liegt aber trotzdem Metall-Polarität vor.

2. Kristallstruktur und Eigenschaften



Abb. 2.3: Für die Metall-Polarität ist die Atomlagenfolge $A_1A_2B_1B_2$ (a) und für die N-Polarität ist die Atomlagenfolge $B_2B_1A_2A_1$ (b).

2.2 Besondere stickstoff-bedingte Eigenschaften von Nitriden

Die Nitrid-Halbleiter unterscheiden sich wesentlich von den meisten anderen Verbindungshalbleitern (Phosphor- und Arsenverbindungen), die im optoelektronischen Bereich Anwendung finden. Dies liegt an den besonderen Eigenschaften des Stickstoff. Der kleine Kovalenzradius von 70 pm des Stickstoff gegenüber Phosphor mit 110 pm und Arsen mit 121 pm bedingt kleine Gitterkonstanten [24]. Werden die kubischen Gitterkonstanten (Index ZB für Zinkblendestruktur) von Aluminiumnitrid (AlN, $a_{ZB} = 0,437$ nm), Galliumnitrid (GaN, $a_{ZB} = 0,4519$ nm) und Indiumnitrid (InN, $a_{ZB} = 0,498$ nm) [25] mit der von GaAs ($a_{ZB} = 0,565$ nm) [26] verglichen, so stellt man fest, dass diese deutlich kleiner sind.

Auch bedingt der Stickstoff die bevorzugte Wurtzit-Kristallstruktur der Nitride [24], im Gegensatz dazu sind die Kristallstrukturen der Phosphide und Arsenide kubisch.

Die Elektronegativität von Stickstoff ist mit 3,0 deutlich größer als von Phosphor und Arsen, je 2,2 [24]. Dadurch besitzen die Gruppe-III-Nitride einen ionischen Bindungs-Charakter und hohe Bindungsenergien, was zu einer großen thermischen und chemischen Stabilität von GaN und AlN führt [24], während die Phosphide und Arsenide eine überwiegend kovalente chemische Bindung besitzen. Die meisten Phosphor- und Arsenverbindungen lassen sich nasschemisch gut ätzen, im Gegensatz zu den Nitriden.

Der interne Parameter u beschreibt die Anion-Kation-Bindungslänge entlang

der $\langle 0001 \rangle$ -Kristallachse (*c*-Achse). Weicht der Wert von *u* vom idealen Wert ab, so verschieben sich die Ladungsschwerpunkte der Tetraederanordnung, so dass Dipole entstehen, die ein elektrisches Feld erzeugen. Dies wird ausführlicher in Kap. 2.5.1 beschrieben.

2.3 Bandlücken der Gruppe-III-Nitride

Die Gruppe-III-N-Halbleiterverbindungen decken einen großen Bereich mit einer direkten Bandlücke von $\approx 0.7 \,\mathrm{eV}$ (InN) [27] bis 6,2 eV (AlN) [28] ab (Abb. 2.4). Da mit dieser Bandlücke ein Spektralbereich von 1,77 µm im Infrarot über das



Abb. 2.4: Bandabstand in Abhängigkeit der Gitterkonstante *a* von Gruppe-III-Nitriden bei Raumtemperatur. Die Kennlinien wurden mit Gl. (2.3) und Gl. (2.1) mit den Werten aus [15,27,28] berechnet (Tab. 2.2).

gesamte sichtbare Spektrum bis zu 200 nm im Ultraviolett abgedeckt wird, sind die Gruppe-III-N-Halbleiter für optoelektronische Bauelemente besonders interessant. Über die Anteile x der Metalle Aluminium, Gallium und Indium mit den Platzhaltern A und B lassen sich der Bandabstand E_g und die Gitterkonstante a einstellen. Die Bandlücke läßt sich mit der Gleichung

$$E_{g,A_xB_{1-x}N} = xE_{g,AN} + (1-x)E_{g,BN} - x(1-x)b_{A_xB_{1-x}N}$$
(2.3)

2. Kristallstruktur und Eigenschaften

	$E_g (eV)$	$\alpha \ ({\rm meV/K})$	β (K)		b~(eV)
AlN	6,2 [28]	$1,799\ [15]$	1462 [15]	$Al_x Ga_{1-x} N$	0,7 [15]
GaN	3,4 [28]	0,909 [15]	830 [15]	$Ga_x In_{1-x} N$	2,5 [27]
InN	0,7 [27]	0,245 [15]	624 [15]	$Al_x In_{1-x} N$	2,5 [15]

Tab. 2.2: Bandlückenenergie und Varshni-Parameter der binären, Bowing-Parameter der ternären Nitrid-Verbindungen.

berechnen [29]. N beschreibt den Stickstoff, die Nichtlinearität der Abhängigkeit von der Zusammensetzung gibt dabei der sogenannte Bowing-Parameter b an, für den man in der Literatur unterschiedliche Werte findet. Insbesondere beruhen die Werte für Al_xIn_{1-x}N noch auf früher angenommenen Bandlückenenergien von InN > 1 eV [29–32]. Aber auch für Al_xGa_{1-x}N werden unterschiedliche Werte angegeben, die von 0,53 eV bis 1,33 eV reichen. In der Zusammenfassung von 2001 haben Vurgaftman und Meyer noch einen Bowing-Parmater von b = 1, 0 eVempfohlen [31], in der Zusammenfassung von 2003 empfehlen sie jedoch einen Bowing-Parameter von b = 0, 7 eV [15]. Die Werte der binären Verbindungen sowie die verwendeten Bowingparameter und die zugehörige Referenz gibt Tab. 2.2 wieder. Die in Tab. 2.2 angegebenen Bowingparameter für AlInN und GaInN beziehen sich auf die Energielücke von 0,7 eV für InN.

Außerdem hängt die Bandlücke von der Temperatur T ab, welche durch die Varshni-Formel angegeben wird [15]:

$$E_g(T) = E_g(T=0) - \frac{\alpha T^2}{T+\beta}$$
 (2.4)

Dabei sind α und β die sogenannten Varshni-Parameter, die ebenfalls in Tab. 2.2 wiedergegeben sind.

Bislang führen hohe Anteile an Indium in dem ternären Halbleitersystem $Ga_{1-x}In_xN$ zu Problemen. Zum Einen führt dies zu lokalen Anreicherungen, sogenannten In-Clustern, die das Emissionsspektrum verbreitern. Solche In-Cluster sind unter anderem auf eine thermodynamische Mischungslücke von $Ga_{1-x}In_xN$ zurückzuführen [33].

Zum Anderen wird durch einen hohen In-Anteil in GaN/GaInN-Heterostrukturen der Gitterabstand gegenüber GaN vergrößert, was zu einer Verspannung im Kristall führt. Diese Verspannungen führen zu einer piezoelektrischen Polarisation (Kap. 2.5.2) und somit zu einem anliegenden piezoelektrischen Feld, was sich auf die Eigenschaften von optoelektronischen Bauelementen negativ auswirkt. Genau diese Problematik und eine mögliche Lösung ist Inhalt dieser Arbeit. Da die Polarisation auf anderen Kristallebenen als der c-Ebene geringer ist (Kap. 2.5.3), werden die Eigenschaften von GaInN-LEDs auf semipolaren Ebenen untersucht.

2.4 Verspannungen durch Gitterfehlanpassung

Bei der Epitaxie von Heterostrukturen aus diesen Nitridverbindungen, wie sie unter anderem für optoelektronische Bauelemente wie LEDs notwendig sind, passen die unterschiedlichen Gitter nicht mehr aufeinander (Abb. 2.5 (a)). Um diese Unterschiede auszugleichen, kommt es in den Gittern im Grenzflächenbereich zunächst zu einer pseudomorphen Verspannung, d. h. das Gitter der abgeschiedenen Schicht passt sich dem darunterliegenden Gitter an (Abb. 2.5 (b)). Dies führt zu einer biaxialen Verspannung im Gitter, die auch eine Änderung des Gitterabstandes in Richtung der *c*-Achse bewirkt. Wird eine kritische Schichtdicke d_c überschritten, so wird die Verspannungsenergie so groß, dass sie ausreicht, um Versetzungen zu erzeugen und es kommt zu einer Relaxation der Schicht [34, 35] (Abb. 2.5 (c)).



Abb. 2.5: Werden Kristallstrukturen mit unterschiedlichen Gitterkonstanten zusammengebracht (a), so erfolgt die Gitterfehlanpassung bis zu einer bestimmten kritischen Schichtdicke d_c durch pseudomorphe Verspannung (b), bei Überschreiten von d_c relaxiert die Schicht unter Bildung von Versetzungen (c). [36]

2. Kristallstruktur und Eigenschaften

Die kritische Schichtdicke für $Ga_{1-x}In_xN$ auf einer 2 µm dicken GaN-Schicht auf Al_2O_3 wurde von Grandjean et al. bestimmt, sie ist 3 Monolagen für x=0,3 und 7 Monolagen für x=0,12 [37]. Parker et al. geben eine kritische Schichtdicke von 100 nm für x=0,08 und von 65 nm für x=0,15 an [38].

Ist die Verspannung

$$\overrightarrow{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix}$$

$$(2.5)$$

(*engl. stress*) homogen, d. h. befindet sich der Körper im statischen Gleichgewicht, oder liegen keine Torsionskräfte an, gilt $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ [19], so dass 6 nicht gleiche Komponenten σ_{ij} übrig bleiben.

Diese Kraft hat eine Verformung $\overleftarrow{\epsilon}$ (*engl. strain*) zur Folge, die sich als Dehnung oder Stauchung der Gitterkonstanten auswirkt. Ist die Verformung reversibel, so handelt es sich um eine elastische Verformung, irreversible Verformungen werden als plastische Verformung bezeichnet. Die Abhängigkeit der elastischen Verformung von der Verspannung gibt das Hook'sche Gesetz unter Verwendung der Voigt-Notation (Erklärung siehe Anh. C) an:

$$\epsilon_i = s_{ij}\sigma_j \quad , \quad i,j = 1,\dots,6 \quad , \tag{2.6}$$

wobei *s* die Elastizitätskonstante beschreibt. Die Umkehrung beschreibt entsprechend die Abhängigkeit der Verspannung von der Verformung:

$$\sigma_i = C_{ij}\epsilon_j \quad , \quad i, j = 1, \dots, 6 \quad , \tag{2.7}$$

mit dem Elastizitätsmodul $C = s^{-1}$, der sich aus den elastischen Konstanten C_{ij} zusammensetzt. Für die 6mm-Symmetrie der Wurtzitstruktur bleiben fünf nichtverschwindende Komponenten übrig [39]:

$$C_{ij} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{C_{11} - C_{12}}{2} \end{pmatrix}$$
 (2.8)

In dieser Arbeit wird angenommen, dass bei der Kristallabscheidung entlang der c-Achse des Wurtzitkristalls die Gitterfehlanpassung nur in der Basalebene erfolgt, welche die Grenzfläche zwischen den unterschiedlichen Gittern darstellt. Sie

	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{13} (GPa)	C_{33} (GPa)	C_{44} (GPa)
AlN	396	137	108	373	116
GaN	390	145	106	398	105
InN	223	115	92	224	48

Tab. 2.3: Elastizitätskonstanten für die binären Nitrid-Verbindungen [15].

bezieht sich daher nur auf die Achsen $\vec{a_1}$ und $\vec{a_2}$, da $\vec{a_3}$ von diesen Vektoren linear abhängig ist. Ausgehend von einer solchen biaxialen Verspannung liegt keine Spannung in z-Richtung an, und unter Vernachlässigung der Scherspannungen gilt:

$$\sigma_1 = \sigma_2$$
 , $\sigma_3 = 0$ und $\sigma_4 = \sigma_5 = \sigma_6 = 0$. (2.9)

Für die Verformung sind dann:

$$\epsilon_1 = \epsilon_2 = \frac{a - a_0}{a_0}$$
, $\epsilon_3 = \frac{c - c_0}{c_0}$ und $\epsilon_4 = \epsilon_5 = \epsilon_6 = 0$ (2.10)

die Dehnung in der Basalebene, bzw. entlang der c-Achse, wobei die erste als isotrop angenommen wird [23]. Eine Stauchung sei hier als Dehnung mit negativem Vorzeichen verstanden. Die Gitterkonstanten c_0 und a_0 geben dabei die Abstände im unverspannten Zustand an. Da entlang der c-Richtung keine Verspannung angenommen wird, gilt:

$$\sigma_3 = 2C_{13}\epsilon_1 + C_{33}\epsilon_3 = 0 \quad . \tag{2.11}$$

Somit verursacht bei der anliegenden biaxialen Verspannung eine Dehnung der Gitterkonstanten a eine Stauchung der Gitterkonstante c und umgekehrt. Daraus folgt aus Gl. (2.11) mit Gl. (2.10) direkt die Kopplung, die durch die Elastizitätskonstanten C_{13} und C_{33} ausgedrückt wird:

$$\frac{c-c_0}{c_0} = -2\frac{C_{13}}{C_{33}}\frac{a-a_0}{a_0} \quad . \tag{2.12}$$

In der Literatur findet man verschiedene Werte für die Elastizitätskonstanten der Gruppe-III-Nitride, die theoretisch berechnet, z. T. auch experimentell bestimmt wurden. In Tab. 2.3 sind die von Vurgaftman und Meyer empfohlenen Elastizitätskonstanten für die Nitrid-Verbindungen angegeben [15].

2.5 Polarisation von Gruppe-III-Nitriden

2.5.1 Spontane Polarisation (\vec{P}_{sp})

Der ionische Bindungs-Charakter der Gruppe-III-Nitride führt zu einer Ausbildung von Dipolen. Im idealen Wurtzitkristall sind alle Bindungswinkel und Bindungslängen identisch, so dass sich die Dipole aufgrund der tetraedrischen Anordnung kompensieren und keine makroskopische Polarisation nach außen gebildet wird. Bei den Gruppe-III-Nitriden ist das Wurtzitgitter aber nicht ideal, wie man aus dem Vergleich der Werte für den unverspannten Wurtzitkristall in Tab. 2.4 und den tatsächlichen Werten in Tab. 2.1 entnehmen kann. Bei den Nitriden weichen bereits im unverspannten Kristall das c/a-Verhältnis und der Parameter u vom idealen Wert ab [1]. Die Metall-Stickstoff-Bindung d_{a4} parallel zur c-Richtung ist länger als die übrigen drei Bindungen $d_{a1...3}$ (Abb. 2.6). Die Dipolmomente der einzelnen Bindungen kompensieren sich nicht und es kommt zu einer spontanen Polarisation \vec{P}_{sp} entlang der c-Achse. Entlang den Kristallachsen senkrecht dazu, a- und m-Achse (Abb. 2.2), liegt weiterhin eine Kompensation der Dipolmomente vor.

Unter semipolaren Kristallebenen werden solche verstanden, bei denen mindestens einer der Miller-Indizes h, k, i und der Miller-Index l des Bravais-Gitters nicht null ist. Bei diesen Kristallebenen, die um einen Winkel 0° $< \Theta < 90^{\circ}$ zur c-Ebene geneigt sind, ist die Polarisation redzuiert. Die spontane Polarisation steigt von GaN über InN zu AlN hin an. Die Wurtzitstruktur ist die Struktur mit der höchsten Symmetrie, die mit der Existenz spontaner Polarisation kompatibel ist [19,41].

	c_0/a_0	u_0	$P_{sp} ({\rm C/m^2})$	$ \Delta P_{sp} \ (\mathrm{mC/m^2})$
AlN	1,6190	0,380	-0,090	AlN/GaN: 55
GaN	$1,\!6336$	0,376	-0,034	GaN/InN: 7
InN	$1,\!6270$	0,377	-0.042	InN/AlN: 48

Wie die Änderung der Energielücke bei ternären Verbindungen ist auch die spontane Polarisation nichtlinear. Sie läßt sich ebenfalls mit einem parabolischen

Tab. 2.4: Gitterkonstantenverhältnis und interner Parameter eines unverspannten Wurtzitkristalls [1] und die spontane Polarisation und Polarisationsunterschiede von Nitridverbindungen, bzw. Heteroübergängen [40].



Abb. 2.6: Die Abstände zwischen den Gruppe-III- und Gruppe-V-Atomen sind unterschiedlich.

Modell

$$\vec{P}_{sp,A_xB_{1-x}N} = x\vec{P}_{sp,AN} + (1-x)\vec{P}_{sp,BN} - x(1-x)\vec{b}_{sp,A_xB_{1-x}N}$$
(2.13)

beschreiben [20], hier stehen A und B wieder für die Metalle Al, Ga und In. Dabei läßt sich der Bowingparameter \vec{b}_{sp} durch bekannte Zwischenwerte wie beispielsweise bei einem Anteil von 50 % mit

$$\vec{b}_{sp,A_xB_{1-x}N} = 2\vec{P}_{sp,AN} + 2\vec{P}_{sp,BN} - 4\vec{P}_{sp,A_{0,5}B_{0,5}N}$$
(2.14)

berechnen [20].

Bernardini et al. stellten bei der Berechnung der Zwischenwerte fest, dass die spontane Polarisation der Verbindungen aber stark von deren Struktur abhängt, d. h. ob es sich um eine geordnete oder eine zufällige Anordnung der beiden Gruppe-III-Elemente handelt [20]. Wird eine geordnete Struktur wie bei einem Kupfer-Platin-Mischkristall (CuPt) angenommen, so ergeben sich für die spontane Polarisation nicht nur Unterschiede im Betrag, sondern auch beim Vorzeichen (Abb. 2.7). Für die zufällige Anordnung berechneten Fiorentini et al. die Bowingparameter $0,019 \text{ C/cm}^2$ für Al_xGa_{1-x}N, $0,038 \text{ C/cm}^2$ für Ga_{1-x}In_xN und $0,071 \text{ C/cm}^2$ für Al_xIn_{1-x}N [42].

2.5.2 Piezoelektrische Polarisation (\vec{P}_{pz})

Treten bei den Gruppe-III-Nitriden mit Wurtzitstruktur biaxiale Verspannungen in der Basalebene auf, wie es bei den hergestellten LEDs bei Heterostruk-



Abb. 2.7: Die Nichtlinearität der spontanen Polarisation hängt bei ternären Halbleitern davon ab, ob die Anordnung der Gruppe-III-Atome zufällig oder CuPt-geordnet ist. Die gestrichelten Verbindungslinien zeigen den Verlauf nach Vegards Gesetz an. [20]

turen oder bei der Verwendung von Fremdsubstraten in dieser Arbeit angenommen wird, so können sich die Bindungslängen und Bindungswinkel ändern (vgl. Kap. 2.4). Durch Änderung des internen Parameters u und des c/a-Verhältnisses verschieben sich die Ladungsschwerpunkte weiter und es entsteht aufgrund der Dipolmomente eine makroskopische Polarisation, die piezoelektrische Polarisation \vec{P}_{pz} . Ohne äußere anliegende Felder setzt sich die gesamte makroskopische Polarisation \vec{P} aus der Summe der spontanen Polarisation im Gleichgewichtszustand \vec{P}_{sp} und der durch Verspannung hervorgerufenen, piezoelektrischen Polarisation \vec{P}_{pz} zusammen.

Die piezoelektrische Polarisation hängt von den richtungsabhängigen, piezoelektrischen Konstanten e_{ij} und den Verformungen ϵ_j ab:

$$P_i = e_{ij}\epsilon_j$$
 , $i = 1, 2, 3$ $j = 1, \dots, 6$, (2.15)

wobei wieder die Voigt-Notation verwendet wird. Da die elastische Verformung $\stackrel{\leftrightarrow}{\epsilon}$ von der Verspannung mit Gl. (2.7) abhängig ist, kann die piezoelektrische Polarisation auch in Abhängigkeit der Verspannung über den piezoelektrischen

Modul $\stackrel{\leftrightarrow}{d}$ dargestellt werden:

$$P_i = d_{ij}\sigma_j$$
 , $i = 1, 2, 3$ $j = 1, \dots, 6$. (2.16)

Aus Symmetriegründen bleiben beim Wurtzitgitter für den piezoelektrischen Tensor $\stackrel{\leftrightarrow}{e}$ fünf nichtverschwindende Komponenten übrig, von denen je zwei gleich sind [19]:

$$\vec{e} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} .$$
 (2.17)

Bei Beschränkung auf die üblicherweise genutzte $\langle 0001 \rangle$ -Wachstumsrichtung für GaN ist die spontane Polarisation entlang der $\langle 0001 \rangle$ -Richtung = z-Achse

$$\vec{P}_{sp,z} = P_{sp} \cdot \hat{z}$$

und die piezoelektrische Polarisation kann bei symmetrischer Verformung in der Basalebene mit $\epsilon_1 = \epsilon_2$ durch

$$\vec{P}_{pz,z} = e_{33}\epsilon_3 + 2e_{31}\epsilon_1 \tag{2.18}$$

beschrieben werden. Die dritte unabhängige Komponente e_{15} des piezoelektrischen Tensors beschreibt die Polarisation durch Scherspannung, die hier nicht berücksichtigt wird. Die Änderungen der Gitterabstände durch Verformung beeinflussen dabei ebenfalls den internen Parameter u und damit die Änderung der Ladungsschwerpunkte zwischen den Gruppe-III- und Stickstoffatomen. Dies kann bei der Berechnung der Tensorkomponenten durch Zufügen eines Terms berücksichtigt werden, der die Änderung durch den Parameter u beschreibt [1]:

$$e_{31} = \frac{\partial P_3}{\partial \epsilon_1} \bigg|_u + \frac{\partial P_3}{\partial u} \bigg|_{\epsilon_1} \frac{du}{d\epsilon_1}$$
(2.19)

und

$$e_{33} = \left. \frac{\partial P_3}{\partial \epsilon_3} \right|_u + \left. \frac{\partial P_3}{\partial u} \right|_{\epsilon_3} \frac{du}{d\epsilon_3} \quad . \tag{2.20}$$

Der erste Term beschreibt dabei jeweils die Änderung aufgrund der Gitterkonstantenänderung, der zweite Term die Änderung aufgrund der abhängigen Ladungsschwerpunktverschiebung. Diese läßt sich mit der dimensionslosen, sogenannten Born'schen Ladung

$$Z^* = \frac{\sqrt{3} a_0^2}{4 e} \frac{\partial P_3}{\partial u} \tag{2.21}$$

2. Kristallstruktur und Eigenschaften

	\mathbf{Z}^*	$e_{33} ({\rm C/m^2})$	$e_{31} \; ({\rm C/m^2})$
AlN	$-2,\!65$	1,50	$-0,\!62$
GaN	$-2,\!67$	$0,\!67$	$-0,\!37$
InN	-3,10	0,81	-0,45

Tab. 2.5: Dynamische Born-Ladung und piezoelektrische Konstanten nach [40].

einfach beschreiben [1]. Die Komponenten des makroskopischen piezoelektrischen Tensors können dann mit

$$a_0 \frac{du}{da} = \frac{du}{d\epsilon_1}$$
, $c_0 \frac{du}{dc} = \frac{du}{d\epsilon_3}$ und $\frac{\partial P_3}{\partial u} = \frac{4e}{\sqrt{3}a_0^2} Z^*$ (2.22)

als

$$e_{33} = c_0 \frac{\partial P_3}{\partial c} + \frac{4 e c_0}{\sqrt{3} a_0^2} Z^* \frac{\partial u}{\partial c}$$
(2.23)

und

$$e_{31} = \frac{a_0}{2} \frac{\partial P_3}{\partial a} + \frac{2e}{\sqrt{3}a_0} Z^* \frac{\partial u}{\partial a}$$
(2.24)

dargestellt werden [1].

Weder die piezoelektrischen Konstanten noch die makroskopische Polarisation können direkt bestimmt werden. Jedoch läßt sich die Differenz in der Polarisation zwischen zwei Zuständen des Kristalls ermitteln, die durch eine adiabatische Transformation ineinander überführt werden können. Hierbei muss das System zu jeder Zeit als isoliert behandelt werden können [43]; das heißt, die angrenzenden Schichten dürfen die Polarisation nicht beeinflussen. Bernardini et al. haben vorgeschlagen, die Polarisationsdifferenz mit Hilfe der Berechnung der geometrischen Quantenphasen, der sogenannten "Berry-Phasen", zu berechnen [1]. Diese Methode wurde 1993 von King-Smith, Vanderbilt und Resta vorgestellt [43]. Damit wurden die piezoelektrische Polarisation und die piezoelektrischen Konstanten von Bernardini et al. bestimmt [40]. Um die spontane Polarisation zu berechnen, haben sie die Differenz zu einer unverspannten Zinkblende-Struktur mit Inversionssymmetrie ohne spontane Polarisation bestimmt. Die berechneten Daten gibt Tab. 2.5 wieder.

Aus Abb. 2.8 geht hervor, dass die piezoelektrischen Konstanten der Nitride deutlich größer sind als die der Arsenide und Phosphide. Die Werte von AlN sind sogar größer als die von ZnO mit $e_{33} = 0,89C/m^2$ und $e_{31} = -0,51C/m^2$, und damit die höchsten Werte der tetraedrisch angeordneten Halbleiter. Auch



Abb. 2.8: Die Piezokonstanten der Gruppe-III-Nitride [40] sind deutlich größer als die der Arsenide und Phosphide [1].

die spontane Polarisation der Nitride ist sehr groß, für AlN sogar nur 3-5 mal kleiner als die spontane Polarisation typischer ferroelektrischer Perovskite [1].

Da die Gitterkonstanten von AlGaN kleiner sind als die von GaN (Abb. 2.4), ist bei AlGaN-Schichten auf einem GaN-Puffer die Verspannung tensil. Die piezoelektrische Polarisation zeigt in die gleiche Richtung wie die spontane Polarisation (Abb. 2.9 (a)) [44]. Die Verspannung bei GaInN auf GaN ist kompressiv, da die Gitterkonstanten von GaInN größer sind als die von GaN (Abb. 2.4). Die spontane und die piezoelektrische Polarisation sind entgegen gerichtet orientiert (Abb. 2.9 (b)) [44]. Es ist dabei zu beachten, dass die Richtung der Polarisation von der Polarität des Kristalls abhängt. In Abb. 2.9 liegt Ga-Polarität vor, wie sie bei der Herstellung von GaN-Schichten mit MOVPE nahezu ausschließlich entsteht [45].

2.5.3 Piezoelektrische Felder

In der Elektrostatik hängt das elektrische Feld \vec{E} von der dielektrischen Verschiebung \vec{D} , der makroskopischen Polarisation \vec{P} und der elektrischen Feldkonstante ε_0 ab:

$$\vec{E} = \frac{\vec{D} - \vec{P}}{\varepsilon_0} \quad , \tag{2.25}$$



Abb. 2.9: Bei AlGaN auf GaN ist die Verspannung tensil, \vec{P}_{sp} und \vec{P}_{pz} wirken in die gleiche Richtung (a). Bei GaInN auf GaN liegt kompressive Verspannung vor, \vec{P}_{sp} und \vec{P}_{pz} wirken entgegengesetzt (b) [44].

mit der gesamten Polarisation $\vec{P} = \vec{P}_{sp} + \vec{P}_{pz}$. Mit den Gleichungen (2.10), (2.12) und (2.18) gilt für das nur durch die piezoelektrische Polarisation induzierte Feld \vec{E}_{pz} somit:

$$\vec{E}_{pz} = \frac{2}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \frac{a - a_0}{a_0} \left(e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \quad . \tag{2.26}$$

In Volumenkristallen liegt kein makroskopisches Feld an, da durch das statische Feld ein Strom thermisch generierter, intrinsischer Ladungsträger flösse, der zum Abbau des Feldes führte. Die dielektrische Verschiebung und das durch die spontane Polarisation generierte Feld kompensieren sich im Volumenkristall. Bei den für LEDs notwendigen Heterostrukturen ist dies jedoch nicht der Fall. Hier wirkt sich das anliegende Feld auf die Strukturen sehr stark aus und beeinflusst die Eigenschaften der LED-Strukturen negativ.

Wie in Kapitel 2.5.1 beschrieben, ist die Bindung entlang der c-Achse bei den Nitriden länger als die übrigen drei Bindungen (Abb. 2.6). Die spontane Polarisation wirkt deshalb entlang dieser Richtung [1], die piezoelektrische Polarisation hängt von der Richtung der wirkenden Verspannung und resultierenden Verformung ab. Berechnet man die anliegende Spannung in Abhängigkeit des Kippwinkels Θ einer Kristallebene zur c-Achse, so läßt sich ein winkelabhängiges Piezofeld dieser Kristallebene berechnen [2]. In der Literatur gibt es große Unterschiede zu den benötigten Parametern, die beispielsweise in [15] oder [39] zusammengefasst sind. Feneberg et al. haben das winkelabhängige Piezofeld mit verschiedenen Literaturwerten berechnet und die Ergebnisse verglichen (Abb. 2.10). Die von Bernardini et al. berechneten Werte aus [46] stimmen dabei mit dem von ihnen durchgeführten Experiment am besten überein [3]. Sie fanden experimentell eine Piezofeldstärke von -1,9 MV/cm für die polare {0001}-Ebene und eine Piezo-



Abb. 2.10: Die Piezofeldstärke hängt über die Verspannung von der Neigung zur c-Achse ab. Die Kennlinien wurden für 10 % In (offene Symbole) und 15 % In (ausgefüllte Symbole) mit verschiedenen Werten aus [46] (Quadrate), [2] (Dreiecke) und [47] (Kreise) berechnet [3].

feldstärke von -0.1 MV/cm für die {1101}-Ebene [3], welche zur {0001}-Ebene um $\Theta = 62^{\circ}$ geneigt ist (durch die gestrichelte Linie in Abb. 2.10 gekennzeichnet). Es ist deutlich zu erkennen, dass das elektrische Feld entlang Kristallrichtungen, die zur *c*-Achse um den Winkel Θ geneigt sind, deutlich geringer ist, für Kristallrichtungen senkrecht zur *c*-Achse sogar zu Null wird. Bereits bei Winkeln um 60° zeigt sich eine deutliche Reduktion des Piezofeldes. Kristallebenen, die um diesen Winkel zur *c*-Ebene geneigt sind, entstehen bei der selektiven Epitaxie (vgl. Kap. 5.2). Werden auf solche Ebenen LED-Strukturen abgeschieden, wird eine verbesserte Effizienz erwartet, insbesondere für dickere Quantenfilme und höheren In-Anteil. Dass der Ansatz der Abscheidung von LED-Strukturen auf diesen mit selektiver Epitaxie hergestellten semipolaren Kristallebenen sehr viel versprechend ist, zeigt diese Arbeit.

Kapitel 3

GaInN-Leuchtdioden

3.1 Grundlagen zu Leuchtdioden

In diesem Kapitel werden die Grundlagen zu Leuchtdioden kurz wiederholt. Leuchtdioden bestehen im einfachsten Fall aus einem als abrupt angenommenen Übergang zwischen n-dotiertem Halbleiter mit der Donator-Konzentration N_D und einem p-dotierten Halbleiter mit der Akzeptor-Konzentration N_A . Bei vollständiger Ionisierung der Dotierstoffatome beträgt die Anzahl der freien Ladungsträger $n = N_D$ für die Elektronen und $p = N_A$ für die Löcher. Werden die Halbleiter zusammengebracht, so gleichen sich im thermischen Gleichgewicht die Ferminiveaus an (Abb. 3.1).

Durch die unterschiedlichen Konzentrationen von Elektronen und Löchern kommt es zu Diffusionsströmen von Elektronen in das p-dotierte Gebiet und von



Abb. 3.1: Bandverlauf der Energiebänder (E_L =Leitungsband, E_F =Ferminiveau, E_V =Valenzband) eines pn-Übergangs eines Halbleiters ohne anliegende äußere Spannung [48].



Abb. 3.2: Bandverlauf eines pn-Übergangs eines Halbleiters unter Spannung in Flussrichtug: Durch strahlende Rekombination von Elektronen und Löchern werden Photonen der Engergie $h\nu$ frei [48].

Löchern in das n-dotierte Gebiet, wo sie rekombinieren. Gleichzeitig wird durch die verbleibenden ionisierten Donator- und Akzeptorrümpfe ein elektrisches Feld aufgebaut, welches dem Diffusionsstrom entgegenwirkt. Wird an den pn-Übergang eine Spannung in Flussrichtung angelegt, so wird die Potentialbarriere herabgesetzt und es werden Elektronen in das p-Gebiet und Löcher in das n-Gebiet injiziert; es fließt ein Strom. In diesen Gebieten stellen die injizierten Ladungsträger Minoritäten dar, die nach der Lebensdauer der Elektronen τ_n , bzw. der Löcher τ_p innerhalb der Minoritätsladungsträgerdiffusionslänge (L_n, L_p) von wenigen μ m mit den Majoritätsladungsträgern spontan rekombinieren. Bei indirekten Halbleitern erfolgt die Rekombination nichtstrahlend, während bei direkten Halbleitern die Rekombination überwiegend strahlend unter Aussendung eines Photons der Energie $h\nu$ erfolgt (Abb. 3.2). Dabei bezeichnet h das Planck'sche Wirkungsquantum und ν die Frequenz des emittierten Lichts, die zur Wellenlänge λ umgekehrt proportional ist: $\nu = c_0/\lambda$, mit der Vakuumlichtgeschwindigkeit c_0 als Proportionalitätskonstante.

Um die strahlende Rekombination zu erhöhen, werden Heterostrukturen verwendet. Ist dabei ein Halbleitermaterial mit geringerer Bandlücke zwischen zwei Halbleitermaterialien mit höherer Bandlücke eingebettet, so wird dies eine Doppelheterostruktur genannt. Die Energiebänder der äußeren Halbleiter stellen dabei Barrieren für die Ladungsträger dar, so dass sie nicht mehr in das andere Gebiet diffundieren können (Abb. 3.3). Die Dicke der Halbleiterschicht mit der geringeren Bandlücke ist dabei kleiner als die Diffusionslänge der Ladungsträger. Dadurch wird die Dichte der angeregten freien Ladungsträger stark erhöht und die Lebensdauer reduziert, wodurch sich die Rekombinationsrate R erhöht:

$$R \propto n \cdot p$$
 . (3.1)

Die Wahrscheinlichkeit für strahlende Rekombination hängt von den Lebensdauern der Ladungsträger ab und wird durch die interne Quanteneffizienz

$$\eta_{int} = \frac{\tau_r^{-1}}{\tau_r^{-1} + \tau_{nr}^{-1}} \tag{3.2}$$

angegeben, wobei τ_r die Lebensdauer der Ladungsträger bei strahlendender Rekombination und τ_{nr} bei nichtstrahlender Rekombination beschreibt. Die Quanteneffizienz steigt, wenn die Lebensdauer der strahlenden Rekombination klein ist. Dünne Schichten für das Material mit der kleineren Bandlücke reduzieren die Lebensdauer der Ladungsträger und fördern wegen Gl. (3.1) die strahlende Rekombination.

Wird die Schichtdicke des Materials mit geringerem Bandabstand sehr klein, so dass sie in dem Bereich der DeBroglie-Wellenlänge von wenigen nm liegt, so tritt eine Quantisierung der Energiezustände ein. Die Beweglichkeit der Ladungsträger wird auf zwei Dimensionen beschränkt. Das bedeutet, dass die Ladungsträger sich in x- und y-Richtung noch frei bewegen können, die Energiezustände aber nur noch diskrete Werte annehmen können (Abb. 3.4). Dies wird dann als Quantenfilm bezeichnet. Weitere Einschränkungen der Beweglichkeitsrichtungen führen dann zu Quantendrähten, bei denen die Beweglichkeit nur noch in einer Richtung, oder zu Quantenpunkten, bei denen gar keine Beweglichkeit mehr



Abb. 3.3: Bandverlauf einer Doppelheterostruktur unter Spannung in Flussrichtug: Durch die Barrieren erhöht sich die Ladungsträgerdichte und damit die strahlende Rekombination [48].


