Thomas Wunderer

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



ulm university universität **UUUIM**



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

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades eines

DOKTOR-INGENIEURS

(DR.-ING.)

der Fakultät für Ingenieurwissenschaften und Informatik der Universität Ulm

von

DIPL.-ING. THOMAS WUNDERER

AUS IMMENSTADT

Gutachter:	Prof. Dr. rer. nat. Ferdinand Scholz
	Prof. Dr. rer. nat. Michael Kneissl
Amtierender Dekan:	Prof. DrIng. Michael Weber

Ulm, 28.07.2010

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

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

1. Aufl. - Göttingen: Cuvillier, 2010 Zugl.: Ulm, Diss., Univ., 2010

978-3-86955-441-9

© CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2010 Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen Telefon: 0551-54724-0 Telefax: 0551-54724-21 www.cuvillier.de

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche Genehmigung des Verlages ist es nicht gestattet, das Buch oder Teile daraus auf fotomechanischem Weg (Fotokopie, Mikrokopie) zu vervielfältigen.
1. Auflage, 2010 Gedruckt auf säurefreiem Papier

978 - 3 - 86955 - 441 - 9

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

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

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

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

Abstract

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

In this thesis, we investigate the properties of InGaN/GaN QWs and LEDs emitting in the blue and green spectral region which were grown on the semipolar side facets of three-dimensional (3D) GaN structures. This approach can be realized on full two inch wafers or larger. First, the growth behavior and crystalline quality of the 3D GaN is studied in detail using different mask patterns for the selective area growth (SAG). The variation of typical growth parameters during the MOVPE (metal organic vapor phase epitaxy) growth showed that a moderate temperature (950 °C), a low V/III ratio (400) and an increased reactor pressure are preferable for the 3D deposition. Very high material quality could be demonstrated for semipolar GaN by forming inverse pyramids with $\{1\overline{10}1\}$ facets. The low threading dislocation density, small widths of XRD rocking curves (< 350 arcsec) as well as narrow luminescence linewidths (D⁰X = 2.2 meV) confirm the advantages of this method.

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

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

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

Finally, we showed that the 3D structures can be embedded into full LED device structures showing reasonable performance. We showed an on-wafer optical output power of 700 μ W @ 20 mA and up to 3 mW @ 110 mA for a semipolar LED with {1101} facets and an emision wavelength of 425 nm. Up to 1 mW @ 110 mA could be achieved for bluish-green emission at 495 nm. LEDs based on μ m sized inverse pyramids exhibit a pretty broad emission spectrum due to the structural gradient of the QW along one facet. This fact could be advantageous for lighting applications where a high color rendering index is preferred whereas the use of smaller sized 3D structures feature narrow spectra suitable for possible laser applications.

Inhaltsverzeichnis

1	Einl	eitung		1
2	Gru	ndlage	en zu Gruppe III-Nitriden	5
	2.1	Krista	Illstruktur	5
	2.2	Bands	struktur	7
	2.3	Mehrk	componentige Verbindungshalbleiter	9
		2.3.1	Gitterkonstante	9
		2.3.2	Bandlücke	9
	2.4	Defekt	te	12
		2.4.1	Punktdefekte	12
		2.4.2	Liniendefekte	13
		2.4.3	Flächendefekte	14
	2.5	Verspa	annung und Verzerrung	14
		2.5.1	Thermische Verspannung	15
		2.5.2	Verspannung durch Gitterfehlanpassung	15
	2.6	Polari	sation	21
		2.6.1	Spontane Polarisation	22
		2.6.2	Piezoelektrische Polarisation	22
		2.6.3	Elektrische Felder	23
3	Eige	enscha	aften von GalnN-Quantenfilmen	27
	3.1	Die F	arbe - Übergangsenergie	27
		3.1.1	Bandlücke	28
		3.1.2	Quantisierung	28
		3.1.3	Quantum Confined Stark Effekt, QCSE	30
		3.1.4	Screening	31
	3.2	Effizie	mz	31
		3.2.1	IQE	32
		3.2.2	- Überlapp-Integral	32

		3.2.3	Materialqualität	34
	3.3	Proble	emdarstellung	34
4	Epit	taxie vo	on (Al)Ga(In)N	37
	4.1	Metho	oden	37
		4.1.1	MBE (molecular beam epitaxy)	38
		4.1.2	HVPE (hydride vapor phase epitaxy)	39
		4.1.3	MOVPE (metal organic vapor phase epitaxy)	39
	4.2	Substr	rate	41
		4.2.1	Saphir (Al_2O_3)	41
		4.2.2	Siliziumkarbid (SiC)	43
		4.2.3	Silizium (Si)	44
		4.2.4	Zinkoxid (ZnO) \ldots	45
	4.3	Hetero	oepitaxie von polarem GaN	45
	4.4	Nicht-	-/semipolare Substrate aus c-GaN	46
	4.5	Hetero	oepitaxie von nicht-/semipolarem GaN	47
		4.5.1	a-GaN auf r-Saphir	47
		4.5.2	m-GaN auf $LiAlO_2$	48
		4.5.3	m-, a-GaN auf m-, a-SiC	48
		4.5.4	$\{10-1x\}$ -GaN auf $(1x0)$ -MgAl ₂ O ₄	49
		4.5.5	$\{10-1-3\}$ -, $\{11-22\}$ - und $\{10-10\}$ -GaN auf $\{10-10\}$ -Saphir	49
		4.5.6	{10-10}-GaN auf stukturiertem {11-20}-Saphir	49
	4.6	GaInN	N-Wachstum	50
	4.7	n-Doti	ierung	51
	4.8	p-Dot	ierung	51
5	Sele	ektive I	Epitaxie	53
	5.1	Prozec	dur	53
	5.2	Maske	2	54
		5.2.1	Maskenmaterial	54
		5.2.2	Maskendesign	55
		5.2.3	Herstellung	57
	5.3	Defekt	treduktion	57
		5.3.1	ELO(G)	58
		5.3.2	FACELO	59
		5.3.3	PENDEO	60
	5.4	3D-Ga	aN-Strukturen	60

	5.5	Model	llierung \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	30
		5.5.1	Gasphasen-Diffusion $\ldots \ldots $	31
		5.5.2	Oberflächen-Migration	52
		5.5.3	Wachstumsrate	52
6	3D-(GaN m	it semipolaren Oberflächen 6	55
	6.1	Wachs	stum von $3D$ -Ga $(In)N$	35
		6.1.1	Formation von Facetten	36
		6.1.2	Variation des V/III-Verhältnises	36
		6.1.3	Variation der Temperatur	71
		6.1.4	Variation des Drucks	73
		6.1.5	Oberflächenoptimierung	75
		6.1.6	Koaleszierte Strukturen	77
	6.2	Defekt	te	78
		6.2.1	Versetzungen	79
		6.2.2	Stapelfehler	32
	6.3	Anisot	tropie	35
		6.3.1	Verspannung 8	35
		6.3.2	Wingtilt	38
	6.4	Zusam	nmenfassung	<i>)</i> 1
7	Sele	ektiv al	bgeschiedene GalnN-Quantenfilme)3
	7.1	Einflu	ss der Wachstums-Parameter)3
		7.1.1	Temperatur) 4
		7.1.2	TEGa/TMIn 9) 4
		7.1.3	Wachstumsrate	<i>)</i> 5
		7.1.4	Trägergas	95
		7.1.5	Ammoniak) 5
		7.1.6	Parameter	96
	7.2	Einflu	ss der Geometrie	96
		7.2.1	Dreieckförmiger Streifen	<i></i> }7
		7.2.2	Inverse Pyramiden)2
	7.3	Einflu	ss des Reaktor-Drucks)6
	7.4	Einflu	ss benachbarter Facetten-Typen)7
	7.5	Einflu	ss der Facetten-Orientierung)9
	7.6	Effizie	mz	13
		7.6.1	Piezoelektrisches Feld	13

		7.6.2	Materialqualität	. 118
		7.6.3	IQE	. 122
8	Sen	nipolar	e Leuchtdioden	129
	8.1	Dotier	rung	. 129
		8.1.1	n-Dotierung	. 129
		8.1.2	p-Dotierung	. 129
	8.2	Prozes	ssierung	. 133
	8.3	Optoe	elektronische Eigenschaften	. 134
		8.3.1	Streifen	. 134
		8.3.2	Inverse Pyramiden	. 136
9	Zus	amme	nfassung und Ausblick	139
	Lite	raturve	erzeichnis	143
	Pub	olikatio	nsliste	167
	Dan	ıksagu	ng	173
	Leb	enslau	ıf	177

1 Einleitung

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

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

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

1 Einleitung

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

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

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

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

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

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

1 Einleitung

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

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

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

2.1 Kristallstruktur

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

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

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



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

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

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

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

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

2.2 Bandstruktur



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

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

2.2 Bandstruktur

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

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



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

da sie über

$$E_g = \frac{h c_0}{\lambda} \tag{2.1}$$

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

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

2.3 Mehrkomponentige Verbindungshalbleiter

Ein (opto-)elektronisches Bauelement besteht typischerweise aus einer Schichtstruktur unterschiedlicher Komponenten. In dem hier interessanten Fall findet beispielsweise eine GaInN/GaN Mehrfach-Quantenfilm-Struktur (engl.: multi quantum well, MQW) als aktive Licht erzeugende Zone Verwendung und eine dünne AlGaN-Schicht wird als Elektronen-Barriere benutzt. Abhängig von der Material-Komposition der einzelnen Schichten können somit unterschiedliche Funktionen erfüllt werden.

2.3.1 Gitterkonstante

Die Gitterkonstante eines (ternären) Mischkristalls ist ein mittlerer Wert aus den Gitterkonstanten der binären Ausgangsmaterialien und folgt einer linearen Gesetzmäßigkeit. Dieser Zusammenhang ist heute weitestgehend anerkannt [31]. Die Vegardsche Regel beschreibt dieses Verhalten mathematisch:

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

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

Hierbei stellen a, c die Gitterkonstanten des jeweiligen Materialsystems dar, wobei A und B die einzelnen Elemente repräsentieren und x für den dazu gehörenden Anteil steht.

Zwangsweise besitzen demnach GaInN und GaN, die den aktiven Bereich einer Leuchtdiode bilden, unterschiedliche Gitterkonstanten (siehe Tab. 2.1). Dies führt bei pseudomorphem Wachstum, wie in Abschnitt 2.5 gezeigt wird, zu Spannungserscheinungen in den Quantenfilmen, durch die wiederum piezoelektrische Felder induziert werden können, vgl. Abschnitt 2.6.3.

2.3.2 Bandlücke

Die Bandlücke und damit verbunden die Emissions-Wellenlänge des emittierten Lichts hängt direkt mit der Komposition der Gruppe III-Elemente zusammen. Theoretisch kann mit den Gruppe III-Nitriden das gesamte sichtbare Farbspektrum abgedeckt werden. Das macht sie deshalb für optoelektronische Anwendungen so attraktiv. Anhand von Abb. 2.4 ist der Zusammenhang zwischen der Gitterkonstanten und der Energielücke einer derartigen Kombination von (Al,Ga,In)N-Komponenten gezeigt.



Abbildung 2.4: Zusammenhang zwischen Gitterkonstante *a* und Bandlücken-Energie für die Gruppe III-Nitride.

Bowing

Die Bandlücke mehrkomponentiger Verbindungshalbleiter folgt keinem linearen Zusammenhang, wie dies für die Berechnung der Gitterkonstanten der Fall ist (Abschn. 2.3.1). In der Regel liegen die sich tatsächlich ergebenden Bandlücken unterhalb der einfachen linearen Näherung. Grund hierfür sind die unterschiedlichen Bindungslängen der beteiligten Atome. Umso größer dieser Unterschied bezüglich der Atomradien ist, desto größer ist die Verzerrung des Gitters und desto stärker ist die Abweichung vom linearen Zusammenhang.

Die Verbiegung kann mit dem sogenannten Bowing-Parameter b beschrieben werden. Es hat sich folgende quadratische Gleichung als zutreffend für die Berechnung ternärer Verbindungen, wie beispielsweise GaInN oder AlGaN, gezeigt:

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

Die Größe des Bowing-Parameters b ist jedoch mit gewissen Unsicherheiten behaftet, da er nicht direkt bestimmt werden kann. Da viele Effekte die Bandlücke und Gitterkonstanten beeinflussen, deren exakte Messung aber Voraussetzung für die Bestimmung von b ist, wird dies auch weiterhin eine anhaltende Problematik bleiben [32]. U.a. wurde beispielsweise die Energielücke für InN früher zu groß angenommen, was zwangsweise zu einem unkorrekten Bowing-Parameter führte [33]. Aktuelle Literaturwerte für die Bowing-Parameter sind in Tabelle 2.2 aufgelistet.

	$E_g (eV)$	$E_g \ (eV)$	b (eV)	$\alpha_v \; ({\rm meV/K})$	β_{υ} (K)
	$(T=0 \mathrm{K})$	$(T=300 \mathrm{K})$			
AlN	6.10	6.00		2.63	2082
GaN	3.510	3.437		0.914	825
InN	0.69	0.608		0.414	154
$Al_xGa_{1-x}N$			0.8		
$Ga_xIn_{1-x}N$			1.4		
$Al_xIn_{1-x}N$			3.4		

2.3 Mehrkomponentige Verbindungshalbleiter

Tabelle 2.2: Bandlücken-Energie E_g , bowing-Parameter *b* und Varshni-Parameter α_v und β_v für die Gruppe III-Nitride [34].

Temperaturabhängigkeit

Die Größe der Bandlücke E_g wird nicht nur durch die Material-Zusammensetzung beeinflusst, sondern sie weist auch eine Abhängigkeit von der Temperatur auf. Ein empirischer Zusammenhang wurde von Varshni gefunden [35]:

$$E_g(T) = E_g(0K) - \frac{\alpha_v \cdot T^2}{\beta_v + T}$$
(2.4)

In Tabelle 2.2 sind die sogenannten Varshni-Parameter α_v und β_v sowie die Bandlückenenergie $E_g(0 K)$ bei T = 0 K für die binären Verbindungen GaN, InN und AlN aufgeführt.

Andere Beschreibungen der Temperaturabhängigkeit wie das Bose-Einstein-Modell [36] oder die von Pässler [37,38] sind physikalisch motiviert und beschreiben ggf. das Verhalten geringfügig besser. Die Varshni-Formel ist jedoch im interessanten Temperatur-Bereich auf wenige meV genau.

Verspannungsabhängigkeit

Die effektive Bandlücke verändert sich auch, wenn der Kristall verzerrt wird. Es verschieben sich die Ladungsschwerpunkte, was zu einer Veränderung der Bandstruktur, insbesondere der Valenzbänder, führt [39]. Diese Veränderung kann in erster Nährung durch eine lineare Interpolation der binären Materialien auch auf die ternären Materialien übertragen werden. Beispielsweise ergibt sich bei einer Verspannung von -0.1% eine Verschiebung um etwa 20 meV [39], siehe Diagramm 2.5.



Abbildung 2.5: Änderung der Bandlücke aufgrund von biaxialer Verspannung für unterschiedliche Indium-Konzentrationen x im $\operatorname{Ga}_{1-x}\operatorname{In}_x$ N-Film [40].

2.4 Defekte

Wie in Abschnitt 4.2 gezeigt wird, werden bei der Herstellung von GaN-basierten LEDs meist Fremdsubstrate benutzt. Bei der Epitaxie unter Verwendung von Substraten, die nicht die gleiche Gitterkonstante aufweisen wie das aufzubringende Material, ist es jedoch praktisch unmöglich, einen perfekten Kristall zu züchten. Die unerwünschten Defekte haben starken Einfluss auf die optoelektrischen Eigenschaften von Halbleitern. Deshalb ist es notwendig, ein Verständnis für die verschiedenen Defektarten zu erlangen und diese durch geschickte Techniken zu minimieren. Man unterscheidet Defekte nach ihrer räumlichen Ausdehnung.

2.4.1 Punktdefekte

Punktdefekte sind nulldimensionale Defekte. Fremdatome, die in den Kristall eingebracht werden, können die halbleitenden elektrischen Eigenschaften des Kristalls ändern. Dies wird beispielsweise absichtlich bei der Dotierung praktiziert. Hingegen gibt es aber auch ungewollte Punktdefekte in Form von Vakanzen (Gitterleerstellen) und Atomen auf Zwischengitterplätzen. Antisite-Defekte, d.h. Anionen auf Kationenplätzen (und umgekehrt), sind weniger häufig, da deren Bildungsenergie verhältnismäßig hoch ist. Punktdefekte sind nicht zwingend ortsgebunden und können im Kristall diffundieren [41]. Sie stören den Kristall auf verschiedene Weise. Als flache Defekte, d.h. als Defekte mit einer kleinen Ionisationsenergie, können sie freie Ladungsträger erzeugen und so beispielsweise als Donatoren eine gewünschte p-Dotierung



Abbildung 2.6: Schematische Darstellung einer Schraubenversetzung (a) und einer Stufenversetzung (b). Der grau markierte Pfeil repräsentiert den Burgers-Vektor \vec{b} .

kompensieren. Tiefe Störstellen mit großer Ionisationsenergie stellen nicht-strahlende Rekombinatonswege zur Verfügung und verschlechtern direkt die Leistungsfähigkeit von darauf basierenden Bauelementen.

2.4.2 Liniendefekte

Eindimensionale Defekte werden als Liniendefekte bezeichnet. Ein typisches Beispiel dafür sind Versetzungen. Beim heteroepitaktischen Wachstum sind sie die am häufigsten auftretenden Defekte. Die Ursache für die Entstehung der Versetzungen ist ein Verspannungsabbau aufgrund der hohen Gitterfehlanpassung zwischen Schicht und Substrat (vgl. Abschn. 2.5.2). Dabei unterscheidet man zwischen Stufen- und Schraubenversetzungen bzw. dem gemischten Versetzungstyp. Breitet sich dieser Liniendefekt in Wachstumsrichtung aus, wird dieser als Fadenversetzung bzw. Threading Dislocation (TD) bezeichnet. Typische Versetzungsdichten liegen hier je nach Qualität im Bereich von 10^5 bis 10^{10} pro cm². Der Versetzungstyp kann mit Hilfe des sogenannten Burgers-Vektors \vec{b} beschrieben werden, der Größe und Richtung des Fehlers vorgibt. Dieser ergibt sich als Differenz zwischen einem gedachten Umlauf um den Gitterfehler und einem Umlauf durch den defektfreien Kristall. Anhand des Burgers-Vektors werden die beiden eben vorgestellten Typen von Versetzungen klassifiziert. Wie man aus den Umlauf-Bildern 2.6 (a) und 2.6 (b) entnehmen kann, steht bei einer Schraubenversetzung der Burgers-Vektor parallel zur Versetzungslinie, bei der Stufenversetzung senkrecht dazu.

2.4.3 Flächendefekte

Flächendefekte sind, wie der Name schon andeutet, zweidimensionale Defekte. Diese können unterschiedliche Ursachen und Eigenschaften haben. Beispielsweise entstehen beim GaN-Wachstum in der Anfangsphase oft Korngrenzen, die beim Zusammenwachsen der kolumnaren GaN-Inseln entstehen. Auch können Inversionsdomänen in Form von lokaler Stickstoff-Terminierung auftreten, was beim InGaN-Wachstum [42] und bei sehr hohen Magnesium-Konzentrationen beobachtet wurde [43].

Stapelfehler

Andere Arten von Flächendefekten treten als Stapelfehler auf, wo sich die hexagonale Stapelfolge ABAB beispielsweise zu ABCBC, ABCAC, etc. ändert. Eine genaue Erläuterung der Stapelfehlerkombinationen ist beispielsweise in der Arbeit von Stampfl und Van der Walle zu finden [44]. Diese Art von Defekten ist häufig beim Wachstum von nicht-polaren Gruppe III-Nitriden auf Fremdsubstraten zu finden [45] und stellt ein heute nicht ausreichend gelöstes Problem dar [46]. Man kann sich einen basalen Stapelfehler als eine Art Quantenfilm aus kubischem Material mit kleinerer Bandlücke vorstellen, der in einen hexagonalen Kristall mit höherer Bandlücke eingebettet ist. Da diese Art von Stapelfehler keine offenen Bindungen besitzt, bleibt sie optisch aktiv. Die bei Lumineszenz-Experimenten (PL, CL) von nicht-polarem GaN häufig beobachteten Übergänge im Bereich um 3.41 eV und 3.29-3.35 eV sind hierfür charakteristisch. Während in der Literatur überwiegend Einigkeit über den Übergang um 3.41 eV herrscht, der Stapelfehlern in der Basalebene zugeordnet wird [47–49], gibt es verschiedene Aussagen über die Ursache der Emission bei rund 3.3 eV. Neben prismatischen Stapelfehlern werden partielle Versetzungen genannt, die einen basalen Stapelfehler terminieren, oder der Emission wird ein DAP-artiger (Donator-Akzeptor-Paar) Übergang zwischen Verunreinigungen zugeordnet, die partielle Versetzungen dekorieren [45, 47, 50]. Experimentelle Untersuchungen an den hier vorgestellten Proben sind in Abschnitt 6.2.2 zu finden.

2.5 Verspannung und Verzerrung

Spannungserscheinungen im Bereich der Epitaxie sind auf zwei Ursachen zurückzuführen.

2.5.1 Thermische Verspannung

Einerseits entstehen Spannungen aufgrund von unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten zwischen Schicht und Substrat bzw. der darunter liegenden Schicht. Bei Differenzen zwischen Wachstums- und späterer Betriebstemperatur von oftmals über 1000° ist dies ein nicht zu unterschätzender Faktor. Die daraus entstehende Verzerrung, die sich in einer makroskopischen Krümmung der Probe oder sogar durch Rissbildung äußert, kann folgendermaßen geschrieben werden:

$$\epsilon_{\text{therm}} = (\alpha_{\text{Schicht}} - \alpha_{\text{Substrat}}) \cdot \Delta T \tag{2.5}$$

Dabei steht ϵ_{therm} für die thermische Verzerrung, α_{Schicht} und α_{Substrat} für die thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Schicht und Substrat und ΔT für die Temperaturdifferenz. Typische Werte für ϵ_{therm} liegen für GaN auf Saphir bei etwa 0.1% [51].

2.5.2 Verspannung durch Gitterfehlanpassung

Von größerer Bedeutung in Hinsicht auf eine effiziente Lumineszenz in einer Leuchtdiode sind Spannungen, die aufgrund von unterschiedlichen Gitterkonstanten entstehen. Man geht davon aus, dass dünne Schichten, wie beispielsweise die GaInN-Quantenfilme in der aktiven Zone, pseudomorph abgeschieden werden. Das bedeutet, dass die Quantenfilm-Schicht die Gitterkonstante in der Wachstumsebene der darunterliegenden Barrieren-Schicht annimmt (Abb. 2.7 (b)). Die Einheitszelle wird durch diese Gitterfehlanpassung deformiert und in der Wachstumsebene biaxial verspannt. Wird jedoch die kritische Schichtdicke d_c überschritten, so wird die Verspannungsenergie derartig groß, dass es zu einer Relaxation der Schicht unter Ausbildung von Defekten kommt (Abb. 2.7 (c) und Abschn. 2.4).

Durch die Verspannung kann bei Gruppe III-Nitriden eine hohe piezoelektrische Polarisation auftreten (siehe Kapitel 2.6) und es können dadurch hohe interne Felder induziert werden. Diese wiederum bewirken einen negativen Einfluss auf die Effizienz, besonders bei hoch indiumhaltigen Filmen, die für grüne Emission notwendig sind (siehe Kapitel 3.1.3).

Die Höhe und Art der Verspannung ist neben der Differenz der Einheitszellen-Größe zwischen aufzuwachsender Schicht und Substrat von der Kristallorientierung abhängig. Verhältnismäßig einfach lässt sie sich bestimmen, wenn die Schicht pseudomorph auf



Abbildung 2.7: Beim Wachstum von Kristallen unterschiedlicher Gitterkonstanten (a) erfolgt eine Gitterfehlanpassung bis zu einer bestimmten Schichtdicke d_c durch pseudomorphe Verspannung (b). Bei Überschreitung diese kritischen Schichtdicke d_c relaxiert die Schicht unter Ausbildung von Defekten (c).

die (0001)-Ebene abgeschieden wird. Dann existiert die Verspannung nur in der Wachstumsebene und die a-Gitterkonstante des Quantenfilmes $a(x)_{\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}}$ (abhängig von der In-Konzentration x) ist gleichzusetzen mit der des Substrats a_{GaN} . Es gilt:

$$\epsilon_{\rm xx} = \frac{a_{\rm GaN} - a(x)_{\rm Ga_{1-x} In_x N}}{a(x)_{\rm Ga_{1-x} In_x N}} \tag{2.6}$$

Es entsteht keine Verspannung in Wachstumsrichtung (hier entlang der c-Achse). Der Kristall hat aber die Möglichkeit sich entlang dieser zu deformieren. Das Hook'sche Gesetz beschreibt dies:

$$\sigma = \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\epsilon}$$

$$\boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\sigma}$$
(2.7)

Dabei wird durch ϵ der Deformationstensor und mit σ der Spannungstensor beschrieben. **S** steht für den Elastizitätskoeffizienten bzw. **C** für den Elastizitätsmodul, wobei $\mathbf{S} = \mathbf{C}^{-1}$. Für den allgemeinen Fall sind **S** und **C** Tensoren 4. Ordnung mit jeweils 81 Koeffizienten. Somit sind sowohl lineare Dehnungen und Verspannungen, Rotationsphänomene als auch Schereinflüsse in allen Raumrichtungen beschreibbar. Die Bedeutung der einzelnen Komponenten zeigt Bild 2.8.

Da Rotationsbewegungen bei der Betrachtung von Verspannungen nicht von Bedeutung sind (rein asymmetrischer Teil) kann man sich auf den symmetrischen Teil beschränken. Dann gilt: $\epsilon_{ij} = \epsilon_{ji}$ und $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$. Dadurch reduziert sich die Anzahl

2.5 Verspannung und Verzerrung



Abbildung 2.8: Veranschaulichung der Komponenten des Verspannungstensors anhand der Verspannungen auf den Flächen eines Quaders [52].

unabhängiger Koeffizienten drastisch. Der Verspannungs- und der Deformationstensor können in folgender Form geschrieben werden:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & \sigma_4 \\ \sigma_5 & \sigma_4 & \sigma_3 \end{bmatrix}$$
(2.8)

$$\begin{bmatrix} \epsilon_{11} & \epsilon_{12} & \epsilon_{13} \\ \epsilon_{12} & \epsilon_{22} & \epsilon_{23} \\ \epsilon_{13} & \epsilon_{23} & \epsilon_{33} \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} \epsilon_1 & \frac{1}{2}\epsilon_6 & \frac{1}{2}\epsilon_5 \\ \frac{1}{2}\epsilon_6 & \epsilon_2 & \frac{1}{2}\epsilon_4 \\ \frac{1}{2}\epsilon_5 & \frac{1}{2}\epsilon_4 & \epsilon_3 \end{bmatrix}$$
(2.9)

Dabei wurden die Tensoren in der vereinfachten Voigt'schen Notation dargestellt, die per Definition einen Faktor $(\frac{1}{2})$ erforderlich macht [53].

Unter Berücksichtigung der Symmetrie der Wurtzit-Struktur reduziert sich die Zahl der Komponenten von \mathbf{C} bzw. \mathbf{S} auf nur noch fünf und das Hook'sche Gesetz kann in folgender Form geschrieben werden [54]:

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} (C_{11} - C_{12}) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \\ \epsilon_5 \\ \epsilon_6 \end{pmatrix}$$
(2.10)

Falls nun davon ausgegangen wird, dass keine Scherspannungen auftreten, gilt ϵ_4 bis ϵ_6 = 0. Desweiteren werden die Elemente der x₁-x₂-Ebene identisch behandelt, weshalb ϵ_1 und ϵ_2 gleich gesetzt werden [52]. Da beim Schichtwachstum in die [0001]-Richtung keine Verspannung in Wachstumsrichtung vorherrscht, gilt $\sigma_3 = 0$ und damit:

$$\epsilon_3 = -\frac{2\,C_{13}\,\epsilon_1}{C_{33}} \tag{2.11}$$

Es zeigt sich demnach, dass eine kompressive Verspannung des Kristallgitters in der x_1 - x_2 -Ebene eine Ausdehnung in x_3 -Richtung zur Folge hat bzw. eine tensile Verspannung eine Reduktion der x_3 -Komponente.

Beliebige Koordinaten

Der folgende Abschnitt beschäftigt sich nun mit der Frage, wie sich die Situation ändert, wenn sich das Wachstum nicht nur auf die c-Fläche beschränkt, sondern auf beliebige Kristallorientierungen erweitert wird. Diese Frage ist besonders wichtig, wenn wie hier GaInN-Quantenfilme auf semipolaren GaN-Oberflächen abgeschieden werden. Große Teile der theoretischen Herleitung sind dabei aus der Arbeit von F. Lipski entnommen [55].

Es erscheint praktisch, neben dem bisher verwendeten Koordinatensystem K, wo die z-Achse mit der c-Achse des Wurtzit-Kristalls zusammenfällt, ein zusätzliches Koordinatensystem K' einzuführen. Dieses entsteht durch Drehung der z-Achse, so dass die neue z-Achse in Wachstumsrichtung zeigt, siehe dazu Abb. 2.9.

Mathematisch erhält man K' aus K durch Anwendung der allgemeinen Drehmatrix U:

$$U = \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\phi & \cos\theta\sin\phi & -\sin\theta\\ -\sin\phi & \cos\phi & 0\\ \sin\theta\cos\phi & \sin\theta\sin\phi & \cos\theta \end{pmatrix}$$
(2.12)

also

$$\begin{pmatrix} \hat{x}'\\ \hat{y}'\\ \hat{z}' \end{pmatrix} = U \cdot \begin{pmatrix} \hat{x}\\ \hat{y}\\ \hat{z} \end{pmatrix}$$
(2.13)

Ebenso werden der Deformationstensor ϵ

$$\epsilon'_{ij} = U_{i\alpha} U_{j\beta} \epsilon_{\alpha\beta} \tag{2.14}$$

2.5 Verspannung und Verzerrung



Abbildung 2.9: Schematische Darstellung des Kristall-Koordinatensystems K und dem Wachstums-Koordinatensystem K'.

und Elastizitätstensor \mathbf{C} transformiert.

$$C'_{ijkl} = U_{i\alpha}U_{j\beta}U_{k\gamma}U_{l\delta}C_{\alpha\beta\gamma\delta}$$
(2.15)

Die primitiven Translationsvektoren im (unverspannten) hexagonalen Kristall lauten mit den Einheitsvektoren des Koordinatensystems $K(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$:

$$\begin{aligned} \dot{\alpha_i} &= a_i \hat{x} \\ \vec{\beta_i} &= \frac{a_i}{2} \hat{x} + \frac{\sqrt{3}a_i}{2} \hat{y} \\ \vec{\gamma_i} &= c_i \hat{z} \end{aligned} \tag{2.16}$$

Dabei sind *a* und *c* die Gitterkonstanten der Einheitszelle. Der Index *i* ist dabei Platzhalter für den Quantenfilm (f) und das Substrat (s). Wird der Kristall durch eine Verspannung deformiert, kann sich die Richtung und der Betrag der primitiven Translationsvektoren verändern. Dies wird durch das Ersetzen der Einheitsvektoren \hat{x} , \hat{y} , \hat{z} durch neue Basisvektoren \hat{x}'' , \hat{y}'' , \hat{z}'' berücksichtigt. Die primitiven Translationsvektoren lauten damit bei Deformation:

$$\vec{\alpha_i}'' = a_i \hat{x}'' \vec{\beta_i}'' = \frac{a_i}{2} \hat{x}'' + \frac{\sqrt{3}a_i}{2} \hat{y}'' \vec{\gamma_i}'' = c_i \hat{z}''$$
(2.17)

wobei folgendes für die "Quasi"-Einheitsvektoren unter Berücksichtigung der Deformation ϵ gilt:

$$\hat{x}'' = (1 + \epsilon_{xx})\hat{x} + \epsilon_{xy}\hat{y} + \epsilon_{xz}\hat{z}$$

$$\hat{y}'' = \epsilon_{yx}\hat{x} + (1 + \epsilon_{yy})\hat{y} + \epsilon_{yz}\hat{z}$$

$$\hat{z}'' = \epsilon_{zx}\hat{x} + \epsilon_{zy}\hat{y} + (1 + \epsilon_{zz})\hat{z}$$
(2.18)

Es wird davon ausgegangen, dass beim pseudomorphen Wachstum einer dünnen Schicht (bspw. GaInN-Quantenfilme) das Substrat unverspannt bleibt und damit gilt:

$$\vec{\alpha_s}'' = \vec{\alpha_s}$$

$$\vec{\beta_s}'' = \vec{\beta_s}$$

$$\vec{\gamma_s}'' = \vec{\gamma_s}$$
(2.19)

Für den dünnen Film finden die Gleichungen 2.18 Anwendung. Dabei kann ϵ durch die Annahme von pseudomorphem Wachstum bestimmt werden. Hier ist nun das Koordinatensystem K' hilfreich, da in der Wachstumsebene gilt, dass der Film die Größe des Substrats annimmt:

$$\alpha_f'' \cdot \hat{x}' = \alpha_s'' \cdot \hat{x}'$$

$$\alpha_f'' \cdot \hat{y}' = \alpha_s'' \cdot \hat{y}'$$
(2.20)

Analoge Überlegungen gelten auch für $\vec{\beta_i''}$ und $\vec{\gamma_i''}$.

Schließlich können die Komponenten des Deformationstensors bestimmt werden. Für das Wachstum auf semipolaren Oberflächen können weiterhin folgende Vereinfachungen bzgl. des Koordinatensystems K' gemacht werden. Der Winkel ϕ wird zu Null gesetzt und nur der Winkel θ ist von Bedeutung, der beispielsweise für die {1101}-Fläche 62° beträgt. Es ergibt sich:

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{xx}^{(0)} + \epsilon_{xz} \frac{\sin \theta}{\cos \theta}$$

$$\epsilon_{yy} = \epsilon_{xx}^{(0)}$$

$$\epsilon_{zz} = \epsilon_{xz} \frac{\cos \theta}{\sin \theta} + \epsilon_{zz}^{(0)}$$

$$\epsilon_{xy} = \epsilon_{yz} = 0$$
(2.21)

mit den Abkürzungen $\epsilon_{xx}^{(0)} = (a_s - a_f)/a_f$ und $\epsilon_{zz}^{(0)} = (c_s - c_f)/c_f$. Das nun noch fehlende Element des Deformationstensors ϵ_{xz} kann über den Umweg der Energiebetrachtung gewonnen werden. Die Energie W aufgrund von Verspannung ist

2.6 Polarisation

$$W = \frac{1}{2} (\epsilon \cdot C \cdot \epsilon)$$
$$W = \frac{1}{2} [C_{11} \epsilon_{xx}^2 + C_{11} \epsilon_{yy}^2 + C_{33} \epsilon_{zz}^2 + 2C_{12} \epsilon_{xx} \epsilon_{yy} + 2C_{13} \cdot (\epsilon_{xx} \epsilon_{zz} + \epsilon_{yy} \epsilon_{zz}) + 4C_{44} \epsilon_{xx}^2]$$
(2.22)

Durch Einsetzen der Gleichungen 2.21 kann die minimale Energie in Abhängigkeit von ϵ_{xz} gefunden werden ("Nullstellensuche" der Ableitung). Das noch fehlende Element des Deformationstensors hat schließlich die Größe:

$$\epsilon_{xz} = -\frac{(C_{11} + C_{12} + C_{13}\epsilon_{zz}^{(0)}/\epsilon_{xx}^{(0)})\sin^2\theta + (2C_{13} + C_{33}\epsilon_{zz}^{(0)}/\epsilon_{xx}^{(0)})\cos^2\theta}{C_{11}\sin^4\theta + 2(C_{13} + 2C_{44})\sin^2\theta\cos^2\theta + C_{33}\cos^4\theta} \cdot \epsilon_{xx}^{(0)}\cos\theta\sin\theta$$
(2.23)

2.6 Polarisation

Eine besondere Eigenschaft der Gruppe III-Nitride ist die Existenz starker Polarisationsfelder. Die Polarisation setzt sich dabei aus einem intrinsischen Anteil, der spontanen Polarisation, und einem deformationsabhängigen Anteil, der piezoelektrischen Polarisation, zusammen. Die Gesamtpolarisation ergibt sich aus der Summe der beiden, wobei zu beachten ist, dass beide Anteile vektoriellen Charakter aufweisen.

$$\vec{P}_{ges} = \vec{P}_{sp} + \vec{P}_{pz} \tag{2.24}$$

Schließlich führt die Gesamtpolarisation zu einem elektrostatischen Feld

$$\vec{E} = \frac{\vec{P}_{ges}}{\chi_e \varepsilon_0} \tag{2.25}$$

(vgl. Abschn. 2.6.3). Dabei steht χ_e für die elektrische Suszeptibilität und ε_0 für die absolute Permittivität. Besonders bedeutsam ist diese Eigenschaft bei dünnen, verspannten Quantenfilmen, deren opto-elektrische Eigenschaften durch diese Felder stark beeinflusst werden (siehe Abschnitt 3.1.3). Die Untersuchung von Quantenfilmen unter Einfluss eines reduzierten piezoelektrischen Feldes, wie es durch das Wachstum auf weniger polaren Kristallflächen realisiert werden kann, bildet die Grundmotivation der hier vorliegenden Arbeit.

2.6.1 Spontane Polarisation

Die spontane Polarisation ergibt sich unabhängig von äußeren Kräften aus der Polarität der III-V-Bindungen und der Abweichung des Bindungswinkels zwischen den (Al,Ga,In)- und N-Atomen vom idealen Tetraeder-Winkel, die aus der Minimierung der Gesamtenergie folgt, vgl. Abschnitt 2.1. Da die Bindungen nicht nur kovalent sind, sondern einen starken ionischen Anteil besitzen, entsteht ein nicht verschwindendes Dipolmoment. Wegen der fehlenden Inversionssymmetrie folgt daher der makroskopische Effekt. Entsprechende theoretische Berechnungen wurden von Bernardini *et al.* vorgenommen. Die Gruppe ermittelte für die spontane Polarisation der Gruppe III-Nitride die in Tabelle 2.3 aufgeführten Werte [56].

	AlN	GaN	InN
$P_{sp}[C/m^2]$	-0,09	-0,034	-0,042

Tabelle 2.3: Spontane Polarisation der hexagonalen Gruppe III-Nitride [56].

2.6.2 Piezoelektrische Polarisation

Die sogenannte piezoelektrische Polarisation tritt als Folge mechanischer Deformation des Kristallgitters auf. Es kommt zu einer zusätzlichen Verschiebung der Ladungsschwerpunkte, die anders als bei der spontanen Polarisation in beliebige Richtungen zeigen kann. Sie steht in direktem Zusammenhang mit der in Kapitel 2.5 beschriebenen Verspannung bzw. Deformation:

$$\vec{P}_{pz} = \mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \tag{2.26}$$

wobei \vec{P}_{pz} den piezoelektrischen Polarisationsvektor, σ den Verspannungs- und ϵ den Deformationstensor darstellt. **d** ist der piezoelektrische Modul und **e** der piezoelektrische Tensor 3. Stufe. Es lässt sich weiter über das Hook'sche Gesetz (Gl. 2.7) folgender Zusammenhang finden:

$$\mathbf{e} = \mathbf{d} \cdot \mathbf{C} \tag{2.27}$$

Berücksichtigt man weiterhin die Symmetrie des Wurtzit-Kristalls verbleiben nur noch fünf Komponenten für **e** bzw. **d** und Gl. 2.27 lässt sich in Voigtscher Notation wie folgt schreiben:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0\\ 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0\\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0\\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & 0\\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{C}$$
(2.28)

Nun können schließlich die Komponenten des piezoelektrischen Polarisationsvektors \vec{P}_{pz} aus Gleichung 2.26 angegeben werden:

$$P_{pz,x} = d_{15} \cdot \sigma_5$$

$$P_{pz,y} = d_{15} \cdot \sigma_4$$

$$P_{pz,z} = d_{31} \cdot (\sigma_1 + \sigma_2) + d_{33} \cdot \sigma_3$$

$$(2.29)$$

bzw.

$$P_{pz,x} = e_{15} \cdot \epsilon_5$$

$$P_{pz,y} = e_{15} \cdot \epsilon_4$$

$$P_{pz,z} = e_{31} \cdot (\epsilon_1 + \epsilon_2) + e_{33} \cdot \epsilon_3$$
(2.30)

Hierbei stehen die Indizes x, y, z für die Raumrichtungen des Kristall-Koordinatensystems K aus Abbildung 2.9. Die Gleichungen sind allgemein gültig für biaxiale Verspannungen in der Wachstumsebene und für beliebige Orientierungen unter Verwendung von Gl. 2.21 anwendbar.

Während der Entstehung dieser Arbeit herrschte in der Literatur jedoch noch Uneinigkeit über den Wert der piezoelektrischen Tensor-Elemente. Während für die Elemente e_{31} und e_{33} größtenteils ähnliche Werte angegeben werden, sind für die Größe und vor allem das Vorzeichen von e_{15} noch sehr unterschiedliche Daten zu finden [57]. Da dieser Wert keinen Einfluss auf die piezoelektrische Polarisation von c-Achsen-orientierten Halbleitern hat, ist dessen Wert noch vergleichsweise unbekannt. Er ist aber entscheidend für das Wachstum auf semipolaren Oberflächen. Denn abhängig vom Vorzeichen dieses Wertes gibt es auch für semipolare Flächen ein verschwindendes inneres Feld oder aber es verschwindet erst bei den definitionsgemäß unpolaren a- und m-Flächen (vgl. Abschnitt 2.1). In Tabelle 2.4 sind ausgewählte Parametersätze für die piezoelektrischen Tensorelemente für GaN aufgelistet. Obwohl in eigenen Veröffentlichungen die Werte von Bernadini *et al.* als am geeignetsten eingestuft worden waren, da sie am besten mit Messdaten in Übereinstimmung gebracht werden konnten, die an Proben aus dieser Arbeit durchgeführt worden waren [58], muss heute von einem negativen e_{15} ausgegangen werden [59]. Die aktuellsten Daten liefern hierfür Romanov *et al.* [60].

2.6.3 Elektrische Felder

Wie von der Elektrostatik bekannt, gibt es folgenden Zusammenhang zwischen elektrischem Feld \vec{E} und Polarisation \vec{P} :

$$\vec{E} = \frac{\vec{D} - \vec{P}}{\varepsilon_0} \tag{2.31}$$

Referenz		Jahr	(C/m^2)	e_{31}	e_{33}	e_{15}
Bykhovski et al.	[61]	1996		-0.22	0.43	-0.22
Shimada <i>et al.</i>	[62]	1998		-0.32	0.63	-0.32
Bernardini et al.	[63]	2002		-0.46	0.78	0.28
Vurgaftman <i>et al.</i>	[27]	2003		-0.53	0.89	0.33
Romanov <i>et al.</i>	[60]	2006		-0.49	0.73	-0.40

 Tabelle 2.4: Piezoelektrische Tensorelemente f
 ür GaN.

Dabei steht ε_0 für die elektrische Feldkonstante und \vec{D} ist die dielektrische Verschiebung. \vec{P} ist die Summe aus spontaner und piezoelektrischer Polarisation und es gilt: $\vec{P} = \vec{P}_{sp} + \vec{P}_{pz}$.

Im Volumenkristall erhält man dennoch selbst bei hohem Polarisationsfeld kein elektrostatisches Feld. Dies kann dadurch erklärt werden, dass bei einem bestehenden elektrischen Feld thermisch generierte intrinsische Ladungsträger einen Strom bilden würden, der zum Abbau des Feldes, der Ursache für den Stromfluss, führte.

Ganz anders verhält es sich hingegen bei dünnen Schichten, beispielsweise einem GaInN-Quantenfilm eingebettet zwischen GaN. Man kann davon ausgehen, dass im Volumenkristall GaN das elektrische Verschiebungsfeld gleich groß ist wie die spontante Polarisation ($\vec{D} = \vec{P}_{sp,s}$). Man kann Gleichung 2.31 also folgendermaßen schreiben:

$$\vec{E}_f = (\vec{P}_{sp,s} - \vec{P}_{sp,f} - \vec{P}_{pz,f})/\varepsilon_0$$
(2.32)

Da sich die spontane Polarisation von GaN und InN nur geringfügig unterscheiden (vgl. Tabelle 2.3), kann die spontane Polarisation im GaN-Substrat und GaInN-QW als ähnlich groß angenommen werden und Gl. 2.32 vereinfacht sich zu:

$$\vec{E}_f = -\vec{P}_{pz,f}/\varepsilon_0 \tag{2.33}$$

Das resultierende interne elektrische Feld in einem GaInN-QW hat seine Ursache daher hauptsächlich in den piezoelektrischen Eigenschaften der Gruppe III-Nitride.

Neben dem Indium-Gehalt wurde von Takeuchi *et al.* in deren Pionier-Arbeit auch die Polarität der Wachstumsoberfläche bei Gruppe III-Nitriden als Ursache für die starken Felder hinzugezogen [64]. Interessant ist unter diesem Gesichtspunkt die Größe der piezoelektrischen Polarisation bzw. des piezoelektrischen Feldes von der Kristallorientierung. Die Richtung der Polarisation soll dabei so angegeben werden, dass sie
2.6 Polarisation



Abbildung 2.10: Größe des piezoelektrischen Feldes für unterschiedliche Wachstums-Richtungen für einen pseudomorph verspannten $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N-QW}$ für x = 10% und 20% [40].

senkrecht zum aufgebrachten Film steht, der in beliebige Richtungen abgeschieden werden kann. Dies geschieht durch Projektion der Einzelkomponenten aus Gl. 2.30:

$$P_{pz}(\theta) = P_{pz,1}(\theta) \cdot \sin(\theta) + P_{pz,3}(\theta) \cdot \cos(\theta)$$
(2.34)

Es gilt zu beachten, dass die piezoelektrische Polarisation P_{pz} bzw. die Deformation ϵ vom Winkel θ abhängig sind (vgl. Gl. 2.30 bzw. 2.21).

Abb. 2.10 zeigt den winkelabhängigen Verlauf des piezoelektrischen Feldes unter Verwendung von Gl. 2.33 und 2.34. Man erkennt, dass das piezoelektrische Feld in der konventionellen c-Richtung am größten ist und sehr hohe Werte in der Größenordnung von mehreren MV/cm erreicht. Diese Tatsache wird als eine der Hauptursachen für die reduzierte Performance langwelliger LEDs und Laser betrachtet. Es ergibt sich jedoch eine deutliche Feldreduktion für semipolare und ein verschwindendes Feld für nichtpolare Oberflächen. Wie im nächsten Kapitel und insbesondere in den Abschnitten 3.1.3 und 3.2.2 erläutert wird, lässt dies eine erhöhte Effizienz erwarten und stellt deshalb die Grund-Motivation für die hier untersuchten Strukturen dar.

3 *Die aktive Zone* -Eigenschaften von GalnN-Quantenfilmen

Ziel eines Licht emittierenden Bauelements ist es, alle für die Rekombination verfügbaren Ladungsträger effizient in Photonen der gewünschten Energie zu konvertieren. Die Farbe sowie die erzielbare Effizienz hängen von verschiedenen Faktoren ab, die eng miteinander verzahnt sind und nicht immer unabhängig voneinander betrachtet werden können. Das folgende Kapitel versucht, einige Antworten auf die Frage nach einem effizienten GaInN-QW der erwünschten Wellenlänge zu finden.

