

1 Einleitung

Halbleiter sind aus dem Alltag des 21. Jahrhunderts nicht mehr wegzudenken. Sie stellen die zentralen Bausteine für Computer-Systeme dar und begegnen uns in zahllosen Geräten des täglichen Lebens. Ohne moderne Halbleitermaterialien könnten wir weder unsere Mobiltelefone nutzen, noch könnten wir uns auf die aktiven Sicherheitssysteme in unseren Automobilen verlassen. Selbst das Abspielen einer CD oder DVD wäre ohne die zukunftsweisenden Halbleiterbauelemente undenkbar.

Neben den rein elektronischen Eigenschaften von Halbleitern haben in zunehmendem Maße auch ihre optischen Anwendungsmöglichkeiten an Bedeutung gewonnen. So werden etwa Leuchtdioden erfolgreich bei Beleuchtungsanwendungen eingesetzt, bei denen Farbe und Weißlicht mit kleinem Formfaktor, hoher Designflexibilität und niedrigem Leistungsverbrauch ausschlaggebend sind.

Im Blickpunkt der Forschung steht derzeit die Entwicklung von hocheffizienten weiß emittierenden Leuchtdioden. Eine Erklärung hierfür ist die Tatsache, dass deutschlandweit etwa 8% der erzeugten Energie für Beleuchtungszwecke aufgewendet werden. Berücksichtigt man den geringen Wirkungsgrad einer herkömmlichen Glühlampe von nur 5%, so ist das Energieeinsparpotential eines neuartigen, hocheffizienten Beleuchtungssystems klar ersichtlich.

Sind bei herkömmlichen Glühlampen nur noch geringe Effizienzsteigerungen möglich, so sind die Potentiale der bereits deutlich effizienteren Leuchtdioden bei weitem noch nicht ausgeschöpft. Durch ein verbessertes Wärmemanagement, eine Optimierung des Chip-Designs und die Weiterentwicklung der Schichtstruktur können die Lichtausbeuten der Leuchtdioden weiter gesteigert werden. Durch eine zeitgleiche Senkung der derzeit noch zu hohen Herstellungskosten können sich LEDs (Light Emitting Diode) schließlich für Einsatzfelder qualifizieren, die heute noch von konventionellen Lichtquellen bedient werden. So ist es möglich, dass in naher Zukunft weiß emittierende LEDs (kurz: weiße LEDs) in der Allgemeinbeleuchtung oder als Lichtquelle in Frontscheinwerfern von Kraftfahrzeugen eingesetzt werden.

1 Einleitung

Die Entwicklung von weißen Leuchtdioden basiert dabei auf dem Materialsystem der nitridischen III-V-Verbindungshalbleiter, welche sich durch ihre thermische, mechanische und elektrische Stabilität auszeichnen. Die direkte Bandlücke der Gruppe III-Nitride erstreckt sich dabei ausgehend von 0.7 eV bei Indiumnitrid (InN) über 3.4 eV bei Galliumnitrid (GaN) bis hin zu 6.2 eV bei Aluminiumnitrid (AlN). Mit den ternären Verbindungshalbleitern AlGaIn und InGaIn lässt sich somit theoretisch der gesamte sichtbare Spektralbereich von Ultraviolett (UV) bis Infrarot (IR) darstellen, was insbesondere für den Einsatz in der Optoelektronik von großem Interesse ist. So werden beispielsweise blau emittierende LEDs durch die Verwendung von InGaIn-Quantenfilmen realisiert. Durch den Einsatz entsprechender Phosphore und der Lumineszenz-Konversion ist folglich die Herstellung von weißen LEDs möglich.

Trotz einer rasanten Entwicklung in den vergangenen Jahren wird eine weitere Effizienzsteigerung der Hochleistungs-LED-Strukturen z.B. durch die typisch hohen Defektdichten und die grundlegenden elektrischen Eigenschaften der Gruppe III-Nitride erschwert. Die durch Heteroepitaxie auf Saphir abgeschiedenen GaN-Schichten weisen dabei üblicherweise Defektdichten von $3 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ auf, was durch die große Gitterfehlpassung zu den üblicherweise verwendeten Fremdsubstraten zu erklären ist. Da diese Versetzungen als Zentren für nichtstrahlende Rekombinationsprozesse fungieren, sind sie verantwortlich für Effizienzverluste. Zusätzlich beeinträchtigen die Kristalldefekte auch die elektrischen Eigenschaften der nitridischen Verbindungshalbleiter. So kommt es an Versetzungslinien zu einer Streuung von Ladungsträgern, was unmittelbar eine Reduktion der elektrischen Leitfähigkeit zur Folge hat. Die damit verbundene Erhöhung der Betriebsspannung einer LED wirkt sich nicht nur direkt negativ auf deren Effizienz aus, sondern limitiert aufgrund der erhöhten Verlustleistung auch direkt die Lebensdauer des Bauelements.