Abb. 3.4: Je dünner die Schicht zwischen den Barrieren, desto stärker ist die Quantisierung [47].

möglich ist. Werden die Barrieren an den Seiten des Quantenfilmes als unendlich hoch angenommen, so können die Energieniveaus für das Leitungs- und das Valenzband analytisch berechnet werden. Dabei gibt der Index n die Ordnung des Energiezustandes an:

$$E_n = \frac{\hbar}{2m^*} \left(\frac{n\pi}{L_{qw}}\right)^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$
 (3.3)

Hierbei bezeichnet $\hbar = h/2\pi$ das normierte Planck'sche Wirkungsquantum, m^* die effektive Masse, die für Elektronen und Löcher unterschiedlich ist, und L_{qw} die Dicke des Quantenfilmes. Da die Barrieren jedoch endlich hoch sind kann Gl. (3.3) bei sehr hohen Barrieren jedoch nur als Nährung verwendet werden, für genauere Berechnungen müssen andere Methoden herangezogen werden, auf die hier nicht weiter eingegangen werden soll.

Die Emissionsenergie des Quantenfilmes und damit die Emissionswellenlänge hängt somit nicht nur vom Halbleiter, sondern auch von der Dicke ab. Ein sehr dünner Quantenfilm hat eine stärkere Quantisierung zur Folge (Abb. 3.4), was zu einer größeren Übergangsenergie und damit zu einer kürzeren Wellenlänge führt. Für längere Wellenlängen sind dann relativ hohe In-Anteile erforderlich. In Kap. 2.3 wurde bereits erwähnt, dass hohe Anteile an In zu Problemen führen können. Zusätzlich führt ein höherer In-Anteil zu einer stärkeren Gitterverspannung und somit entlang der $\langle 0001 \rangle$ -Kristallorientierung zu einem stärkeren Piezofeld. Um den hohen In-Anteil zu vermeiden böte sich für die längerwellige Emission an, dickere Quantenfilme abzuscheiden. Aufgrund der in Gruppe-III-Nitriden anliegenden Piezofelder wirken sich aber gerade breite Quantenfilme negativ auf die Effizienz aus (vgl. Kap. 3.3). Für längerwellige Emission ist ein deutlich geringeres Piezofeld daher in jeder Hinsicht von Vorteil.

3.2 GaInN-Leuchtdioden

Mit dem Materialsystem AlGaInN sind theoretisch LEDs im gesamten sichtbaren Spektralbereich möglich. Für LEDs können Doppelheterostrukturen aus GaN mit einem höheren Bandabstand als Barrieren und $Ga_xIn_{1-x}N$ als aktive Schicht mit niedrigerem Bandabstand hergestellt werden. Dabei bestimmt der Anteil x die Bandlücke der aktiven Schicht, wie aus Abb. 2.4 und Gl. (2.3) ersichtlich. Ein höherer In-Anteil der Quantenfilme mit kleinerer Bandlücke zwischen GaN-Schichten führt zu höheren Barrieren für die Ladungsträger und somit zu einem besseren Ladungsträgereinschluß und zu längeren Wellenlängen. Hohe In-Gehalte führen bislang jedoch aufgrund von instabilen Mischungsverhältnissen zu In-Clustern [33] und hohen Verspannungen im Kristall, was die in Kap. 2.5 beschriebenen Pizeofelder und deren in Kap. 3.3 beschriebene Auswirkungen verstärkt.

3.3 Auswirkungen der Piezofelder auf AlGaInN-Heterostrukturen

Wie in Kapitel 2.5 bereits beschrieben, sind bei den Nitrid-Halbleitern durch die spontane und piezoelektrische Polarisation starke elektrische Felder vorhanden. Dadurch entstehen an den Grenzflächen hohe Oberflächenladungen. In Volumenkristallen werden diese Oberflächenladungen und das interne Feld durch freie Ladungsträger und Oberflächenadsorbate kompensiert.

Optoelektronische Bauelemente bestehen aber nicht aus Volumenkristallen, sondern meist aus Doppelheterostrukturen, um die strahlende Rekombination zu erhöhen, wie in Kapitel 3.1 beschrieben. Durch die unterschiedlichen Gitter der Quantenfilme und Barrieren kommt es zu starken Verspannungen in der Struktur, die starke Piezofelder zur Folge haben. In diesen Strukturen kann die Kompensation der Felder nicht wie im Volumenkristall erfolgen.

Für $GaN/Ga_xIn_{1-x}N/GaN$ -Doppelheterostrukturen werden mit zunehmenden In-Anteil die Gitter der Schichten stärker kompressiv verspannt. Damit nimmt auch die piezoelektrische Polarisation zu. Für GaN und InN beträgt der



Abb. 3.5: Durch die anliegenden Grenzflächenladungen zur Abschirmung des elektrischen Feldes verkippen die Bänder, die Ladungsträger werden räumlich getrennt, die Ladungsträgerlebensdauer steigt und die Rekombinationsrate sinkt [47].

Unterschied der Gitterkonstanten $\Delta a \approx 10\%$ (Tab. 2.1), der Unterschied in der spontanen Polarisation beträgt $\approx 23\%$ (Tab. 2.4). Durch die hohe Gitterfehlanpassung dominiert bei GaN/GaInN-Heterostrukturen die piezoelektrische Polarisation. Da die totale Polarisation der beiden angrenzenden Schichten i. A. nicht gleich ist, kommt es zu einer abrupten Änderung der Polarisation an der Grenzfläche, was zu einer gebundenen Flächenladung Q_{GF} führt. Diese läßt sich aus den Polarisationsunterschieden der beiden Schichten berechnen:

$$Q_{GF,AN/A_xB_{1-x}N} = \vec{P}_{AN} - \vec{P}_{A_xB_{1-x}N}$$

= $(\vec{P}_{sp,AN} + \vec{P}_{pz,AN}) - (\vec{P}_{sp,A_xB_{1-x}N} + \vec{P}_{pz,A_xB_{1-x}N}).$ (3.4)

Dabei stehen die Platzhalter A und B wieder für die Metalle Aluminium, Gallium und Indium. Bei pseudomorph verspannten GaN/Ga_xIn_{1-x}N Übergängen liegt der Betrag der Grenzflächenladungen $|Q_{GF}/q|$ im Bereich von 10¹³ bis 10^{14} cm^{-2} [47], wobei $q = -1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ die Elementarladung ist. Bei einer Heterostruktur wechselt dabei das Vorzeichen der Grenzflächenladung (Abb. 3.5).

Die Grenzflächenladungen führen zu einem elektrischen Feld und die Energiebänder werden verzerrt. Es kommt zu einer räumlichen Trennung der freien Ladungsträger im Quantenfilm, um die Grenzflächenladungen zu kompensieren.



Abb. 3.6: Die gemessene Lebensdauer der Ladungsträger (Quadrate) steigt mit zunehmender Quantenfilmdicke durch den Einfluss des Piezofeldes (berechnet, durchgezogene Linie), während die Übergangsenergie (Punkte) sinkt [49].

Durch die räumliche Trennung überlappen sich die Maxima der Wellenfunktionen von Elektronen und Löchern nicht mehr (Abb. 3.5) und die strahlende Rekombination nimmt stark ab. Dadurch erhöht sich die Lebensdauer der Ladungsträger deutlich. Da die räumliche Trennung der Ladungsträger auch von der Dicke der Quantenfilme abhängt (Abb. 3.5), zeigt sich mit zunehmender Quantenfilmdicke von z. B. 1 zu 8 nm eine Zunahme der Ladungsträgerlebensdauer um 2 Größenordnungen (Abb. 3.6) [49], was sich in einer reduzierten Effizienz auswirkt. Durch die Verkippung der Energiebänder nimmt auch der Bandabstand ab, was als Quantum Confined Stark Effect (QCSE) bezeichnet wird [47] (Abb. 3.5). Die strahlende Rekombination wird zu längeren Wellenlängen hin verschoben. Wird die Anzahl der freien Ladungsträger erhöht, z. B. durch Erhöhen des Stroms in Flussrichtung der Diode, werden die Felder teilweise abgeschirmt, was sich in einer Verschiebung zurück zu kürzeren Wellenlängen auswirkt.

Durch die Auswirkungen der Polarisation bei den Gruppe III-Nitriden wird die strahlende Rekombination und damit die Effizienz von LEDs reduziert. Eine Elimination oder zumindest Reduktion der Polarisation kann die Effizienz von GaN/Ga_xIn_{1-x}N-LEDs daher wesentlich verbessern. Es ist daher wichtig, eine Lösung für das Polarisationsproblem zu finden. Wie Abb. 2.10 in Kap. 2.5.3 zeigt, ist dies für Kristallebenen senkrecht zur c-Ebene möglich, bzw. für Kristallebenen, die dazu um den Winkel Θ geneigt sind.

3.4 Einflussparameter auf die Emissionswellenlänge

Hier wird noch einmal zusammengefasst, was die Emissionswellenlänge der LEDs beeiflusst:

- In-Anteil in den GaInN-Quantenfilmen: ein höhere In-Anteil bewirkt durch einen geringeren Bandabstand eine längere Wellenlänge.
- Quantisierung der Energiezustände: je dünner der Quantenfilm, desto stärker ist die Quantisierung und desto kürzer ist wegen des größeren Abstandes des Energieüberganges die Wellenlänge.
- QCSE: Verkippung der Energiebänder durch das piezoelektirsche Feld führt zu einer geringeren Energielücke und damit zur einer längeren Wellenlänge. Dabei ist zu beachten, dass ein höherer In-Anteil durch die stärkere Verspannung eine höhere Feldstärke und damit eine stärkere Verkippung der Bänder zur Folge hat.

Mit Hilfe der Bestimmung der Emissionswellenlänge soll unter anderem später das reduzierte Piezofeld nachgewiesen werden.

Kapitel 4

Epitaxie

Das Wort Epitaxie setzt sich zusammen aus der griechischen Vorsilbe "epi", die "darauf, darüber" bedeutet und "taxia", was ebenfalls aus dem Griechischen kommt und für "das Anordnen" steht [50]. In der Halbleitertechnologie bedeutet es die Kristallabscheidung einer Kristallart auf einem gleichartigen anderen Kristall. Epitaxie wird zur Abscheidung von einkristallinen Halbleitermaterialien auf Substrate verwendet, wobei die Substrate meist aus dem gleichen Halbleitermaterial bestehen. Beim Abscheiden von gleichen Halbleitermaterialien aufeinander wird dies auch als Homoepitaxie bezeichent, vom griechischen Wort "homós", was "gleich, gleichartig, entsprechend" bedeutet [50]. Bei GaN werden häufig andere Substrate verwendet, da diese billiger als GaN-Substrate sind. Die Kristallabscheidung von unterschiedlichen Halbleitermaterialien wird entsprechend als Heteroepitaxie bezeichnet, von dem griechischen Wort "héteros", was "der andere, von anderer Art" bedeutet [50].

4.1 Epitaxieverfahren für optoelektronische Bauelemente

Für die Herstellung von elektronischen und optoelektronischen Bauelementen sind einkristalline Halbleiterschichten von sehr guter Qualität notwendig. Um dies zu erreichen, ist Epitaxie erforderlich. Damit möglichst wenig Fremdatome in den Kristall eingebaut werden, ist eine hohe Reinheit der Quellmaterialien notwendig. Da die Schichten z. T. sehr dünn sind, ist die Kontrolle der Schichtdicke sehr wichtig. Auch müssen die Übergänge von unterschiedlichen Halbleitermaterialien

4. Epitaxie

sehr abrupt sein. Für lichtemittierende Bauelemente ist das Abscheiden von wenigen nm dünnen Quantenfilmen notwendig, um die Ladungsträger in diesem Bereich einzufangen und die Effizienz der strahlenden Rekombination zu verbessern (Kap. 3.1). Hierfür eignen sich die Molekularstrahlepitaxie (*engl. molecular beam epitaxy, MBE*) und die metallorganische Gasphasen-Epitaxie (*engl. metalorganic vapor phase epitaxy, MOVPE*). In den folgenden Unterkapiteln 4.1.1.2 und 4.1.2 werden die Verfahren prinzipiell vorgestellt. Die MBE ist hier der Vollständigkeit wegen nur kurz beschrieben, dieses Verfahren wird aufgrund der geringeren Eignung zur selektiven Epitaxie nicht verwendet. Die verwendete MOVPE wird etwas ausführlicher beschrieben.

4.1.1 Gasphasen-Epitaxie

Bei der Gasphasen-Epitaxie (*engl. vapor phase epitaxy, VPE*) handelt es sich um einen Ungleichgewichtsprozess, der durch Übersättigung der Gasphase im Reaktor erreicht wird. Um den thermodynamischen Gleichgewichtszustand herzustellen, kann ein Festkörper aus der Gasphase abgeschieden werden [51]. Deshalb wird kein Ultrahochvakuum benötigt, stattdessen kann das Kristallwachstum bei moderaten Drücken von 10^3 bis 10^5 Pa stattfinden.

Für die Elemente aus der V. Hauptgruppe stehen gasförmige Quellen zur Verfügung, bei denen sich NH_3 für die Gruppe-III-Nitride als am häufigsten verwendetes Quellmaterial durchgesetzt hat [18, 52, 53]. Als Quelle für die Metalle stehen aber keine gasförmigen Verbindungen zur Verfügung.

4.1.1.1 Hydrid-Gasphasen-Epitaxie

Bei der klassischen VPE werden die Metalle der III-V-Verbindungshalbleiter meist als Feststoffe verwendet. Chlorwasserstoff wird bei 800 - 900°C über das flüssige Metall geleitet, dabei reagieren die Ausgangsstoffe zu gasförmigen Metall-Chloriden und Wasserstoff, die zum Substrat geleitet werden. Dadurch ist die VPE wenig flexibel und es lassen sich nur unzureichend abrupte Heteroübergänge realisieren. Abhilfe schafft hier die MOVPE (Kap.4.1.1.2).

Bei der Hydrid-Gasphasen-Epitaxie werden für die Nitridhalbleiter GaCl und Ammoniak (Hydrid-N-Quelle) bei 1000 - 1100 °C über dem Fremdsubstrat zusammengeführt, wo sie auf dem Substrat zu GaN reagieren. Die gasförmigen Abfallprodukte GaCl₃ und Wasserstoff werden abtransportiert. Die HVPE zeichnet sich durch hohe Wachstumsraten bis zu 250 μ m/h aus [54]. Deshalb eignet



Abb. 4.1: Schematische Darstellung eines Gasmischsystems für eine MOVPE-Anlage [59].

sich die HVPE weniger für die Herstellung von optoelektronischen Bauelementen, wird aber zur Herstellung von GaN-Substraten und dicken GaN-Pufferschichten (GaN-Quasi-Substate) als Grundlage von optischen Bauelementen auf GaN-Basis verwendet. Übersichtsartikel zur HVPE sind beispielsweise [55–57].

4.1.1.2 Metallorganische Gasphasen-Epitaxie

Bei der MOVPE handelt es sich um eine Weiterentwicklung der Gasphasen-Epitaxie [18]. Manasevit stellte diese Methode 1968 zur direkten Abscheidung von GaAs auf isolierenden Oxiden vor [58].

Bei der MOVPE kann das Problem von nicht-gasförmigen Metall-Quellen der VPE wie folgt gelöst werden: Die Gruppe-III-Elemente werden aus metallorganischen Verbindungen bereitgestellt, woher der Name der MOVPE kommt. Dies sind meistens Trimethyl- (TMAl, TMGa und TMIn) und Triethylquellen (TEAl, TEGa und TEIn). Durch den hohen Dampfdruck der flüssigen oder festen Metallorganika ist es möglich, die Komponenten mit Trägergasen wie Stickstoff oder Wasserstoff als gesättigten Dampf in den Reaktor zu transportieren. Für die kontrollierte Zuleitung der Gase in den Reaktor wird ein Gasmischsystem verwendet (Abb. 4.1, schematischer Aufbau). Die Gasflüsse werden über elektronische Massenflussregler (engl. mass flow controller, MFC) eingestellt.

4. Epitaxie

Wegen der höheren Dampfdrücke und der guten Stabilität gegenüber Alterungserscheinungen werden überwiegend die Trimethylverbindungen eingesetzt [53]. Die Metall-Kohlenstoffbindung ist bei den Ethylgruppen schwächer als bei den Methylgruppen, weshalb sie bei höheren Temperaturen gegenüber den Methylgruppen mehr zu parasitären Reaktionen im Reaktor neigen. Der Kohlenstoffeinbau ist jedoch bei Verwendung von Ehtylgruppen durch einen anderen Reaktionsmechanismus auch geringer [60]. Auch das für die p-Dotierung des GaN verwendete Magnesium wird aus einer metallorganischen Quelle bereitgestellt. Hierzu wird Bis(cyclopentadienyl)magnesium (Cp₂Mg) verwendet.

Wegen der hohen Bindungsenergie des N_2 kann der molekulare Stickstoff nicht verwendet werden, da die Wachstumstemperaturen bis 1200 °C für eine pyrolytische Zerlegung nicht ausreichen. Der Ammoniak (NH₃) hat sich als das beste Quellenmaterial herausgestellt. Mögliche Alternativen sind in [60] beschrieben.

Für die n-Dotierung mit Silizium steht das Gas Silan (SiH₄) zur Verfügung, das wegen seiner hohen Dotiereffizienz als Gemisch mit H₂ vorliegt. Bei den durchgeführten Versuchen ist die Konzentration 100 ppm SiH₄ in H₂ (ppm = parts per million) [53].

Exemplarisch ist hier die verwendete MOVPE-Anlage 200/4 RFS der Firma Aixtron beschrieben, bei der es sich um ein System handelt, in dem auf ein 2-Zoll-Substrat Material abgeschieden werden kann (Ein-Scheiben-Anlage, engl. single wafer reactor). Es gibt auch MOVPE-Anlagen, in denen auf mehrere Substrate gleichzeitig abgeschieden werden kann (Mehr-Scheiben-Anlage, engl. multi wafer reactor). Für die Herstellung der LED-Strukturen wurde diese Anlage verwendet, weil sie gegenüber der anderen verfügbaren Epitaxie-Anlage AIX 200RF (ebenfalls von der Firma Aixtron) eine geringere thermische Masse des Systems besitzt und so schnellere Änderungen der Temperatur möglich sind [61]. Schnelle Temperaturänderungen spielen insbesondere bei dem aktiven Bereich aus Quantenfilmen und Barrieren eine wichtige Rolle, damit die Ubergänge abrupt und somit die Energiebarrieren möglichst steil sind, um die Ladungsträger effizient einzuschließen. Die Anlage arbeitet bei Drücken zwischen 10³ und 10⁴ Pa. Diese Anlagetypen werden als Niederdruck-MOVPE (engl. low pressure, LP), Anlagen mit Druckbereichen um 10⁵ Pa werden als Atmosphärendruck-MOVPE bezeichnet. Für eine laminare Strömung und die Vermeidung von Verwirbelungen ist es wichtig, dass die Gesamtströmung im Reaktor konstant bleibt. Dazu werden bei Änderung der Prozessgasmenge nicht zum Prozess beitragende Inertgase (Dummy-Quellen: N₂, H₂) über das Gasmischsystem in den Reaktor geleitet. Auch sind abrupte Zu- und



4.1 Epitaxieverfahren für optoelektronische Bauelemente

Abb. 4.2: Schematische Darstellung eines Reaktors einer MOVPE-Anlage [53].

RF-Spule

Strahlreaktor

Drehteller

Abschaltung der einzelnen Quellengase möglich, indem sie über den Run/Vent-Ventilblock in den Reaktor oder daran vorbei geleitet werden. Allen Quellgasen außer dem Ammoniak werden noch zusätzlich Inertgase (N_2, H_2) zugeführt, um sie bei geringen Gasflüssen schneller in den Reaktor zu transportieren (Push-Leitung, Abb. 4.1).

Der zylindrische Horizontalreaktor besteht aus Stahl, in dessen Inneren sich die auswechselbare Reaktorkammer (Liner) aus Quarzglas mit rechteckigem Querschnitt, der Suszeptor mit dem drehbaren Substratteller und eine Hochfrequenz-Spule (engl. radio frequency, RF) befinden (Abb. 4.2). Durch den rechteckigen Querschnitt des Liners wird über die Breite des Suszeptors eine homogene Gasströmung erreicht. Der Suszeptor und der Drehteller bestehen aus mit Siliziumcarbid beschichtetem Graphit. Durch Absorption der RF-Leistung des Graphit werden der Suszeptor und der Drehteller geheizt. Da nur Drehteller und der Suszeptor geheizt werden, wird eine Aufheizung der Reaktorwände vermieden und es werden parasitäre Abscheidungen verringert. Die Temperatur des Substrates wird mit einem Pyrometer gemessenen, welches sich unter dem Suszeptor befindet. In der Gasphase finden teilweise Zerlegungsprozesse, aber auch parasitäre Reaktionen statt, wodurch es zu einer Deposition dieser entstandenen Verbindungen an der Reaktorwand kommt. Um das zu verhindern, werden die Quellgase der Gruppe-III- und Gruppe-V-Elemente erst im Reaktor in der Nähe des Suszeptors zusammengeführt. Dies ist durch getrennte Zuleitungen der Gase und durch eine Teilerplatte im Liner möglich. Über eine Drehschieberpumpe mit Regelventil wird der Reaktordruck eingestellt.

Für das kristalline Abscheiden von Feststoffen müssen zunächst die gasförmi-

4. Epitaxie

gen Reaktionskomponenten zur Substratoberfläche transportiert werden. Die Quellmaterialien werden in der Nähe der Substratoberfläche thermisch und teilweise katalytisch zerlegt. Die freiwerdenden Atome diffundieren dann dorthin und werden adsorbiert. Durch Diffusionsvorgänge an der Oberfläche und Reaktionen mit der Substratoberfläche bilden sich Nukleationskeime. Werden die parasitären Reaktionen und Zwischenprodukte vernachlässigt, läßt sich der Abscheidevorgang des Festkörpers aus der Gasphase stark vereinfacht als

$$[R_3M]_{gas} + [NH_3]_{gas} \longrightarrow [MN]_{solid} + [3RH]_{gas}$$

$$(4.1)$$

beschreiben. Hier bezeichnet M das Gruppe-III-Atom, R das organische Radikal des metallorganischen Moleküls, N das Stickstoff-Atom und H das Wasserstoffatom des Ammoniakgases. Da die thermische Zerlegung von NH₃ durch die hohen Bindungskräfte der N-H-Bindung schlecht ist, wird ein Überangebot an Ammoniak in den Reaktor geleitet, damit genug atomarer Stickstoff zur Verfügung steht.

Die Atome werden dann bevorzugt an Stufen und Kanten bereits vorhandener Kristallstrukturen eingebaut. Die überflüssigen Reaktionsprodukte und Atome, die nicht in den Kristall eingebaut werden können, desorbieren von der Substratoberfläche und werden durch den Gasfluss abtransportiert.

Einen großen Einfluss auf die Abscheiderate hat dabei die Temperatur. Bei relativ niedrigen Substrattemperaturen wird die Rate von der Geschwindigkeit der Grenzflächenreakionen bestimmt (kinetisch limitiertes Wachstum, Abb. 4.3). Die Temperatur reicht nicht aus, um alle Quellgase vollständig zu zerlegen. Durch die geringe Diffusion der wenigen adsorbierenden Atome an der Oberfläche kann es anstelle eines homogenen Schichtwachstums zu einer Bildung einzelner Kristallite kommen. In diesem Bereich nimmt die Abscheiderate mit steigender Temperatur zu, da auch die Reaktionsgeschwindigkeit zunimmt.

Ist die Temperatur hoch genug, dass die Quellmaterialien effizient zerlegt werden, bestimmt das Angebot an Quellmaterialien hauptsächlich die Rate, das von der Temperatur weitgehend unabhängig ist (Abb. 4.3). Die Temperatur ist dann auch hoch genug für eine ausreichende Beweglichkeit der adsorbierten Atome an der Oberfläche. In diesem massentransportlimitierten Bereich wird die Abscheiderate hauptsächlich über den Fluss der Gruppe-III-Atome bestimmt. Die Epitaxie von GaN mit MOVPE erfolgt üblicherweise in diesem Bereich. Durch die Kontrolle des Abscheidevorgangs mittels Diffusionsprozessen ist selektive Epitaxie möglich.

Eine weitere Erhöhung der Temperatur führt zu erhöhten Vorreaktionen und



Abb. 4.3: Schematische Darstellung der Abhängigkeit der Wachstumsrate von der Temperatur.

damit Depositionen an den Reaktorwänden und zur Desorption der Gruppe-IIIund Gruppe-V-Elemente von der Wachstumsoberfläche (desorptions-limitiertes Wachstum). Dadurch sinkt die Abscheiderate in diesem Bereich wieder.

Nachteilig beim Wachstum mit MOVPE sind parasitäre Abscheidungen an den Reaktorwänden und speziell bei der Nitrid-MOVPE der hohe notwendige Ammoniak-Anteil während der Epitaxie.

Die Vorteile der MOVPE liegen bei der guten Kontrollierbarkeit von Heterostrukturen und Dotierungen und gegenüber der MBE insbesondere bei den moderaten Reaktordrücken, damit entfällt das aufwändige Hochvakuum. Die Möglichkeit von Multi-Wafer-Anlagen und der damit verbundene höhere Durchsatz ist ein Vorteil für industielle Produktionsnutzung. Ausschlaggebend für diese Arbeit ist der Vorteil der einfacher zu realisierenden selektiven Epitaxie, um damit semipolare Kristallebenen zu erhalten, auf denen LED-Strukturen abgeschieden werden können. Wie bereits erwähnt, ist die selektive Epitaxie bei MOVPE aufgrund der diffusionsbasierten Abscheidung gut realisierbar [62, 63]. Eine genauere Beschreibung der MOVPE, auch Organometallische Gasphasen-Epitaxie (OMVPE) genannt, befindet sich in [64], speziell zur Nitrid-MOVPE in [18] und [53].

4.1.2 Molekularstrahlepitaxie

Bei der MBE handelt es sich um einen Prozess, dessen Wachstumsbedingungen weit vom thermodynamischen Gleichgewicht entfernt sind und der stark von der Wachstumskinetik der Oberflächenprozesse auf dem Substrat bestimmt wird [65]. Da der Molekültransport als gerichteter Strahl zum Substrat stattfindet, ist ein Ultrahochvakuum notwendig, um Kollisionen zu vermeiden und keine störenden Fremdatome in das Material einzubauen. Um eine gute Schichtqualität z. B. bei GaAs zu erreichen, sind mindestens Drücke im unteren Bereich von 10^{-7} Pa notwendig [65].

Für die Gruppe-III-Elemente werden Feststoffquellen verwendet. Das Quellenmaterial wird aus sogenannten Effusionszellen verdampft. Die Gruppe-V-Elemente können auch als gasförmige Ausgangsquellen vorliegen, die in einem Hochtemperatur-Gasinjektor thermisch zerlegt werden.

Für das Wachstum der Nitrid-Halbleiter besteht bei der MBE das Problem, dass atomarer Stickstoff zur Verfügung gestellt und aus Mangel einer entsprechenden Quelle der atomare Stickstoff durch Zerlegung von Molekülen gewonnen werden muss. Mögliche Stickstoff-Quellen und deren Vor- und Nachteile werden in [52] diskutiert.

Die Vorteile der MBE liegen in der hohen Schichtreinheit, der Möglichkeit von speziellen Messungen zur Prozesskontrolle wie die Beugung von hochenergetischen Elektronen (*engl. reflexion high energy electron diffraction, RHEED*) zur Kontrolle der Kristallqualität während der Epitaxie [52] und sehr abrupten Hetero- und Dotierübergängen im Schichtdickenbereich von Monolagen [66].

Die Nachteile der MBE sind insbesondere die hohe Störanfälligkeit des Hochvakuums, die z. T. aufwändige Wartung der Anlage, z. B. muss nach dem Auffüllen der Quellen der Materialfluss über die Temperatur der Effusionszellen wieder neu kalibriert werden, und der technologiebedingt relativ niedrige Durchsatz. Bei der Epitaxie der Gruppe-III-Nitrid-Halbleiter kommt insbesondere noch das Problem einer geeigneten Stickstoffquelle dazu.

Eine ausführliche Beschreibung der MBE befindet sich in [65], speziell zur Nitrid-MBE und einer MBE-Anlage beispielsweise in [52]. In Abb. 4.4 ist schematisch der Aufbau einer Anlage dargestellt. Mit MBE hergestellte LEDs besitzen eine niedrigere, optische Ausgangsleistung und eine schlechtere Homogenität [52]. Aufgrund einer anderen Versetzungsstruktur geben mit MBE hergestellte, optoelektronische Bauelemente eine geringere Ausgangsleistung ab, benötigen höhe-



Abb. 4.4: Schematische Darstellung einer MBE-Anlage.

re Ströme in Vorwärtsrichtung und weisen höhere Leckströme in Sperrichtung auf [67].

Außerdem ist selektive Epitaxie mit MBE schwerer zu realisieren. Da hier das Abscheideverhalten von der Wachstumskinetik der Oberflächenprozesse auf dem Substrat bestimmt wird [65], hängt die Beweglichkeit der adsorbierten Molüle stark von der Substrattemperatur ab [68]. Bis 990 °C ließ sich keine selektive Epitaxie erreichen [62].

4.2 Epitaxie auf polaren, semipolaren und nichtpolaren Kristallebenen

In Kap. 3.3 wurde beschrieben, wie sich die Polarisation und das elektrische Feld negativ auf die Effizienz von Licht emittierenden Bauelementen auf der Basis von Gruppe-III-Nitriden auswirkt. Da die Polarisation am stärksten entlang der $\langle 0001 \rangle$ -Kristallachse wirkt (Abb. 2.10), wird die Epitaxie von LED-Strukturen auf nicht-polaren Kristallebenen [4–12, 69] und semi-polaren Kristallebenen [70, 71] mit großem Interesse erforscht. Dazu werden im folgenden Abschnitt mögliche Ansätze vorgestellt, nicht- oder semipolare LEDs epitaktisch abzuscheiden.

4.2.1 GaN-Substrate

Lange Zeit waren GaN-Substrate ausreichender Größe und Qualität nicht verfügbar, deshalb wurde GaN auf Fremdsubstraten abgeschieden. Das liegt daran, dass GaN nicht wie andere Halbleiter, z. B. Si oder GaAs, mit dem Czochralski-Verfahren aus der Schmelze gezogen werden kann. GaN schmilzt bei höheren Temperaturen nicht, sondern der Stickstoff entweicht wegen des hohen Dampfdruckes, und flüssiges Gallium bleibt übrig (Phasendiagramm Gruppe-III-Nitride nach [72]). Dies kann nur verhindert werden, wenn mit hohen Stickstoff-Partialdrücken ab 4,5 GPa das GaN stabilisiert wird [73] (Abb. 4.5 und 4.6).



Abb. 4.5: Phasendiagramm der Gruppe-III Niride [72].

Abb. 4.6: Phasendiagramm von GaN bei $1 \cdot 10^5$ Pa, Meßpunkte siehe [73].

Eine Möglichkeit GaN-Substrate herzustellen ist, dicke GaN-Schichten auf Fremdsubstraten mit HVPE abzuscheiden. Nach dem Wachstum wird eine mehrere 100 µm dicke Schicht vom Fremdsubstrat gelöst [74]. Diese kommerziell erhältlichen Substrate sind alle entlang der $\langle 0001 \rangle$ -Richtung orientiert, da das HVPE-Wachstum auf Fremdsubstraten in dieser Richtung bislang die beste Kristallqualität zeigt. Deshalb werden für das Wachstum entlang anderer Kristallrichtungen weiterhin meist noch Fremdsubstrate verwendet. Einen anderen Ansatz stellte erstmals eine Arbeit von Funato et. al. vor. Sie haben dazu ein $\{11\overline{2}2\}$ -GaN-Subtrat verwendet [75]. Dieses Substrat wurde aus einer dicken c-orientierten HVPE-Schicht gesägt. Die von Funato et al. erzielten Ergebnisse werden in Kap. 6.3.2 mit den Ergebnissen dieser Arbeit verglichen und es wird an dieser Stelle wird nicht weiter darauf eingegangen.

4.2.2 Kristallabscheidung von GaN auf Fremdsubstraten

Bei der Verwendung der Fremdsubstrate ist vor allem die Gitteranpassung von Fremdsubstrat und Nitrid-Halbleiter wichtig, um Verspannungen und die Defektdichte im Kristall so gering wie möglich zu halten. Auch spielen die thermischen Ausdehnungskoeffizienten eine Rolle, da die Wachstumstemperatur der Nitride zwischen 800 - 1100°C liegt und beim Abkühlen auf Raumtemperatur sich weitere Verpannungen durch unterschiedliche Ausdehnung von Fremdsubstrat und Nitrid-Schichten ergeben können. Die wichtigsten Fremdsubstrate für die GaN-Epitaxie stellen Saphir und Siliziumkarbid dar, auch spielen Silizium und GaAs eine große Rolle [76, 77]. Die beiden letzten sollen in dieser Arbeit aber nicht weiter betrachtet werden, da hier keine Ergebnisse auf nicht- und semi-polaren Kristallebenen vorliegen. Einen Überblick über verschiedene Fremdsubstrate, Gitterfehlanpassung und die thermischen Ausdehnungskoeffizienten für die Epitaxie auf nicht- und semi-polaren Kristalleben gibt Tab. 4.1.

4.2.2.1 Entlang *a*-Richtung orientiertes GaN auf *r*-orientiertem Saphir

Wie die Gruppe-III-Nitride hat Saphir eine hexagonale Kristallstruktur. Saphir wird in der *c*-Orientierung häufig als Substratmaterial für das kristalline Abscheiden von GaN verwendet, wobei GaN entlang der $\langle 0001 \rangle$ -Richtung abgeschieden wird. Wird anstatt der üblichen *c*-Kristallfläche die *r*-Kristallebene (Abb. 4.7) des Saphir verwendet, so erfolgt die Kristallabscheidung des GaN entlang der *a*-Richtung ($\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Richtung, Abb. 2.2 und 4.8). Wie in Abb. 4.8 schematisch zu sehen ist, gibt es bei den Gitterkonstanten der beiden Kristalle deutliche Unterschiede. Dies führt bei Schichtdicken $> d_c$ zu Versetzungen (vgl. Kap. 2.4), wie dies bei den GaN-Pufferschichten für LEDs auf solchen Substraten der Fall ist. Die Dichte der Schraubenversetzungen der von Craven et. al. hergestellten, et-wa 1,5 µm dicken GaN-Schicht beträgt 2,6 $\cdot 10^{10}$ / cm² und die Stapelfehlerdichte 3,6 $\cdot 10^5$ / cm [4].