3.1 Die Farbe - Übergangsenergie

Zunächst soll auf die in der Anwendung oft wichtigste Eigenschaft eingegangen werden: Die Emissions-Wellenlänge, sprich die Farbe des emittierten Lichts. Sie ist abhängig von mehreren Parametern. Neben der Komposition des $Ga_{1-x}In_xN$ -Films, in der die strahlende Rekombination stattfinden soll, ist die Dicke des Films für die Farbe entscheidend. Wird die Dicke der aktiven Schicht klein genug gewählt, treten Quantisierungs-Effekte ein und die effektive Übergangsenergie verschiebt sich von der eigentlichen Bandlückenenergie hin zu höheren Energien, je dünner der Quantenfilm gewählt wird. Neben den Quantisierungs-Eigenschaften hat die Dicke des QWs Einfluss auf die Emissions-Wellenlänge, falls innere Felder eine Verkippung des QWs hervorrufen und sich die Ladungsträger in den dann entstehenden Potiential-Minima ansammeln. Die Verschiebung der Wellenlänge, die auch als Quantum Confined Stark Effekt (QCSE) bekannt ist, hilft langwelligere Emission zu erzielen. Die damit einhergehende Trennung der Ladungsträger ist jedoch schlecht für eine effiziente strahlende Rekombination (vgl. Abschn. 3.2). Desweiteren hat die Verspannung Einfluss auf die Emissions-Wellenlänge (vgl. Abschn. 2.3.2). Es ändert sich dadurch die Bandlückenenergie und ggf. auch die 3 Eigenschaften von GaInN-Quantenfilmen

Größe des piezoelektrischen Feldes und damit der QCSE. Ebenso stellt man eine geringe Veränderung der Emissions-Energie für unterschiedliche Temperaturen fest (Gl. 2.4).

3.1.1 Bandlücke

Die Bandlücke und damit verbunden die Emissions-Wellenlänge des Volumenkristalls ist das Hauptmerkmal, das die Farbe des emittierten Lichts bestimmt. Wie bereits in Abschnitt 2.3.2 ausführlich diskutiert, können verschiedene Einflussfaktoren die Größe der Bandlücke verändern. In diesem Zusammenhang sollen diese Parameter stichpunktartig ins Gedächtnis gerufen werden.

- Komposition des mehrkomponentigen Verbindungshalbleiters
- Bowing, nicht-linearer Zusammenhang zwischen binären Ausgangsmaterialien
- Temperaturabhängikeit
- Verspannungsabhängigkeit

3.1.2 Quantisierung

Um im späteren Bauelement die Rekombination in dem Bereich zu erzwingen, wo sie erwünscht wird, ist es sinnvoll, die Schichtdicke der aktiven Schicht zu reduzieren, um die Ladungsträger in gewissem Maße in einem sogenannten Quantentopf (engl.: quantum well, QW) einzusperren. Da diese sehr kleine Volumina aufweisen, kommt es zu einer hohen Konzentration freier Ladungsträger, nicht strahlende Übergänge werden weniger wahrscheinlich und es resultiert daraus eine hohe Effektivität strahlender Rekombination [1]. Während sich bei noch vergleichsweise großen Schichtendicken $(> 8 \text{ nm}) L_{qw}$ ein Quasi-3 D-Verhalten zeigt, wie es vom Volumen-Material bekannt ist, tritt eine Quantisierung der Energiezustände ein und es können nur noch diskrete Werte angenommen werden, wenn L_{qw} hinreichend klein wird und in die Größenordnung der de Broglie-Wellenlänge kommt.

Die Berechnung der Energieniveaus in einem QW erfordert die Lösung der Schrödinger-Gleichung, die folgende Form im stationären, eindimensionalen Fall annimmt:

$$\Psi''(x) + \frac{2m^*}{\hbar^2} [E - V(x)] \Psi(x) = 0$$
(3.1)



Abbildung 3.1: Elektronische Zustandsdichte eines Halbleiters mit 3, 2, 1 und 0 Freiheitsgraden [65].

Gestrichene Größen bedeuten hier Ableitungen nach dem Ort x. Die Größe E steht für die Energieniveaus, $\Psi(x)$ für die Wellenfunktion, m^* für die effektive Masse, $\hbar = h/(2\pi)$ für das Plancksche Wirkungsquantum und V(x) für das Potential, das von der Heterostruktur bestimmt wird.

Die Lösung der Schrödingergleichung zeigt, dass es zu einer Quantisierung der Energiezustände kommt und sich die Absorptionskante der Struktur folgendermaßen ändert:

$$E_{g,qw} = E_{g,bulk} + E_{0,e} + E_{0,h} \tag{3.2}$$

Dabei entspricht $E_{g,qw}$ auch der sich ergebenden Emissions-Energie $h\nu$. $E_{g,bulk}$ steht für die Energielücke der Volumen-Schicht, $E_{0,e}$ und $E_{0,h}$ für die jeweils kleinsten quantisierten Energien von Elektronen und Löchern.

Die Emissions-Energie und damit auch die Wellenlänge des emittierten Lichts unterscheidet sich demnach sowohl von den Eigenschaften des Volumenkristalls des Quantenfilms, beispielsweise GaInN, als auch vom Material der Barriere, z.B. GaN. Somit besteht also die Möglichkeit ein effektives Materialsystem zu kreieren, das nicht die gleichen Eigenschaften hat wie das Material, aus dem es gemacht ist!

Eine weitere, wichtige positive Eigenschaft eines Quantenfilms ist, dass die Zustandsdichte der Elektronen nicht von der Energie der Ladungsträger abhängt, vgl. Bild 3.1.

3 Eigenschaften von GaInN-Quantenfilmen



Abbildung 3.2: Eigenschaften eines QWs unter Einfluss eines externen Feldes (a) im Vergleich zum feldfreien Fall (b). Die feldbedingten Änderungen werden unter dem Begriff QCSE zusammengefasst.

Sie ist für Energien $E \ge E_0$, wobei E_0 den Grundzustand darstellt, eine Konstante der Größe:

$$\rho^{2D}(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \tag{3.3}$$

Sind mehrere Quantenzustände möglich, kann die gesamte Zustandsdichte folgendermaßen geschrieben werden:

$$\rho^{2D}(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \Sigma_n \sigma(E - E_n)$$
(3.4)

Hierbei steht E_n für die quantisierten Energien und $\sigma(E - E_n)$ ist die Sprungfunktion.

3.1.3 Quantum Confined Stark Effekt, QCSE

Alle elektrischen Felder führen in Halbleitern zu einer Bandverkippung im Ortsraum. Dabei spielt es keine Rolle, ob die Felder durch eine extern angelegte Spannung oder, wie in dem hier besprochenen Fall (vgl. Abschn. 2.6.3), durch Polarisationsfelder hervorgerufen werden. Ist in diesem Halbleiter ein Quantenfilm enthalten, kommt es dort zu Konsequenzen, die unter dem Namen Quantum Confined Stark Effekt (QCSE) zusammengefasst werden. Aufgrund des Feldes kommt es zu einer Verkippung der Bandstruktur in der aktiven Zone. Der ohne Feld rechteckförmige Bandverlauf der QWs nähert sich aufrund der Verkippung einem eher dreieckförmigen Topf an (Abb. 3.2). Die Ladungsträgerschwerpunkte werden abhängig von der Stärke des Feldes verschoben und Elektronen und Löcher erfahren eine örtliche Trennung im QW. Dies führt zu einer reduzierten Überlappung der Wellenfunktionen von Elektronen und Löchern und dadurch zu einer geringeren strahlenden Rekombinations-Wahrscheinlichkeit und langen Ladungsträger-Lebensdauern (vgl. Abschn. 3.2.2 und 7.6.1). Andererseits führt die veränderte Form des Potentialtopfs dazu, dass sich die Grundniveaus entsprechend verschieben (Abb. 3.2). Die Emissions-Energie eines QWs unter dem Einfluss des QCSE ist typischerweise geringer als die eines unbeeinflussten Films. Diese Eigenschaft ist in Bezug auf langwellige Emission für nicht- und semipolare Strukturen von Nachteil. Denn nun muss eine höhere In-Konzentration oder ein dickerer QW gewählt werden, um die gleiche Farbe zu erzielen.

3.1.4 Screening

Freie Ladungsträger sammeln sich in den energetisch günstigsten Niveaus im QW an. Das innere Feld wird durch die Anhäufung freier Ladungsträger abgeschwächt und der Einfluss des QCSE teilweise kompensiert [66]. Die in kommerziell erhältlichen LEDs beobachtete Farbverschiebung bei unterschiedlicher Stromdichte ist genau auf diesen Effekt zurückzuführen. Wie in Abschnitt 7.6.1 zu sehen sein wird, konnte an den hier untersuchten Proben ein deutlich geringerer Einfluss des Screenings durch freie Ladungsträger nachgewiesen werden, was einen indirekten Nachweis des reduzierten Piezofeldes auf den semipolaren Oberflächen darstellt.

3.2 Effizienz

Wird von Effizienz in einem optoelektronischen Produkt gesprochen, wird oftmals die WPE (engl.: wallplug efficiency) gemeint. Sie gibt an, wieviel elektrische Leistung in optische Leistung transformiert werden kann. Diese setzt sich zusammen aus der EQE (engl.: external quantum efficiency) und der FE (engl.: feeding efficiency), die das Verhältnis zwischen gemittelter Photonen-Energie und elektrischer Energie aus der Energiequelle angibt.

$$\eta_{WPE} = \eta_{EQE} \times \eta_{FE} \tag{3.5}$$

Die externe Quanteneffizienz η_{EQE} gibt wiederum an, wieviele Photonen den Halbleiter im Verhältnis zu eingebrachten Elektronen verlassen. Wieviele Elektronen der Quelle die aktive Schicht erreichen, wird durch die Injektionseffizienz η_{INJ} beschrieben, wieviele Elektronen in Photonen umgewandelt werden, durch die interne Quanteneffizienz η_{IQE} , und wieviele Photonen den Halbleiter tatsächlich verlassen durch die Extraktionseffizienz η_{EXTR} :

3 Eigenschaften von GaInN-Quantenfilmen

$$\eta_{EQE} = \eta_{EXTR} \times \eta_{IQE} \times \eta_{INJ} \tag{3.6}$$

Da in den hier durchgeführten Studien materialspezifische Eigenschaften im Vordergrund stehen, soll der Schwerpunkt auf die interne Quanteneffizienz η_{IQE} gesetzt werden. Diese gilt es durch optimales Design der aktiven Zone und durch eine hohe Materialqualität zu steigern. Im Bauelement selbst sind dann Ladungsträgerinjektion durch niedrige Potentialbarrieren in der aktiven Zone, was beispielsweise durch leicht Indium-haltige Barrieren erreicht werden kann, von Interesse [67]. Sehr vorteilhaft hat sich diesbezüglich auch eine AlGaN-Elektronen-Barriere erwiesen, die Elektronen davon abhält, über die aktive Zone zu schießen und nicht-strahlend im p-Gebiet zu rekombinieren [68]. Die Lichtextraktion, das Temperatur-Management und ein Teil des Spannungsabfalls können durch einen geschickten Chip-Aufbau gesteigert werden [69], der im Rahmen dieser Arbeit aber nicht näher untersucht wurde.

3.2.1 IQE

Die interne Quanteneffizienz gibt das Verhältnis zwischen strahlender und gesamter Rekombinationsrate (strahlend und nicht-strahlend) wider:

$$\eta_{IQE}(T) = \frac{1/\tau_r(T)}{(1/\tau_r(T)) + (1/\tau_{nr}(T))} = \frac{1}{1 + \tau_r(T)/\tau_{nr}(T)} = \frac{\tau(T)}{\tau_r(T)}, \quad (3.7)$$

mit

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_r} + \frac{1}{\tau_{nr}} \tag{3.8}$$

 τ_r bzw. τ_{nr} stehen hierbei für die strahlende bzw. nicht-strahlende Lebensdauer und sind abhängig von der Temperatur *T*. Eine möglichst hohe Effizienz ist also erzielbar, wenn die nicht-strahlende Rekombinationsdauer deutlich länger ist als die strahlende. Auf der einen Seite sollten also die nicht-strahlenden Prozesse durch einen möglichst defektfreien Halbleiter minimiert werden und damit die nicht-strahlende Rekombinationsdauer vergrößert werden. Auf der anderen Seite ist es hilfreich, die strahlenden Übergänge durch eine möglichst große Überlappung der Elektronen-Löcher-Wellenfunktionen zu maximieren. Das Wachstum auf semi- und nichtpolaren Oberflächen scheint hierfür vorteilhaft, wie der folgende Abschnitt zeigt.

3.2.2 Überlapp-Integral

Das Überlapp-Integral M_{cv}^2 zwischen Elektronen- und Löcher-Wellenfunktion ist ein Maß für die Wahrscheinlichkeit, dass es zur strahlenden Rekombination kommt. Es ist



Abbildung 3.3: Überlapp-Integral M_{cv}^2 als Funktion der Kristall-Orientierung für Quantenfilm-Dicken zwischen 2 nm und 4 nm. 0° auf der x-Achse entspricht der c-Richtung, 90° der nichtpolaren m-Richtung [70].

invers proportional zur strahlenden Lebensdauer und es gilt:

$$M_{cv}^2 \sim \frac{1}{\tau_r} \tag{3.9}$$

Ziel ist demnach, eine große Überlappung der Wellenfunktionen für ein effizientes Bauelement zu ermöglichen. Die Überlappung ist abhängig von der Größe innerer Felder, also hauptsächlich der Kristallorientierung und der In-Konzentration, und der Dicke der QWs.

Theoretische Überlegungen führen zu dem Ergebnis, dass nahezu unabhängig von inneren Feldern ein extrem dünner QW mit dadurch bedingt tiefer Bandlücke (z.B. InN) [71], um die erwünschte Farbe zu erreichen, die beste Überlappung ergeben würde. Ein sehr dünner Film birgt jedoch die Gefahr, dass die Ladungsträger im LED-Betrieb über den Topf hinausschießen können und nicht im Film rekombinieren. Daneben ist bei hohen Betriebsströmen eine hohe Ladungsträgerdichte, bedingt durch den dünnen Film, unerwünscht (vgl. Abschn. 3.3). Und schließlich bleibt auch die Tatsache unberücksichtigt, dass eine derartige Struktur herstellungsbedingt sehr anspruchsvoll erscheint [72].

Typische Schichtdicken von c-orientierten QW-Strukturen liegen deshalb im Bereich von 1.5-3 nm. Wie in Abb. 3.3 zu sehen, verringert sich das Überlapp-Intergral in c-Richtung jedoch deutlich, je dicker die QWs gewählt werden. Für nicht- bzw. semipolare Orientierungen ist dagegen keine bzw. nur eine geringe Reduzierung zu erwarten, was die Wahl von dickeren QWs erlaubt. Somit kann mit weniger polaren, dicken QWs

3 Eigenschaften von GaInN-Quantenfilmen

eine gute Rekombinations-Wahrscheinlichkeit, ein gutes Confinement, eine geringere Ladungsträgerdichte und eine automatisch langwelligere Emission erreicht werden.

3.2.3 Materialqualität

Neben der Erhöhung der strahlenden Rekombinations-Wahrscheinlichkeit, was durch semi- und nichtpolare Filme realisiert werden kann, ist auch eine hohe Materialqualität unabdingbar, um die nicht-strahlenden Rekombinations-Prozesse möglichst gering zu halten. Parallel zur Entstehung dieser Arbeit wurden intensive Anstrengungen von anderen Gruppen unternommen, nicht- und semipolare GaInN-basierte Bauelemente zu reaslisieren [22]. Die ersten nicht- und semipolaren LEDs konnten auf Fremdsubstraten, wie z.B. r-Saphir, präsentiert werden [73]. Die optische Ausgangsleistung liegt jedoch weit hinter dem, was heute auf c-orientierten Substraten erzielt werden kann [3], und ist auch heute noch eine anhaltende Problematik beim Wachstum auf Fremdsubstraten mit konventioneller Größe [74,75]. Trotz geringem bzw. verschwindendem piezoelektrischen Feld kompensiert die vergleichsweise schlechte Materialqualität die Vorzüge der Polarisation-Eigenschaften. Die bisher besten Bauelemente in nicht- und semipolarer Orientierung konnten deshalb auf GaN-Substraten erzielt werden [23] (siehe auch Abschn. 4.4). Es wird somit klar, dass die Realisierung von hochqualitativem semipolarem (Al,Ga,In)N zwingend erforderlich ist und stellt deshalb den Schwerpunkt der nächsten Kapitel dar.

3.3 Problemdarstellung

Licht-Emitter sollen im Allgemeinen neben der erwünschten Farbe eine hohe Lichtleistung erzielen können und zudem kostengünstig in der Herstellung als auch im Betrieb sein. Bei konventionell hergestellten polaren GaInN-basierten LEDs werden bereits sehr hohe Effizienzen erreicht [3], doch sinkt die Ausgangsleistung je langwelliger die Emission [76] und je höher der Betriebsstrom gewählt wird [19]. Die stetige Abnahme der Effizienz für langwellige Emission, die mit einem Anstieg des In-Gehalts einhergeht, wird hauptsächlich auf zwei Ursachen zurückgeführt. Die Schwierigkeit besteht darin, hochqualitatives GaInN mit hoher Indium-Konzentration abzuscheiden (Abschn. 4.6). Andererseits wird die strahlende Rekombination durch hohe piezoelektrische Felder erschwert (Abschn. 3.1.3). Deshalb muss die QW-Dicke typischwerweise sehr dünn gewählt werden (Abschn. 3.2.2). Dünne QWs erhöhen jedoch die Stromdichte und bewirken den als Droop bekannt gewordenen zusätzlichen Abfall der Effizienz [19]. Bei kleinen Stromdichten, typischerweise um die $10 \,\mathrm{A/cm^2}$, wird die höchste Effizienz erreicht und nimmt dann kontinuierlich mit der Stromdichte ab. Die Ursache für den sogennanten Droop wird heute kontrovers diskutiert und scheint noch nicht endgültig geklärt [14, 15]. Auger- [16] bzw. Phononen- oder Defekt-aktivierte Auger-Rekombination [17] werden neben Ladungsträger-Verlust [18] als mögliche Ursachen genannt. Praktisch hat sich gezeigt, dass sowohl durch eine Reduzierung der Stromdichte in einer Doppel-Hetero-Struktur [19] oder mit homogen gepumpten Mehrfach-QWs (engl.: multi quantum wells, MQWs) [17, 20] als auch durch Reduktion von Polarisations-Einflüssen [21] eine Verbesserung des Droop-Verhaltens erzielt werden kann.

Als Lösungsweg zur Verbesserung des 'Green Gaps' und des 'Droops' werden deshalb weniger polare Kristall-Orientierungen für das Wachstum vorgeschlagen [13,22]. Selbst dicke QWs versprechen dann eine hohe Rekombinations-Wahrscheinlichkeit (Abschn. 3.2.2). Wie in Abschnitt 4.5 zu sehen sein wird, ist die bisher erzielte Materialqualität bei vergleichsweise kostengünstiger Herstellung auf Fremdsubstraten allerdings heute noch unbefriedigend und der Vorteil der reduzierten Felder wird durch erhöhte nicht-strahlende Rekombinations-Prozesse bei weitem kompensiert. Bauelemente auf hochwertigen GaN-Substraten scheinen daher essentiell [23]. Deren Herstellung kann durch Heraussägen von in c-Richtung gewachsenem GaN geschehen (Abschn. 4.4). Die stark limitierte Probengröße und das aufwendige Herstellungs-Verfahren machen die Substrate jedoch besonders teuer [26].

In dieser Arbeit wird deshalb versucht, durch selektive Epitaxie 3D-GaN-Struktren mit semipolaren Flächen zu erzeugen (Kapitel 6). Dabei können konventionelle Substrat-Größen verwendet werden und eine kostengünstige Herstellung bleibt gewährleistet. Weiterhin versprechen die reduzierten elektrischen Felder eine hohe Rekombinations-Wahrscheinlichkeit und wenn es schließlich gelingt, das gut etablierte Wachstum in c-Richtung (Abschn. 4.3) auf die 3D-Strukturen zu erweitern, sollten hohe absolute Effizienzen für hohe Ströme und langwellige Emission erzielbar sein (siehe Abschn. 7.6.3).

4 *Wie wird's gemacht?* -Epitaxie von (AI)Ga(In)N

In diesem Kapitel soll auf die unterschiedlichen Methoden der Materialsynthese von (Al,Ga,In)N-Schichten eingegangen werden. Dazu sollen zuerst die verschiedenen Anlagentypen vorgestellt und deren Besonderheiten erörtert werden. Es folgt eine Diskussion über mögliche Substrattypen, die auch das Wachstum von semi- und unpolarem Material erlauben. Schließlich werden die Epitaxie-Schritte detailliert behandelt, die zur Herstellung einer LED-Struktur notwendig sind, einschließlich der Problematik des GaInN-Wachstums und der Dotierung.

4.1 Methoden

Kristallines GaN kann mit unterschiedlichen Systemen abgeschieden werden. Grundsätzlich wird hierbei zwischen Gasphasen-Herstellungsverfahren und Verfahren unterschieden, die auf der Züchtung des Kristalls aus einer Lösung beruhen. Technisch scheint es unrealistisch, GaN aus einer mit dem Gruppe V-Element gesättigten Schmelze des Gruppe III-Elements zu ziehen, wie es von den üblichen Bridgeman- oder Czochralski-Verfahren bekannt ist. Der dafür benötigte Dampfdruck ist viel zu hoch. Es gibt zwar Forschungen zu ähnlichen Ansätzen bei Temperaturen zwischen 1400 °C und 1700 °C und Drücken bis zu 20 kbar, GaN aus der flüssigen Phase zu gewinnen [77–79], doch sind dabei nur kleine Volumen-Kristalle zu erreichen. Eine recht interessante Methode zur Züchtung von GaN-Substraten, die derzeit viel Aufmerksamkeit erlangt und bei deutlich niedrigeren Temperaturen (400-600°C) und Drücken (2-3 kbar) arbeitet, ist das sogenannte ammonothermale Verfahren. Hierbei wird GaN aus einer überkritischen NH₃-Lösung gewonnen. Exzellente Materialdaten konnten mit diesem Verfahren jüngst demonstriert werden [80–83].

Zur Realisierung von Heteroübergängen, wie sie für (opto-)elektronische Anwendungen benötigt werden, finden epitaktische Verfahren Verwendung. Dazu zählen einerseits

die Molekularstrahlepitaxie (MBE) [84] und die beiden Gasphasen-Epitaxie-Verfahren, Hydrid-Gasphasen-Epitaxie (HVPE) [4] und die in dieser Arbeit bevorzugte metallorganische Gasphasen-Epitaxie (MOVPE) [85]. Die wichtigsten Eigenschaften dieser Methoden sollen diesbezüglich erwähnt werden, für eine detaillierte Beschreibung wird jedoch auf Fremd-Literatur verwiesen.

4.1.1 MBE (molecular beam epitaxy)

Das naheliegendste Verfahren zur Gewinnung von GaN erscheint die Synthese aus den Elementen Ga und N, wie es das grundsätzliche Prinzip der MBE darstellt. Die MBE-Anlage ist ein Ultrahochvakuumsystem, bei dem flüssiges Gallium (Ga) in einer sogenannten Knudsenzelle verdampft wird und mit atomarem Stickstoff (N) zu GaN reagiert. Die Schwierigkeit beim Nitrid-Wachstum ist jedoch die Bereitstellung von atomarem Stickstoff, der durch Zerlegung von Molekülen gewonnen werden muss. Diese Problematik wird beispielsweise in [86] näher behandelt. Daneben stellt oftmals die Nukleation ein Problem dar, d.h. das Anwachsen von GaN auf dem Fremdsubstrat. Deshalb wird beim MBE-Wachstum häufig ein Substrat verwendet, das bereits eine mittels MOVPE hergestellte Nukleationsschicht besitzt. Die Vorteile der MBE liegen in der hohen Schichtreinheit, der Möglichkeit von speziellen in-situ Messmethoden zur Prozesskontrolle, wie beispielsweise die Beugung von hochenergetischen Elektronen (engl.: reflexion high energy electron diffraction, RHEED), und sehr abrupten Heteround Dotierübergängen im Schichtdickenbereich von Monolagen [87].

Für optoelektronische Anwendungen ist das MBE-Verfahren weniger gut geeignet [88], da u.a. GaInN-Schichten nicht in ausgezeichneter Qualität herstellbar sind. Auch wenn GaN-basierte Laser mittels MBE demonstriert wurden [89], wirkt sich die etwas andere Defektstruktur gegenüber MOVPE-Schichten nachteilig auf die Effizienz der strahlenden Rekomination aus [90]. Sehr gute Resultate sind dagegen bei rein elektronischen Bauelementen zu erreichen [91,92].

Desweiteren ist, wie in dieser Arbeit erforderlich, das selektive Wachstum mittels MBE nur schwer realisierbar. Da hier das Abscheideverhalten von der Wachstumskinetik der Oberflächenprozesse auf dem Substrat bestimmt wird [93], hängt die Beweglichkeit der adsorbierten Moleküle von der Substrattemperatur ab [94]. Bis 990°C konnte jedoch kein selektives Wachstum erzielt werden [95].

Bezüglich der Realisierung von nicht-polaren Schichten auf Fremdsubstraten, die thermisch weniger stabil sind, wie beispielsweise ZnO oder $LiAlO_2$ (vergleiche Abschn. 4.2), könnte das MBE-Verfahren Vorteile bieten. Denn die Wachstumstemperatur wird deutlich niedriger gewählt und es finden in der Regel keine reaktive Gase wie NH_3 oder H_2 Verwendung, die das Substrat zersetzen können.

4.1.2 HVPE (hydride vapor phase epitaxy)

Die bei der HVPE (engl.: hydride vapor phase epitaxy) aus der Dampfphase realisierte Abscheidung erfolgt bei hohen Temperaturen von etwa 1100°C und Drücken kleiner oder gleich dem Atmosphärendruck. Die Quellgase sind Ammoniak (NH₃) und Galliumchlorid (GaCl). Letzteres wird durch HCl-Gas gewonnen, das über geschmolzenes Gallium strömt. Mit diesem Verfahren lassen sich im Vergleich zu MBE oder MOVPE sehr hohe Wachstumsraten von mehreren $100 \,\mu\text{m/h}$ erzielen [96]. Durch die dadurch erreichbare Dicke kann die Defekt dichte bis in den Bereich von $10^5 \,\mathrm{cm}^{-2}$ reduziert werden [97]. Allerdings lassen sich die für die Herstellung elektronischer Bauelemente benötigten, oftmals nur wenige Nanometer dicken (Quanten-)Filme mit dieser Methode nur unzureichend realisieren. Vielmehr findet das HVPE-Verfahren für die Abscheidung dicker GaN-Schichten Verwendung, die als Pufferschichten und Quasisubstrate dienen. Zur Zeit ist die HVPE die geeignetste Technik zur Realisierung von freistehenden GaN-Substraten. Diese werden typischerweise in der Industrie für die Herstellung von langlebigen Laserdioden eingesetzt. Im Hinblick auf Bereiche der Forschung können durch geschicktes Sägen unterschiedlichste Orientierungen aus den in c-Richtung gewachsenen Schichten zur Herstellung von weniger polaren GaN-Substraten gewonnen werden [25]. Auf diesen hochqualitativen Substraten wurden bisher die effizientesten semi- und unpolaren GaN-basierten Bauelemente realisiert [98–101]. Jedoch ist "deren Fläche immer noch auf [wenige] Quadratzentimeter beschränkt und deren Kosten enorm hoch für jegliche kommerzielle Anwendung" [26].

4.1.3 MOVPE (metal organic vapor phase epitaxy)

Die MOVPE (engl.: metal organic vapor phase epitaxy) ist das am häufigsten eingesetzte Verfahren zur Herstellung von GaN-basierten Bauelementen. Auch hier erfolgt die Abscheidung aus der Gasphase. Es dienen metall-organische Verbindungen als Ausgangsmaterial. Die Metallorganika befinden sich in sogenannten Bubblern und werden von einem Trägergas (N₂ oder H₂) aufgenommen und zum Reaktor geführt. Es kommt beim Nitrid-Wachstum meistens Ammoniak (NH₃) als N-Quelle zum Einsatz, weil molekularer Stickstoff N₂ eine vergleichsweise hohe Bindungsenergie aufweist und



Abbildung 4.1: Schematische Darstellung der Abhängigkeit zwischen Wachstumsrate und -temperatur.

schlecht gespalten werden kann. Trimethylgallium (TMGa, $(CH_3)_3Ga$) bzw. Triethylgallium (TEGa, $(C_2H_5)_3Ga$), Trimethylindium (TMIn, $(CH_3)_3In$) und Trimethylaluminium (TMAl, $(CH_3)_3Al$) finden als Gruppe III-Quellen (Precursor) Verwendung. Die gesättigten Trägergase werden separat zum vorgeheizten Substrat im Reaktor geführt und die zuvor aufgenommenen Elemente dort deponiert, was durch thermisches und teilweise katalytisches Spalten der Ausgangsstoffe ermöglicht wird. Die Reaktionsgleichung für GaN lautet repräsentativ für die Gruppe III-Vertreter:

$$Ga(CH_3)_3 + NH_3 \rightarrow GaN + 3 \cdot CH_4$$

Die organischen Reste werden mit dem Trägergas abtransportiert.

Das MOVPE-Wachstum findet im Allgemeinen bei einem Reaktordruck von 100 -1000 hPa und Temperaturen zwischen 700° und 1200°C statt. In Abhängigkeit der Temperatur kann das Wachstum in 3 Hauptbereiche unterteilt werden (siehe Abb. 4.1). Im Bereich vergleichsweise niedriger Temperaturen steigt die Zerlegungs- und Oberflächenreaktions-Effizienz exponentiell mit der Temperatur. Dieser Bereich ist kinetisch begrenzt. Die Wachstumsrate ist stark temperaturabhängig und deshalb vergleichsweise schwer zu kontrollieren. Die Temperatur reicht hier nicht aus, um die Quellgase vollständig zu zerlegen. Ebenso ist die Diffusion gehemmt und es besteht die Gefahr eines inhomogenen Schichtwachstums.

Ist die Temperatur hoch genug, dass die angebotenen Quellmaterialien effizient zerlegt werden, befindet man sich im massentransportlimitierten Bereich. Die Temperatur ist hier hoch genug für eine ausreichende Beweglichkeit der Adatome. Die Wachstumsrate ist in diesem Regime hauptsächlich durch das Angebot an Gruppe III-Elementen, die pro Zeiteinheit in den Reaktor gelangen, bestimmt und bleibt über einen größeren Temperaturbereich konstant. Der Arbeitspunkt im MOVPE-Prozess wird typischerweise in den transportlimitierten Bereich gelegt. Für die selektive Epitaxie ist dieser Bereich besonders entscheidend, da über die Steuerung der Diffusionsprozesse der Wachstumsmechanismus kontrolliert werden kann.

Schließlich gibt es den Hochtemperaturbereich. Hier erhöht sich zum einen der Dampfdruck des Kristalls und damit die Desorptionsrate von der Oberfläche in die Gasphase, zum anderen erhöhen sich die parasitären Vorreaktionen. Beide Effekte reduzieren die Wachstumsrate.

Die Wachstumsrate von MOVPE-Prozessen liegt bei wenigen μ m/h. Heteroepitaktische Strukturen sind ebenso kein Problem wie der großtechnische Einsatz, ohne dass ein UHV-Reaktor notwendig ist. Deshalb ist diese Methode die erste Wahl für die Synthese optoelektronischer Bauelemente auf Nitridbasis. Für weiterführende Einzelheiten zum Wachstum mittels MOVPE wird beispielsweise auf [102] verwiesen, insbesondere für die Nitrid-MOVPE auf [103].

4.2 Substrate

Ein geeignetes Substrat zum Wachstum von hochwertigen Halbleiterschichten ist von entscheidender Bedeutung. Idealerweise besteht das Substrat aus dem gleichen Material wie die Schicht selbst, um thermische sowie strukturelle Verspannungen beim und nach dem Wachstum zu vermeiden (vgl. Abschn. 2.5). GaN-Substrate wären deshalb die beste Wahl. Dagegen spricht jedoch der noch immer recht hohe Preis, der für hochqualitative GaN-Substrate aufgrund der aufwendigen Herstellungs-Technologie bezahlt werden muss (siehe Abschn. 4.1 und 4.1.2). Sind also die Anforderungen nach einer extrem niedrigen Defektdichte nicht zwingend erforderlich, wie es beispielsweise für die Herstellung von GaInN-LEDs der Fall ist, wird auf günstige Fremdsubstrate ausgewichen. Am häufigsten verbreitet ist dabei Saphir, aber auch SiC, Si und GaAs werden eingesetzt..

4.2.1 Saphir (Al₂O₃**)**

In Tabelle 4.1 ist eine Zusammenstellung möglicher Fremdsubstrate für das GaN-Wachsum aufgezeigt. Auf besonders bedeutende Materialien soll im Folgenden näher

Substrat	Kristall-	$\Delta \gamma^{1}$ [%],	$\Delta \alpha^2$	Spalt-	Stabilität	Kosten
	gitter	$300\mathrm{K}$	$[\times 10^{-6}]$	ebene	für VPE-	$[\%/cm^{2}]$
					Prozesse	
Al_2O_3	Korund	13,8	1,9	(1-102)	gut	1-2
6H-SiC	ZnS 6H	-3,4	-1,4	(1-100)	gut	25
				(11-20)		
				(0001)		
Si	Diamant	20,1	-2,0	(111)	gut	< 0,01
GaAs	Zinkblende	25,3	0,4	(110)	ausreichend	4
$MgAl_2O_4$	Spinel	-10,3	1,9	(100)	gut	n.a.
ZnO	Wurtzit	2,0	-2,7	(1-100)	ausreichend	300
				(11-20)		
				(0001)		
LiAlO ₂	β -NaFeO ₂	1,7	1,7	(001)	instabil	60

Tabelle 4.1: Mögliche Substrate zum Wachstum von GaN [90, 104, 105].

eingegangen werden. Andere werden erwähnt, da sie teilweise für das Wachstum von semi- und unpolarem GaN Verwendung finden und ggf. in Zukunft eine bedeutendere Rolle einnehmen könnten [106].

Saphir (Al_2O_3) diente schon bei den Pionierarbeiten von Maruska & Tietjen im Jahre 1969 [4] zum GaN-Schichtwachstum mittels Hydrid-Gasphasenepitaxie (HVPE) als Substrat, vgl. auch Kapitel 4.3, und ist derzeit das meist verwendete Substratmaterial für optoelektronische (Al,Ga,In)N-Bauelemente [107, 108]. Dies liegt unter anderem an der nicht unerheblichen Tatsache, dass Saphir im Vergleich zu anderen Substraten relativ kostengünstig ist, was auch in dieser Arbeit das schwerwiegendste Argument darstellt.

Daneben besitzt es folgende materialspezifische Eigenschaften, die für die GaN-Epitaxie von Bedeutung sind. Die übliche Wachstumsrichtung ist die (0001)-Orientierung. Die theoretische Gitterfehlanpassung zwischen GaN und Saphir beträgt bei unverdrehter Ausrichtung der hexagonalen Kristallstruktur an das Korund-Gitter rund 33 %. Jedoch ist die epitaktische Ausrichtung des (Al,Ga,In)N-Gitters am Sauerstoffuntergitter des Al₂O₃ energetisch günstiger, was eine Verdrehung um 30° zur Folge hat und die Gitterfehlanpassung auf 13,8 % senkt, siehe dazu Abbildung 4.2.

Mit einer Bandlücke von 9.9 eV ist Saphir im sichtbaren Spektralbereich transparent,

¹Gitterfehlanpassung zwischen Fremdsubstrat und GaN (hier: $\Delta a/a$)

 $^{^2\}mathrm{Differenz}$ des thermischen Ausdehnungskoeffizienten zwischen Fremdsubstrat und GaN



Abbildung 4.2: Symmetriebeziehung zwischen Al_2O_3 (0001) und (Al,Ga,In)N (0001); die epitaktische Ausrichtung von (Al,Ga,In)N erfolgt am Sauerstoffuntergitter des Al_2O_3 [108].

was für optische Anwendungen interessant ist, da das Licht durch das Substrat ausgekoppelt werden kann. Allerdings lässt es als elektrischer Isolator keine rückseitigen Kontakte zu. Ebenso negativ fällt die schlechte thermische Leitfähigkeit von ca. $0.5 \frac{W}{cm K}$ auf [109], was gerade bei optoelektronischen Bauelementen hoher Leistung von Nachteil sein kann, da eine gute Wärmeabfuhr die Funktionstüchtigkeit bzw. die Lebensdauer stark beeinflusst.

Desweiteren ist Saphir interessant, wenn es um die Realisierung von nicht- und semipolarem GaN geht. Unterschiedliche Kristall-Orientierungen sind dabei zum Teil vielversprechend untersucht worden, siehe Kapitel 4.5. Probleme, die aufgrund der Heteroepitaxie dabei entstehen, müssen jedoch noch gelöst werden, um den positiven Einfluss des reduzierten piezoelektrischen Feldes nicht durch eine erhöhte Anzahl an Kristall-Defekten und Stapelfehlern zu stören.

4.2.2 Siliziumkarbid (SiC)

Auch Siliziumkarbid (SiC) findet häufigen Einsatz zum Wachstum von (Al,Ga,In)N-Schichten. Dem deutlich höheren Preis im Vergleich zu Saphir stehen folgende Merkmale gegenüber.

Die Gitterkonstante von SiC unterscheidet sich von GaN um nur 3.4% und ermöglicht dadurch das Wachstum von qualitativ hochwertigen Filmen. Die Tatsache, dass die Abweichung zu AlN sogar nur 1.1% beträgt, spiegelt sich darin wider, dass AlN bzw. AlGaN als Nukleationsschicht vor dem anschließenden Wachstum von GaN Verwendung findet. Somit kann die Fehlanpassung noch weiter reduziert werden.

GaN kristallisiert in der gleichen hexagonalen Ausrichtung wie SiC. Z.B. kann somit die durch Spalten entlang des Kristallgitters entstehende Bruchkante als einfacher Spiegel dienen, wie es zur Realisierung von Lasern nötig ist.

Da SiC in die Gruppe der Halbleiter fällt, ist die Möglichkeit gegeben, durch dessen Dotierung einen rückseitigen Kontakt über das Substrat zu realisieren. Dadurch kann ggf. auch die Größe der entsprechenden Bauelemente verkleinert bzw. die Anzahl bei einer gegebenen Wafergröße erhöht werden. Ebenso ist Siliziumkarbid aber auch als semiisolierendes Substrat denkbar, wie es bei Hochfrequenz-Anwendungen benötigt wird. Bei optoelektronischen Bauelementen wirkt sich hingegen der relativ geringe Bandabstand von 2.89 eV negativ aus, da kurzwelliges Licht somit absorbiert wird, was es gerade bei GaN-basierten Leuchtelementen zu vermeiden gilt.

Bezüglich thermischer Eigenschaften bietet SiC sowohl einen weiteren Vorteil, bringt aber ebenso einen unerwünschten Effekt mit sich. So übersteigt zwar die thermische Leitfähigkeit von $4.9 \frac{W}{cm K}$ die von GaN mit $1.3 \frac{W}{cm K}$ und Saphir mit $0.5 \frac{W}{cm K}$ deutlich, vgl. Abschnitt 4.2.1, und eine effiziente Wärmeabfuhr über das Substrat kann gewährleistet werden. Die thermische Ausdehnung von SiC gegenüber Galliumnitrid ist allerdings kleiner, wodurch es nach der Abkühlung des Ensembles zu tensilen Verspannungen in der Epitaxie-Schicht kommt und verstärkte Rissbildung auftritt (vgl. Abschn. 2.5.1).

Auch auf SiC wurde GaN-Wachstum in weniger polare Kristall-Richtungen gezeigt, vgl. Kapitel 4.5. Auch hier besteht jedoch das Problem erhöhter Defekt-Bildung und der dadurch bis heute bedingten Limitierung der Effizienz.

4.2.3 Silizium (Si)

Der wohl bekannteste, am häufigsten eingesetzte und in der Technologie hervorragend beherrschte Halbleiter ist Silizium (Si). Dies ist auch der Grund für die sehr preiswerten und qualitativ hochwertigen Silizium-Substrate.

Die bisher erzielten (Al,Ga,In)N-Schichtqualitäten auf Si erreichen jedoch noch nicht die Bestwerte wie auf den Substratmaterialien Al_2O_3 oder SiC. Jedoch konnten bereits recht ordentliche Gruppe III-N-Bauelemente wie LEDs [110, 111] und HEMTs (engl.: high electron mobility transistor) auf Si demonstriert werden [107, 112].

Die Schwierigkeiten basieren hauptsächlich auf der Gitterfehlanpassung zwischen Silizium und Gallium-Nitrid. Beim Wachstum von GaN auf Si (111), auf der die hexagonale Wurtzit-Struktur kristallisiert [113], beträgt die Fehlanpassung etwa 20 %. Der Schlüssel für dennoch hochwertige Wachstumsschichten ist deshalb in geeigneten Pufferschichten zu suchen. Verbesserungen der Kristallstruktur wurden sowohl durch Puffer aus Aluminiumnidrid (AlN) [114], als auch aus Aluminiumarsenid (AlAs) [115], Aluminiumoxid (AlO_x) [116] und Siliziumnitrid (SiN) [117] erzielt. Heute ist es möglich, recht ordentliches GaN auf Si abzuscheiden [118].

Problematisch ist auch die Tatsache, dass sich unter den typischen Gasphasen-Epitaxie-Verfahren (MOVPE, HVPE, siehe Abschnitt 4.1.3 und 4.1.2) bei den typischen Wachstumstemperaturen von über 1000°C eine Legierung aus Si und Ga bildet und ein epitaktisches Wachstum erheblich beeinträchtigt.

Für optoelektronische Anwendungsfelder könnte sich der geringe Bandabstand von 1.12 eV als problematisch erweisen. Dagegen bietet Silizium den großen Vorteil, nasschemisch behandelbar zu sein. Ohne größeren technischen Aufwand scheint daher ein Ablösen des Substrates möglich, wodurch der oben erwähnte negative Einfluss des kleinen Bandabstandes für optoelektronische Anwendungen nicht mehr relevant wäre.

Auch auf Si konnte Wachstum in semipolare Richtungen erzielt werden, siehe Kapitel 4.5. Ähnliche Probleme wie bei anderen Fremdsubstraten behindern jedoch hocheffiziente Bauelemente.

4.2.4 Zinkoxid (ZnO)

Als Substratmaterial für das (Al,Ga,In)N-Wachstum scheint auch Zinkoxid recht geeignet. Aufgrund der sehr ähnlichen Kristallgröße zu den Gruppe III-Nitriden ist sogar ein gitterangepasstes Wachstum für die ternäre Verbindung $Ga_{1-x}In_xN$ mit einer In-Konzentration von x = 18% theoretisch möglich [119, 120]. Jedoch ist ZnO wegen seiner chemisch/mechanischen Stabilität nicht uneingeschränkt für die typischen Gasphasen-Epitaxie-Verfahren (siehe Abschnitt 4.1.3 und 4.1.2) bei hohen Temperaturen und einer Wasserstoff-haltigen Atmosphäre zu benutzen. Zinkoxid zersetzt sich dabei. Es wurden aber Arbeiten gezeigt, die durch einen angepassten Prozess-Ablauf GaN-Wachstum nicht nur mittels MBE [121], sondern auch mit MOVPE [122, 123] bzw. HVPE [124] erlauben.

4.3 Heteroepitaxie von polarem GaN

Heute kommerziell erhältliche GaN-basierte Bauelemente sind nahezu ausnahmslos in der konventionellen c-Richtung hergestellt. Eine sehr hohe Materialgüte kann in

dieser Wachstumsrichtung selbst auf Fremdsubstraten wie Saphir erzielt werden und hocheffiziente Bauelemente ermöglichen. Wie solch ein typisches Wachstum abläuft, soll nun kurz erläutert werden.

Wie bereits erläutert, kommt beim (Al,Ga,In)N-Wachstum, wie schon bei den Pionier-Arbeiten von Maruska et al. in den späten 1960er [4] und frühen 1970er [5,125], meist Saphir als Fremdsubstrat zum Einsatz. Um die hohe Gitterfehlanpassung teilweise zu kompensieren, erkannten Amano et al. (und Nakamura) in den 1980er den Nutzen eines 2-Stufen-Prozesses für das Wachstum von GaN [6], bei dem vor dem eigentlichen GaN-Wachstum Ga(In)N- oder AlN-Nukleationskeime bei reduzierter Temperatur abgeschieden werden. Die nur wenige Nanometer dicke Nukleationsschicht besitzt polykristalline Eigenschaften, durch die es gelingt, Verspannungen kontrolliert abzubauen und die Defektdichte in der GaN-Schicht auf Werte von etwa $10^9 \,\mathrm{cm}^{-2}$ zu bringen. Die in dieser Arbeit beschriebenen Proben wurden alle mit einer Sauerstoff-dotierten Aluminiumnitrid-Nukleation hergestellt [126]. Bei dieser Art von Nukleation schafft man es, eine nahezu vollständige Unterdrückung von Fadenversetzungen mit Schraubenanteil zu erreichen. Der verbleibende Anteil an Stufenversetzungen kann durch weitere Schritte im Prozessablauf deutlich verringert werden. Es hat sich herausgestellt, dass durch eine teilweise Maskierung der Oberfläche, auf der das eigentliche Wachstum behindert wird, Defekte geblockt werden können und sich nicht mehr fortsetzen. Diese Maskierung kann durch eine in-situ abgeschiedene SiN-Schicht erfolgen [127] und ist eine Art Weiterentwicklung der ELO(G)- bzw. FACELO-Technik (vgl. Abschnitt 5.3.1 und 5.3.2). Der große Vorteil hierin liegt in der Möglichkeit, das Maskenmaterial direkt im Wachstumsreaktor abzuscheiden. Die Proben müssen nicht unter erhöhtem Arbeits- und Zeitaufwand hergestellt werden und sind auch keiner zusätzlichen Gefahr von Verunreinigungen ausgesetzt. Dem tieferen Verständnis der zugrundeliegenden Mechanismen der sogenannten selektiven Epitaxie widmet sich Kapitel 5.

4.4 Nicht-/semipolare Substrate aus c-GaN

Die oben erwähnten Techniken können benutzt werden, um hohe Materialqualitäten selbst für relativ dünne ($< 10 \,\mu$ m) Schichten zu erzielen. Heute kommerziell erhältliche GaN-basierte Laserdioden, die für die Gewährleistung einer langen Lebensdauer sehr niedrige Defektdichten benötigen, sind jedoch nahezu ausschließlich auf GaN-Substraten hergestellt. Für deren Herstellung kommt meist die in Abschnitt 4.1.2 diskutierte HVPE-Technik zum Einsatz, wobei die oben beschriebenen GaN-Templates

als gutes Start-Substrat Verwendung finden können. Schichtdicken von mehreren Millimetern sind heute erzielbar, wobei sich die typische Defektdichte bis auf 10⁵ cm⁻² reduzieren läßt [97]. Betrachtet man diese Scheiben als Volumenkristall, liegt der Ansatz nahe, zur Herstellung von nicht- und semipolaren GaN-Substraten einfach die gewünschte Orientierung durch Sägen herauszupräparieren. Tatsächlich sind diese oftmals auf eine Größe von wenigen Quadratmillimetern begrenzten Substrate heute zu Forschungszwecken erhältlich. Aufgrund der hohen Materialgüte wurden auch die bisher besten Bauelemente auf diesem semi- und nichtpolaren Materialien erzielt [98–101]. Der hohe Preis für die in der Größe stark limitierten Proben stellt jedoch ein Hindernis für eine kommerzielle Nutzung dar [26].

4.5 Heteroepitaxie von nicht-/semipolarem GaN

Bevor allerdings der Wettlauf um die beste Performance auf GaN-Substraten begann, stand das heteroepitaktische Wachstum auf Fremdsubstraten im Vordergrund, um nicht- und semipolare Schichten zu realisieren. Verschiedene Substrat-Orientierungen unterschiedlicher Substrat-Materialien (vgl. Abschn. 4.2) wurden und werden dahingehend untersucht, wobei die erzielbare Orientierung prinzipiell nicht von der benutzten Wachstums-Methode abhängen sollte.