Durch die limitierte Leitfähigkeit ist es ebenfalls schwierig, Bereiche der InGaIn-Quantenfilme elektrisch zu pumpen, welche abseits der verwendeten Kontaktstege liegen. Als Folge der hieraus resultierenden inhomogenen Stromdichteverteilung ergibt sich schließlich eine inhomogene Ausleuchtung des LED-Chips. Die Extraktionseffizienz der LED ist somit limitiert. Speziell unterhalb der Kontakte werden hohe Stromdichten erzielt, wobei ein Großteil der hier erzeugten Lichtmenge durch den Kontakt abgeschattet wird und folglich nicht genutzt werden kann.

Durch eine gezielte Reduktion der Kristalldefekte und eine deutliche Erhöhung der lateralen Stromleitfähigkeit erscheint es demzufolge möglich die Effizienz von weißen Hochleistungs-LEDs zu steigern. In der hier vorliegenden Dissertation wird aufgezeigt, wie diese Vorhaben verfolgt und umgesetzt werden können.

Zielsetzung und Gliederung der Arbeit

Grundlage für eine weitere Effizienzsteigerung von weiß emittierenden InGaN-Leuchtdioden ist eine Reduktion der Versetzungsdichte und eine Verbesserung der lateralen Stromleitfähigkeit zur gezielten Erhöhung der Extraktionseffizienz. Die vorliegende Arbeit befasst sich mit dieser Thematik und zeigt verschiedene Lösungen dieser Problematik auf.

In Kapitel 2 werden die grundlegenden physikalischen Eigenschaften der Gruppe III-Nitride diskutiert. Neben der Betrachtung der Bandstrukturen und der charakteristischen Polarisation der nitridischen Verbindungshalbleiter wird hier ebenfalls auf die elektrischen Eigenschaften von GaN eingegangen. Speziell der Einfluss der typisch hohen Defektdichten auf die elektrische Leitfähigkeit soll hier veranschaulicht werden. Außerdem wird aufgezeigt, inwieweit die limitierte laterale Leitfähigkeit der Gruppe III-Nitride die Eigenschaften von optoelektronischen Bauelementen negativ beeinflussen kann.

Das epitaktische Wachstum von hochqualitativem GaN wird in Kapitel 3 diskutiert. Die Entwicklung einer sauerstoffdotierten AlN-Nukleationsschicht steht hier ebenso im Vordergrund wie die effektive Defektreduktion durch eine in-situ abgeschiedene SiN-Zwischenschicht.

Zur Verbesserung der lateralen Leitfähigkeit in dünnen Epitaxieschichten ist die Verwendung von zweidimensionalen Ladungsträgern untersucht worden. Die Entstehung und die Eigenschaften dieser Ladungsträger werden in Kapitel 4 ausführlich diskutiert. Experimentelle Ergebnisse zu n-leitfähigen AlGaN/AlN/GaN-Multiheterostrukturen folgen in Kapitel 5. Die Untersuchung der lateralen und vertikalen Leitfähigkeit dieser hoch leitfähigen Schichten wird hier veranschaulicht. Die entsprechenden Ergebnisse für die mit Magnesium dotierten und somit p-leitfähigen Schichten werden entsprechend in Kapitel 6 dargestellt.

In Kapitel 7 wird auf das Wachstum von Leuchtdioden mit InGaN-Quantenfilmen eingegangen. Die speziellen Anforderungen an das Abscheiden von qualitativ hochwertigen Quantenfilmen wird hier ebenso betrachtet wie der starke Einfluss des Mg-Dotierprofils auf die optische Ausgangsleistung von InGaN-LEDs. Im Mittelpunkt dieses Kapitels steht die Betrachtung der verbesserten Stromaufweitung in Flip-Chip aufgebauten Hochleistungs-LEDs, welche durch die Integration von modulationsdotierten p- und n-leitfähigen Multiheterostrukturen erzielt werden konnte.