Neuere Forschungsergebnisse auf c-plane GaN von Imer et. al. zeigen Defektdichten im Bereich von 10^{6} - 10^{7} /cm² [5]. Bei diesem Verfahren werden die

Substrat	Kristall-	Fehlan-	Differenz des	Spalt-	Thermische
	struktur	passung	therm. Aus-	ebene	Stabilität im
		zu GaN (a)	dehnungs-		MOVPE-
		[bei 300K]	koeff. zu GaN		Prozeß
Al_2O_3	Korund	$13,\!8\%$	$1,9 \cdot 10^{-6}$	$(1\bar{1}02)$	gut
				$(1\bar{1}00)$	
6H-SiC	ZnS 6H	- 3,4 $\%$	$-1.4 \cdot 10^{-6}$	$(11\bar{2}0)$	gut
				(0001)	
$MgAl_2O_4$	Spinell	- 10,3 $\%$	$1,9 \cdot 10^{-6}$	(100)	gut
$LiAlO_2$	β -NaFeO ₂	1,7%	$1,7 \cdot 10^{-6}$	(001)	instabil
Si	Diamant	$20{,}1\%$	$-2,0 \cdot 10^{-6}$	(111)	gut
GaAs	Zinkblende	25,3%	$0.4 \cdot 10^{-6}$	(110)	ausreichend

Tab. 4.1: Mögliche Substrate für die GaN-Epitaxie auf nicht- und semi-polaren Kristallebenen und wichtige Eigenschaften. Die Substratmaterialien Si und GaAs sind nur zur Vollständigkeit aufgeführt, in Bezug auf die nicht- und semipolaren Kristallebenen liegt bislang keine Literatur vor.



Abb. 4.7: Schematische Darstellung: Saphir-Kristall [78].

Abb. 4.8: Schematische Darstellung: aplane GaN auf r-plane Saphir [4].

unterschiedlichen Wachstumsraten von N- und Ga-Polarität der *c*-Richtung ausgenutzt. Mit einem aufwändigen Verfahren aus selektiver Epitaxie und lateralem Überwachsen von tiefen Ätzgräben zwischen maskierten Bereichen werden streifenförmige Bereiche koalesziert [5].

Chen et. al. haben GaN/AlGaN mit einer Emissionswellenänge von 363 nm [6] und GaInN/GaN LED-Strukturen mit einer Emissionswellenlänge von 425 nm [7] auf *a*-plane GaN unter Verwendung von *r*-plane Saphirsubstraten hergestellt.

Chakraborty et. al. haben ebenfalls *a*-plane GaInN/GaN-LEDs auf *r*-plane Saphir epitaktisch abgeschieden [8], wobei sie zur Verbesserung der Kristallqualität die Methode von epitaktischem lateralen Überwachsen verwendet haben (vgl. Kap. 4.2.3). Die Emissionswellenlänge der Photolumineszenz liegt bei 413 nm, ein zweites Emissionsmaximum von halber Intensität der 413 nm-Emissionsspitze liegt bei 450 nm. Chakraborty et. al. führen das zweite Maximum von geringerer Intensität darauf zurück, dass sich die laterale Abscheiderate von Ga- und N-Polarität der *c*-Richtung beim Überwachsen unterscheidet. Dadurch entstehen nach der Koaleszenz nach dem vollständigem lateralen Überwachsen Bereiche unterschiedlicher Defektdichte an der planaren Oberfläche in dem Bereich der Ga- und N-Polarität. Diese wirken sich auf den In-Anteil in den Quantenfilmen und somit auf die Emissionswellenlänge in den verschiedenen Bereichen aus [79].

4.2.2.2 Entlang *a*-Richtung orientiertes GaN auf *a*-orientiertem Siliziumkarbid

Eine andere Möglichkeit, nicht-polares GaN entlang der *a*-Richtung zu erhalten, ist die Kristallabscheidung auf der *a*-Ebene von Siliziumkarbid (SiC). Auch SiC wird häufig zur Epitaxie entlang der *c*-Richtung verwendet. Es hat den Vorteil einer relativ guten Wärmeleitfähigkeit von 4,9 W/cmK und der elektrischen Leitfähigkeit, was substratseitige Kontaktierung von Bauelementen ermöglicht [53]. Die Nachteile von SiC sind die höheren Kosten und der geringe Wärmeausdehnungskoeffizient, der bei Abkühlung zu einer tensilen Verspannung der GaN-Schicht führt. Dadurch neigen die epitaktisch abgeschiedenen GaN-Schichten zu Rissen.

Bei der Epitaxie von *a*-plane GaN auf *a*-plane 6H-SiC wurde von Craven et al. eine bei 1200 °C abgeschiedene AlN-Pufferschicht verwendet [9]. Die Dichte der Schraubenversetzungen bei einer Dicke von einer 1 μ m GaN-Schicht beträgt

 $3 \cdot 10^{10}$ /cm² und die Dichte der Stapelfehler in der Basalebene $7 \cdot 10^5$ /cm [9]. Die AlN-Pufferschicht bildet entlang der *m*-Achse von SiC verlaufende Streifen aus, senkrecht zur *c*-Achse. Craven et al. verbinden die hohe Defektdichte mit der asymmetrischen lateralen Abscheiderate entlang der $\langle 0001 \rangle$ - und $\langle 000\bar{1} \rangle$ -Richtung [9], wie bei der Epitaxie von *a*-plane GaN auf *r*-plane Saphir. Die $\langle 000\bar{1} \rangle$ -Richtung ist bei der Epitaxie stabiler und setzt sich deshalb langsamer fort.

4.2.2.3 Entlang *m*-Richtung orientiertes GaN auf *m*-orientiertem Siliziumkarbid

Auf *m*-orientiertem 4H-SiC haben Sun et al. *m*-orientiertes GaN abgeschieden [80]. Dazu haben sie zunächst eine 220 nm dicke AlN-Pufferschicht mit einer glatten Oberfläche abgeschieden. Es zeigt sich dabei deutlich eine mikrostrukturelle, anisotrope Entwicklung bei der Abscheidung entlang der $\langle 0001 \rangle$ - und der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Kristallachse, die in der *m*-Kristallebene liegen. Insbesondere bilden sich verstärkt zum Rand des Wafers hin trapezförmige Inseln aus, welche durch die stabilen, energetisch bevorzugten $\{000\bar{2}\}$ -, $\{10\bar{1}0\}$ -, und $\{10\bar{1}1\}$ -Ebenen begrenzt werden. Bei der Koaleszenz dieser Inseln bilden sich dreieckförmige Lücken aus. Die beobachtete Asymmetrie bei der Koaleszenz füht zu Versetzungen im Kristall.

Mit ortsaufgelöster Katodolumineszenz wurde festgestellt, dass die Koaleszenzbereiche aufgrund der hohen Defektdichte deutlich schwäche Emission zeigt, als im Ursprungsbereich der entstandenen Inseln.

4.2.2.4 Entlang *m*-Richtung orientiertes GaN auf (001)-orientiertem γ -Lithiumaluminat

Haskell et al. haben die {001}-Ebene von γ -Lithiumaluminat (γ -LiAlO₂) verwendet, um GaN in der *m*-Richtung ($\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Richtung) abzuscheiden [10]. Der Vorteil von γ -LiAlO₂ liegt dabei insbesondere in der sehr guten Gitteranpassung (Tab. 4.1). Auf das Substrat wurde mit HVPE eine 250 µm dicke GaN-Schicht abgeschieden, um die Kristallqualität zu verbessern, und anschließend wurde die GaN-Schicht vom Substrat gelöst [10]. Da LiAlO₂ jedoch weniger temperaturstabil ist, musste die GaN-Epitaxie bei niedrigeren Temperaturen als üblich (siehe Kapitel 4.2.1) von 860- 890 °C erfolgen. Auf diesem freistehenden m-plane GaN ist die Stapelfehlerdichte in der Basalebene $1 \cdot 10^5$ /cm und die Schraubenversetzungsdichte $4 \cdot 10^9$ /cm² [10].



Abb. 4.9: Schematische Darstellung: Wachstum von $\{10\overline{1}\overline{1}\}$ -GaN auf $\{100\}$ -Spinell [70].

Abb. 4.10: Schematische Darstellung: Wachstum von $\{10\overline{1}\overline{3}\}$ -GaN auf $\{110\}$ -Spinell [70].

Trotz der hohen Defektdichte zeigen auf dieses Quasi-Substrat abgeschiedene LED-Strukturen gute Ergebnisse. Auf das so hergestellte, freistehende mplane GaN wurde dann eine GaInN/GaN LED-Struktur abgeschieden, die bei 450 nm Emissionswellenlänge eine Ausgangsleistung von 240 µW bei einem Strom von 20 mA erreicht [11]. Wird die LED in ein Gehäuse gesetzt und mit Hilfe der Epoxid-Abdeckung die Auskopplung des Lichts verbessert, lassen sich sogar Ausgangsleistungen von 0,6 mW bei 20 mA Strom und im gepulsten Modus 23,5 mW bei 1 A Stromfluß erreichen [12]. Neuere Ergebnisse zeigen sogar 1 mW bei 20 mA [69].

4.2.2.5 Semipolare GaN-Kristallebenen auf Spinell

Spinell (MgAl₂O₄) wurde von Baker et al. als Substrat für die Deposition von semipolaren GaN verwendet [70]. Auf der $\{100\}$ -MgAl₂O₄-Ebene wird $\{10\overline{1}\overline{1}\}$ -GaN (Abb. 4.9), und auf der $\{110\}$ -MgAl₂O₄-Ebene wird $\{10\overline{1}\overline{3}\}$ -GaN (Abb. 4.10) abgeschieden.

Die experimentellen Daten versprechen eine gute thermodynamische Stabilität bei unterschiedlichen Epitaxie-Bedingungen, im Gegensatz zu den nichtpolaren Kristallebenen, die einen sehr engen Parameterbereich besitzen [70]. Die Dichte der Schraubenversetzungen berträgt $2 \cdot 10^9 / \text{cm}^2$. Auch hier wird als Ursache das sehr langsame Fortschreiten der N-Seite der *c*-Richtung vermutet, das zu Versetzungen führt, wenn die Schichten beim Wachsen koaleszieren [70].

Chakraborty et al. haben LED-Strukturen auf diesen semipolaren $\{10\bar{1}\bar{1}\}$ bzw. $\{10\bar{1}\bar{3}\}$ Kristallflächen hergestellt. Auf beiden Kristallebenen beträgt die Emissionswellenlänge 439 nm. Dabei zeigt die LED auf der $\{10\bar{1}\bar{3}\}$ -Ebene eine bessere Ausgangsleistung von 190 μ W bei 20 mA als die LED auf der $\{10\bar{1}\bar{1}\}$ -Kristallebene mit Ausgangsleistungen von 11 μ W bei 20 mA [71].

4.2.3 Verschiedene Kristallebenen durch selektive Epitaxie

Da die Qualität der unpolaren Schichten auf anderen Kristallebenen schlechter als die der {0001}-Ebene ist, sind vergleichbare Ergebnisse nur mit Hilfe von defektreduzierenden Techniken möglich. Oft wird das laterale Überwachsen (*engl. epitaxial lateral overgrowth, ELO*) von maskierten Bereichen angewendet, das durch selektive Epitaxie erreicht wird. Gerade die letztgenannte selektive Abscheide-Technik läßt sich aber auch direkt für das Ausbilden von semi- und nichtpolaren Kristallfacetten während der Epitaxie nutzen [81,82]. Die angewendete Technik der selektiven GaN-Epitaxie und die Eigenschaften der entstehenden Oberflächen werden deshalb in Kap. 4.3 näher beschrieben. Auf diese seitlichen Facetten können dann LED-Strukturen abgeschieden werden.

4.3 Selektive Epitaxie von GaN

Ein großer Vorteil der MOVPE ist die Möglichkeit der selektiven Epitaxie (selektives Wachstum, engl. selective area growth, SAG) nur in gewünschten Bereichen. Bei den Nitrid-Verbindungshalbleitern wird SAG häufig zur Qualitätsverbesserung der Kristallschichten durch laterales Überwachsen (ELO) eingesetzt [63,83]. Nach SAG von kubischem GaN [84] und Wurtzit-GaN 1994 [85] konnte diese Technik drei Jahre später erfolgreich für ELO mit Hydrid-Gasphasen-Epitaxie für die Herstellung von Quasisubstraten [86] und MOVPE zur Reduktion der Defektdichte der GaN-Schichten [87,88] demonstriert werden. Durch die Untersuchungen von Hiramatsu et al. zur Abhängigkeit der Ausbildung von Kristallfacetten bei SAG konnte die ELO-Technik zum 2-Schritt-ELO oder auch facettenkontrolliertem ELO (engl. facet-controlled epitaxial lateral overgrowth, FACELO) weiterentwickelt werden [22,89].



Abb. 4.11: Schematische Darstellung: Gasdiffusion zu den geöffneten Bereichen.

Prinzipiell gibt es zwei Möglichkeiten für SAG: lokale Unterdrückung und lokale Unterstützung der Kristallabscheidung. Da in dieser Arbeit nur die erste Methode angewendet wird, soll auf das andere Verfahren nicht näher eingegangen werden. Für SAG mittels lokaler Unterdrückung wird die Substratoberfläche mit einem maskierendem Material abgedeckt, das typischerweise ein Dielektrikum wie SiO₂ oder Si_xN_y ist. In diese maskierende Schicht können mittels üblicher Fotolithografie und Ätzverfahren geöffnete Bereiche strukturiert werden, in denen die Abscheidung der kristallinen Schicht kontrolliert erfolgen kann.

Idealerweise findet beim SAG keine Deposition auf der dielektrischen Maske statt, während die ankommenden Quellmaterialien in den Öffnungsbereichen in den Kristall eingebaut werden. Dadurch kommt es über den Öffnungen zu einem niedrigeren Anteil der Quellmaterialien als über den maskierten Bereichen, was zu einem Konzentrationsgradienten und somit zu einer Diffusion in der Gasphase führt (Abb. 4.11).

4.3.1 Abscheideraten und Füllfaktor

Durch die zusätzlichen Quellmaterialien kommt es zu einer Steigerung der Materialabscheidung in den Öffnungen, die mit zunehmender Entfernung von der Maske geringer wird. Ein auf den Gleichgewichts-Zustand der Gas-Phase basierendes Diffusionstransportmodell zum Anstieg der Abscheiderate wird von Coltrin et al. vorgeschlagen [90]. Tatsächlich wurde bestätigt, dass die Wachstumsrate g



Abb. 4.12: Schematische Darstellung: Das abgeschiedene Volumen einer Periode ist für SAG und unstrukturiertes Wachstum pro Flächeneinheit gleich.

mit dem Füllfaktor FF

$$FF = \frac{w_{open}}{w_{open} + w_{mask}} = \frac{w_{open}}{w_{period}}$$
(4.2)

zusammenhängt. Dabei sind w_{open} , bzw. w_{mask} die Breiten der Öffnung, bzw. der Maske.

Da bei kleinerem Füllfaktor der maskierte Bereich größer ist als bei großen Füllfaktoren, steht in den Öffnungen auch mehr Quellmaterial zur Verfügung, so dass hier die lokale Wachstumsrate g_{local} größer ist als für große Füllfaktoren. Somit gilt

$$g_{local} \propto \frac{1}{FF}$$
 . (4.3)

Das abgeschiedene Volumen pro Flächeneinheit bleibt insgesamt gleich (Abb. 4.12), da das Halbleitermaterial in den Öffnungen zusätzlich in den Kristall eingebaut wird, das auf der Maske nicht abgeschieden werden kann. Wird aus der Querschnittsfläche und der Streifenperiode die Abscheiderate pro Fläche berechnet und als "normierte Abscheiderate" bezeichnet (Abb. 4.12)

$$g_{norm} = V_{sel} / ((w_{open} + w_{mask}) \cdot t_{growth})$$

= $V_{sel} / (w_{Periode} \cdot t_{growth})$, (4.4)

ergibt sich die gleiche Abscheiderate pro Periodenfläche wie beim unstrukturiertem Wachstum

$$g_{plan} = V_{plan} / (w_{Periode} \cdot t_{growth}) \quad . \tag{4.5}$$

Dabei ist V_{sel} das selektiv abgeschiedene Volumen, V_{plan} das ganzfläche abgeschiedene Volumen auf einer gleich großen Fläche wie bei der selektiven Epitaxie (Breite $w_{Periode}$) und t_{growth} die Dauer des Abscheideprozesses.

Wird nun die selektive Epitaxie in den streifenförmigen Öffnungen entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ - und $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Kristallorientierung betrachtet, so entstehen bei der entsprechenden Wahl der Epitaxieparameter Streifen mit dreieckigem Querschnitt, die durch die $\{11\overline{2}2\}$ - bzw. $\{1\overline{1}01\}$ -Kristallebenen begrenzt werden. Die Oberfläche ist auf diesen entstandenen, schrägen Seitenfacetten um den Faktor $1/\cos\Theta$ gößer als bei der planaren Epitaxie auf ebener Fläche, die hier als Referenz-Proben, bzw. Referenz-LED bezeichnet wird. Dabei beschreibt Θ den Winkel zwischen der schrägen Kristallfacette und der Oberflächennormalen. Mit den Winkeln $\Theta \approx 62^{\circ}$ und $\Theta \approx 58^{\circ}$ der {1101}- bzw. {1122}-Seitenfacetten ist dieser Faktor ≈ 2 . Somit wird auf den seitlichen Facetten erwartet, dass die Schichtdicke nur halb so dick ist, wie auf der Topfacette. Wie sich in dieser Arbeit zeigt, ist dies aber nicht immer der Fall. Bei der Epitaxie werden bestimmte Kristallebenen bevorzugt ausgebildet, wie dies Chakraborty et al., bzw. Craven et al. bei ihren Experimenten festgestellt haben [8,9]. Bei selektiver GaAs-Epitaxie kann dabei auch die Ga-Quelle die Abscheidung auf den unterschiedlichen Facetten beeinflussen [91,92]. Die Ga-Moleküle setzen sich je nach Quelle unterschiedlich zusammen und besitzen daher unterschiedliche Beweglichkeiten. Um die Ursachen für die Entstehung von bevorzugten Facetten bei den Gruppe-III-Nitriden herauszufinden, haben Hiramatsu et al. die Eigenschaften der Kristallebenen analysiert, wie dies in Abschnitt 4.3.2 beschrieben wird. Die bevorzugte Ausbildung von bestimmten Kristallebenen wirkt sich ebenfalls auf die lokale Abscheiderate aus.

4.3.2 Oberflächeneigenschaften verschiedener Kristallebenen

Für ihre Untersuchungen bezüglich der Entstehung von verschiedenen Kristallfacetten von GaN haben Hiramatsu et al. selektive Epitaxie verwendet und eine SiO₂-Maskierung streifenförmig entlang der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ - bzw. $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -GaN-Richtung geöffnet [22]. Die Fensteröffnungen sind 5 µm breit und besitzen eine Periode von



Abb. 4.13: Die Ausbildung der $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten ist von den Epitaxiebedingungen nahezu unabhängig [22].



Abb. 4.14: Abhängigkeit der Facetten der Streifenöffnungen entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -GaN-Richtung von Druck und Temperatur. [22].

10 µm. Für die selektive Epitaxie wurde der Druck von 5 bis 67 kPa und die Temperatur von 900 bis 1100 °C variiert, um das Entstehen verschiedener Kristallebenen zu analysieren. Hiramatsu et al. fanden heraus, dass sich bei Streifen entlang der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Richtung nahezu unabhängig von Druck und Temperatur immer die $\{1\bar{1}01\}$ -Facetten ausbilden (Abb. 4.13) und auch die Abscheiderate $g_{\{1\bar{1}01\}}$ in der $\langle 1\bar{1}01 \rangle$ -Richtung unabhängig vom Druck ist (Abb. 4.15). [22] Dagegen zeigt sich für Streifen entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Richtung eine deutliche Abhängigkeit von Druck und Temperatur (Abb. 4.14). Für Temperaturen um 925°C bilden sich



Abb. 4.15: Die Abscheiderate der semipolaren $\{1\overline{1}01\}$ -Kristallfacetten ist unabhängig vom Druck [22].



Abb. 4.16: Darstellung des Kristallgitters und der Kristallebenen von Streifen entlang $\langle 11\overline{2}0\rangle$. [22].



Abb. 4.17: Darstellung des Kristallgitters und der Kristallebenen von Streifen entlang $\langle 1\bar{1}00 \rangle$. [22].

{1122}-Facetten aus. Auf diesen Facetten und auf der oberen {0001}-Topfacette sind Vertiefungen (*engl. pits*) vorhanden. Bei höheren Temperaturen wird die Oberfläche glatter und bei niedrigen Drücken entstehen die {1120}-Facetten. Bei hohen Drücken werden weiterhin die {1122}-Facetten bevorzugt, jedoch ab Temperaturen über 1000°C verschwinden die schrägen Facetten und der Querschnitt des Streifens wird rechteckig. Eine glatte Oberfläche ist bei diesen Temperaturen aber nur noch mit gleichzeitig hohem Druck zu erreichen. [22]

Die Unterschiede der Abscheideraten auf den unterschiedlichen Facetten müssen deshalb mit den Eigenschaften der Oberflächen, der Oberflächenenergie und der Stabilität der Atomanordnung an der Oberfläche erklärt werden. Deshalb wird von den jeweiligen Kristallebenen die Anzahl der freien Bindungen (*engl. dangling bonds, DB*) pro Fläche und die Polarität der entstehenden Kristallebenen verglichen (Abb. 4.16 und Abb. 4.17).

Eine genauere Betrachtung des Kristallaufbaus der Streifen in $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Richtung führt zu der Bestimmung der freien Bindungen: Die DB-Dichte ist mit 11,4 DB/nm² für die {0001}-Kristallebenen und mit 12,1 DB/nm² für die {1 $\bar{1}00$ }-Kristallebenen kleiner als die DB-Dichte der {1 $\bar{1}01$ }-Kristallebenen mit 16,0 DB/nm². Bei der selektiven Epitaxie würde man erwarten, dass die Facetten mit weniger freien Bindungen stabiler sind und sich deshalb ausbilden.

Bei MOVPE-Bedingungen ist das aber nicht der Fall. Der Grund dafür ist die Polarität der Kristallebenen. Das V/III-Verhältnis ist bei MOVPE sehr groß, um wegen der unvollständigen Zerlegung des Ammoniakgases genug Stickstoffatome anbieten zu können. Die $\{1\overline{1}01\}$ -Facette ist N-polarisiert, deshalb bildet sie sich insbesondere bei hohen Drücken (hoher N-Anteil) und niedrigen Temperaturen

4. Epitaxie

(geringe Ga-Beweglichkeit) aus. Für sehr niedrige Drücke und sehr hohe Temperaturen werden dann die $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten instabil, da die N-Polarität-Ebene durch die Stickstoffatome nicht mehr ausreichend stabilisiert wird. Die $\{0001\}$ und die $\{1\overline{1}00\}$ -Kristallebenen werden dann energetisch bevorzugt und bilden sich aus [93].

Die Entwicklung des Querschnittes von Streifen entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Richtung hängt stärker von Druck und Temperatur ab. Auch hier sind die DB-Dichten der {0001}-Facette mit 11,4 DB/nm² und der { $11\bar{2}0$ }-Facette mit 14,0 DB/nm² geringer als die der { $11\bar{2}2$ }-Facette mit 17,8 DB/nm². Aber auch bei dieser Streifenrichtung spielt die Polarität der Oberfläche eine größere Rolle als die Anzahl der freien Bindungen.

Bei hohen Drücken und niedrigen Temperaturen bilden sich die $\{11\bar{2}2\}$ -Facetten aus. Diese Facetten besitzen wie die $\{11\bar{2}0\}$ -Facetten keine Polarität, die manchmal auch als gemischte Polarität bezeichnet wird. Unter MOVPE-Bedingungen sind sie durch das hohe V/III-Verhältnis bevorzugt, da der hohe Stickstoffanteil diese Facetten gegenüber der Ga-polarisierten $\{0001\}$ -Kristallebene stabilisiert, wie dies in Abb. 4.17 durch die Stickstoffatome an der Oberfläche angedeutet wird. Mit sinkendem Druck oder steigender Temperatur nimmt die Abscheiderate auf den $\{11\bar{2}2\}$ -Facetten ab, da die Ga-Beweglichkeit steigt. Es bildet sich ein trapezförmiger Querschnitt mit zunehmender Breite der $\{0001\}$ -Facette, die jetzt stabiler wird. Bei weiterer Reduktion des Drucks oder zunehmender Temperatur werden die Ga-Polarität-Ebenen mehr und mehr stabilisiert, die $\{11\bar{2}0\}$ - und $\{0001\}$ -Facetten sind dann wegen der geringeren Dichte der freien Bindungen energetisch bevorzugt [22].

Bei niedrigen Temperaturen ist die Beweglichkeit der Ga-Atome an der Oberfläche eher gering, was zu einer hohen Defektdichte an der Oberfläche führt. Mit steigender Temperatur nimmt auch die Oberflächenmigration zu und die Oberfläche der Streifen wird glatt. Ein weiterer Anstieg der Temperatur oder ein niedrigerer Druck führt zum Abdampfen der adsorbierten Quellmaterialien, so dass die Oberfläche wieder unebener wird.

Diese Überlegungen zeigen, dass die Ausbildung der Facetten für Streifen entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Kristallrichtung gegenüber der Bedeckung der Oberfläche mit Stickstoffatomen sehr sensitiv ist. Shahedipour-Sandvik et al. schreiben bei Öffnungen im Bereich $\langle 1 \mu m$ ebenfalls den Verspannungen eine Rolle bei der Kristallfacettenausbildung zu [94]. Da Druck, Temperatur und das V/III-Verhältnis bei der Entstehung der Facetten einen großen Einfluß haben, kann man vermuten, dass auch die Wahl der Gruppe-III-Quellen über die Beweglichkeit der Moleküle Einfluß nimmt.

4.3.3 Selektive Epitaxie und Ga-Quelle

Bei der selektiven Epitaxie von Arseniden haben Kaluza et al. erhebliche Unterschiede bei den Abscheideraten auf unterschiedlichen Kristallebenen unter Verwendung unterschiedlicher metallorganischer Quellmaterialien gefunden [91]. Sie stellten beim Wachstum von V-förmigen Gräben zur Erzeugung von Quantendrähten in Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs Schichten deutliche Unterschiede bei vertikalem und lateralem Wachstum in Abhängigkeit des verwendeten Quellmaterials fest. Ein verstärktes laterales Wachstum und ein damit verbundenes Schließen des Grabens wurde bei Verwendung von TMGa gefunden. Bei Verwendung von TEGa bleibt der Graben offen, da die vertikale Wachstumsrate größer als die laterale Wachstumsrate ist [91].

Eine mögliche Erklärung für die unterschiedlichen Abscheideraten kann durch die unterschiedlichen Moleküle an der Oberfläche gegeben werden. Bei Verwendung von TMGa sind die Spezies an der Oberfläche sehr bewegliche Monomethylgallium-Moleküle (MMGa), die eine relativ große Diffusionlänge an der Oberfläche besitzen [60] und deshalb zu einer erhöhten Abscheiderate an den Seitenflächen der V-Gräben führen [91]. Wird TEGa verwendet, so sind die Spezies an der Oberfläche elementares Gallium, GaC₂H₅, GaH₂ und hochreaktive Galliumwasserstoff-Moleküle (Gallan, GaH₃ [95,96]) mit einer sehr kurzen Diffusionslänge. Durch die geringe Aktivierungsenergie treten insbesondere die hochreaktiven Gallan-Moleküle auf. Sie werden in der direkten Umgebung ihres Auftreffens auf die Oberfläche in den Kristall eingebaut [60]. Durch den schattierenden Effekt des Grabens ist dort die Abscheiderate auf dessen Seitenflächen niedriger [91].

Die beschriebenen Untersuchungen sind für GaAs-Verbindungshalbleiter durchgeführt worden [91]. Die Epitaxie von GaAs-Halbleitern mittels MOVPE erfolgt bei niedrigeren Temperaturen (545 - 720°C) als die Epitaxie von GaN (min. 750°C für GaInN, bis zu 1150°C für GaN). Die Temperatur spielt aber eine große Rolle für die Beweglichkeit und Diffusionslänge. Son et al. haben unter Verwendung von TEGa periodische (Al)GaAs-Gitter mit sägezahnförmiger Struktur hergestellt [92]. Bei relativ niedrigen Temperaturen bleibt die Struktur erhalten, während bei höheren Temperaturen die Struktur mit zunehmender Schichtdicke

4. Epitaxie

planarisiert wird [92].

Dieses genau umgekehrte Verhältnis zwischen lateraler und vertikaler Abscheiderate bei Verwendung von TEGa und TMGa könnte darauf hinweisen, dass dies auch die Ursache für das umgekehrte Abscheideverhalten von aktivem Bereich und p-dotiertem GaN auf den seitlichen Facetten und der Top-Facette bei ist, das bei den untersuchten Proben in dieser Arbeit beobachtet wurde (Kap. 6.3.1.4). Die für diese Arbeit hergestellten und analysierten Proben wurden deshalb auch auf das strukturelle Abscheideverhalten untersucht, ebenso der Einfluss von TEGa, TMGa (Kap. 6.3.1.5) und Mg-Dotierung (Kap. 6.3.1.6). Aufgrund der Entstehung von bevorzugten Kristallebenen sind aber auch deren spezifische Eigenschaften von großer Bedeutung.

Kapitel 5

Herstellung und Prozessierung von GaInN-LEDs

Die in dieser Arbeit untersuchten LEDs wurden in der in Kap. 4.1.1.2 vorgestellten Niederdruck-MOVPE-Anlage AIXTRON 200/4 RFS hergestellt. Die verwendeten Quellmaterialien für die Gruppe-III-Elemente sind Trimethylgallium (TMGa, $(CH_3)_3Ga$), Triethylgallium (TEGa, $(C_2H_5)_3Ga$), Trimethylaluminium (TMAl, $(CH_3)_3Al$) und Trimethylindium (TMIn, $(CH_3)_3In$) sowie Biscyclopentadienylmagnesium (Cp₂Mg, $(C_5H_5)_2Mg$) als Mg-Quelle für die p-Dotierung. Als Gruppe-V-Element-Quelle wurde Ammoniak (NH₃) verwendet und zur n-Dotierung mit Silizium (Si) diente Silan (SiH₄) in H₂. Als Substrat wird für die Abscheidung das Fremdsubstrat Saphir (Al₂O₃) verwendet.

5.1 Ganzflächig abgeschiedene GaInN-LEDs (Referenz-LEDs)

Die ganzflächig abgeschiedenen polaren LEDs auf der c-Kristallebene sollen als Referenz zu den mit selektiver Epitaxie hergestellten, semipolaren LEDs dienen.

5.1.1 Epitaktische Herstellung der Referenz-LEDs

Das $\langle 0001 \rangle$ -orientierte Al₂O₃-Substrat wird zunächst bei 1200 °C für 10 min in H₂-Atmosphäre thermisch gereinigt. Da durch die große Fehlanpassung von Saphir und GaN ein direktes Anwachsen nicht möglich ist [97], erfolgt bei einer relativ niedrigen Temperatur von 900 °C die Abscheidung einer AlN-Nukleationsschicht



Abb. 5.1: Schematischer Aufbau der Epitaxiestruktur einer in c-Richtung abgeschiedenen LED.

(Abb. 5.1), die Amano et al. 1986 vorgeschlagen haben [98] und von Kuhn et al. weiterentwickelt wurde [99]. An einer Vielzahl an Kristallisationskeimen entstehen beim späteren Wachstum GaN-Inseln, die während des Prozesses größer werden und zusammenwachsen (Abb. 5.2) [100].

Anschließend wird die Nukleationsschicht bei einer höheren Temperatur von ≈ 1100 °C 10 min ausgeheilt, um die kristalline Qualität zu verbessern, da durch die unterschiedlichen Orientierungen der Keimkristalle viele Korngrenzen entstehen, die zu Kristalldefekten wie z. B. Versetzungen führen. Für die in dieser Arbeit untersuchten Proben wird anschließend eine $\approx 1.5 \,\mu$ m dicke GaN-Schicht abgeschieden (Abb. 5.1). Bei der Abscheidung dieser Schicht wird davon ausgegangen, dass sich die Anzahl der Defekte dadurch reduziert, dass Versetzungslinien zusammentreffen und daran enden oder sich gegenseitig auslöschen. Typische Suszeptortemperaturen für die Abscheidung von GaN liegen zwischen 1120 und 1150 °C. Dabei kann die Temperatur des Substrates zwischen 70 und 100 K kälter sein als die Suszeptortemperatur (Abb. 5.3) [101]. Für LED-Strukturen wird diese untere GaN-Nitrid-Schicht nach einer relativ dünnen undotierten Startschicht mit Silizium dotiert, um eine n-Leitfähigkeit zu erzielen.



Abb. 5.2: Schematische Darstellung des Epitaxie-Prozesses, wie ihn Hiramatsu et al. beschrieben haben [100].

Dann folgt der aktive Bereich, der bei den in dieser Arbeit betrachteten LEDs aus 5 GaInN-Quantenfilmen von 2 bis 3 nm Dicke besteht, die durch 7 bis 10 nm dicke GaN-Barrieren getrennt sind (Abb. 5.1). Um die Elektronen möglichst im aktiven Bereich für strahlende Rekombination mit den Löchern nutzen zu können, folgt auf die Vielfachquantenfilmstruktur (*engl. multiple quantum well, MQW*) eine Elektronenbarriere aus AlGaN (Abb. 5.1) mit einem Aluminiumgehalt von 10 bis 15%, das eine höhere Bandlücke besitzt. Dadurch erfolgt ein effizienter Einschluss der Ladungsträger in den Quantenfilmen und Diffusion der Elektronen ins p-Gebiet wird verhindert. Hangleiter et al. fanden heraus, dass durch Abscheiden einer AlGaN-Schicht nach dem aktiven Bereich diese Barriere dadurch erhöht wird, dass das elektrische Feld in entgegengesetzter Richtung zum GaInN wirkt (Abb. 5.4) [49]. Zum Schluß wird die Mg-dotierte, p-leitende Schicht abgeschieden, die typischerweise 200 bis 300 nm dick ist (Abb. 5.1).

5.1.2 Besonderheiten der Epitaxie von GaInN

Die Abscheidung von GaInN erfordert andere Prozessbedingungen, weil sich InN in vielen Eigenschaften von GaN unterscheidet. Durch die unterschiedlichen Schmelzpunkte von GaN ($T_{M,GaN} = 2791 \text{ K}$) und InN ($T_{M,InN} = 2146 \text{ K}$) [17] sind auch die Dampfdrücke der zugehörigen Gruppe-III-Verbindungen unterschiedlich (Abb. 4.5). Das wirkt sich auf die Epitaxie-Temperatur aus. Für einen effizienten In-Einbau in das Kristallgitter muss die Temperatur auf 700 bis 850 °C gesenkt werden. Dabei gilt, dass bei niedrigeren Temperaturen und sonst gleichen Bedingungen mehr In in den Kristall eingebaut wird [102]. Jedoch nimmt mit sinkender Wachstumstemperatur auch die Kristallqualität ab. Außerdem reduziert die niedrige Temperatur die Ammoniak-Zerlegung, die von 60 % bei 1000 °C auf 7 % bei 900 °C fällt [103], was durch einen wesentlich höheren NH₃-Fluss ausgeglichen werden muss, damit ausreichend atomarer Stickstoff zur Verfügung steht.

Eine weitere Möglichkeit die Einbaueffizienz zu steigern ist die Steigerung der Abscheiderate. Bei größeren Abscheideraten wird eine höhere Einbaueffizienz von In in den Kristall beobachtet. Eine höhere Abscheiderate führt demnach auch zu einem höheren In-Anteil im Quantenfilm. Dies wurde zuerst von Keller et al. beobachtet [104]. Sohmer et al. fanden z. B. bei einer Zunahme der Abscheiderate



Abb. 5.3: Messungen der Substratoberflächentemperatur mittels Reflektometrie (durchgezogene Linie) im Vergleich mit der mittels Pyrometrie gemessener Suszeptortemperatur (gestrichelte Line) zeigen Abweichungen zwischen 70 und 100 K [101].