4.5.1 a-GaN auf r-Saphir

Erstmals wurde von GaN-Schichten in nichtpolarer [11-20]-Richtung im Jahr 1976 von Sano und Aoki berichtet [128]. Die Abscheidung erfolgte dabei auf Saphir mit [1-102]-Orientierung. Die recht rauhe, schuppenartige Oberfläche verhinderte jedoch die Realisierung von entsprechenden Bauelementen. Trotz der Optimierung von Wachstumsparametern gelang es erst im Jahr 2002 einer Gruppe der University of California in Santa Barbara (UCSB), unter Zuhilfenahme der ELO(G)-Technik (siehe Abschnitt 5.3.1) mittels MOVPE glatte Schicht-Oberflächen zu realisieren [129]. Erste Bauelemente folgten 2003 mit einer Schottky-Diode [130] und GaN/AlGaN- [131] als auch InGaN/GaN-LEDs [24, 132]. Trotz des Einsatzes von defektreduzierenden Techniken wie ELO(G) und der Verwendung von dicken GaN-Puffer-Schichten (HVPE) bleibt die Ausgangsleistung derartiger Bauelemente jedoch weit hinter den heute erreichbaren Leistungen auf in c-Richtung abgeschieden Schichten zurück. Die immer noch vergleichsweise schlechte Materialqualität mit einer Vielzahl von Defekten und Stapel-

fehlern dominiert damit die Leistungsfähigkeit derartiger Bauelemente und kompensiert die Vorzüge des reduzierten piezoelektrischen Feldes.

4.5.2 m-GaN auf $LiAlO_2$

Die erste nichtpolare GaN/AlGaN-Heterostruktur in [1-100]-Richtung wurde mittels MBE auf LiAlO₂ im Jahr 2000 realisiert [133, 134]. Obwohl auch hier die Materialqualität bei weitem nicht mit der von c-GaN zu vergleichen ist, war es hinreichend gut, um das Fehlen von piezoelektrischer Polarisation erstmals experimentell nachzuweisen. Weltweit stieg danach das Interesse, das Potential von nichtpolaren Nitriden detaillierter zu untersuchen. Das kostengünstige LiAlO₂ wurde später auch verwendet, um dickes nichtpolares GaN mittels HVPE abzuscheiden. Hier besteht dann die Möglichkeit, durch verhältnismäßig einfaches Entfernenen des Trägermaterials, freistehende m-GaN-Substrate herzustellen [135]. Doch gerade die Instabilität des Substrats während typischen Gasphasen-Epitaxie-Bedingungen (vgl. Abschn. 4.1.2 und 4.1.3) kann zu erheblichen Problemen führen. 2005 folgte schließlich auch auf diesem Material die Realisierung einer InGaN/GaN-LED, die mit einer optischen Ausgangsleistung von 240 µW bei 20 mA die bis dahin beste Performance auf nicht- und semipolarem Material zeigte [136].

4.5.3 m-, a-GaN auf m-, a-SiC

Siliziumkarbid (SiC) eignet sich sowohl für das Wachstum in die konventionelle c-Richtung als auch als Substrat für die Abscheidung von nichtpolaren Gruppe III-Nitriden in m- und a-Richtung. Obwohl schon erste Berichte von nichtpolarem AlN vor dem Jahr 2000 auftauchten [137], starteten systematische Untersuchungen hinsichtlich der Realisierung von Bauelementen erst 2002 an der Universität Kyoto [138,139]. 6H- und 4H-SiC-Substrate rückten damit in den Fokus für die Abscheidung von aund m-orientierten Gruppe III-Nitriden [140–143]. 2005 konnte für m-GaN, das mittels MBE auf m-SiC abgeschieden wurde, eine mit $7.2 \cdot 10^{18}$ cm⁻³ sehr hohe p-Typ Dotier-Konzentration experimentell demonstriert werden [144], was für optoelektronische Anwendungen sehr attraktiv erscheint. Dennoch bewegen sich die typische Fadenversetzungs-Dichte und die Anzahl an Stapelfehlern in einem zu hohen Bereich für hocheffiziente Bauelemente [145].

4.5.4 $\{10\text{-}1x\}\text{-}GaN$ auf (1x0)-MgAl_2O_4

Baker *et al.* demonstrierten 2005 erstmals das Wachstum von semipolarem GaN auf Spinell (MgAl₂O₄) [146]. Während auf (100)-MgAl₂O₄ semipolares { $10\overline{13}$ }-GaN abgeschieden werden kann, wächst auf (110)-MgAl₂O₄ semipolares { $10\overline{13}$ }-GaN. Kurz darauf präsentierten Chakraborty *et al.* InGaN/GaN-LEDs auf solchen Substraten [147]. Auch hier ist jedoch das Material noch mit einer hohen Defekt- und Stapelfehler-Dichte versehen, was die vergleichsweise verhaltene optischen Ausgangsleistung von 11 bzw. 190 µW bei 20 mA widerspiegelt [147]. Eine absichtliche Fehlorientierung des Substrates hilft auch hier, die Materialeigenschaften zu verbessern, wie es in ähnlicher Weise standardmäßig für das Wachstum in c-Richtung angewandt wird [148].

4.5.5 {10-1-3}-,{11-22}- und {10-10}-GaN auf {10-10}-Saphir

Erste Hinweise, dass auf m-Saphir semipolares $\{10\overline{13}\}$ -GaN abgeschieden werden kann, gab es 2001 von Matsuoka *et al.* [149]. Planare Schichten, die auch für die Realisierung von Bauelementen geeignet waren, konnten in der semipolaren $\{10\overline{13}\}$ - und $\{11\overline{2}2\}$ -Kristallorientierung von Baker *et al.* entwickelt werden [150]. Dabei fand die HVPE zum Wachstum der Proben Verwendung. Auf einem derartigen HVPE-Template wurde dann eine semipolare grüne LED realisiert [151]. Trotz des vergleichsweisen dicken HVPE-Materials war die Ausgangsleistung aber auf nur 19 µW limitiert. Später wurde dann $\{11\overline{2}2\}$ -GaN auch von Kappers *et al.* mittels MOVPE untersucht [152]. Schließlich wurde auch nichtpolares $\{10\overline{1}0\}$ -GaN auf m-Saphir demonstriert [153]. Die Nitridierung hat hierbei den besonderen Einfluss, welche Orientierung sich durchsetzen kann. Wie u.a. die LED-Daten zeigen, weisen die Schichten jedoch nur mäßig gute Materialqualität auf und besitzen wie bei den meisten Techniken der Heteroepitaxie von nicht- und semipolaren GaN trotz HVPE-Einsatzes eine hohe Anzahl an Defekten und Stapelfehlern [154].

4.5.6 $\{10-10\}$ -GaN auf stukturiertem $\{11-20\}$ -Saphir

Aktuelle Ansätze, nicht- und semipolares Material großflächig herzustellen, bauen auf die Idee, durch Strukturierung des Substrats (hier Saphir) einen begrenzten Bereich der c-Ebene freizulegen. Dieser liegt je nach Substrat-Orientierung in der Wachtumsebene (für nichtpolares Material) oder ist schräg verkippt. Das Wachstum verläuft in der gewohnten c-Richtung mit der bekannten 30-Grad-Drehung der GaN-Einheitszelle

in Bezug auf das Saphir-Substrat (siehe auch Abschnitt 4.2.1). So wurde m-GaN auf strukturiertem a-Saphir erstmals von Okada *et al.* gezeigt [155]. Während bei diesem Ansatz noch eine dielektrische Maske benutzt wurde, wurde später gezeigt, dass dies nicht zwingend nötig ist [156]. Das gegenüber den bisher diskutierten Ansätzen deutlich verbesserte Material ermöglichte schließlich auch eine recht ordentliche Ausgangsleistung einer auf diesem Material basierten LED. Das vollständig prozessierte Bauelement besitzt mit einer Ausgangsleistung von 3 mW bei 20 mA [157] sehr vergleichbare Werte wie die in dieser Arbeit realisierten LEDs auf 3D-GaN (siehe Kapitel 8).

4.6 GaInN-Wachstum

Wie in Abschn. 2.3.2 gezeigt, kann mit dem ternären Materialsystem $Ga_{1-x}In_xN$, abhängig von der Indium-Komposition x, ein großer Bereich des sichtbaren Spektralbereichs abgedeckt werden. Das Wachstum hoch In-haltiger GaInN-Filme mit einer hohen Materialqualität ist jedoch besonders anspruchsvoll, aber dennoch zwingend notwendig für ein effizientes optoelektronisches Bauelement. Ein Hauptproblem stellt die große Gitterkonstante von InN dar, durch die die Bindungsenergie klein und der Dampfdruck hoch wird [158]. Dies hat zur Folge, dass die Wachstumstemperatur für InNhaltige Schichten deutlich gesenkt werden muss, um die gewünschte In-Konzentration zu gewährleisten [159]. Die geringeren Wachstumstemperaturen (700°C - 850°C) sind jedoch ungünstig für das Wachstum hochqualitativer GaN-Schichten, die typischerweise bei über 1000°C abgeschieden werden. Denn einerseits verringert sich bei reduzierter Temperatur die Mobilität der Adsorbate, was die Tendenz zur Defektbildung erhöht, andererseits ist eine effiziente Ammoniak-Zerlegung in diesem Temperaturregime deutlich erschwert. Zur Kompensation dieser Effekte wird deshalb die Wachstumsrate meist stark reduziert (etwa 1 nm/min) und ein hoher NH₃-Partialdruck angeboten. Die geringe Wachstumsrate bedingt jedoch wiederum einen reduzierten In-Einbau [160]. Es zeigt sich, dass eine ausgewogene Wachstumsoptimierung notwendig ist, um hoch Inhaltige, hochqualitative GaInN-Schichten abzuscheiden. Auf experimentelle Untersuchungen von semipolarem GaInN wird in Kapitel 7 ausführlich eingegangen.

4.7 n-Dotierung

Als n-Dotierstoff in Gruppe III-Nitriden findet Silizium nahezu ausnahmslos Verwendung. Es baut sich anstatt eines Atoms der III. Hauptgruppe in den Kristall ein. Mit seinen vier Valenzelektronen besitzt es demzufolge ein Elektron mehr, das für die Bindung nicht benötigt wird und der Halbleiter wird n-leitfähig. Die Dotierung mit Silizium ist relativ unkritisch und sollte keinen entscheidenden Einfluss auf das eigentliche Wachstumsverhalten zeigen – ganz im Gegenteil zur p-Dotierung mit Magnesium. Die Elektronen-Konzentration steigt dabei beim MOVPE-Wachstum linear mit der Silan-Flussrate (SiH₄) an und zeigt keinen Sättigungseffekt. Dotierungen um $1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ können ohne Rissbildung (cracks) erzielt werden. Aufgrund der geringen Aktivierungsenergie von Si in den GaN-Schichten von ca. 12-17 meV [161] reichen diese Si-Konzentrationen für die n-Leitung vollkommen aus, da man davon ausgehen kann, weitestgehend alle Si-Donatoren bei Raumtemperatur ionisiert vorzufinden.

Bei zu hohen Si-Konzentrationen besteht jedoch die Gefahr, dass sich Si an der Oberfläche ansammelt und durch Formation mit Ammoniak (NH₃) während des Wachstums eine passivierende Si₃N₄-Schicht bildet, die das zweidimensionale Wachstum stört [162]. Diese Eigenschaft kann jedoch bei geschicktem Einsatz zur effizienten Defekt-Reduktion genutzt werden, wie dies auch in den dieser Arbeit zugrundeliegenden Proben geschehen ist [127].

4.8 p-Dotierung

Schwieriger stellt sich die p-Dotierung von Gruppe III-Nitriden dar. Bis Ende der 80er Jahre konnte keine p-Leitfähigkeit in Gallium-Nitrid nachgewiesen werden. Erst 1989 gelang es der Arbeitsgruppe um Amano und Akasaki, Magnesium-dotiertes GaN durch Bestrahlung mit niederenergetischen Elektronen elektrisch zu aktivieren [7]. Drei Jahre später zeigte Nakamura, dass diese Aktivierung auch thermisch erfolgen kann [163]. Dies war dann schließlich der Durchbruch für den erfolgreichen Einsatz der Gruppe III-Nitride für die Anwendung in optoelektronischen Bauelementen.

Die Komplexität der p-Dotierung in GaN hat mehrere Ursachen. Zum einen ist GaN durch diverse Punktdefekte schon ohne absichtliche Dotierung n-leitend. Zum anderen bildet Magnesium mit einer Aktivierungsenergie von ca. 130-210 meV ein tiefes Akzeptorniveau aus, so dass bei Raumtemperatur weniger als 10 % der Mg-Akzeptoren ionisiert sind [164, 165]. Es werden also viel mehr Mg-Atome benötigt, um eine gleich

hohe Ladungsträger-Konzentration zu erreichen, als Si-Atome für das n-Gebiet. Zudem ist die Beweglichkeit der Löcher um etwa eine Größenordnung niedriger als die Beweglichkeit der Elektronen [166]. Und schließlich nimmt die Löcher-Konzentration ab einer gewissen Mg-Konzentration (ca. $6 \cdot 10^{19}$ - $1 \cdot 10^{20}$ cm⁻³) auf Grund von Selbstkompensation wieder ab und eine effektive Löcher-Konzentration von nur etwa $2 \cdot 10^{18}$ cm⁻³ ist erreichbar [165, 167].

Wie in Abschnitt 8.1.2 zu sehen ist, tritt beim selektiven Wachstum von p-dotierten Schichten ein zusätzliches, nicht unerhebliches Problem auf. Eigene Untersuchungen sowie vergleichbare Experimente anderer Gruppen [168] zeigen ein stark anisotropes Wachstumsverhalten der Mg-dotierten Schichten. Es kommt vor, dass auf einer 3D-Oberfläche auf einem Facetten-Typ nahezu keine Abscheidung statt findet. Dies kann zu Totalausfällen in einer LED führen, da elektrische Kurzschlüsse nicht vermieden werden können. Wie diese Problematik durch eine geschickte Prozess-Führung umgangen werden kann, zeigt ebenfalls Abschnitt 8.1.2.

5 Selektive Epitaxie

Selektive Epitaxie (engl.: selective area growth, SAG) stellt eine Technik dar, bei der durch eine Teilmaskierung der Oberfläche epitaktisches Wachstum örtlich unterdrückt bzw. gefördert werden kann. Diese Technik wurde in den 1990er als Methode zur effektiven Defektreduktion durch das sogenannte ELO-Verfahren, u.ä. untersucht. Daneben bietet es die Möglichkeit Bauelement-Strukturen selektiv abzuscheiden und eröffnet eine Alternative zur Strukturierung durch Ätzen, wodurch oft Oberflächen-Schäden verursacht werden. Beispiele hierfür sind in Wellenleitern, Laser-Facetten oder niederdimensionalen Quantenstrukturen zu finden [169, 170].

In früheren Untersuchungen hat sich bereits gezeigt, dass sich abhängig von den MOVPE-Wachstums-Parametern und dem Maskendesign dreidimensionale (3D) GaN-Oberflächen verwirklichen lassen [171]. Diese Möglichkeit stellt die Grundlage der hier entwickelten Proben dar. Denn durch geschickte Prozessführung können hochqualitative 3D-GaN-Strukturen mit semipolaren Oberflächen realisiert werden, auf welchen wiederum GaInN-Quantenfilme bzw. vollständige LED-Strukturen abgeschieden werden können - und dies auf konventionellen Substratgrößen.

5.1 Prozedur

Über selektive Epitaxie von GaN auf Saphir mittels MOVPE wurde erstmals von Kato et al. berichtet [172]. Das typische Prozedere stellt sich wie folgt dar: Zuerst werden wenige µm GaN auf ein Substrat abgeschieden und anschließend das Maskenmaterial exsitu aufgebracht, z.B. via PECVD (engl.: plasma enhanced chemical vapor deposition). Typische Materialien einer solchen Maske stellen dielektrische Schichten wie beispielsweise SiO₂ oder SiN dar, die für das GaN-Wachstum eine ausreichend gute Selektivität gewährleisten, um Abscheidungen auf der meist amorphen Schicht zu verhindern. Anschließend werden mittels konventioneller Lithographie- und Ätz-Techniken Öffnungen in der Maske erzeugt, wodurch die darunterliegende GaN-Oberfläche freigelegt wird.

5 Selektive Epitaxie

Zur Herstellung einer defektreduzierten Probe wird in einem zweiten Epitaxie-Schritt das Wachstum zunächst aus den Öffnungen begonnen und setzt sich durch laterales Überwachsen der Maske zu einer geschlossenen Schicht fort, siehe Abb. 5.3. Der grundsätzlichen Idee folgend, sollte die Form, die Größe der Öffnungen und deren Abstand keinen prinzipiellen Einfluss auf die Funktionsweise dieser Technik haben. Jedoch hat sich praktisch gezeigt, dass die Materialqualität des überwachsenen Bereichs stark von der Maskenform bzw. -orientierung und den gewählten Wachstums-Bedingungen abhängt (vgl. Abschnitt 5.3.2 und 6.1).

5.2 Maske

Die für das selektive Wachstum notwendige Teilmaskierung der Oberfläche muss verschiedenen Anforderungen genügen. Welchen Einfluss das Maskenmaterial und die Geometrie des Maskendesigns hat, soll folgender Abschnitt klären.

5.2.1 Maskenmaterial

Bezüglich des Maskenmaterials ist die Gewährleistung einer angemessenen Stabilität unter den für das GaN-Wachstum notwendigen Verhältnissen ein zwingendes Hauptkriterium. Die recht hohen Wachstumstemperaturen von > 1000 °C unter einer Wasserstoff-Atmosphäre sind nicht für alle Materialien geeignet. Zersetzt sich die Maske während des Wachstums, ist die Bedingung für die selektive Epitaxie, dass auf dem maskierten Bereich kein Wachstum stattfindet, nicht mehr gewährleistet. Andererseits können sich Fremdatome, die vom Maskenmaterial stammen, in den Kristall einbauen und zu einer unerwünschten Dotierung führen. Häufig findet aufgrund der hohen Stabilität in der Literatur SiO₂ als Maskenmaterial Verwendung. Daneben werden S_xN_y , TiN, HfN, WSiN u.ä. für die selektive Epitaxie benutzt, wobei hier das Maskenmaterial oft auch als Separations-Schicht für die Herstellung von GaN-Substraten dient [173]. Dann ist absichtlich eine verringerte Stabilität des Maskenmaterials erwünscht, an der die Trennung stattfinden kann. Auch in eigenen Experimenten wurde dieses Verhalten beobachtet und SiO₂ hat sich als stabilste Maske bewährt [174]. Deshalb wurde nahezu ausschließlich SiO₂ bei den hier vorgestellten Proben eingesetzt.

Daneben muss die Maske eine hohe Selektivität aufweisen, d.h. es muss gewährleistet sein, dass kein bzw. nur bedingt Material auf der Maske abgeschieden wird. Die sonst polykristallinen Abscheidungen beeinträchtigen ansonsten das Konzept der selektiven Epitaxie und führen zu zufälligen und unkontrollierbaren Schichtdicken. Diesen Anforderungen genügen die oben genannten Materialien ausreichend.

Wingtilt

Ein oft beobachtetes Phänomen des selektiven Wachstums ist ein Verkippen des Kristallgitters in den lateral überwachsenen Teilen bezüglich der Substrat- bzw. Template-Oberfläche. Diese als Wingtilt bezeichnete Eigenschaft ist unerwünscht, da die an der Maskenkante beginnende Verkippung durch Defektbildung kompensiert werden muss. Es konnte gezeigt werden, dass die Verkippung schon während des Wachstums ausgebildet wird und nicht erst durch thermische Verspannung nach dem Wachstum induziert wird [175]. Als treibende Kraft für die Ausbildung des Wingtilts werden Oberflächenspannungen genannt [176]. Neben den wohl wichtigeren Faktoren wie den GaN-Wachstumsbedingungen wurde auch das Maskenmaterial bzw. dessen Rauhigkeit als Einflussparameter für den Wingtilt beobachtet [177,178]: Je glatter die Oberfläche, desto weniger stark die Verkippung (siehe auch Abschn. 6.3.2).

Im Rahmen dieser Arbeit wurde, wie schon erwähnt, aufgrund der hohen thermischen Stabilität SiO_2 als Maskenmaterial bevorzugt, dessen Abscheidung mittels PECVD bezüglich der Oberflächenrauhigkeit optimiert wurde [179].

5.2.2 Maskendesign

Um das Ziel zu erreichen, durch 3D-Wachstum Ga(In)N-Strukturen zu erzeugen deren Kristallflächen gegenüber der c-Fläche geneigt sind und Facetten mit reduziertem piezoelektrischen Feld aufweisen, ist das Maskendesign von besonderer Beudeutung. Es sollte idealerweise derart konstruiert sein, dass eine homogen strukturierte Oberfläche großflächig zu realisieren ist. Zwingend muss also die Maske an die hexagonale Kristall-Struktur des GaN angepasst und ausgerichtet werden.

Streifenmaske

Die einfachste Maskengeometrie stellt eine Streifenmaske dar, die entlang der zwei Haupt-Richtungen des GaN-Kristalls ausgerichtet werden kann. Für eine Streifenmaske in $\langle 1\overline{1}00 \rangle$ -Richtung sind, wie in Abschnitt 5.3.2 zu sehen sein wird, GaN-Streifen mit dreieck-, trapez- oder rechteckförmigem Querschnitt mit (0001)-, $\{11\overline{2}2\}$ - und

5 Selektive Epitaxie



Abbildung 5.1: Skizze von normalen Pyramiden



Abbildung 5.2: Skizze von inversen Pyramiden

 $\{11\overline{2}0\}$ -Oberflächen erzielbar. Welcher Facettentyp, abhängig von den Wachstumsparametern, bevorzugt wird, ist Schwerpunkt des Abschnitts 6.1. Wird eine Streifenmaske in $\langle 11\overline{2}0 \rangle$ -Richtung des GaN-Kristall ausgerichtet, ist unter den meisten Wachstumsbedingungen nur ein dreieckförmiger Querschnitt mit $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten zu erzielen. Nur wenn das Wachstum frühzeitig gestoppt wird, sind trapezförmige Querschnitte die Folge. Es wurde auch gezeigt, dass direkt auf Saphir die Nitridierung dazu führen kann, $\{1\overline{1}00\}$ -Ebenen zu erzeugen [170]. Gerne wird in der Literatur bei der Beschreibung von Streifenmasken das Größen-Verhältnis zwischen Maskenöffnung und Periode angegeben. Der sogenannte Füllfaktor ergibt sich aus:

$$FF = \frac{b_{open}}{b_{open} + b_{mask}} = \frac{b_{open}}{b_{period}}$$
(5.1)

wobei b_{open} und b_{mask} jeweils die Öffnungs- und Maskenbreite bezeichnen. So ist die lokale Wachstumsrate beispielsweise invers proportional zum Füllfaktor FF, vgl. Gl. 5.7. Jedoch gehen durch die Angabe des reinen Verhältnisses die absoluten Größen-Angaben verloren, die zur Evaluierung bestimmter Kenndaten notwendig sein können.

Punkt- bzw. Hexagonmaske

Neben streifenförmigen GaN-Strukturen sind auch andere dreidimensionale Formen denkbar, die zur hexagonalen Struktur der Gruppe III-Nitride passen. So wurde gezeigt, dass aus punktförmigen oder hexagonalen Öffnungen in der Maske GaN-Pyramiden mit $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten wachsen [180]. Werden die Öffnungen in einem hexagonalen Muster angeordnet, sind auch damit großflächige Bereiche mit semipolarer GaN-Oberfläche denkbar (siehe Abb. 5.1).

In dieser Arbeit wurde zusätzlich ein neuer Ansatz entwickelt, hexagonal angeordnete inverse Pyramiden mit semipolarer Oberfläche zu erzeugen. Die gewünschte strukturierte Oberfläche kann man sich folgendermaßen vorstellen. Sie würde sich als Abdruck einer plastisch verformbaren Masse ergeben, wenn die oben diskutierte Anordnung normaler Pyramiden als Stempel benutzt würde. D.h. eine inverse Pyramide besitzt eine hexagonale Grundfläche, deren sechs Seitenfacetten sich von oben nach unten verjüngen und einem hexagonalen Trichter ähneln (siehe Abb. 5.2). Das Wachstum von inversen Pyramiden kann mit einer Maske geschehen, die zu oben beschriebener das Negativ darstellt. D.h. die Maske besitzt nicht wie oben punktförmige oder hexagonale Öffnungen, sondern das Maskenmaterial wird zu Punkten bzw. Hexagonen strukturiert. Die Umrandung wird dafür freigeätzt, wo das Wachstum im zweiten Epitaxie-Schritt zunächst beginnt und sich unter Ausbildung der Trichter-Form oberhalb des Maskenmaterials fortsetzt. Die Idee, inverse GaN-Pyramiden zu erzeugen, beruht auf mehreren Überlegungen, deren Vorteile in Kapitel 6 näher erörtert werden. In Abschnitt 6.4 wird abschließend eine kurze Zusammenfassung der Vorteile aufgelistet.

5.2.3 Herstellung

Die Herstellung einer strukturierten Maske für die selektive Epitaxie läuft typischerweise folgendermaßen ab: Auf ein GaN-Template wird ganzflächig eine dünne, hier meist 200 nm dicke, SiO₂-Schicht aufgebracht. Sie wurde in unserem Fall meist mittels PECVD abgeschieden, aber auch ein Sputter- oder Verdampfungs-Prozess ist möglich. Anschließend wird photolithographisch eine Lackmaske strukturiert, deren Muster durch trocken- oder nasschemisches Ätzen in das Maskenmaterial übertragen wird. Besondere Sorgfalt ist dann für die Lackentfernung notwendig, bevor die Proben in einem zweiten Epitaxie-Schritt überwachsen werden.

Alternativ kann direkt auf dem GaN-Substrat die Strukturierung eines Negativ-Lacks erfolgen und durch Sputtern des Maskenmaterials mit anschließendem Lift-off-Prozess ein ähnliches Ergebnis erzielt werden. Diese Variante wurde beispielsweise für die Herstellung von sub-Mikrometer-Strukturen verwendet [181]. Der Sputter-Prozess ist jedoch aufwendiger, weshalb meist ersteres Verfahren zum Einsatz kam.

5.3 Defektreduktion

In den 90er Jahren des letzten Jahrhunderts wurde die selektive Epitaxie von Gruppe III-Nitriden intensiv studiert und unter dem Gesichtspunkt einer effektiven Defektreduktion eingesetzt. Diese Entwicklung soll nun kurz umrissen werden.

5 Selektive Epitaxie



Abbildung 5.3: Skizze einer ELO-Probe.



Abbildung 5.4: Skizze einer FACELO-Probe.

5.3.1 ELO(G)

Als ELO, auch ELOG oder LEO, wird die Technik des lateralen epitaktischen Wachstums (engl.: epitaxial lateral overgrowth) bezeichnet, bei der selektive Epitaxie eingesetzt wird, um die Materialqualität durch teilweises Blockieren von Defekten zu verbessern. Die sogenannten Fadenversetzungen, die bedeutendsten Defekte bei verhältnismäßig gutem Material (vgl. Abschnitt 2.4.2), sollen dabei teilweise durch die örtlich begrenzte Maskierung der Oberfläche gestoppt werden. Kann oberhalb dieser Teilmaskierung besseres, defektärmeres Material abgeschieden werden, ist dadurch die Qualitäts-Verbesserung erreicht. Dass die ELO-Technik durchaus effektive Defektreduktion zulässt, konnte 1998 durch die Realisierung eine Laserdiode mit einer Lebensdauer >10000 h auf ELO-Material demonstriert werden. Hierbei wurde der überwachsene Masken-Teil als Puffer für die gepumpte, aktive Zone benutzt [182], was prinzipiell kein Problem darstellt, jedoch den Nachteil der ELO-Technik schon andeutet. Es kann zwar defektreduziertes Material hergestellt werden, es ist jedoch örtlich limitiert auf maximal die Größe der ursprünglichen Maskenoberfläche. Die Qualität oberhalb der Maskenöffnung erfährt keine Defektreduktion und wird daher als gleich groß wie im Template angenommen. Der Vorschlag von Nam et al., durch Wiederholung dieser Prozedur die örtlich gebündelten Defekte von der hochwertigeren Schicht zu entkoppeln, klingt daher naheliegend [183]. Hierbei wird die Maske im zweiten Schritt oberhalb der vorher unmaskierten Fläche platziert. Hinsichtlich des Aufwands und den damit verbundenen Kosten scheint diese Technik jedoch unpraktikabel, da neben den zusätzlichen Prozessierungs-Schritten drei Epitaxie-Fahrten nötig sind. Es hat sich auch zudem nie ein klarer Erfolg erkennen lassen.

5.3.2 FACELO

In weiteren Studien wurde erkannt, dass die kristallographische Ausrichtung der Maske und die Wachstumsparameter wie Temperatur, V/III-Verhältnis, Druck, Komposition des Trägergases und der Füllfaktor (vgl. Abschn. 5.2.2) entscheidenden Einfluss auf die Wachstumskinetik und dadurch Materialqualität des überwachsenen Bereiches haben [184–186]. Eine systematische Untersuchung auf Form und Oberflächenbeschaffenheit von ELO-Proben wurde von Hiramatsu *et al.* hinsichtlich des Einflusses von Wachstumstemperatur und -druck durchgeführt. Hierbei wurden Streifenmasken in $\langle 1\overline{100} \rangle$ - und $\langle 11\overline{20} \rangle$ -Richtung für die selektive Epitaxie herangezogen [171]. Wie schon von Kapolnek *et al.* beobachtet, ist die Ausrichtung der Streifenmaske am darunterliegenden Kristall von Bedeutung hinsichtlich der resultierenden Querschnittsform des GaN-Materials im zweiten Epitaxie-Schritt [187]. Während für Streifen in $\langle 11\overline{20} \rangle$ -Richtung eine Dreieckstruktur mit $\{1\overline{101}\}$ -Facetten für einen breiten Parameterraum beobachtet wird, kann für Streifen entlang der $\langle 1\overline{100} \rangle$ -Richtung der Querschnitt von Dreieck, über Trapez bis hin zu einem Rechteck über die Wachstumsparameter eingestellt werden (vgl. Abschn. 5.2.2).

Die Frage, ob aus diesem Grund eine bestimmte Orientierung zu bevorzugen ist, um die Materialqualität zu steigern, lässt sich aber alleine anhand der Querschnittsform nicht beantworten. Für beide Orientierungen ist es möglich, eine geschlossene, plane Oberfläche zu erhalten, auch wenn dies für Streifen in $\langle 1\overline{1}00 \rangle$ -Richtung einfacher zu erzielen ist. Für die Beurteilung der "richtigen" Masken-Orientierung sind daher intensivere Untersuchungen nötig. Inwiefern die Maskenorientierung die Materialquailtät der 3D-GaN-Schicht beeinflusst, die in dieser Arbeit im Mittelpunkt steht, und was dies für Konsequenzen auf die GaInN-Lumineszenz hat, wird in Kapitel 6 näher erörtert.

Der einstufige ELO-Prozess, der keine Defektreduktion im maskenfreien Bereich aufweist, wurde auf obiger Beobachtung beruhend weiterentwickelt. Wie gezeigt, ist es für Streifen in $\langle 1\overline{1}00 \rangle$ -Richtung möglich, das selektive Wachstums mit Prozessparametern zu beginnen, die zur Ausbildung eines dreieckförmigen Querschnitts führen. Hier wird beobachtet, dass die vom Template stammenden, nach oben laufenden Fadenversetzungen seitlich um etwa 90° abknicken und parallel zur Waferoberfläche weiterlaufen. Wird also nach dem dreidimensionalen Wachstum auf ein stark laterales Wachstum gewechselt, kann schnell eine glatte Oberfläche mit deutlicher Defektreduktion erzielt werden, da die TDs sich nicht zur Oberfläche hin fortsetzen, sondern parallel zur Oberfläche eingebettet werden. Nun ist die defektreduzierte Fläche nicht auf den überwachsenen Teil oberhalb der Maskierung beschränkt (siehe Abb. 5.4). Diese Technik hat sich auch unter dem Namen FACELO (engl.: facet controlled epitaxial lateral overgrowth) etabliert und ermöglicht Defektdichten von etwa $5 \times 10^6 \text{cm}^{-2}$. Die hohe Güte konnte außerdem durch optische Charakterisierungs-Methoden (Linienbreite < 1 meV von D⁰X) bestätigt werden [186].

5.3.3 PENDEO

Der ELO-Idee folgend sieht ein anderer Ansatz, um die Materialqualität zu verbessern, folgendes vor: In ein GaN-Template werden senkrecht Strukturen geätzt, beispielsweise Streifen in $\langle 1\overline{1}00 \rangle$ -Richtung. Die c-Fläche der Streifen bleibt für das anschließende Wachstum weiterhin maskiert und laterales Wachstums findet ausgehend von den $\{11\overline{2}0\}$ -Flanken statt, bis sich eine geschlossene Schicht auch oberhalb der maskierten Streifen gebildet hat. Auch mit dieser Technik lassen sich qualitativ hochwertige Schichten herstellen [188]. Der Name PENDEO, der hierfür gebräuchlich ist, leitet sich vom lateinischen Wort 'pendere' ab und bedeutet: "Ich schwebe, ich hänge".

5.4 3D-GaN-Strukturen

Wie im vorigen Abschnitt ausführlich beschrieben, kann die selektive Epitaxie erfolgreich zur effizienten Defektreduktion eingesetzt werden. In diesem Zusammenhang wurde festgestellt, dass sich abhängig von den Wachstums-Parametern 3D-Strukturen erzeugen lassen, die semipolare Seitenfacetten aufweisen. Inwiefern jedoch diese Wachstums-Parameter geeignet sind, hochqualitative Puffer-Schichten für die Abscheidung von semipolaren QW bereit zu stellen, stellt den Schwerpunkt von Kapitel 6 dar.

5.5 Modellierung

Um die Vorgänge des Massentransports beim selektiven Wachstum anhand eines Modells zu beschreiben, werden Gasphasen-Diffusion und Oberflächen-Migration als die zwei Hauptkomponenten genannt [189, 190]. Es wurde bestätigt, dass für planare Schichten bzw. dünne Filme Gasphasen-Diffusion die Eigenschaften gut beschreiben kann. Werden die epitaktischen Filme jedoch dicker, könne Oberflächen-Migration nicht mehr verlachlässigt werden [191], insbesondere wenn sich dadurch bedingt unterschiedliche Facetten-Typen ausbilden, wie das bei einem trapezförmigen Streifen der Fall ist.
5.5 Modellierung



Abbildung 5.5: Schematisches Diagramm des Gasphasen-Diffusions-Modells in zwei Dimensionen [192].

5.5.1 Gasphasen-Diffusion

Die Gasphasen-Diffusion lässt sich vereinfacht durch folgendes Modell skizzieren (Abbildung 5.5) [192]: Bei der Gasphasen-Epitaxie liegt eine bestimmte Materialkonzentration C_0 vor. In der Gasphase selbst geht kein Material verloren und es gilt:

$$\nabla^2 C = 0 \tag{5.2}$$

Da auf den maskierten Bereichen kein Wachstum stattfindet, wird kein Material aus der Gasphase in diesem Bereich entnommen. Es gilt:

$$\left. \frac{\partial C}{\partial z} \right|_{z=0} = 0 \tag{5.3}$$

Auf den nicht-maskierten Bereichen ist Wachstum möglich und Material kann aus der Gasphase entnommen und in das Kristallgitter eingebaut werden. Es gilt folgende Gleichung an der Kristall-Oberfläche:

$$D(\vec{n} \cdot \nabla C) = kC \tag{5.4}$$

Hierbei stellt \vec{n} den Normalenvektor senkrecht zur Oberfläche dar. Der Diffusionskoeffizient D ist materialspezifisch und von Wachstumsdruck und -temperatur abhängig. Es gilt [192]:

$$D = D_{ref} \left(\frac{p_{ref}}{p}\right) \left(\frac{T}{T_{ref}}\right)^{1.7}$$
(5.5)

mit $T_{ref} = 300 K p_{ref} = 1013 h Pa$ und $D_{ref} = 0.39 cm^2/s$. Die Diffusion erhöht sich mit kleinerem Druck und höherer Temperatur, die Moleküle werden mobiler. Diese Eigenschaft konnte experimentell anhand der GaInN-QW-Eigenschaften nachgewiesen werden (vgl. Abschn. 7.3). Die Einbaukonstante k beschreibt, wieviel Material

5 Selektive Epitaxie

tatsächlich eingebaut wird, wenn die Atome am "richtigen" Ort angekommen sind. Adsorption als auch Desorption werden hierbei berücksichtigt.

In Abschnitt 7.2.1 wird gezeigt, dass durch das Gasphasen-Diffusions-Modell das Quantenfilm-Wachstums sehr gut beschrieben werden kann. In Kombination mit einer detaillierten Analyse von Quantenfilm-Dicke und Komposition entlang einer Facette konnte insbesondere festgestellt werden, dass sich ein unterschiedlicher charakteristischer Wert D/k für unterschiedliche Facetten-Typen ergibt. Dies könnte u.a. die verschiedenen Einbau-Effizienzen der Precursoren wie beispielsweise Indium erklären.

5.5.2 Oberflächen-Migration

Da die hier untersuchten Strukturen Dimensionen erreichen, die nicht mehr nur als dünne Schichten gelten und ggf. Facetten unterschiedlichen Typs aufweisen, sollte neben der Gasphasen-Diffusion auch Oberflächen-Migration eine Rolle spielen und deshalb berücksichtigt werden. Diese Eigenschaft kann folgendermaßen beschrieben werden:

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = D_s \frac{\partial^2 C_s}{\partial x^2} - \frac{C_s}{\tau}$$
(5.6)

Mit D_s wird hiermit die Oberflächen-Diffusions-Konstante beschrieben, τ bezeichnet die mittlere Lebensdauer des adsorbierten Precursors und C_s dessen Konzentration im diffusionsfähigen Stadium auf der Epitaxie-Oberfläche [192]. Findet man nun beispielsweise unterschiedliche Schichtdicken auf eng benachbarten Facetten-Typen unterschiedlicher Orientierung, deutet dies auf Facetten-abhängige Werte für D_s und τ hin (vgl. Abschn. 7.4).

5.5.3 Wachstumsrate

Nun gibt es also Bereiche, in denen Material aus der Gasphase verbraucht wird, und andere, in denen kein Materialverlust stattfindet. Dies führt zu einem Konzentrations-Gradienten entlang der Oberfläche, der dazu tendiert, durch Diffusion und Migration ausgeglichen zu werden. In den Wachstumsbereichen kommt es daher zu einer erhöhten Wachstumsrate verglichen mit einer unstrukturierten Oberfläche. Bei verhältnismäßig kleinen Abmessungen der maskierten Bereiche kann davon ausgegangen werden, dass dieselbe Materialmenge eingebaut wird wie auf unstrukturierten Substraten. Es erhöht sich die Wachstumsrate in den Öffnungen entsprechend dem Verhältnis ihrer Flächen. Man kann für die effektiv erhöhte Wachstumsrate r_{eff} schreiben:

$$r_{eff} = r_0 \frac{A}{A_{open}} = r_0 \cdot FF \tag{5.7}$$

Dabei bezeichnet r_0 die Wachstumsrate auf einem unstrukturierten Substrat, A ist die Fläche innerhalb eines Periodenintervalls und A_{open} die Fläche innerhalb der Maskenöffnung. FF steht für den in Gl. 5.1 definierten Füllfaktor. Diese Annahme für die hier zugrundeliegenden Strukturen konnte experimentell bestätigt werden (Abschn. 7.5 und [193,194]). Was für die spätere Anwendung zu berücksichtigen bleibt, ist, dass sich trotz konstanten abgeschiedenen Volumens die sich ergebende Oberfläche der 3D-Strukturen ändern kann, wenn unterschiedlich geneigte Facetten gezüchtet werden. Dies kann Konsequenzen auf die Dicke der später abgeschiedenen Quantenfilme und folglich der sich ergebenden Lichtemission haben.

In dieser Arbeit wird selektive Epitaxie eingesetzt, um dreidimensionale Ga(In)N-Stukturen abzuscheiden, deren Form an die hexagonale Kristallstruktur der Gruppe III-Nitride angepasst ist und Oberflächen aufweist, die nicht parallel zur c-Oberfläche orientiert sind. Damit gelingt es, auf einem großflächigen Substrat Flächen mit reduziertem piezoelektrischen Feld zu erzeugen, was die strahlende Rekombination verbessern sollte. Das Wachstum geschieht dabei auf hochqualitativen GaN-Templates, was zugleich eine hohe Materialgüte verspricht. Das folgende Kapitel widmet sich den Eigenschaften derart hergestellter 3D-GaN-Strukturen im Detail und versucht, geeignete Herstellungs-Bedingungen anzugeben. Zur Beurteilung der Experimente werden neben strukturellen Untersuchungen optische Eigenschaften analysiert, wobei örtlich hochaufgelöste Messungen Aussagen über die lokale Verspannungs- und Defektsituation zulassen.

6.1 Wachstum von 3D-Ga(In)N

Detaillierte Untersuchungen zum selektiven Wachstum von Gruppe III-Nitriden wurden schon seit Anfang der 1990er Jahre unternommen. Dabei stand jedoch meist das Ziel der Defektreduktion durch das ELO(G) bzw. FACELO-Verfahren im Vordergrund (vgl. Abschnitt 5.3). Die Proben wurden in diesem Zusammenhang dahingehend untersucht, eine planare geschlossene c-orientierte Oberfläche mit möglichst geringer Defektdichte zu realisieren. Dort wurde bereits festgestellt, dass verschiedene Wachstumsparameter die Form der 3D-Strukturen, abhängig von der Maskenorientierung, beeinflussen.

Ziel unserer Untersuchungen ist jedoch, nicht-planare Strukturen zu realisieren, die großflächig semipolare Oberflächen aufweisen. Da die erzielbare Materialqualität ein entscheidendes Kriterium für die Ausgangsleistung späterer Bauelemente darstellt, sind intensive Studien der GaN-Wachstumsbedingungen notwendig, die einerseits die erwünschte Oberflächen-Orientierung, andererseits eine qualitativ hochwertige Schicht ermöglichen, die als Puffer für das Abscheiden der GaInN-basierten aktiven Zone dient. Strukturelle Untersuchungen unter Zuhilfenahme von optischer und Rasterelektronen-Mikroskopie (REM) sowie hochauflösender Röntgenbeugung (engl.: high resolution x-ray diffraction, HRXRD) werden deshalb kombinert mit spektroskopischen Messmethoden wie Photo- und Kathodolumineszenz (PL, CL). Die Variationen im Wachstum werden dabei an normalen und inversen Pyramiden durchgeführt, wobei die Ergebnisse anschließend auch auf die Streifen-Geometrie übertragen werden. Detaillierte Analysen sind hierzu auch in Ref. [195] zu finden.

6.1.1 Formation von Facetten

Unter typischen GaN-Wachstumsbedingungen in der MOVPE wurde festgestellt, dass die laterale Wachstumsrate in a-Richtung schneller ist als in der dazu senkrechten m-Richtung. Dies führt dazu, dass bei punktförmigen Öffnungen in der Maske, wo aus der Maskenöffnung heraus das Wachstum beginnt, die am langsamsten wachsende Facette ausgebildet wird. In diesem Fall sind dies sechs {1101}-Ebenen, die eine Pyramide mit hexagonaler Grundfläche ausbilden (Abb. 6.1).

Dasselbe Argument ist beim Wachstum von inversen Pyramiden anzuwenden. Auch hier ist die Wachstumsrate in a-Richtung schneller. Dies hat zur Folge, dass, wenn von außen startend die punktförmige Maskierung überwachsen wird, sich $\{11\overline{2}x\}$ -Ebenen ausbilden müssen. Abhängig von den genauen Parametern (vgl. folgende und Abschn. 5.3) kann so eine inverse Pyramide mit semipolaren $\{11\overline{2}2\}$ -Facetten entstehen (Abb. 6.2).

6.1.2 Variation des V/III-Verhältnises

Zunächst wird der Einfluss des V/III-Verhältnisses auf Form und Materialqulität der GaN-Schicht im zweiten Epitaxie-Schritt untersucht. Dabei wird ausgehend von den Standard-Wachstumsparametern für c-GaN gestartet. Dies bedeutet bei dem hier benutzten Reaktor ein Wachstum bei einer Temperatur von T = 1120 °C, einem Reaktordruck von p = 150 hPa und einem NH₃ zu TMGa-Verhältnis von V/III = 1800.





Abbildung 6.1: Entstehung von normalen Pyramiden mit $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten. Rote Pfeile markieren schnelle Wachstumsrate in a-Richtung, Inset: Maskendesign.

Abbildung 6.2: Entstehung von inversen Pyramiden mit $\{11\overline{2}2\}$ -Facetten. Rote Pfeile markieren schnelle Wachstumsrate in a-Richtung, Inset: Maskendesign.

REM

Betrachtet werden zunächst die Strukturen, bei denen die Maskengeometrie die Ausbildung von normalen Pyramiden erwarten lässt. Wie im REM-Bild 6.3 zu sehen, sind bei einem V/III-Verhältnis von 1800 dreidimensionale Strukturen zu erkennen. Doch kein bestimmter Facetten-Typ wird bevorzugt ausgebildet und eine ausgeprägte Homogenität ist nicht gegeben. Wird das V/III-Verhältnis nun sukzessive verringert (V/III = 900, 600, 400), entsteht ein immer stärker betontes 3D-Wachstum. Während bei einem moderaten V/III-Verhältnis von 900 eine gute Homogenität vorherrscht, geht diese immer mehr verloren, je kleiner der Ammoniak-Fluss gewählt wird. Dann sind neben Pyramiden, die gerade so groß sind wie die Maskenöffnung, weitere 3D-



Abbildung 6.3: Normale Pyramiden gewachsen mit T = 1120 °C , p = 150 hPa und V/III = 1800 (a), 900 (b), 600 (c) und 400 (d).



Abbildung 6.4: Inverse Pyramiden gewachsen mit T = 1120 °C , p = 150 hPa und V/III = 1800 (a), 900 (b), 600 (c) und 400 (d).

Gebilde zu finden, die zwar kristallographisch richtig orientiert sind, sich jedoch in Größe und Form stark unterscheiden. Ein geregelter Austausch zwischen den einzeln wachsenden Pyramiden und ein gleichmäßiger Einbau der beteiligten Spezies scheint nicht gegeben, und sobald eine Pyramide größer wird als die der Umgebung, vergrößert sich diese auf Kosten der Nachbarn. Eine leichte Variation der Maskenöffnung könnte hierfür schon die Ursache sein und ist in der Praxis nahezu nicht zu vermeiden.

Betrachtet man auf demselben Wafer die Bereiche, bei denen die Ausbildung von inversen Pyramiden erwartet wird, ist Folgendes festzustellen (Abb. 6.4): Bei einem vergleichsweise hohen V/III-Verhältnis von 1800 ist eine vollständig geschlosse Oberfläche zu beobachten. Die Probe entspricht daher einer typischen ELO(G)-Struktur. Um das laterale Wachstum zu verringern und die Ausbildung der 3D-Struktur zu fördern, kann, wie beim Wachstum von normalen Pyramiden, das V/III-Verhältniss reduziert werden. Ganz im Gegensatz dazu weisen jedoch selbst bei sehr kleinem V/III-Verhältnis die invers gewachsenen Pyramiden eine perfekte Homogenität auf der gesamten Fläche auf. Der Hauptgrund dafür liegt in der Wachstumkinetik der Struktur. Da die Maske nur punktuell die Oberfläche bedeckt und deshalb keine Trennung in einzelne Bereiche verursacht, kann ein ständiger Austausch der beteiligten Atome stattfinden, um den energetisch günstigsten Platz für den Einbau zu finden. Dies verspricht neben der erwünschten semipolaren Oberfläche eine hohe Materialqualität.

HRXRD

Um die Materialqualität zu beurteilen, wurden systematische Röntgenbeugungs-Experimente durchgeführt. In Diagramm 6.5 sind die XRD-Halbwertsbreiten von symmetrischen und asymmetrischen Reflexen für die oben beschriebenen Proben gezeigt (inverse Pyramiden). Die Halbwertsbreiten nehmen für ein kleiner werdendes V/III-Verhältnis ab und bilden bei einem Verhältnis von 400 ein Optimum. XRD-Werte für



Abbildung 6.5: XRD Halbwertsbreiten für inverse GaN-Pyramiden gewachsen mit T = 1120 °C , p = 150 hPa und variablem V/III-Verhältnis.

die asymmetrischen Reflexe von $< 350 \,\mathrm{arcsec}$, die sowohl Stufen- als Schraubenversetzungen widerspiegeln, sind für heteroepitaktisches semipolares Material exzellente Werte und in dieser Größe in der Literatur nicht bekannt.