2 Grundlagen zu Gruppe III-Nitriden

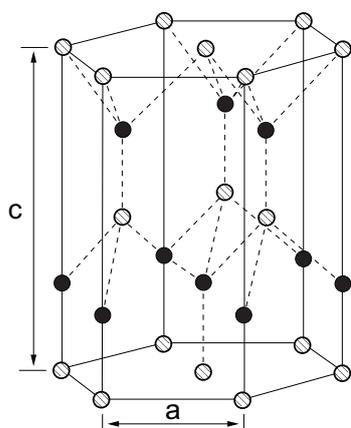
Bei der Realisierung von optoelektronischen Halbleiterbauelementen ist es von übergeordneter Bedeutung, die physikalischen Eigenschaften des verwendeten Materialsystems zu kennen. Die im Mittelpunkt dieser Arbeit stehende Effizienzsteigerung von weiß emittierenden Hochleistungsleuchtdioden setzt daher fundierte Kenntnisse der physikalischen Grundlagen der Gruppe III-Nitride voraus, welche in diesem zweiten Kapitel veranschaulicht werden sollen.

2.1 Das Materialsystem $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})\text{In}_{1-y}\text{N}$

Gallium, Aluminium und Indium sind Elemente der dritten Hauptgruppe des Periodensystems. Zusammen mit Stickstoff aus der fünften Hauptgruppe bilden sie das Materialsystem der nitridischen Verbindungshalbleiter. Zu den wohl wichtigsten physikalischen Grundlagen des Materialsystems $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})\text{In}_{1-y}\text{N}$ gehören die Kristall- und Bandstruktur von Galliumnitrid (GaN), Aluminiumnitrid (AlN) und Indiumnitrid (InN). Die kompositionsunabhängig stets direkte Bandlücke reicht von 0.7 eV für InN bis zu 6.2 eV für AlN. Für die Realisierung von optoelektronischen Bauelementen ist dies von großem Interesse, da aus diesen Materialien theoretisch Halbleiterlichtquellen hergestellt werden können, deren Emissionswellenlängen den spektralen Bereich von Infrarot bis Ultraviolett abdecken. In kommerziell erhältlichen Leuchtdioden werden die nitridischen Verbindungshalbleiter bereits mit großem Erfolg für Bauelemente mit Emissionswellenlängen von 550 nm (Grün) bis 380 nm (Ultraviolett) eingesetzt. Die Realisierung von effizienten Bauelementen außerhalb dieses Spektralbereichs wird durch die speziellen Materialeigenschaften stark erschwert. Hinderlich sind hier vor allem die limitierte Gitteranpassung der ternären Verbindungshalbleiter AlGaN oder InGaN, sowie fehlende Verfahren zur Herstellung von qualitativ hochwertigen In- bzw. Al-reichen Schichten. Ehe in Kapitel 3 auf das Wachstum von hochqualitativem GaN eingegangen wird, werden zunächst die Kristall- und Bandstruktur sowie die charakteristische Polarisation der Gruppe III-Nitride betrachtet.