Abb. 5.4: Die Elektronenbarriere aus AlGaN hindert die Elektronen an der Diffusion ins p-dotierte Gebiet. Das gegensäztliche polarisationsinduzierte elektrische Feld von GaInN und AlGaN begünstigt den Einschluß [49].

von 1,1 nm/min zu 5,4 nm/min eine Zunahme des In/Ga-Verhältnisses von 1,3 zu 10,4 [105]. Röntgendiffraktometriemessungen bestätigten einen Anstieg des In-Gehalts von 18 % auf 24 % bzw. 26 % durch eine Erhöhung des TEGa-Flusses um einen Faktor 2 bzw. 4 bei sonst gleichen Bedingungen.

Die Verwendung von H_2 als Trägergas vermindert den Einbau von In in den Kristall. Durch Reaktionen an der Oberfläche entstehen indiumhaltige Hydride, wodurch die adsorbierten In-Atome verringert werden [105]. Deshalb wird während des Abscheidens des aktiven Bereiches N_2 als Trägergas eingesetzt.

Es wird vermutet, dass es bei niedrigen Temperaturen unter Verwendung von TMGa durch die CH_3 -Radikale zu einem erhöhten Kohlenstoffeinbau kommt [64]. Daher wird für die Quantenfilme nicht mehr TMGa als Ga-Quelle verwendet, sondern zu TEGa gewechselt. Der In-Gehalt der Quantenfilme bei den hier hergestellten LEDs beträgt zwischen 10 und 20 %.

Weiterhin machen sich die unterschiedlichen Gitterkonstanten von GaN und InN bei der Epitaxie bemerkbar, deren Unterschied für die *a*-Achse $\approx 10\%$ beträgt (Tab. 2.1). Bis zu einer kritischen Schichtdicke wächst das Ga_xIn_{1-x}N zunächst pseudomorph verspannt auf, bevor die GaInN-Schicht relaxiert (vgl. Kap. 2.4). Die kritische Schichtdicke nimmt dabei mit zunehmenden In-Gehalt ab [38]. Diese biaxiale Verspannung führt zu der in Kap. 2.5.2 beschriebenen piezoelektrischen Polarisation.



Abb. 5.5: Berechnete spinodale Isotherme für das $Al_yGa_xIn_{1-x-y}N$ -Materialsystem von 0 - 3000 °C [107].

Ein weiteres Problem bei der GaInN-Epitaxie ist die begrenzte Mischbarkeit. Theoretische Berechnungen zeigen, dass die ternäre Verbindung im thermodynamischen Gleichgewicht eine temperaturabhängige Mischungslücke aufweist (Abb. 5.5) [106, 107]. Für eine Temperatur von 800 °C ist die theoretisch berechnete Löslichkeit von In in GaN unter 6 % [106].

Da es sich bei der MOVPE aber nicht um einen Gleichgewichtsprozess handelt, gelten diese Berechnungen nur bedingt. Experimentell wurden auch inhomogene In-Verteilungen in Ga_xIn_{1-x} N-Quantenfilmen nachgewiesen [108–110]. Anreicherungen von In werden auch als In-Cluster bezeichnet. Diese In-Fluktuationen werden auf die Entmischung zurückgeführt [108–110]. Auch in dieser Arbeit wurden Effekte beobachtet, die auf die Entmischung zurückgehen.

5.1.3 Besonderheiten der Epitaxie von Mg-dotiertem GaN

Die p-Dotierung von GaN stellt eine Herausforderung dar, da es kaum Akzeptoren gibt, deren Energieniveau ausreichend flach ist. Die Ionisierungsenergie vom meist verwendeten Akzeptor Magnesium liegt mit 170 bis 220 meV [111] um ein Vielfaches der thermischen Energie bei Raumtemperatur von $k_{\rm B}T \approx 25 \,\mathrm{meV}$ über dem Valenzband von GaN, wobei $k_{\rm B}$ die Boltzmannkonstante und T die Raumtemperatur in Kelvin ist. Dadurch sind bei Raumtemperatur nur 0,8 bis 8% der elektrisch aktiven Akzeptoren ionisiert [112]. Somit ist eine um 2 Größenordnungen höhere Mg-Konzentration notwendig als die gewünschte Ladungsträgerkonzentration. Eine Mg-Konzentration ab 10^{20} cm⁻³ hat aber eine Verschlechterung der Kristallqualität zur Folge, die viele Stickstoff-Fehlstellen V_N enthält. Aus V_N und den auf Ga-Plätzen eingebauten Mg können sich Mg-V_N-Komplexe bilden, die als tiefe Donatoren wirken, welche die Akzeptoren kompensieren [113] und somit die p-Leitfähigkeit reduzieren.

Die Cp₂Mg-Moleküle werden im Reaktor thermisch zerlegt. Die Mg-Atome können dann in den entstehenden GaN-Kristall eingebaut werden. Ein Problem stellt dabei die begrenzte Löslichkeit von Mg in GaN dar. Ein anderes Problem ist die niedrigere Bildungsenergie von Mg-H-Komplexen gegenüber ionisiertem Mg⁺, insbesondere bei höheren Temperaturen [114]. Da diese Mg-H-Komplexe neutral sind, wurde lange Zeit keine p-Leitfähigkeit gemessen und die p-Dotierung mit Mg galt als nicht möglich.

Durch die Bestrahlung von Mg-dotiertem GaN mit niederenergetischen Elektronen konnten Amano et al. erstmals p-Leitfähigkeit erreichen [115]. Durch die niederenergetischen Elektronen wurden die Mg-H-Bindungen aufgebrochen und der Wasserstoff konnte aus der Schicht entfernt werden. Nakamura zeigte später, dass die Aktivierung auch thermisch möglich ist [116]. Die Realisierung der p-Leitfähigkeit bedeutete den Durchbruch für GaN-pn-Übergänge.

Da die Leitfähigkeit von Mg-dotiertem GaN dennoch deutlich niedriger als die n-Leitfähigkeit ist, wird die p-dotierte Schicht relativ dünn abgeschieden, damit der Serienwiderstand nicht zu groß wird. Ein weiterer Vorteil einer dünnen Mgdotierten GaN-Schicht ist die Ausdiffusion des Wasserstoffs, da Mg-H-Bindungen nicht nur aufgebrochen, sondern die Wasserstoff-Atome auch aus dem Kristall durch Diffusion entfernt werden müssen und die H-Atome eine begrenzte Diffusionsgeschwindigkeit besitzen [53]. Auch kann das Mg über Defekte in andere Epitaxieschichten hineindiffundieren. Diffundiert das Mg in den aktiven Bereich, so verschlechtert sich die Effizienz der Quantenfilme.

5.1.4 Prozessierung der Referenz-LEDs

Um vergleichbare und reproduzierbare Messergebnisse zu erhalten, ist eine definierte Prozessierung der LED-Strukturen notwendig. Diese wird im folgenden
5. Herstellung und Prozessierung von GaInN-LEDs



Abb. 5.6: Schematische, nicht maßstäbliche Darstellung der Prozessierung der Referenz-LED-Strukturen: (a) epitaktische Schichtstruktur, (b) geätzte Mesa, (c) strukturierter n-Kontakt und (d) sturkturierter p-Kontakt.

beschrieben. Eine genaue Beschreibung der Prozessierung von GaN-LEDs und der auftretenden Probleme und Lösungsmöglichkeiten sind in [117] beschrieben.

Für die p-Leitfähigkeit ist aufgrund der Wasserstoffbindungen das Mg nach der Abscheidung noch nicht elektrisch aktiv. In einem anschließenden Aktivierungsschritt müssen bei 600 °C an Luft oder Sauerstoff oder bei 700 bis 800 °C in Stickstoffatmosphäre die H-Bindungen aufgebrochen und der Wasserstoff entfernt werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurden die hergestellten Strukturen in Stickstoffatmosphäre aktiviert. Die Aktivierung der Mg-dotierten p-GaN-Schicht erfolgt ganz zu Beginn der Prozessierung. Die hohe Temperatur würde beim Tempern der Kontaktmetallisierung zur Bildung einzelner Metallinseln führen [117].

Bei den auf Saphir-Substraten abgeschiedenen LED-Strukturen (Abb. 5.6 (a)) ist aufgrund der isolierenden Eigenschaften des Saphiers ein rückseitiger Kontakt nicht möglich. Beide Kontakte müssen deshalb auf der Probenoberseite realisiert werden. Um auf die vergrabene n-dotierte Schicht eine Metallisierung aufbringen zu können (Abb. 5.1), muss diese zuerst freigelegt werden (Abb. 5.6 (b)). Naßchemisches Ätzen ist bei GaN nicht möglich, deshalb wird dazu mit reaktivem Ionenstrahlätzverfahren unter Verwendung von Argon- und Chlor-Ionen eine 400 nm hohe Mesa in das GaN geätzt.

Die Definition der Kontaktstrukturen erfolgt anschließend durch Fotolithografie, ganzflächigem Aufdampfen der Metallisierungen mit Elektronenstrahlverdampfung und Abhebetechnik (*engl. lift-off*). Dabei wird für den nseitigen Kontakt (Abb. 5.6 (c)) eine Titan-Aluminium-Nickel-Gold-Schichtfolge (Ti/Al/Ni/Au) und für den p-seitigen Kontakt (Abb. 5.6 (d)) eine Nickel-Gold-Schichtfolge (Ni/Au) verwendet, die nach der Strukturierung legiert werden.

Um die thermische Belastung für die Legierung möglichst gering zu halten, sind schnelle Temperatur-Rampen erforderlich. In einem Kurzzeittemperverfahren (*engl. rapid thermal processing*, RTP^1) wird die Schichtfolge unter Stickstoffatmosphäre in wenigen Minuten zu einer Legierung verschmolzen.

Für die in dieser Arbeit untersuchten Referenz-LEDs wurde auf die optimierten Prozessierungsparameter von M. Scherer zurückgegriffen [117]. Diese sehen eine 5-minütige Aktivierung der p-dotierten Schicht bei 800 °C im RTP-Ofen unter Stickstoffatmosphäre vor. Die nominellen Schichtdicken sind für den n-seitigen Kontakt 5 nm Ti, 120 nm Al, 20 nm Ni und 80 nm Au und für den p-seitigen Kontakt 20 nm Ni und 100 nm Au. Die Metallisierungen werden nach dem Abhebeschritt 2 min bei 600 °C (n-Kontakt) und 400 °C (p-Kontakt) in N₂-Atmosphäre legiert.

5.2 Selektiv abgeschiedene GaInN-LEDs

5.2.1 Herstellung der selektiv abgeschiedenen LEDs

Wie bei der Epitaxie der Referenz-LED-Strukturen wird für die Herstellung der selektiv abgeschiedenen LEDs zunächst eine AlN-Nukleationsschicht und eine ndotierte GaN-Pufferschicht vor dem Aufbringen der Maskenschicht abgeschieden (Abb. 5.7 (a)).

¹In der Literatur findet man hierzu auch häufig die Bezeichnung RTA vom englischen *rapid thermal annealing*, was schnelles thermisches Ausheilen bedeutet. (Die Bezeichung kommt von der Beseitigung von Kristallfehlern in Silizium bei hohen Temperaturen, die z. B. durch Ionenimplantation entstanden sind [118, 119].)

5. Herstellung und Prozessierung von GaInN-LEDs



Abb. 5.7: Auf das Al_2O_3 -Substrat mit GaN-Pufferschicht (a) wird eine dielektrische Schicht abgeschieden (b).



Abb. 5.8: In die dielekrische Maskenschicht werden streifenförmige Öffnungen geätzt (a), so dass bei der anschließenden Epitaxie eine n-leitende Rippe mit dreieckigem Querschnitt entsteht (b).

Auf das so vorbereitete Substrat wird mit Plasmaunterstützter Gasphasenabscheidung (*engl. plasma enhanced chemical vapor deposition, PECVD*) eine nominell 200 nm dicke SiO₂-Schicht abgeschieden (Abb. 5.7 (b)). Diese Schicht wird anschließend mit Fotolithografie und reaktivem Ionenätzen strukturiert, so dass streifenförmige Öffnungen entlang der beiden Kristallhauptrichtungen $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ und $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ entstehen (Abb. 5.8 (a)). Anhand von unterschiedlichen Maskierungsgeometrien sollen diese Streifen untereinander und die selektiv hergestellten LEDs mit unstrukturiert hergestellten LEDs in ihren Eigenschaften verglichen werden.

Für die folgende selektive Abscheidung ist es wichtig, die Probe sorgfältig zu reinigen, bevor sie wieder in den Reaktor geschleust wird, damit keine Verschmutzungen die Epitaxie verfälschen.

Zunächst werden die Parameter so gewählt, dass in den Öffnungen eine mit Silizium (Si) dotierte n-leitende Rippe entsteht (Abb. 5.8 (b)). Die entstehenden Kristallfacetten hängen nicht nur von den Epitaxiebedingungen, sondern auch von der Geometrie der Maskierung ab. Hierfür wird der Füllfaktor als Verhältnis zwischen Fensteröffnung und Gesamtperiode definiert (Gl. 4.2). Ist der Füllfaktor klein, so bilden sich schnell Streifen mit dreieckigem Querschnitt aus. Bei größeren



Abb. 5.9: Schematische Darstellung der $\{11\overline{2}2\}$ - und der $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten als Streifen entlang der $\langle 1\overline{1}00 \rangle$ -Orientierung [120].

Füllfaktoren ist nicht genug Material vorhanden, um ein vollständiges Dreieck auszubilden; es entstehen Streifen mit trapezförmigem Querschnitt.

Für Streifen entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Orientierung ergeben sich gegenüber der c-Ebene um $\approx 58^{\circ}$ geneigte { $11\bar{2}2$ }-Facetten, der Winkel gegenüber der c-Ebene für die { $1\bar{1}01$ }-Facetten von Streifen entlang der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Orientierung beträgt $\approx 62^{\circ}$ (Abb. 5.9) [120]. Diese Facetten besitzen eine deutlich geringere Polarisation als die {0001}-Kristallebene (Abb. 2.10).

Als Startbedingungen werden die Epitaxie-Parameter verwendet, von denen aus den FACELO-Experimenten die Ausbildung der schrägen Facetten bekannt ist [59]. Auf diese semipolaren Facetten der Streifen werden die weiteren für eine vollständige LED-Struktur notwendigen Schichten abgeschieden. Der aktive Bereich (Abb. 5.10 (a)) und die p-dotierte Deckschicht (Abb. 5.10 (b)) entsprechen nominell der Referenz-LED.



Abb. 5.10: Auf die semipolaren Seitenfacetten der Streifen werden der aktive Bereich (a) und die p-leitende Deckschicht (b) abgeschieden.



Abb. 5.11: Die Mesastruktur reicht bis in den n-dotierten Bereich, die Querschnittsform des Streifens bleibt dabei erhalten (a). Mit den Kontakten werden mehrere LED-Streifen parallel geschaltet (b).

5.2.2 Prozessierung der selektiv abgeschiedenen LEDs

Für die selektiv abgeschiedenen LEDs kann die Prozessierung der Referenz-LEDs prinzipiell übernommen werden. Der Maskensatz für die Referenz-LED-Prozessierung läßt sich jedoch nicht verwenden. Durch die Streifenhöhe von einigen μ m ist eine exakte Übertragung der Strukturen mit der zur Verfügung stehenden Kontaktlithografie nicht möglich. Je höher die Streifen (je kleiner der Füllfaktor), desto schlechter ist die Abbildung in den maskierten Bereichen zwischen den Streifen. Insbesondere die Kontaktflächen der p-seitigen Metallisierung sind sehr klein und würden durch die Lichtstreuung bei der Kontaktlithografie nicht mehr abgebildet werden. Aus diesem Grund kommt für die mit selektiver Epitaxie hergestellten LEDs ein anderer Maskensatz zum Einsatz. Durch die größeren Kontaktstrukturen werden mehrere LED-Streifen gleicher Geometrie parallel geschaltet.

Beim Ätzen der Mesa dieser Strukturen bleibt die Querschnittsstruktur der Streifen erhalten, da nur in die n-dotierte Schicht hineingeätzt wird



Abb. 5.12: Mikroskopaufnahme (a) und schematische Darstellung (b) einer fertig prozessierten LED, deren mit selektiver Epitaxie erzeugte Streifen durch die Kontaktstrukturen parallel geschaltet sind.

(Abb. 5.11(a)). Die Kontaktmetallisierung wird ebenfalls wie bei den Referenz-LEDs mit Fotolithografie, Elektronenstrahlverdampfung der Metalle und Abhebetechnik strukturiert (Abb. 5.11 (b)).

Eine Mikroskop-Aufnahme der fertig prozessierten LED-Struktur ist in Abb. 5.12 (a) zu sehen und Abb. 5.12 (b) zeigt eine schematische Darstellung.

Kapitel 6

GaInN-LEDs auf semipolaren Seitenfacetten

6.1 Prinzipieller Funktionsnachweis

Als grundlegende Frage stellt sich zuerst, ob die Herstellung von LED-Strukturen auf den mittels selektiver Epitaxie hergestellten semipolaren Seitenfacetten zu funktionsfähigen Bauelementen führt. Zu einer ersten Überprüfung der Elektrolumineszenz ist eine einfache Prozessierung ausreichend. Dazu werden einfache, runde In-Kontakte aufgedampft, die mehrere Streifen miteinander parallel verbinden. Wegen der vorhandenen Hintergrunddotierung des GaN [121] kann sogar bei Verwendung von nominell undotierten GaN-Pufferschichten Elektrolumineszenz erreicht werden; dazu sind allerdings recht hohe Spannungen erforderlich (Abb. 6.1). Die Herstellung und Funktion solcher LEDs ist damit erfolgreich nachgewiesen. Als nächster Schritt steht die Überprüfung und der Nachweis des reduzierten Piezofeldes und der damit verbundenen verbesserten Eigenschaften an.

6.2 Untersuchungen zum Nachweis des reduzierten piezoelektrischen Feldes

In Kap. 3.3 wurden die Auswirkungen des piezoelektrischen Feldes auf AlGaInN-Heterostrukturen beschrieben. Um das reduzierte Feld auf den schrägen Seitenfacetten nachzuweisen, soll gezeigt werden, dass diese Auswirkungen deutlich ge-



Abb. 6.1: Bereits mit einfacher Prozessierung läßt sich Elektrolumineszenz nachweisen.

ringer sind. Die zu untersuchenden Eigenschaften sind:

- geringere Rotverschiebung der Emissionswellenlänge und Rückverschiebung mit zunehmenden Strom.
- höhere strahlende Rekombination durch geringere räumliche Trennung, insbesondere bei dickeren Quantenfilmen.

Demnach wird für die semipolaren LEDs auf den Seitenfacetten eine kürzere Emissionswellenlänge und eine höhere Ausgangsleistung gegenüber der Referenz-LED erwartet. Eine höhere Ausgangsleistung läßt sich jedoch nur nachweisen, wenn aufgrund der Besonderheiten der selektiven Epitaxie und der Prozessierung mit der gegebenen Topografie keine neuen Herausforderungen auftreten.

6.2.1 Vergleich der Emissionswellenlängen

Zum Vergleich der Emissionswellenlängen von den semipolaren Facetten-LEDs und der Referenz-LED werden die Spektren mit Fotolumineszenz (*engl. photoluminescence*, PL), Kathodolumineszenz (*engl. cathodoluminescence*, CL) und Elektrolumineszenz (*engl. electroluminescence*, EL) gemessen. Dabei ist zu berücksichtigen, dass sowohl der Füllfaktor über die lokale Abscheiderate (vgl. Kap. 4.3.1) als auch die Kristallebenen über ihre Eigenschaften (vgl. Kap. 4.3.2) Einfluss auf



Abb. 6.2: Für Füllfaktoren > 0,35 werden zwei Emissionsmaxima detektiert (durchgezogene Linie, Bsp. FF=0,6), für Füllfaktoren < 0,35 ist nur ein Maximum messbar (gestrichelte Linie, Bsp. FF=0,3).

die Quantenfilmdicke und den In-Einbau nehmen. Beides wirkt sich auf die Emissionswellenlänge aus (Kap. 3.4). Damit wird auch eine vom Füllfaktor abhängige Emissionswellenlänge der semipolaren Facetten-LEDs erwartet.

6.2.1.1 Einfluss des Füllfaktors

Um den Einfluss des Füllfaktors zu untersuchen, sind die hergestellten, untersuchten Proben in Felder unterteilt, in denen die Füllfaktoren der maskierten Bereiche variieren. Das Emissionsspektrum wird für verschiedene Füllfaktoren gemessen. Bei diesen Messungen fällt auf, dass für Füllfaktoren > 0,35 zwei Emissionsmaxima auftreten, bei kleinen Füllfaktoren nur ein Emissionsmaximum auftritt (PL: Abb. 6.2, CL: Abb. 6.3 und EL: Abb. 6.4).

Für das Auftreten von zwei Emissionsmaxima kommen verschiedene Gründe in Betracht. Die bereits erwähnten In-Anreicherungen können beispielsweise zu dem längerwelligen Emissionsmaximum führen, aber auch Donator-Akzeptor-Rekombination oder Rekombination über Störstellen-Energieniveaus können ein zweites Emissionsmaximum verursachen.

Ortsaufgelöste CL-Messungen sollen zeigen, ob sich die Emissionsmaxima bestimmten Bereichen auf den Streifen zuordnen lassen. Die Messungen wurden



Abb. 6.3: CL-Spektren der selektiv gewachsenen LED-Strukturen auf $\{11\overline{2}2\}$ -(a) und $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten (b) in Abhängigkeit des Füllfaktors. Die Messungen wurden von der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Christen am Institut für Experimentelle Physik der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg durchgeführt.

von der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Christen am Institut für Experimentelle Physik der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg durchgeführt. Die SEM-Aufnahme der jeweiligen Abbildungen 6.5 und 6.6 zeigt zur Veranschaulichung den selektiv abgeschiedenen Streifen und die eingezeichneten Meßpunkte der Linienrasterung der rechts dargestellten Spektren. Zur besseren Übersicht ist an der Seite der Spektren der gemessene Bereich gekennzeichnet. Die mit selektiver Epitaxie hergestellten LEDs weisen unterschiedliche Querschnittsformen von



Abb. 6.4: Auch mit Elektrolumineszenz werden bei den Spektren für Streifen mit trapezförmigen Querschnitt zwei Emissionsmaxima gemessen.



6.2 Untersuchungen zum Nachweis des reduzierten piezoelektrischen Feldes

Abb. 6.5: Die SEM-Aufnahme zeigt einen Streifen in $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -orientierter Richtung mit trapezförmigen Querschnitt. Das rechte Bild zeigt die zugehörigen Spektren an den eingezeichneten Punkten.

Trapez oder Dreieck auf. Bei der systematischen Untersuchung der Querschnittsform fällt auf, dass sie sich für Füllfaktoren < 0.35 von trapezförmig zu dreieckig ändert.

Werden die ortsabhängigen Spektren betrachtet, so ist die kurzwellige Emission nur auf den seitlichen Facetten der Streifen zu sehen, während die langwellige Emission auf den seitlichen Facetten und auf der Topfacette zu sehen ist (Abb. 6.5). Dabei ist das längerwellige Emissionsmaximum auf der Topfacette



Abb. 6.6: Die SEM-Aufnahme zeigt einen Streifen in $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -orientierter Richtung mit dreieckigem Querschnitt. Das rechte Bild zeigt die zugehörigen Spektren an den eingezeichneten Punkten.



Abb. 6.7: Maxima der Emissionswellenlängen (PL) der LED-Strukturen in Abhängigkeit des Füllfaktors im Vergleich mit einer unstrukturiert abgeschiedenen Referenz-LED, gemessen bei tiefer Temperatur (20 K).

gegenüber der längerwelligen Emission auf den seitlichen Facetten jedoch geringfügig blauverschoben. Bei einem dreieckförmigen Querschnitt tritt nur kurzwellige Emission auf, die zur Spitze hin geringfügig länger wird (Abb. 6.6).

6.2.1.2 Vergleich der Spektren

Zum Vergleich untereinander wurden die Maxima der Emissionswellenlängen der LED-Strukturen mit PL ermittelt und über dem zugehörigen Füllfaktor aufgetragen. Um auszuschließen, dass die kurzwellige Emission Ursache von Akzeptor-Übergängen ist [21], wurden für die Messungen Proben verwendet, deren obere Deckschicht keine Mg-Dotierung enthält. Dabei wird zwischen der langwelligen und der kurzwelligen Emission unterschieden. Aus Abb. 6.7 ergibt sich folgende Beziehung:

$$\lambda_{Top,\langle 1\bar{1}00\rangle} > \lambda_{Top,\langle 11\bar{2}0\rangle} > \lambda_{Ref} > \lambda_{\{1\bar{1}01\}} > \lambda_{\{11\bar{2}2\}} \quad , \tag{6.1}$$

wobei die $\{11\overline{2}2\}$ -Ebenen die schrägen Facetten der in $\langle 1\overline{1}00 \rangle$ -Richtung orientierten Streifen bilden und die $\{1\overline{1}01\}$ -Ebenen die schrägen Facetten der in $\langle 11\overline{2}0 \rangle$ -Richtung orientierten Streifen. Wie bereits die CL-Spektren gezeigt haben, verschwindet die längerwellige Emission genau dann, wenn der Querschnitt des Streifens von trapezförmiger zu dreieckiger Form wechselt (Abb. 6.3). Auf die Ursachen wird in Kap. 6.2.1.3 näher eingegangen.

Die Emissionswellenlänge der Quantenfilme auf den seitlichen Facetten ist kürzer als die Emissionswellenlänge der Referenz-LED, wie dies für das reduzierte Piezofeld erwartet wurde.

Wird zunächst nur die Emission der seitlichen Facetten betrachtet, so tritt mit abnehmenden Füllfaktor eine Rotverschiebung für Streifen entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ und $\langle 11\overline{2}0\rangle$ -Kristallorientierung auf (Abb. 6.7). Dies wird wegen einer zunehmenden Abscheiderate mit abnehmenden Füllfaktor auch erwartet. Ein Vergleich mit selektiver Epitaxie von GaAs bei vergleichbaren Abmessungen bestätigt dies: Caneau et. al. fanden bei Ga_{0.47}In_{0.53}As-Quantenfilmen zwischen InP-Schichten ebenfalls eine Wellenlängenverschiebung [122]. Sie verwendeten dazu Maskenstreifen aus SiO2 von 1 mm Länge und Breiten von 10 und 30 μm mit dazwischenliegenden Kanälen von 4, 6 und 10 µm Breite. Dies ist mit bestimmten Geometrien der in dieser Arbeit untersuchten semipolaren LEDs mit Maskenbreiten von $10 \,\mu\text{m}$ und Offnungen von 4 und $6 \,\mu\text{m}$ vergleichbar. Mit abnehmenden Füllfaktor wird die mit Fotolumineszenz gemessene Wellenlänge länger. Dabei zeigte die Verwendung von TEGa bei den Quantenfilmen einen geringeren Einfluss als TMGa. Der Einfluss von TMGa wurde hier jedoch nicht näher untersucht, da für die Quantenfilme wegen der in Kap. 5.1.2 genannten Gründe nur TEGa verwendet wurde. Bei der Verwendung von TMGa würde demnach ein größerer Einfluss erwartet werden.

Caneau et al. schreiben dabei die Wellenlängenverschiebung sowohl einer größeren Dicke der Quantenfilme als auch einem höheren In-Gehalt zu. Dabei ist die Steigerung des In-Gehalts bei Verwendung von TEGa zwar geringer, jedoch ist die Schichtdicke der Quantenfilme größer [122]. Da hier die Quantenfilme ausschließlich mit TEGa abgeschieden wurden, liegen zum In-Anteil im Vergleich mit TMGa als verwendete Ga-Quelle keine Ergebnisse vor. Welchen Einfluss die Verwendung von TEGa auf den In-Einbau bei den Quantenfilmen besitzt wird in Kap. 6.2.2 diskutiert und mit den Ergebnissen von Caneau et al. verglichen.

Die Quantenfilme auf den schrägen, semipolaren Kristallebenen emittieren jedoch bei unterschiedlicher Wellenlänge. Die LED-Strukturen der $\{11\overline{2}2\}$ -Facetten emittieren bei einer ≈ 10 nm kürzeren Wellenlänge als die LED-Strukturen auf den $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten. Dies kann nicht durch das Piezofeld begründet sein, weil die Stärke des Piezofeldes für die Neigungswinkel von 58° und 62° der beiden Kristallebenenfamilien der schrägen Seitenfacetten ähnlich ist (Abb. 2.10). Es muss



Abb. 6.8: Mit abnehmenden Füllfaktor nimmt die lokale Abscheiderate wie in Kap. 4.3.1 beschrieben zu.

dafür andere Gründe geben, auf die mithilfe von strukturellen Untersuchungen später eingegangen wird (Kap. 6.2.2).

Nun wird die Emission der Top-Facette betrachtet. Die Emissionswellenlänge der Top-Facetten wird mit abnehmenden Füllfaktor kürzer (Abb. 6.7). Auch dies ist nicht durch das Piezofeld begründet.

Um die Ursachen hierfür zu ermittlen, werden die Quantenfilme genauer betrachtet. Da der Einfluss auf die Emissionswellenlänge nicht nur durch das Piezofeld gegeben ist, sondern alle in Kap. 3.4 aufgezählten Parameter sich darauf auswirken, werden die anderen Einflüsse auf die Wellenlänge untersucht. Dies sind in diesem Fall die Dicke und der In-Gehalt der Quantenfilme. Dafür wird zunächst allgemein der Einfluss der lokalen Abscheiderate analysiert, bevor die Quantenfilme genauer betrachtet werden.

6.2.1.3 Einfluss der lokalen Abscheiderate

Um die lokale Abscheiderate zu untersuchen, wurde das abgeschiedene Volumen berechnet und auf die Periode umgerechnet. Wie nach der Beschreibung aus Kap. 4.3 erwartet, nimmt mit abnehmenden Füllfaktor die lokale Abscheiderate zu (Abb. 6.8). Dadurch entstehen Streifen mit trapezförmigen Querschnitt bei großen Füllfaktoren (Abb. 6.9 (a)) und Streifen mit dreieckigem Querschnitt

6.2 Untersuchungen zum Nachweis des reduzierten piezoelektrischen Feldes



Abb. 6.9: Die SEM-Aufnahmen zeigen den Querschnitt eines Streifens mit einem Füllfaktor von beispielsweise 0,75 mit Trapezstruktur (a) und mit einem Füllfaktor von beispielsweise 0,27 mit Dreieckstruktur (b).

in Bereichen mit kleinen Füllfaktoren (Abb. 6.9 (b), vgl. Kap. 5.2.1). Bei den für diese Untersuchungen hergestellten Proben fällt auf, dass der Wechsel vom Trapez zum Dreieck bei Streifen entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Richtung bei gleichen Epitaxie-Bedingungen bei kleineren Füllfaktoren erfolgt als bei Streifen entlang der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Kristallrichtung.

Die Erklärung für das unterschiedliche Abscheideverhalten ist in der Stabilität der entstehenden Kristallfacetten zu finden. Wegen der ausgeprägten Stabilität der seitlichen { $1\bar{1}01$ }-Facetten der Streifen entlang der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Richtung bilden sich diese Facetten grundsätzlich aus (Kap. 4.3.2). Wenn zum Ende des Abscheideprozesses das Dreieck noch nicht vollständig ausgebildet ist, bleibt ein trapezförmiger Querschnitt erhalten. Die benötigte Zeit, um einen vollständig dreieckigen Querschnitt zu erhalten, hängt neben den anderen Epitaxie-Parametern auch von der lokalen Abscheiderate und somit vom Füllfaktor ab. Da während der Kristallabscheidung zwei verschiedene Kristallebenen vorliegen ({0001} und { $1\bar{1}01$ }, bzw. { $11\bar{2}2$ }), solange der Streifenquerschnitt trapezförmig ist, konkurrieren diese Ebenen um das angebotene Quellenmaterial. Damit kann die Vollständigkeit des Dreiecks bei unterschiedlichen Füllfaktoren mit der Facettenstabilität und den damit zusammenhängenden Abscheideraten der einzelnen Facetten erklärt werden:

 (1120)-orientierte Streifen: Die seitlichen {1101}-Facetten sind sehr stabil (Kap. 4.3.2). Deshalb erfolgt die Kristallabscheidung in dieser Richtung relativ langsam. Das angebotene Material wird hauptsächlich in der c-Ebene eingbaut, da diese Kristallebene weniger stabil ist und somit die Abscheiderate in dieser Richtung deutlich größer ist. Durch die begrenzenden schrägen Seitenfacetten wird diese Ebene aber mit zunehmender Kristallabscheidung immer schmaler, bis der Dreiecksquerschnitt vollständig ausgebildet ist. Jetzt nimmt die Abscheiderate auf den seitlichen Facetten sprunghaft zu, da mehr verfügbares Quellenmaterial eingebaut wird (Abb. 6.8 und vgl. Kap. 6.2.1.4).

(1100)-orientierte Streifen: Da die {1122}-Facetten eine geringere Stabilität besitzen, ist auch die Abscheiderate auf diesen Facetten größer. Das angebotene Material verteilt sich gleichmäßig auf den Facetten, was sich auch in einer stärkeren lateralen Abscheidung auswirkt und damit ein stärkeres laterales Überwachsen des Maskenmaterials zur Folge hat. Dadurch nimmt die Breite der c-Ebene langsamer ab und das Dreieck ist später vollständig ausgebildet. Durch die größere Oberfläche der seitlichen Facetten ist die Schichtdicke dünner als auf der c-Ebene (Kap. 6.2.1.4).

Dass die lokale Abscheiderate in den Öffnungen ansteigt, ist von der selektiven Epitaxie der Gruppe-III-Arsenide und -Phosphide bekannt (vgl. Kap. 4.3). Dies wird durch Diffusion der Quellgase verursacht, die durch Konzentrationsunterschiede von den Maskenbereichen zu den Öffnungen diffundieren [123]. Es wurde untersucht, wie sich dies auf die mit selektiver Epitaxie hergestellten LEDs auswirkt. Wie sich bereits bei den Untersuchungen zum Einfluss des Füllfaktors zeigte, spielt die Stabilität der Kristallebenen für die lokale Abscheiderate eine große Rolle. Daher werden auch die Unterschiede in Dicke und Zusammensetzung der einzelnen Schichten erwartet.

6.2.1.4 Unterschiede der Quantenfilmdicken

Aufgrund der unterschiedlichen Leitfähigkeiten ergeben die verschiedenen Schichten der LED-Struktur einen ausreichend guten Kontrast bei der Rasterelektronenmikroskopie (*engl. scanning electron microscopy, SEM*). Da die GaInN-Quantenfilme aber nur wenige Nanometer dünn sind, sind sie einzeln schlecht mit SEM zu erkennen, der gesamte aktive Bereich ist jedoch gut zu sehen.

Damit die Quantenfilme deutlicher zu sehen sind und der Kontrast der aktiven Zone erhöht wird, wurde je eine Probe durch selektive und ganzflächige Epitaxie mit einem In-Anteil von nominell $\approx 10\%$ in den Quantenfilmen hergestellt. Mit ganzflächiger Epitxie ist hier die Kristallabscheidung ohne Maskierung

6.2 Untersuchungen zum Nachweis des reduzierten piezoelektrischen Feldes



Abb. 6.10: Bei einer entsprechenden Vergrößerung lassen sich die Quantenfilme mit SEM erkennen. Es lassen sich die Schichtdicken des aktiven Bereiches auf beiden Facetten eines Trapezes (a) und den seitlichen Facetten bei einem Dreieck (b) messen.

gemeint, und wird im Folgenden als Referenz-LED bezeichnet. Bei einer entsprechenden Vergrößerung lassen sich die Quantenfilme im SEM erkennen. Es lassen sich die Schichtdicken des aktiven Bereiches auf beiden Facetten eines Trapezes (Abb. 6.10(a)) und den seitlichen Facetten bei einem Dreieck (Abb. 6.10(b)) messen.