Photolumineszenz

Zur weiteren Evaluierung der Materialqualität wurde auf den 3D-GaN-Strukturen ein jeweils nominell identischer GaInN-Quantenfilm abgeschieden, der als Monitor bei Lumineszenz-Experimenten Aussagen über die Eigenschaften des darunterliegenden





Abbildung 6.6: PL-Spektren eines GaInN-QW gewachsen auf inversen GaN-Pyramiden, mit einem V/III-Verhältnis für das 3D-GaN-Wachstum von 900, 600, 400 und 200.

Abbildung 6.7: Normierte PL-Spektren aus Abb. 6.6 auf die semipolare Fläche der inversen Pyramiden.

GaN zulassen soll, wobei in diesem Zusammenhang nicht auf die Details des GaInN-Wachstums bzw. die Besonderheiten dieser ternären Verbindung eingegangen werden soll. Dies geschieht ausführlich in Kapitel 7. Es kann somit direkt bestimmt werden, wie gut die einzelnen GaN-Wachstums-Parameter für die spätere Anwendung im Lichtemittierenden Bauteil geeignet sind. Hier sollen zunächst nur die QW-Intensitäten der zugrundeliegenden PL-Messungen verglichen werden. Dabei stammt das Licht ausschließlich von der semipolaren Fläche der inversen Pyramiden und nicht von der noch teilweise vorhandenen c-Fläche (bestätigt durch lokal aufgelöste CL-Untersuchungen). Es ist zu erkennen, dass, je kleiner das V/III-Verhältnis, desto höher die erzielbare Intensität (Abb. 6.6). Trotz sorgfältiger Justage ist die erhöhte Intensität der PL-Messung jedoch nicht zwingend mit einer erhöhten Materialqualität gleich zu setzen. Um die Qualität zu evaluieren, ist es notwendig, die genaue Geometrie der Strukturen zu berücksichtigen. Wie in Abb. 6.4 zu sehen, unterscheidet sich die Größe der Pyramiden erheblich, trotz Verwendung derselben Maskengeometrie und unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Wachstumsraten. Bei der Beurteilung der PL-Messungen muss deshalb berücksichtigt werden, dass einerseits eine unterschiedlich große semipolare Fläche angeregt wird, die zur Lumineszenz beitragen kann. Andererseits ist durch die unterschiedliche Textur ein unterschiedliches Extraktions-Verhalten gegeben, was die dedektierbare Stärke der Lumineszenz beeinflusst.

In Diagramm 6.7 wurden aus diesem Grund die gemessenen absoluten Intensitäten mit der aus den REM-Bildern ermittelten Fläche korreliert. Dem Diagramm zufolge scheint selbst nach der Normierung ein reduziertes V/III-Verhältnis von Vorteil zu sein, da unabhängig von der gewählten Messtemperatur eine erhöhte Intensität ermittelt wurde. Es bleibt zu erwähnen, dass absichtlich nicht die oft übliche, durch PL-Experimente ermittelte IQE (interne Quanteneffizienz), das Verhältnis der bei den zwei Messtemperaturen ermittelten Intensitäten, als Optimierungsparameter herangezogen wird [196]¹. Man erhielte: IQE = 100% für ein V/III-Verhältnis von 900 trotz absolut geringerer Intensität. Unter dem Gesichtspunkt, dass die absoluten Intensitäten höher gewichtet werden als die relativen, befindet sich das Ergebnis in Übereinstimmung mit den Werten aus den XRD-Experimenten.

¹Zur exakten Bestimmung der IQE wäre eine leistungsabhängige Messung notwendig. Diese wurde nicht durchgeführt.



Abbildung 6.8: Normale Pyramiden gewachsen mit V/III = 400, p = 150 hPa und T = 1120 °C (a), 1060 °C (b), 950 °C (c) und 850 °C (d).

6.1.3 Variation der Temperatur

Basierend auf obigen Ergebnissen wurde für die nun folgende Wachstums-Serie ein vergleichsweise kleines V/III-Verhältnis von 400 gewählt (Standard-Bedingungen: 1800). Der Einfluss einer unterschiedlichen Wachstumstemperatur soll nun untersucht werden. Wieder wird Wert auf eine möglichst dreidimensionale Oberfläche gelegt, wobei eine hohe Materialqualität gewährleistet werden soll, die durch Lumineszenz-Experimente zu bestätigen ist. Ein Absenken der Temperatur ändert dabei einerseits die Mobilität der Adatome, andererseits beeinflusst es das effektive V/III-Verhältnis durch eine recht temperaturabhängige Ammoniak-Zerlegung. Welcher Effekt dabei der dominierende ist, kann nicht vollständig getrennt behandelt werden.

REM

Abb. 6.8 zeigt den Einfluss der Wachstumstemperatur auf die Geometrie von normal gewachsenen Pyramiden. Bei einer Temperatur von T = 1120 °C, der Standard-Temperatur für c-orientiertes GaN, ist eine sehr schlechte Homogenität der gewachsenen Strukturen zu erkennen, siehe Abschnitt 6.1.2. Diese verbessert sich mit Reduktion der Temperatur. Es sind jedoch weiterhin zufällig gewachsene Kristallite zu finden, deren Orientierung nicht zwingend der des Templates folgt und die Texturierung stört. Wird die Temperatur auf sehr niedrige Werte um 850 °C gesetzt, kann man beobachten, wie auf der oberen Spitze der normalen Pyramide weitere Strukturen zu wachsen beginnen. Zusätzliche pyramidale Formen entstehen auf der Spitze und erscheinen invertiert zu ursprünglichen. Eine zu tiefe Temperatur ist demnach für die hier untersuchte Anwendung nicht geeignet.

Auch beim Wachstum von inversen GaN-Pyramiden ist ein ähnliches Temperaturverhalten zu erkennen (Abb. 6.9). Mit Erniedrigung der Reaktortemperatur verringert sich das Verhältnis von lateral zu vertikalem Wachstum, was dem Ausbilden



Abbildung 6.9: Inverse Pyramiden gewachsen mit V/III = 400, p = 150 hPa und T = 1120 °C (a), 1060 °C (b), 950 °C (c) und 850 °C (d).

der 3D-Strukturen nützt. Die noch deutlich vorhandene c-Fläche bei 1120 °C ist bei 1060 °C erheblich, bei 950 °C vollständig verschwunden. Bei zu niedriger Temperatur (850 °C) ist jedoch das Entstehen von recht rauhen Oberflächen zu erkennen und deutet auf ein defektreicheres und unvorteilhaftes Wachstum hin.

HRXRD

Anhand obiger Untersuchungen wurde festgestellt, dass eine moderat reduzierte Temperatur zu bevorzugen ist, um semipolare Oberflächen großflächig zu erzeugen. Nun soll mittels Röntgenanalyse überprüft werden, ob eine reduzierte Wachstumstemperatur die Materialqualität nicht zu sehr beeinträchtigt. Abb. 6.10 zeigt, dass eine Reduktion der Wachtumstemperatur zu einer Verbreiterung der Reflexe führt und damit ggf. zu einer Verschlechterung der Qualität. Es ist jedoch zu berücksichtigen, dass gerade bei der hohen Temperatur eine vergleichsweise große und in diesem Zusammenhang unerwünschte c-Fläche vorhanden ist. Demnach muss ein Kompromiss zwischen Form und Qualität der Strukturen gefunden werden. Eine Wachstumstemperatur von 950°C liefert neben der erwünschten Form gute Röntgen-Werte.

Photolumineszenz

Auf diesen Strukturen wurde wieder ein GaInN-QW zur Beurteilung der GaN-Materialqualität als Monitor für die PL-Analyse benutzt (Abb. 6.11 und 6.12). Offensichtlich hat die reduzierte Temperatur entgegen der eigentlichen Erwartung keinen negativen Einfluss auf die Lumineszenz. Im Gegenteil, die beste Probe wurde mit einer Temperatur von 950 °C hergestellt. Dieses Urteil beruht wieder auf dem Vergleich der absoluten und nicht der relativen Intensitäten der PL-Messungen bei Raum- und Tieftemperatur, vgl. Abschnitt 6.1.2.



Abbildung 6.10: XRD-Halbwertsbreiten für inverse GaN-Pyramiden gewachsen mit V/III = 400, p = 150 hPa und variabler Temperatur.

6.1.4 Variation des Drucks

Desweiteren wurde der Einfluss des Reaktor-Drucks auf Form und Qualität der 3D-Strukturen untersucht. Dabei wurde das Wachstum bei T = 1120 °C , V/III = 900 und einem Reaktordruck von p = 150 und 250 hPa durchgefürht.

300



 \Rightarrow T = 15K \Rightarrow T = 295K

¢ G

Abbildung 6.11: PL-Spektren eines GaInN-QW gewachsen auf inversen GaN-Pyramiden, mit einer Temperatur für das 3D-GaN-Wachstum von $1120 \,^{\circ}$ C, $1060 \,^{\circ}$ C, $950 \,^{\circ}$ C und $850 \,^{\circ}$ C.

Abbildung 6.12: Normierte PL-Spektren aus Abb. 6.11 auf die semipolare Fläche der inversen Pyramiden.



Abbildung 6.13: Normale und inverse Pyramiden abgeschieden mit T = 1120 °C , V/III = 900, und p = 150 (a) und 250 hPa (b).

REM

In Abb. 6.13 ist zu erkennen, dass ein erhöhter Reaktordruck vorteilhaft für ein dreidimensionales Wachstum ist. Ähnlich wie bei einem niedrigen V/III-Verhältnis findet man bei den normalen Pyramiden recht unterschiedlich große Strukturen, wenn der Druck erhöht wird. Bei den inversen Pyramiden, wo stets eine perfekte Homogenität vorherrscht, schlägt sich dieser Trend in einem besseren 3D-Wachstum nieder. Da insgesamt bei dieser Proben-Serie die Reaktor-Temperatur und das V/III-Verhältnis vergleichsweise hoch gewählt wurde, sind noch große c-Flächen vorhanden. Die Oberflächen-Qualität zeigt bei der Probe mit erhöhtem Druck bessere Eigenschaften.

HRXRD

Diesem Trend folgend, kann eine erhöhte Materialqualität für die Probe, die bei höherem Druck abgeschieden wurde, mittels Röntgenbeugungs-Experimenten bestätigt werden. Alle Reflexe zeigen eine deutlich niedrigere Halbwertsbreite und damit verbesserte Kristallqualität (Abb. 6.14).

Photolumineszenz

Interessanterweise ist bei den Lumineszenz-Experimenten nun ein zusätzlicher Peak bei etwa 500 nm zu erkennen, der bei den Proben mit niedrigerem Druck nicht zu sehen war. Dieser stammt von der noch vorhandenen c-Fläche (hohe Temperatur, hohes V/III-Verhältnis) und ist u.a. aufgrund des stärkeren piezoelektrischen Feldes rotverschoben (Abb. 6.15 und Abschnitt 3.1.3). Es zeigt sich damit eindeutig, dass mit höherem Druck die GaN-Materialqualität für das GaInN-Wachstum bessere Eigenschaften aufweist und damit zu bevorzugen ist.



Abbildung 6.14: XRD-Halbwertsbreiten für inverse GaN-Pyramiden abgeschieden mit V/III = 900, T = 1120 °C und p = 150 und 250 hPa.

6.1.5 Oberflächenoptimierung

Die bisher gefundenen Ergebnisse zeigen, dass ein kleines V/III-Verhältnis, eine moderate Wachstumstemperatur und ein erhöhter Druck förderlich für das dreidimensionale Wachstum sind. Dabei ergeben sich nicht nur zur c-Fläche verkippte Oberflächen, wie sie wegen des reduzierten piezoelektrischen Feldes gewünscht sind. Ebenso wurde gezeigt, dass die Materialqualität durch die gefundenen Wachstumsparamter positiv beeinflusst wird. Das 3D-Wachstum wird durch die Änderung des lateralen (a- und m-Richtung) zu vertikalen (c-Richtung) Wachstums ermöglicht. Es bleibt die





Abbildung 6.15: PL-Spektren eines GaInN-QW abgeschieden auf inversen GaN-Pyramiden mit einem Reaktordruck für das 3D-GaN-Wachstum von 150 und 250 hPa.

Abbildung 6.16: PL-Spektren aus Abb. 6.15 normiert auf die semipolare Fläche der inversen Pyramiden.



Abbildung 6.17: REM-Aufnahme von inversen Pyramiden ohne (links) und mit Oberflächen-Optimierung (rechts).

Frage zu klären, ob es eine unterschiedliche Wachstumsrate zwischen den zwei lateralen Hauptrichtungen der hexagonalen Struktur gibt und ob diese ebenso von den Wachstums-Paramtern abhängt.

REM

Betrachtet man eine inverse Pyramide, die mit oben gefundenen Parametern hergestellt wurde, detaillierter, erkennt man, dass nicht nur ein Facetten-Typ vorherrscht. Neben sechs rechteckförmigen $\{11\overline{2}2\}$ -Facetten sind 30° verdreht weitere sechs, nun dreieckförmige $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten zu finden (Abb. 6.17, links). Dies deutet darauf hin, dass die Wachstumsgeschwindigkeit unter diesen Bedingungen in a- und m-Richtung ähnlich groß ist. Wie sich in Abschnitt 7.5 zeigen wird, kann jedoch das Vorhandensein von unterschiedlichen Facetten-Typen zu unterschiedlichen Emissions-Wellenlängen des darauf abgeschiedenen GaInN-QWs führen. Diese für bestimmte Anwendungen unerwünschte Eigenschaft kann durch einen zusätzlichen Wachstumsschritt verbessert werden. Indem der Unterschied zwischen den Wachstumsraten in a- und m-Richtung vergrößert wird, kann ein Facetten-Typ herausgearbeitet werden. Die rechte REM-Aufnahme in Bild 6.17 zeigt eine Probe, bei der bei ansonsten gleichen Bedingungen die Wachstumstemperatur innerhalb der letzten 10 Wachstumsminuten von 950°C auf 1120 °C erhöht wurde. Wie zu sehen ist, kann durch den zusätzlich Schritt mit erhöhter Wachstumstemperatur das Wachstum in a-Richtung verstärkt werden und somit die Ausbildung von $\{11\overline{2}2\}$ -Facetten fördern. Der Gegenpart von $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten wird dabei unterdrückt, obwohl er zuvor sogar dominierte. Obwohl nicht ausgeschlossen

werden kann, dass es bei diesem Schritt zu Umverteilungs-Prozessen zwischen den Facetten-Typen kommt, wird diese Möglichkeit als unwahrscheinlich eingestuft.

Oberflächen-Rauigkeit

Die zwei möglichen semipolaren Facetten-Typen wurden bezüglich ihrer Oberflächen-Rauigkeit näher untersucht. Wie bereits in früheren Arbeiten erkannt, ergibt sich eine glattere Oberfläche für die langsam wachsende $\{1\overline{1}01\}$ -Facette im Vergleich zur $\{11\overline{2}2\}$ -Facette [174]. Quantitativ wurden die zwei Facetten-Typen nach Optimierung der Wachstumsparameter mittels AFM untersucht. Dafür wurde ein spezieller Halter benutzt, der eine Ausrichtung der Facetten-Oberfläche parallel zum Probentisch erlaubt. Für einen (1 µm x 1 µm)-Scan wurde für die $\{1\overline{1}01\}$ -Facette eine Rauhigkeit von nur 0.21 nm RMS bestimmt. Die $\{11\overline{2}2\}$ -Facette weist eine leicht rauhere Oberfläche mit einem Wert von 0.33 nm RMS auf. Es ist nochmals zu betonen, dass diese Werte an Proben erzielt wurden, die bereits einen eingebetteten GaInN-QW besitzen, der typischerweise die Rauigkeit erhöht. Die Ergebnisse können deshalb als besonders gut betrachtet werden.

6.1.6 Koaleszierte Strukturen

Zur Verbesserung der Materialqualität wird beim sogenannten FACELO-Prinzip der Effekt ausgenutzt, dass die zunächst in c-Richtung verlaufenden Fadenversetzungen abknicken und sich parallel zur Substratoberfläche fortsetzen und dadurch in die Struktur eingebettet werden können (vgl. Abschnitt 5.3.2). Soll diese Technik auf die in dieser Arbeit untersuchten Strukturen übertragen werden, darf die strukturierte 3D-Oberfläche keinesfalls planarisiert werden und die semipolaren Oberflächen dadurch verloren gehen. Diese Gefahr besteht bei der Wahl von Wachstums-Parametern mit bevorzugtem lateralen Wachstum und einer suboptimalen Ausrichtung der Maske am Halbleiterkristall. Eine Punktmaske scheint hierfür bevorzugt zu sein, da eine leichte Dejustage der Maske toleriert werden kann. Die Ausbildung inverser Pyramiden ist wiederum gegenüber der von normalen Pyramiden zu bevorzugen, da eine Bündelung der abknickenden Fadenversetzungen in einem Punkt zu erwarten ist mit gleichzeitig erhöhter Homogenität.

Abb. 6.18 zeigt, dass diese Idee in idealer Weise zu realisieren ist. Wie bereits erläutert (Abschn. 6.1.1), dominieren während des Überwachsens der Maske typischerweise die schnell wachsenden $\{11\overline{2}2\}$ -Facetten. Stoßen diese nach vollständigem Überwachsen



Abbildung 6.18: REM-Aufnahme einer koaleszierten Struktur. Die 3D-Strukturierung wird zur Qualitätsverbesserung in höher gelegene Bereiche transformiert.

der Maske in einem Punkt zusammen, beginnt sich der langsam wachsende {1101}-Facetten-Typ auszubilden, wie es vom Volumen-Kristall-Wachstum bekannt ist. Dieses Verhalten bleibt schließlich für das weitere Wachstum bestehen. Die inversen Pyramiden in der koaleszierten Probe weisen nur mehr einen semipolaren Facetten-Typ auf und zeichnen sich durch eine großflächige Homogenität aus (Abb. 6.18). Die Strukturen sind somit absichtlich und kontrolliert erzeugte "V-Defekte", wie sie oftmals beim Wachstum von GaInN beobachtet werden [197].

6.2 Defekte

Neben der Möglichkeit, nicht- und semipolares Material mit der gewünschten Orientierung zu realisieren, ist die Materialqualität von entscheidender Bedeutung für die Realisierung hocheffizienter Bauelemente. Defekte im Halbleitermaterial wirken oft als nichtstrahlende Rekombinations-Zentren (vgl. Abschn. 2.4) und reduzieren gegebenfalls die Vorteile, die durch ein reduziertes piezoelektrisches Feld gewonnen werden. Dies ist bis heute das Hauptproblem, wenn planares nicht- und semipolares Material auf Fremdsubstraten abgeschieden wird (siehe Abschn. 4.5). Neben den beim corientierten GaN am häufigsten anzutreffenden Fadenversetzungen ergibt sich beim Wachstum von nicht- und semipolaren Gruppe III-Nitriden eine zusätzliche Problematik durch das Auftreten von Stapelfehlern [45]. Diese sind optisch aktiv und weisen ganz spezielle Charakteristika auf (vgl. Abschn. 2.4.3). Der folgende Abschnitt wird sich aus diesem Grund genauer mit der Frage von Defekten beschäftigen, die möglicherweise in den hier vorgestellten Proben zu finden sind.

6.2.1 Versetzungen

Wie in Abschnitt 2.4 erklärt, sind Fadenversetzungen die am häufigsten gefundenen Defekte, die aufgrund der Gitterfehlanpassung zwischen Epitaxie-Schicht und Substrat entstehen. Das Abscheiden einer hochqualitativen GaN-Schicht auf c-orientiertem Saphir, das als Template-Material für das selektive Wachstum benutzt wird, wurde einer detaillierten Studie unterzogen. Durch ein optimiertes Prozedere einschließlich einer defektreduzierenden SiN-Zwischenschicht kann die Fadenversetzungs-Dichte typischerweise auf etwa $1-2 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$ [127] reduziert werden. Dieses Material dient nun als Quasi-Substrat für das 3D-GaN-Wachstum.

Streifen mit $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten

Zur quantitativen Analyse von Versetzungen, insbesondere von Fadenversetzungen, kann bei $\{1\overline{1}01\}$ -Flächen nicht auf die Methode des selektiven Ätzens mit anschließendem Auszählen der Vertiefungen durch Analyse von AFM-Topographie-Bildern zurückgegriffen werden, wie dies oftmals bei c-orientiertem GaN angewandt wird [199]. Dies liegt daran, dass typischerweise genau die $\{1\overline{1}01\}$ -Oberflächen nach dem Ätzvorgang zurückbleiben. Für eine aussagekräftige Bewertung muss deshalb auf die aufwendigere Methode der TEM-Analyse zurückgegriffen werden. Bild 6.19 zeigt exemplarisch eine TEM-Aufnahme eines GaN-Streifens mit $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten (von I. Knoke, Fraunhofer Institut IISB Erlangen). Folgende Eigenschaften sind den Bildern zu entnehmen: Wie zu erwarten, ist eine effektive Defekt-Reduktion im Template durch die SiN-Zwischenschicht zu erkennen (Abb. 6.19 (c) und (d)). Die verbleibenden, nicht geblockten Fadenversetzungen setzen sich in c-Richtung fort und können durch die Maskenöffnung in den GaN-Streifen vordringen (Abb. 6.19 (d)). Dort ist ein seitliches Abknicken der Versetzungslinien zu beobachten. Soweit entspricht die Analyse den Erwartungen, die der FACELO-Technik zugrunde liegen (vgl. Abschn. 5.3.2). Jedoch ist ebenso eine erhebliche Anzahl an neu generierten Defekten mit netzartiger Struktur im Ubergangsbereich zwischen Post, dem Bereich oberhalb der Maskenöffnung, und Wing, dem Bereich oberhalb der Maske, zu erkennen (Abb. 6.19 (e)). Wie in Abschnitt 6.3.2 gezeigt wird, konnte durch Röntgen-Messungen ermittelt werden, dass die Netzebenen im überwachsenen Teil eine Verkippung gegenüber dem Template aufweisen,



Abbildung 6.19: Schematische Darstellung der Defekt-Struktur in einer GaN-Streifen-Probe mit {1101}-Facetten (a). Dazu die lokal aufgenommenen TEM-Bilder (b)-(e) von I. Knoke, Fraunhofer Institut IISB Erlangen [198].

was im Übrigen auch in der TEM-Aufnahme zu erkennen ist (Abb. 6.19 (e)). Die beobachteten Versetzungen im Grenzbereich zwischen Öffnung und maskiertem Bereich könnten daher in Zusammenhang mit dem Wingtilt stehen.

Inverse Pyramiden

Die Erkenntnisse, die aus obigen Untersuchung und der Literatur (bspw. [186]) gezogen werden können, beinhalten, dass ein Überwachsen der Maske in a-Richtung nötig ist, um die Materialqualität gemäß dem FACELO-Prinzip zu verbessern. Um dies bei Verwendung einer Streifenmaske zu realisiren, muss diese in $\langle 1\overline{1}00 \rangle$ -Richtung ausgerichtet werden und man ist auf die Ausbildung von $\{11\overline{2}n\}$ -Facetten beschränkt. Diese Tatsache und der Verlauf der abknickenden Fadenversetzungen führten zu der Idee des Wachstums inverser Pyramiden. Hierbei ist ein Überwachsen der Maske in der erwünschten, typischerweise schnell wachsenden a-Richtung gewährleistet. Andererseits können durch die hexagonale Anordnung der Masken-Öffnungen die abkni-

6.2 Defekte



Abbildung 6.20: CL-Aufnahme der Querschnittsfläche von inversen Pyramiden (a). Die intergrale (352-370 nm) (b) als auch die monochromatische Bandkanten-nahe (c) Emission ist gegenüber der des Templates überlegen. Dunkle Streifen und Punkte geben Hinweise auf TDs.

ckenden Fadenversetzungen in einem Punkt gebündelt werden. Hierdurch ergibt sich ein weiterer Vorteil gegenüber der Streifenmaske, wo die Defekte linienförmig erhalten bleiben.

Abbildung 6.20 zeigt eine CL-Analyse der Querschnittsfläche inverser Pyramiden. Man erkennt, dass sowohl die integrale (352-370 nm) als auch die monochromatische, Bandkanten-nahe (engl.: near band edge emssion, NBE) Emission gegenüber der des Templates verbessert ist. Dies ist ein Hinweis darauf, dass das FACELO-Prinzip für inverse Pyramiden funktioniert und die Materialqualität mit dieser Methode im Vergleich zum bereits hochwertigen Template gesteigert werden kann. Die dunklen Streifen und Punkte in dem Lumineszenz-Experiment können als Hinweise auf nichtstrahlende Fadenversetzungen angesehen werden. Um diese irrelavant für das spätere Bauelement zu machen, ist ein Koaleszieren und ein Weiterwachsen der Strukturen möglich. Dann werden die Defekte in einem für die aktive Zone unbenutzten Teil der Probe eingebettet, wobei die 3D-Oberfläche beibehalten werden kann (vgl. Abschn. 6.1.6).

Bei dieser Art von Struktur konnte weiterhin gezeigt werden, dass nur noch $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten ausgebildet werden. Diese Kombination, ein Überwachsen in a-Richtung mit Ausbildung von $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten, ist mit einer Streifenmaske nicht möglich.

Tatsächlich konnte gerade bei dieser Struktur die vorhergesagte, exzellente Materialqualität mittels TEM-Analysen bestätigt werden (Abb. 6.21 von A. Chuvilin, Materialwissenschaftliche Elektronenmikroskopie an der Universität Ulm): Keine einzige Vesetzungslinie im struktuierten Bereich und damit in der Nähe der später zu benutzenden aktiven Zone ist zu erkennen. Diese Methode ist also geeignet, (nahezu)



Abbildung 6.21: TEM-Aufnahme (von A. Chuvilin, Materialwissenschaftliche Elektronenmikroskopie an der Universität Ulm): Die Aufnahme-Bedingungen erlauben das Erkennen von Stufen- und Schraubenversetzungen, Mischtypen und Stapelfehlern. Kein Defekt ist auf der semipolarer Seitenfläche sichtbar.

defektfreies semipolares (Al,Ga,In)N großflächig herzustellen und besitzt damit aus heutiger Sicht ein eindeutiges Alleinstellungsmerkmal.

6.2.2 Stapelfehler

Inwiefern bei den hier untersuchten Proben Stapelfehler auftreten und die Kristallstruktur stören, soll nun näher betrachtet werden.

Streifen mit $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten

Fig. 6.22 zeigt exemplarisch das PL-Spektrum eines GaN-Streifens mit $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten. Es wird deutlich dominiert von einem Übergang bei 3.470 eV, der der Bandkantennahen Lumineszenz zugeordnet werden kann [200]. Dennoch sind, jedoch um ein vielfaches geringer als bei Vergleichsproben von bspw. a-GaN auf r-Saphir [45], eine Schulter bei 3.41 und Übergänge in der Nähe von 3.3 eV zu erkennen (vgl. Abschn. 2.4.3). Lokal aufgelöste CL-Messungen helfen die defektreichen Orte auf der Probe über die Lumineszenz zu identifizieren und es muss nicht zwingend eine aufwendige TEM-Analyse durchgeführt werden.



Abbildung 6.22: PL-Spektrum bei 14K von einer Streifen-Probe mit {1101}-Facetten.

Bild 6.23 zeigt die Ergebnisse einer CL-Analyse an einem GaN-Streifen mit $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten, der unter sub-optimalen Bedingungen, insbesondere bei einer vergleichsweise hohen Reaktor-Temperatur, hergestellt wurde. Wie zu erkennen ist, stammt die Bandkanten-nahe Emission hauptsächlich vom oberen Bereich des GaN-Dreiecks und lässt dort auf eine erhöhte Materialqualität schließen. Nur vereinzelt und streng lokalisiert nahe der Facetten-Oberfläche und dem maskierten Bereich im unteren Drittel



Abbildung 6.23: Monochromatische CL-Analyse eines GaN-Streifens mit $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten. Oben rechts: REM-Aufnahme; oben links: Bandkanten-nahe (NBE, 3.47 eV) Luminesszenz; unten links: Basale Stapelfehler (BSF, 3.41 eV); unten rechts: Defekt-bezogene Lumineszenz (3.32 eV).



Abbildung 6.24: PL Spektrum einer GaN-Probe mit koaleszierten, inversen Pyramiden gemessen bei T=15 K.

des Dreieckes erhält man Beiträge, die von Stapelfehlern stammen könnten [201]. An genau dieser Probe wurden auch Stapelfehler durch eine TEM-Analyse festgestellt (vgl. Abb. 6.19 (b)) und konnten mit den Erkenntnissen aus der CL-Analyse korreliert werden. Es bleibt festzuhalten, dass durch Optimierung der Wachstums-Parameter die Ausbildung von Stapelfehlern reduziert werden kann. In den hier untersuchten Proben war dies durch Förderung des 3D-Wachstums möglich und in der TEM-Analyse waren schließlich keine Stapelfehler mehr sichtbar [202].

Inverse Pyramiden

Fig. 6.24 zeigt das PL-Spektrum einer koaleszierten inversen GaN-Pyramide, gewachsen unter optimierten Bedingungen (vgl. Abb. 6.18 und 6.21). Scharfe Bandkantennahe Lumineszenz mit einer Halbwertsbreite (engl.: full width at half maximum, FWHM) des Donator-gebundenen Exzitonen-Übergangs von nur 2.2 meV gibt Hinweis auf die sehr hohe Materialqualität der vorliegenden Probe. Der Übergang bei 3.473 eV deutet auf eine nahezu verspannungsfreie Schicht hin. Defekt-bezogene Lumineszenz, die bei oben diskutierter Streifen-Probe zu beobachten ist, kann für die inverse Pyramiden-Probe vollständig ausgeschlossen werden, was die in Abschnitt 6.2 vorgestellte, besonders effiziente Defekt-Reduktion dieser Methode unterstreicht.

6.3 Anisotropie

In diesem Abschnitt soll auf die Isotropie-Eigenschaften der hier untersuchten Proben eingegangen werden. Offensichtlich wird bei z.B. einer streifenförmigen 3D-Struktur schon durch die Masken-Geometrie eine ausgezeichnete Richtungsabhängigkeit vorgegeben. Inwiefern sich diese auf pysikalische Eigenschaften auswirkt, versucht der folgende Abschnitt zu klären.

6.3.1 Verspannung

Am Beispiel von dreieckförmigen GaN-Streifen soll die Verspannungs-Situation analysiert werden, die durch thermische Verspannung einer GaN-Schicht auf Saphir-Substrat in die 3D-Struktur induziert wird. Typischerweise sind dünne MOVPE-GaN-Schichten auf Saphir kompressiv verspannt, d.h. die a-Gitterkonstante der Einheitszelle steht unter biaxialem Krafteinfluss, durch den sie zusammengedrückt wird [127]. Diese Kraft entsteht dadurch, dass bei Wachstumstemperatur die GaN-Schicht praktisch unverspannt aufwachsen kann und nach Abkühlung auf mindestens Raumtemperatur aufgrund der unterschiedlichen thermischen Ausdehnung zwischen GaN und Saphir die Verspannung induziert wird.

Eine Simulation beruhend auf Finite-Elemente-Berechnungen wurde zur Darstellung der Verspannungs-Situation herangezogen [40]. Sie beruht auf obiger Annahme einer kompressiven Schicht-Verspannung. Als Randbedingung wurde dabei angenommen, dass eine Übertragung der Verspannung nur durch den aus der Maskenöffnung gewachsenen Teil möglich ist. Der überwachsene Anteil oberhalb der Maske soll keine direkte Verbindung zur GaN-Schicht oder zum Maskenmaterial aufweisen. Dies hat zur Folge, dass ein weniger verspannter Streifen vorliegen sollte, je mehr Material über die Maske im Vergleich zur Maskenöffnung gewachsen wird.

Sreifen - Querschnitt

Abb. 6.25 zeigt das aus der Simulation erhaltene Verspannungs-Muster der Querschnittsfläche für eine willkürlich angenommene biaxiale Verspannung des Templates von $\sigma_{xx} = -1$ GPa. Um den qualitativen Verlauf mit absoluten Messgrößen zu korrelieren, wurden ortsaufgelöste CL-Messungen an der Bruchkante einer realen Struktur durchgeführt. Aus der Wellenlängen-Position des Donator-gebundenen Exzitonen-Übergangs (D⁰X) lässt sich auf den Verspannungs-Zustand schließen. Eine gute Über-



Abbildung 6.25: Simulation der Verspannungs-Situation eines dreieckförmigen Streifens unter Einfluss einer kompressiven biaxialen Template-Verspannung von $\sigma_{xx} = -1$ GPa [40].

einstimmung konnte zwischen Simulation und Messung gefunden werden (Abb. 6.26). Interessanterweise ergeben sich nicht nur unterschiedliche Verspannungs-Zustände zwischen Template und 3D-Struktur, sondern das zuvor homogen abgeschiedene Template erfährt zusätzlich eine Spannungs-Modulation. Das selektiv gewachsene GaN liegt dabei im Volumen nahezu verspannungsfrei vor (3.471 eV) und induziert im darunter liegenden Bereich des Templates einen tensilen Verspannungs-Charakter (3.465 eV). Unterhalb des Maskenbreichs herrscht im Template wiederum wenig Verspannung (3.471 eV).





6.3 Anisotropie



Abbildung 6.27: CL-Analyse einer streifenförmigen GaN-Probe senkrecht zur c-Fläche (von S. Metzner, OvG-Universität Magdeburg).

Streifen - Aufsicht

Abbildung 6.27 zeigt die Wellenlängen-Verteilung der CL-Analyse, gemessen auf der Probenoberfläche. Das integrale CL-Spektrum zeigt zwei ausgeprägte Peaks bei etwa 3.485 und 3.466 eV. Durch die orstaufgelöste Analyse wird klar, dass der energetisch höher gelegene Übergang dem D⁰X des kompressiv verspannten Templates und der zweite, vergleichsweise breite Peak dem D⁰X des GaN-Streifens zuzuordnen ist. Es ergibt sich also eine leicht tensil verspannte Facetten-Oberfläche. Ganz ähnliche Beobachtungen konnten anhand von Raman-Messungen an den Proben erzielt werden [203]. Wie sich später zeigen wird, hängt die vergleichsweise breite Emission des GaN-Streifens mit der inhomogenen Verspannungs-Situation, auch entlang der Facette, zusammen.



Abbildung 6.28: D^0X -Peak-Position entlang einer $\{1\overline{1}01\}$ -Facette eines dreieckförmigen GaN-Streifens korreliert mit der simulierten Verspannungs-Kurve (von I. Tischer und M. Feneberg, Inst. für Halbleiterphysik, Universität Ulm).

Streifen - Facette

Nun soll der Blick auf den Verspannungs-Zustand entlang einer Facette gerichtet werden. Dafür werden die Ergebnisse obiger Simulation auf die Seitenfläche angewendet. Der theoretisch ermittelte Verlauf konnte anhand von hoch-ortaufgelösten CL-Linescans der D⁰X-Peak-Position in gute Übereinstimmung gebracht werden (Abb. 6.28).

Inverse Pyramiden

Die Verspannungs-Situation bei inversen Pyramiden scheint im Vergleich zu Streifen deutlich homogener zu sein, wie anhand der D⁰X-Peak-Position entlang der semipolaren Facetten zu erkennen ist (Abb. 6.29). Die Position ändert sich um maximal 6 meV im Vergleich zu über 25 meV bei Streifen (vgl. Abb. 6.28).

6.3.2 Wingtilt

Die als Wingtilt bezeichnete Eigenschaft der Verkippung der Kristallebenen im überwachsenen Maskenbereich (vgl. Abschn. 5.2.1) soll nun für Streifen und inverse Pyramiden vergleichend analysiert werden.

6.3 Anisotropie



Abbildung 6.29: CL-Analyse an einer inversen GaN-Pyramide (von S. Metzner, OvG-Universität Magdeburg).



Abbildung 6.30: TEM-Aufnahme von einem GaN-Streifen mit $\{1\overline{1}01\}$ -Facette in der Nähe des Maskenbereichs. Man erkennt einen ausgeprägten Wingtilt von mehreren Grad, der mit einer netzartigen Struktur von Versetzungen verbunden ist (von A. Chuvilin, Materialwissenschaftliche Elektronenmikroskopie an der Universität Ulm).



Abbildung 6.31: XRD-Rocking-Kurven des (0002)-Reflexes für Streifen entlang der $\langle 11\overline{2}0\rangle$ -Richtung gemessen parallel (links) und senkrecht (rechts) zu den Streifen.

Streifen

Die Proben in unserer Versuchsreihe wurden meist mit stark vertikalem Wachstum hergestellt, um ein 3D-Wachstum zu gewährleisten (vgl. Abschn. 6.1). Dennoch kann auch hier das Phänomen des Wingtilts beobachtet werden. Die Verkippung der Kristallebenen lässt sich u.a. mittels TEM-Untersuchungen erkennen. Abb. 6.30 zeigt eine TEM-Aufnahme eines Streifens mit $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten. Die c-Ebene des Wings ist um einige Grad bezüglich der Template- bzw. Maskenoberfläche verkippt. Dies hat zur Folge, dass sich am Übergang zwischen Post und Wing Defekte ausbilden müssen. Sie wurden als Kleinwinkelkorngrenzen in Form von Stufenversetzungen, die parallel zur Streifenrichtung verlaufen, identifiziert [204].



Abbildung 6.32: XRD-Rocking-Kurven des (0002)-Reflexes für Streifen entlang der $\langle 1\overline{1}00 \rangle$ -Richtung gemessen parallel (links) und senkrecht (rechts) zu den Streifen.

Neben der aufwendigen TEM-Untersuchung lässt sich auch mit Hilfe von Röntgenbeugungs-Experimenten die Verkippung der Kristall-Flächen zeigen. In Abb. 6.31 und 6.32 ist jeweils die Rocking-Kurve des (0002)-Reflexes für Messungen parallel (links) und senkrecht (rechts) zu den Streifen mit $\{1\overline{1}01\}$ - und $\{11\overline{2}2\}$ -Facetten zu sehen. Für beide Streifenrichtungen ist die Halbwertsbreite entlang der Streifen deutlich geringer als senkrecht dazu. Für die Streifen in $\langle 1\overline{1}00 \rangle$ -Richtung sind eindeutig 3 Peaks zu erkennen, die dem Post- und Template-Bereich sowie den beiden Wings zugeordnet werden können. Für die Steifen in $\langle 11\overline{2}0 \rangle$ -Richtung ist nur ein verbreiteter Peak sichtbar [195]. Vermutlich ist auch hierfür der Wingtilt verantwortlich. Denn mittels hoch orstaufgelöster Röntgenbeugung konnte diese Eigenschaft an vergleichbaren Proben nachgewiesen werden [205].

Inverse Pyramiden

Bei inversen Pyramiden ist die Ausbildung eines Wingtilts nicht zu erkennen. Sowohl bei der Röntgen-Analyse als auch bei einer TEM-Untersuchung konnten keine Hinweise auf Wingtilt gefunden werden. Dies steht in direktem Zusammenhang mit der erhöhten Materialqualität, da keine Defekte an der Grenzfläche zwischen Post und Wing generiert werden müssen.

6.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde detailliert erörtert, wie man 3D-GaN-Strukturen herstellen kann und welche Eigenschaften sie besitzen. Es wurde gezeigt, dass die Wachstumsparameter beim MOVPE-Prozess großen Einfluss auf Form und Materialqualität haben. Für das 3D-Wachstum sind ein hohes V/III-Verhältnis, eine mäßige Wachstumstemperatur und ein erhöhter Reaktordruck zu bevorzugen. Daneben haben sich inverse Pyramiden als hochwertiger im Vergleich zu normalen Pyramiden oder Streifen herausgestellt. Folgende Vorteile seien stichpunktartig hervorgehoben:

- Besonders homogene Struktur, das Wachstum geschieht zusammenhängend und wird nicht durch die Maske getrennt
- Leichte Dejustage der Maske tolerierbar
- Wahl des Facetten-Typs durch Prozessführung, dennoch erhöhte Materialqualität durch FACELO-Prinzip.

- Möglichkeit der weiteren Defektreduktion durch Koaleszenz und Transformation der 3D-Struktur in höhere Bereiche
- Homogenere Verspannung
- Stapelfehlerfreie und äußerst defektarme Oberfläche
- Kein nachweisbarer Wingtilt

Bezüglich der GaN-Materialqualität sind somit inverse Pyramiden eindeutig zu bevorzugen. Inwiefern dieses Argument auch für die aktive Zone mit GaInN-Quantenfilmen für den Einsatz in optoelektronischen Bauelementen gilt, soll das nächste Kapitel helfen zu klären.

7 Selektiv abgeschiedene GalnN-Quantenfilme

Nachdem in Kapitel 6 auf die Herstellung und Eigenschaften von selektiv abgeschiedenen GaN-Strukturen mit semipolaren Oberflächen eingegangen wurde, sollen in diesem Kapitel die Eigenschaften von GaInN-Quantenfilmen analysiert werden, die auf diesen Oberflächen abgeschiedenen wurden. Hierbei wird sich zeigen, dass die genaue Geometrie der zugrundeliegenden GaN-Struktur erheblichen Einfluss auf die Eigenschaften der QWs hat. Die von der selektiven Epitaxie bekannte Gasphasen-Diffusion beeinflusst sowohl Dicke als auch Komposition der Filme, zusätzlich müssen auch die Einflüsse von Oberflächen- bzw. Interfacetten-Migration berücksichtigt werden, wenn Strukturen mit unterschiedlichem Facetten-Typ vorliegen. Sind die strukturellen und optischen Eigenschaften der QW-Struktur bekannt, können daraus materialspezifische Kenndaten wie die Größe des piezoelektrischen Feldes ermittelt werden. Ortsund zeitaufgelöste Lumineszenz-Spektroskopie-Untersuchungen zeigen zudem eine gute Übereinstimmung mit den theoretisch vorhergesagten Eigenschaften der semipolaren Quantenfilme.

7.1 Einfluss der Wachstums-Parameter

Wie schon in Abschnitt 4.6 angesprochen, ist das Wachstum von hochqualitativen GaInN-Schichten recht anspruchsvoll und eine ausgewogene Parameter-Optimierung notwendig. Die Problematik liegt einerseits in der Wahl von Parametern für einen hohen Indium-Einbau, der für langwellige Emission notwendig ist, andererseits sollten diese aber defektarmes Material gewährleisten, was oftmals einen Kompromiss erfordert. Eine Auswahl der wichtigsten Parameter wird im Folgenden aufgeführt.

7.1.1 Temperatur

Die Temperatur ist der entscheidenste Faktor für den Einbau von Indium. Typische Wachstumstemperaturen von GaInN bewegen sich zwischen 700°-850°C. Diese recht niedrigen Temperaturen im Vergleich zur typischen GaN-Wachstumstemperatur von über 1000°C sind aufgrund des hohen Dampfdrucks von InN notwendig. Je niedriger die Temperatur gewählt wird, desto mehr Indium kann eingebaut werden. Als einfache Faustregel kann für eine typische c-plane QW-Dicke von 2.5 nm eine Wellenlängen-Verschiebung der QW-Emission von etwa 1 nm/K angenommen werden [206]. Die niedrige Temperatur hat jedoch eine kleinere Oberflächenmobilität der Indium-Adatome zur Folge, was tendenziell zu größeren Inhomogenitäten in Dicke und Komposition der Quantenfilme führt. Auch wurde gezeigt, dass sich die Laser-Schwelle von GaN-basierten Laserdioden erhöht, wenn die Abscheidung der QWs mit gleicher In-Konzentration bei einer niedrigeren Temperatur stattfindet [207]. Neben den schon erwähnten erhöhten Inhomogenitäten kann nicht-strahlende Rekombination, hervorgerufen durch (Punkt-)Defekte, dafür verantwortlich gemacht werden. Gerade bei niedrigeren Temperaturen ist es deshalb notwendig, die sich daraus ergebenden negativen Effekte zu kompensieren. So hat sich gezeigt, dass beispielsweise ein Uberangebot an Indium, das einen sogenannten Surfactant-Effekt bewirkt, die Mobilität der Adatome erhöhen kann und damit den Mobilitätsverlust durch die niedrige Temperatur teilweise zu kompensieren vermag [208, 209].

7.1.2 TEGa/TMIn

Das Verhältnis zwischen Ga und In in der Gasphase wirkt sich nur bedingt auf die Zusammensetzung im Halbleiter aus. Nicht die Mixtur in der Gasphase ist bei einer angemessenen Wachstumstemperatur limitierend bzw. entscheidend für die Komposition, sondern vielmehr die Desorption von Indium von der Oberfläche. Deshalb ist, wie bereits angesprochen, die Wachstumstemperatur sehr bedeutend. Auch die Wachstumsrate hat starken Einfluss auf den Indium-Einbau. So ergibt sich beispielsweise bei Erhöhung des TEGa-Flusses eine höhere In-Konzentration im Festkörper, obwohl das effektive Verhältnis in der Gasphase erniedrigt wurde [160, 206]. Wie schon erwähnt, sollte dennoch für eine hohe Materialqualität ein deutliches Überangebot an Indium-Atomen angeboten werden, wodurch sich die Mobilität verbessern lassen kann und dadurch die Tendenz zu defektärmerem Material gegeben ist.

7.1.3 Wachstumsrate

Die Wachstumsrate (dominiert durch den TEGa-Fluss) hat einen deutlichen Einfluss auf die Komposition der GaInN-Schicht. Eine Erhöhung des Indium-Gehalts kann mit steigender Wachstumsrate beobachtet werden. Dieses Verhalten ist darauf zurückzuführen, dass bei großer Wachstumsrate die Desorption des Indiums stark reduziert ist [160]. Es verringert sich die Migrationszeit, d.h. die Zeit zwischen Adsorption und Einbau. Dadurch besteht jedoch auch eine Gefahr für Einbaufehler. Dies bedeutet, dass ein Kompromiss zwischen Indium-Gehalt und Materialqualität gefunden werden muss. Wachstumsraten für den QW von etwa 1 nm/min haben sich hierfür als geeignet herausgestellt.

7.1.4 Trägergas

Wasserstoff (H₂) als typischerweise verwendetes Trägergas für das Wachstum von GaN kann für das Wachstum von GaInN negative Auswirkungen haben. Die Kombination aus hohen Wasserstoff-Mengen und niedriger Temperatur verschiebt das chemische Gleichgewicht der Ammoniak-Zerlegung zu Ungunsten der Zerlegungs-Effizienz. Daneben reagiert Wasserstoff mit dem zur Verfügung stehenden Indium zu InH₃, wodurch der Indium-Einbau behindert wird [210]. H₂ kann jedoch hilfreich sein, um den QW zu homogenisieren, In-Cluster zu vermeiden und beispielsweise im Barrieren-Material Indium gezielt abzubauen [211]. In unseren Versuchsreihen wurde die aktive Zone nahezu ausnahmslos unter Stickstoff-Atmosphäre abgeschieden, um eine hohe Indium-Einbau-Effizienz zu gewährleisten bzw. bei gleicher In-Konzentration höhere Wachstumstemperaturen für eine erhöhte Materialqualität zu erlauben.

7.1.5 Ammoniak

Es wurde gezeigt, dass die sogenannte Pyrolyse, die Zerlegung des Ammoniaks, unterhalb von 900°C extrem temperaturabhängig ist [212]. Um dies bei den für das GaInN-Wachstum notwendigen niedrigen Temperaturen zu kompensieren, wird mit einem sehr hohen Ammoniak-Angebot bei deutlich reduzierter Wachstumsrate gearbeitet. Zu wenig Ammoniak kann zu Stickstoffvakanzen führen, was sich in der Verschlechterung der Effizienz durch nicht-strahlende Rekombination zeigt. Ein Überangebot an Indium, das als Surfactant dient, kann auch hier hilfreich entgegenwirken.