2.1.1 Kristall- und Bandstruktur von GaN, AlN und InN

Die Halbleiter InN, GaN und AlN kristallisieren unter epitaktischen Bedingungen bevorzugt in der thermodynamisch stabilen Wurtzit-Struktur. Wie Abbildung 2.1 entnommen werden kann, besteht der Kristall aus zwei hexagonal dichtesten Kugelpackungen, wobei jedes Atom tetraedrisch von 4 Atomen der anderen Atomsorte umgeben ist. Die große Elektronegativitätsdifferenz zwischen (Ga,Al,In) und N bewirkt eine stark ionische Bindung der Atome. Dies ist die Erklärung für die hohe Stabilität dieser Materialien. Das Kristallgitter wird durch die a - und c -Gitterkonstante beschrieben, wobei a die Seitenlänge der hexagonalen Anordnung der Atome einer Sorte ist und c der Länge der dazu senkrechten Achse entspricht. Die jeweiligen Gitterkonstanten von unverspanntem AlN, GaN und InN in Wurtzit-Anordnung sind tabellarisch in Abbildung 2.1 aufgelistet. Entlang der c -Achse ist die Struktur aus Netzebenen der selben Atomsorte aufgebaut. Im Fall von GaN wechseln sich folglich N- mit Ga-Ebenen ab. Je nachdem welche Atomsorte die Oberfläche der GaN-Schicht bildet, wird von N- bzw. *Ga-face* gesprochen. Die in dieser Arbeit durch metallorganische Gasphasenepitaxie abgeschiedenen Schichten weisen in der Regel *Ga-face* auf [1]. Inwieweit eine N-terminierte Schicht die physikalischen Eigenschaften von GaN verändert, wird folglich in dieser Arbeit nicht weiter thematisiert. Weitere Informationen hierzu finden sich beispielsweise in einer Veröffentlichung von Hellmann [2]. Die Tatsache, dass nitridische Verbindungshalbleiter in der Wurtzitmodifikation in $[0001]$ -Richtung kein Inversionszentrum besitzen, macht sie zu piezoelektrischen Materialien. Auf diese nicht zu vernachlässigende und charakteristische physikalische Eigenschaft der Gruppe III-Nitride wird in Abschnitt 2.1.3 näher eingegangen.



| — | AlN | GaN | InN |
|-----------|-------|-------|-------|
| a_0 [Å] | 3.112 | 3.189 | 3.540 |
| c_0 [Å] | 4.982 | 5.185 | 5.705 |

Abbildung 2.1: Wurtzit-Struktur von Gruppe III-Nitriden (links). Gitterkonstanten von relaxiertem GaN, AlN und InN in Wurtzit-Struktur (rechts) [3].

Unter dem Einfluss sehr hoher Drücke oder durch Heteroepitaxie auf Fremdsubstraten mit kubischer Kristallstruktur (z.B. GaAs) kann neben der hexagonalen Wurtzit-Struktur auch die Ausbildung von Steinsalz- oder kubischer Zinkblende-Struktur bei GaN-Kristallen beobachtet werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde ausschließlich die Heteroepitaxie von GaN auf üblichen Saphirsubstraten mit [0001]-Orientierung untersucht, weshalb die Eigenschaften von GaN in Zinkblende- oder Steinsalz-Struktur sowie das Wachstum auf alternativen Fremdsubstraten nicht weiter betrachtet werden. Nähere Informationen zum heteroepitaktischen Wachstum von GaN auf Silizium bzw. GaAs finden sich z.B. in Arbeiten von Dadgar *et al.* [4] bzw. Hasegawa *et al.* [5].

Bandstruktur von GaN

In Abbildung 2.2 ist der Verlauf des Leitungs- und Valenzbandes von GaN im Impulsraum nach Berechnungen von Suzuki und Ueyonama dargestellt [6]. Bei den Gruppe III-Nitriden befindet sich sowohl das Leitungsbandminimum (LB) als auch das Valenzbandmaximum (VB) am Γ -Punkt. GaN, AlN und InN sind somit direkte Halbleiter, die eine effiziente Umwandlung von elektrischer in optische Energie ermöglichen. Entsprechend der Bandstruktur konnten bei Photolumineszenzmessungen an AlN [7] bzw. GaN [8, 9] exzitonische Übergänge (X_A , X_B , X_C) beobachtet werden, deren Übergangsenergien aus der Tabelle in Abbildung 2.2 entnommen werden können.