Um das Abscheideverhalten der GaInN-Schichten auf den unterschiedlichen Facetten zu untersuchen und mit der Referenz-Probe zu vergleichen, wurde die Dicke des gesamten aktiven Bereiches ausgemessen und wie in Kap. 4.3.1 beschrieben "normiert" (Abb. 6.11). Damit soll geprüft werden, ob das abgeschiedene Volumen pro Substratfläche gleich ist (vgl. Gl. (4.5)). Die je nach Füllfaktor kleinere oder größere zur Abscheidung verfügbare Fläche wird durch eine angepasste lokale Abscheiderate ausgeglichen. Das bedeutet in dieser Arbeit, dass für den Vergleich die Querschnittsfläche des abgeschiedenen Materials sowohl für die in $\langle 1100 \rangle$ - als auch die in $\langle 1120 \rangle$ -Richtung orientierten, selektiv abegeschiedenen Streifen und für die mit planarer Epitaxie abgeschiedene Referenz-LED-Struktur auf die Periode umgerechnet wurde. Hier wurde wie in Kap. 4.3.1 beschrieben die Fläche einer entsprechenden Periodenbreite verwendet. Da der Indiumanteil < 20% ist, können die Abscheideraten für die GaInN-Quantenfilme und die GaN-Barrieren als vergleichbar angenommen werden [124]. Somit lassen sich über die Dauer der Kristallabscheidung von Quantenfilmen und Barriere Rückschlüsse auf die einzelnen Schichtdicken ziehen.



Abb. 6.11: Normierte aktive Schichtdicke auf den semipolaren Facetten und der Referenz-LED-Struktur.

Die Epitaxieparameter der n-dotierten Rippe wurden dahingehend angepasst, dass der Wechsel von trapezförmigen zu dreieckförmigen Querschnitt zu größeren Füllfaktoren verschoben wird. Die Auswertung der SEM-Untersuchungen dieser Proben ergab für Füllfaktoren > 0,43 einen trapezförmigen Querschnitt der Streifen, für Füllfaktoren < 0,43 ist der Querschnitt dreieckig. Bei den Streifen mit dreieckigem Querschnitt läßt sich deutlich erkennen, dass die normierte Quantenfilmdicke des aktiven Bereiches auf den $\{11\overline{2}2\}$ -Facetten mit der Rate der Referenz-LED übereinstimmt (Abb. 6.11). Auf den $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten werden jedoch dickere Quantenfilme gemessen. Dies erklärt die längerwellige Emission der Quantenfilme auf diesen Facetten.

Obwohl die Referenzprobe dünnere Quantenfilmdicken aufweist, ist die Emissionswellenlänge größer als bei den selektiv abgeschiedenen LED-Strukturen sowohl entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ - als auch der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Kristallorientierung. Dies ist durch das deutlich stärkere piezoelektrische Feld begründet, das aufgrund der Verkippung der Energiebänder zu einer Rotverschiebung in der Emissionswellenlänge bei der Referenz-Probe führt. Ein rechnerischer Vergleich dazu wurde im Zusammenhang mit dem Vergleich der In-Anteile in den Quantenfilmen der Referenz-Probe und den Facetten-Quantenfilmen durchgeführt, vgl. Kap. 6.2.2. Somit ist die gemessene Emissionswellenlänge ein Indiz für die reduzierten Piezofelder auf den schrägen Seitenfacetten.



Abb. 6.12: Normierte Quantenfilmdicke auf den semipolaren Seitenfacetten (gefüllte Symbole), den polaren Topfacetten (offene Symbole) und der Referenz-LED (Sterne) .

Bei Streifen mit trapezförmigem Querschnitt muss zwischen den zwei auftretenden Kristallebenen unterschieden werden. Dabei fällt auf, dass sowohl für Streifen entlang der $\langle 1\bar{1}00\rangle$ - als auch entlang der $\langle 11\bar{2}0\rangle$ -Kristallorientierung die Quantenfilme auf der {0001}-Top-Facette des Trapezes deutlich dicker sind als auf den schrägen Seitenfacetten (Abb. 6.12). Das Dickenverhältnis zwischen Top- und Seiten-Facette unterscheidet sich für die beiden Streifenrichtungen. Für Streifen entlang der $\langle 1120 \rangle$ -Orientierung beträgt das Dickenverhältnis des aktiven Bereiches zwischen Top- $\{0001\}$ - und $\{1\overline{1}01\}$ -Seitenfacetten 4:1, für Streifen entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Orientierung beträgt es zwischen Top- $\{0001\}$ - und $\{11\bar{2}2\}$ -Seitenfacetten 2:1 (Abb. 6.12). Qualitativ wurde das Verhältnis aus der vorhergehenden Erklärung zur Abhängigkeit der Querschnittsform von der füllfaktorabhängigen lokalen Wachstumsrate auch so erwartet. Durch die stabileren $\{1101\}$ -Facetten erfolgt die Kristallabscheidung überwiegend auf der {0001}-Top-Facette bis der dreieckige Querschnitt voll ausgebildet ist, während sich die Kristallabscheidung auf den $\{11\overline{2}2\}$ -Seitenfacetten nicht so stark von der planaren Epitaxie unterscheidet. Dieser Dickenunterschied ist für die $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Streifenrichtung durch die größere Oberfläche auf den Seitenfacetten bedingt und stimmt für die $\{11\overline{2}2\}$ -Facetten der Streifen entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Kristallorientierung mit den Messungen überein.

6. GaInN-LEDs auf semipolaren Seitenfacetten



Abb. 6.13: Zur Spitze hin nimmt die Dicke des aktiven Bereiches zu. Dies kann durch Migrations-, Adsorptions- und Desorptionsprozesse verursacht sein.

Bei den $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten ist der Dickenunterschied jedoch größer. Hier spielen neben der stabilitätsbedingten Abscheiderate unterschiedliche Adsorptions- und Desorptions-Prozesse eine Rolle, aber auch Oberflächenmigration von Ga und den zugehörigen adsorbierten Molekülen kann dazu beitragen. Diese Einflüsse lassen sich hauptsächlich dadurch erkennen, dass die Schichtdicke auf den seitlichen Facetten zur Spitze des Dreiecks hin zunimmt (Abb. 6.13).

Zur Verifizierung erfolgten mit Transmissionselektronenmikroskopie (*engl. transmission electron microscopy, TEM*) wegen der höheren möglichen Auflösung detaillierte Messungen an den Streifen mit trapezförmigem Querschnitt. Die Untersuchungen mit TEM wurden an der Universität in Regensburg im Labor für Elektronenmikroskopie von der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Zweck durchgeführt. Systematische Untersuchungen zur Schichtdicke wurden aufgrund der aufwändigen Probenpräparation für die Untersuchungen mit TEM nicht durchgeführt. Die Messungen sollten in erster Linie aufzeigen, ob der mit SEM auftretende Meßfehler für den Vergleich der Schichtdicken akzeptabel ist.

Abb. 6.14 zeigt eine TEM-Aufnahme von einem Bereich eines trapezförmigen Streifens, in dem die Quantenfilme in zwei Kristallebenen zu sehen sind. Der Unterschied in der Dicke der Quantenfilme ist deutlich zu erkennen. Messungen



Abb. 6.14: Mit TEM lassen sich die Quantenfilme einzeln auflösen und die Dicken ausmessen. Die Untersuchungen mit TEM wurden an der Universität in Regensburg im Labor für Elektronenmikroskopie von der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Zweck durchgeführt.

zeigen, daß die Dicke der einzelnen Quantenfilme in der $\{0001\}$ -Ebene der Streifen zwischen 7,5 nm und 8 nm beträgt, die Quantenfilme in der $\{1\overline{1}01\}$ -Ebene zwischen 2 nm und 2,5 nm dick sind. Dies bestätigt die Ergebnisse der Schichtdicken und normierten Abscheideraten aus den SEM-Untersuchungen in Abb. 6.11 und 6.12, somit sind diese Daten ausreichend.

Die Quantenfilme in der $\{0001\}$ -Topebene der Streifen entlang der $\langle 11\overline{2}0 \rangle$ -Richtung mit trapezförmigen Querschnitt wurden außerdem mit ortsaufgelöster Röntgendiffraktometrie (*engl. high resolution x-ray diffraction, HRXRD*) untersucht [125]. Da die schrägen Facetten mit dieser Methode nur schwer zu messen sind, wurden dazu Proben verwendet, bei denen die Epitaxieparameter dahingehend angepasst wurden, dass die Änderung der Querschnittsform zu kleineren Füllfaktoren (FF=0,33) verschoben wurde. Diese Streifen weisen bei mehreren Masken-Geometrien einen trapezförmigen Querschnitt auf. Mit HRXRD konnte festgestellt werden, dass es sich bei der Verformung um elastische Verformung handelt. Auch konnte die Dicke der Quantenfilme bestimmt werden. Wie aufgrund der Abscheidecharakteristik der verschiedenen Facetten zu erwarten, wird mit abnehmenden Füllfaktor (zunehmenden Maskenbreiten) die Breite der oberen Fa-

cette immer schmaler, jedoch nimmt die Dicke sowohl der Quantenfilme als auch der dazwischen liegenden Barrieren zu (Abb. 6.15). Die kürzer werdende Emissionswellenlänge der Quantenfilme auf der Top-Facette (vgl. Kap. 6.2.1.2, Abb. 6.7) steht im Widerspruch zu der zunehmenden Quantenfilmdicke (Abb. 6.12). Wegen der abnehmenden Wellenlänge würde mit abnehmenden Füllfaktor auch eine abnehmende Dicke der Quantenfilme erwartet. Dickere Quantenfilme führen durch Abnahme der Quantisierung, einem höheren In-Anteil und stärkerer Verspannung (Abb. 6.15) zu einer Rotverschiebung, die Emission der Top-Facetten-Quantenfilme weist aber mit abnehmenden Füllfaktor eine Blauverschiebung auf. Bei Streifen entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Kristallorientierung verschiebt sich die Wellenlänge von 460 nm bei einem Füllfaktor von 0,6 zu 424 nm bei einem Füllfaktor von 0,375. Bei der $\langle 11\overline{2}0 \rangle$ -Kristallorientierung zeigt sich diese weniger auffällig, da auch durch die Abscheidecharakteristik weniger Streifen einen trapezförmigen Querschnitt besitzen. Hier findet die Verschiebung von 442 nm bei einem Füllfaktor von 0,75 nach 438,5 nm bei einem Füllfaktor von 0,6 statt. Im Gegensatz dazu zeigen die Streifen entlag der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Kristallorientierung bei dieser Füllfaktoränderung noch die erwartete Rotverschiebung (von 445 nm bei FF=0,75 nach 460 nm bei FF=0,6). Wie die ortsaufgelösten HRXRD-Messungen zeigen, nimmt mit abnehmenden Füllfaktor ebenfalls der In-Anteil von 12% auf 15% in den Top-Quantenfilmen der untersuchten Probe zu, der auch eine Rotverschiebung erwarten läßt. Es stellt sich die Frage, woher die Blauverschiebung der Emissionswellenlänge der Top-Facetten-Quantenfilme kommt.

Ein Ansatz zur Klärung des Widerspruchs ist der Einfluss der Breite der Topfacette. Die Topfacette der Streifen in $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Richtung ist bei gleichem Füllfaktor immer schmaler als die der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Richtung, auch die Wellenlänge der Topfacette ist bei Streifen entlang der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Richtung ist trotz dickerer Quantenfilme kürzer als bei Streifen entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Richtung, deren Top-Facetten-Quantenfilme dünner sind (Abb. 6.7 und 6.12).

Weiterhin fällt bei den $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -orientierten Streifen auf, dass hier zunächst beim größten Füllfaktor und den breiten Top-Facetten mit abnehmenden Füllfaktor die erwartete Rotverschiebung auftritt, die Wellenlänge dann aber mit abnehmender Breite der Topfacette wieder kürzer wird (Abb. 6.7). Dies kann damit begründet werden, dass sich an den oberen Ecken der Streifen mit trapezförmigen Querschnitt Quantendrähte bilden können, deren Emissionswellenlänge mit abnehmender Breite kürzer wird. Für die Erzeugung von Quantendrähten nutzten Kaluza et al. V-Gräben, um in der unteren Spitze des Grabens die Beweglichkeit



6.2 Untersuchungen zum Nachweis des reduzierten piezoelektrischen Feldes

Abb. 6.15: Von A. A. Sirenko gemessener In-Anteil und Schichtdicken von Quantenfilmen und Barrieren des aktiven Bereiches auf der $\{0001\}$ -Topfacette von entlang $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -orientierten Streifen. Sowohl der In-Gehalt als auch die Schichtdicke nehmen mit abnehmenden Füllfaktor (zunehmender Maskenbreite) zu [125].

der Ladungsträger weiter einzuschränken [91].

Um bei den Streifen mit trapezförmigem Querschnitt Quantendrähte zu vermuten, ist die Breite der Topfacette im μ m-Bereich jedoch nicht ausreichend schmal. Denkbar wäre jedoch die Ausbildung von Quantendrähten an den Kanten zwischen Seiten- und Top-Facette, auch wenn bei den Untersuchungen mit Elektronenmikroskopie Quantendrähte nicht explizit nachgewiesen werden konnten. Auch spricht der durch die hohe Defektdichte in den Top-Quantenfilmen gezeigte hohe In-Gehalt (Abb. 6.18 und 6.19) und die Breite des Spektrums dagegen, dass die langwellige Emission allein durch Quantendrähte verursacht wird. Dies läßt sich aber dadurch erklären, dass sich die langwellige Emission der Top-Quantenfilme mit dem Signal der Drähte überlagert und somit ein breites Spektrum zeigt.

Für die langwellige Emission auf den Seitenfacetten kann außer dem Einfluss durch Quantendrähte Diffusion von Ladungsträgern in Betracht kommen, da der Anregungspunkt nicht klein genug ist. Weiterhin ist auf den seitlichen Flanken Rekombination über Defekte möglich, die durch die selektive Epitaxie abknicken und nicht mehr nach oben, sondern zu den schrägen Facetten hin laufen [126]. Für die letztere Annahme spricht insbesondere die schlechtere Kristallqualität auf den $\{11\overline{2}2\}$ -Facetten bei den entlang $\langle 1\overline{1}00 \rangle$ orientierten Streifen, wie dies in Abb. 6.25 zu sehen ist.

Die Ladungsträgerdiffusion ist neben möglichen entstandenen Quantendrähten bei der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Streifenrichtung eher für das langwellige Signal auf den Seitenfacetten verantwortlich, wie CL-Messungen zeigen, welche die Emission bei verschiedenen Wellenlängenbereichen wiedergeben (Abb.6.16). Die zugehörige SEM-Aufnahme der Streifen zeigt Abb. 6.16 (a). Die sehr dunkel erscheinenden, dünnen Streifen sind die erkennbaren Maskenbereiche. Die benachbarten, breiteren Streifen in hellem Grau sind die schrägen Seitenfacetten und die ungefähr gleich breiten, in mittlerem Grau erscheinenden Streifen dazwischen sind die Topfacetten der Strukturen.

Im Bereich von 370 nm bis 410 nm zeigt sich eine relativ starke Emission auf den schrägen $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten (Abb. 6.16 (b)). Bei längeren Wellenlängen läßt sich zunächst auf der Topfacette eine schwache Emission detektieren, die mit zunehmender Wellenlänge stärker wird (Abb. 6.16 (c) und (d)). Dabei ist die Emission im Übergangswinkel zwischen Top- und Seitenfacette am stärksten. Ob es sich an den Kanten dabei tatsächlich um Quantendrähte, Emission über Defekte oder Überlagerung durch Anregung auf Top- und Seitenfacette handelt,



Abb. 6.16: SEM-Aufnahme von Streifen mit trapezförmigen Querschnitt entlang der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Richtung (a) und ortsaufgelöste CL-Messungen (b-d). Die schrägen Seitenfacetten emittieren stark bei kurzer Wellenlänge (b), während die Top-Facette bei längerer Wellenlänge emittiert (c) und bei noch längerer Wellenlänge emittiert insbesondere die Kante zwischen Top- und Seitenfacette (d).

ließ sich in dieser Arbeit nicht klären.

Bei Streifen mit dreieckigem Querschnitt zeigen die ortsaufgelösten CL-Messungen, dass die kurzwellige Emissionswellenlänge von den Seiten zur Spitze hin um 2-3 nm länger wird (Abb. 6.6 (b)). Dies wird dadurch verursacht, dass die Quantenfilme zur Spitze hin dicker werden (Kap. 6.2.1.4, Abb. 6.13). Dies ist vermutlich durch unterschiedliche Absorptions- und Desorptionsprozesse sowie Diffusions- und Migrationsprozesse während der Abscheidung der Quantenfilme verursacht aufgrund der niedrigeren Abscheidetemperatur der Quantenfilme gegenüber der n-dotierten Rippe. Auch ist die Spitze des Streifen näher an den Quellgasen in der Gasphase, so dass diese hier bevorzugt adsorbieren. Weiterhin nehmen lokale Temperaturunterschiede Einfluss. Wird die relativ kurze Diffusionslänge der In- und Ga-Vorstufen in der Gasphase insbesondere bei der niedrigen Abscheidetemperatur der Quantenfilme berücksichtigt (z. B. 11 μ m für Ga), kann davon ausgegangen werden, dass die Konzentration der Quellgase im Bereich der Spitze höher als im Bereich des Streifenbodens ist [127]. Bei der höheren Abscheidetemperatur der n-dotierten Rippe ist das anders.

Dies kann bei Streifen mit trapezförmigen Querschnitt zusammen mit den spezifischen Eigenschaften der Kristallebenen die Ursache für die längerwellige Emission an den Kanten zwischen Top- und Seitenfacette sein, aufgrund von größerer Filmdicke bzw. Quantendrähte und höherem In-Gehalt.

Da eine systematische Messung zur füllfaktorabhängigen Untersuchung der Quantenfilmdicke auf den seitlichen Facetten nicht möglich war, liegen hierzu keine Ergebnisse vor.

Bei Streifen mit einem trapezförmigen Querschnitt würde bei den $\{11\overline{2}2\}$ -Facetten aufgrund der kürzeren Emissionswellenlänge von ca. 375 nm (FF=0,75) bis ca. 395 nm (FF=0,325) erwartet, dass die Quantenfilme auf diesen Facetten dünner sind, als die Quantenfilme auf den $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten, wie das bei den Streifen mit dreieckigem Querschnitt der Fall ist. Die Quantenfilme auf den $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten emittieren von 395 nm (FF=0,75) bis ca. 400 nm (FF=0,5), bei längerer Wellenlänge (Abb. 6.7), demnach würden hier dickere Quantenfilme erwartet werden. Dies ist aber nicht der Fall. Die Quantenfilme auf den $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten mit ca. 2 nm etwas dünner, als die Quantenfilme auf den $\{1\overline{1}22\}$ -Facetten mit ca. 3 nm (Abb. 6.12), da die Abscheiderate zugunsten der $\{0001\}$ -Top-Ebene reduziert ist. Der Grund für die dennoch längerwellige Emission kann ein Unterschied im In-Anteil sein, auf den in Kap. 6.2.1.5 eingegangen wird.

6.2.1.5 Unterschiede beim In-Anteil

Mit der zunehmenden Dicke steigt der In-Anteil in den Quantenfilmen an [53]. Bei den ortsaufgelösten HRXRD-Messungen der Topfacetten von Streifen mit trapezförmigem Querschnitt wurde mit abnehmenden Füllfaktor (zunehmender Maskenbreite) ein Anstieg des In-Gehaltes in den Quantenfilmen in der c-Ebene von 12 auf 15 % festgestellt (Abb. 6.15). Zum In-Anteil der Quantenfilme auf den seitlichen Facetten liegen zur Abhängigkeit vom Füllfaktor leider keine systematischen Messergebnisse vor.

Andere übliche Messmethoden wie energiedispersive Röntgenspektroskopie

6.2 Untersuchungen zum Nachweis des reduzierten piezoelektrischen Feldes

(engl. Energy Dispersive X-ray Analysis, EDX) und DALI (engl. digital analysis of lattice images) scheiterten hier leider aufgrund des zu niedrigen In-Anteils auf der untersuchten Fläche, bzw. der zu geringen Quantenfilmdicke auf den seitlichen Facetten [128]. Unter DALI versteht man eine quantitative Analyse der lokalen Materialkomposition mit TEM. Durch eine exakte Messung der Gitterabstände in hochauflösenden TEM-Aufnahmen kann mit Gl. (2.1) und Gl. (2.2) die lokale Zusammensetzung bestimmt werden [129]. Die DALI-Messungen mit TEM wurden an der Universität in Regensburg im Labor für Elektronenmikroskopie von der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Zweck durchgeführt. Die Bestimmung der lokalen Zusammensetzungen des GaInN in den Quantenfilmen ist von großer Wichtigkeit zur Auswertung der Eigenschaften der schrägen Seitenfacetten, weil damit wichtige Zusammenhänge von Dicke, Zusammensetzung, Emissionswellenlänge und Piezofeld der schrägen Seitenfacetten beschrieben werden können.

Messungen mit Sekundär-Ionen-Massenspektroskopie (*engl. secondary ion* mass spectroscopy, SIMS) konnten trotz des relativ großen Fehlers bessere Daten liefern. Die SIMS-Messungen wurden am 4. Physikalischen Institut der Universität Stuttgart von der Arbeitsgruppe des Kristall-Labors durchgeführt. Aus den Ergebnissen läßt sich bei den In-Anteilen kein eindeutiger Unterschied feststellen, dennoch zeigen die Kennlinien eine Tendenz zu einem höheren In-Anteil der $\{1\overline{1}01\}$ -Ebene gegenüber der $\{11\overline{2}2\}$ -Ebene (Abb. 6.17).

Um den Einfluss der Kristallebene auf den In-Einbau wenigstens qualitativ zu untersuchen, müssen daher andere Methoden herangezogen werden. Für die Quantenfilme mit sehr hohem In-Gehalt läßt sich beispielsweise eine weitere interessante Beobachtung machen. Im Bereich der Quantenfilme und GaN-Barrieren in der $\{0001\}$ -Kristallebene sind für beide Streifenrichtungen (entlang der $\langle 11\overline{2}0\rangle$ und entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Kristallrichtung orientiert) Defekte zu erkennen, die wie Löcher im Material aussehen (Abb. 6.18 (a)). Im aktiven Bereich auf den schrägen Facetten beider Streifenrichtungen treten diese Löcher nicht auf (Abb. 6.18 (b)). Eine Referenz-Probe wurde unter den gleichen Bedingungen hergestellt wie die selektiv abgeschiedenen LEDs. Auch bei dieser Probe sind keine solchen Defekte zu erkennen (Abb. 6.19 (a)). Eine zweite planare Referenz-Probe wird hergestellt, bei der die Prozesstemperatur während der Abscheidung des aktiven Bereiches um 25 K reduziert wird, um einen höheren In-Anteil zu erhalten (vgl. Kap. 5.1.2). Bei dieser Probe sind mit SEM wieder solche lochartigen Defekte zu sehen, allerdings nicht in dreieckiger Form (Abb. 6.18 (a)) sondern rechteckig (Abb. 6.19 (b)). Die dreieckige Form hängt bei den mit selektiver Epitaxie hergestellten



Abb. 6.17: SIMS-Ergebnisse lassen auf der $\{1\overline{1}01\}$ -Ebene einen höheren In-Anteil gegenüber der $\{11\overline{2}2\}$ -Ebene vermuten (Durchgeführt am 4. Physikalischen Institut der Universität Stuttgart von der Arbeitsgruppe des Kristall-Labors).



Abb. 6.18: Die SEM-Aufnahmen zeigen die Quantenfilme mit hohem In-Anteil: Top-Quantenfilme einer Trapezstruktur (a) und seitliche Quantenfilme (b).

Proben mit der Ausbildung der schrägen Facetten zusammen. Mögliche Ursachen für die Ausbildung der Defekte sind eine schlechte Kristallqualität aufgrund von zu niedriger Temperatur (vgl. Kap. 6.2.1.4) und die Bildung von lokalen In-Anreicherungen aufgrund eines zu hohen In-Anteils. Dieses Experiment bestätigt, dass der In-Anteil in den Quantenfilmen der Top-Facette deutlich höher ist als der In-Anteil der Seitenfacetten-Quantenfilme der semipolaren LEDs und auch höher als der In-Anteil der Referenz-LEDs. 6.2 Untersuchungen zum Nachweis des reduzierten piezoelektrischen Feldes



Abb. 6.19: Die SEM-Aufnahmen zeigen die Quantenfilme mit hohem In-Anteil der Referenzstruktur: Referenz-Quantenfilme bei gleicher Prozesstemperatur wie die selektive Epitaxie (a), Referenz-Quantenfilme bei 25 K niedrigerer Prozesstemperatur (b).

Wahrscheinlich ist neben lokalen Temperaturunterschieden ein unterschiedlicher In-Einbau aufgrund der unterschiedlichen Abscheideraten auf den Kristallfacetten der Grund. Ein höherer In-Anteil in der *c*-Ebene führt zu In-Clustern aufgrund der Mischungslücke (Kap. 5.1.2), der Anteil auf den seitlichen Facetten ist niedriger, es bilden sich keine Anreicherungen. Auch die Emissionsspektren zeigen, dass der In-Anteil der Quantenfilme der Top-Facette höher ist als auf den seitlichen Facetten. Die Eigenschaften der schrägen Facetten haben auch hier einen starken Einfluss auf das Abscheideverhalten, da durch die niedrigere Abscheiderate auf den Seitenfacetten auch der In-Einbau geringer ist. Dies erklärt den am Ende von Kap. 6.2.1.4 beschriebenen Widerspruch zu Emissionswellenlänge und Quantenfilmdicke auf den seitlichen Facetten bei Streifen mit trapezförmigen Querschnitt in Abb. 6.7 und Abb.6.12.

6.2.2 Emissionswellenlänge und Piezofeldstärke

Werden die Maxima der Emissionswellenlängen der LED-Strukturen verglichen, zeigt die Messung der integralen PL-Spektren einen nahezu konstanten Unterschied der Wellenlängen von ≈ 10 nm zwischen der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ - und der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Streifenrichtung bei gleichem Füllfaktor (Abb. 6.7). Dieser Unterschied kann nicht durch die unterschiedlich starken Piezofelder verursacht sein, da sich diese aufgrund der ähnlichen Neigungswinkel (Abb. 5.9) nur wenig unterscheiden (Abb. 2.10). Dieser Unterschied wird sowohl durch die Schichtdicken als auch durch einen höheren In-Anteil der Quantenfilme auf den {1101}-Kristallebenen



Abb. 6.20: Vergleich von Quantenfilmdicken und Emissionswellenlänge in Abhängigkeit der Quantisierung und des Piezofeldes bei einem In-Anteil von 10 %. Erklärung siehe Text.

begründet. Da Messungen nur qualitativ möglich waren und die Ergebnisse nicht eindeutig sind, soll dies nun durch Berechnungen in Bezug auf die Einflussfaktoren Emissionswellenlänge, Quantenfilmdicke und Piezofeldstärke überprüft werden.

Um den Einfluß des Piezofeldes zu ermitteln, dienen die von Feneberg et al. experimentell bestimmten Werte der Piezofeldstärke von $1.9 \text{ MV/cm} \pm 0.2 \text{ MV/cm}$ für die Referenzprobe und $0.1 \text{ MV/cm} \pm 0.1 \text{ MV/cm}$ für die semipolaren $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten bei einen In-Anteil von 10% [3]. Werden nun die zu erwartenden Emissionswellenlängen unter Berücksichtigung des Quantisierungseffektes und des piezoelektrischen Feldes aufgetragen, zeigt sich der starke Einfluss auf die Wellenlänge (Abb. 6.20). Hier wurde für die Referenzprobe nur der Wert von 1.7 MV/cm verwendet, da dies sehr gut mit dem experimentell ermittelten Wert übereinstimmt.

Für die stark polare c-Ebene wirkt sich eine geringe Änderung der Quantenfilmdicke in einer deutlichen Änderung der Wellenlänge aus. Für die deutlich reduzierten Felder auf den schrägen Seitenfacetten ist der Einfluss wesentlich ge-

6.2 Untersuchungen zum Nachweis des reduzierten piezoelektrischen Feldes

ringer. Insbesondere nimmt der Einfluss mit zunehmender Quantenfilmdicke ab. Zum Vergleich wird das Diagramm mit den experimentellen Werten der Quantenfilmdicke und Emissionswellenlänge ergänzt (Abb. 6.20). Der Übersichtlichkeit halber sind hier die Fehlerbalken der Quantenfilmdicken nicht eingetragen.

Für die Referenzprobe (Sternsymbol in Abb. 6.20) stimmen bei der gemessenen Quantenfilmdicke unter Berücksichtigung der Meßtoleranzen der In-Anteil von 10% und die angenommene Pizeofeldstärke gut überein. Dagegen emittieren die Quantenfilme auf den seitlichen Facetten bei längerer Wellenlänge als aufgrund der niedrigen Piezofelder bei 10% In erwartet würde, ginge man von einem gleichen In-Anteil aus. Wäre der In-Anteil der Referenzprobe und der Quantenfilme auf den seitlichen Facetten wirklich gleich, so müsste auch der Unterschied in der Wellenlänge zwischen der Referenz-LED und der semipolaren LED viel stärker ausfallen. Der In-Anteil der Facetten-LED-Quantenfilme kann demnach als höher als bei der Referenzprobe angenommen werden. Das In baut sich somit besser bei diesen Kristallebenen ein, allerdings ist wegen des geringeren Piezofeldes auch ein deutlich höherer Anteil für längere Wellenlängen notwendig.

Auch zeigt sich bei der Emission der entlang $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ - und $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -orientierten Streifen-LEDs, dass der Unterschied in der Wellenlänge zwischen beiden Facetten-LED-Typen nicht allein in der Quantenfilmdicke und den geringfügig unterschiedlich starken Piezofeldern begründet ist. Da das Piezofeld in der $\{11\bar{2}2\}$ -Ebene nur sehr schwach ist, wird erwartet, dass auch die Emissionswellenlänge mit zunehmendender Quantenfilmdicke ähnlich langsam ansteigt, wie die Theoriekurve bei einem Piezofeld von 100 kV/cm. Im Gegensatz dazu zeigen die experimentell ermittelten Wellenlängen und die zugehörige berechnete Kurvenanpassung (*engl. Fit*) eine deutlich stärkere Zunahme, als aufgrund der Dicke der Quantenfilme erwartet wird.

Eine zu der semipolaren Kristallebene und hohen Abscheiderate des GaInN auf dieser Facette passende Erklärung dafür ist ein zunehmender In-Anteil mit zunehmender Quantenfilmdicke. Bei den sehr dünnen Quantenfilmen erscheint der In-Anteil deutlich niedriger als bei der $\{1\overline{1}01\}$ -Kristallebene zu sein. Erst bei dickeren Quantenfilmen wird eine ähnliche Emissionswellenlänge und somit ähnlich hoher In-Anteil erreicht. Dies deckt sich mit den Beobachtungen zum Epitaxieverhalten, da die Abscheiderate auf den weniger stabilen Facetten größer ist und somit der In-Gehalt mit zunehmender Schichtdicke ansteigt (vgl. Kap. 5.1.2).

Ein höherer In-Gehalt wurde auch von Caneau et al. bei der selektiven Epitaxie gefunden [122]. Da von Caneau et al. aber nur eine Kristallrichtung der GaAsbasierenden Halbleiter untersucht wurde, kann dafür die Erklärung ebenfalls in der Stabilität der Kristallebenen liegen.

Die Wellenlänge der $\{1\overline{1}01\}$ -Ebenen steigt dagegen so schwach an, wie dies auch der Verlauf der Wellenlänge bei zunehmender Quantenfilmdicke unter Berücksichtigung des reduzierten Piezofeldes erwarten lässt. Die eingefügte Kurvenanpassung zu den Meßpunkten der experimentell ermittelten Emissionswellenlänge und Quantefilmdicke weist einen ähnlichen Kennlinienverlauf auf, wie die Kennlinie der von der Quantenfilmdicke abhängigen Wellenlänge bei einer Piezofeldstärke von 100 kV/cm. Den Vergleich der rechnerischen Ergebnisse dazu gibt Tab. 6.1 wieder. Dies lässt auf einen konstanten In-Anteil der Quantenfilme auf dieser Kristallebene schließen, der aber höher ist als der In-Anteil der Referenz-LED. Tab. 6.1 zeigt, dass der In-Anteil auf den seitlichen Quantenfilmen sogar höher als 15% betragen muss, sogar wenn man von der oberen Tolaranz-Feldstärke von 200 kV/cm für einen In-Anteil von 10% ausgeht. Hier kann ein Wert von 16 bis 17% angenommen werden.

In-Anteil	Piezofeldstärke	QW-Dicke	λ be rechnet
10 %	$1700{ m kV/cm}$	$3\mathrm{nm}$	$470,8\mathrm{nm}$
		$4\mathrm{nm}$	$509,3\mathrm{nm}$
		$5\mathrm{nm}$	$551,7\mathrm{nm}$
10 %	$200\mathrm{kV/cm}$	$3\mathrm{nm}$	$402,1\mathrm{nm}$
		$4\mathrm{nm}$	$408,5\mathrm{nm}$
		$5\mathrm{nm}$	$413{,}6\mathrm{nm}$
15 %	$300\mathrm{kV/cm}$	$3\mathrm{nm}$	$435,1\mathrm{nm}$
		$4\mathrm{nm}$	$445{,}4\mathrm{nm}$
		$5\mathrm{nm}$	$453,\!6\mathrm{nm}$

Tab. 6.1: Berechnung der Emissionswellenlänge für die polare c-Ebene (Feldstärke 1700 kV/cm) und die semipolaren Kristallebenen bei einem In-Anteil von 10 bzw. 15 % und einer angenommenen Feldstärke von 200 bzw. 300 kV/cm.

Damit haben die Eigenschaften der Kristallebenen, insbesondere deren Stabilität ebenfalls einen Einfluss auf die Zusammensetzung der GaInN-Quantenfilme:

• {1101}-Ebenen: stabile Kristallebenen, langsame Abscheiderate, konstanter In-Einbau.

 {1122}-Ebenen: Kristallebenen weniger stabil, schnellere Abscheiderate, In-Anteil steigt mit der Abscheiderate und steigender QW-Dicke. In-Anteil für dünnere Quantenfilme bis ca. 4 nm wahrscheinlich geringer als auf den {1101}-Ebenen.

6.2.3 Stromabhängige Wellenlängenverschiebung

Der durch das Piezofeld verursachte QCSE führt bei GaInN-LEDs zu einer Rotverschiebung der Emissionswellenlänge. Stehen mehr freie Ladungsträger zur Verfügung, beispielsweise durch Erhöhen des Stromes in Flussrichtung, so schirmen diese das anliegende Piezofeld zumindest teilweise ab und die Emission verschiebt sich zu kürzeren Wellenlängen. Ist das Piezofeld auf bestimmten Kristallebenen reduziert, bzw. liegt kein Feld an, wird demzufolge auch eine entsprechend dem schwächeren Feld reduzierte, bzw. keine Rotverschiebung erwartet. Somit kommt es bei Erhöhen des Stroms in Flussrichtung zu einer weniger starken, bzw. keiner Rückverschiebung zu kürzeren Wellenlängen.