7.1.6 Parameter

Tabelle 7.1 gibt eine Zusammenfassung der Wachstums-Parameter für die GaInN-Abscheidung, die auf den semipolaren Seitenfacetten zu den besten Ergebnissen im langwelligen (~ 510 nm) Emissionsbereich geführt haben. In den zugrundeliegenden Experimenten hat sich die Wachstumstemperatur als besonders kritisch herausgestellt, die im Rahmen der hier untersuchten Strukturen unbedingt oberhalb von 700°C zu liegen hat. Ansonsten ist ein kristallines Wachstum nicht mehr gewährleistet, die Proben färben sich gräulich und metallisches Indium mit löcheriger Struktur kann im QW gefunden werden (vgl. Abb. 7.22).

	Temperatur	TEGa	TMIn	$\rm NH_3$	Dauer
	(°C)	$(\mu mol/min)$	$(\mu mol/min)$	(mmol/min)	(s)
Barriere	800	21.1	-	235	360
QW	730	5.3	7.9	235	360
Barriere	730	5.3	-	235	180
Barriere	800	21.1	-	235	315

Tabelle 7.1: Bisher beste GaInN-Wachstums-Parameter für grüne (~ 510 nm) QW-Emission mit einer QW-Dicke von etwa 4 nm (abhängig von der speziellen 3D-Struktur) für die semipolare Facette.

Die Reaktor-Temperatur während des Wachstums der Barrieren kann typischerweise höher gewählt werden als während des QW-Wachstums, um eine erhöhte Materialqualität zu ermöglichen. Zur Verhinderung der Dekomposition des GaInN-Films wird jedoch zunächst Barrieren-Material ($\sim 2 \text{ nm}$) bei reduzierter Temperatur abgeschieden bevor die Temperatur erhöht wird. Die Wachstumsrate der QWs ist abhängig von der Geometrie und liegt im Bereich von etwa 1 nm/min.

7.2 Einfluss der Geometrie

Beim selektiven Wachstum von GaInN-Quantenfilmen auf eine dreidimensionale GaN-Oberfläche müssen verschiedene Faktoren berücksichtigt werden, um die gewünschten Zielvorgaben wie Schichtdicke und Komposition zu erreichen. Vom selektiven Wachstum ist bekannt, dass in erster Nährung ein vollständiger Einbau des angebotenen Materials auf den maskenfreien Flächen erfolgt. Wie in Kapitel 6 beschrieben, erhöht sich dementsprechend die Wachstumsrate bezüglich des Verhältnisses aus Periode zur
Maskenöffnung. Für den Quantenfilm ergibt sich eine leicht andere Situation. Hier ist nicht nur die ursprüngliche Maskenbreite bzw. -öffnung entscheidend, sondern vielmehr die Form und die effektiv vorhandene Oberfläche der dreidimensionalen Unterlage.

Für Streifen mit rein dreieckigem Querschnitt gilt für die Dicke des semipolaren QWs:

$$d_{QW,Facette} = \frac{b_{Periode}}{2 \cdot b_{Basis}} \cdot d_{QW,planar}$$
(7.1)

wobei $b_{Periode}$, b_{Basis} und $d_{QW,planar}$ die Größe der Masken-Periode, der Basis des Dreiecks und die Dicke des unstrukturieren QWs angibt. Zur Vereinfachung wird mit einem Facettenwinkel von 60° gerechnet, was für die $\{1\overline{101}\}$ - mit rund 62° und die $\{11\overline{22}\}$ -Facette mit rund 58° eine ausreichende Genauigkeit liefert. Wird also beispielsweise eine Maskengeometrie gewählt mit gleicher Breite für die Maske und Öffnung und wird dann ein Dreieck abgeschieden, das nicht über die Maske ragt, kann eine zum planaren Fall gleiche QW-Schichtdicke angenommen werden. Oder die Dreiecke werden derart lange abgeschieden, dass deren Basen zusammenstoßen. Dann kann mit der halben Schichtdicke gerechnet werden.

Wird der QW auf einer 3D-Struktur gezüchtet, die keinen rein dreieckförmigen Querschnitt aufweist, muss die exponierte Fläche, die nun aus unterschiedlichen Kristall-Orientierungen bestehen kann, berücksichtigt werden [194]. Wie jedoch zu sehen sein wird, reicht eine simple geometrische Berechnung nicht, um Schichtdicken und Komposition vorhersagen zu können (vgl. Abschn.7.4). Vielmehr kommt es zu einem konkurrierenden Wachstums-Verhalten zwischen den Facetten-Typen. Allerdings kann das abgeschiedene Gesamtvolumen weiterhin als konstant angenommen werden.

7.2.1 Dreieckförmiger Streifen

Wie sich herausgestellt hat, kann die Schichtdicke und Komposition der Quantenfilme entlang einer µm großen Struktur nicht als homogen angenommen werden. Die oben beschriebene Berechnung der QW-Dicke (Gl. 7.1) gilt unter diesem Gesichtspunkt nur integral.

QW-Dicke

Abbildung 7.1 zeigt eine TEM-Aufnahme der aktiven Zone einer Vielfach-QW-Struktur, die auf den $\{1\overline{1}01\}$ -Seitenfacetten eines relativ großen GaN-Streifens (Facettenlänge: 12 µm, Maskenperiode: 23 µm) mit rein dreieckigem Querschnitt abgeschieden



Abbildung 7.1: TEM-Aufnahme der aktiven Zone eines dreieckförmigen GaN-Streifens mit {1101}-Facetten, nahe der Dreiecksspitze (links) und in der Facetten-Mitte (rechts) (von A. Chuvilin, Materialwissenschaftliche Elektronenmikroskopie an der Universität Ulm).

wurde. Wie zu erkennen, konnte auf der etwa $12\,\mu$ m langen Facette eine gut ausgebildete MQW-Struktur realisiert werden, wobei die Schichtdicke im obersten Teil nahe der Dreiecksspitze deutlich erhöht ist.

In Diagramm 7.2 sind die ermittelten QW-Schichtdicken entlang der Facette eingezeichnet (offene Kreise). Sie wurden anhand der TEM-Bilder bestimmt, indem über 5 QWs gemittelt wurde. Es ist ein zunächst starker Abfall der Dicke zu erkennen, wobei anschließend die Filmdicke vergleichsweise konstant bleibt. Es wurde nun ver-



Abbildung 7.2: Ermittelte QW-Dicke entlang einer Facette. Die Dicke wurde anhand von TEM-Bildern über 5 QWs gemittelt. Mittels Gasphasen-Diffusion kann der Dicken-Verlauf gut modelliert werden (in Kooperation mit M. Feneberg).



Abbildung 7.3: (Links) Reciprocal-space Maps gemessen für ausgewählte Positionen auf der Seitenfacette. Der Abstand Z von der Spitze ist in Mikrometer angegeben. Die MQW Satelliten-Peaks sind entsprechend ihrer Ordnung markiert. (Rechts) (a) REM Aufnahme der 3D Strktur, (b) die globale Verspannung der MQWs, (c) Periode der MQW Struktur und (d) Ga-Fluoreszenz. Die Bilder wurden aus Ref. [205] entnommen.

sucht, die experimentell ermittelten Schichtdicken mit einem Wachstums-Modell zu beschreiben. Wir konnten zeigen, dass mit Hilfe des in Abschnitt 5.5 vorgestellten Gasphasen-Diffusions-Modells der Verlauf der Schichtdicken-Variation sehr gut nachgebildet werden kann. In Diagramm 7.2 sind die Verläufe des Konzentrations-Profils für Werte von D/k von 0.1, 1 und 10 µm eingezeichnet und mit dem Dicken-Verlauf korreliert. Mit D/k = 0.1 µm kann die Dicke des Quantenfilms entlang der Facette am besten modelliert werden. Dieses Ergebnis ist deutlich kleiner als der Wert, der mit D/k = 20 µm für die {1122}-Facette ermittelt wurde (vgl. Abschn. 7.2.2) und könnte als Hinweis für eine höhere Indium-Einbau-Effizienz auf der {1011}-Facette gedeutet werden. Das Ergebnis zeigt, dass bei Strukturen mit nur einem Facetten-Typ allein Gasphasen-Diffusion ausreichend ist, das Quantenfilm-Wachstum auf 3D-Strukturen genau zu beschreiben.

Desweiteren wurde die Probe einer hoch-ortsaufgelösten Röntgenanalyse unterzogen, um anhand der Pendellösungen der ω -2- θ -Scans eine alternative Messmethode zur Bestimmung der QW-Dicke zu erhalten. In Kooperation mit der Gruppe von A. Sirenko [205] konnte dieses Experiment an einem Synchrotron-Röntgen-Strahl durchgeführt

werden. Dazu wurde dieser bis auf eine Größe von etwa 240 nm fokusiert und entlang der Facette geführt. Für unterschiedliche örtliche Positionen auf der Facette wurde eine "Reciprocal-Space Map" (RSM) erstellt, woraus Schichtdicken- und Kompositions-Angaben gewonnen werden können. Für die hier untersuchte Probe wurde festgestellt, dass sich die Periode, bestehend aus QW- und Barrieren-Dicke, kontinuierlich von der Spitze zum Fuß des Dreiecks verringert. Während eine Schichtdicke von etwa 24 nm an der Dreiecksspitze ermittelt wurde, halbiert sie sich auf etwa 12 nm am Fuß mit einem etwa linearen Verlauf [205]. Die Wachstumsdauer der Barriere wurde bei dieser Probe etwa doppelt so lange gewählt wie die des Quantenfilms. Aufgrund der sehr ähnlichen Wachstums-Bedingungen zwischen QW und Barriere kann eine ähnliche Wachstumsrate angenommen und somit eine QW-Dicke von 8 nm an der Spitze und 4 nm am Fuß des Dreiecks angegeben werden.

Dieses Ergebniss steht in guter Übereinstimmung mit den absoluten Größen, die aus der TEM-Analyse ermittelt wurden. Es muss jedoch berücksichtigt werden, dass die obersten Hundert Nanometer aufgrund der Ortsauflösung mittels HRXRD nicht messbar sind. Doch gerade dort wurden mittels TEM die größten Veränderungen beobachtet. Unter diesem Gesichtspunkt kann der TEM-Analyse eine größere Genauigkeit zugeschrieben werden.

Komposition

Neben der QW-Dicke ist die Frage nach der Komposition der mit entscheidendste Faktor für die erzielbare Farbe (siehe Abschn. 3.1). Um diese lokal zu bestimmen, wurden verschiedene Messmethoden herangezogen. Für die Untersuchung wird zunächst dieselbe 3D-GaN-Geometrie gewählt wie bei den Analysen zur QW-Dicke.

Als erstes soll versucht werden, anhand von ortsaufgelöster Röntgen-Diffraktometrie Rückschlüsse auf den Indium-Gehalt x in der $\operatorname{Ga}_{1-x}\operatorname{In}_x$ N-Matrix zu erhalten. Neben der Schichtdicke kann anhand der RSM-Karten die MQW-Verspannung abgelesen werden (Bild 7.3). Um die In-Konzentration der Quantenfilme abzuschätzen, muss das Verhältnis zwischen Well und Barriere bekannt sein, was unter Berücksichtigung der Wachstumszeiten und den TEM-Aufnahmen möglich wird. Um eine exakte Konzentration der Schichten anzugeben, muss weiterhin der Verspannungs-Grad abgeschätzt werden bzw. es müssen mehrere verschiedene Röntgen-Reflexe analysiert werden, um die Gitterkonstanten a und c bestimmen zu können. Dennoch ist auch dann eine Konversion zwischen a, c und x des $\operatorname{Ga}_{1-x}\operatorname{In}_x$ N-Quantenfilms nicht trivial. Beispielsweise genügt



Abbildung 7.4: Anhand von µ-PL-Messungen ermittelte Indium-Konzentration entlang einer Facette [214].

der konventionelle Ansatz von Schuster *et al.* nicht [213], welcher das Poisson-Verhältnis der in c-Richtung orientierten, pseudomorphen Schichten benutzt. Vielmehr muss die Berechnung den Verspannungs-Zustand der Streifen-Geometrie einschließen. Im Rahmen dieser Untersuchung konnte dieser jedoch nicht zweifelsfrei bestimmt werden, da zusätzliche Einflüsse durch Wingtilt zu berücksichtigen sind (vgl. Abschn. 6.3.2). Unter der weniger präzisen Annahme einer vollständig relaxierten Struktur und einem Barriere/Well-Verhältnis von etwa 2.2 würde die In-Konzentration etwa 30% an der Spitze und 24% am Fuße des Dreiecks betragen [205]. Dies entspricht also einem relativen Konzentrations-Abfall um 20% und ist, wie später zu sehen sein wird, direkt mit der Wachstumsrate korreliert.

Um dieses Ergebnis weiter zu verifizieren, wurde eine spezielle Probenart präpariert, die anstatt einer MQW-Struktur eine etwa 30 nm dicke GaInN-Schicht auf den Seitenflächen besitzt. Dadurch wird es möglich, auch unter konventionellen Röntgenbeugungs-Experimenten genügend Signal-Stärke zu erreichen und andererseits bei optischen Experimenten Quantisierungs-Effekte und den Einfluss des Piezofeldes auszuschließen. Aus der gemessenen Übergangs-Energie kann dann verhältnismäßig einfach eine Indium-Konzentration bestimmt werden, wenn Änderungen der Wellenlänge durch zusätzliche Verspannungs-Änderungen entlang der Facette ausgeschlossen werden. Diese aus der µ-PL-Analyse gewonnenen Ergebnisse, die in Kooperation mit U.T. Schwarz *et al.* von der Universität Regensburg durchgeführt wurden [214], sind in Diagramm 7.4 dargestellt. In Übereinstimmung mit der Röntgen-Analyse ergibt sich für diese Struktur ein Abfall der In-Konzentration von 22% auf 17.5%, einem relativen Konzentrations-Abfall um 20%.

Es stellt sich die Frage nach der Ursache für den unterschiedlichen Indium-Gehalt entlang einer Facette. Für die hier untersuchte Struktur, die relativ groß ist und einen starken Überhang über die Maske aufweist, wird der Einfluss der Verspannung auf den Indium-Einbau als verhältnismäßig gering eingestuft. Vielmehr wurde aufgrund von Diffusions-Prozessen eine Abnahme der Schichtdicke beobachtet (vgl. Abschn. 7.2.1). Es ist bekannt, dass eine erhöhte Wachstumsrate zu einem erhöhten Indium-Einbau führt [160]. In einer Studie für c-orientierte Quantenfilme konnte ermittelt werden, dass es bei einer Halbierung der Wachstumsrate zu einer Abnahme der relativen Indium-Konzentration um etwa 22% kommt [206]. Dieses Ergebnis steht in guter Übereinstimmung mit der absoluten Schichtdicken-Abnahme und dem relativen In-Gradienten entlang der Facette und lässt also vermuten, dass die aufgrund von Gasphasen-Diffusion erhöhte Wachstumsrate an der Dreiecksspitze maßgebend für den dort erhöhten Indium-Einbau ist. Bei dieser Probe muss nicht berücksichtigt werden, dass es einen potentiellen Unterschied in der Gasphasen-Diffusion zwischen Gallium und Indium geben kann, der die lokale Gaszusammensetzung ändern könnte. Entlang der Facette ist überall ein Überangebot an Indium-Atomen vorhanden und die Komposition wird von der Wachstumstemperatur und -rate dominiert (vgl. Abschn. 7.1 und 7.2.2).

7.2.2 Inverse Pyramiden

Detaillierte Untersuchungen zu den strukturellen Eigenschaften der GaInN-Quantenfilme wurden ebenfalls an inversen Pyramiden-Strukturen durchgeführt. Die 3D-Oberfläche wird in diesem Fall von etwa 12 µm großen Pyramiden gebildet, deren $\{11\overline{2}2\}$ -Facetten vollständig über den Maskenbereich ragen und in jeweils einer ausgeprägten Spitze enden. Die spezielle Geometrie beeinflusst die QW-Eigenschaften in besonderem Maße.

Abbildung 7.5 zeigt die lokale QW-Emission (b) entlang der mehrere µm großen inversen Pyramiden (a). Es kommt zu einer enormen Verschiebung der Wellenlänge von etwa 530 nm an der oberen Kante bis etwa 380 nm nahe der Pyramiden-Spitze. Durch die gewaltige Variation der Parameter bildet diese Probe eine ideale Test-Struktur für detaillierte Analysen, wozu normalerweise eine Vielzahl an Versuchen nötig wäre.

In einer engen Kooperation zwischen verschiedenen Forschungs-Gruppen (Inst. für Optoelektronik, Inst. für Quantenmaterie und Zentrale Einrichtung Elektronenmikroskopie an der Universität Ulm und Inst. für Experimentelle Physik an der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg) ist es uns gelungen, für jede beliebige Position ent-



Abbildung 7.5: REM-Aufnahme einer inversen Pyramiden-Struktur mit einer Periodenlänge von 13 µm (a) mit entsprechender CL-Wellenlängen-Karte (b). Ausgeprägte Verschiebung der Wellenlänge entlang einer Facette. Die CL-Analyse wurde von S. Metzner, OvG-Universität Magdeburg durchgeführt.

lang der Facette alle entscheidenden Parameter wie Schichtdicke, Komposition und piezoelektrische Polarisation genau zu bestimmen. Dies war möglich durch die Kombination aus TEM-Analysen (A. Chuvilin) und einer Modell-Rechnung zur Gasphasen-Diffusion (M. Feneberg). Weiterhin fließen in die Bestimmung der Parameter die lokalen Übergangs-Energien und die Ladungsträger-Lebensdauern ein, die durch eine lokal aufgelöste CL-Analyse zugänglich wurden (S. Metzner). Durch die drei unabhängigen Messungen und durch eine umfangreiche Simulations-Rechnung (M. Feneberg), in der die Wellenfunktionen unter Berücksichtigung der semipolaren Orientierung (mit $e_{15} = -0.36 \text{ C/m}^2$ [215], vgl. Abschn. 2.6.2) vollständig modelliert wurden, wird eine exakte Zuordnung möglich.

QW-Dicke

Abbildung 7.6 zeigt die aus der TEM-Analyse gewonnenen QW-Schichtdicken entlang der Facette. Durch Modellierung der QW-Dicke mittels Gasphasen-Diffusion wird es möglich, die vergleichsweise grobe Bestimmung der Dicken zu verfeinern. Es gilt zu beachten, dass es nicht möglich ist, einen beliebigen Kurvenverlauf für die QW-Dicke zu wählen, da dies starken Einfluss auf die Emissions-Energie und Übergangs-Wahrscheinlichkeit hätte und eine eindeutige Lösung dadurch nicht möglich wäre. Die





Abbildung 7.6: QW-Schichtdicken entlang einer inversen Pyramiden-Struktur bestimmt durch TEM-Analysen und Gasphasen-Diffusions-Modell. Die Position 0 entspricht der Pyramiden-Spitze.

Abbildung 7.7: QW-Übergangs-Energien entlang einer inversen Pyramiden-Struktur bestimmt durch CL-Analysen und entsprechende Modell-Rechnung. Die Position 0 entspricht der Pyramiden-Spitze.

Angaben der Parameter sind aus diesem Grund sehr exakt. Für diese Struktur mit $\{11\overline{2}2\}$ -Facetten wurde $D/k = 20 \,\mu\text{m}$ im Gasphasen-Diffusions-Modell ermittelt. Dieser ist deutlich größer als der Wert für die $\{1\overline{1}01\}$ -Facette von $D/k = 0.1 \,\mu\text{m}$ (vgl. Abschn. 7.2.1) und könnte u.a. als Hinweis auf einen erhöhten Indium-Einbau auf der $\{1\overline{1}01\}$ -Facette verstanden werden.

Komposition

Die nun bekannte QW-Dicke fließt in die Berechnung der Übergangs-Energien (Abb. 7.7) und Übergangs-Wahrscheinlichkeiten (invers proportional zur strahlenden Lebensdauer τ_r , Abb. 7.8) ein, wobei jeweils eine vollständige Lösung der Poisson- und Schrödinger-Gleichung für die semipolare Orientierung durchgeführt wurde. Eine eindeutige Übereinstimmung mit den Messdaten ist nur für eine bestimmte Indium-Konzentration und piezoelektrische Polarisation möglich. Die entsprechenden Werte entlang der Facette sind in Abb. 7.9 zu finden.

Während sich die QW-Dicke entlang der etwa 11 µm langen Facette etwas mehr als halbiert, kommt es zu einer enormen Abnahme des Indium-Gehalt von etwa 20% an der Oberkante auf etwa 9% an der inneren Spitze der inversen Pyramide. Dieser starke Gradient der Komposition kann nun nicht mehr allein durch die Wachstumsrate erklärt werden. Vielmehr muss ein reduziertes Indium-Angebot eine zusätzliche Ursa-



Abbildung 7.8: Ladungsträger-Lebensdauer entlang einer inversen Pyramiden-Struktur bestimmt durch CL-Analysen und entsprechnede Modell-Rechnung. Die Position 0 entspricht der Pyramiden-Spitze.



Abbildung 7.9: Indium-Konzentration entlang einer inversen Pyramiden-Struktur bestimmt durch Modell-Rechnung. Die Position 0 entspricht der Pyramiden-Spitze.

che fur den starken Gradienten darstellen. Bei genauerer Analyse des Indium-Gehalts, insbesondere in Korrelation mit der QW-Dicke kann folgendes festgehalten werden:

In der oberen Hälfte der Facette ist der Gradient der Indium-Komposition (hier: 20.2% bis 19.4%) alleine mit der Wachstumsrate, dominiert von TEGa, zu beschreiben. In diesem örtlich begrenzten Bereich herrscht noch immer ein Überangebot an Indium in der Gasphase (vgl. Tab. 7.1.6) und die Festkörper-Konzentration wird hauptsächlich durch die Wachstumstemperatur und -rate beeinflusst. Erst in der unteren Hälfte der inversen Pyramide wirkt sich die Gasphasen-Konzentration des In-Precursors auf die Komposition aus. Die Konzentration fällt stark ab. Wie in Abbildung 7.10 zu sehen, kann unter Berücksichtigung dieser beiden Effekte - der Wachstumsraten-abhängigen Einbaurate und der unterschiedlichen effektiven Gasphasen-Diffusion-Konstanten der Ga- und In-Species - der Verlauf sehr gut nachgebildet werden. Ein Wert von $D/k = 5\,\mu$ m für InN hat sich dabei als zutreffend für die semipolare {1122}-Facette gezeigt.

Somit kann die Vermutung von Fang *et al.*, dass Gasphasen-Diffusion der dominierende Mechanismus für den In-Gradienten darstelle [192], stark präzisiert werden. Ebenso sei erwähnt, dass der Verlauf nur mit einem D/k für InN angefittet werden kann, das kleiner ist als das für GaN. Dies steht im Widerspruch zu den Schlussfolgerungen von Shioda *et al.* [216]. Die Autoren weisen jedoch in ihrem Artikel bereits darauf hin, dass in ihren Experimenten nur eine schlechte Selektivität erreicht wurde. Dies kann die Ergebnisse natürlich erheblich beeinflussen.



Abbildung 7.10: Modellierung der QW-Dicke und Komposition mittels Gasphasen-Diffusion. 'InN korrigiert' bedeutet in diesem Zusammenhang, dass der Wachstumsratenabhängige In-Einbau bereits berücksichtigt wurde. Die Position 0 entspricht der Pyramiden-Spitze.

7.3 Einfluss des Reaktor-Drucks

Der Diffusions-Koeffizient im Gasphasen-Diffusions-Modell weist folgende Abhängigkeiten auf [192]:

$$D = D_{ref} \left(\frac{p_{ref}}{p}\right) \left(\frac{T}{T_{ref}}\right)^{1.7}$$
(7.2)

mit $T_{ref} = 300 \text{ K}$, $p_{ref} = 1013 \text{ hPa}$ und $D_{ref} = 0.39 \text{ cm}^2/\text{s}$. Durch einen niedrigeren Reaktordruck bzw. eine höhere Wachstumstemperatur sollte die Gas-Diffusion erhöht werden können. Tatsächlich konnte durch eine Erniedrigung des Reaktordruck während des Wachstums der aktiven Zone die Verschiebung der Wellenlänge gemäß den Erwartungen verändert werden. Wie in Abbildung 7.11 zu sehen, verringert sich die integrale PL-Linienbreite mit Reduktion des Reaktordrucks, wobei sich die Peak-Wellenlänge nur geringfügig ändert. Dies ist ein direkter Nachweis für eine Verbesserung der Homogenität mit Reduktion des Reaktordrucks. Die unterschiedlich starke Änderung der Wellenlängen-Verschiebung und der Unterschied in der absoluten Linienbreite zwischen den beiden Streifen-Orientierungen gilt es hierbei zu beachten. Ursachen hierfür könnten einerseits in der besseren Oberflächen-Qualität von $\{1\overline{101}\}$ -Facetten im Vergleich zu $\{11\overline{22}\}$ -Facetten liegen (vgl. Abschn. 6.1.5). Andererseits wurde für die $\{1\overline{101}\}$ -Facette eine vergleichsweise größere Fläche mit nahezu konstanter QW-Dicke ermittelt, was sich durch unterschiedliche Werte für D/k des Gasphasen-Diffusions-Modells ableiten ließ (vgl. Abschn. 7.2).



Abbildung 7.11: Normierte PL-Intensität von 3D-GaInN/GaN-Streifen mit $\{11\overline{2}2\}$ -Facette, deren aktive Zone unter verschiedenem Reaktordruck abgeschieden wurde, gemessen bei T=15 K (links). PL-Linienbreite unterschiedlicher 3D-Strukturen, deren aktive Zone unter verschiedenem Reaktordruck abgeschieden wurde (rechts).

Auch wenn durch Prozess-Parameter während des Wachstums die QW-Eigenschaften beeinflusst werden können, kann durch ein entsprechendes Masken- bzw. 3D-GaN-Design mehr Einfluss auf die Homogenität der Quantenfilme ausgeübt werden. Falls beispielsweise eine homogene QW-Emission erwünscht wird, ist es naheliegend, die Dimensionen der 3D-Struktur stark zu verringern. Tatsächlich konnten als Fortführung dieser Arbeit sehr homogene Quantenfilme auf niederdimensionalen Strukturen mit einer Periode von nur 240 nm abgeschieden werden, wie sie als aktive Zone in einer semipolaren Laserdiode eingesetzt werden sollen [217]. Wird jedoch ein breites Emissions-Spektrum gewünscht, wie es für Beleuchtungs-Anwendungen mit hohem CRI (engl.: color rendering index) interessant ist, scheinen größere inverse Pyramiden für die Realisierung von Licht-Emittern besonders geeignet (vgl. Abschn. 8.3.2).

7.4 Einfluss benachbarter Facetten-Typen

Nun soll auf ein weiteres Phänomen aufmerksam gemacht werden, das beim Wachstum von Quantenfilmen auf 3D-Strukturen auftreten kann. Wird ein QW auf eine Struktur abgeschieden, die unterschiedliche Facetten-Typen aufweist (z.B. trapezförmiger Streifen mit semipolaren Seiten-Flächen und polarer Top-Ebene), kann es zu Interfacetten-Migrationsprozessen kommen. D.h. die Wachstumskinetik auf einer Facette wird durch eine direkt benachbarte Facette eines anderen Typs beeinflusst. Es kommt zu einem Austausch der Quellmaterialien und es findet ein konkurrierender Wachstumsprozess statt. Wie schon in früheren Arbeiten an 3D-Strukturen



Abbildung 7.12: STEM-Aufnahme einer LED-Struktur mit semipolarer {1101}-Facette und polarer c-Fläche (von A. Chuvilin, Materialwissenschaftliche Elektronenmikroskopie an der Universität Ulm). Deutliche Unterschiede in der QW-Dicke sind zwischen den Facetten-Typen zu erkennen.

erkannt [218–220], können diese konkurrierenden Wachstums-Mechanismen zu unterschiedlichen QW-Dicken und/oder In-Konzentrationen führen (Abb. 7.12). Als Folge einer unterschiedlichen QW-Dicke, eines ggf. unterschiedlichen Indium-Gehalts und eines unterschiedlichen piezoelektrischen Feldes resultiert meist eine unterschliedliche Emissions-Wellenlänge. Ähnliche Studien von Funato *et al.* versuchen diese Tatsache zu nutzen, um durch geschickte Überlagerung der verschiedenen Emissionen einen weißen Farbeindruck zu generieren [221, 222]. Damit könnten potentiell weiße LEDs realisiert werden, ohne die Notwendigkeit eines Lumineszenz-Konverters, wie er typischerweise heute verwendet wird.

Abbildung 7.12 zeigt eine STEM-Aufnahme einer 3D Struktur, die vor dem Abscheiden der aktiven Zone eine $\{1\overline{1}01\}$ -Facette und eine (0001)-Ebene aufweist. Zu erkennen ist die deutliche Zunahme der Schichtdicke auf der polaren Ebene (~ 7.5 nm QW-Dicke) im Vergleich zur semipolaren Fläche (~ 3 nm). Dieses Verhalten wurde gemäß den Untersuchungen von Fang *et al.* Oberflächen-Migrations-Prozessen zugeschrieben [192]. Folgende mathematische Gleichung wurde dafür als zutreffend gefunden:

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = D_s \frac{\partial^2 C_s}{\partial x^2} - \frac{C_s}{\tau}$$
(7.3)

wobe
i D_s die Oberflächen-Diffusions-Konstante,
 τ die gemittelte Lebensdauer von adsorbierten Precurs
orn und C_s die Precursor-Konzentration in diffusionsfähigem Zu-

stand auf der Epitaxie-Oberfläche darstellt. Der Unterschied der Wachstumsrate ergebe sich demnach aufgrund von unterschiedlichen Lebensdauern der Adatome auf den verschiedenen Facetten, die wiederum von deren Reaktions-Wahrscheinlichkeiten abhängten. In ihrem Experiment hat sich beispielsweise eine Adatom-Lebensdauer für die c-Fläche von $\tau_{Ga}^{(0001)} = 5 s$ und für die {1122}-Facette von $\tau_{Ga}^{\{1122\}} = 12 s$ als zutreffend ergeben [192]. Der relative Unterschied zwischen polarer und semipolarer Fläche passt damit hervorragend zu den in unseren Untersuchungen ermittelten Werten.

Doch nicht nur bei trapezförmigen Streifen kann zwischen polarer c-Fläche und semipolarer Seitenfläche diese Beobachtung gemacht werden, sondern auch bei unterschiedlichen, eng benachtbarten semipolaren Facetten-Typen. Wie in Abschnitt 7.5 zu sehen sein wird, ergeben sich sehr deutliche Unterschiede in der Emissions-Wellenlänge von den benachbarten Facetten-Typen.

Es kann also festgehalten werden, dass es bei Vorhandensein von unterschiedlichen Facetten-Typen (z.B. $\{1\overline{1}01\}, \{11\overline{2}2\}, (0001)$) zu einem konkurrierenden Wachstums-Mechanismus kommen kann, der Dicke und In-Gehalt der QWs und dadurch die Emissions-Wellenlänge beeinflussen kann. Soll diese Interfacetten-Migration nicht absichtlich genutzt werden, erscheint es kontrollierbarer, wenn die Struktur derart ausgelegt wird, dass nur ein Facettentyp vor dem Abscheiden der aktiven Zone vorliegt, in diesem Fall also rein dreieckförmige Strukturen zu bevorzugen sind.

7.5 Einfluss der Facetten-Orientierung

Die Wahl des "richtigen" Facetten-Typs hängt neben der Größe des piezoelektrischen Feldes in starkem Maße auch von der Möglichkeit ab, homogene, hoch Indium-haltige Quantenfilme mit einer guten Materialqualität abzuscheiden. Es sollen in diesem Zusammenhang deshalb Untersuchungen erfolgen, die die Fragen nach Indium-Einbau-Effizienz und lokaler Homogenität beantworten. Beim selektiven Wachstum auf corientiertem Saphir ist jedoch die Wahl des Facetten-Typs auf die zwei semipolaren $\{1\overline{101}\}$ - und $\{11\overline{22}\}$ -Orientierung beschränkt.

$\{1\overline{1}01\}$ im Vergleich zu (0001)

Zunächst soll das Augenmerk auf eine Probenart gerichtet werden, bei der eine etwa 30 nm dicke GaInN-Schicht auf einen GaN-Puffer abgeschieden wurde. Dabei wurde

gleichzeitig, neben der Verwendung von $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten, das Wachstum auf einer corientierten GaN-Schicht durchgeführt. XRD-Messungen mit den dafür notwendigen Berechnungen zur Bestimmung der In-Konzentration für die entsprechende Orientierung haben gezeigt, dass eine um etwa 50% höhere Einbau-Effizienz für die $\{1\overline{1}01\}$ -Facette im Vergleich zur (0001)-Richtung vorliegt ($\{1\overline{1}01\}$: 22% In; (0001): 14.8% In) [198]. Dieses Ergebnis konnte durch optische Untersuchungen bestätigt werden. Interessanterweise konnte bei den optischen Untersuchungen nicht nur ein erhöhter Indium-Einbau festgestellt werden, sondern auch eine deutlich erhöhte Materialqualität. Die Intensität der semipolaren Fläche liegt trotz höherer Indium-Konzentration um etwa ein bis zwei Größenordnungen über der des polaren Films [223]. Dies ist ein starkes Indiz für die Möglichkeit, vergleichsweise dicke, semipolare GaInN-Schichten mit hoher Materialqualität realisieren zu können. Diese Tatsache könnte genutzt werden, um die Effizienz langwelliger LEDs weiter zu steigern, indem hochqualitative GaInN-Spacer unter die aktive Zone integriert werden, wie dies bei c-orientierten Schichten häufig praktiziert wird [224, 225]. Durch eine etwa 20-50 nm dicke GaInN-Schicht mit niedriger In-Konzentration von circa 2-5% ist es möglich, die relative Verspannung zum Quantenfilm zu reduzieren und dadurch die Generation von nichtstrahlenden Punktdefekten zu minimieren [207].

$\{1\overline{1}01\}$ im Vergleich zu $\{11\overline{2}2\}$

Der Vergleich zwischen den zwei semipolaren Facetten $\{1\overline{1}01\}$ und $\{11\overline{2}2\}$ soll an zwei unterschiedlichen Proben-Arten untersucht werden. Zuerst werden dreieck- bzw. trapezförmige GaN-Streifen für die beiden Streifen-Richtungen untersucht, die gleichzeitig auf einem mit verschiedenen Füllfaktoren maskierten Template abgeschieden wurden. Wie in früheren Studien gefunden [194], ergibt sich eine kurzwelligere Emission der $\{11\overline{2}2\}$ - im Vergleich zu den $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten, siehe Abb. 7.15. Um eine Aussage über die Indium-Komposition zu erlauben, muss dafür die QW-Schichtdicke bekannt sein.

Die Dicke der QWs wurde in dieser Studie folgendermaßen bestimmt: Für jede Masken-Geometrie wurde die exakte Form der 3D-GaN-Struktur mittels REM vermessen, um die effektive Oberfläche, bestehend aus semipolarer und ggf. polarer Fläche, zu ermitteln. Es fällt auf, dass sich trotz gleichen Füllfaktors die effektive Oberfläche in den zwei Streifen-Richtungen unterscheidet. Offenbar lässt sich - abhängig von den Wachstums-Parametern - die Form der 3D-Struktur variieren (vgl. Abschn. 6). Wie erwartet, bleibt dabei das abgeschiedene Volumen im Rahmen des Messfehlers für beide Richtungen identisch (Abb. 7.13). Unter der Annahme, dass dies auch für die aktive



Abbildung 7.13: Abgeschiedenes Volumen in Abhängigkeit der Maskenbreite für eine Maskenöffnung von 6 µm für Streifen in $\langle 1\overline{1}00\rangle$ - und $\langle 11\overline{2}0\rangle$ -Richtung.

Zone gilt, kann die QW-Schichtdicke ermittelt werden. Wir fanden so nahezu identische Dicken für die zwei Streifenrichtungen (Abb. 7.14). Die nicht unerhebliche Änderung der Wellenlänge auf den zwei Facetten muss also hauptsächlich an einer unterschiedlichen In-Konzentration liegen. Da nun Übergangs-Energie und Dicke der Quantenfilme unabhängig voneinander ermittelt werden konnten, kann die In-Konzentration unter Berücksichtigung der piezoelektrischen Polarisation bestimmt werden. Mit circa 15.5% fanden wir für die $\{1\overline{101}\}$ -Facette eine deutlich höhere Indium-Konzentration gegenüber 12% für die $\{11\overline{22}\}$ -Facette (Abb. 7.15).

Ganz ähnliche Ergebnisse werden bei inversen Pyramiden gefunden, die beide Facetten-Typen eng benachbart nebeneinander aufweisen. Die sechs $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten zeigen eine



Abbildung 7.14: Aus REM-Aufnahmen bestimmte QW-Dicke auf den semipolaren Seitenfacetten in Abhängigkeit der Maskenbreite für eine Maskenöffnung von 6 µm für Streifen in $\langle 1\overline{1}00 \rangle$ - und $\langle 11\overline{2}0 \rangle$ -Richtung.



Abbildung 7.15: PL-Übergangs-Energie in Abhängigkeit der Masken-Periode für die $\{11\overline{2}2\}$ - (Kreise) und $\{1\overline{1}01\}$ -Facette (Dreiecke). Für die ermittelte QW-Dicke (vgl. Abb.7.14) kann die entsprechende In-Konzentration durch fitten berechnet werden [40].

um mehr als 20 nm verschobene CL-Emission im Vergleich zur $\{11\overline{2}2\}$ -Facette (Abb. 7.16). Auch hier wird als Hauptunterschied die Indium-Konzentration vermutet, da Dicke und Piezofeld sehr vergleichbar sein dürften.

Der Grund für den unterschiedlichen Indium-Einbau könnte in Zusammenhang mit der unterschiedlichen Oberflächen-Terminierung stehen. Es kann einfach nachvollzogen werden, dass die $\{1\overline{1}01\}$ -Facette Stickstoff-terminiert ist und die $\{11\overline{2}2\}$ -Facette sowohl eine Gallium- als auch eine Stickstoff-Terminierung aufweisen kann [171, 226]. Es ist weiterhin bekannt, dass N-face GaN eine meist sehr langsam wachsende Oberfläche darstellt und sich aus diesem Grund zu einer besonders glatten und stabilen



Abbildung 7.16: Monochromatische CL-Aufnahmen einer inversen GaInN/GaN Pramide mit unterschiedlichen semipolaren Facetten-Typen. (a) Emission bei $\lambda = 440 \text{ nm}$ von $\{11\overline{2}2\}$ -Facetten, (b) Emission bei $\lambda = 472 \text{ nm}$ von $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten. Gemessen von M. Wiedenmann, Inst. für Halbleiterphysik an der Universität Ulm.

Facette ausbildet. Dies wird für die Stickstoff-terminierte (000-1)- und für die $\{1\overline{1}01\}$ -Fläche beobachtet [174,227]. Daneben wurde experimentell festgestellt, dass die besseren Bauelemente auf Ga-polaren Ebenen zu erzielen sind [228]. Es wird vermutet, dass dies am erhöhten Einbau von Verunreinigungen auf N-polaren Oberflächen liegt [229], insbesondere auch durch CH₃-Alkyle als Restprodukt der metallorganischen Precursoren [226]. Der erhöhte Einbau von Verunreinigungen gilt auch in Bezug auf Indium. Keller *et al.* konnten eine erhöhte In-Konzentration auf (000-1)- im Vergleich zu (0001)-GaN nachweisen [230].

7.6 Effizienz

Nachdem die Thematik der strukturellen Eigenschaften von GaInN-Filmen auf semipolaren Oberflächen im Detail erörtert wurde, stellt sich nun die Frage, ob semipolare Quantenfilme eine Effizienz-Steigerung gegenüber polaren Bauelementen ermöglichen. Hierfür müssen zwei Hauptmerkmale näher untersucht werden. Wie in Abschnitt 3.2 erläutert, gilt es einerseits, die strahlende Rekombination zu verbessern, was durch eine bessere Überlappung der Wellenfunktionen geschehen kann, andererseits müssen nicht-strahlende Prozesse möglichst vermieden werden. Unter diesem Gesichtspunkt soll zunächst geklärt werden, ob die aus der Theorie vorhergesagte Reduktion des piezoelektrischen Feldes vorhanden und wie groß das gegebenfalls verbleibende Feld ist. Anschließend soll auf die Materialqualität der aktiven Zone und die Schwierigkeiten eingegangen werden, hoch Indium-haltige Quantenfilme herzustellen.

7.6.1 Piezoelektrisches Feld

In Abschnitt 3.1.3 wurde über die Einflüsse des piezoelektrischen Feldes auf die Emissions-Eigenschaften eines QWs intensiv gesprochen. Diesbezüglich sollen nun messtechnisch erzielte Befunde vorgestellt werden, die an selektiv abgeschiedenden semipolaren 3D-Quantenfilmen gewonnen wurden.

Abschirmung durch Ladungsträger

Der indirekte Nachweis des reduzierten piezoelektrischen Feldes in semipolaren GaInN-QWs im Vergleich zu einer polaren Struktur kann durch Ladungsträger erfolgen, die das interne Feld teilweise abschirmen. Dadurch verringert sich der Einfluss des QCSEs,



Abbildung 7.17: Wellenlängen-Verschiebung durch Abschirmung des QCSE mit freien Ladungsträgern, durch photo-generierte Ladungsträger (a) und elektrische Injektion (b).

was sich in einer geringeren Rotverschiebung der Übergangs-Energie im Vergleich zum unverkippten Fall äußert. Zum Nachweis dieses Effekts können die Ladungsträger sowohl durch optische Anregung als auch durch elektrische Injektion in den QW eingebracht werden. Die Abbildungen 7.17 (a) und (b) zeigen die Blauverschiebung der Wellenlänge mit zunehmender Ladungsträgerdichte sowohl für eine optische Anregung als auch durch elektrische Injektion. Als Vergleich ist auch eine in c-Richtung gewachsene Referenz-Probe gezeigt. Sie wurde unter vergleichbaren Bedingungen hergestellt, weist aber einen leicht unterschiedlichen Indium-Gehalt auf (vgl. Abschn. 7.5). Trotz geringerer Indium-Konzentration ist die Verschiebung der Wellenlänge jedoch deutlich ausgeprägter als in der semipolaren Probe [231]. Diese Eigenschaft kann benutzt werden, um mit Hilfe von Modellrechnungen die Größe des piezoelektrisches Feldes anzugeben. Für die oben beschriebenen semipolaren $Ga_{1-x}In_xN$ -Filme mit einer Indium-Konzentration von x = 15% wurde mit dieser Methode ein Feld von $477 \, \text{kV/cm}$ bestimmt [55]. Dieser Wert befindet sich in akzeptabler Übereinstimmung mit dem heute verfügbaren Wert von $840\pm150\,\mathrm{kV/cm}$ für die $\{10\overline{11}\}$ -Ebene [59] und liegt deutlich unter dem einer c-orientierten Probe (2.78 MV/cm) [57]. Diese Methode ist jedoch nicht besonders genau und über das Vorzeichen des Feldes ist keine Aussage möglich.

PL mit variablem externen Feld

Eine sehr elegante Methode zur Bestimmung der Größe sowie der Richtung der piezoelektrischen Polarisation ist durch eine PL-Analyse zugänglich, bei der das interne Feld durch eine extern zu variierende Spannung verkippt werden kann (siehe auch [232,233]). Die dafür präparierte Probe wurde mit einem semitransparenten Kontakt



Abbildung 7.18: Bestimmung des piezoelektrischen Feldes mittels Feld-abhängiger Photolumineszenz. Die Größe des PF kann zu 120 kV/cm für den $Ga_{1-x}In_xN$ -Film (x = 15%) angegeben werden [55, 58].

versehen, wodurch gewährleistet wird, dass die dedektierbare PL-Emission von einer durch das externe Feld beeinflussten Position stammt.

Erstmals ermöglichte diese Methode den messtechnischen Zugang zu den unbekannten Größen einer semipolaren GaInN/GaN-Struktur [55,58]. Ein sehr kleiner Wert für das piezoelektrische Feld von nur 120 kV/cm für einen Ga_{1-x}In_xN-Film (x = 15%) wurde hierdurch ermittelt und das Vorzeichen dahingehend bestimmt, dass es in die gleiche Richtung zeigt, wie beim c-orientierten QW. Dieser Befund hat schließlich konsequenter Weise zu dem Schluss geführt, dass die Parametersätze des piezoelektrischen Tensors so zu wählen seien, dass der Messwert auf der Theoriekurve zum Liegen kommt. Dies sei mit den Parametersätzen, wie sie von Bernardini und Fiorentini vorgeschlagen werden, möglich [63]. Das bedeutendste und in der Literatur mit widersprüchlichen Angaben behaftete Tensorelement e_{15} sei in diesem Fall positiv ($e_{15}=0.28 \text{ C/m}^2$) zu wählen [57]. Dies hat zu Folge, dass es kein verschwindendes Feld bzw. keinen Vorzeichenwechsel des piezoelektrischen Feldes für eine semipolare Orientierung geben kann (vgl. Abb. 2.10). Neuere Untersuchungen postulieren diesen jedoch als unbestreitbaren Befund [59,234].

Woher stammt die Diskrepanz? Vermutlich liegt dies am Unterschied der untersuchten Probenarten. Während Shen *et al.* ihre Experimente auf quasi unverspannten GaN-Substraten durchgeführt haben und das piezoelektrische Feld allein aus dem darauf pseudomorph verspannten GaInN-Film resultiert, kann vermutet werden, dass die anisotrope Verspannung der dreidimensionalen GaN-Struktur die Größe des zu messenden Feldes beinflusst [215]. Dies macht soweit Sinn, da nur der relative Unterschied

zwischen Film und Puffer entscheidend für die Feld-Größe ist. Entsprechende Simulationen bezüglich der Verspannungs-Situation des GaN-Streifens sagen sogar unterschiedliche Verspannungs-Zustände entlang einer Facette vorher, was schließlich zu der Konsequenz führen würde, dass abhängig von der Position entlang einer Facette ein unterschiedlich großes Piezofeld ermittelt werden könnte [215]. Wir gehen heute davon aus, dass das Tensorelement e_{15} negativ ist und eine Größe von $e_{15} = -0.36 \text{ C/m}^2$ aufweist [59].

Variation der QW-Dicke

In Abschnitt 7.2.2 wurde gezeigt, dass sich die Wellenlänge eines GaInN-QW, der auf einer großen inversen Pyramiden-Struktur abgeschieden wurde, enorm entlang der Facette ändert. Die Änderung der Wellenlänge ist sowohl auf eine Variation der QW-Dicke als auch teilweise durch eine In-Konzentrations-Änderung hervorgerufen. In der oberen Hälfte der Struktur kann jedoch eine etwa konstante Indium-Konzentration angenommen werden. Diese Struktur eignet sich, um das piezoelektrische Feld durch Variation der QW-Dicke zu bestimmen. Bulashevich *et al.* haben eine analytische Methode entwickelt, die Feld-abhängige Verschiebung der Emissions-Energie anzugeben [235]:

$$E_{e,h} - E_{e,h}^{0} = -\frac{512m_{e,h}e^2F^2d^4}{243\pi^6\hbar^2\chi^2}$$
(7.4)

wobei $E_{e,h}^0$ jeweils der Grundzustand für Elektronen und Löcher im Potential-Topf mit unendlich hohen Wänden ohne elektrisches Feld F sei (vgl. Abschn. 3.1.2):

$$E_{e,h}^{0} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_{e,h} d^2} \tag{7.5}$$

Dabei stehen e und h für Elektronen und Löcher, χ für die Abschirmung des Feldes durch Ladungsträger, was jedoch hier aufgrund der niederenergetischen Anregung vernachlässigt wurde ($\chi = 1$), und d für die Dicke des QWs. Abb. 7.19 zeigt die Bestimmung des piezoelektrischen Feldes für diese vereinfachten Annahmen. In guter Übereinstimmung mit der gemessenen Verschiebung der Übergangs-Energie wird ein Feld von etwa 1-1.3 MV/cm bestimmt, ohne genaue Kenntnis der Indium-Komposition oder der piezoelektrischen Konstanten zu besitzen. Das Ergebnis befindet sich in guter Übereinstimmung mit den Resultaten, die aus der vollständigen Lösung der Poissonund Schrödinger-Gleichung folgen (vgl. Abb. 7.9).