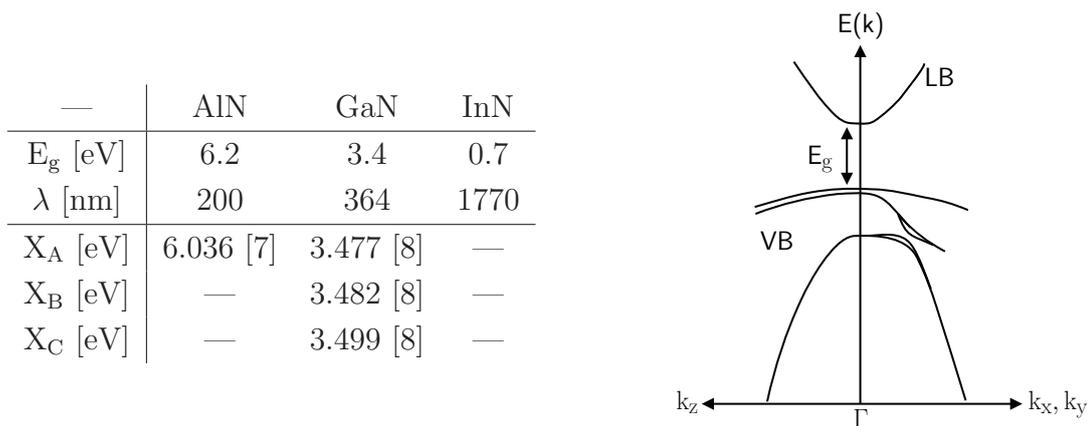


Abbildung 2.2: Bandlückenenergien (295K) und exzitonische Übergangsenergien aus Photolumineszenz (4K) der Gruppe III-Nitride (links). Bandstruktur von GaN berechnet nach der Pseudopotential-Methode in der Nähe des Γ -Punktes (rechts) [6].

Bandstruktur der ternären Verbindungshalbleiter $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ und $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

Die Quantenfilmstrukturen innerhalb der aktiven Zone der in dieser Arbeit betrachteten blau emittierenden Leuchtdioden werden durch den ternären Verbindungshalbleiter $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ realisiert. Durch eine Variation der Indium-Konzentration kann somit die Bandlückenenergie E_g und folglich auch die Emissionswellenlänge λ der LEDs eingestellt werden. Für die Emission von blauem Licht mit einer Wellenlänge von 470 nm ist, bei Vernachlässigung der Piezoelektrizität, eine Indium-Konzentration in Höhe von ca. 19 % einzustellen (vgl. Abbildung 2.3).

Die zur Verbesserung der lateralen Stromführung eingesetzten Strukturen, welche im Mittelpunkt dieser Arbeit stehen, basieren dagegen auf $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Durch eine Variation der Al-Konzentration werden hier vor allem die elektrischen Eigenschaften der Stromaufweitungsschichten definiert (siehe Kapitel 4). Al-Konzentrationen von ca. 20 % führen hier schließlich zu einer Erhöhung der Bandlückenenergie um 350 meV.

Die Bandlückenenergie für $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ bzw. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ergibt sich unter Berücksichtigung der charakteristischen Nichtlinearität b zu

$$E_{g,\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}} = x \cdot E_{g,\text{GaN}} + (1 - x) \cdot E_{g,\text{InN}} - x \cdot (1 - x) \cdot b_{\text{InGaN}} \quad (2.1)$$

und

$$E_{g,\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}} = x \cdot E_{g,\text{GaN}} + (1 - x) \cdot E_{g,\text{AlN}} - x \cdot (1 - x) \cdot b_{\text{AlGaN}} \quad (2.2)$$

Die aus der Literatur bekannten Werte für die *Bowling-Parameter* b_{InGaN} bzw. b_{AlGaN} sind $1 \pm 0.5 \text{ eV}$ [10] bzw. $1 \pm 0.3 \text{ eV}$ [11]. Der Zusammenhang zwischen Bandlückenenergie und Gitterkonstanten der Gruppe III-Nitride ist in Abbildung 2.3 graphisch dargestellt. Die Emissionswellenlänge λ der spezifischen $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ -Quantenfilme oder entsprechend anderer Materialkompositionen berechnet sich schließlich zu:

$$\lambda = \frac{hc_0}{E_g} \quad (2.3)$$

Dabei ist h das *Plancksche-Wirkungsquantum* und c_0 die Vakuumlichtgeschwindigkeit. Die sich aus Gleichung 2.3 ergebenden Wellenlängen für (Al,Ga,In)-N können der Tabelle in Abbildung 2.2 entnommen werden.

Durch das heteroepitaktische Wachstum zweier Materialien mit unterschiedlichen Gitterkonstanten (z.B. InGaN auf GaN) und/oder thermischen Expansionskoeffizienten α (z.B. GaN und Saphir) kommt es grundsätzlich zu kristallinternen Verspannungen. Inwiefern diese Verspannungen die Eigenschaften der hier betrachteten Schichten beeinflussen, wird im folgenden Abschnitt veranschaulicht.