Dieser Effekt wurde durch einen Vergleich von stromabhängiger Emissionswellenlänge zwischen einer Referenz-LED und einer entlang der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Kristallrichtung orientierten Streifen-LED mit reduziertem Piezofeld nachgewiesen [130]. Das Emissionsmaximum der beiden bei nominell gleichen Bedingungen hergestellten LEDs wurde bei verschiedenen Stromstärken von 1 mA bis 50 mA gemessen (Abb. 6.21). Während bei der Referenz-LED eine Verschiebung um $\Delta\lambda \approx 3,5$ nm stattfindet, beträgt die Verschiebung der LED-Struktur auf der $\{1\bar{1}01\}$ -Facette mit $\Delta\lambda \approx 1,5$ nm weniger als die Hälfte.

Aufgrund des angenommenen deutlich geringeren Piezofeldes auf der $\{1\overline{1}01\}$ -Facette mit $0, 1 \pm 0, 1 \,\mathrm{MV/cm^2}$ gegenüber $1, 9 \pm 0, 2 \,\mathrm{MV/cm^2}$ auf der polaren c-Ebene scheint dieser Unterschied aber viel zu klein. Dies kann durch die im Folgenden beschriebenen, gegebenen Umstände erklärt werden.

Wie aus Kap. 6.2.2 hervorgeht, ist der In-Anteil der seitlichen Facetten-Quantenfilme höher als 10 %, wie bei der Referenz-LED. Das anliegende Piezofeld ist stärker als die für 10 %-In-Anteil angenommenen $0, 1 \pm 0, 1 \text{ MV/cm}^2$, während der In-Anteil der Referenz-Probe bei 10 % sehr gut passt und das anliegende Feld mit $1,7 \text{ MV/cm}^2$ gut in der Toleranz liegt $(1,9 \pm 0, 2 \text{ MV/cm}^2)$.

Bei einem In-Anteil von 10 % bei der Referenz-LED müsste die Wellenlänge ohne das Piezofeld, nur unter Berücksichtigung der Quantisierung, bei der angenommenen Quantenfilmdicke von $\approx 3 \text{ nm}$ bei 395 nm liegen (Abb. 6.20). Die



Abb. 6.21: Die Wellenlängenverschiebung ist auf der polaren c-Ebene mehr als doppelt so groß wie auf der weniger polaren $\{1\overline{1}01\}$ -Ebene [130].

kürzeste gemessene Wellenlänge liegt aber bei 425,8 nm. Dadurch wird deutlich, wie gering der erzielte Abschirmungseffekt ist.

Bei der LED-Struktur auf der $\{1\overline{1}01\}$ -Ebene liegt der Punkt kürzester Wellenlänge bei 424,7 nm. Ohne Piezofeld entspricht das bei einer Quantenfilmdicke von 5 nm einen In-Anteil von 14%. Die Quantenfilme auf den seitlichen Facetten sind zwischen 4 nm und 5 nm dick. Dies stimmt mit der angenommenen geringen Piezofeldstärke und den als höher anzunehmenden In-Anteil gegenüber der Referenz-LED mit 10% überein.

Da eine quantitative, experimentelle Bestimmung der In-Anteile aus Mangel an geeigneten Messmethoden nicht möglich war, war auch eine eindeutige Analyse und Klärung zum Einfluss des Piezofeldes nicht möglich.

6.3 Quantenausbeute

Der prinzipielle Funktionsnachweis der LEDs wurde zu Beginn des Kapitels erbracht. Für Untersuchungen zur Quantenausbeute werden die LEDs wie in Kap. 5.2.2 beschrieben prozessiert. Dabei traten strukturbedingte Probleme auf, deren Lösungen im Folgenden beschrieben sind.



Abb. 6.22: Stabilitäts-Test: Die mit SiO_2 (a) und Si_xN_y (b) beschichteten Proben wurden 30 min bei 1100 °C in geringer N₂-Atmosphäre und prozessähnlichem NH₃-Gehalt getempert. Die SiO₂-Schicht ist stabil, die Si_xN_y-Schicht zersetzt sich. [130]

6.3.1 Probleme der Prozessierung und Lösungen

6.3.1.1 Wahl der Maskierungsschicht

Es hat sich herausgestellt, dass die Wahl der Maskierungsschicht bei den Facetten-LEDs eine wichtige Rolle spielt. Für die Maskierung der selektiven Epitaxie werden typischerweise die Dielektrika SiO_2 und Si_xN_y verwendet, wie in Kap. 4.3 beschrieben. Aus dem Einsatz der selektiven Epitaxie für FACELO hat sich Si_xN_y als vorteilhaft für die Materialqualität herausgestellt [59]. Deshalb wurde zunächst für die selektive Epitaxie Si_xN_v verwendet. Allerdings wurde bei den fertig prozessierten LEDs überwiegend Kurzschluss-Verhalten gemessen, mit Ausnahme der größten Füllfaktor-Bereiche [130]. Eine Analyse mit SEM zeigte, dass sich das Masken- Si_xN_y während der Epitaxie und Prozessierung teilweise zersetzt hat. Bei der Parallelschaltung von mehreren LED-Streifen mit der p-seitigen Metallisierung verläuft die p-Kontaktstruktur direkt über dem Maskenmaterial. Bei defektem Maskenmaterial kommt es zu einer direkten Verbindung von p- und n-dotiertem Bereich über das Metall. Nur bei Streifen-LEDs mit dem größten Füllfaktor sind die einzelnen Streifen bereits koalesziert, die Maskenbereiche also vollständig lateral überwachsen und es tritt kein solcher Kurzschluss auf. Bei diesen LED-Streifen dominiert die langwellige Emission der Top-Facetten, weil durch die Koaleszenz nur wenig Fläche der Seitenfacetten vorhanden ist, die Top-Facette aber sehr breit ist und deshalb eine deutlich größere Fläche besitzt.


Abb. 6.23: Bei Verwendung einer dotierten GaN-Pufferschicht ist die notwendige Spannung deutlich niedriger.

Um die Stabilität der Maskenschicht zu überprüfen, wurden in einem speziell abgestimmten Test jeweils Si_xN_y - und SiO_2 -Schichten prozessähnlichen Bedingungen ausgesetzt, einschließlich des RTP-Schrittes zur Mg-Aktivierung [130].

Aus dem Versuch geht eindeutig hervor, dass SiO_2 das stabilere Maskenmaterial ist (Abb. 6.22). Es hält den thermischen Belastungen vollkommen Stand. Die Si_xN_y -Schicht ist dagegen nach dem Test stellenweise zersetzt. Eine Ursache dafür kann eine nicht-stöchiometrische Zusammensetzung des Si_xN_y sein. Da sich für die hergestellten LEDs bei Verwendung von SiO_2 keine Nachteile ergeben, wurde für die weiteren LED-Strukturen ausschließlich SiO_2 als Maskierung verwendet.

6.3.1.2 Mesa-Strukturierung

Da durch die spektralen Untersuchungen bestätigt wurde, dass das Piezofeld deutlich schwächer ist, soll die optische Leistungsfähigkeit der semipolaren Streifen-LEDs geprüft werden. Um den recht hohen Serienwiderstand der ersten LEDs zu reduzieren, wurden n-dotierte GaN-Pufferschichten verwendet. Damit sind moderate Spannungswerte möglich (Abb. 6.23). Die LED-Strukturen mit kleinen Füllfaktoren zeigen bessere Eigenschaften als die LEDs mit großen Füllfaktoren: eine niedrigere Spannung bei definiertem Strom und höhere Ausgangsleistungen. An dieser Stelle sei nochmals darauf hingewiesen, dass bei den



Abb. 6.24: Mesa-Strukturen bei den Streifen-LEDs: mehrere Streifen werden bei der Strukturierung zusammengefasst (a). Ist der Fotoresist auf der Spitze der Streifen zu dünn, wird unbeabsichtigt die p-dotierte Schicht und der aktive Bereich weggeätzt (b).

kleinen Füllfaktoren der Streifenquerschnitt dreieckig ist und somit die LED auf semipolaren Kristallebenen abgeschieden wurde. Ist bei großen Füllfaktoren der Querschnitt noch trapezförmig, so ist noch eine polare c-Facette vorhanden, auf welcher sich neben den semipolaren Facetten die LED-Struktur befindet. Dennoch wirkt sich die unzureichende Leitfähigkeit der p-Schicht auf die Strom-Spannungs-Kennlinien aus, die zeigen, dass der Serienwiderstand noch immer zu hoch ist. Die Spannung steigt bei einem Stromanstieg von 5 mA auf 20 mA um etwa 1,5 V, was deutlich zu hoch ist. Ein akzeptabler Wert bei diesem Stromanstieg wäre 0,5 V oder weniger (vgl. Ergebnisvergleich von M. Scherer mit Werten aus industrieller Fertigung [117]).

Weiterhin wurde wie bei den Referenz-LEDs auch bei den selektiv abgeschiedenen LEDs eine Mesa strukturiert (Abb. 6.24 (a)), wie in Kap. 5.2.2 beschrieben. Dadurch wurden n- und p-seitiger Kontakt lokal zusammen gebracht und ohmsche Verluste reduziert. Außerdem wird durch die Mesa-Strukturierung die Auskopplung des Lichtes verbessert. Beides trug zu einer höheren Ausgangsleistung bei.

Aufgrund der gegebenen Topografie der Probe weist die Strukturierung mit herkömmlicher Fotolithografie Probleme auf. Für die Auftragung des Fotolackes (*engl. photo resist, PR*) stand nur das Schleuderverfahren (*engl. spin coating*) zur Verfügung. Bei dem Auftragen des Fotolackes mit einer Lackschleuder verteilt sich

der Fotolack nicht gleichmäßig auf der Probe, sondern setzt sich in den Bereichen zwischen den Streifen ab, so dass die Fotolackschicht hier wesentlich dicker ist als auf den Spitzen. Der Fotolack dient im folgenden Trockenätzschritt als Maskierung: Wo Fotolack die Probe maskiert, sollen die Schichten nicht angegriffen werden, die unmaskierten Bereiche sollen weggeätzt werden. Ist der Fotolack auf den Spitzen zu dünn, so wird dieser bei dem folgenden Trockenätz-Schritt hier abgeätzt, bevor die gewünschte Ätztiefe erreicht ist, wo die n-dotierte Schicht freigelegt ist. Ist der Fotolack weggeätzt, so werden die p-dotierte Schicht und der aktive Bereich an den Spitzen ebenfalls abgetragen (Abb. 6.24 (b)). Wird anschließend Metall auf die LED-Strukturen aufgedampft, so kommt es an diesen Stellen zu einem Kurzschluss. Da keine Sprühbelackung zur Verfügung stand, die eine deutlich homogenere Lackdicke bei einer solchen Topografie ermöglicht, wurde ein dünnflüssiger Lack bei möglichst geringer Drehzahl aufgetragen, um dies zu vermeiden und möglichst gute Gleichmäßigkeit für die Lackschicht zu erreichen. So kann auf der Spitze eine ausreichende Lackdicke erzielt werden, so dass die Deckschicht nicht angegriffen wird. Die anschließende Metallisierung rief dann keinen Kurzschluss mehr hervor. Dennoch treten bei der Prozessierung der LEDs auf den schrägen Seitenfacetten andere Probleme auf, die es zu lösen galt, um die Vorteile des reduzierten Feldes unter Beweis zu stellen.

6.3.1.3 Zusammensetzung und Leitfähigkeit

Bei GaN ist die p-Dotierung prinzipiell immer noch ein Problem. Bei den Streifen-LEDs stellt die p-Dotierung eine besondere Herausforderung dar. Die Strom-Spannungs-Kennlinien der Elektrolumineszenz-Messungen lassen auf eine schlechtere Leitfähigkeit der p-dotierten Deckschicht als bei der Referenz-LED schließen (Kap. 6.3.1.4). Der Grund dafür ist wahrscheinlich ein zu geringer Mg-Einbau, es kommen aber auch eine zu geringe Mg-Aktivierung beispielsweise durch schlechtere Wasserstoffdiffusion entlang dieser Kristallorientierung oder eine Kombination aus beiden Möglichkeiten in Frage. Beim Betrachten der Proben mit SEM erscheinen die Mg-dotierten GaN-Schichten in einem sehr hellen Grau, wodurch sie sich gut von den anderen Schichten abheben. Bei den Streifen-LEDs kann man dabei eine unterschiedliche Helligkeit der Grautöne der Mg-dotierten Schicht erkennen. Die $\{11\overline{2}2\}$ -Facetten der entlang der $\langle 1\overline{1}00 \rangle$ -Kristallrichtung orientierten Streifen erscheinen dunkler als die $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten der entlang der $\langle 11\overline{2}0 \rangle$ -Kristallrichtung orientierten Streifen (vgl. Abb. 6.25). Die Streifen schließen Win-



Abb. 6.25: SEM Aufnahmen von 30° , 60° , 90° und 120° -Winkeln, die mit selektiver Epitaxie hergestellt wurden. Die entsprechenden bzw. äquivalenten Kristallrichtungen sind durch Pfeile gekennzeichnet.

kel von 30°, 60°, 90° und 120° ein (Abb. 6.25 (a) - (d)). Dabei werden die Winkel von 30° und 90° von Streifen eingeschlossen, die entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ - und der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Kristallorientierung verlaufen, bzw. entlang der jeweils äquivalenten Kristallorientierungen. Die Winkel von 60° und 120° bestehen nur aus Streifen die entlang der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Richtung und dazu äquivalenten Richtungen verlaufen. Offensichtlich wird das Mg auf den verschiedenen Facetten unterschiedlich eingebaut, was eine unterschiedlich starke Dotierung zur Folge hat. Auch kann eine weniger effiziente Aktivierung der Mg-Dotierung zu einer schlechteren Leitfähigkeit der p-dotierten Schicht führen, was im SEM als dunkleres Grau zu erkennen ist. Da die Flächen der schrägen Seitenfacetten und der Top-Facette aber nur wenige μ m breit sind, kann der Einfluss mit herkömmlichen Methoden wie Hall-, Transferlängenmodell- (TLM) oder SIMS-Messungen kaum ermittelt werden. Akasaka et al. haben ebenfalls mit SEM einen Helligkeitsunterschied von pdotiertem GaN auf verschiedenen Kristallfacetten gefunden und erklären das ebenfalls mit einem unterschiedlichen Mg-Einbau [131]. Demnach ist die p-Dotierung auf den seitlichen Facetten geringer als auf der Topfacette. Wie in Kap. 6.2.2 in den Quantenfilmen auf den seitlichen Facetten ein höherer In-Anteil gegenüber der Referenz-LED festgestellt wurde, so wird hier auf einen niedrigeren Mg-Anteil auf den seitlichen Facetten geschlossen. Aus diesem Grund wurde der Gasfluss des Mg-Quellgases erhöht, um auf den seitlichen Facetten einen höheren Mg-Anteil und somit eine bessere Leitfähigkeit zu erreichen.

6.3.1.4 Schichtdicken der p-dotierten Schicht

Bei den ersten Proben mit erhöhten Mg-Quellengasfluss wurde zum Teil Kurzschlussverhalten der mit selektiver Epitaxie hergestellten LEDs festgestellt. Mit SEM konnte qualitativ festgestellt werden, dass sich das Mg-dotierte GaN bei der Epitaxie anders verhält als der aktive Bereich. Beim aktiven Bereich ist die normierte Schichtdicke für beide Streifen mit trapezförmigen Querschnitt in beiden Richtungen größer als bei der Referenzprobe, wenn sie aus der Querschnittsfläche errechnet wird (Abb. 6.11). Beim p-dotierten Bereich sind die Schichtdicken der Referenzprobe und der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -orientierten Streifen nahezu gleich, die Schichtdicke der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -orientieren Streifen ist größer und nimmt mit abnehmenden Füllfaktor ab (Abb. 6.26).

War bei den Messungen der Quantenfilme die geringe Schichtdicke eine Herausforderung bei der Analyse mit SEM, so ist bei der p-dotierten Schicht die Leitfähigkeit ein Problem. Durch die geringere Leitfähigkeit gegenüber der ndotierten Schicht und dem aktiven Bereich kommt es bei den Untersuchungen der p-dotierten Schicht zu einer Aufladung der Oberfläche. Das führt dazu, dass sich die Kanten der p-dotierten Schicht nicht mehr exakt fokussieren lassen und keine klare Linie mehr zu erkennen ist. Dadurch ist der auftretende Meßfehler größer.

Das Verhältnis der Schichtdicken ändert sich im Vergleich mit der Referenzprobe mit dem Wechsel vom trapezförmigen zu dreieckförmigen Querschnitt. Die p-dotierte Schicht der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -orientierten Streifen ist jetzt dünner als die Schicht der Referenzprobe, während die Schicht der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -orientierten Streifen dicker wird.

Vergleicht man die Schichtdickenverläufe von aktiven Bereich und p-dotierten



Abb. 6.26: Die mit Mg-dotierte Schichtdicke zeigt bezüglich der Kristallebenen ein umgekehrtes Verhalten wie der aktive Bereich (Abb. 6.11).

GaN in Abhängigkeit des Füllfaktors in Abb. 6.11 und Abb. 6.26, so kann man auf ein umgekehrtes Wachstumsverhalten der beiden Bereiche schließen (Tab. 6.2):

- Mit abnehmenden Füllfaktor nimmt bei den entlang der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Kristallrichtung orientierten Streifen mit dreieckigem Streifenquerschnitt beim aktiven Bereich die Schichtdicke stark zu, während bei der p-dotierten Schicht die Dicke abnimmt.
- Bei den entlang der (1100)-Kristallrichtung orientierten Streifen mit dreieckigem Streifenquerschnitt nimmt mit abnehmenden Füllfaktor beim aktiven Bereich die Schichtdicke ab, während bei der p-dotierten Schicht die Dicke stark zunimmt.

Als eine Ursache für dieses entgegengesetzte Verhalten kommt die Wahl der metallorganischen Gallium-Quelle in Frage (vgl. 4.3.3). Für die Mg-dotierte Deckschicht wird TMGa und für den aktiven Bereich TEGa verwendet, da dieser bei niedrigeren Temperaturen abgeschieden wird (Kap. 5.1.1). Damit tritt als weiteres Einflusskriterium auch die Temperatur als Ursache für das unterschiedliche Abscheideverhalten auf.

Aufgrund der in dieser Arbeit gefundenen Unterschiede in den Abscheideraten bei der Epitaxie wurde der Einfluss der Quellenmaterialien bei GaN-Epitaxie-

6. GaInN-LEDs auf semipolaren Seitenfacetten

$\langle 11\bar{2}0\rangle$	aktiver	Schichtdicke nimmt mit	leicht ab.	Trapez
	Bereich	abnehmenden Füllfaktor	stark zu.	Dreieck
	n detient	Schichtdicke nimmt mit	stark ab.	Trapez
	p-dotiert	abnehmenden Füllfaktor	leicht ab.	Dreieck
$\langle 1\bar{1}00 \rangle$	aktiver	Schichtdicke nimmt mit	zu.	Trapez
	Bereich	abnehmenden Füllfaktor	ab.	Dreieck
	n dationt	Schichtdicke nimmt mit	zu.	Trapez
	p-dotiert	abnehmenden Füllfaktor	stark zu.	Dreieck

Tab. 6.2: Vergleich der Abscheidecharakteristika von aktivem und p-dotiertem Bereich für die $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ - und $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -orientierte Streifenrichtung.

Bedingungen untersucht. Dazu wurden Testproben mit TEGa und TMGa mit Markerschichten hergestellt und analysiert.

6.3.1.5 Untersuchungen zum Einfluss der Quellen TEGa und TMGa

Um zu untersuchen, ob bei GaN die Wahl der MO-Quelle einen ähnlichen Einfluss nimmt wie bei GaAs (Kap. 4.3.3), wurde eine spezielle Probe mit Markerschichten hergestellt. Dabei handelt es sich um dünne Zwischenschichten, die im Vergleich mit den abgeschiedenen GaN-Schichten mit SEM einen guten materialspezifischen Kontrast ergeben [132]. Für die Zwischenschichten wurde in dieser Arbeit Sidotiertes GaN verwendet.

Um möglichst gleiche Bedingungen wie bei den LED-Strukturen zu erhalten, wurde zuerst eine n-dotierte Rippe und anschließend je 4 GaN-Schichten mit TEGa und TMGa abgeschieden, die zur Analyse des Epitaxieverhaltens durch Si-dotierte Markerschichten getrennt wurden. Zum Vergleich wurde für die Abscheidung der gleiche Ga-Fluss von $25 \,\mu$ mol/min für beide Quellen eingestellt.

Mit SEM wurden bei der fertigen Probe die Schichtdicken der mit TEGa und TMGa abgeschiedenen Bereiche ausgemessen (Abb. 6.27 und 6.28). Unabhängig von der MO-Quelle ist die Dicke der Top-Schicht immer größer als die der Seitenfacetten (Tab. 6.3), wie dies auch bei dem aktiven Bereich der Fall ist. Die auftretenden Dickenunterschiede zwischen den TEGa- und TMGa-Schichten liegen im Rahmen des anzunehmenden Meßfehlers, können aber auch durch die Eigenschaften der Kristallebenen verursacht sein. Im Rahmen dieser Arbeit wurde dies aber nicht näher untersucht. Das Dickenverhältnis von ≈ 2 zwischen Top- und



Abb. 6.27: Vergleich des Einflusses der Ga-Quelle auf die selektive Kristallabscheidung mit Si-Markerschichten für Streifen in $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Richtung: (a) SEM-Aufnahme und (b) schematische Darstellung.



Abb. 6.28: Vergleich des Einflusses der Ga-Quelle auf die selektive Kristallabscheidung mit Si-Markerschichten $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Richtung: (a) SEM-Aufnahme und (b) schematische Darstellung.

Seitenfacette war bei der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Streifenrichtung aufgrund des Größenverhältnisses der Oberflächen zu erwarten. Das größere Dickenverhältnis von $\approx 8,5:1$ bei der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Streifenrichtung gegenüber dem aktiven Bereich (4:1) läßt sich dadurch erklären, dass die Proben für den Vergleich mit einem anderen Molfluss abgeschieden wurden als die LED-Strukturen. Da die Abscheiderate bei MOVPE aufgrund des Stickstoff-Überangebots hauptsächlich durch den Ga-Anteil bestimmt wird, wirkt sich der höhere Ga-Fluss stark auf des Ungleichgewicht der Abscheideraten auf den konkurrierenden Facetten aus (Kap. 6.2.1.3).

Zusammenfassend wird festgestellt, dass für die Streifen entlang der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Richtung die Abscheidung bei Verwendung von TEGa auf der Seite mit 180 nm dicker ist als bei Verwendung von TMGa mit 150 nm. Für die $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -

Kristallrichtung	Facette	Dicke mit TEGa	Dicke mit TMGa		
/1100	Тор	$660\mathrm{nm}$	540 nm		
$\langle 1100 \rangle$	Seite	$285\mathrm{nm}$	$315\mathrm{nm}$		
Verhältnis	Top:Seite	$\approx 2,3:1$	\approx 1,7:1		
(1150)	Тор	$1460\mathrm{nm}$	$1379\mathrm{nm}$		
$\langle 1120\rangle$	Seite	180 nm	$150\mathrm{nm}$		
Verhältnis	Top:Seite	$\approx 8:1$	$\approx 9:1$		

6. GaInN-LEDs auf semipolaren Seitenfacetten

Tab. 6.3: Gemessene Dicken der mit TEGa und TMGa abgeschiedenen Schichten auf den Seiten- und Top-Facetten für die $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ - und $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -orientierte Streifenrichtung.

Streifenrichtung mit 285 nm (TEGa) und 315 nm (TMGa) ist das Schichtdickenverhältnis jedoch umgekehrt (vgl. Tab. 6.3). Somit gilt das von Caneau et al. gefundene Verhalten nur für bestimmte Kristallebenen, bedingt durch deren Eigenschaften (vgl. Kap. 6.2.1.2). Die Kristallebene nimmt auch hier großen Einfluss auf die Abscheidecharakteristik.

Durch diese Versuche wurde gezeigt, dass die Änderung der Abscheidecharakteristik von aktiven und p-dotierten Bereich nicht durch die MO-Quellen verursacht wird, da im Dickenverhältnis Top:Seite keine Umkehrung eingetreten ist. Es muss dafür einen anderen Grund geben. Deshalb wird der Einfluss der Mg-Dotierung auf das Abscheideverhalten auf den Facetten untersucht.

6.3.1.6 Abscheidecharakteristik von Mg-dotiertem GaN bei selektiver Epitaxie

Um die Abscheidecharakteristik der p-dotierten GaN-Schicht genauer zu analysieren, wird die Schichtdicke für die Facetten getrennt betrachtet (Abb. 6.29). Analog zum aktiven Bereich ist für Streifen entlang der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Richtung mit trapezförmigen Querschnitt der p-dotierte Bereich auf der Top-Facette dicker als auf den Seitenfacetten, allerdings ist das Verhältnis von Top- zu Seitenfacette mit 1,5:1 deutlich geringer (Tab. 6.4). Die Schichtdicke auf der Topfacette ist nur wenig dicker als die der Referenzprobe. Die Schichtdicke auf der Seitenfacette ist dagegen dünner. Wird der Streifenquerschnitt bei kleinerem Füllfaktor dreieckig, so nimmt die Dicke der p-dotierten Schicht auf den Seitenfacetten sprunghaft auf den Wert der Referenzprobe zu (Abb. 6.29).



Abb. 6.29: Die mit Mg-dotierte Schicht zeigt bezüglich der Kristallebenen ein umgekehrtes Verhalten wie der aktive Bereich (Abb. 6.12).

Bei der anderen Streifenrichtung ($\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Richtung) beträgt die Dicke der Top-Schicht nur $\approx 1/3$ der Schichtdicke auf der Seite. Wählt man die Öffnung breiter, 8 µm statt 6 µm, ist die Dicke der Topschicht nur $\approx 1/5$ der Schichtdicke auf der Seitenfacette. Damit ist die Topschicht deutlich dünner als die Schicht auf der Referenzprobe. Die Schichtdicke auf der Seite nimmt mit abnehmenden Füllfaktor leicht zu (Abb. 6.29) und erreicht für einen dreieckigen Querschnitt etwa die Schichtdicke der Referenzprobe. Die Schwankungen der Schichtdicke lassen sich auf Messtoleranzen zurückführen. Hier zeigt sich wieder die Sensitivität der Facetten auf Änderungen bei den Epitaxiebedingungen. Möglicherweise fördert die gemischte Polarität der { $11\bar{2}$ }-Facetten auf diesen Kristallebenen die Abscheiderate unter Einfluss der Mg-Moleküle.

Um aufgrund dieser Ergebnisse festzustellen, ob das Abscheideverhalten tatsächlich in der p-Dotierung mit Mg begründet ist, wird zum Vergleich eine Probe mit undotierter Deckschicht hergestellt. Der Vergleich zeigt eindeutig, dass die Änderung der Abscheideraten durch die Dotierung mit Mg verursacht wird (Abb. 6.30 und 6.31).

Wird zunächst die Dicke der Schicht auf der Topfacette für die Streifen entlang der verwendeten Kristallrichtungen betrachtet, so fällt auf, dass die Schichtdicke für die entlang $\langle 11\overline{2}0 \rangle$ -orientierten Streifen sowohl im dotierten als auch im

Kristallrichtung	Facette	Dicke mit Mg	Dicke ohne Mg	Verhältnis mit:ohne Mg
(1100)	Тор	56 - 85 nm	$600\mathrm{nm}$	1:7 - 1:10
(1100)	Seite	182 - 270 nm	$60\mathrm{nm}$	3:1 - 4,5:1
Verhältnis	Top:Seite	1:3,2	10:1	
/1150)	Тор	245 - 262 nm	$865\mathrm{nm}$	1:3,5
(1120)	Seite	$165 - 170 \mathrm{nm}$	$86\mathrm{nm}$	2:1
Verhältnis	Top:Seite	1,5:1	10:1	

6. GaInN-LEDs auf semipolaren Seitenfacetten

Tab. 6.4: Gemessene Dicken der mit und ohne Mg-Dotierung abgeschiedenen Schichten auf den Seiten- und Top-Facetten für die $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ - und $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -orientierte Streifenrichtung.



Abb. 6.30: SEM Aufnahmen von selektiv abgeschiedenen Streifen mit undotierter (a) und mit Mg-dotierter Deckschicht (b) in $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Richtung.

undotierten Fall immer größer ist als die Dicke der Topfacette der entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Richtung orientierten Streifen (Tab. 6.4). Dies ist dadurch begründet, dass die schrägen $\{1\bar{1}01\}$ -Facetten der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -orientierten Streifen sehr stabil sind, was sich in einer langsameren Abscheiderate auswirkt und somit die Abscheiderate auf der $\{0001\}$ -Topfacette größer ist. Der Einfluss der Abscheiderate, der durch die Facettenstabilität stark beeinflusst wird, zeigt sich deutlich im Vergleich der Dickenverhältinsse zwischen dotiertem und undotiertem GaN für die einzelnen Facetten: Der Unterschied in der jeweiligen Abscheiderate zwischen dotierter und undotierter Schicht fällt für die $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Richtung füllfaktorabhängig mit 1:7-1:10 für einen FF von 0,43-0,75 für die Top-Facette und 3:1-4,5:1 für



Abb. 6.31: SEM Aufnahmen von selektiv abgeschiedenen Streifen mit undotierter (a) und mit Mg-dotierter Deckschicht (b) in $\langle 11\overline{2}0 \rangle$ -Richtung.

einen FF von 0,75-0,43 für die Seiten-Facette deutlich stärker aus als für die $(11\overline{2}0)$ -Richtung mit 1:3,5 für die Top-Facette und 2:1 für die Seiten-Facetten (Tab. 6.4). Bei der $\langle 1\overline{1}00 \rangle$ -Richtung Richtung kommt ähnlich wie bei den Quantenfilmen (vgl. Kap. 6.2.2) eine Zunahme der Abscheiderate mit abnehmenden Füllfaktor hinzu, die für beide Facettentypen unterschiedlich ist. Daher ist hier auch kein einheitliches Dickenverhältis bestimmbar. Weiterhin fällt auf, dass bei den undotierten Proben das Dickenverhältnis von Top:Seite bei den beiden untersuchten Streifenrichtungen mit 10:1 gleich ist. Dabei stimmt das Verhältnis für die $\langle 11\overline{2}0\rangle$ -Richtung mit den Untersuchungen zum Einfluss des Quellgases überein (vgl. Kap. 6.3.1.5). Bei der $\langle 1\bar{1}00\rangle$ -Richtung ist dies nicht der Fall. Der Grund dafür ist, dass bei dem Vergleich der Quellgase die Prozessparameter auf den Vergleich der Quellgase angepasst wurden, wobei für die p-dotierte Deckschicht andere Parameter benötigt werden. Für den Vergleich zwischen dotierter und undotierter Schicht wurde lediglich die Cp_2Mg -Quelle nicht verwendet. Aber auch dies zeigt wieder deutlich die Stabilität der Facetten der Streifen entlang der $\langle 1120 \rangle$ -Richtung gegenüber den Epitaxieparametern im Gegensatz zu den Streifen entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Richtung, die auf die vorgenommene Anderung wieder sehr sensitiv reagiert.

Die Ergebnisse werden durch die Untersuchungen von Beaumont et al. bestätigt, die ebenfalls bei Mg-dotiertem GaN eine starke Abnahme der Kristallabscheidung in vertikaler Richtung und eine Zunahme in lateraler Richtung feststellten [120]. Mögliche Gründe sind die Eigenschaften der Kristallebenen wie Polarität und Oberflächenenergie, die sich auf den Einbau des Mg auswirken,



Abb. 6.32: SEM Aufnahme eines selektiv abgeschiedenen Streifens ohne (a) und mit gepulster Gasversorgung (b).

aber auch die Beweglichkeit der Moleküle der Quellen-Materialien.

Dieser Unterschied von lateraler und vertikaler Abscheidung kann bei den selektiv hergestellten LED-Strukturen zu Problemen führen. Es kann vorkommen, dass die Deckschicht an der Spitze des Streifens zu dünn und somit nicht ganz geschlossen ist (Abb. 6.32 (a)). Wird dann die Metallisierung aufgedampft, so kommt es zu Kurzschlüssen.

Eine Möglichkeit diesem Problem abzuhelfen ist die Isolierung der Spitze [130], eine andere Möglichkeit ist, durch gepulste Versorgung der Gruppe-III-Quellen und Stickstoff die Beweglichkeit der adsorbierten Spezies zu unterstützen und so eine gleichmäßigere Abscheidung zu fördern (Abb. 6.32 (b)). Durch das gepulste, d. h. abwechselnde Ein- und Ausschalten von Ammoniak- und Ga/Mg-Quelle wird das schrittweise Wachstum von Monolagen ermöglicht. Setzt man zur Beobachtung des Kristallabscheideverhaltens Marker-Schichten ein (Abb. 6.33), so kann man deutlich erkennen, dass die gepulste Gasversorgung auf die Streifen entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Richtung (Abb. 6.33 (a)) einen geringeren Einfluss hat, als auf die Streifen entlang der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Richtung (Abb. 6.33 (b)). Die gepulste Gasversorgung kann folglich für die entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Kristallrichtung orientierten Streifen nicht zur Lösung des Problems eingesetzt werden.

Als Abhilfe kann hier vor dem Aufdampfen der Metallisierung die Spitze mit Al_2O_3 isoliert werden (Abb. 6.34) [130]. Um nur die Spitze des Streifens zu bedecken und den Kurzschluss zu beseitigen, nicht aber die Kontaktfläche auf den Seiten zu isolieren, wird die Abhebetechnik eingesetzt. Durch die gegebene Topo-



Abb. 6.33: SEM Aufnahme selektiv abgeschiedener Streifen mit gepulster Gasversorgung in $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ - (a) und $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Richtung (b). Bei Streifen entlang der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Kristallrichtung sind die Markerschichten zur Epitaxie-Analyse in der Mgdotierten Schicht zu erkennen.

grafie auf der Probe ist der Einsatz zur Strukturierung mit Fotolithografie nicht möglich. Durch die unterschiedlichen Höhen der Streifen, verursacht durch die unterschiedlichen Füllfaktoren, kann nicht auf Maske und Streifenspitzen fokussiert werden, so dass eine Justage nur auf die Steifenspitzen nicht möglich ist. Insbesondere können keine Justage-Marken eingesetzt werden, da diese durch die selektive Epitaxie außerhalb des Fokus lägen.

Was bei der fotolithografischen Strukturierung des Fotoresists von Nachteil ist, kann hier ausgenutzt werden. Der Fotoresist füllt beim Aufschleudern hauptsächlich die Zwischenräume auf, die Spitze der Streifen wird aber nur sehr dünn bedeckt. Die dünne Lackschicht auf der Spitze läßt sich durch einen kurzen Ätzschritt mit Sauerstoff-Plasma entfernen, so dass dieser Bereich frei liegt. Anschließend wird eine dünne Schicht Al_2O_3 aufgesputtert (Abb. 6.34) [130]. Dabei ist es wichtig, unter flachem Einfall des Strahls der Al_2O_3 -Ionen aufzusputtern [133], um nicht die ganze Oberfläche zu bedecken, da sonst ein Abheben der Lackschicht mit der Isolation neben den Spitzen nicht mehr möglich wäre. So schirmen die Streifen die schrägen Seitenfacetten gegenseitig ab. Es entsteht eine nicht ideale, aber ausreichende Abrisskante. Nach dem Aufsputtern der Isolationsschicht wird diese mit dem Fotolack abgehoben und bleibt nur auf den Spitzen erhalten (Abb. 6.35). Wird jetzt die Metallisierung aufgedampft, so ist der direkte Kontakt von p-dotierter Schicht zur n-dotierten Rippe behoben. Durch die Isolation

6. GaInN-LEDs auf semipolaren Seitenfacetten



Abb. 6.34: Schematische Darstellung zur Isolierung der Spitzen mit Al₂O₃ [130].

der Spitzen lassen sich die Leckströme deutlich reduzieren (Abb. 6.36) [130, 133].