Abbildung 7.19: Die Quadrate repräsentieren die gemessene Übergangs-Energie in Korrelation zur ermittelten QW-Dicke entlang einer semipolaren Facette (Abschn. 7.2.2). Die eingezeichneten Kurven zeigen die Verschiebung der Emissions-Wellenlänge für unterschiedliche Feld-Größen nach Bulashevich *et al.* [235]. Die Kurven wurden entsprechend normiert.

Lebensdauer

Die örtliche Trennung von Elektronen und Löchern innerhalb des durch die internen Felder verkippten Quantenfilms hat eine geringe Rekombinations-Wahrscheinlichkeit zur Folge, da es zu einer reduzierten Überlappung der Wellenfunktionen kommt. Messtechnisch erhält man Zugang zu der Größe des Überlapp-Integrals durch die Bestimmung der strahlenden Lebensdauer. Diese ist invers proportional zum Überlapp-Integral der Ladungsträger-Wellenfunktionen. Ein aufgrund eines hohen Piezofeldes stark verkippter QW führt also zu langen Ladungsträger-Lebensdauern, während ein wenig verkippter Quantenfilm schnelle Rekombinations-Zeiten hervorruft.

In Kooperation mit dem Institut für Strahlenphysik an der Universität Stuttgart konn-



Abbildung 7.20: Abklingszeiten der PL-Intensität einer semipolaren $\{1\overline{1}01\}$ -GaInN/GaN-Probe (a) und einer polaren Referenz (b) gemessen bei T = 4 K. QW-Dicke etwa 4 nm mit einer Indium-Konzentration von etwa 15%.

ten wir an einem blau-emittierenden Facetten-QW die Ladungsträger-Lebensdauer bestimmen [236]. Hierzu wurde der Laserstrahl in einer konfokalen Konfiguration auf einen Durchmesser von nur etwa 1 µm fokusiert. Abb. 7.20 zeigt die Abklingzeiten der PL-Intensität bei T = 4 K für die semipolare $\{1\overline{1}01\}$ -GaInN/GaN-Probe (a) im Vergleich zu einer polaren Probe (b). Ein nicht-monoexponentieller Verlauf wurde hierbei bestimmt.

Mit Hilfe der Fit-Funktion

$$I(t) = I_0 \exp\left[-\left(\frac{t}{\tau}\right)^{\beta}\right]$$
(7.6)

konnten wir eine Abklingzeit von $\tau = 650 \text{ ps}$ für die semipolare Probe und $\tau > 50 \text{ ns}$ für die polare Probe ermitteln [236]. Hierbei ist I(t) die PL-Intensität als Funktion der Zeit und β ein Fit-Parameter zur Beschreibung der vergleichsweise komplizierten Rekombinations-Dynamik gemäß Sun *et al.* [237]. Die strahlende PL-Kinetik kann gut mit dieser gestreckten Exponentialfunktion nachgebildet werden, wie sie gewöhnlicherweise benutzt wird, um ungeordnete Systeme zu beschreiben. Mit $\beta = 0.56$ konnte die beste Fit-Kurve ermittelt werden. Das Ergebnis ist vergleichbar mit Werten aus ähnlichen Studien [238]. Fluktuationen der Indium-Konzentration könnten diese Art der Unordnung verursachen und verantwortlich für den nicht-monoexponentiellen Abfall der PL-Intensität bei GaInN-LEDs sein [239].

Der ermittelte Wert für die Lebensdauer steht damit in sehr guter Übereinstimmung mit theoretischen Berechnungen des Überlapp-Integrals [70] und ist ein direkter Beweis für die drastisch reduzierte Polarisation auf den semipolaren Flächen. Dabei kann ausgeschlossen werden, dass die schnellen Abfallszeiten mit einer erhöhten nichtstrahlenden Rekombination in Verbindung stehen, da die absolute Intensität der semipolaren Probe mehr als doppelt so hoch ist wie die der polaren Probe [236].

7.6.2 Materialqualität

Nachdem gezeigt wurde, dass auf den Seitenfacetten der 3D-Struktur ein drastisch reduziertes Piezofeld vorherrscht, muss nun geklärt werden, ob die Schichten auch in einer ausreichend guten Materialqualität hergestellt werden können, um die Vorteile für die strahlende Rekombination nicht durch zu hohe nicht-strahlende Prozesse zu kompensieren.



Abbildung 7.21: Absolute PL-Intensität in Abhängigkeit der Wellenlänge gemessen bei T=295 K. Der Hauptunterschied der Proben liegt in der GaInN-Wachstumstemperatur.

Defekte

In Abschnitt 2.4 wurden typische Defekte vorgestellt und bezüglich ihrer räumlichen Ausdehnung unterschieden. Die zwei- und eindimensionalen Defekte, wie Stapelfehler und Fadenversetzungen, gilt es schon im GaN-Puffer zu vermeiden bzw. zu reduzieren. Sie wurden diesbezüglich schon in Kapitel 6.2 ausführlich behandet. In diesem Zusammenhang soll auf die 0-dimensionalen Defekte eingegangen werden, die eine Hauptproblematik in der aktiven Zone darstellen [207].

Häufige Punktdefekte in diesem Materialsystem treten in Form von Vakanzen (Gitterleerstellen) oder Atomen auf Zwischengitterplätzen auf. Als tiefe Störstellen, d.h. mit großer Ionisationsenergie, wirken sie als effiziente nicht-strahlende Rekombinations-Zentren und reduzieren die für die beabsichtigten strahlenden Übergänge notwendigen Ladungsträger. Als grundlegender Mechansimus für das Entstehen von Punktdefekten im Quantenfilm wird die starke Verspannung gesehen, die aufgrund der unterschiedlichen Gitterkonstanten zwischen GaInN und GaN entsteht (vgl. Abschn. 2.3.1). Gerade bei hoch Indium-haltigen Schichten besteht eine besonders hohe Gefahr für die Generation von Defekten, da einerseits der Verspannungs-Haushalt mit steigendem Indium-Gehalt zunimmt, andererseits die Wachstums-Bedingungen für hohe In-Konzentrationen tendenziell zu defektreicheren Schichten führen (vgl. Abschn. 7.1). Doch weil die piezoelektrische Polarisation für nicht-polare QWs reduziert ist, ergibt sich auch eine geringere Rotverschiebung aufgrund des QCSE. D.h. zum Erzielen derselben Wellenlänge ist auf nicht- und semipolaren Orientierungen mehr Indium nötig als bei der Verwendung der konventionellen c-Richtung.



Abbildung 7.22: TEM-Aufnahme einer semipolaren MQW-Struktur mit sehr hoher In-Konzentration. Die Struktur weist stellenweise löcherartige Defekte in der aktiven Zone auf.

Abbildung 7.21 zeigt die absolut gemessene PL-Intensität von semipolaren GaInN-Quantenfilmen für unterschiedliche Emissions-Wellenlängen gemessen bei einer Temperatur von T=295 K. Der Hauptunterschied in den Proben liegt in der Wachstumstemperatur beim Abscheiden der Quantenfilme, was zu einem unterschiedlichen Indium-Einbau führt (vgl. Abschn. 7.1). Wie zu erkennen, gibt es eine starke Abnahme der Intensität mit steigender Indium-Konzentration. Obwohl mit zunehmendem In-Gehalt auch die Größe des piezoelektrischen Feldes ansteigt, ist der starke Abfall der Intensität hauptsächlich auf die reduzierte Materialqualität zurückzuführen. Neben der Gefahr von Phasensegregation, die zur Ausbildung von Bereichen unterschiedlicher In-Gehälter führt [240, 241], kann es auch passieren, dass metallisches Indium abgeschieden wird und die kristalline Struktur nicht mehr aufrecht erhalten werden kann. Besonders bei zu kalter Wachstumstemperatur ist dies ein Problem (vgl. Abschn. 7.1.6). Abbildung 7.22 zeigt eine TEM-Aufnahme einer solchen Struktur. Die sehr hohe Indium-Konzentration kann nicht mehr im Kristall eingebaut werden und führt zu regelrechten Löchern im QW. Dieses Extrembeispiel soll verdeutlichen, dass eine ausgewogenen Parameter-Optimierung im Wachstumsprozess notwendig ist, um GaIn
N-Filme mit einem Indium-Prozentsatz von über 20% abzuscheiden, wie
es für semipolare Filme und grüne Licht-Emission notwendig ist. Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten, bisher besten Prozess-Parameter für langwellige Emission sind in Tabelle 7.1 zusammengefasst.



Abbildung 7.23: PL-Linienbreite von zwei semipolaren GaInN-Facetten-Quantenfilmen in Abhängigkeit der Emissions-Energie im Vergleich zu c-plane Proben aus [242].

Homogenität

Es soll nun die Homogenität der semipolaren Quantenfilme untersucht werden. Dabei können unterschiedliche Größenskalen betrachtet werden. Zunächst wird auf die Linienbreite der QW-Emission eingegangen, die durch integrale Anregung aus einer PL-Analyse gewonnen werden konnte. Abb. 7.23 zeigt ein Diagramm der Linienbreite in Abhängigkeit von der Emissions-Energie für c-orientierte GaInN-Quantenfilme [242]. Darin sind als sternförmige Punkte die Linienbreiten für zwei unserer semipolaren Quantenfilme eingezeichnet. Man erkennt eine Zunahme der Linienbreite mit erhöhter Indium-Konzentration. Diese Verbreiterung kann verschiedene Ursachen haben. Lokale Fluktuationen in Dicke und In-Konzentration können dafür genannt werden. Allein statistische Überlegungen führen diesbezüglich schon zu einer Verbreiterung des Emissions-Spektrums. Daneben sind die Wachstums-Parameter, die für einen hohen Indium-Einbau gewählt werden, tendenziell nachteilig für eine hohe Homogenität. Die niedrige Wachstumstemperatur reduziert die Mobilität der Adatome und erhöht die Gefahr für Fluktuations-Anhäufungen. Die Linienbreite der zwei semipolaren Proben befindet sich in guter Übereinstimmung mit den c-orientierten Strukturen. Unter dem Gesichtspunkt, dass für dieselbe Emissions-Energie sogar mehr Indium für die semipolaren Filme nötig ist, kann festgehalten werden, dass diese eine recht hohe Homogenität aufweisen, insbesondere da die makroskopische Homogenität durch Dicken- und Kompositions-Gradienten entlang einer Facette beeinflusst wird (vgl. Abschn. 7.2).



Abbildung 7.24: µ-PL-Analyse einer semipolaren, grünen GaInN-QW-Struktur durchgeführt an der Universität Regensburg [214]. Links: Intensitätsprofil, rechts: Wellenlängen-Karte.

Dass semipolare GaInN-Filme eine recht homogene Emission zeigen, wurde auch von Kawakami *et al.* mittels SNOM (scanning near field microscopy) beobachtet [243].

In Abb. 7.24 sind die Ergebnisse einer Photolumineszenz-Untersuchung mit hoher Ortsauflösung (μ -PL) gezeigt, die an einer semipolaren, grün emittierenden {1101}-Streifen-Probe vorgenommen wurde [214]. Die Länge der Facette beträgt etwas mehr als 4 µm. Die Spitze des Dreiecks befindet sich dabei zwischen den Messpunkten 1 und 3, die Basis des Dreiecks zwischen 8 und 9. Werden Randeffekte in diesem Zusammenhang vernachlässigt, stellt man eine äußerst homogene QW-Emission fest, was sich sowohl in der Intensität als auch in der Wellenlängen-Verteilung widerspiegelt. Die erhöhte Intensität an der Spitze des Dreiecks ist vemutlich auf Auskoppeleffekte zurückzuführen und spielt bezüglich der Homogenität eine untergeordnete Rolle.

7.6.3 IQE

In diesem Abschnitt soll nun versucht werden, eine Größe für die Effizienz der untersuchten Strukturen anzugeben und damit zu beurteilen, inwiefern sie geeignet sind, bisherige Konzepte ggf. zu ersetzen. Sind beide oben diskutierten Faktoren optimiert, d.h. eine hohe strahlende Rekombination durch eine gute Überlappung von Elektronenund Löcher-Wellenfunktion gewährleistet und die nicht-strahlende Rekombination aufgrund einer hohen Materialgüte minimiert, zeigt sich dies direkt durch eine hohe interne Quanteneffizienz η_{IQE} . Diese zu bestimmen ist jedoch nicht trivial.

Es haben sich hauptsächlich zwei Messmethoden zur Bestimmung von η_{IQE} etabliert. Die erste Methode ist dabei sehr pragmatisch. Man misst die externe Quanteneffizienz η_{EQE} einer vollständig prozessierten LED, was prinzipiell eine eindeutige Größe darstellt, und ermittelt aufgrund der Kenntnis der Extraktionseffizienz η_{EXTR} die interne Quanteneffizienz η_{IQE} . Die Schwierigkeit besteht darin, η_{EXTR} korrekt abzuschätzen. Jedoch sind durch diese Messmethode η_{IQE} und η_{EXTR} eng miteinander verbunden (vgl. Abschn. 3.2). Wird ein Wert überschätzt, so erniedrigt sich der andere automatisch und umgekehrt. Ein großer Nachteil dieser Methode ist die Notwendigkeit einer vollständig prozessierten LED. Die QW-Eigenschaft kann nicht getrennt von Dotierprofilen oder Prozessierungs-Fehlern betrachtet werden.

Die andere Methode stützt sich auf eine temperatur- und leistungsabhängige PL-Analyse [196, 244, 245]. Dabei nimmt man an, dass bei einer zu bestimmenden Anregungs-Leistung und tiefer Temperatur eine Quantenausbeute von 100% vorherrscht. Durch Variation der Anregungs-Leistung und Temperatur wird zunächst die maximale PL-Intensität I_{max} ermittelt und dient zur Normierung des Wertes, der bei Raumtemperatur gemessen wird I(T). Da angenommen werden kann, dass die Extraktionseffizienz η_{EXTR} unabhängig von der Temperatur ist ($\eta_{EXTR} \neq f(T)$), kann, indem ein einfacher Quotient aus I(T) und I_{max} gebildet wird, die interne Quanteneffizienz bestimmt werden. Es gilt dann:

$$\eta_{IQE} = \frac{I(T)}{I_{max}} \tag{7.7}$$

In diesem Modell wird davon ausgegangen, dass erst bei erhöhter Temperatur nichtstrahlende Prozesse auftreten. Die Gefahr dieser Methode scheint jedoch in der Annahme zu stecken, dass bei tiefer Messtemperatur jegliche nicht-strahlende Prozesse ausgeschlossen werden. Somit besteht die Gefahr, dass leicht eine deutlich zu hohe η_{IQE} bestimmt wird, falls durch eine, absolut gesehen, geringe Intensität geteilt wird. Wir vermuten, dass beispielsweise erhöhte Indium-Ansammlungen sowohl bei Raumals auch bei Tieftemperatur nicht-strahlend wirken können. Schlechte Proben werden dadurch überbewertet!

Unter diesen Gesichtspunkten soll deshalb eine Alternativ-Methode genutzt werden, um die interne Quanteneffizienz η_{IQE} der semipolaren Proben abzuschätzen. Es soll dabei ebenfalls auf eine temperaturabhängige Messung zurückgegriffen werden. Bei tiefer Temperatur wird auch hier davon ausgegangen, dass die strahlende Rekombination do-

miniert. Mit anderen Worten, eine nicht-strahlende Rekombination durch thermischaktivierte Prozesse ist sehr unwahrscheinlich. In diesem Zusammenhang wird nun die Zeitabhängigkeit der Rekombination zur Bestimmung von η_{IQE} herangezogen. Der bedeutende Unterschied zur PL-Analyse besteht darin, dass keine Relativwerte zur Ermittlung von η_{IQE} genutzt werden, sondern absolute Größen, die ggf. auch mit Literaturwerten verglichen werden können und so auf ihre Plausibilität hin überprüfbar sind. Ebenso können die Abklingzeiten präziser ermittelt werden, als es für absolute Intensitäten der Fall ist. Allein die thermische Ausdehnung führt während der PL-Messung zu einer Positions-Verschiebung der Probe für unterschiedliche Messtemperaturen und macht dadurch ein ständiges Nachjustieren der Messapparatur nötig, wenn keine Fehler bei den zu ermittelnden Intensitäten gemacht werden sollen. Insbesondere kann diese Methode auch mit einer hohen Ortsauflösung benutzt werden, wie es nötig wird, wenn sich lokal die QW-Eigenschaften ändern und in Folge dessen die Quanteneffizienz stark variiert, wie es bei inversen GaInN/GaN-Pyramiden der Fall sein kann.

Streifen

Die in Bezug auf die µ-PL vorgestellte (vgl. Abschn. 7.6.2), grün emittierende {1101}-Streifen-Probe wurde mittels zeitaufgelöster Kathodoluminezenz (CL) untersucht [246]. Die bei einer Temperatur von T = 5.5 K ermittelte Abklingzeit der CL-Intensität beträgt $\tau = 4.2$ ns. Dieser Wert für den grünen ($\lambda = 510$ nm), semipolaren QW steht in guter Übereinstimmung mit dem Wert von $\tau = 3.1$ ns, der für einen grünen QW auf der semipolaren {2021}-Fläche und damit mit leicht kleinerem Piezofeld von Funato *et al.* ermittelt wurde [247]. Im Vergleich zu polaren Schichten, bei denen Abfallszeiten von etwa $\tau = 85$ ns für grüne Emission bestimmt wurden [248], ist dies ein eindeutiges Charakteristikum für ein reduziertes Piezofeld.

Bei Tieftemperatur wird davon ausgegangen, dass der Beitrag der nicht-strahlenden Rekombination durch sehr lange Zerfallszeiten zu vernachlässigen ist und somit gilt:

$$\tau_r(5\,\mathrm{K}) = \tau(5\,\mathrm{K}) \tag{7.8}$$

D.h. gemäß Gleichung 3.7 gilt:

$$\eta_{IQE}(5\,\mathrm{K}) = \frac{\tau(5\,\mathrm{K})}{\tau_{\mathrm{r}}(5\,\mathrm{K})} = 100\,\% \tag{7.9}$$

Bei Raumtemperatur wurde an unserer Probe eine Abfallszeit von $\tau(300 \text{ K}) = 600 \text{ ps}$ ermittelt. Um die IQE bei Raumtemperatur $\eta_{IQE}(300 \text{ K})$ zu bestimmen, muss $\tau_r(300 \text{ K})$ bekannt sein. Da davon ausgegangen werden kann, dass τ_r mit steigender Temperatur ansteigt [249], gilt deshalb

$$\tau_r(300\,\mathrm{K}) \ge \tau_r(5\,\mathrm{K}) \tag{7.10}$$

und ein maximaler Wert für die interne Quanteneffizienz kann nun abgeschätzt werden:

$$\eta_{IQE}(300\,K) \le 14\%$$
(7.11)

Vergleichs-Messungen mittels temperatur- und anregungsabhängiger PL haben $\eta_{IQE} \approx 30\%$ ergeben [250]. Wir vermuten, dass dieser Wert im Rahmen der oben diskutierten Annahmen etwas zu hoch ausfällt. Dennoch kann festgehalten werden, dass die hier erreichte Quanteneffizienz nur etwa 2-3 mal schlechter ausfällt als die Werte von Funato *et al.* [247], die ihre Strukturen auf freistehenden GaN-Substraten realisiert haben. Genau diese Strukturen haben zur bisher langwelligsten GaN-basierten Laserdiode mit 531 nm geführt [251]. Die Effektivität der hier gezeigten Methode, durch selektives Wachstum langwellige semipolare GaInN/GaN-Filme mit hoher Materialgüte auf großen Substrat-Flächen zu realisieren, ist hiermit bestätigt.

Inverse Pyramiden

Wie in Kapitel 6.1.6 gezeigt, kann die GaN-Materialqualität durch die Verwendung von inversen Pyramiden deutlich gesteigert werden. Nun soll auch für diese Strukturen ein Wert für die interne Quanteneffizienz η_{IQE} eines darauf abgeschiedenen GaInN-QWs angegeben werden. Entlang einer Facette der trichterförmigen Struktur ist eine starke Verschiebung der Wellenlänge zu beobachten, die auf einen Gradienten in QW-Dicke und Indium-Konzentration zurückgeführt werden konnte (vgl. Abschn. 7.2.2). Diese Struktur bietet sich nun in idealer Weise an, die IQE für unterschiedliche Emissions-Wellenlängen auf der semipolaren Facette anzugeben (Abb. 7.25). Die max. IQE wurde dabei anhand der Abklingzeiten der CL-Intensität bei Raumtemperatur und T = 4 K bestimmt (vgl. Abb. 7.8). Folgender Zusammenhang wurde dabei verwendet:

$$\eta_{IQE}(300\,\mathrm{K}) = \frac{\tau(300\,\mathrm{K})}{\tau_{\mathrm{r}}(300\,\mathrm{K})} \le \frac{\tau(300\,\mathrm{K})}{\tau_{\mathrm{r}}(4\,\mathrm{K})} \le \frac{\tau(300\,\mathrm{K})}{\tau(4\,\mathrm{K})}$$
(7.12)

mit $\tau(T)$ als gemessene Zerfallszeit bei der Temperatur T, $\tau_r(T)$ steht für die strahlende Lebensdauer.

Die abnehmende Effizienz mit zunehmender Wellenlänge ist für c-orientierte Quantenfilme ein wohl bekanntes Problem und unter der Bezeichnung "Green Gap" bekannt



Abbildung 7.25: Max. IQE für verschiedene Wellenlängen entlang einer inversen Pyramiden-Facette.

geworden. Da nun auch für die semipolare Orientierung trotz des reduzierten piezoelektrischen Feldes eine starke Abhängigkeit von der Wellenlänge beobachtet wird, stellt sich die Frage nach den limitierenden Faktoren. Ist das Problem das noch immer vorhandene innere Feld, das zu einer Trennung der Ladungsträger führt, oder die Materialqualität, die sich ggf. mit zunehmendem Indium-Gehalt verschlechtert?

Zur Klärung dieser Frage soll eine genauere Analyse der zeitaufgelösten CL-Messungen erfolgen. Dafür wird die nicht-strahlende Lebensdauer entlang der Facette aus den gemessenen Abklingzeiten abgeschätzt. Es wird erwartet, dass es mit Verschlechterung der Materialqualität zu schnelleren Abklingzeiten der CL-Intensität kommt, d.h. dass die nicht-strahlenden Prozesse schneller werden.



Abbildung 7.26: Ladungsträger-Lebensdauer in einem GaInN-QW entlang einer inversen Pyramiden-Struktur. Die Position 0 entspricht der Pyramiden-Spitze.

Abbildung 7.26 zeigt die gemessenen Abklingzeiten und die ermittelte nicht-strahlende Lebensdauer τ_{nr} entlang der inversen Pyramiden-Facette. Wie in Abschn. 7.2.2 ausführlich diskutiert, sind die QW-Dicke und die Indium-Konzentration nahe der inneren Spitze geringer und nehmen kontinuierlich nach oben hin zu. Dies hat zur Folge, dass die strahlenden Lebensdauern länger werden, da es zu einer zunehmenden Trennung von Elektronen und Löchern innerhalb des QWs kommt. Dennoch hat das interne Feld noch immer starken Einfluss auf die Effizienz, obwohl es die semipolare Orientierung um etwa 2/3 reduziert ist.

Betrachtet man die nicht-strahlenden Zeiten, kann die Facette in zwei Bereiche geteilt werden. In der unteren Hälfte wird eine kontinuierliche Abnahme der Lebensdauer festgestellt, je weiter man sich von der Trichter-Spitze entfernt. Dies ist genau der Bereich, in dem eine starke Zunahme der Indium-Konzentration ermittelt wurde (vgl. Abschn. 7.2.2). Demnach wird vermutet, dass es zu einer Verschlechterung der Materialqualität durch die höhere Indium-Konzentration kommt. In der oberen Hälfte des Trichters hingegen nehmen die nicht-strahlenden Zeiten wieder zu. In diesem Bereich ist die Indium-Konzentration nahezu konstant und alle Zeiten erhöhen sich (nur) durch die Zunahme der QW-Dicke. Eine Zunahme der nicht-strahlenden Zeiten wurde jedoch zunächst nicht erwartet, da eine gleichbleibende Materialqualität mit gleichbleibender Indium-Konzentration angenommen werden kann. Thermionische Emission als möglicher Verlustmechanismus, wie er u.a. von Jho et al. zur Beschreibung von stark verkippten Quantenfilmen herangezogen [232] wird, ergibt zwar einen tendenziell richtigen Verlauf, jedoch sind die absoluten Werte zu groß und können das Verhalten nicht beschreiben. Aus diesem Grund vermuten wir, dass es tatsächlich zu einer Abnahme der nicht-strahlenden Rekombination mit zunehmender QW-Dicke kommt. Beispielsweise könnte es an den Grenzflächen zwischen Barriere und QW zu nicht-strahlenden Prozessen kommen, deren Wahrscheinlichkeit durch dickere Filme reduziert wird, da sich die Wellenfunktionen nicht mehr so tief in das Barrieren-Material ausdehnen. Die langen Lebensdauern sind ein eindeutiger Hinweis auf eine recht hohe Materialqualität.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass auch für semipolare Orientierungen trotz deutlicher Reduktion der piezoelektrischen Polarisation die internen Felder die strahlende Rekombinations-Wahrscheinlichkeit hemmen und limitierend für eine hohe Effizienz wirken. Zudem muss das Wachstum hoch-qualitativer GaInN-Filme optimiert sein, was gerade für hohe Indium-Konzentrationen eine Schwierigkeit darstellt.

8 Semipolare Leuchtdioden

Die bisher gefundenen Erkenntnisse gilt es nun, im Bauteil auf deren Funktionstüchtigkeit zu erproben. Für die Realisierung einer funktionierenden Leuchtdiode sind neben der aktiven Zone, die in den Kapiteln 3 und 7 detailliert erörtert wurde, p- und n-dotierte Schichten nötig, um eine angemessene Ladungsträger-Injektion und deren gezielte Rekombination zu ermöglichen. Dabei ist das exakte Dotierprofil von besonderer Bedeutung, da beispielsweise Mg-Atome als p-Dotierstoff die InGaN-Lumineszenz zerstören, jedoch im p-Gebiet nötig sind für eine gute Leitfähigkeit. Bevor elektrooptische Eigenschaften diskutiert werden, soll kurz auf Prozessierungs-Details eingegangen werden.

8.1 Dotierung

In Abschnitt 4.7 und 4.8 wurden bereits die Besonderheiten der Dotierung von GaNbasierten Schichten diskutiert. Nun sollen im Speziellen die Eigenschaften von dotierten Schichten erörtert werden, die selektiv abgeschieden wurden.

8.1.1 n-Dotierung

Silizium als n-Dotierstoff in Gruppe III-Nitriden erweist sich als vergleichsweise unproblematisch. Die Dotierstoff-Konzentration steigt linear mit der Silan-Flussrate an und baut sich auch beim selektiven Wachstum ohne erkennbare Probleme in den Kristall ein.

8.1.2 p-Dotierung

Wie bereits in Abschnitt 4.8 erklärt, stellt sich die p-Dotierung von Gruppe III-Nitriden deutlich schwieriger dar. Neben den in Abschnitt 4.8 diskutierten Problemen, wie beispielsweise der hohen Ionisierungsenergie und der deshalb notwendigen hohen Dotierstoff-Konzentration, treten beim selektiven Wachstum zusätzliche Probleme auf. Das Einbauverhalten von Magnesium bzw. das Wachstum von Mg-dotiertem GaN verhält sich sehr unterschiedlich für die einzelnen Kristallrichtungen [165,252,253]. Bei den von uns verwendeten Prozess-Parametern kommt es zu einem deutlich verstärkten lateralen Wachstum auf den Streifen, wie es auch von Beaumont *et al.* gefunden wurde [168], wobei es sogar vorkommt, dass das Wachstum in c-Richtung nahezu vollständig unterdrückt wird [174]. Diese Tatsache wirkt sich fatal auf die Funktionsweise des Bauelements aus, da der später aufgebrachte p-Metall-Kontakt an der Dreiecksspitze direkt das n-Gebiet bzw. die aktive Zone berühren und zu elektrischen Kurzschlüssen führen kann.

Spitzenisolierung

Dieser Problematik konnten wir auf unterschiedlicher Weise entgegen wirken. Wir konnten zeigen, dass prozesstechnologisch die Spitze durch eine dielektrische Zwischenschicht nach dem Wachstum elektrisch isoliert werden kann [174]. Hierzu wird ein sehr dünnflüssiger Lack (z.B. AZ1512HS) mit einer äußerst hohen Umdrehungszahl (9000 U/min) aufgeschleudert. Dieser legt sich zwischen die Erhebungen, dass die Spitzen nur leicht bedeckt werden, die Zwischenräume dagegen vergleichsweise dick. Im folgenden Schritt werden durch eine Trockenätzung in einem Sauerstoff-Plasma-Verascher die Spitzen vom Lack freigelegt. Anschließend wird unter einem sehr flachen Winkel die dielektrische Schicht, wie beispielsweise Al_2O_3 , aufgesputtert und bedeckt hauptsächlich die Dreiecksspitze, da die benachbarten Dreiecke die untere Seite der Dreiecke abschirmen. Nach einem Lift-off-Schritt und der Entfernung des Lacks befindet sich die Isolations-Schicht nur auf der Dreiecksspitze (Abbildung 8.1).

Ebenso hat sich eine Modifikation des p-GaN-Wachstums zur Vermeidung von elektrischen Kurzschlüssen als praktikabel erwiesen. Durch ein gepulstes Angebot der Precursoren kann das vertikale Wachstum gesteigert werden und es ist somit möglich, auch die Spitze zu überwachsen [231]. Dazu wurde in diesen Experimenten das gepulste Angebot in das konventionell gewachsene p-GaN eingebettet. Jeweils für eine Sekunde wurde das Ammoniak-Angebot hierfür aus- und die Gallium- und Magnesium-Quelle angeschalten. Hierauf folgend wurde der Ammoniak für drei Sekunden aufgeschalten und die zuvor geöffneten Quellen geschlossen. Dieser Zyklus wurde 360 Mal wiederholt, um eine nominelle Schichtdicke von 100 nm zu erreichen, bevor das Wachstum konventionell beendet wurde.

8.1 Dotierung



Abbildung 8.1: 3D-REM-Aufnahme: Schräger Blick auf die Dreiecksspitzen. Im hinteren Bereich der Streifen ist die elektrische Al₂O₃-Isolationsschicht zur Vermeidung von Kurzschlüssen zu sehen.

Den vielleicht elegantesten Weg zur elektrischen Isolierung der Dreiecksspitze stellt ein mehrstufiger Prozess ohne gepulstes p-GaN-Wachstum dar. Er beginnt mit einer vergleichsweise hohen Mg-Konzentration, wie sie nahe der aktiven Zone und für eine gute p-Leitfähigkeit nötig ist. Auf das sich durch das laterale Wachstum bildende Plateau mit einer c-orientierten Oberfläche kann nun mit sehr geringer Dotierstärke ein (p)-GaN-Dreieck abgeschieden und somit die Spitze isoliert werden. Die für gute p-Kontakt-Eigenschaften nötige Erhöhung der Dotierstoff-Konzentration findet in einem dritten Schritt statt, bei dem die Schicht nun wieder hauptsächlich auf den Facetten wächst. Bild 8.2 zeigt eine REM-Aufnahme einer solchen Struktur.



Abbildung 8.2: REM-Aufnahme einer GaN-Dreiecksspitze mit mehrstufigem p-GaN-Wachstum. Heller Kontrast deutet auf p-Leitfähigkeit hin.

8 Semipolare Leuchtdioden



Abbildung 8.3: SIMS-Ergebnisse einer planaren LED-Struktur (links) im Vergleich zur semipolaren {1101}-Facetten-LED (rechts). Die Messungen wurden von N. Valle vom Département Science et Analyse des Matériaux du Centre de Recherche Public Gabriel Lippmann in Luxemburg durchgeführt.

Mg-Konzentration

Über den genauen Einbau von Dotierstoff-Atomen bzw. über einen Unterschied zum c-orientierten Wachstum kann bisher keine eindeutige Aussage getroffen werden. Standardisierte Messmethoden wie das Hall-Verfahren zur Evaluierung von Ladungsträger-Dichte und -Beweglichkeit sind nicht direkt zugänglich. Dies liegt daran, dass sich die p-dotierten Schichten nur auf den Steitenflächen der 3D-Strukturen befinden und dadurch keine großflächige, zusammenhängende Schicht gegeben ist. Eine Messung ist deshalb in üblicher Hall-Geometrie nicht möglich.

Deshalb wurde in Kooperation mit dem Centre de Recherche Public Gabriel Lippmann in Luxemburg versucht, durch ortsaufgelöste Sekundärionen-Massenspektrometrie-Messungen (SIMS) mit einer lateralen Auflösung von etwa 8 µm Hinweise auf die Höhe der Dotierstoff-Konzentration zu erhalten [254]. Dazu wurde der Ionen-Strahl von oben auf einen dreieckförmigen, nicht verkippten GaN-Streifen gerichtet, auf dessen Seitenfläche sich eine vollständige LED-Struktur befindet. Die Schicht-Folgen wurden, wie von SIMS bekannt, abgetragen. Wie sich herausgestellt hat, stört die strukturierte Oberfläche jedoch die gewohnte Detektion der herausgeschlagenen Atome und eine eindeutige Aussage zum Mg-Einbau ist problematisch. Abb. 8.1.2 zeigt das SIMS-Ergebnis einer planaren Referenz-Probe (links) im Vergleich zur 3D-Probe mit semipolaren $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten (rechts). Eine Interpretation erscheint sehr schwierig. Vergleicht
man das Verhältnis zwischen Mg- und Ga-Atomen, könnte man vermuten, dass der Mg-Einbau auf der semipolaren Fläche etwa halb so groß ausfällt.

Mittlerweile gibt es in der Literatur Hinweise, dass eine erhöhte Mg-Konzentration auf der $\{1\overline{1}01\}$ -Orientierung zu finden ist und auch eine Selbstkompensation später auftritt [255].

Bei den hier untersuchten Strukturen musste jedoch zur aussagekräftigen Bewertung der p-Dotierung auf die indirekte Beurteilung über die Ausgangsleistung im LED-Betrieb zurückgegriffen werden. Unter diesem Gesichtspunkt konnte im Rahmen dieser Arbeit keine vollständige Optimierung der Wachstums-Parameter für die p-Dotierung erarbeitet werden. Ebenso steht die Untersuchung des optimalen Dotierprofils für die semipolare Orientierung noch aus [256].

8.2 Prozessierung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die LED-Strukturen diversen Prozessierungs-Schritten unterzogen, wie sie u.a. aus der normalen Bauelement-Produktion bekannt sind, um sie für elektro-optische Untersuchungen vorzubereiten. U.a. wurden Schritte wie Aktivierung der p-Schicht durch thermisches Ausheizen, Formation von Mesa-Strukturen, Metallisierung von p- und n-Kontakten durchgeführt. Zu weiterführenden Details siehe hierzu beispielsweise [174] oder auch [194]. Ebenso ist auch eine aufwendigere Chip-Herstellung, wie sie heute von der Industrie für Hochleistungs-Bauelemente verwendet wird [69], mit dieser Struktur denkbar. Hierfür wird die p-Seite als hoch-reflektierender Vollkontakt ausgeführt und auf einen Träger im sogenannten Flip-Chip-Prozess übertragen. Danach wird das (Saphir-)Substrat entfernt, die n-Seite aufgerauht, um eine gute Licht-Extraktion zu ermöglichen, und die n-Kontakte aufgebracht. Die Emission erfolgt dann durch das n-Gebiet. Im Rahmen dieser Arbeit wurde festgestellt, dass die durch die strukturierte Oberfläche vorzunehmenden Anpassungen ohne größere Probleme durch eine Optimierung der Lithographie-Schritte möglich ist.

Die anschließend gezeigten Ergebnisse wurden an Teststrukturen erzielt, die als konventionelle Top-Emitter prozessiert wuden. Die Messungen wurden on-wafer durchgeführt, d.h. kein Vereinzeln der Bauelemente bzw. Aufbau zu einem Chip vorgenommen. Die optoelektronischen Kenndaten gilt es unter diesem Gesichtspunkt zu beurteilen.



Abbildung 8.4: Strom-Spannungs-Kennlinie einer Facetten-LED mit sehr guten Leckstrom-Eigenschaften.



Abbildung 8.5: Optische Ausgangsleistung als Funktion des Stroms für zwei unterschiedliche Kontaktdurchmesser (70 und 140 µm).

8.3 Optoelektronische Eigenschaften

Es sollen nun die optoelektronischen Eigenschaften der Test-LEDs vorgestellt werden, wobei zwischen Streifen- und inversen Pyramiden-Strukturen unterschieden werden soll. Der Hauptgrund der Unterscheidung liegt in der Homogenität der Lumineszenz-Eigenschaft entlang einer Facette, was direkte Konsequenzen auf die LED-Emission hat (vgl. Abschn. 7.2).

8.3.1 Streifen

Zunächst wird das Augenmerk auf die Streifen-Geometrie mit $\{1\overline{1}01\}$ -Facetten gelegt. Die bei der Elektrolumineszenz-Messung typischerweise ermittelten LIV-Kenndaten, d.h. optische Ausgangsleistung, Strom- und Spannnungs-Charakteristik, sind in den Diagrammen 8.4 und 8.5 für eine LED dargestellt, die im UV/blauen Spektral-Bereich bei 425 nm emittiert. Man erkennt die sehr guten Dioden-Eigenschaften der untersuchten Struktur und ein hervorragendes Leckstrom-Verhalten. Bei einer Rückwärtsspannung von -2 V konnten nur wenige Hundert pA Leckstrom gemessen werden, was die Effektivität der Spitzenisolierung bestätigt, die in diesem Fall durch ein gepulstes p-GaN-Wachstum erzielt wurde (vgl. Abschn. 8.1.2). Die optische Ausgangsleistung für die bei 425 nm emittierende LED beträgt bis zu 700 µW bei 20 mA und 3 mW bei 110 mA.





Abbildung 8.6: Optische Ausgangsleistung als Funktion des Stroms einer blau-grün emittierenden semipolaren Facetten-LED mit einer Peak-Wellenlänge von 495 nm.

Abbildung 8.7: Spektrum einer blau-grün emittierenden semipolaren Facetten-LED mit einer Peak-Wellenlänge von 495 nm.

Desweiteren wurden Versuche unternommen, die Emissions-Wellenlänge der untersuchten Strukturen in den grünen Spektralbereich zu schieben. In den Abschnitten 7.1 und 7.6.2 wurden bereits die Schwierigkeiten intensiv diskutiert, hoch-Indiumhaltige Quantenfilme in hoher Materialqualität abzuscheiden. Insbesondere stellt die Wachstumstemperatur einen sehr kritischen Parameter dar. Die Temperatur während des GaInN-Quantenfilm-Wachstums muss tief genug gewählt werden, um die benötigte In-Konzentration für eine lange Emissions-Wellenlänge zu gewährleisten. Jedoch steigt dadurch die Gefahr von Einbaufehlern bzw. der Generation von Punktdefekten, die sich nachteilig auf die strahlenden Eigenschaften auswirken. Ebenso muss darauf geachtet werden, die Reakortemperatur für das p-(Al)GaN-Wachstum korrekt zu wählen. Sie muss heiß genug sein für gute elektrische Eigenschaften, jedoch nicht zu hoch, um eine Degradierung der GaInN-Schichten zu vermeiden. Typische Wachstumstemperaturen für die p-dotierten Schichten bewegen sich aus diesem Grund zwischen 950° und 1050°C.

Abb. 8.6 zeigt die optische Ausgangsleistung als Funktion des Stroms für eine semipolare Facetten-LED mit einer Peak-Wellenlänge von 495 nm. Bei der Test-Struktur konnte eine Ausgangsleistung von 240 μ W bei 20 mA und 1 mW bei 110 mA erzielt werden. Abb. 8.7 zeigt das entsprechende Spektrum.

Obwohl diese Daten nicht an die Werte von Bauelementen auf freistehenden GaN-Substraten heranreichen [98–100, 257–259], sind dies doch recht passable Werte und unterstreichen die Funktionalität dieser nicht vollständig optimierten Methode. Beson-

8 Semipolare Leuchtdioden

ders unter dem Gesichtspunkt, dass die Strukturen auf kostengünstigen, vollen 2-Zoll-Wafern (oder größer) hergestellt werden können, zeigt das Potential dieses Konzepts auf. Denn verglichen mit anderen Verfahren, bei denen semi- oder nicht-polares Material auf Fremdsubstraten abgeschieden wird, gehören diese Werte noch immer zu den besten, die in der Literatur gefunden werden können [24, 74, 75, 132, 136, 147, 151].

8.3.2 Inverse Pyramiden

Wie in Abschnitt 7.2.2 gezeigt, kommt es bei inversen GaInN/GaN-Pyramiden zu einer kontinuierlichen Verschiebung der Emissions-Wellenlänge entlang einer Facette. Wir konnten detailliert darlegen, dass durch den Einfluss von Gasphasen-Diffusion ein Gradient in QW-Dicke und Indium-Konzentration verursacht wird, der zu einer enormen Variation der Emissions-Wellenlänge von über 1 eV führt. Wird ein derartiges Design in eine LED-Struktur integriert, hat dies direkten Einfluss auf die Leucht-Eigenschaften des Bauelements.

Diagramm 8.8 zeigt die EL-Spektren einer inversen Pyramiden-LED für unterschiedliche Ströme (1 mA - 20 mA). Wie zu erkennen, ergibt sich ein insgesamt sehr breites Emissions-Spektrum. Dabei kommt es zusätzlich zu einer Farbverschiebung für unterschiedliche Stromdichten. Während bei sehr kleinen Strömen die Emission im grün/gelben Bereich liegt, schiebt sie mit ansteigender Stromdichte zu höherer Energie in den blauen Bereich. Die genaue Farb-Koordinate wurde von S. Shirokov von der M. V. Lomonosov Moscow State University in Moskau, Russland ermittelt und ist in Diagramm 8.9 dargestellt. Interessanterweise wird im Farbdiagramm der Weißlicht-Punkt für 1 mA erreicht, schiebt dann über eine grünliche hin zu einer von einem Blauton dominierten Emission. Dieser Farbverlauf kann nicht durch einfaches Bandfilling oder durch ein Abschirmen des im geringeren Umfang noch vorhandenen piezoelektrischen Feldes erklärt werden. Vielmehr muss die lokale QW-Eigenschaft wie Schichtdicke und In-Komposition auf der 3D-Oberfläche berücksichtigt werden, wie dies ausführlich in Kapitel 7 geschehen ist.

Ob diese Beobachtung für die Anwendung in einem Bauteil erwünscht oder eher negativ zu bewerten ist, kann nicht pauschal beantwortet werden. Während die breite Emission für schmalbandige Applikationen wie beispielsweise Laserdioden unvorteilhaft erscheint, kann sie für die Beleuchtungstechnik durchaus interessante Aspekte zeigen. Wird die Struktur z.B. in Kombination mit einem orange/roten Phosphor für die Erzeugung von weißem Licht benutzt, könnte auch für hohe Stromdichten und eine hohe Lichtleistung eine Weißlicht-Quelle mit hohem CRI (engl.: color rendering index)

8.3 Optoelektronische Eigenschaften





Abbildung 8.8: EL-Spektren einer semipolaren Facetten-LED basierend auf inversen GaN-Pyramiden für Ströme von 1 bis 20 mA.

Abbildung 8.9: Farbkoordinaten einer semipolaren Facetten-LED basierend auf inversen GaN-Pyramiden für Ströme von 1 bis 20 mA ermittelt von S. Shirokov von der M. V. Lomonosov Moscow State University in Moskau, Russland.

realisiert werden. Es würde dann das Minimum im grünen Spektralbereich entfallen, das oft beobachtet wird, wenn konventionelle UV/blaue LEDs mit gelbem Phosphor zur Anwendung kommen, und die beleuchteten Gegenstände hätten ein brillianteres, natürlicheres Erscheinungsbild.

9 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen der hier vorliegenden Arbeit wurden dreidimensionale Ga(In)N-Strukturen dahingehend untersucht, ob sie als Licht emittierende Komponenten Vorteile bezüglich der Effizienz im Vergleich zu konventionellen Bauelementen auf GaN-Basis aufweisen. Zwei Hauptmerkmale sind hierfür zur Steigerung der internen Quanteneffizienz (IQE) zu optimieren. Einerseits müssen die nicht-strahlenden Übergänge gehemmt, andererseits die strahlende Rekombination gefördert werden.

Zunächst wird eine theoretische Basis geschaffen, um die optoelektronischen Vorgänge innerhalb eines GaInN-Quantenfilms zu verstehen, der in die konventionelle, stark polare c-Richtung des Wurtzit-Kristalls abgeschieden wird. Sodann wird detailliert dargestellt, dass semipolare Kristall-Orientierungen eine deutlich reduzierte Polarisation aufweisen und dadurch eine erhöhte strahlende Rekombinations-Wahrscheinlichkeit innerhalb der Quantenfilme zu erwarten ist, die auf solchen Oberflächen abgeschieden werden. Es zeigt sich zudem, dass auch höhere Schichtdicken gewählt werden können, ohne dass die inneren Felder zu einer drastischen Reduktion der Oszillator-Stärke führen, wie es für c-orientierte Filme der Fall ist.

Doch für eine hohe Effizienz ist nicht nur die Förderung der strahlenden Rekombination entscheidend, sondern ebenso eine hohe Materialgüte, um nicht-strahlende Prozesse zu minimieren. Aus diesem Grund wird das Wachstum von nicht- und semipolarem GaN näher erörtert und mögliche Defektarten diskutiert. Neben den Wachstums-Methoden werden mögliche Substrat-Typen vorgestellt, die in der Literatur für weniger polare Gruppe III-Nitride Verwendung finden. Es wird klar, dass die defektreichen Schichten, die typischerweise bei dieser Art der Heteroepitaxie entstehen, nicht geeignet sind, konventionelle Verfahren abzulösen. Eine hohe Materialgüte scheint essentiell, wie es die besten Bauelemente auf nicht-/semipolaren GaN-Substraten beweisen. Deren hohe Kosten und die stark limitierte Proben-Größe stellen heute jedoch ungelöste Probleme dar.

Unsere Methode ist hingegen geeignet, kostengünstig auf konventionellen Substrat-Größen semipolare Oberflächen mit sehr hoher Materialqualität herzustellen. Das Ver-

9 Zusammenfassung und Ausblick

fahren beruht auf selektiver Epitaxie, wo Teilbereiche der Substrat-Oberfläche maskiert werden. In einem zweiten Wachstums-Schritt wird ein strukturiertes Abscheiden ermöglicht und durch die Wahl geeigneter Parameter während des MOVPE-Wachstums (metall-organische Gasphasen-Epitaxie) die Formierung von 3D-Strukturen mit semipolaren Facetten erzielt. Als Masken wurden sowohl streifen- als auch hexagonalförmige Anordnungen untersucht. Die detaillierten Variationen der Prozess-Parameter ergeben, dass eine moderate Wachstumstemperatur (950°C), ein kleines V/III-Verhältnis (400) und ein erhöhter Reaktor-Druck (250 hPa) förderlich für die 3D-Abscheidung sind und somit eine gute Puffer-Schicht für GaInN-Filme erzeugt werden kann. XRD-Halbwertsbreiten der Rocking-Kurven von symmetrischen und asymmetrischen Reflexen $< 350 \,\mathrm{arcsec}$ bestätigen die gute Qualität dieser Proben. Ferner wird ausführlich erörtert, dass die in dieser Arbeit neu eingeführten inversen GaN-Pyramiden eine ausgezeichnete Materialgüte aufweisen. TEM-Untersuchungen bestätigen die sehr geringe Versetzungsdichte, was durch das effiziente Blockieren der Versetzungen in der SiN-Zwischenschicht und der SiO₂-Maske oder durch Abknicken und Einbetten in Bereiche erreicht wird, die nicht als aktive Zone dienen. Spektroskopische Untersuchungen zeigen zudem eine Halbwertsbreite des Donator-gebundenen Exzitonen-Übergangs von nur 2.2 meV (T=14 K) ohne jeglichen Hinweis auf Defektbezogene Lumineszenz, wie sie sonst typischerweise für nicht- und semipolares Material beobachtet wird.