Eine andere Möglichkeit die Leckströme zu reduzieren ist die in Kap. 6.3.1.4 vorgestellte Epitaxie mit gepulster Quellgaszufuhr. Damit lassen sich ohne zusätzliche Prozessierungsschritte noch niedrigere Leckströme erreichen (Abb. 6.36) [130]. Mit den verwendeten Parametern wurde eine homogenere, weniger stark dotierte Schicht erzeugt. Im Rahmen dieser Arbeit konnte nicht geklärt werden, was für die guten Ergebnisse verantwortlich ist:

• der geringe Mg-Einbau in der p-dotierten Schicht aufgrund der gepulsten Gasverorgung

 oder

• die schichtweise Abscheidung von Ga/Mg- und N-Lagen durch die gepulste Gasversorgung und dadurch eine bessere Verteilung auf den Facetten.

Allerdings ist diese Methode nur bei Streifen entlang der $\langle 11\overline{2}0 \rangle$ -Kristallrichtung erfolgreich (Kap. 6.3.1.4).



Abb. 6.35: Mit einer aufgesputterten Al_2O_3 -Isolierung auf der Spitze des Streifens lassen sich die Kurzschlüsse aufgrund von einer nicht geschlossenen Deckschicht beheben (a). Bei Streifen mit trapezförmigen Querschnitt ist die im SEM schwarz erscheinende Isolations-Schicht besser zu erkennen (b).

6.3.1.7 Thermische Belastungen

Für die hergestellten Facetten-LEDs stellen thermische Belastungen ein großes Problem dar. Wie sich bei den Elektrolumineszenz-Messungen herausgestellt hat, wirkt sich jeder Temperatur-Schritt reduzierend auf die Ausgangsleistung aus und sollte nach Möglichkeit vermieden werden. Ein Temperatur-Schritt bei der LED-Prozessierung gleich zu Beginn ist die Aktivierung des Mg-Dotierstoffes. Die Aktivierung wurde zunächst nach den Erfahrungen der Prozessentwicklung zur Herstellung von planaren GaN-LEDs auf polarer *c*-Ebene durchgeführt [117]. Dazu werden die LED-Strukturen 5 min bei 800°C in N₂-Atmosphäre im RTP-Ofen getempert. Dieser Prozess-Schritt führt bei den Facetten LEDs zu einer sehr geringen Ausgangsleistung. Teilweise konnte anschließend gar keine Elektrolumineszenz mehr erreicht werden. Durch niedrigere Temperaturen und eine kürzere Dauer der Aktivierung konnte die Elektrolumineszenz jedoch an Facetten-LEDs detektiert werden.

Es wird davon ausgegangen, dass die thermische Belastung für die Quantenfilme dabei zu hoch ist und es zu einem Vermischen der GaN/GaInN-Barrieren oder Diffusion von Mg in die Quantenfilme kommt, wodurch diese zerstört werden [134–136]. Wie frühere Untersuchungen zeigten, kann die Aktivierung in Sauerstoff-haltiger Atmosphäre bei geringeren Temperaturen erfolgen [21]. Aus diesem Grund wurde die Aktivierung mit einem Temper-Schritt in Umgebungs-



Abb. 6.36: Strom-Spannungs-Kennlinie von LED-Strukturen mit und ohne elektrischer Spitzenisolierung und mit gepulster Gasversorgung. Die Leckströme werden mit beiden Methoden deutlich reduziert [130].

luft auf einer Heizplatte vorgenommen, bei dem die Probe innerhalb von einer Minute von Raumtemperatur auf ca. 720 °C geheizt und anschließend langsam wieder abgekühlt wird. Dabei kann der freie Wasserstoff aus dem Kristall diffundieren, so dass es zu keiner Neupassivierung des Mg kommt [137].

Ein weiteres Problem, welches thermische Belastung verursacht, ist die sowohl für die n-seitigen Titan-Aluminium-Nickel-Gold-Kontakte, als auch für die p-seitigen Nickel-Gold-Kontakte notwendige Legierung mit RTP [117]. Dabei benötigt die n-seitige Metallisierung eine höhere Temperatur als die p-seitige Schichtfolge der Metalle. Die Temperung fürht zwar zu niedrigen Kontaktwiderständen, bewirkt aber auch eine Reduktion der Ausgangsleistung [130]. Um eine höhere Ausgangsleistung zu erzielen, wurde deshalb ein größerer Kontaktwiderstand in Kauf genommen. Um diesen Temperatur-Schritt ganz zu vermeiden, wurden für die LED-Strukturen In-Kontakte verwendet, die keinen Legierschritt benötigen. Allerdings sind die In-Kontakte nicht langzeitstabil. Für die Facetten-LEDs ist daher eine separate Untersuchung und Optimierung des Aktivierungsprozesses notwendig, unterstützt durch eine Optimierung der Epitaxie der p-dotierten Schicht. Diese zusätzlichen, aufwändigen Untersuchungen hätten den Rahmen dieser Arbeit gesprengt.

6.3.1.8 Oberflächenbeschaffenheit

Anhand der Abb. 6.25 (a) - (d) läßt sich die Oberflächenbeschaffenheit der entlang der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Richtung und $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Richtung orientierten Streifen vergleichen. In den SEM-Aufnahmen ist zu sehen, dass die $\{1\bar{1}01\}$ -Facetten der entlang der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Richtung orientierten Streifen glatt sind. Dagegen zeigen die $\{11\bar{2}2\}$ -Facetten der entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Richtung orientierten Streifen eine raue, unebene Oberfläche. Außerdem haben sich an der Spitze dieser Streifen viele strukturelle Defekte in Form invertierter Pyramiden gebildet. Das Prozessfenster für die $\{11\bar{2}2\}$ -Facetten ist sehr eng, geringe Abweichungen führen dazu, dass es zu einer stellenweisen Ausbildung anderer, stabilerer Kristallebenen kommt, was sich in der rauen Oberfläche und den invertierten Pyramiden an der Dreiecksspitze der Streifen auswirkt.

Bei den Streifen entlang der $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Richtung tritt dieses Problem nicht auf. Sie besitzen ein sehr breites Prozess-Fenster. Wie in Kap. 4.3.2 beschrieben, ist dies durch die N-Polarität der { $1\bar{1}01$ }-Facetten begründet, die durch das hohe Stickstoff-Angebot unter MOVPE-Bedingungen stabilisiert werden. Daraus folgt, dass sich die $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Richtung mit den { $11\bar{2}2$ }-Facetten kaum für die Herstellung solcher semipolaren LEDs mit selektiver Epitaxie eignet und demzufolge die $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Richtung mit den { $1\bar{1}01$ }-Facetten in dieser Arbeit für die Ergebnisse hauptsächlich verwendet wurde.

Die Ausbildung der $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten wird aber nicht nur unter MOVPE-Bedingungen beobachtet. Sie bilden sich beispielsweise auch bei der Entstehung von V-förmigen Defekten aus, die in der Literatur als "V-pits" bezeichtet werden [138], beim Ätzen mit KOH und H₃PO₄ zur Defektanalyse [139] und bei der Herstellung von GaN-Substrat-Plättchen [140]. Somit werden diese Facetten in der Wurtzit-Struktur energetisch insgesamt bevorzugt und können demnach als "natürliche" Facetten bezeichnet werden.

6.3.2 Ausgangsleistungen bis 3 mW

Mit den gelösten Problemen und der verbesserten Prozessierung mit Mesa- und Kontakt-Strukturierung wurden Ausgangsleistungen von 700 μ W bei 20 mA und 3 mW bei 111 mA erreicht (Abb. 6.37). Im Vergleich dazu wurde bei LEDs auf der polaren *c*-Ebene eine maximale Ausgangsleistung von 840 μ W bei 20 mA erreicht, die an der Universität Ulm im Rahmen einer Dissertation zur Untersuchung



Abb. 6.37: Optische Ausgangsleistung mit elektrischer Anregung von LEDs auf selektiv abgeschiedenen Streifen in $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Richtung. Diese LEDs wurden mit gepulster Gasversorgung während der Epitaxie der p-dotierten GaN-Deckschicht abgeschieden und mit den bislang gelösten beschriebenen Problemen bei der Prozessierung hergestellt.

des Einflusses der Prozessierungsparameter hergestellt wurden [117]. Mittlerweile konnte die Ausgangsleistung der LEDs auf der polaren *c*-Ebene auf 3,5 mW bei 20 mA durch weitere Prozessierungsoptimierung gesteigert werden [124]. Dies zeigt, dass die semipolaren LEDs in den ersten Versuchen schon ähnlich gute Ausgangsleistungen erzielen konnten und durch weitere Optimierung der Prozessierung eine deutliche Steigerung der Ausgangsleistung möglich ist.

Wie schon in Kap. 4.2.1 erwähnt, haben Funato et al. LED-Strukturen auf einem semipolaren Substrat mit $\{11\overline{2}2\}$ -Oberfläche abgeschieden [75]. Das verwendete Substrat wurde dabei aus einer dicken GaN-Schicht gesägt, die mit HVPE auf der polaren *c*-Ebene hergestellt wurde. Die Ausgangsleistungen liegen jedoch nur von LEDs vor, die bereits in Epoxidharz vergossen wurden. Sie erreichten für eine im blauen Spektralbereich emittierende LED bei einem Strom von 20 mA eine Ausgangsleistung von 1,76 mW [75]. Durch das Vergießen der LEDs mit einer domförmigen Kuppel aus Epoxidharz wird die Lichtauskopplung jedoch deutlich verbessert. Die Effizienz einer typischen LED steigt bei Verwendung eines Harzes mit einem Brechungsindex von n=1,5 um einen Faktor von 2 bis 3 an [48]. Wird

die Leistung der in dieser Arbeit entstandenen LEDs für vergossene LEDs mit diesem Faktor berechnet, so sind vergleichbare Ausgangsleistungen zu erwarten.

Ebenso wie Funato et al. verwendeten Schmidt et al. bzw. Tyagi et al. m-plane, bzw. $\{10\bar{1}\bar{1}\}$ -Substrate, die aus einer dicken mit HVPE abgeschiedenen c-Ebenen-GaN-Schicht gesägt wurden. Damit wurden Ausgangsleistungen von 23,7 mW [141] bzw. 20,58 mW [142] bei je 20 mA erreicht. Dabei ist zu bedenken, dass beim Aussägen aus c-Ebenen-GaN-Scheiben nur kleine Substrate herausgesägt werden können, solange es noch keine Möglichkeit gibt, große GaN-Volumenkristalle herzustellen. Es ist zu beachten, dass das in dieser Arbeit vorgestellte Konzept bereits auf den erhältlichen 2-Zoll-GaN-Substraten, bzw. wie hier vorgestellen 2-Zoll-GaN-Quasisubstraten anwendbar ist und somit die großflächige Herstellung solcher LEDs erlaubt. Es entfällt außerdem das Aussägen der Substrate, die nur wenige Quadratmillimeter groß sind. Die Arbeiten von Funato et al., Schmidt et al. und Tyagi et al. bestätigen jedoch eindeutig die verbesserten Eigenschaften der LEDs aufgrund eines deutlich reduzierten Piezofeldes [75].

Diese Arbeit zeigt, wie viel versprechend der Ansatz der Facetten-LEDs ist. Um die noch vorhandenen Probleme zu lösen und Dinge wie Einbau und Homogenität der In-Verteilung zu klären, sind speziell auf diese Strukturen abgestimmte Messmethoden notwendig, die im Rahmen dieser Arbeit nicht zur Verfügung standen, bzw. aufgrund der Struktur und Abmessungen der Proben erst noch zu entwickeln sind.

Kapitel 7

Zusammenfassung

Inhalt dieser Arbeit ist die Herstellung und Charakterisierung von AlGaInNbasierenden Leuchtdioden auf semipolaren Kristallebenen mittels selektiver Epitaxie. Nach dem prinzipiellen Funktionsnachweis dieser neuartigen LEDs wurde untersucht, wie sich das reduzierte Piezofeld auf das Emissionsspektrum und die Ausgangsleistung auswirkt. Dabei zeigte sich, dass bei der selektiven Epitaxie noch weitere Unterschiede gegenüber herkömmlichen LEDs auftreten. Die herkömmlich hergestellten LEDs werden in dieser Arbeit als Referenz-LEDs bezeichnet. Mit diesen Referenz-LEDs wurden die semipolaren LEDs in in ihren optoelektronischen und strukturellen Eigenschaften verglichen.

Für die Herstellung der semipolaren Kristallebenen wird zunächst auf ein $\langle 0001 \rangle$ -Richtung orientiertes Al₂O₃-Substrat eine GaN-Pufferschicht abgeschieden. Auf diese wird eine SiO₂-Maskenschicht aufgebracht und entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ und $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Orientierung der Wurtzit-Kristallstruktur streifenförmig geöffnet. Da auf der SiO₂-Maske kein Material abgeschieden werden kann, erfolgt die Epitaxie selektiv in den geöffneten Bereichen. Abhängig vom Verhältnis von der Breite der Öffnung zur Gesamtbreite der Periode (Füllfaktor) ändert sich die lokale Abscheiderate, so dass sich bei unterschiedlicher Strukturierung der Breite der Maskierungsstreifen Bereiche mit unterschiedlichem Füllfaktor auf einer Probe befinden. Durch die Wahl der Epitaxieparameter bilden sich GaN-Streifen mit semipolaren Seitenfacetten aus, die vorzugsweise für die LED bereits n-dotiert sind. Auf diese Streifen wird die Multi-Quantenfilmstruktur und eine p-dotierte Schicht abgeschieden, um eine vollständige LED zu erhalten. Eine Referenz-LED wird bei gleichen Epitaxieparametern abgeschieden.

Um das reduzierte Piezofeld nachzuweisen, werden zunächst die Emissions-

7. Zusammenfassung

spektren verglichen. Bei den semipolaren LEDs zeigt sich die gegenüber der Referenz-LED erwartete kürzere Wellenlänge. Dadurch, dass das Piezofeld hier deutlich reduziert ist, werden die Energiebänder kaum verbogen und die Rotverschiebung ist erheblich reduziert. Weiterhin wird eine zweite, längerwellige Emissionsspitze bei großen Füllfaktoren festgestellt. Ortsaufgelöste Messungen der Spektren zeigen, dass dies mit der Querschnittsform der Streifen bei großen Füllfaktoren zusammenhängt: Zu Beginn der Abscheidung wird die Streifenbildung durch drei Kristallebenen begrenzt: zwei semipolare schräge Seitenfacetten und die polare {0001}-Top-Facette, wodurch sich ein trapezförmiger Querschnitt ergibt. Die {0001}-Top-Facette wird mit fortschreitender Epitaxie immer schmaler, bis der Streifen nur noch durch die schrägen Ebenen gebildet wird und ein vollständig dreieckiger Querschnitt entstanden ist. Bei großen Füllfaktoren ist die lokale Abscheiderate jedoch kleiner und der trapezförmige Querschnitt bleibt erhalten. Bei der Betrachtung eines Streifenquerschnitts mit Trapezform sind die Quantenfilme sowohl in den schrägen semipolaren Ebenen, als auch in der polaren {0001}-Top-Ebene zu finden.

Bei dem aktiven Bereich konnte ein von der Lage der Quantenfilme abhängiger Einfluss sowohl auf die Quantenfilmdicke als auch auf den In-Anteil festgestellt werden. Die Oberfläche der schrägen Seitenfacetten ist um den Faktor $1/\cos\Theta \approx 2$ größer als für die Referenz-LED. Die Schichtdicke der in $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Richtung orientierten Streifen entspricht dieser Bedingung. Bei den in $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -Richtung orientierten Streifen wird aber eine größere Schichtdicke als erwartet gemessen, sobald der Querschnitt des Streifens nicht mehr trapezförmig, sondern dreieckig ist. Dies ist auf die Eigenschaften der Kristallebenen und das daraus resultierende Epitaxieverhalten zurückzuführen.

Besonders stark wirken sich Eigenschaften der Kristallebenen bei Streifen mit trapezförmigen Querschnitt aus. Hier liegen zwei unterschiedliche Kristallebenen vor, die um das angebotene Quellenmaterial konkurrieren. Damit werden sowohl die Schichtdicken als auch die Zusammensetzung beeinflusst, was sich in der Emissionswellenlänge auswirkt. Die Emissionswellenlänge der Quantenfilme in der {0001}-Top-Ebene ist durch die dickeren Quantenfilme deutlich länger als die der Quantenfilme auf den seitlichen Facetten und sogar längerwelliger als die Emission der Referenz-LED. Mit dem Wechsel zum dreieckförmigen Querschnitt wird die Emissionswellenlänge der Quantenfilme auf den Seitenfacetten sprungartig länger. Die mit abnehmenden Füllfaktor zunehmende Schichtdicke wirkt sich in einer zunehmenden Emissionswellenlänge aus. Die schrägen Seitenfacetten wirken sich positiv auf die GaInN-Quantenfilme aus. Wird in GaInN-Quantenfilmen mit hohem In-Anteil in der polaren *c*-Ebene die Bildung von In-Clustern beobachtet, so zeigen die Quantenfilme auf den Seitenfacetten eine sehr homogene Verteilung, obwohl es Indizen für einen höheren In-Anteil gibt. Auch die TEM-Analyse läßt darauf schließen, dass sich keine In-Cluster in den Quantenfilmen auf den schrägen Seitenfacetten gebildet haben. Die hier gezeigten LEDs sind auch im Hinblick auf die homogene Abscheidung von GaInN-Quantenfilmen mit hohem In-Anteil vielversprechend. Die Ergebnisse von SIMS-Messungen weisen ebenfalls auf einen höheren In-Anteil in den Quantenfilmen auf den schrägen Facetten hin.

Mit stromabhängigen Messungen der Emissionswellenlänge wurde gegenüber der Referenz-LED eine Reduktion des Feldes nachgewiesen. Mit zunehmenden Strom ist die Blauverschiebung der Emission von den semipolaren LEDs nur halb so groß wie die Blauverschiebung der polaren Referenz-LED. Ebenfalls bestätigt das Ergebnis dieser Messung im Vergleich mit theoretischen Berechnungen, dass die Abschirmung des Piezofeldes durch freie Ladungsträger nur unvollständig erfolgt.

Die bei SEM durch die Leitfähigkeit bedingten Helligkeitsunterschiede deuten darauf hin, dass die Dotierung der Schicht auf den Seitenfacetten geringer ist als bei der der Referenz-LED (polare {0001}-Ebene). Dies erfordert eine höhere Dotierung. Die Dotierung mit Magnesium führt bei der selektiven Epitaxie zu drastischen Unterschieden in den Abscheideraten auf den verschiedenen Kristallebenen. Die Abscheidung von p-dotiertem GaN ist auf den seitlichen Facetten deutlich größer als auf der {0001}-Topebene. Dies kann unter anderem dazu führen, dass bei dreieckigem Streifenquerschnitt die Schicht an der Spitze nicht vollständig geschlossen ist und dadurch die Kontaktmetallisierung einen Kurzschluss verursacht. Abhilfe schafft hier die Isolierung der Spitzen durch das Aufbringen einer nicht-leitenden Schicht oder ein gepulstes Zuschalten der Gruppe-III- und Stickstoffquellen.

Strukturelle Untersuchungen zeigen, dass die Eigenschaften der Kristallebenen einen großen Einfluss besitzen. Durch das Überangebot an Stickstoff unter MOVPE-Wachstumsbedingungen werden die $\{1\overline{1}01\}$ -Ebenen wegen ihrer N-Polarität stabilisiert, weshalb sie sich bevorzugt ausbilden. Das wirkt sich in einer sehr glatten Oberfläche aus. Durch die Stabilität der $\{1\overline{1}01\}$ -Ebenen wird bei LEDs auf diesen Ebenen auch eine höhere Ausgangsleistung erzielt.

Die Herstellung und Prozessierung der semipolaren Streifen-LEDs wurde auf

7. Zusammenfassung

ihre Besonderheiten angepasst. Mit der während der Arbeit erfolgten Verbesserungen bei der Prozessierung erreicht die "on chip" erzielte Ausgangsleistung bei 20 mA einen Wert von 0,7 mW und eine Ausgangsleistung von 3 mW bei einem Strom von 111 mA. Insbesondere eignet sich die in dieser Arbeit vorgestellte Lösung zur Nutzung semipolarer Ebenen für den Einsatz ganzer Wafer.

Die in dieser Arbeit vorgestellten LED-Strukturen zeigen ein hohes Potential, um die Ausgangsleitung und Effizienz von AlGaInN-basierenden LEDs entscheidend zu verbessern, insbesondere für den längerwelligen Spektralbereich, da ein verbessertes In-Einbauverhalten nachgewiesen wurde.

Anhang A

Formelzeichen und Abkürzungen

Verwendete Formelzeichen

- α Varshni-Parameter, material
spezifische Konstante
- ε Permittivität
- ϵ Verforming (strain)
- $\eta_{int.}$ interne Quanteneffizienz
- Θ Neigungswinkel anderer Kristallebenen zur {0001}-Ebene (*c*-Ebene)
- λ (Emissions-)Wellenlänge
- μ Ladungsträgerbeweglichkeit: Index n: Elektronen, Index p: Löcher
- ν Lichtfrequenz
- σ Verspannung (*stress*)
- τ Ladungsträgerlebensdauer: Index
 n: Elektronen, Index p: Löcher
- au Ladungsträgerlebensdauer: Index r: bei strahlender Rekombination, Index nr: bei nicht-strahlender Rekombination
- A Metall 1 (Al, Ga, In)
- aGitterkonstante, bei Wurtzit-Struktur in der Basalebene, Index $\theta\colon$ idealer Wert
- $B \qquad \text{Metall 2 (Al, Ga, In)}$
- *b* Bowingparameter, Index *sp*: bei spontaner Polarisation
- C Elastizitätsmodul, mit Indizes: Elastizitätskonstanten
- c Gitterkonstante, bei Wurtzit-Struktur
 \perp zur Basalebene, Index $\mathit{0}\colon$ idealer Wert

A. Formelzeichen und Abkürzungen

c_0	Vakuumlichtgeschwindigkeit									
d_c	kritische Schichtdicke									
E_F	Fermienergieniveau									
E_g	Energiebandlücke									
E_L	Energieniveau Leitungsband									
E_n	Energieniveau n-ter Ordnung									
E_V	Energieniveau Valenzband									
$\overset{\leftrightarrow}{d}$	piezoelektrischer Modul									
e	mit zwei Indizes: Komponenten des piezoelektrischen Tensors									
$\stackrel{\leftrightarrow}{e}$	piezoelektrischer Tensor									
g_{norm}	normierte Abscheiderate									
g_{plan}	Abscheiderate ohne Maskierung (planar)									
h	Plank'sches Wirkungsquantum									
\hbar	normiertes Plank'sches Wirkungsquantum $h/2\pi$									
i,j	Indizes von Tensorkomponenten									
k_B	Boltzmannkonstante									
L	Minoritätsladungsträgerdiffusionslänge, Index $\mathit{n}:$ Elektronen, Index $\mathit{p}:$									
	Löcher									
L_{qw}	Quantenfilmdicke									
m^*	effektive Ladungsträgermasse									
N	Stickstoff (-Anteil)									
N	mit Index A: Akzeptor-Konzentration, Index D: Donator-									
	Konzentration									
n	Anzahl der freien Ladungsträger der Elektronen									
n	Ordnung des Energieniveaus									
n_{\downarrow}	Interferenzordnung									
\vec{P}	Polarisation, Index sp : spontan, Index pz : piezoelektrisch									
p	Anzahl der freien Ladungsträger der Löcher									
Q_{GF}	Grenzflächenladung									
s	mit Indizes: Elastizitätskonstantenkomponenten									
T	Temperatur									
t_{growth}	Wachstumszeit									
U_D	Diffusionsspannung									
u	interner Parameter									
V_{sel}	Volumen des selektiv abgeschiedenen Materials									

V_N	Stickstoff-Fehlstelle
w_{mask}	Breite der Maskierung
w_{open}	Breite der Öffnung
w_{period}	Breite der Periode (Maske + Öffnung)
x	Anteil in der Verbindung
Z^*	Born-Ladung

Verwendete Abkürzungen

CL	Kathodolumineszenz (engl. cathodoluminescence)
DALI	engl. Digital Analysis of Lattice Images
DB	freie Bindungen (engl. dangling bonds)
EL	Elektrolumineszenz (engl. electroluminescence)
ELO	laterales Überwachsen (engl. epitaxial lateral overgrowth)
LED	Leuchtdiode (engl. light emitting diode)
FACELO	facetten-kontrolliertes laterales Überwachsen (<i>engl. facet-controlled</i>
	epitaxial lateral overgrowth)
\mathbf{FF}	Füllfaktor
HRXRD	hochauflösende Röntgendiffraktometrie (<i>engl. high resolution x-ray diffraction</i>)
HVPE	Hydrid-Gasphasen-Epitaxie (engl. hydride vapor phase epitaxy)
MBE	Molekularstrahlepitaxie (engl. molecular beam epitaxy)
MOVPE	Metallorganische Gasphasen-Epitaxie (engl. metal organic vapor
	phase epitaxy)
PECVD	Plasmaunterstützte Gasphasenabscheidung (engl. plasma enhanced
	chemical vapor deposition, PECVD)
PL	Fotolumineszenz (engl. photoluminescence)
RTP	Kurzzeittempern (engl. rapid thermal processing)
SAG	selektive Epitaxie, selektives Wachstum (<i>engl. selective area growth</i>)
SEM	Rasterelektronenmikroskopie (<i>engl. scanning electron microscopy</i>)
SIMS	Sekundär-Ionen-Massenspektroskopie (engl. secondary ion mass
	spectroscopy)
TEM	Transmissionselektronenmikroskopie (engl. transmission electron
	microscopy)
	/

Anhang B

Notation der Klammersymbole

Die Wahl der Klammersymbole für Kristallebenen und Kristallrichtungen ist in der Kristallografie wie folgt definiert:

- Bestimmte Kristallrichtungen werden durch eckige Klammern beschrieben, beispielsweise [0001] für die c-Kristallrichtung des Wurtzit.
- Kristallografisch äquivalente Kristallrichtungen, beispielsweise einer Richtungsfamilie, werden durch spitze Klammern beschrieben, also eine bestimmte Kristallrichtung und dazu parallel verlaufende Richtungen, beispielsweise die $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Richtung und die $\langle \bar{1}100 \rangle$ -Richtung gehören zur gleichen Familie.
- Bestimmte Kristallebenen werden durch runde Klammern beschrieben, beispielsweise die (0001)-Kristallebene.
- Kristallografisch äquivalente Kristallebenen, beispielsweise einer Ebenenfamilie, werden durch geschweifte Klammern ausgedrückt, beispielsweise gehören die Facetten der Streifen entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Richtung mit dreieckigem Querschnitt beide der $\{11\bar{2}2\}$ -Ebenenfamilie an.

In dieser Arbeit wurden die spitzen und die geschweiften Klammersymbole für die Richtungs- und Ebenen-Familien verwendet, da die physikalischen Aussagen für die hier betrachteten Fälle innerhalb der Familien gleich sind. Dies ist mit Ausnahme der [0001]-Richtung korrekt, wo [0001]-Richtung und die [0001]-Richtung unterschiedliche Eigenschaften aufweisen. Im vorliegenden Text wird die [0001]-Richtung nicht weiter betrachtet und daher auch in diesem Fall die Bezeichnung für die Familie verwendet. Sollte dennoch die $[000\bar{1}]\text{-Richtung}$ gemeint sein wird sie in diesem Fall explizit angegeben.

Anhang C

Voigt-Notation: Reduktion der Anzahl unabhängiger Komponenten

Die Voigt-Notation wird in der Literatur zum Teil auch als Matrix-Notation bezeichnet. Sie dient der Reduktion von Indizes von Vektoren ab dem dritten Rang [19].

C.1 Für Tensoren dritten Ranges

Im Allgemeinen besitzt ein Tensor dritten Ranges $3^3 = 27$ unabhängige Komponenten, wie beispielsweise der piezoelektrische Modul. Die Polarisation ist gegeben durch $P_i = d_{ijk}\sigma_{jk}$. Werden diese Komponenten in vollständiger Form ausgeschrieben, so bilden sie eine kubisch aufgebaute Matrix aus drei Ebenen. Bezieht sich der erste Index auf die Ebene, in welcher diese bestimmte Komponente liegt, so bezieht sich der zweite Index auf die Reihe und der dritte Index auf die Spalte. Die Ebenen ergeben sich dann wie folgt:

1	1.Ebene 2					3	S.Ebene		
i = 1			i=2			i = 3			
d_{111}	d_{112}	d_{113}	d_{211}	d_{212}	d_{213}	d_{311}	d_{312}	d_{313}	(C.1)
(d_{121})	d_{122}	d_{123}	(d_{221})	d_{222}	d_{223}	(d_{321})	d_{322}	d_{323}	
(d_{131})	(d_{132})	d_{133}	(d_{231})	(d_{232})	d_{233}	(d_{331})	(d_{332})	d_{333}	

C. Voigt-Notation: Reduktion der Anzahl unabhängiger Komponenten

Dadurch, dass d_{ijk} in j und k symmetrisch ist, verschwinden die in Klammern angegebenen Koeffizienten als unabhängige Komponenten, so dass 18 unabhängige d_{ijk} übrig bleiben.

Es ist nun vorteilhaft, die Anzahl der Indizes so weit wie möglich zu reduzieren. Dies wird erreicht, indem neue Bezeichnungen d_{11} , d_{12} , etc. definiert werden. Mit diesen neuen Bezeichnungen kann die Matrix (C.1) wie folgt geschrieben werden:

Damit werden in diesem Beispiel $d_{21} = d_{211}$ und $d_{14} = 2d_{123}$ definiert. In beiden Notationen ist der erste Index gleich, der zweite und dritte Index der vollständigen Tensor Notation werden durch einen Index von 1 bis 6 wie folgt ersetzt:

Tensor Notation	11	22	33	23,32	31,13	12,21
Voigt-Notation	1	2	3	4	5	6

Die letzten beiden Indizes der Tensor-Notation entsprechen der Notation bei einem Tensor zweiten Grandes (Vektor), wenn dessen Matrix symmetrisch ist. Dieser kann dann gleichfalls wie am Beispiel der Spannungskomponenten vereinfacht werden:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{31} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & \sigma_4 \\ \sigma_5 & \sigma_4 & \sigma_3 \end{bmatrix}.$$
(C.3)

Mit der neuen Notation stellt sich die Gleichung für die erste Komponente der Polarisation dann folgendermaßen dar:

$$P1 = d_{11}\sigma_1 + \frac{1}{2}d_{16}\sigma_6 + \frac{1}{2}d_{15}\sigma_5 + \frac{1}{2}d_{16}\sigma_6 + d_{12}\sigma_2 + \frac{1}{2}d_{14}\sigma_4 + \frac{1}{2}d_{15}\sigma_5 + \frac{1}{2}d_{14}\sigma_4 + d_{13}\sigma_3,$$

oder

 $P_1 = d_{11}\sigma_1 + d_{12}\sigma_2 + d_{13}\sigma_3 + d_{14}\sigma_4 + d_{15}\sigma_5 + d_{16}\sigma_6,$ (C.4)

und ebnso für die Komponenten P_2 und P_3 der Polarisation. In der Kurzfassung wird die Gleichung dann als

$$P_i = d_{ij}\sigma_j$$
, $i = 1, 2, 3$ $j = 1, \dots, 6$ (C.5)

dargestellt. Die Faktoren $\frac{1}{2}$ wurden in der Darstellung der Komponentenebenen (C.2) gewählt, um einen Faktor 2 in der Darstellung von P_1 in Gl. (C.4) zu vermeiden und damit die kompakte Form in Gl. (C.5) darstellen zu können. Die Matrix der Komponenten d_{ij} stellt sich mit den neuen Indizes dar als:

$$\begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & d_{25} & d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} & d_{36} \end{pmatrix}$$
(C.6)

C.2 Für Tensoren vierten Ranges

Für die Erklärung zur Voigt-Notation (oder Matrix-Notation) wird hier das Hook'sche Gesetz als Beispiel verwendet:

$$\epsilon = s\sigma$$
 bzw. in alternativer Darstellung $\sigma = C\epsilon$

Im Allgemeinen gilt, wenn eine homogene Verspannung σ_{ij} auf einen Kristall wirkt, führt dies zu einer homogenen Vermormung ϵ_{ij} , so dass jede Komponente linear von allen Komponenten der Verformung abhängt:

$$\begin{aligned} \epsilon_{11} = & s_{1111}\sigma_{11} + s_{1112}\sigma_{12} + s_{1113}\sigma_{13} \\ &+ s_{1121}\sigma_{21} + s_{1122}\sigma_{22} + s_{1123}\sigma_{23} \\ &+ s_{1131}\sigma_{31} + s_{1132}\sigma_{32} + s_{1133}\sigma_{33}, \end{aligned}$$

und acht weitere Gleichungen für die übrigen acht ϵ_{ij} -Komponenten, wobei die s_{ijkl} Konstanten sind. In kompakter Form schreibt sich das Hook'sche Gesetz damit:

$$\epsilon_{ij} = s_{ijkl}\sigma_{kl} \tag{C.7}$$

bzw.

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \epsilon_{kl} \quad . \tag{C.8}$$

An einfachen Verspannungsbedingungen soll nun am Beispiel des Verspannungstensors die Symmetrie gezeigt werden. Liegt eine Scherspannung in der Richtung von x_3 an, so treten beide Komponenten σ_{12} und σ_{21} auf, womit

$$\epsilon_{11} = s_{1112}\sigma_{12} + s_{1121}\sigma_{21} = (s_{1112} + s_{1121})\sigma_{12}$$

gilt. Die Komponenten s_{1112} und s_{1121} treten deshalb immer zusammen auf. Sie können in keinem Experiment getrennt bestimmt werden, wie das im Allgemeinen für alle Paare s_{ijkl} und s_{ijlk} gilt [19]. Daraus folgt:

$$s_{ijkl} = s_{ijlk} \quad . \tag{C.9}$$

Wenn andererseits eine uniaxiale Spannung parallel zur Richtung x_3 anliegt, sind die Komponenten der Verformung

$$\epsilon_{11} = s_{1133}\sigma_{33}$$
 , $\epsilon_{22} = s_{2233}\sigma_{33}$, etc.,

insbesondere gilt:

$$\epsilon_{12} = s_{1233}\sigma_{33}$$
 und $\epsilon_{21} = s_{2133}\sigma_{33}$

Da gleichzeitig wegen der Symmetrie des Verformungstensors $\epsilon_{12} = \epsilon_{21}$ gelten muss, folgt unter Betrachtung weiterer Spezialfälle

$$s_{ijkl} = s_{jikl} \quad . \tag{C.10}$$

In gleicher Weise läßt sich die Symmetrie für die Verspannung und den Elastizitätsmodul C_{ijkl} zeigen, dass gilt:

$$C_{ijkl} = C_{ijlk}$$
 und (C.11)

$$C_{ijkl} = C_{jikl} \quad . \tag{C.12}$$

Damit bleiben von den 81 Komponenten für s_{ijkl} und C_{ijkl} nur noch 36 unabhängige Komponenten übrig und es läßt sich somit die Anzahl der Indizes reduzieren. Für die Verspannungs- und Verformungskomponenten bleibt ein Index übrig:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{31} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \sigma_{1} & \sigma_{6} & \sigma_{5} \\ \sigma_{6} & \sigma_{2} & \sigma_{4} \\ \sigma_{5} & \sigma_{4} & \sigma_{3} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \epsilon_{11} & \epsilon_{12} & \epsilon_{31} \\ \epsilon_{12} & \epsilon_{22} & \epsilon_{23} \\ \epsilon_{31} & \epsilon_{23} & \epsilon_{33} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \epsilon_{1} & \frac{1}{2}\epsilon_{6} & \frac{1}{2}\epsilon_{5} \\ \frac{1}{2}\epsilon_{6} & \epsilon_{2} & \frac{1}{2}\epsilon_{4} \\ \frac{1}{2}\epsilon_{5} & \frac{1}{2}\epsilon_{4} & \epsilon_{3} \end{bmatrix}$$

$$(C.13)$$

Ahnlich wie bei der Indexreduktion für Tensoren dritten Ranges können auch die Indizes der Tensoren vierten Ranges reduziert werden, indem neue Indizes von 1 bis 6 definiert werden:

Tensor Notation	11	22	33	23,32	31,13	12,21
Voigt-Notation	1	2	3	4	5	6

und hier ebenfalls die auftretenden Faktoren berücksichtigt werden:

s_{ijkl}	=	s_{mn}	, wenn m u	nd n	1, 2	oder 3	$\operatorname{sind},$	
$2s_{ijkl}$	=	s_{mn}	, wenn entwede	er m	oder	n 4 ,	5 oder 6	ist,
$4s_{ijkl}$	=	s_{mn}	, wenn beide \boldsymbol{n}	<i>i</i> und	n 4	, 5 ode	r 6 sind.	