Inwiefern die hohe Materialgüte auch für einen GaInN-Film gilt, der auf den dreidimensionalen Strukturen abgeschieden wird, ist ein weiterer Schwerpunkt dieser Arbeit. Hierfür werden zunächst die Wachstums-Parameter, die Einfluss auf den Indium-Einbau nehmen, und die Geometrie-Einflüsse erörtert. Es folgen strukturelle Untersuchungen zu QW-Dicke und Komposition mittels TEM und hoch-ortsaufgelöster Röntgen-Diffraktometrie in Kombination mit Kathodolumineszenz-Untersuchungen. Die erhöhte Schichtdicke des QWs nahe der dreieckförmigen Spitze und der graduelle Abfall in Schichtdicke und In-Konzentration konnte sehr genau durch ein Gasphasen-Diffusions-Modell beschrieben werden. Dabei hat sich ein charakteristischer Wert für $D/k = 0.1 \,\mu\text{m}$ für die $\{1\overline{101}\}$ -Facette im Vergleich zu $D/k = 20 \,\mu\text{m}$ für die $\{11\overline{22}\}$ -Facette ergeben, was u.a. als Hinweis für eine höhere In-Einbau-Effizienz der $\{1\overline{101}\}$ -Facette verstanden werden kann. Durch eine Variation des Reaktor-Drucks während des Abscheidens der aktiven Zone konnte überprüft werden, dass die Wachstums-Kinetik von der Gasphasen-Diffusion dominiert wird. Ein niedriger Druck von 100 hPa während des QW-Wachstums hat zu den homogensten QW-Emissionen geführt. Quantitative Analysen der untersuchten Strukturen konnten eindeutig zeigen, dass die piezoelektrische Polarisation auf den Seiten-Facetten deutlich reduziert ist. Das mittels Feld-abhängiger PL-Messungen bestimmte Feld beträgt nur 0.12 MV/cm für einen 15%-igen QW auf stark verspanntem GaN-Puffer. Durch Variation der Quantenfilm-Dicke bei einer konstanten In-Konzentration von 20% auf einem nahezu unverspannten GaN-Puffer wurde ein Feld von etwa 1-1.3 MV/cm ermittelt und ist damit um etwa 2/3 gegenüber dem c-orientierten Films reduziert. Ferner bestätigt die Ladungsträger-Lebensdauer von 650 ps eines semipolaren blau-emittierenden QWs im Vergleich zu über 50 ns für den polaren Fall die theoretisch vorhergesagte bessere Überlappung der Wellenfunktionen. Und schließlich wurde eine etwa drei Mal geringere Blauverschiebung der Emissions-Wellenlänge mit erhöhter Ladungsträger-Dichte im Vergleich zum c-orietierten Fall gefunden.

Der Einfluss von Gasphasen-Diffusion auf strukturelle Eigenschaften eines GaInN-Films hängt stark von der genauen Geometrie der 3D-Strukturen ab. Eine besonders stark ausgeprägte Verschiebung der QW-Emissions-Wellenlänge ist bespielsweise bei einer etwa 12 µm großen inversen Pyramide gegeben. Die enorme Variation der Parameter entlang nur einer Facette zeichnet die Struktur als ideale Test-Probe aus. Es wird hiermit versucht, eine Korrelation zwischen interner Quanteneffizienz (IQE) und Indium-Komposition anzugeben, wozu ansonsten eine Vielzahl an Proben nötig wäre. Genaue Aussagen über QW-Dicke, Komposition und piezoelektrisches Feld können durch eine Kombination aus TEM-Untersuchungen, Emissions-Energien und Zerfallszeiten, die aus CL-Untersuchungen gewonnen wurden, getroffen werden. Eine Abschätzung der maximalen IQE für eine Wellenlänge von 390 nm liegt bei 90%, nimmt dann kontinuierlich ab und erreicht Werte von 25% für eine Wellenlänge von 525 nm. Somit konnte bestätigt werden, dass die hier vorgestellte Methode geeignet ist, qualitativ hochwertige semipolare Ga(In)N-Schichten auf konventioneller Substrat-Größe herzustellen.

Die 3D-Strukturen wurden schließlich in Test-LEDs integriert, um deren Anwendungs-Potential im Bauteil zu überprüfen. Die nicht vollständig optimierten Test-Strukturen zeigen recht vielversprechende Werte für on-wafer Messungen. Eine optische Ausgangsleistung von 700 µW @ 20 mA und bis zu 3 mW @ 110 mA konnten für eine semipolare LED mit {1101}-Facetten und einer Emissions-Wellenlänge von 425 nm erzielt werden. Bis zu 1 mW @ 110 mA wurde für blau-grüne Emission bei 495 nm erreicht. LEDs auf Basis von µm großen inversen Pyramiden zeigen durch die Wellenlängen-Verschiebung entlang einer Facette ein recht breites Emissions-Spektrum. Dies könnte vorteilhaft für Beleuchtungs-Anwendungen sein, wo eine hohe Farbwiedergabe erwünscht ist.

9 Zusammenfassung und Ausblick

Die hier vorliegende Arbeit enthält wertvolle Informationen für zukünftige Arbeiten, deren Basis die Anwendung dreidimensionaler Ga(In)N-Strukturen beinhaltet. Besonderes Augenmerk muss dabei auf den Struktur-Dimensionen liegen. Bei 3D-Größen im µm-Bereich, werden die QW-Eigenschaften durch die Wachstums-Mechanismen der Gasphasen-Epitaxie bestimmt. Insbesondere führt dies zu einem Gradienten in der QW-Dicke und -Komposition. Interessant kann diese Eigenschaft, wie bereits erwähnt, beispielsweise bei der Erzeugung von breitbandiger Emission sein, wie es in Beleuchtungs-Anwendungen der Fall ist.

Werden homogene Schichten mit schmalbandiger Emission benötigt, wie dies beispielsweise bei Laser-Anwendungen der Fall ist, müssen die Struktur-Dimensionen zwangsweise verkleinert werden. Diese Verkleinerung eröffnet dann zusätzlich die Möglichkeit der Licht-Materie-Kopplung, wenn die Struktur-Größe im Bereich der Emissions-Wellenlänge liegt. Interessante Anwendungen wie komplex-gekoppelte DFB-Laser (engl.: distributed feedback), mehr-dimensionale Photonische Kristalle oder Quantenpunkt-Emitter sind denkbar. Desweiteren besteht durch geschickte selektive Dotierung und/oder selektives Ätzen der 3D-Strukturen das Potential, eine Vielzahl neuartiger optoelektronischer Bauelemente zu verwirklichen.

- [1] E. Schubert, *Light-Emitting Diodes*, First ed. (Cambridge University Press, 2003).
- [2] T. Gessmann and E. F. Schubert, "High-efficiency AlGaInP light-emitting diodes for solid-state lighting applications," J. Appl. Phys. 95, 2203–2216 (2004).
- [3] Y. Narukawa, M. Sano, T. Sakamoto, T. Yamada, and T. Mukai, "Successful fabrication of white light emitting diodes by using extremely high external quantum efficiency blue chips," *phys. stat. sol.* (a) **205**, 1081–1085 (2008).
- [4] H. P. Maruska and J. J. Tietjen, "The preparation and properties of vapordeposited single-crystalline GaN," Appl. Phys. Lett. 15, 327 (1969).
- [5] J. Pankove, E. Miller, D. Richman, and J. Berkeyheiser, "Electroluminescence in GaN," J. Luminescence 5, 84 (1971).
- [6] H. Amano, N. Sawaki, I. Akasaki, and Y. Toyoda, "Metalorganic vapor phase epitaxial growth of a high quality GaN film using an AlN buffer layer," *Appl. Phys. Lett.* 48, 353–355 (1986).
- [7] H. Amano, M. Kito, K. Hiramatsu, and I. Akasaki, "P-type conduction in Mg-doped GaN treated with low-energy electron beam irradiation (LEEBI)," *Jpn. J. Appl. Phys.* 28, L2112 (1989).
- [8] S. Nakamura, N. Iwasa, and M. Senoh, "Method of manufacturing p-type compound semiconductor," (1994), US patent 5,306,662.
- [9] S. Nakamura, M. Senoh, and T. Mukai, "P-GaN/n-InGaN/n-GaN doubleheterostructure blue-light-emitting diodes," Jpn. J. Appl. Phys. 32, L8 (1993).
- [10] S. Nakamura, M. Senoh, N. Iwasa, and S. Nagahama, "High-brightness In-GaN blue, green and yellow light-emitting diodes with quantum well structures," *Jpn. J. Appl. Phys.* 34, L797 (1995).
- [11] S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, Y. Sugimoto, and H.Kiyoku, "Room-temperature continuous-wave operation of

InGaN multi-quantum-well structure laser diodes," *Appl. Phys. Lett.* **69**, 4056 (1996).

- [12] T. Takeuchi, S. Sota, M. Katsuragawa, M. Komori, H. Takeuchi, H. Amano, and I. Akasaki, "Quantum-Confined Stark Effect due to Piezoelectric Fields in GaInN Strained Quantum Wells," Jpn. J. Appl. Phys. 36, L382–L385 (1997).
- [13] T. Takeuchi, H. Amano, and I. Akasaki, "Theoretical Study of Orientation Dependence of Piezoelectric Effects in Wurtzite Strained GaInN/GaN Heterostructures and Quantum Wells," Jpn. J. Appl. Phys. 39, 413–416 (2000).
- [14] C. Fricke, W. Goetz, A. Hangleiter, J. Ibbetson, E. F. Schubert, and J.-I. Shim, "New Developments in Solid-State Lighting," in *Int. Conf. on Nitride Semicon*ductors, Rump Session (2009).
- [15] J. Hader, J. V. Moloney, B. Pasenow, S. W. Koch, M. Sabathil, N. Linder, and S. Lutgen, "On the importance of radiative and Auger losses in GaN-based quantum wells," *Appl. Phys. Lett.* **92**, 261103 (2008).
- [16] Y. C. Shen, G. O. Mueller, S. Watanabe, N. F. Gardner, A. Munkholm, and M. R. Krames, "Auger recombination in InGaN measured by photoluminescence," *Appl. Phys. Lett.* **91**, 141101 (2007).
- [17] A. Laubsch, M. Sabathil, W. Bergbauer, M. Strassburg, H. Lugauer, M. Peter, S. Lutgen, N. Linder, K. Streubel, J. Hader, J. V. Moloney, B. Pasenow, and S. W. Koch, "On the origin of IQE-'droop' in InGaN LEDs," *phys. stat. sol. (c)* 6, S913–S916 (2009).
- [18] M.-H. Kim, M. F. Schubert, Q. Dai, J. K. Kim, E. F. Schubert, J. Piprek, and Y. Park, "Origin of efficiency droop in GaN-based light-emitting diodes," *Appl. Phys. Lett.* **91**, 183507 (2007).
- [19] N. F. Gardner, G. O. Muller, Y. C. Shen, G. Chen, S. Watanabe, W. Gotz, and M. R. Krames, "Blue-emitting InGaN–GaN double-heterostructure lightemitting diodes reaching maximum quantum efficiency above 200 A/cm²," Appl. Phys. Lett. **91**, 243506 (2007).
- [20] J. Xie, X. Ni, Q. Fan, R. Shimada, U. Özgür, and H. Morkoç, "On the efficiency droop in InGaN multiple quantum well blue light emitting diodes and its reduction with p-doped quantum well barriers," *Appl. Phys. Lett.* **93**, 121107 (2008).
- [21] M. F. Schubert, J. Xu, J. K. Kim, E. F. Schubert, M. H. Kim, S. Yoon, S. M. Lee, C. Sone, T. Sakong, and Y. Park, "Polarization-matched GaInN/AlGaInN

multi-quantum-well light-emitting diodes with reduced efficiency droop," *Appl. Phys. Lett.* **93**, 041102 (2008).

- [22] T. Paskova, Nitrides with Nonpolar Surfaces (Wiley-VCH Verlag, 2008).
- [23] J. Speck and S. Chichibu, "Nonpolar and Semipolar Group III Nitride-Based Materials," MRS Bulletin 34, 304–352 (2009).
- [24] A. Chakraborty, B. Haskell, S. Keller, J. Speck, S. DenBaars, S. Nakamura, and U. Mishra, "Nonpolar InGaN/GaN emitters on reduced-defect lateral epitaxially overgrown *a*-plane GaN with drive-current-independent electroluminescence emission peak," *Appl. Phys. Lett.* 85, 5143 (2004).
- [25] K. Fujito, S. Kubo, and I. Fujimura, "Development of Bulk GaN Crystals and Nonpolar/Semipolar Substrates by HVPE," MRS Bulletin 34, 313–317 (2009).
- [26] U. Schwarz and M. Kneissl, "Nitride emitters go nonpolar," phys. stat. sol. (RRL) 1, A44–A46 (2007).
- [27] I. Vurgaftman and J. R. Meyer, "Band parameters for nitrogen-containing semiconductors," J. Appl. Phys. 94, 3675–3696 (2003).
- [28] S. Bloom, G. Harbeke, E. Meier, and I. Ortenburger, "Band Structure and Reflectivity of GaN," phys. stat. sol. (b) 66, 161 (1974).
- [29] M. Suzuki, T. Uenoyama, and A. Yanase, "First-principles calculations of effective-mass parameters of AlN and GaN," *Phys. Rev. B* 52, 8132 (1995).
- [30] T. Kawashima, H. Yoshikawa, S. Adachi, S. Fuke, and K.Ohtsuka, "Optical properties of hexagonal GaN," J. Appl. Phys. 82, 3528 (1997).
- [31] A. Kniest, "Einfluß der Gitterfehlanpassung bei der Epitaxie von GaInN," Diplomarbeit (4. Physikalisches Institut, Universität Stuttgart, 1998).
- [32] T. Sandu and R. I. Iftimie, "Bandgaps and band bowing in semiconductor alloys," *Solid State Comm.* 150, 888–892 (2010).
- [33] Q. Guo and A. Yoshida, "Temperature Dependence of Band Gap Change in InN and AlN," Jpn. J. Appl. Phys. 33, 2453–2456 (1994).
- [34] J. Piprek, Nitride Semiconductor Devices (WILEY-VCH Verlag, 2007).
- [35] Y. Varshni, "Temperature dependence of the energy gap in semiconductors," *Physica* 34, 149 (1967).
- [36] L. Viña, S. Logothetidis, and M. Cardona, "Temperature dependence of the dielectric function of germanium," *Phys. Rev. B* 30, 1979–1991 (1984).

- [37] R. Pässler, "Parameter Sets Due to Fittings of the Temperature Dependencies of Fundamental Bandgaps in Semiconductors," phys. stat. sol. (b) 216, 975–1007 (1999).
- [38] R. Pässler, "Dispersion-related description of temperature dependencies of band gaps in semiconductors," *Phys. Rev. B* 66, 085201 (2002).
- [39] A. Shikanai, T. Azuhata, T. Sota, S. Chichibu, A. Kuramata, K. Horino, and S. Nakamura, "Biaxial strain dependence of exciton resonance energies in wurtzite GaN," J. Appl. Phys. 81, 417–424 (1997).
- [40] M. Feneberg, "persönliche Mitteilung," (2009), Universität Ulm.
- [41] S. Limpijumnong and C. G. Van de Walle, "Diffusivity of native defects in GaN," *Phys. Rev. B* 69, 035207 (2004).
- [42] H. Chen, R. M. Feenstra, J. E. Northrup, T. Zywietz, and J. Neugebauer, "Spontaneous Formation of Indium-Rich Nanostructures on InGaN(0001) Surfaces," *Phys. Rev. Lett.* 85, 1902–1905 (2000).
- [43] P. Tavernier, T. Margalith, J. Williams, D. Green, S. Keller, S. DenBaars, U. Mishra, S. Nakamura, and D. Clarke, "The growth of N-face GaN by MOCVD: effect of Mg, Si, and In," J. Cryst. Growth 264, 150–158 (2004).
- [44] C. Stampfl and C. G. Van de Walle, "Energetics and electronic structure of stacking faults in AlN, GaN, and InN," *Phys. Rev. B* 57, R15052–R15055 (1998).
- [45] P. P. Paskov, R. Schifano, B. Monemar, T. Paskova, S. Figge, and D. Hommel, "Emission properties of a-plane GaN grown by metal-organic chemical-vapor deposition," J. Appl. Phys. 98, 093519–1–7 (2005).
- [46] C. Johnston, M. Kappers, M. Moram, J. Hollander, and C. Humphreys, "Assessment of defect reduction methods for nonpolar a-plane GaN grown on r-plane sapphire," J. Cryst. Growth 311, 3295–3299 (2009).
- [47] R. Liu, A. Bell, F. A. Ponce, C. Q. Chen, J. W. Yang, and M. A. Khan, "Luminescence from stacking faults in gallium nitride," *Appl. Phys. Lett.* 86, 021908 (2005).
- [48] J. Mei, S. Srinivasan, R. Liu, F. A. Ponce, Y. Narukawa, and T. Mukai, "Prismatic stacking faults in epitaxially laterally overgrown GaN," *Appl. Phys. Lett.* 88, 141912 (2006).
- [49] T. Gühne, Z. Bougrioua, P. Vennegues, M. Leroux, and M. Albrecht, "Cathodoluminescence spectroscopy of epitaxial-lateral-overgrown nonpolar (11-20) and

semipolar (11-22) GaN in relation to microstructural characterization," J. Appl. Phys. 101, 113101 (2007).

- [50] B. Bastek, F. Bertram, J. Christen, T. Wernicke, M. Weyers, and M. Kneissl, "A-plane GaN epitaxial lateral overgrowth structures: Growth domains, morphological defects, and impurity incorporation directly imaged by cathodoluminescence microscopy," *Appl. Phys. Lett.* **92**, 212111 (2008).
- [51] J. Hertkorn, "Verbesserung der lateralen Stromführung in hocheffizienten Halbleiterlichtquellen," Dissertation (Institut für Optoelektronik der Fakultät für Ingenieurwissenschaften und Informatik an der Universität Ulm, 2009).
- [52] F. Hitzel, Die Rolle von Defekten in hocheffiziet emittierenden InGaN-basierten Heterostrukturen, Dissertation (Technische Universi\u00e4t Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, 2004).
- [53] J. Nye, *Physical Properties of Crystals* (Oxford University Press, 1967).
- [54] U. M. E. Christmas, A. D. Andreev, and D. A. Faux, "Calculation of electric field and optical transitions in InGaN/GaN quantum wells," J. Appl. Phys. 98, 073522 (2005).
- [55] F. Lipski, Optische Tieftemperaturmikroskopie zur Bestimmung von Piezofeldern in GaInN, Diplomarbeit (Abteilung Halbleiterphysik der Fakultät für Naturwissenschaften an der Universität Ulm, 2006).
- [56] F. Bernardini, F. Fiorentini, and D. Vanderbilt, "Accurate calculation of polarization-related quantities in semiconductors," *Phys. Rev. B* 63, 193201 (2001).
- [57] M. Feneberg and K. Thonke, "Polarization fields of III-nitrides grown in different crystal orientations," J. Phys.: Condens. Matt. 19, 403201 (2007).
- [58] 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.* 86, 242112 (2006).
- [59] H. Shen, M. Wraback, H. Zhong, A. Tyagi, S. P. DenBaars, S. Nakamura, and J. S. Speck, "Unambiguous evidence of the existence of polarization field crossover in a semipolar InGaN/GaN single quantum well," *Appl. Phys. Lett.* 95, 033503 (2009).
- [60] A. E. Romanov, T. J. Baker, S. Nakamura, J. S. Speck, and E. U. Group, "Straininduced polarization in wurtzite III-nitride semipolar layers," J. Appl. Phys. 100, 023522 (2006).

- [61] A. D. Bykhovski, V. V. Kaminski, M. S. Shur, Q. C. Chen, and M. A. Khan, "Piezoresistive effect in wurtzite n-type GaN," *Appl. Phys. Lett.* 68, 818–819 (1996).
- [62] K. Shimada, T. Sota, and K. Suzuki, "First-principles study on electronic and elastic properties of BN, AlN, and GaN," J. Appl. Phys. 84, 4951–4958 (1998).
- [63] F. Bernardini and V. Fiorentini, "First-principles calculation of the piezoelectric tensor d of III–V nitrides," Appl. Phys. Lett. 80, 4145–4147 (2002).
- [64] T. Takeuchi, H. Amano, and I. Akasaki, "Theoretical study of orientation dependence of piezoelectric effects in wurtzite strained GaInN/GaN heterostructures and quantum wells," Jpn. J. Appl. Phys. 39, 413 (2000).
- [65] E. Schubert, Physical Foundations of Solid-State Devices (Rensselaer Polytechnic Institute, Troy, New York, 2005).
- [66] N. A. Shapiro, H. Feick, W. Hong, M. Cich, R. Armitage, and E. R. Weber, "Luminescence energy and carrier lifetime in InGaN/GaN quantum wells as a function of applied biaxial strain," J. Appl. Phys. 94, 4520–4529 (2003).
- [67] J. Xu, M. F. Schubert, A. N. Noemaun, D. Zhu, J. K. Kim, E. F. Schubert, M. H. Kim, H. J. Chung, S. Yoon, C. Sone, and Y. Park, "Reduction in efficiency droop, forward voltage, ideality factor, and wavelength shift in polarization-matched GaInN/GaInN multi-quantum-well light-emitting diodes," *Appl. Phys. Lett.* 94, 011113 (2009).
- [68] J. Lee, X. Li, X. Ni, U. Özgür, H. Morkoç, T. Paskova, G. Mulholland, and K. R. Evans, "On carrier spillover in c- and m-plane InGaN light emitting diodes," *Appl. Phys. Lett.* **95**, 201113 (2009).
- [69] V. Haerle, B. Hahn, S. Kaiser, A. Weimar, S. Bader, F. Eberhard, A. Plössl, and D. Eisert, "High brightness LEDs for general lighting applications using the new ThinGaNTM-Technology," *phys. stat. sol. (a)* **201**, 2736–2739 (2004).
- [70] M. Feneberg, F. Lipski, R. Sauer, K. Thonke, T. Wunderer, P. Brückner, and F. Scholz, "High quantum efficiency of semipolar GaInN/GaN quantum wells," *phys. stat. sol.* (c) 5, 2089 (2008).
- [71] S.-Y. Kwon, H. J. Kim, E. Yoon, Y. Jang, K.-J. Yee, D. Lee, S.-H. Park, D.-Y. Park, H. Cheong, F. Rol, and L. S. Dang, "Optical and microstructural studies of atomically flat ultrathin In-rich InGaN/GaN multiple quantum wells," J. Appl. Phys. 103, 063509 (2008).

- [72] A. Kadir, M. Gokhale, A. Bhattacharya, A. Pretorius, and A. Rosenauer, "MOV-PE growth and characterization of InN/GaN single and multi-quantum well structures," J. Cryst. Growth **311**, 95 – 98 (2008).
- [73] A. Chakraborty, B. A. Haskell, S. Keller, J. S. Speck, S. P. DenBaars, S. Nakamura, and U. K. Mishra, "Nonpolar InGaN/GaN emitters on reduced-defect lateral epitaxially overgrown a-plane GaN with drive-current-independent electroluminescence emission peak," *Appl. Phys. Lett.* 85, 5143–5145 (2004).
- [74] T. Gühne, P. DeMierry, M. Nemoz, E. Beraudo, S. Chenot, and G. Nataf, "Demonstration of semipolar (11-22) InGaN/GaN blue-green light emitting diode," *Electron. Lett.* 44, 231–232 (2008).
- [75] S.-M. Hwang, Y. G. Seo, K. H. Baik, I.-S. Cho, J. H. Baek, S. Jung, T. G. Kim, and M. Cho, "Demonstration of nonpolar a-plane InGaN/GaN light emitting diode on r-plane sapphire substrate," *Appl. Phys. Lett.* **95**, 071101 (2009).
- [76] S. Nakamura, M. Senoh, N. Iwasa, S. Nagahama, T. Yamada, and T. Mukai, "Superbright Green InGaN Single-Quantum-Well-Structure Light-Emitting Diodes," Jpn. J. Appl. Phys. 34, L1332–L1335 (1995).
- [77] I. Grzegory and S. Krukowski, "Synthesis and Crystal Growth of A^{III}B^V Semiconducting Compounds Under High Pressure of Nitrogen," *Physica Scripta* 39, 242 (1991).
- [78] I. Grzegory, J. Jun, M. Bockowski, S. Krukowski, M. Wrobleswski, B. Jucznik, and S. Porowski, "III-V Nitrides Thermodynamics and crystal growth at high N₂ pressure," J. Phys. Chem. Solids 56, 639 (1995).
- [79] S. Porowski, "Bulk and homoepitaxial GaN-growth and characterisation," J. Crystal Growth 189, 153 (1998).
- [80] R. Dwilinski, R. Doradzinski, J. Garczynski, L. Sierzputowski, A. Puchalski, Y. Kanbara, K. Yagi, H. Minakuchi, and H. Hayashi, "Excellent crystallinity of truly bulk ammonothermal GaN," J. Cryst. Growth **310**, 3911 (2008).
- [81] R. Dwilinski, R. Doradzinski, J. Garczynski, L. Sierzputowski, M. Zajac, and M. Rudzinski, "Homoepitaxy on bulk ammonothermal GaN," J. Cryst. Growth 311, 3058 (2009).
- [82] R. Dwilinski, R. Doradzinski, J. Garczynski, L. Sierzputowski, A. Puchalski, Y. Kanbara, K. Yagi, H. Minakuchi, and H. Hayashi, "Bulk ammonothermal GaN," J. Cryst. Growth **311**, 3015 (2009).

- [83] R. Dwilinski, R. Doradzinski, J. Garczynski, L. Sierzputowski, R. Kucharski, M. Zajac, M. Rudzinski, R. Kudrawiec, J. Serafinczuk, and W. Strupinski, "Recent achievements in AMMONO-bulk method," J. Cryst. Growth in press (2010).
- [84] M. Henini, "Molecular beam epitaxy from research to mass-production part 1," III-Vs Review 9, 32 (1996).
- [85] H. M. Manasevit, "Single-Crystal Gallium Arsenide on insulating substrates," Appl. Phys. Lett. 12, 156 (1968).
- [86] M. Mayer, "Reaktive Molekularstrahlepitaxie für Leuchtdioden im InAlGaN-Materialsystem," Dissertation (Abteilung Optoelektronik der Fakultät für Ingenieurwissenschaften an der Universität Ulm, 2000).
- [87] I. Ecker, "Molekularstrahlepitaxie GaAs-basierender Mischungshalbleiter für 1300 nm-nahe Laserdiodenemission," Dissertation (Abteilung Optoelektronik der Fakultät für Ingenieurwissenschaften an der Universität Ulm, 2004).
- [88] M. Johnson, Z. Yu, J. Brown, F. Koeck, N. El-Masry, H. Kong, J. Edmond, J. Cook, and J. Schetzina, "A critical comparison between MOVPE and MBE growth of III-V nitride semiconductor materials for opto-electronic device applications," *GaN and related alloys; Proc. of the Symp., Boston, MA, USA; 30 Nov.-4 Dec. 1998* (1999).
- [89] C. Skierbiszewski, Z. R. Wasilewski, M. Siekacz, A. Feduniewicz, P. Perlin, P. Wisniewski, J. Borysiuk, I. Grzegory, M. Leszczynski, T. Suski, and S. Porowski, "Blue-violet InGaN laser diodes grown on bulk GaN substrates by plasmaassisted molecular-beam epitaxy," *Appl. Phys. Lett.* 86, 011114 (2005).
- [90] M. Kamp, GaN-based light emitters epitaxy, technology and devices, Habilitationsschrift (Abteilung Optoelektronik der Fakultät für Ingenieurwissenschaften an der Universität Ulm, 2001).
- [91] M. J. Manfra, L. N. Pfeiffer, K. W. West, H. L. Stormer, K. W. Baldwin, J. W. P. Hsu, D. V. Lang, and R. J. Molnar, "High-mobility AlGaN/GaN heterostructures grown by molecular-beam epitaxy on GaN templates prepared by hydride vapor phase epitaxy," *Appl. Phys. Lett.* 77, 2888–2890 (2000).
- [92] M. Micovic, J. Moon, T. Hussain, P. Hashimoto, W. Wong, and L. McCray, "GaN HFETs on SiC Substrates Grown by Nitrogen Plasma MBE," *phys. stat. sol. (a)* 188, 31–35 (2001).
- [93] M. Herman and H. Sitter, Moleular Beam Epitaxy (Springer Verlag, Berlin, 1996).

- [94] M. Golling, "Molekularstrahlepitaxie vertikal emittierender InGaAs-Laser-Strukturen mit periodischer Gewinnstruktur," Dissertation (Abteilung Optoelektronik der Fakultät für Ingenieurwissenschaften an der Universität Ulm, 2004).
- [95] Z. Yu, M. A. L. Johnson, J. D. Brown, N. A. El-Masry, J. F. Muth, J. W. Cook, J. F. Schetzina, K. W. Haberern, H. S. Kong, and J. A. Edmond, "Epitaxial Lateral Overgrowth of GaN on SiC and Sapphire Substrates," *MRS Internet J. Nitride Semicond. Res.* 4S1, G4.3 (1999).
- [96] P. Brückner, "Herstellung freistehender Galliumnitrid-Schichten,," Dissertation (Institut für Optoelektronik der Fakultät für Ingenieurwissenschaften und Informatik an der Universität Ulm, 2008).
- [97] D. Ehrentraut and Z. Sitar, "Advances in Bulk Crystal Growth of AlN and GaN," MRS Bulletin 34, 259–265 (2009).
- [98] M. Funato, M. Ueda, Y. Kawakami, Y. Narukawa, T. Kosugi, M. Takahashi, and T. Mukai, "Blue, Green, and Amber InGaN/GaN Light-Emitting Diodes on Semipolar {11-22} GaN Bulk Substrates," Jpn. J. Appl. Phys. 45, L659–L662 (2006).
- [99] K. Okamoto, H. Ohta, D. Nakagawa, M. Sonobe, J. Ichihara, and H. Takasu, "Dislocation-Free *m*-Plane InGaN/GaN Light-Emitting Diodes on *m*-Plane GaN Single Crystals," Jpn. J. Appl. Phys. 45, L1197–L1199 (2006).
- [100] M. C. Schmidt, K.-C. Kim, H. Sato, N. Fellows, H. Masui, S. Nakamura, S. P. DenBaars, and J. S. Speck, "High Power and High External Efficiency *m*-Plane InGaN Light Emitting Diodes," *Jpn. J. Appl. Phys.* 46, L126–L128 (2007).
- [101] K.-C. Kim, M. Schmidt, H. Sato, F. Wu, N. Fellows, M. Saito, K. Fujito, J. Speck, S. Nakamura, and S. DenBaars, "Improved electroluminescence on nonpolar mplane InGaN/GaN quantum wells LEDs," *phys. stat. sol. (RRL)* 1, 125–127 (2007).
- [102] G. B. Springfellow, Organometallic Vapor-Phase Epitaxy: Theory and Practice (Academic Press, San Diego, USA, 1999).
- [103] C. Kirchner, "Metallorganische Gasphasenepitaxie für optoelektronische und elektronische Bauelemente im Materialsystem AlGaInN," Dissertation (Abteilung Optoelektronik der Fakultät für Ingenieurwissenschaften und Informatik an der Universität Ulm, 2001).

- [104] F. Habel, "Optimierung und Skalierung von HVPE Prozessen zur Herstellung von Galliumnitrid-Substraten und -Quasisubstraten," Diplomarbeit (Abteilung Optoelektronik der Fakultät für Ingenieurwissenschaften an der Universität Ulm, 2001).
- [105] Y. Park, "Current Status of Group III-Nitride Semiconductors and Future Prospects," Journal of the Korean Physical Society 34, 199 (1999).
- [106] C. Miskys, New Substrates for Epitaxy of Group III Nitride Semiconductors: Challenges and Potential, Dissertation (Technische Universität München, 2004).
- [107] L. Liu and J. Edgar, "Substrates for Gallium Nitride Epitaxy," Mater. Sci. Eng. 37, 61 (2002).
- [108] L. Kirste, Wachstum und Realstruktur von epitaktischen (Al,Ga)N-Schichten, Dissertation (Fakultät für Chemie, Pharmazie und Geowissenschaften, Albert-Ludwigs-Universität, Freiburg i. Br., 2003).
- [109] W. Übler, "Erhöhung der thermischen Leitfähigkeit elektrisch isolierender Polymerwerkstoffe," Dissertation (Technische Fakultät der Universität Erlangen-Nürnberg, 2002).
- [110] S. Guha and N. Bojarczuk, "Ultraviolet and violet GaN light emitting diodes on silicon," Appl. Phys. Lett. 72, 415 (1998).
- [111] A. Dadgar, C. Hums, A. Diez, J. Bläsing, and A. Krost, "Growth of blue GaN LED structures on 150-mm Si(111)," J. Cryst. Growth 297, 279 – 282 (2006).
- [112] S. Hoshi, M. Itoh, T. Marui, H. Okita, Y. Morino, I. Tamai, F. Toda, S. Seki, and T. Egawa, "12.88 W/mm GaN High Electron Mobility Transistor on Silicon Substrate for High Voltage Operation," *Appl. Phys. Express* 2, 061001 (2009).
- [113] K. Dovidenko, S. Oktyabrsky, J. Narayan, and M. Razeghi, "Aluminium nitride films on different orientations of sapphire and silicon," J. Appl. Phys. 79, 2439 (1996).
- [114] S. Molina, A. Sánchez, F. Pacheco, R. García, M. Sánchez-García, F. Sánchez, and E. Calleja, "The effect of Si doping on the defect structure of GaN/AlN/Si(111)," *Appl. Phys. Lett.* **74**, 3362 (1999).
- [115] A. Strittmatter, A. Krost, M. Straßburg, V. Türck, D. Bimberg, J. Bläsing, and J. Chirsten, "Low-pressure metal organic chemical vapor deposition of GaN on silicon (111) using an AlAs nucleation layer," *Appl. Phys. Lett.* 74, 1242 (1999).

- [116] N. P. Kobayashi, J. T. Kobayashi, P. D. Dapkus, W.-J. Choi, A. E. Bond, X. Zhang, and D. H. Rich, "GaN growth on Si(111) substrate using oxidized AlAs as an intermediate layer," *Appl. Phys. Lett.* **71**, 3569–3571 (1997).
- [117] Y. Nakada, I. Aksenov, and H. Okumura, "GaN heteroepitaxial growth on silicon nitride buffer layers formed on Si (111) surfaces by plasma-assisted molecular beam epitaxy," Appl. Phys. Lett. 73, 827 (1998).
- [118] A. Dadgar, F. Schulze, M. Wienecke, A. Gadanecz, J. Bläsing, P. Veit, T. Hempel, A. Diez, J. Christen, and A. Krost, "Epitaxy of GaN on silicon - impact of symmetry and surface reconstruction," *New J. of Physics* 9, 389 (2007).
- [119] Y. Kawai, S. Ohsuka, M. Iwaya, S. Kamiyama, H. Amano, and I. Akasaki, "Improvement of crystalline quality of InGaN epilayers on various crystal planes of ZnO substrate by metal-organic vapor phase epitaxy," *phys. stat. sol. (c)* 6, S486–S489 (2009).
- [120] S.-J. Wang, N. Li, E.-H. Park, S.-C. Lien, Z. C. Feng, A. Valencia, J. Nause, and I. Ferguson, "Metalorganic chemical vapor deposition of InGaN layers on ZnO substrates," J. Appl. Phys. 102, 106105 (2007).
- [121] F. Hamdani, M. Yeadon, D. J. Smith, H. Tang, W. Kim, A. Salvador, A. E. Botchkarev, J. M. Gibson, A. Y. Polyakov, M. Skowronski, and H. Morkoç, "Microstructure and optical properties of epitaxial GaN on ZnO (0001) grown by reactive molecular beam epitaxy," J. Appl. Phys. 83, 983–990 (1998).
- [122] E. Angelopoulos, "Heteroepitaxial Growth of GaN on ZnO by MOVPE," Masterarbeit (Institut für Optoelektronik der Fakultät für Ingenieurwissenschaften und Informatik an der Universität Ulm, 2007).
- [123] S. B. Thapa, J. Hertkorn, T. Wunderer, F. Lipski, F. Scholz, A. Reiser, Y. Xie, M. Feneberg, K. Thonke, R. Sauer, M. Dürrschnabel, L. D. Yao, D. Gerthsen, H. Hochmuth, M. Lorenz, and M. Grundmann, "MOVPE growth of GaN around ZnO nanopillars," J. Cryst. Growth 310, 5139 (2008).
- [124] F. Lipski, S. B. Thapa, J. Hertkorn, T. Wunderer, S. Schwaiger, F. Scholz, M. Feneberg, M. Wiedenmann, K. Thonke, H. Hochmuth, M. Lorenz, and M. Grundmann, "Studies towards freestanding GaN in hydride vapor phase epitaxy by in-situ etching of a sacrificial ZnO buffer layer," *phys. stat. sol. (c)* 6, 352–355 (2009).
- [125] J. I. Pankove, H. P. Maruska, and J. E. Berkeyheiser, "Optical absorption of GaN," Appl. Phys. Lett. 17, 197–199 (1970).

- [126] B. Kuhn and F. Scholz, "An oxygen doped nucleation layer for the growth of high optical quality GaN on sapphire," *phys. stat. sol.* (a) 188, 629 (2001).
- [127] J. Hertkorn, F. Lipski, P. Brückner, T. Wunderer, S. Thapa, F. Scholz, A. Chuvilin, U. Kaiser, M. Beer, and J. Zweck, "Process optimization for the effective reduction of threading dislocations in MOVPE grown GaN using in situ deposited SiN_x masks," J. Cryst. Growth **310**, 4867–4870 (2008).
- [128] M. Sano and M. Aoki, "Epitaxial Growth of Undoped and Mg-Doped GaN," Jpn. J. Appl. Phys. 15, 1943–1950 (1976).
- [129] M. D. Craven, S. H. Lim, F. Wu, J. S. Speck, and S. P. DenBaars, "Threading dislocation reduction via laterally overgrown nonpolar (1122) a-plane GaN," *Appl. Phys. Lett.* 81, 1201–1203 (2002).
- [130] V. Adivarahan, C. Chen, J. Yang, M. Gaevski, M. Shatalov, G. Simin, and M. A. Khan, "Planar Schottky Diodes on High Quality A-plane GaN," Jpn. J. Appl. Phys. 42, L1136–L1138 (2003).
- [131] C. Chen, V. Adivarahan, J. Yang, M. Shatalov, E. Kuokstis, and M. A. Khan, "Ultraviolet Light Emitting Diodes Using Non-Polar *a*-Plane GaN-AlGaN Multiple Quantum Wells," *Jpn. J. Appl. Phys.* 42, L1039–L1040 (2003).
- [132] A. Chitnis, C. Chen, V. Adivarahan, M. Shatalov, E. Kuokstis, V. Mandavilli, J. Yang, and M. A. Khan, "Visible light-emitting diodes using a-plane GaN– InGaN multiple quantum wells over r-plane sapphire," *Appl. Phys. Lett.* 84, 3663–3665 (2004).
- [133] P. Waltereit, O. Brandt, A. Trampert, H. Grahn, J. Menniger, M. Ramsteiner, M. Reiche, and K. Ploog, "Nitride semiconductors free of electrostatic fields for efficient white light-emitting diodes," *Nature* 406, 865–868 (2000).
- [134] P. Waltereit, O. Brandt, M. Ramsteiner, R. Uecker, P. Reiche, and K. H. Ploog, "Growth of M-plane GaN (1100) on γ-LiAlO₂ (100)," J. Cryst. Growth 218, 143 (2000).
- [135] B. A. Haskell, A. Chakraborty, F. Wu, H. Sasano, P. T. Fini, S. P. Denbaars, J. S. Speck, and S. Nakamura, "Microstructure and enhanced morphology of planar nonpolar m-plane GaN grown by hydride vapor phase epitaxy," *J. Electron. Mat.* 34, 357–360 (2005).
- [136] A. Chakraborty, B. Haskell, S. Keller, J. Speck, S. DenBaars, S. Nakamura, and U. Mishra, "Demonstration of Nonpolar *m*-Plane InGaN/GaN Light-Emitting

Diodes on Free-Standing *m*-Plane GaN Substrates," Jpn. J. Appl. Phys. 44, L173 (2005).

- [137] S. Stemmer, P. Pirouz, Y. Ikuhara, and R. F. Davis, "Film/Substrate Orientation Relationship in the AIN/6H-SiC Epitaxial System," *Phys. Rev. Lett.* 77, 1797– 1800 (1996).
- [138] N. Onojima, J. Suda, and H. Matsunami, "Growth of AlN (1120) on 6H-SiC (1120) by Molecular-Beam Epitaxy," Jpn. J. Appl. Phys. 41, L1348–L1350 (2002).
- [139] N. Onojima, J. Suda, T. Kimoto, and H. Matsunami, "4H-polytype AlN grown on 4H-SiC (1120) substrate by polytype replication," *Appl. Phys. Lett.* 83, 5208– 5210 (2003).
- [140] B. Imer, F. Wu, M. D. Craven, J. S. Speck, and S. P. DenBaars, "Stability of (1100) m-Plane GaN Films Grown by Metalorganic Chemical Vapor Deposition," Jpn. J. Appl. Phys. 45, 8644–8647 (2006).
- [141] Q. Sun, S.-Y. Kwon, Z. Ren, J. Han, T. Onuma, S. F. Chichibu, and S. Wang, "Microstructural evolution in m-plane GaN growth on m-plane SiC," *Appl. Phys. Lett.* **92**, 051112 (2008).
- [142] A. M. Fischer, Z. Wu, K. Sun, Q. Wei, Y. Huang, R. Senda, D. Iida, M. Iwaya, H. Amano, and F. A. Ponce, "Misfit Strain Relaxation by Stacking Fault Generation in InGaN Quantum Wells Grown on *m*-Plane GaN," *Appl. Phys. Express* 2, 041002 (2009).
- [143] M. Horita, T. Kimoto, and J. Suda, "Nonpolar 4H-Polytype AlN/AlGaN Multiple Quantum Well Structure Grown on 4H-SiC(1100)," Appl. Phys. Express 3, 051001 (2010).
- [144] M. McLaurin, T. E. Mates, and J. S. Speck, "Molecular-beam epitaxy of p-type m-plane GaN," Appl. Phys. Lett. 86, 262104 (2005).
- [145] M. D. Craven, F. Wu, A. Chakraborty, B. Imer, U. K. Mishra, S. P. DenBaars, and J. S. Speck, "Microstructural evolution of a-plane GaN grown on a-plane SiC by metalorganic chemical vapor deposition," *Appl. Phys. Lett.* 84, 1281–1283 (2004).
- [146] T. J. Baker, B. A. Haskell, F. Wu, P. T. Fini, J. S. Speck, and S. Nakamura, "Characterization of Planar Semipolar Gallium Nitride Films on Spinel Substrates," Jpn. J. Appl. Phys. 44, L920–L922 (2005).

- [147] A. Chakraborty, T. Baker, B. Haskell, F. Wu, J. Speck, S. Denbaars, S. Nakamura, and U. K. Mishra, "Milliwatt Power Blue InGaN/GaN Light-Emitting Diodes on Semipolar GaN Templates," Jpn. J. Appl. Phys. 44, L945–L947 (2005).
- [148] J. F. Kaeding, M. Iza, H. Sato, S. P. DenBaars, J. S. Speck, and S. Nakamura, "Effect of Substrate Miscut on the Direct Growth of Semipolar (1011) GaN on (100) MgAl₂O₄ by Metalorganic Chemical Vapor Deposition," Jpn. J. Appl. Phys. 45, L536–L538 (2006).
- [149] T. Matsuoka and E. Hagiwara, "GaN Growth on Novel Lattice-Matching Substrate: Tilted M-Plane Sapphire," phys. stat. sol. (a) 188, 485–489 (2001).
- [150] T. J. Baker, B. A. Haskell, F. Wu, J. S. Speck, and S. Nakamura, "Characterization of Planar Semipolar Gallium Nitride Films on Sapphire Substrates," *Jpn. J. Appl. Phys.* 45, L154–L157 (2006).
- [151] R. Sharma, P. Pattison, H. Masui, R. Farrell, T. Baker, B. Haskell, F. Wu, S. DenBaars, J. Speck, and S. Nakamura, "Demonstration of a semipolar (1013) InGaN/GaN green light emitting diode," *Appl. Phys. Lett.* 87, 231110 (2005).
- [152] M. Kappers, J. Hollander, C. McAleese, C. Johnston, R. Broom, J. Barnard, M. Vickers, and C. Humphreys, "Growth and characterisation of semi-polar InGaN/GaN MQW structures," J. Cryst. Growth 300, 155 – 159 (2007).
- [153] R. Armitage and H. Hirayama, "M-plane GaN grown on m-sapphire by metalorganic vapor phase epitaxy," Appl. Phys. Lett. 92, 092121 (2008).
- [154] T. Wei, R. Duan, J. Wang, J. Li, Z. Huo, J. Yang, and Y. Zeng, "Microstructure and Optical Properties of Nonpolar *m*-Plane GaN Films Grown on *m*-Plane Sapphire by Hydride Vapor Phase Epitaxy," Jpn. J. Appl. Phys. 47, 3346–3349 (2008).
- [155] N. Okada, Y. Kawashima, and K. Tadatomo, "Direct Growth of *m*-plane GaN with Epitaxial Lateral Overgrowth from *c*-plane Sidewall of *a*-plane Sapphire," *Appl. Phys. Express* 1, 111101 (2008).
- [156] K. Okuno, Y. Saito, S. Boyama, N. Nakada, S. Nitta, R. G. Tohmon, Y. Ushida, and N. Shibata, "m-Plane GaN Films Grown on Patterned a-Plane Sapphire Substrates with 3-inch Diameter," Appl. Phys. Express 2, 031002 (2009).
- [157] Y. Saito, K. Okuno, S. Boyama, N. Nakada, S. Nitta, Y. Ushida, and N. Shibata, "m-Plane GaInN Light Emitting Diodes Grown on Patterned a-Plane Sapphire Substrates," Appl. Phys. Express 2, 041001 (2009).

- [158] A. G. Bhuiyan, A. Hashimoto, and A. Yamamoto, "Indium nitride (InN): A review on growth, characterization, and properties," J. Appl. Phys. 94, 2779– 2808 (2003).
- [159] D. Fuhrmann, U. Rossow, C. Netzel, H. Bremers, G. Ade, P. Hinze, and A. Hangleiter, "Optimizing the internal quantum efficiency of GaInN SQW structures for green light emitters," *phys. stat. sol. (c)* **3**, 1966 (2006).
- [160] S. Keller, B. P. Keller, D. Kapolnek, A. C. Abare, H. Masui, L. A. Coldren, U. K. Mishra, and S. P. D. Baars, "Growth and characterization of bulk InGaN films and quantum wells," *Appl. Phys. Lett.* 68, 3147–3149 (1996).
- [161] W. Götz, N. Johnson, C. Chen, H. Liu, C. Kuo, and W. Imler, "Acitvation energies of Si donors in GaN," Appl. Phys. Lett. 68, 3144 (1996).
- [162] A. L. Rosa, J. Neugebauer, J. E. Northrup, C.-D. Lee, and R. M. Feenstra, "Adsorption and incorporation of silicon at GaN (0001) surfaces," *Appl. Phys. Lett.* 80, 2008 (2002).
- [163] S. Nakamura, T. Mukai, M. Senoh, and N. Iwasa, "Thermal annealing effects of p-type Mg-doped GaN films," Jpn. J. Appl. Phys. 31, L139 (1992).
- [164] W. Götz, N. Johnson, J. Walker, D. Bour, and R. Street, "Activation of acceptors in Mg-doped GaN grown in metalorganic chemical vapor deposition," *Appl. Phys. Lett.* 68, 667 (1996).
- [165] Y. Tsuchiya, Y. Okadome, H. Furukawa, A. Honshio, Y. Miyake, T. Kawashima, M. Iwaya, S. Kamiyama, H. Amano, and I. Akasaki, "Highly doped p-type aplane GaN grown on r-plane sapphire substrate," *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 892, FF1706 (2006).
- [166] M. Levinshtein, S. Rumyantsev, and M. Shur, Properties of Advanced Semiconductor Materials: GaN, AlN, InN, BN, SiC, and SiGe (John Wiley and Sons, New York, 2001).
- [167] U. Kaufmann, P. Schlotter, H. Obloh, K.Köhler, and M. Maier, "Hole conductivity and compensation in epitaxial GaN:Mg layers," *Phys. Rev. B* 62, 10867 (2000).
- [168] B. Beaumont, M. Vaille, G. Nataf, A. Bouillé, J.-C. Guillaume, P. Vénnègues, S. Haffouz, and P. Gibart, "Mg-enhanced lateral overgrowth of GaN on patterned GaN/sapphire substrate by selective Metal Organic Vapor Phase Epitaxy," MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. 3, 20 (1998).

- [169] R. Bhat, "Current status of selective area epitaxy by OMCVD," J. Cryst. Growth 120, 362–368 (1992).
- [170] T. Tanaka, K. Uchida, A. Watanabe, and S. Minagawa, "Selective growth of gallium nitride layers with a rectangular cross-sectional shape and stimulated emission from the optical waveguides observed by photopumping," *Appl. Phys. Lett.* 68, 976–978 (1996).
- [171] K. Hiramatsu, K. Nishiyama, A. Motogaito, H. Miyake, Y. Iyechika, and T. Maeda, "Recent progress in selective area growth and epitaxial lateral overgrowth of III-nitrides: Effects of reactor pressure in MOVPE growth," *phys. stat. sol. (a)* 176, 535 (1999).
- [172] Y. Kato, S. Kitamura, K. Hiramatsu, and N. Sawaki, "Selective growth of wurtzite GaN and Al_xGa_{1-x}N on GaN/sapphire substrates by metalorganic vapor phase epitaxy," J. Cryst. Growth 144, 133–140 (1994).
- [173] C. Hennig, E. Richter, M. Weyers, and G. Tränkle, "Self-separation of thick two inch GaN layers grown by HVPE on sapphire using epitaxial lateral overgrowth with masks containing tungsten," *phys. stat. sol.* (c) 4, 2638–2641 (2007).
- [174] T. Wunderer, "Elektrolumineszenz-Untersuchungen an GaInN-Facetten-Quantenfilmen," Diplomarbeit (Abteilung Optoelektronik der Fakultät für Ingenieurwissenschaften an der Universität Ulm, 2006).
- [175] P. Fini, A. Munkholm, C. Thompson, G. B. Stephenson, J. A. Eastman, M. V. Ramana Murti, O. Auciello, L. Zhao, S. P. DenBaars, and J. S. Speck, "In situ, real-time measurement of wing tilt during lateral epitaxial overgrowth of GaN," *Appl. Phys. Lett.* **76**, 3893 (2000).
- [176] H. Marchand, X. H. Wu, J. P. Ibbetson, P. T. Fini, P. Kozodoy, S. Keller, J. S. Speck, S. P. DenBaars, and U. K. Mishra, "Microstructure of GaN laterally overgrown by metalorganic chemical vapor deposition," *Appl. Phys. Lett.* 73, 747–749 (1998).
- [177] S. Tomiya, K. Funato, T. Asatsuma, T. Hino, S. Kijima, T. Asano, and M. Ikeda, "Dependence of crystallographic tilt and defect distribution on mask material in epitaxial lateral overgrown GaN layers," *Appl. Phys. Lett.* 77, 636 (2000).
- [178] P. Brückner, "Einfluß der Prozeßparameter beim epitaktischen Überwachsen von strukturierten GaN-Schichten mittels MOVPE," Diplomarbeit (Abteilung Optoelektronik der Fakultät für Ingenieurwissenschaften an der Universität Ulm, 2004).

- [179] M. Fikry, "Investigations of Processing Methods for GaN-Based Laser Diodes," Masterarbeit (Institut f
 ür Optoelektronik der Fakult
 ät f
 ür Ingenieurwissenschaften und Informatik an der Universit
 ät Ulm, 2008).
- [180] T. S. Zheleva, O.-H. Nam, M. D. Bremser, and R. F. Davis, "Dislocation density reduction via lateral epitaxy in selectively grown GaN structures," *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2472–2474 (1997).
- [181] T. Wunderer, Y. Men, J. Wang, F. Lipski, S. Schwaiger, F. Scholz, M. Feneberg, M. Wiedenmann, and K. Thonke, "Light-Matter Coupling of Semipolar InGaN Quantum Wells Grown on Sub-Micrometer Sized 3D Gratings'," in *Poster auf 8th Int. Conf. on Nitride Semicond., ICNS-8, Jeju, Korea, Okt* (2009.).
- [182] S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, H. Kiyoku, Y. Sugimoto, T. Kozaki, H. Umemoto, M. Sano, and K. Chocho, "Present status of InGaN/GaN/AlGaN-based laser diodes," J. Cryst. Growth 189–190, 820–825 (1998).
- [183] O. Nam, T. Zheleva, M. Bremser, D. Thomson, and R. Davis, "Organometallic Vapor-Phase Lateral Epitaxy of Low Defect Density GaN Layers," *Mat. Res.* Soc. Symp. Proc. 482, 301 (1998).
- [184] J. Park, P. A. Grudowski, C. J. Eiting, and R. D. Dupuis, "Selective-area and lateral epitaxial overgrowth of III–N materials by metal organic chemical vapor deposition," *Appl. Phys. Lett.* **73**, 333–335 (1998).
- [185] K. Tadatomo, Y. Ohuchi, H. Okagawa, H. Itoh, H. Miyake, and K. Hiramatsu, "Hydrogen and Nitrogen Ambient Effects on Epitaxial Lateral Overgrowth (ELO) of GaN Via MOVPE," *MRS Internet J. Nitride Semicond. Res.* 4S1, G3.1 (1999).
- [186] B. Beaumont, P. Vennéguès, and P. Gibart, "Epitaxial lateral overgrowth of GaN," phys. stat. sol. (b) 227, 1–43 (2001).
- [187] D. Kapolnek, S. Keller, R. Vetury, R. D. Underwood, P. Kozodoy, S. P. D. Baars, and U. K. Mishra, "Anisotropic epitaxial lateral growth in GaN selective area epitaxy," *Appl. Phys. Lett.* **71**, 1204–1206 (1997).
- [188] R. F. Davis, T. Gehrke, K. Linthicum, P. Rajagopal, A. Roskowski, T. Zheleva, E. A. Preble, C. Zorman, M. Mehregany, U. Schwarz, J. Schuck, and R. Grober, "Review of Pendeo-Epitaxial Growth and Characterization of Thin Films of GaN and AlGaN Alloys on 6H-SiC(0001) and Si(111) Substrates," *MRS Internet J. Nitride Semicond. Res.* 6, 14 (2001).

- [189] O. Kayser, "Selective growth of InP/GaInAs in LP-MOVPE and MOMBE/CBE," J. Cryst. Growth 107, 989 (1991).
- [190] D. Ottenwälder, "Untersuchungen zur selektiven Epitaxie im Halbleitersystem GaIn(As,P)," Dissertation (Physikalisches Institut der Universität Stuttgart, 1996).
- [191] J. E. Greenspan, C. Blaauw, B. Emmerstorfer, R. W. Glew, and I. Shih, "Analysis of a time-dependent supply mechanism in selective area growth by MOCVD," *J. Cryst. Growth* 248, 405–410 (2003).
- [192] H. Fang, Z. J. Yang, Y. Wang, T. Dai, L. W. Sang, L. B. Zhao, T. J. Yu, and G. Y. Zhang, "Analysis of mass transport mechanism in InGaN epitaxy on ridge shaped selective area growth GaN by metal organic chemical vapor deposition," *J. Appl. Phys.* 103, 014908 (2008).
- [193] F. Habel, "Methoden zur Defektreduktion von Galliumnitrid-Substraten und -Quasisubstraten," Dissertation (Abteilung Optoelektronik der Fakultät für Ingenieurwissenschaften und Informatik an der Universität Ulm, 2006).
- [194] B. Neubert, "GaInN/GaN LEDs auf semipolaren Seitenfacetten mittels selektiver Epitaxie hergestellter GaN-Streifen," Dissertation (Institut für Optoelektronik der Fakultät für Ingenieurwissenschaften und Informatik an der Universität Ulm, 2008).
- [195] J. Wang, "Investigations of Sub-Micrometer-Sized Three-Dimensional GaInN/GaN Structures for Light Emitting Applications," Masterarbeit (Institut für Optoelektronik der Fakultät für Ingenieurwissenschaften und Informatik an der Universität Ulm, 2009).
- [196] A. Hangleiter, D. Fuhrmann, M. Grewe, F. Hitzel, G. Klewer, S. Lahmann, C. Netzel, N. Riedel, and U. Rossow, "Towards understanding the emission efficiency of nitride quantum wells," *phys. stat. sol. (a)* **201**, 2808–2813 (2004).
- [197] X. H. Wu, C. R. Elsass, A. Abare, M. Mack, S. Keller, P. M. Petroff, S. P. DenBaars, J. S. Speck, and S. J. Rosner, "Structural origin of V-defects and correlation with localized excitonic centers in InGaN/GaN multiple quantum wells," *Appl. Phys. Lett.* 72, 692–694 (1998).
- [198] T. Wunderer, J. Hertkorn, F. Lipski, P. Brückner, M. Feneberg, M. Schirra, K. Thonke, I. Knoke, E. Meissner, A. Chuvilin, U. Kaiser, and F. Scholz, "Optimization of semipolar GaInN/GaN blue/green light emitting diode structures on {1101} GaN side facets," Proc. of SPIE 6894, 68940V-1; Gallium Nitride Ma-

terials, Devices III, H. Morkoç, C.W. Litton, J.-I. Chyi, Y. Nanishi, E. Yoon, Eds., (2008).

- [199] F. Habel and M. Seyboth, "Determination of dislocation density in epitaxially grown GaN using an HCl etching process," *phys. stat. sol.* (c) 0, 2448 (2003).
- [200] K. Kornitzer, T. Ebner, K. Thonke, R. Sauer, C. Kirchner, V. Schwegler, M. Kamp, M. Leszczynski, I. Grzegory, and S. Porowski, "Photoluminescence and reflectance spectroscopy of excitonic transitions in high-quality homoepitaxial GaN films," *Phys. Rev. B* 60, 1471 (1999).
- [201] I. Tischer, M. Schirra, M. Feneberg, G. Prinz, R. Sauer, K. Thonke, T. Wunderer, F. Scholz, A. Chuvilin, U. Kaiser, I. Knoke, and E. Meissner, "Spatial distribution of structural defects in GaN," in *DPG-Frühjahrstagung, Berlin* (2008).
- [202] I. Knoke and E. Meissner, "persönliche Mitteilung," (2007).
- [203] R. Kirste, A. Hoffmann, F. Bertram, T. Hempel, J. Christen, T. Wunderer, and F. Scholz, "Luminescence and Raman Spectroscopy on InGaN/GaN Prism Structures," in *Poster auf European Mat. Res. Soc. (E-MRS) Spring Meeting, Strasbourg, Frankreich, Juni* (2009).
- [204] A. Sakai, H. Sunakawa, and A. Usui, "Transmission electron microscopy of defects in GaN films formed by epitaxial lateral overgrowth," *Appl. Phys. Lett.* 73, 481–483 (1998).
- [205] P. L. Bonanno, S. M. O'Malley, A. A. Sirenko, A. Kazimirov, Z.-H. Cai, T. Wunderer, P. Brückner, and F. Scholz, "Intrafacet migration effects in InGaN/GaN structures grown on triangular GaN ridges studied by submicron beam x-ray diffraction," *Appl. Phys. Lett.* **92**, 123106 (2008).
- [206] S. Jäger, "Untersuchungen zur Optimierung von InGaN/GaN-Vielfach-Quantentopf-Strukturen," Studienarbeit (Institut für Optoelektronik der Fakultät für Ingenieurwissenschaften und Informatik an der Universität Ulm, 2009).
- [207] M. Schillgalies, "MOVPE von InGaN-basierten Halbleiterlasern im Wellenlängenbereich von 400nm bis 450nm," Dissertation (Fakultät für Physik und Geowissenschaften an der Universität Leipzig, 2008).
- [208] G. Pozina, J. P. Bergman, B. Monemar, S. Yamaguchi, H. Amano, and I. Akasaki, "Optical spectroscopy of GaN grown by metalorganic vapor phase epitaxy using indium surfactant," *Appl. Phys. Lett.* **76**, 3388–3390 (2000).

- [209] C. Kruse, S. Einfeldt, T. Bottcher, and D. Hommel, "In as a surfactant for the growth of GaN (0001) by plasma-assisted molecular-beam epitaxy," *Appl. Phys. Lett.* **79**, 3425–3427 (2001).
- [210] S. C. Jain, M. Willander, J. Narayan, and R. V. Overstraeten, "III-nitrides: Growth, characterization, and properties," J. Appl. Phys. 87, 965–1006 (2000).
- [211] Y.-T. Moon, D.-J. Kim, K.-M. Song, C.-J. Choi, S.-H. Han, T.-Y. Seong, and S.-J. Park, "Effects of thermal and hydrogen treatment on indium segregation in InGaN/GaN multiple quantum wells," J. Appl. Phys. 89, 6514–6518 (2001).
- [212] J. N. Baillargeon, K. Y. Cheng, S. L. Jackson, and G. E. Stillman, "Investigation of the thermal dissociation of PH₃ and NH₃ using quadrupole mass spectrometry," J. Appl. Phys. 69, 8025–8030 (1991).
- [213] M. Schuster, P. O. Gervais, B. Jobst, W. Hosler, R. Averbeck, H. Riechert, A. Iberl, and R. Stommer, "Determination of the chemical composition of distorted InGaN/GaN heterostructures from x-ray diffraction data," J. of Physics D: Appl. Phys. 32, A56–A60 (1999).
- [214] C. Vierheilig, H.-J. Möstl, and U. Schwarz, "persönliche Mitteilung," (2008), Universität Regensburg.
- [215] M. Feneberg, K. Thonke, T. Wunderer, F. Lipski, and F. Scholz, "Piezoelectric polarization of semipolar and polar GaInN quantum wells grown on strained GaN templates," J. Appl. Phys. 107, in press (2010).
- [216] T. Shioda, M. Sugiyama, Y. Shimogaki, and Y. Nakano, "Selective area metalorganic vapor-phase epitaxy of InN, GaN and InGaN covering whole composition range," J. Cryst. Growth **311**, 2809–2812 (2009).
- [217] T. Wunderer, J. Biskupek, A. Chuvilin, U. Kaiser, Y. M. J. Wang, F. Lipski, S. Schwaiger, K. Forghani, and F. Scholz, "GaN-based Laser Structure Using 3D Semipolar InGaN Quantum Wells Embedded in Planar AlGaN Cladding Layers," in 15th Int. Conf. on Metal Organic Vapor Phase Epitaxy (2010).
- [218] B. Neubert, P. Brückner, F. Habel, 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).
- [219] 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**, 1587 (2006).

- [220] A. A. Sirenko, A. Kazimirov, S. Cornaby, D. H. Bilderback, B. Neubert, P. Bruckner, F. Scholz, V. Shneidman, and A. Ougazzaden, "Microbeam high angular resolution x-ray diffraction in InGaN/GaN selective-area-grown ridge structures," *Appl. Phys. Lett.* 89, 181926 (2006).
- [221] M. Funato, T. Kotani, T. Kondou, Y. Kawakami, Y. Narukawa, and T. Mukai, "Tailored emission color synthesis using microfacet quantum wells consisting of nitride semiconductors without phosphors," *Appl. Phys. Lett.* 88, 261920 (2006).
- [222] M. Funato, T. Kondou, K. Hayashi, S. Nishiura, M. Ueda, Y. Kawakami, Y. Narukawa, and T. Mukai, "Monolithic Polychromatic Light-Emitting Diodes Based on InGaN Microfacet Quantum Wells toward Tailor-Made Solid-State Lighting," *Appl. Phys. Express* 1, 011106 (2008).
- [223] H.-J. Möstl, "persönliche Mitteilung," (2008), Universität Regensburg.
- [224] T. Akasaka, H. Gotoh, T. Saito, and T. Makimoto, "High luminescent efficiency of InGaN multiple quantum wells grown on InGaN underlying layers," *Appl. Phys. Lett.* 85, 3089–3091 (2004).
- [225] T. Akasaka, H. Gotoh, H. Nakano, and T. Makimoto, "Blue-purplish InGaN quantum wells with shallow depth of exciton localization," *Appl. Phys. Lett.* 86, 191902 (2005).
- [226] H. Masui, S. C. Cruz, S. Nakamura, and S. P. DenBaars, "Geometrical Characteristics and Surface Polarity of Inclined Crystallographic Planes of the Wurtzite and Zincblende Structures," J. Electron. Mat. 38, 756 (2009).
- [227] M. Aoki, H. Yamane, M. Shimada, S. Sarayama, H. Iwata, and F. J. Disalvo, "Influence of 3d-Transition-Metal Additives on Single Crystal Growth of GaN by the Na Flux Method," Jpn. J. Appl. Phys. 42, 5445 (2003).
- [228] H. Masui and S. Nakamura, "Advances in Light Emitting Materials, Materials Science Forum, ed. B. Monemar, M. Kittler, and H. Grimmeiss, (Zurich: Trans Tech)," 590, 212–232. (2008).
- [229] S. C. Cruz, S. Keller, T. E. Mates, U. K. Mishra, and S. P. DenBaars, "Crystallographic orientation dependence of dopant and impurity incorporation in GaN films grown by metalorganic chemical vapor deposition," J. Cryst. Growth 311, 3817–3823 (2009).
- [230] S. Keller, N. A. Fichtenbaum, M. Furukawa, J. S. Speck, S. P. DenBaars, and U. K. Mishra, "Growth and characterization of N-polar InGaN/GaN multiquantum wells," *Appl. Phys. Lett.* **90**, 191908 (2007).

- [231] 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).
- [232] Y. D. Jho, J. S. Yahng, E. Oh, and D. S. Kim, "Field-dependent carrier decay dynamics in strained In_xGa_{1-x}N/GaN quantum wells," *Phys. Rev. B* 66, 035334 (2002).
- [233] U. T. Schwarz, H. Braun, K. Kojima, Y. Kawakami, S. Nagahama, and T. Mukai, "Interplay of built-in potential and piezoelectric field on carrier recombination in green light emitting InGaN quantum wells," *Appl. Phys. Lett.* **91**, 123503 (2007).
- [234] H. Shen, M. Wraback, H. Zhong, A. Tyagi, S. P. DenBaars, S. Nakamura, and J. S. Speck, "Determination of polarization field in a semipolar (1122) In-GaN/GaN single quantum well using Franz-Keldysh oscillations in electroreflectance," Appl. Phys. Lett. 94, 241906 (2009).
- [235] K. A. Bulashevich, S. Y. Karpov, and R. A. Suris, "Analytical model for the quantum-confined Stark effect including electric field screening by nonequilibrium carriers," *phys. stat. sol.* (b) 243, 1625–1629 (2006).
- [236] T. Wunderer, P. Brückner, J. Hertkorn, F. Scholz, G. J. Beirne, M. Jetter, P. Michler, M. Feneberg, and K. Thonke, "Time- and locally resolved photoluminescence of semipolar GaInN/GaN facet light emitting diodes," *Appl. Phys. Lett.* 90, 171123 (2007).
- [237] Y. J. Sun, O. Brandt, S. Cronenberg, S. Dhar, H. T. Grahn, K. H. Ploog, P. Waltereit, and J. S. Speck, "Nonpolar $In_xGa_{1-x}N(1\overline{1}00)$ multiple quantum wells grown on γ -LiAlO₂(100) by plasma-assisted molecular-beam epitaxy," *Phys. Rev.* B 67, 041306 (2003).
- [238] T. Onuma, A. Chakraborty, B. A. Haskell, S. Keller, S. P. DenBaars, J. S. Speck, S. Nakamura, U. K. Mishra, T. Sota, and S. F. Chichibu, "Localized exciton dynamics in nonpolar (1120) In_xGa_{1-x}N multiple quantum wells grown on GaN templates prepared by lateral epitaxial overgrowth," *Appl. Phys. Lett.* 86, 151918 (2005).
- [239] M. Pophristic, F. H. Long, C. Tran, I. T. Ferguson, and J. R. F. Karlicek, "Timeresolved photoluminescence measurements of InGaN light-emitting diodes," *Appl. Phys. Lett.* **73**, 3550–3552 (1998).

- [240] I. Ho and G. B. Stringfellow, "Solid phase immiscibility in GaInN," Appl. Phys. Lett. 69, 2701–2703 (1996).
- [241] M. Rao, D. Kim, and S. Mahajan, "Compositional dependence of phase separation in InGaN layers," Appl. Phys. Lett. 85, 1961–1963 (2004).
- [242] J. Off, "Epitaxie und optoelektronische Eigenschaften von GaN und verwandten Verbindungshalbleitern," Dissertation (Universität Stuttgart, 2001).
- [243] Y. Kawakami, K. Nishizuka, D. Yamada, A. Kaneta, M. Funato, Y. Narukawa, and T. Mukai, "Efficient green emission from (1122) InGaN/GaN quantum wells on GaN microfacets probed by scanning near field optical microscopy," *Appl. Phys. Lett.* **90**, 261912 (2007).
- [244] S. Watanabe, N. Yamada, M. Nagashima, Y. Ueki, C. Sasaki, Y. Yamada, T. Taguchi, K. Tadatomo, H. Okagawa, and H. Kudo, "Internal quantum efficiency of highly-efficient In_xGa_{1-x}N-based near-ultraviolet light-emitting diodes," *Appl. Phys. Lett.* 83, 4906–4908 (2003).
- [245] C. E. Martinez, N. M. Stanton, A. J. Kent, D. M. Graham, P. Dawson, M. J. Kappers, and C. J. Humphreys, "Determination of relative internal quantum efficiency in InGaN/GaN quantum wells," J. Appl. Phys. 98, 053509 (2005).
- [246] S. Metzner, "Orts-Zeitaufgelöste Lumineszenz-Untersuchungen an nicht-polaren und semi-polaren GaN-Strukturen," Diplomarbeit (Institut für Experimentelle Physik der Fakultät für Naturwissenschaften an der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, 2008).
- [247] M. Funato, A. Kaneta, Y. Kawakami, Y. Enya, K. Nishizuka, M. Ueno, and T. Nakamura, "Weak Carrier/Exciton Localization in InGaN Quantum Wells for Green Laser Diodes Fabricated on Semi-Polar {2021} GaN Substrates," Appl. Phys. Express 3, 021002 (2010).
- [248] K. Nishizuka, M. Funato, Y. Kawakami, Y. Narukawa, and T. Mukai, "Efficient rainbow color luminescence from In_xGa_{1-x}N single quantum wells fabricated on {1122} microfacets," Appl. Phys. Lett. 87, 231901 (2005).
- [249] A. Sasaki, S. Shibakawa, Y. Kawakami, K. Nishizuka, Y. Narukawa, and T. Mukai, "Equation for Internal Quantum Efficiency and Its Temperature Dependence of Luminescence, and Application to In_xGa_{1-x}N/GaN Multiple Quantum Wells," Jpn. J. Appl. Phys. 45, 8719–8723 (2006).
- [250] D. Dräger, "persönliche Mitteilung," (2009), TU Braunschweig.

- [251] Y. Enya, Y. Yoshizumi, T. Kyono, K. Akita, M. Ueno, M. Adachi, T. Sumitomo, S. Tokuyama, T. Ikegami, K. Katayama, and T. Nakamura, "531 nm Green Lasing of InGaN Based Laser Diodes on Semi-Polar {2021} Free-Standing GaN Substrates," Appl. Phys. Express 2, 082101 (2009).
- [252] T. Akasaka, S. Ando, T. Nishida, T. Saitoh, and N. Kobayashi, "Currentconfining structure of InGaN hexagonal microfacet lasers by selective incorporation of Mg during selective-area MOVPE," J. Cryst. Growth 248, 537 (2003).
- [253] D. Ren and P. Dapkus, "Anisotropic Mg incorporation in GaN growth on nonplanar templates," Appl. Phys. Lett. 86, 121901 (2005).
- [254] N. Valle, "persönliche Mitteilung," (2009).
- [255] N. Sawaki, T. Hikosaka, N. Koide, S. Tanaka, Y. Hondaa, and M. Yamaguchia, "Growth and properties of semi-polar GaN on a patterned silicon substrate," *J. Cryst. Growth* **311**, 2867–2874 (2009).
- [256] T. Wunderer, M.Fikry, J. Hertkorn, F. Lipski, S. Schwaiger, and F. Scholz, "Influence of Mg doping near the active region of GaN-based LEDs and LDs," in DGKK-Workshop, Braunschweig (2008).
- [257] H. Sato, A. Tyagi, H. Zhong, N. Fellows, R. B. Chung, M. Saito, K. Fujito, J. S. Speck, S. P. DenBaars, and S. Nakamura, "High power and high efficiency green light emitting diode on free-standing semipolar (11-22) bulk GaN substrate," *phys. stat. sol. (RRL)* 1, 162–164 (2007).
- [258] A. Tyagi, H. Zhong, N. N. Fellows, M. Iza, J. S. Speck, S. P. DenBaars, and S. Nakamura, "High Brightness Violet InGaN/GaN Light Emitting Diodes on Semipolar (1011) Bulk GaN Substrates," Jpn. J. Appl. Phys. 46, L129–L131 (2007).
- [259] H. Sato, R. B. Chung, H. Hirasawa, N. Fellows, H. Masui, F. Wu, M. Saito, K. Fujito, J. S. Speck, S. P. DenBaars, and S. Nakamura, "Optical properties of yellow light-emitting diodes grown on semipolar (1122) bulk GaN substrates," *Appl. Phys. Lett.* **92**, 221110 (2008).

Publikationsliste

Artikel

- S. Ahmed, R. Liske, T. Wunderer, M. Leonhardt, R. Ziervogel, C. Fansler, T. Grotjohn, J. Asmussen, und T. Schuelke, "Extending the 3 omega-method to the MHz range for thermal conductivity measurements of diamond thin films", *Diamond and Related Materials* 15, 389 (2006).
- T. Wunderer, P. Brückner, B. Neubert, F. Scholz, M. Feneberg, F. Lipski, M. Schirra, und K. Thonke, "Bright semipolar GaInN/GaN blue light emitting diode on side facets of selectively grown GaN stripes", *Appl. Phys. Lett.* 89, 041121 (2006).
- M. Feneberg, F. Lipski, R. Sauer, K. Thonke, T. Wunderer, B. Neubert, P. Brückner, und F. Scholz, "Piezoelectric fields in GaInN/GaN quantum wells on different crystal facets", *Appl. Phys. Lett.* 89, 242112 (2006).
- B. Neubert, T. Wunderer, P. Brückner, F. Scholz, M. Feneberg, F. Lipski, und K. Thonke, "Semipolar GaN/GaInN LEDs with more than 1mW optical output power", J. Crystal Growth 298, 706 (2007).
- M. Feneberg, F. Lipski, R. Sauer, K. Thonke, P. Brückner, B. Neubert, T. Wunderer, und F. Scholz, "Polarized light emission from semipolar GaInN quantum wells on {1101} GaN facets", J. Appl. Phys 101, 053530 (2007).
- T. Wunderer, P. Brückner, J. Hertkorn, F. Scholz, G. J. Beirne, M. Jetter, P. Michler, M. Feneberg, und K. Thonke, "Time and locally resolved photoluminescence of semipolar GaInN/GaN facet light emitting diodes", *Appl. Phys. Lett.* 90, 171123 (2007).
- T. Wunderer, P. Brückner, J. Hertkorn, F. Scholz, G. J. Beirne, M. Jetter, P. Michler, M. Feneberg, und K. Thonke, "Time and locally resolved photoluminescence of semipolar GaInN/GaN facet light emitting diodes", Virtual J. Ultrafast Science 5, 6 (2007).

Publikationsliste

- M. Feneberg, F. Lipski, R. Sauer, K. Thonke, T. Wunderer, P. Brückner, und F. Scholz, "Piezoelectric Fields in Tilted GaInN Quantum Wells", *Mat. Res.* Symp. Proc. 955, 112-02 (2007).
- J. Hertkorn, P. Brückner, S. B. Thapa, T. Wunderer, F. Scholz, M. Feneberg, K. Thonke, R. Sauer, M. Beer, und J. Zweck, "Optimitation of nucleation and buffer layer growth for improved GaN quality", *J. Crystal Growth* **308**, 30 (2007).
- T. Wunderer, J. Hertkorn, F. Lipski, P. Brückner, M. Feneberg, M. Schirra, K. Thonke, I. Knoke, E. Meissner, A. Chuvilin, U. Kaiser, und F. Scholz, "Optimization of semipolar GaInN/GaN blue/green light emitting diode structures on {1101} GaN side facets", Gallium Nitride Materials and Devices III, ed. by H. Morkoc et al., *Proc. of SPIE* 6894, 68940V-1 (2008).
- P. L. Bonanno, S. M. O'Malley, A. A. Sirenko, A. Kazimirov, Z.-H. Cai, T. Wunderer, P. Brückner, und F. Scholz, "Intrafacet migration effects in InGaN/GaN structures grown on triangular GaN ridges studied by submicron beam x-ray diffraction", *Appl. Phys. Lett.* **92**, 123106 (2008).
- T. Wunderer, F. Lipski, J. Hertkorn, P. Brückner, F. Scholz, M. Feneberg, M. Schirra, K. Thonke, A. Chuvilin, und U. Kaiser, "Bluish-green semipolar GaInN/GaN light emitting diodes on {1101} GaN side facets", phys. stat. sol. (c) 5, 2059 (2008).
- M. Feneberg, F. Lipski, M. Schirra, R. Sauer, K. Thonke, T. Wunderer, P. Brückner, und F. Scholz, "High quantum efficiency of semipolar GaInN/GaN quantum wells", *phys. stat. sol.* (c) 5, 2089 (2008).
- S. M. O'Malley, P. L. Bonanno, T. Wunderer, P. Brückner, B. Neubert, F. Scholz, A. Kazimirov, und A. A. Sirenko, "X-ray diffraction studies of selective area grown InGaN/GaN multiple quantum wells on multi-facet GaN ridges", *phys. stat. sol.* (c) 5, 1655 (2008).
- 15. J. Hertkorn, F. Lipski, P. Brückner, T. Wunderer, S. B. Thapa, F. Scholz, A. Chuvilin, U. Kaiser, M. Beer, J. Zweck, "Process optimization for the effective reduction of threading dislocations in MOVPE grown GaN using in situ deposited SiN_x masks", J. Crystal Growth **310**, 4867 (2008).
- S. B. Thapa, J. Hertkorn, T. Wunderer, F. Lipski, F. Scholz, A. Reiser, Y. Xie, M. Feneberg, K. Thonke, R. Sauer, M. Dürrschnabel, L. D. Yao, D. Gerthsen, H. Hochmuth, M. Lorenz, M. Grundmann, "MOVPE growth of GaN around ZnO nanopillars", J. Crystal Growth 310, 5139 (2008).
- 17. F. Lipski, S.B. Thapa, J. Hertkorn, T. Wunderer, S. Schwaiger, F. Scholz, M. Feneberg, M. Wiedenmann, K. Thonke, H. Hochmuth, M. Lorenz, und M. Grundmann, "Studies towards freestanding GaN in hydride vapor phase epitaxy by in-situ etching of a sacrificial ZnO buffer layer", *phys. stat. sol.* (c) 6, S352 (2009).
- R. Jabbarov, N. Musayeva, F. Scholz, T. Wunderer, A. N. Turkin, S. S. Shirokov, und A. E. Yunovich, "Preparation and optical properties of Eu²⁺ doped CaGa₂S₄-CaS composite bicolor phosphor for white LED", *phys. stat. sol. (a)* **206**, 287 (2009).
- F. Scholz, S.B. Thapa, M. Fikry, J. Hertkorn, T. Wunderer, F. Lipski, A. Reiser, Y. Xie, M. Feneberg, K. Thonke, R. Sauer, M. Dürrschnabel, L.D. Yao, and D. Gerthsen, "Epitaxial growth of coaxial GaInN-GaN hetero-nanotubes", *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* 6, 012002 (2009).
- T. Wunderer, F. Lipski, J. Hertkorn, S. Schwaiger, und F. Scholz, "Fabrication of 3D InGaN/GaN structures providing semipolar GaN planes for efficient green light emission", *phys. stat. sol.* (c) 6, 490 (2009).
- F. Scholz, T. Wunderer, B. Neubert, M. Feneberg, K. Thonke, "GaN-Based Light-Emitting Diodes on Selectively Grown Semipolar Crystal Facets", MRS Bull. 34, 328 (2009).
- T. Wunderer, F. Lipski, S. Schwaiger, J. Hertkorn, M. Wiedenmann, M. Feneberg, K. Thonke, und F. Scholz, "Properties of Blue and Green InGaN/GaN Quantum Well Emission on Structured Semipolar Surfaces", *Jpn. J. Appl. Phys.* 48, 060201 (2009).
- 23. J. Hertkorn, S.B. Thapa, T. Wunderer, F. Scholz, Z.H. Wu, Q.Y. Wei, F.A. Ponce, M.A. Moram, C.J. Humphreys, C. Vierheilig, und U.T. Schwarz, "Highly conductive modulation doped composition graded p-AlGaN/(AlN)/GaN multi-heterostructures grown by metalorganic vapor phase epitaxy", J. Appl. Phys. 106, 013720-1-2 (2009).
- M. Feneberg, K. Thonke, T. Wunderer, F. Lipski, F. Scholz, "Piezoelectric polarization of semipolar and polar GaInN quantum wells grown on strained GaN templates", J. Appl. Phys. 107, 103517 (2010).
- S. Schwaiger, F. Lipski, T. Wunderer, und F. Scholz, "Influence of slight misorientations of r-plane sapphire substrates on the growth of nonpolar a-plane GaN layers via HVPE", *phys. stat. sol. (c)* 7, 2069 (2010).

Publikationsliste

- F. Lipski, T. Wunderer, S. Schwaiger, und F. Scholz, "Fabrication of freestanding 2"-GaN wafers by hydride vapour phase epitaxy and self-separation during cooldown", *phys. stat. sol. (a)* **207**, 1287 (2010).
- 27. F. Scholz, T. Wunderer, M. Feneberg, K. Thonke, A. Chuvilin, U. Kaiser, S. Metzner, F. Bertram, und J. Christen, "GaInN-based LED structures on selectively grown semi-polar crystal facets", phys. stat. sol. (a) 207, 1407 (2010).
- 28. T. Wunderer, J. Wang, F. Lipski, S. Schwaiger, A. Chuvilin, U. Kaiser, S. Metzner, F. Bertram, J. Christen, S.S. Shirokov, A.E. Yunovich, und F. Scholz, "Semipolar GaInN-Based Light-Emitting Diodes Grown on Honeycomb Patterned Substrates", *phys. stat. sol.* (c) 7, 2140 (2010).
- S. Schwaiger, I. Argut, T. Wunderer, R. Rösch, F. Lipski, J. Biskupek, U. Kaiser, und F. Scholz, "Planar Semipolar (10-11) GaN on (11-23) Sapphire", Appl. Phys. Lett. 96, 231905 (2010).

Konferenzbeiträge

Nationale

- T. Wunderer, B. Neubert, P. Brückner, und F. Scholz, "Elektrolumineszenz von GaInN-Facetten-Quantenfilmen", *DGKK-Workshop III-V-Epitaxie*, Duisburg, Deutschland, Dez. 2005.
- T. Wunderer, P. Brückner, J. Hertkorn, F. Scholz, G. Beirne, M. Jetter, P. Michler, M. Feneberg, K. Thonke, "Zeitaufgelöste PL an semipolaren GaInN/GaN-Leuchtdioden", DGKK-Workshop III-V-Epitaxie, Ulm, Deutschland, Dez. 2006.
- T. Wunderer, F. Lipski, J. Hertkorn, P. Brückner, F. Scholz, M. Feneberg, M. Schirra, K. Thonke, A. Chuvilin, U. Kaiser, I. Knoke, und E. Meissner, "Blaugrüne semipolare GaInN/GaN LEDs auf {1101} GaN-Seitenfacetten", DGKK-Workshop III-V-Epitaxie, Marburg, Deutschland, Dez. 2007.
- T. Wunderer, F. Lipski, J. Hertkorn, P. Brückner, F. Scholz, M. Feneberg, R. Sauer, and K. Thonke, "Semipolar {1101} GaInN quantum wells for green light emitting diodes", *DPG-Tagung*, Berlin, Germany, Feb. 2008.
- 5. T. Wunderer, M. Fikry, J. Hertkorn, S. Schwaiger, F. Lipski, F. Scholz, "Einfluss der Mg-Dotierung nahe der aktiven Zone auf die Effizienz von GaN-basierten

LEDs und Lasern", *DGKK-Workshop III-V-Epitaxie*, Braunschweig, Deutschland, Dez. 2008.

- T. Wunderer, F. Lipski, S. Schwaiger, J. Hertkorn, F. Scholz, M. Wiedenmann, M. Feneberg, und K. Thonke, "Herstellung von 3D GaInN/GaN Strukturen mit semipolaren Oberflächen für effiziente grüne Licht-Emission", *DGKK-Workshop III-V-Epitaxie*, Braunschweig, Deutschland, Dez. 2008.
- T. Wunderer, F. Lipski, S. Schwaiger, F. Scholz, M. Wiedenmann, M. Feneberg, K. Thonke, "Fabrication of high quality semipolar GaN on full 2 inch for green light emitters", *DPG-Tagung*, Dresden, Germany, März 2009.
- T. Wunderer, F. Scholz, M. Feneberg, K. Thonke, A. Chuvilin, U. Kaiser, S. Metzner, F. Bertram, und J. Christen, "GaInN/GaN LEDs on semipolar crystal facets", (eingeladen), *Workshop Nitrides*, Bremen, Deutschland, Sep. 2009.
- T. Wunderer, A. Chuvilin, Y. Men, F. Lipski, S. Schwaiger, J. Wang, E. Kohn, U. Kaiser, und F. Scholz, "Light-Matter Coupling of Semipolar GaInN Quantum Wells by Selective Area Growth of Sub-Micrometer Sized 3D Gratings", *Hetech* 2009, Günzburg/Ulm, Deutschland, Nov. 2009.
- T. Wunderer, R. A. R. Leute, J. Biskupek, A. Chuvilin, U. Kaiser, Y. Men, J. Wang, F. Lipski, S. Schwaiger, K. Forghani, und F. Scholz, "GaN-based laser structure with semipolar InGaN QWs realized by selective area epitaxy", *DPG-Tagung*, Regensburg, Germany, März 2010.
- T. Wunderer, F. Lipski, S. Schwaiger, F. Scholz, M. Feneberg, K. Thonke, A. Chuvilin, U. Kaiser, S. Metzner, F. Bertram, J. Christen, C. Vierheilig, U. Schwarz, "Three-dimensional GaN for semipolar light emitters", (eingeladen), *DPG-Tagung*, Regensburg, Germany, März 2010.

Internationale

- T. Wunderer, F. Lipski, J. Hertkorn, P. Brückner, F. Scholz, M. Feneberg, M. Schirra, K. Thonke, A. Chuvilin, und U. Kaiser, "Bluish-green semipolar GaInN/GaN light emitting diode on {1101} GaN side facets", Poster auf 7th Int. Conf. on Nitride Semiconductors, Las Vegas, Nevada, USA, Sept. 2007.
- T. Wunderer, J. Hertkorn, F. Lipski, P. Brückner, F. Scholz, M. Feneberg, M. Schirra, K. Thonke, A. Chuvilin, und U. Kaiser, "Bluish-Green Semipolar GaInN/GaN Light Emitting Diode on {1101} GaN Side Facets", SPIE Photonics West, San Jose, USA, Jan. 2008.

Publikationsliste

- T. Wunderer, F. Lipski, J. Hertkorn, S. Schwaiger, F. Scholz, "Fabrication of 3D InGaN/GaN Structures Providing Semipolar GaN Planes For Efficient Green Light Emission", 5th Int. Workshop on Nitride semiconductors (IWN2008), Montreux, Schweiz, Okt. 2008.
- 4. T. Wunderer, F. Lipski, S. Schwaiger, F. Scholz, M. Wiedenmann, M. Feneberg, K. Thonke, S. Metzner, F. Bertram, und J. Christen, "Fabrication of high quality semipolar GaInN/GaN on c-plane sapphire using selective area epitaxy", Poster auf 13th European Workshop on MOVPE, Ulm, Deutschland, Juni 2009.
- T. Wunderer, J. Wang, F. Lipski, S. Schwaiger, S. S. Shirokov, A. E. Yunovich, und F. Scholz, "Color Tuning using Single Semipolar GaInN Light-emitting Diode Grown on 3D Inverted Pyramids", 8th Int. Conf. on Nitride Semiconductors, ICNS-8, Jeju, Korea, Okt. 2009.
- T. Wunderer, Y. Men, J. Wang, F. Lipski, S. Schwaiger, F. Scholz, M. Feneberg, M. Wiedenmann, und K. Thonke, "Light-Matter Coupling of Semipolar InGaN Quantum Wells Grown on Sub-Micrometer Sized 3D Gratings", Poster auf 8th Int. Conf. on Nitride Semiconductors, ICNS-8, Jeju, Korea, Okt. 2009.
- T. Wunderer, F. Lipski, S. Schwaiger, M. Feneberg, K. Thonke, A. Chuvilin, U. Kaiser, S. Metzner, J. Christen, und F. Scholz, "Properties of selectively grown 3D GaInN/GaN LEDs with semipolar surfaces", Poster auf NTT Basic Research Laboratory School, Atsugi, Japan, Nov. 2009.
- T. Wunderer, J. Biskupek, A. Chuvilin, U. Kaiser, Y. Men, J. Wang, F. Lipski, S. Schwaiger K. Forghani, und F. Scholz, "GaN-based Laser Structure Using 3D Semipolar InGaN Quantum Wells Embedded in Planar AlGaN Cladding Layers", 15th Int. Conf. on MOVPE, ICMOVPE XV, Lake Tahoe, USA, Mai 2010.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei all denen bedanken, die zum Gelingen dieser Arbeit ihren ganz besonderen Beitrag geleistet haben:

- Prof. Dr. Ferdinand Scholz für die exzellente Betreuung dieser Arbeit, für die Freiheiten, eigene Ideen verwirklichen zu können, und das Vertrauen, das er mir stets entgegen gebracht hat. Sein kritischer Blick und die motivierende Art, die erzielten Ergebnisse zu reflektieren, sowie sein warmherziger Charakter sind die Eigenschaften, die einen wahren Doktorvater auszeichnen.
- **Prof. Dr. Michael Kneissl** für seine freundliche Bereitschaft, das Zweitgutachten zu erstellen.
- Dr. Martin Feneberg für seine umfangreiche und beständige Unterstützung, die behandelte Materie ins rechte Licht zu rücken, was nicht nur auf seine spektroskopischen Fähigkeiten beschränkt bleibt.
- Dipl.-Phys. Frank Lipski für die gewinnbringenden Diskussionen und sein andauerndes Engagement, viele der Ideen in die Tat umzusetzen.
- Dr. Peter Brückner, Dr. Joachim Hertkorn, Dipl.-Phys. Stephan Schwaiger und M.Sc. Kamran Forghani für ihr sorgfältiges Arbeiten und die Expertise im Bereich der Epitaxie.
- M.Sc. Junjun Wang, M.Sc. Mohamed Fikry, M.Sc. Hongcheng Xu und Stefan Jäger für die vielen Beiträge, die sie zur Erstellung ihrer Abschluss-Arbeiten und deshalb auch für mein Weiterkommen erarbeitet haben.
- Ilona Argut, Rudolf Rösch, Rainer Blood, Susanne Menzel, Dipl.-Ing. Dieter Kinzler und Dr. Jürgen Mähnß für die tatkräftige und freundschaftliche Hilfe bei allen Belangen rund um die Proben-Präparation und zu Reinraum-Angelegenheiten.
- Dipl.-Phys. Robert A. R. Leute, Dipl.-Ing. Yakiv Men und Dipl.-Ing. Wolfgang Schwarz für die bisher geleistete Unterstützung und hoffentlich erfolgreiche Fortführung der Sub-µm-Strukturen.

Danksagung

- Dipl.-Phys. Ingo Tischer, Dipl.-Phys. Michael Wiedenmann, Dipl.-Phys. Kim Fujan, Dr. Martin Schirra und apl. Prof. Dr. Klaus Thonke vom Institut für Quantenmaterie an der Universität Ulm für die sorgfältigen und gewinnbringenden CL-Analysen.
- Prof. Dr. Andrey Chuvilin, Dr. Johannes Biskupek, Dr. Lorenz Lechner und Prof. Dr. Ute Kaiser von der Materialwissenschaftlichen Elektronenmikroskopie an der Universität Ulm für die erstklassigen TEM-Aufnahmen, die großen Beitrag zum heutigen Erkenntnis-Stand geleistet haben.
- Dipl.-Phys. Sebastian Metzner, Dr. Frank Bertram und Prof. Dr. Jürgen Christen vom Institut für Experimentelle Physik an der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg für die vielfältigen und detaillierten CL-Analysen.
- Dr. Gareth J. Beirne, Dr. Michael Jetter und Prof. Dr. Peter Michler vom Institut für Halbleiteroptik und Funktionelle Grenzflächen an der Universität Stuttgart für die gute Zusammenarbeit bei den zeitaufgelösten PL-Analysen.
- Prof. Dr. Andrei A. Sirenko *et al.* vom Department of Physics am New Jersey Institute of Technology, USA für die einzigartige Unterstüzung mittels hoch-ortsaufgelöster XRD-Untersuchungen.
- Dipl.-Phys. Lukas Schade, Dipl.-Phys. Hans-Jürgen Möstl, Dipl.-Phys. Clemens Vierheilig und Prof. Dr. Ulrich T. Schwarz vom Institut für Experimentelle und Angewandte Physik an der Universität Regensburg für die aussagekräftigen µ-PL-Messungen.
- Dipl.-Phys. Daniel Dräger, Moritz Brendel und Prof. Dr. Andreas Hangleiter vom Institut für Angewandte Physik an der Technischen Universität Braunschweig für die vielversprechenden Gewinn- und IQE-Messungen.
- Prof. Dr. Alexander E. Yunovich, Dr. Stas Shirokov, Dr. Nahida Musayeva und Dr. Rasim Jabbarov für die liebenswerte Herzlichkeit und den gelebten Frohmut.
- Dipl.-Phys. Benedikt Westenfelder und Dr. Barbara Neubert für die angenehme Arbeitsatmosphäre innerhalb des gemeinsamen Büros.
- Sükran Kilic und Hildegard Mack für die tadellose Unterstützung in allen Verwaltungs-Angelegenheiten.

- Der Kaffeebohne und allen bisher nicht erwähnten Genießern des Heißgetränks, durch das so manche Idee erst entstehen konnte.
- Allen Kollegen des Instituts für Optoelektronik an der Universität Ulm für die sehr gute Zusammenarbeit und das tolle Arbeitsklima.
- Meiner lieben Freundin **Tina** für den strukturellen Halt im Leben, das Aufzeigen neuer Wege und das Geschenk des gemeinsamen Zuhauses.
- Schließlich **meinen Eltern** für die bis heute andauernde Unterstützung und das entgegengebrachte Vertrauen.

Herzlichen Dank!

Lebenslauf

Persönliche Daten

20.04.1020	Calana	: T	. J. (:	A 11	
29.04.1960	Genoren	in innensu	aat (I	III AII	.gau)

Ausbildung

09/1986 - 02/1989	Grundschule in Burgberg
03/1989 - 07/1990	Grundschule in Martinszell
09/1990 - 07/1999	Gymnasium Immenstadt
09/2000 - 03/2006	Studium der Elektrotechnik an der Universität Ulm

Berufliche Erfahrung

09/2004 - $02/2005$	Wissenschaftlicher Assistent		
	Fraunhofer USA, Lansing, MI, USA		
04/2006 - 09/2010	Wissenschaftlicher Mitarbeiter		
	Institut für Optoelektronik an der Universität Ulm		

Thomas Wunderer