Analog zu der Reduktion der Indizes bei der Voigt-Notation für Tensoren dritten Ranges lassen sich die Gleichgungen (C.7) und (C.8) somit als

$$\epsilon = s_{ij}\sigma_j \quad (i, j = 1, \dots, 6) \tag{C.14}$$

und

$$\sigma = C_{ij}\epsilon_j \quad (i, j = 1, \dots, 6) \tag{C.15}$$

ausdrücken. Die Matritzen für s_{ij} und C_{ij} sind dann in ausgeschriebener Form:

({	s ₁₁	s_{12}	s_{13}	s_{14}	s_{15}	s_{16})		(C_{11})	C_{12}	C_{13}	C_{14}	C_{15}	C_{16}
1	s_{21}	s_{22}	s_{23}	s_{24}	s_{25}	s_{26}		C_{21}	C_{22}	C_{23}	C_{24}	C_{25}	C_{26}
1	s_{31}	s_{32}	s_{33}	s_{34}	s_{35}	s_{36}	und	C_{31}	C_{32}	C_{33}	C_{34}	C_{35}	C_{36}
1	s_{41}	s_{42}	s_{43}	s_{44}	s_{45}	s_{46}	una	C_{41}	C_{42}	C_{43}	C_{44}	C_{45}	C_{46}
	s_{51}	s_{52}	s_{53}	s_{54}	s_{55}	s_{56}		C_{51}	C_{52}	C_{53}	C_{54}	C_{55}	C_{56}
. /	s ₆₁	s_{62}	s_{63}	s_{64}	s_{65}	s_{66} /)	C_{61}	C_{62}	C_{63}	C_{64}	C_{65}	C_{66})

.
Literaturverzeichnis

- F. Bernardini, V. Fiorentini und D. Vanderbilt, Phys. Rev. B 56, 10024 (1997).
- [2] T. Takeuchi, H. Amano und I. Akasaki, Japan. J. Appl. Phys. 39, 413 (2000).
- [3] M. Feneberg, F. Lipski, R. Sauer, K. Thonke, T. Wunderer, B. Neubert, P. Brückner und F. Scholz, Appl. Phys. Lett. 89, 242112 (2006).
- [4] M. D. Craven, S. H. Lim, F. Wu, J. S. Speck und S. P. DenBaars, Appl. Phys. Lett. 81, 469 (2002).
- [5] B. M. Imer, F. Wu, S. P. DenBaars und J. S. Speck, Appl. Phys. Lett. 88, 061908 (2006).
- [6] C. Chen, V. Adivarahan, J. Yang, M. Shatalov, E. Kuokstis und M. A. Kahn, Japan. J. Appl. Phys. Lett. 42, L1039 (2003).
- [7] A. Chitnis, C. Chen, V. Adivarahan, M. Shatalov, E. Kuokstis, V. Mandavilli, J. Yang und M. A. Khan, Appl. Phys. Lett. 84, 3663 (2004).
- [8] A. Chakraborty, B. A. Haskell, S. Keller, J. S. Speck, S. P. DenBaars, S. Nakamura und U. K. Mishra, Appl. Phys. Lett. 85, 5143 (2004).
- [9] M. D. Craven, F. Wu, A. Chakraborty, B. Imer, U. K. Mishra, S. P. Den-Baars und J. S. Speck, Appl. Phys. Lett. 84, 1281 (2004).
- [10] B. A. Haskell, A. Chakraborty, F. Wu, H. Sasano, P. T. Fini, S. P. DenBaars, J. S. Speck und S. Nakamura, J. Electron. Mat. 34, 357 (2005).
- [11] A. Chakraborty, B. A. Haskell, S. Keller, J. S. Speck, S. P. DenBaars, S. Nakamura und U. K. Mishra, Japan. J. Appl. Phys. Lett. 44, L173 (2005).

- [12] A. Chakraborty, B. A. Haskell, H. Masui, S. Keller, J. S. Speck, S. P. DenBaars, S. Nakamura und U. K. Mishra, Japan. J. Appl. Phys. 45, 793 (2006).
- [13] M. P. Halsall, P. Harmer, P. J. Parbrook und S. J. Henley, Phys. Rev. B 69, 235207 (2004).
- [14] K. Kopitzki und P. Herzog, Einführung in die Festköperphysik (Teubner Verlag, Stuttgart, 2002).
- [15] I. Vurgaftman und J. R. Meyer, J. Appl. Phys. 94, 3675 (2003).
- [16] A. Zoroddu, F. Bernardini, P. Ruggerone und V. Fiorentini, Phys. Rev. B 64, 045208 (2001).
- [17] Properties of Group III Nitrides, 1. Ausg., J. H. Edgar (Hrsg.), (INSPEC, London, UK, 1994).
- [18] A. Pelzmann, Charakterisierung und Optimierung von Leuchtdioden auf der Basis von GaN, Dissertation, Universität Ulm, 2000.
- [19] J. F. Nye, *Physical Properties of Crystals* (Oxford University Press, Oxford, UK, 1985).
- [20] F. Bernardini und V. Fiorentini, Phys. Rev. B 64, 085207 (2001).
- [21] V. Schwegler, Herstellung und Charakterisierung von lichtemittierenden Dioden im AlGaInN-Materialsystem, Dissertation, Universität Ulm, 2004.
- [22] K. Hiramatsu, K. Nishiyama, A. Motogaito, H. Miyake, Y. Iyechika und T. Maeda, phys. stat. sol. (a) 176, 535 (1999).
- [23] O. Ambacher, J. Phys. D. **31**, 2653 (1998).
- [24] C. E. Mortimer und U. Müller, *Chemie* (Georg Thieme Verlag, Stuttgart, 2003).
- [25] C. Stampfl und C. G. Van de Walle, Phys. Rev. B **59**, 5521 (1999).
- [26] H. Morkoç, S. Strite, G. B. Gao, M. E. Lin, B. Sverdlov und M. Burns, J. Appl. Phys. 76, 1363 (1994).

- [27] V. Y. Davydov, A. A. Klochikhin, V. V. Emtsev, D. A. Kurdyukov, S. V. Ivanov, V. A. Vekshin, F. Bechstedt, J. Furthmüller, J. Aderhold, J. Graul, A. V. Mudryi, H. Harima, A. Hashimoto, A. Yamamoto und E. E. Haller, phys. stat. sol. (b) 234, 787 (2002).
- [28] S. Strite, M. E. Lin und H. Morkoç, Thin Solid Films 231, 197 (1993).
- [29] Y. K. Kuo und W. W. Lin, Japan. J. Appl. Phys. 41, 5557 (2002).
- [30] T. Takeuchi, H. Takeuchi, S. Sota, H. Sakai, H. Amano und I. Akasaki, Japan. J. Appl. Phys. 36, L177 (1997).
- [31] I. Vurgaftman, J. R. Meyer und L. R. Ram-Mohan, J. Appl. Phys. 89, 5815 (2001).
- [32] T. Peng, J. Piprek, G. Qiu, J. O. Olowolafe, K. M. Unruh, C. P. Swann und E. F. Schubert, Appl. Phys. Lett. 71, 2439 (1997).
- [33] T. Matsuoka, Appl. Phys. Lett. **71**, 105 (1997).
- [34] J. W. Matthews und A. E. Blakeslee, J. Cryst. Growth 27, 118 (1974).
- [35] R. People und J. C. Bean, Appl. Phys. Lett. 47, 322 (1985), erratum: apl 49 (1986), p. 229.
- [36] S. E. Miller, Methoden zur Defektreduzierung in optoelektronischen $Ga_{1-x}In_xN$ -Bauelementen Epitaxie und Charakterisierung, Dissertation, Universität Ulm, 2005.
- [37] N. Grandjean und J. Massies, Appl. Phys. Lett. 72, 1078 (1998).
- [38] C. A. Parker, J. C. Roberts, S. M. Bedair, M. J. Reed, S. X. Liu und N. A. El-Masry, Appl. Phys. Lett. 75, 2776 (1999).
- [39] U. M. E. Christmas, A. D. Andreev und D. A. Faux, J. Appl. Phys. 98, 073522 (2005).
- [40] F. Bernardini, V. Fiorentini und D. Vanderbilt, Phys. Rev. B 63, 193201 (2001).
- [41] M. Posternak, A. Baldereschi, A. Catellani und R. Resta, Phys. Rev. Lett. 64, 1777 (1990).

- [42] V. Fiorentini, F. Bernardini und O. Ambacher, Appl. Phys. Lett. 80, 1204 (2002).
- [43] R. D. King-Smith und D. Vanderbilt, Phys. Rev. B 47, 1651 (1993).
- [44] E. T. Yu, X. Z. Dang, P. M. Asbeck, S. S. Lau und G. J. Sullivan, J. Vac. Sci. Technol. B 17, 1742 (1999).
- [45] A. Kazimirov, G. Scherb, J. Zegenhagen, T.-L. Lee, M. J. Bedzyk, M. K. Kelly, H. Angerer und O. Ambacher, J. Appl. Phys. 84, 1703 (1998).
- [46] F. Bernardini und V. Fiorentini, Appl. Phys. Lett. 80, 4145 (2002).
- [47] O. Ambacher, J. Majewski, C. Miskys, A. Link, M. Hermann, M. Eickhoff, M. Stutzmann, F. Bernardini, V. Fiorentini, V. Tilak, B. Schaff und L. F. Eastman, J. Phys. : Condens. Matter 14, 3399 (2002).
- [48] E. F. Schubert, *Light Emitting Diodes*, 2. Ausg. (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2006).
- [49] A. Hangleiter, J. S. Im, H. Kollmer, S. Heppel, J. Off und F. Scholz, MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. 3, Art. 15 (1998).
- [50] Das große Fremdwörterbuch, dritte Ausg., Duden (Hrsg.), (Bibliographisches Institut & F. A. Brockhaus AG, Mannheim, 2003).
- [51] G.-B. Stringfellow, J. Cryst. Growth 68, 111 (1984).
- [52] M. Mayer, Reaktive Molekularstrahlepitaxie f
 ür Leuchtdioden im InAlGaN-Materialsystem, Dissertation, Universit
 ät Ulm, 2000.
- [53] C. Kirchner, Metallorganische Gasphasenepitaxie f
 ür optoelektronische und elektronische Bauelemente im Materialsystem AlGaInN, Dissertation, Universit
 ät Ulm, 2001.
- [54] P. Brückner, in *annual report* (Institute of Optoelectronics, Ulm University, Ulm, 2006), S. 73.
- [55] W. Zhang und B. K. Meyer, phys. stat. sol. (c) **0**, 1571 (2003).
- [56] K. Hiramatsu, in Vacuum science and technology: nitrides as seen by the technology 2002, T. Paskova und B. Monemar (Hrsg.), (Research Signpost, Kerala, Indien, 2002), S. 125–145.

- [57] R. J. Molnar, W. Götz, L. T. Romano und N. M. Johnson, J. Cryst. Growth 178, 147 (1997).
- [58] H. M. Manasevit, Appl. Phys. Lett. **12**, 156 (1968).
- [59] P. Brückner, Einfluß der Prozeßparameter beim epitaktischen Überwachsen von strukturierten GaN-Schichten mittels MOVPE, Diplomarbeit, Universität Ulm, 2004.
- [60] G. Xing und Y. Z. Zhen, J. Microwaves and Optoelectronics 2, 1 (2002).
- [61] C. Kirchner, pers. Auskunft.
- [62] Z. Yu, M. A. L. Johnson, J. D. Brown, N. A. El-Masry, J. F. Muth, J. W. Cook, JR., J. F. Schetzina, K. W. Haberern, H. S. Kong und J. A. Edmond, MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. 4S1, G4.3 (1999).
- [63] B. Beaumont, P. Vennéguès und P. Gibart, phys. stat. sol. (b) **227**, 1 (2001).
- [64] G. B. Stringfellow, Organometallic Vapor-Phase Epitaxy: Theory and Practice, 2. Ausg. (Academic Press, San Diego, USA, 1999).
- [65] M. A. Herman und H. Sitter, Molecular Beam Epitaxy (Springer Verlag, Berlin, 1996).
- [66] I. Ecker, Molekularstrahlepitaxie GaAs-basierender Mischungshalbleiter für 1300 nm-nahe Laserdiodenemission, Dissertation, Universität Ulm, 2004.
- [67] M. A. L. Johnson, Z. Yu, J. D. Brown, F. A. Koeck, N. A. El-Masry, H. S. Kong, J. A. Edmond, J. W. Cook, JR. und J. F. Schetzina, MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. 4S1, G5.10 (1999).
- [68] M. C. Golling, Molekularstrahlepitaxie vertikal emittierender InGaAs-Laser-Strukturen mit periodischer Gewinnstruktur, Dissertation, Universität Ulm, 2004.
- [69] R. Stevenson, Compound Semiconductor, July 2006.
- [70] T. J. Baker, B. A. Haskell, F. Wu, P. T. Fini, J. S. Speck und S. Nakamura, Japan. J. Appl. Phys. Lett. 44, L920 (2005).

- [71] A. Chakraborty, T. J. Baker, B. A. Haskell, F. Wu, J. S. Speck, S. P. DenBaars, S. Nakamura und U. K. Mishra, Japan. J. Appl. Phys. Lett. 44, L945 (2005).
- [72] M. Sumiya und S. Fuke, MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. 9, Art. 1 (2004).
- [73] J. Unland, B. Onderka, A. Davydov und R. Schmid-Fetzer, J. Cryst. Growth 256, 33 (2003).
- [74] C. R. Miskys, M. K. Kelly, O. Ambacher und M. Stutzmann, phys. stat. sol. (c) 0, 1627 (2003).
- [75] M. Funato, M. Ueda, Y. Kawakami, Y. Narukawa, T. Kosugi, M. Takahashi und T. Mukai, Japan. J. Appl. Phys. Lett. 45, L659 (2006).
- [76] A. Krost und A. Dadgar, Materials Science and Engineering **B93**, 77 (2002).
- [77] L. Liu und J. H. Edgar, Materials Science and Engineering Reports R37, 61 (2002).
- [78] Marketech International Inc.
- [79] A. Chakraborty, S. Keller, C. Meier, B. A. Haskell, S. Keller, P. Waltereit, S. P. DenBaars, S. Nakamura, J. S. Speck und U. K. Mishra, Appl. Phys. Lett. 86, 031901 (2005).
- [80] Q. Sun, S.-Y. Kwon, Z. Ren, J. Han, T. Onuma, S. F. Chichibu und S. Wang, Appl. Phys. Lett. 92, 051112 (2008).
- [81] K. Nishizuka, M. Funato, Y. Kawakami, S. Fujita, Y. Narukawa und T. Mukai, Appl. Phys. Lett. 85, 3122 (2004).
- [82] B. Neubert, F. Habel, P. Brückner, F. Scholz, T. Riemann und J. Christen, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 831, E11.32.1 (2005).
- [83] K. Hiramatsu und H. Miyake, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 639, G8.4.1 (2001).
- [84] M. Nagahara, S. Miyoshi, H. Yaguchi, K. Onabe, Y. Shiraki und R. Ito, Japan. J. Appl. Phys. 33, 694 (1994).

- [85] Y. Kato, S. Kitamura, K. Hiramatsu und N. Sawaki, J. Cryst. Growth 144, 133 (1994).
- [86] A. Usui, H. Sunakawa, A. Sakai und A. A. Yamaguchi, Japan. J. Appl. Phys. Lett. 36, L899 (1997).
- [87] O.-H. Nam, M. D. Bremser, B. L. Ward, R. J. Nemanich und R. F. Davis, Japan. J. Appl. Phys. Lett. 36, L532 (1997).
- [88] O.-H. Nam, M. D. Bremser, T. S. Zheleva und R. F. Davis, Appl. Phys. Lett. 71, 2638 (1997).
- [89] B. Beaumont, V. Bousquet, P. Vennéguès, M. Vaille, A. Bouillé, P. Gibart, S. Dassonneville, A. Amokrane und B. Sieber, phys. stat. sol. (a) 176, 567 (1999).
- [90] M. E. Coltrin, C. C. Willan, M. E. Bartram, J. Han, N. Missert, M. H. Crawford und A. G. Baca, MRS Int. J. Nitride Semicond. 4S1, G6.9 (1999).
- [91] A. Kaluza, A. Schwarz, D. Gauer, H. Hardtdegen, N. Nastase, H. Lüth, T. Schäpers, D. Meertens, A. Maciel, J. Ryan und E. O'Sullivan, J. Cryst. Growth 221, 91 (2000).
- [92] C.-S. Son, T. G. Kim, X.-L. Wang und M. Ogura, J. Cryst. Growth 221, 201 (2000).
- [93] T. Akasaka, Y. Kobayashi, S. Ando, N. Kobayashi und M. Mumagai, J. Cryst. Growth 189/190, 72 (1998).
- [94] F. Shahedipour-Sandvik, J. Grandusky, A. Alizadeh, C. Keimel, S. P. Ganti, S. T. Taylor, S. F. LeBoeuf und P. Sharma, Appl. Phys. Lett. 87, 233108 (2005).
- [95] D. Hellwinkel, *Die systematische Nomenklatur der organischen Chemie* (Springer Verlag, Berlin, 2006).
- [96] A. A. Khandekar, J. Y. Yeh, L. J. Mawst, X. Song, S. E. Babcock und T. F. Kuech, J. Cryst. Growth 303, 456 (2007).
- [97] P. Gibart, Rep. Prog. Phys. 67, 667 (2004).

- [98] A. Amano, S. Sawaki, I. Akasaki und Y. Toyoda, Appl. Phys. Lett. 48, 353 (1986).
- [99] B. Kuhn, AlGaN/GaN-Heterostrukturen: Epitaxie und elektrische Eigenschaften, Dissertation, Universität Stuttgart, 2002.
- [100] K. Hiramatsu, S. Itoh, H. Amano, I. Akasaki, N. Kuwano, T. Shiraishi und K. Oki, J. Cryst. Growth 115, 628 (1991).
- [101] R. Steins, New process approaches to metalorganic vapor phase epitaxy of III-nitrides for high power HEMTs, Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, 2006.
- [102] S. Nakamura und T. Mukai, Japan. J. Appl. Phys. Lett. **31**, L1457 (1992).
- [103] V. Härle, H. Bolay, F. Steuber, F. Scholz, V. Syganow, G. Frankowsky und A. Hangleiter, Int. Symp. on Blue Laser and Light Emitting Diodes 1, Tu (1996).
- [104] S. Keller, B. P. Keller, D. Kapolnek, U. K. Mishra, S. P. DenBaars, I. K. Shmagin, R. M. Kolbas und S. Krishnankutty, J. Cryst. Growth 170, 349 (1997).
- [105] A. Sohmer, J. Off, H. Bolay, V. Härle, V. Syganow, J. S. Im, V. Wagner, F. Adler, A. Hangleiter, A. Dörnen, F. Scholz, D. Brunner, O. Ambacher und H. Lakner, MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. 2, Art. 14 (1997).
- [106] I. Ho und G. B. Stringfellow, Appl. Phys. Lett. 69, 2710 (1996).
- [107] T. Matsuoka, Appl. Phys. Lett. 71, 105 (1997).
- [108] S. Chichibu, T. Azuhata, T. Sota und S. Nakamura, Appl. Phys. Lett. 70, 2822 (1997).
- [109] D. Singh, D. Doppalapudi, T. D. Moustakas und L. T. Romano, Appl. Phys. Lett. 70, 1089 (1997).
- [110] N. El-Masry, E. Piner, S. Liu und S. Bedair, Appl. Phys. Lett. 72, 40 (1998).
- [111] P. Kozodoy, H. Xing, S. P. DenBaars, U. K. Mishra, A. Saxler, R. Perrin, S. Elhamri und W. C. Mitchel, J. Appl. Phys. 87, 1832 (2000).

- [112] M. Kamp, GaN-based Light Emitters; Epitaxy, Technology and Devices, Habilitationsschrift, Universität Ulm, 2001.
- [113] U. Kaufmann, M. Kunzer, M. Maier, H. Obloh, A. Ramakrishnan, B. Santic und P. Schlotter, Appl. Phys. Lett. 72, 1326 (1998).
- [114] J. Neugebauer und C. G. Van de Walle, Appl. Phys. Lett. 68, 1829 (1996).
- [115] H. Amano, M. Kito, K. Hiramatsu und I. Akasaki, Japan. J. Appl. Phys. Lett. 28, 2112 (1989).
- [116] S. Nakamura, N. Iwasa, M. Senoh und T. Mukai, Japan. J. Appl. Phys. Lett. 31, 1258 (1992).
- [117] M. A. Scherer, Prozesstechnologie f
 ür GaN basierende Leuchtdioden, Dissertation, Universit
 ät Ulm, 2004.
- [118] D. Widmann, H. Mader und H. Friedrich, Technologie hochintegrierter Schaltungen, zweite Ausg. (Springer Verlag, Berlin, 1996).
- [119] U. Hilleringmann, Silizium-Halbleitertechnologie, erste Ausg. (Teubner Verlag, Stuttgart, 1996).
- [120] B. Beaumont, M. Vaille, G. Nataf, A. Bouillé, J.-C. Guillaume, P. Vennéguès, S. Haffouz und P. Gibart, MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. 3, Art. 20 (1998).
- [121] S. C. Jain, M. Willander, J. Narayan und R. Van Overstraeten, J. Appl. Phys. 87, 965 (2000).
- [122] C. Caneau, R. Bhat, C. C. Chang, K. Kash und M. A. Koza, J. Cryst. Growth 132, 364 (1993).
- [123] M. Aoki, H. Sano, M. Suzuki, M. Takahashi, K. Uomi und A. Takai, Electron. Lett. 27, 2138 (1991).
- [124] F. Scholz, pers. Auskunft.
- [125] A. A. Sirenko, A. Kazimirov, S. Cornaby, D. H. Bilderback, B. Neubert, P. Brückner, F. Scholz, V. Shneidman und A. Ougazzaden, Appl. Phys. Lett. 89, 181926 (2006).

- [126] Y. Honda, Y. Iyechika, T. Maeda, H. Miyake und K. Hiramatsu, Japan. J. Appl. Phys. Lett. 40, L309 (2001).
- [127] P. L. Bonanno, S. M. O'Malley, A. A. Sirenko, A. Kazimirov, Z.-H. Cai, T. Wunderer, P. Brückner und F. Scholz, Appl. Phys. Lett. 92, 123106 (2008).
- [128] M. Beer, pers. Auskunft.
- [129] K. Engl, TEM-Analysen an Gruppe III-Nitrid Heterostrukturen, Dissertation, Universität Regensburg, 2005.
- [130] T. Wunderer, *Elektrolumineszenz-Untersuchungen an GaInN-Facetten-Quantenfilmen*, Diplomarbeit, Universität Ulm, 2006.
- [131] T. Akasaka, S. Ando, T. Nishida, T. Saitoh und N. Kobayashi, J. Cryst. Growth 248, 537 (2003).
- [132] F. Habel, P. Brückner und F. Scholz, J. Cryst. Growth 272, 515 (2004).
- [133] S. Lorch, Herstellung, Charakterisierung und Anwendungen von ionenstrahlgesputterten optischen Schichten, Dissertation, Universität Ulm, 2006.
- [134] M. D. McCluskey, L. T. Romano, B. S. Krusor, N. M. Johnson, T. Suski und J. Jun, Appl. Phys. Lett. 73, 1281 (1998).
- [135] C.-C. Chuo, C.-M. Lee und J.-I. Chyi, Appl. Phys. Lett. 78, 314 (2001).
- [136] H. Sakuta, Y. Kawano, Y. Yamanaka, S. Kurai und T. Taguchi, phys. stat. sol. (c) 2, 2407 (2005).
- [137] H. Paul, n- und p-Dotierung von AlGaN mittels MOVPE, Diplomarbeit, Abteilung Optoelektronik, Universität Ulm, 2004.
- [138] I.-H. Kim, H.-S. Park, Y.-J. Park und T. Kim, Appl. Phys. Lett. 73, 1634 (1998).
- [139] D. J. Fu, G. P. Panin und T. W. Kang, J. Korean Phys. Society 42, S611 (2003).
- [140] I. Grzegory, J. Phys. : Condens. Matter 13, 1 (2001).
- [141] M. C. Schmidt, K.-C. Kim, H. Sato, N. Fellows, H. Masui, S. Nakamura, S. P. DenBaars und J. S. Speck, Japan. J. Appl. Phys. 46, L126 (2007).

[142] A. Tyagi, H. Zhong, N. Fellows, M. Iza, J. S. Speck, S. P. DenBaars und S. Nakamura, Japan. J. Appl. Phys. 46, L129 (2007).

Vorveröffentlichungen

Artikel

- B. Neubert, T. Wunderer, P. Brückner, F. Scholz, M. Feneberg, F. Lipski and K. Thonke, "Semipolar GaN/GaInN LEDs with more than 1 mW optical output power", *J. Cryst. Growth*, **298**, 706, (2007).
- M. Feneberg, F. Lipski, R. Sauer, K. Thonke, P. Brückner, B. Neubert, T. Wunderer and F. Scholz, "Polarized light emission from semipolar GaInN quantum wells on {1101} GaN facets", J. Appl. Phys., 101, 053330, (2007).
- M. Feneberg, F. Lipski, R. Sauer, K. Thonke, T. Wunderer ,B. Neubert, P. Brückner and F. Scholz, "Piezoelectric fields in GaInN/GaN quantum wells on different crystal facets", *Appl. Phys. Lett.*, 89, 242112, (2006).
- A.A. Sirenko, A. Kazimirov, S. Cornaby, D. H. Bilderback, B. Neubert, P. Brückner, F. Scholz, V. Shneidman and A. Ougazzaden, "Microbeam high angular resolution x-ray diffraction in InGaN/GaN selective-areagrown ridge structures", *Appl. Phys. Lett.*, 89, 181926, (2006).
- T. Wunderer, P. Brückner, B. Neubert, F. Scholz, M. Feneberg, F. Lipski, M. Schirra and K. Thonke, "Bright semipolar GaInN/GaN blue light emitting diode on side facets of selectively grown GaN stripes", *Appl. Phys. Lett.*, 89, 041121, (2006).
- B. Neubert, F. Habel, P. Brückner, F. Scholz, M. Schirra, M. Feneberg, K. Thonke, T. Riemann, J. Christen, M. Beer, J. Zweck, G. Moutchnik and M. Jetter, "Investigations on local Ga and In incorporation of GaInN quantum wells on facets of selectively grown GaN stripes", *phys. stat. sol. (c)*, **3 (6)**, 1587, (2006).
- M. Feneberg, M. Schirra, B. Neubert, P. Brückner, F. Scholz, R. Sauer and K. Thonke, "Spatially resolved cathodoluminescence, photoluminescence

electroluminescence, and reflective study of GaInN quantum wells on non-(0001) GaN facets", *phys. stat. sol.* (b), **243** (7), 1619, (2006).

- B. Neubert, P. Brückner F. Scholz, T. Riemann, J. Christen, M. Beer and J. Zweck, "GaInN quantum wells grown on facets of selectively grown GaN stripes", *Appl. Phys. Lett.*, 87, 182111, (2005).
- B. Neubert, F. Habel, P. Brückner, F. Scholz, T. Riemann and J. Christen, "Electroluminescence from GaInN quantum wells grown on non-(0001) facets of selectively grown GaN stripes", *Mat. Res. Symp. Proc.*, 831, 691, (2005).

Vorträge

- B. Neubert, T. Wunderer, P. Brückner, F. Scholz, M. Feneberg, F. Lipski and K. Thonke, "Semipolar GaN/GaInN LEDs with more than 1 mW optical output power", 13. International Conference on Metal Organic Vapor Phase Epitaxy, ICMOVPE XIII, Vortrag Tu-B1.2, Miyazaki, Japan, May 2006.
- B. Neubert, F. Habel, P. Brückner, F. Scholz, M. Schirra, M. Feneberg, K. Thonke, T. Riemann, J. Christen, M. Beer, J. Zweck, G. Moutchnik and M. Jetter, "Investigations on local Ga and In incorporation of GaInN quantum wells on facets of selectively grown GaN stripes", 6. International Conference on Nitride Semiconductors, ICNS 2005, Vortrag Fr-G9-1, Bremen, Germany, Aug. /Sep. 2005.
- B. Neubert, F. Habel, P. Brückner, F. Scholz, T. Riemann, and J. Christen, "Elektrolumineszenz von GaInN-Quantenfilmen auf Facetten von selektiv gewachsenen GaN-Streifen", 19. Workshop Epitaxie von III/V-Halbleitern, DGKK 2004, Vortrag 2b-04, Freiburg i. Br., Germany, Dez. 2004.

Poster

 B. Neubert, F. Habel, P. Brückner, F. Scholz, M. Schirra, M. Feneberg, K. Thonke, T. Riemann, J. Christen, M. Beer, J. Zweck, G. Moutchnik and M. Jetter, "Characteristics of GaInN quantum wells grown on non(0001) facets of selectively grown GaN stripes", *11. European Workshop for Metalorganic Vapor Phase Epitaxy, EWMOVPE XI*, Poster H-01, Lausanne, Schweiz, Jun. 2005. • B. Neubert, F. Habel, P. Brückner, F. Scholz, T. Riemann, and J. Christen, "Electroluminescence from GaInN quantum wells grown on non-(0001) facets of selectively grown GaN stripes" ,*MRS Fall Meeting 2004*, poster E11.32., Boston, MA, USA, Nov. 2004.

Danksagung

Für das Gelingen der Arbeit während meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter der Abteilung Optoelektronik der Universität Ulm wurde ich von Vielen unterstützt, wofür ich mich an dieser Stelle dafür bedanken möchte:

Mein ganz besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. Ferdinand Scholz, der mir die Arbeit an diesem interessanten Thema ermöglicht hat und die vorbildliche Betreuung als "Doktorvater".

Herrn Prof. Dr. Jürgen Christen danke ich für seine Bereitschaft, freundlicherweise das Zweitgutachen zu übernehmen und die Kathodolumineszenzmessungen.

Meinem Diplomanden und späterem Kollegen Dipl.-Ing. Thomas Wunderer danke ich für die guten Ergebnisse während seiner Diplomarbeit und das gute Büroklima.

Besonders bedanken möchte ich mich auch bei apl. Prof. Dr. Klaus Thonke, Dr. Martin Feneberg und Dipl.-Phys. Frank Lipski für die vielen Messungen und Ergebnisse die zum Erfolg der Arbeit beigetragen haben und ihre Diskussionsbereitschaft.

Meinem Bürokollegen Dr.-Ing. Frank S. Habel danke ich für die stets angenehme Arbeitsatmosphäre, die vielen informativen Diskussionen und stete Hilfsbereitschaft bei der Epitaxie.

Herrn Dr.-Ing. Christoph Eichler danke ich für die freundliche Unterstützung im Messlabor und Diskussionen.

Meinem Betreuer der Diplomarbeit und späteren Kollegen Dr.-Ing. Marcus A. Scherer danke ich für die Einweisung in die GaN-Prozessierung sowie zusammen mit Dipl. Phys. Matthias Seyboth danke ich für das stets gute Klima in der Arbeitsgruppe und hilfreiche Diskussionen.

Danksagung

Meinem Kollegen Dipl.-Ing. Peter Brückner danke ich für die Einweisung und umfangreiche Unterstützung bei der GaN-Epitaxie.

Bei meinem Kollegen M. Sc. Sarad B. Thapa möchte ich mich ganz besonders für seine organisatorische Hilfe bei der Dienstreise in Nagoya in Japan bedanken.

Mein Dank gilt natürlich auch dem technischen Personal des Instituts für Optoelektronik: Susanne Menzel, Rainer Blood, Rudi Rösch, Gerlinde Meixner und Josef Theisz und dem Sekrtariat: Hilde Mack, Skran Kilic und Christine Bunk für ihre stete Hilfsbereitschaft und Motivation.

Bedanken möche ich mich auch bei allen, die mich mit ihren Messungen unterstützt haben:

- Dr. M. Schirra für die durchgeführten Kathodolumineszenzmessungen
- Dipl.-Phys. Martin Beer und Prof. Dr. Josef Zweck ür die umfangreichen TEM-Untersuchungen.
- Dr. Till Riemann für die vielen und aufschlussreichen Kathodolumineszenzmessungen.
- Dr. Michael Jetter und Galina Moutchnik für die SIMS-Messungen.
- Prof. Dr. Andreas Hangleiter danke ich für die Messungen der Ladungsträger-Lebensdauern.
- Dr. Andrei Sirenko für die ortsaufgelösten HRXRD-Messungen.

Mein Dank gilt allen Mitgliedern des Institutes für Optoelektronik für jegliche Hilfe und Unterstützung und das stets gute Arbeitsklima, das zum Erfolg der Arbeit beigetragen hat.

Ganz besonders herzlich bedanke ich mich bei meiner Mutter, die mir das Studium der Elektrotechnik durch ihre Unterstützung ermöglicht hat und mich zusammen mit meiner Schwester immer wieder aufgebaut und motiviert hat.

Wissenschaftlicher und beruflicher Werdegang

Persönliche Daten

Geb. am 06. Juli 1974 in Neumünster Ledig, deutsch

Schulbildung

1980–1984	Grundschule in Neumünster
1984–1990	Realschule in Neumünster und Ulm mit Abschluss der mittleren Reife
1994–1996	Technische Oberschule in Ulm mit Ergänzungsprüfung in Französisch zur Allgemeinen Hochschulreife

Berufsausbildung

08/1990-02/1994	Berufsausbildung als Kommunikationselektroniker, Informa-
	tionstechnik, 10.02.1994: Facharbeiterbrief der IHK Ulm

03/1994–08/1994 Volontariat als Kommunikationselektroniker

Studium

10/1996-01/2002	Studium Elektrotechnik
	12.01.1999: Vordiplom
	07.01.2002: Diplom

Berufliche Tätigkeiten

02/2002-09/2006	wissenschaftlicher Mitar	beite	r der	Abteilung (Optoelektronik		
	an der Universität Ulm						
seit $10/2006$	Applikations-Ingenieur	bei	Süss	MicroTec	Lithography		
	GmbH, Garching b. München						

Garching b. München, 25. September 2008