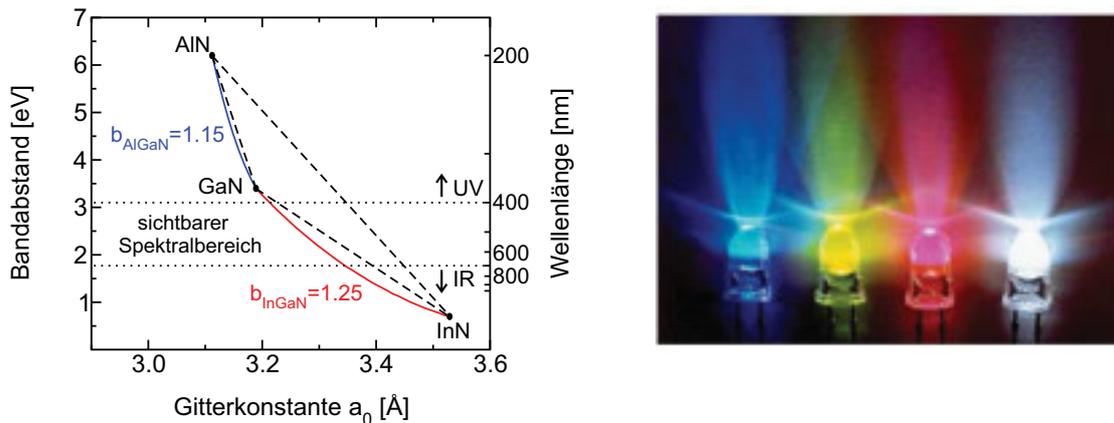


Abbildung 2.3: Zusammenhang zwischen Bandlückenenergie, Emissionswellenlänge und Gitterkonstante der Gruppe III-Nitride bei Raumtemperatur. Durch eine Variation der Al- bzw. In-Konzentration können theoretisch LEDs hergestellt werden die den Spektralbereich von Ultraviolett (UV) bis Infrarot (IR), abdecken. Beispielsweise sind hier blau-, grün-, rot- (auf Basis von AlInGaP) und weiß-emittierende LEDs dargestellt [12].

2.1.2 Verspannung

Bei den in dieser Arbeit untersuchten Halbleiterstrukturen spielen die kristallinen Verspannungen eine nicht zu vernachlässigende Rolle. So ist beispielsweise die große Gitterfehlpassung zwischen GaN und Saphir verantwortlich für die hohen Defektdichten innerhalb des GaN (siehe Abschnitt 2.2). Im Gegensatz zu der unerwünschten Verspannung an der GaN/Saphir-Grenzfläche ist die Verspannung an einer AlGaIn/GaN-Grenzfläche notwendig für die Realisierung der in dieser Arbeit entwickelten Stromaufweitungsschichten (siehe Abschnitt 2.1.3).

Wie die Verspannung an der GaN/Saphir-Grenzfläche reduziert werden kann, wird in Abschnitt 2.2 genauer diskutiert. Im Folgenden wird veranschaulicht, welchen Einfluss die unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von GaN und Saphir auf die Verspannung der GaN-Schicht haben. Im Anschluss daran wird aufgezeigt wie die Verspannung an einer AlGaIn/GaN-Grenzfläche berechnet werden kann.

GaN wird in der Regel bei Temperaturen im Bereich von $1000\text{ }^{\circ}\text{C}$ - $1100\text{ }^{\circ}\text{C}$ synthetisiert. Problem hierbei ist, dass die zur Heteroepitaxie verwendeten Saphirwafer einen deutlich größeren thermischen Ausdehnungskoeffizienten als GaN haben (vgl. Tabelle 2.1). Werden beide Schichten nun im Anschluss an das Wachstum abgekühlt, so kommt es zwangsweise zu einer thermisch induzierten Verspannung ϵ_{therm} . Da sich das Saphirsubstrat beim Abkühlen stärker zusammenzieht als das GaN, ist eine biaxial-

2 Grundlagen zu Gruppe III-Nitriden

| Material | Gitterkonstanten | | Thermische Ausdehnung | |
|-------------------------|------------------|-----------|-----------------------------------|-----------------------------------|
| | a_0 [Å] | c_0 [Å] | α_a [$10^{-6}/\text{K}$] | α_c [$10^{-6}/\text{K}$] |
| GaN | 3.189 | 5.185 | 5.6 | 3.2 |
| Al_2O_3 | 4.758 | 12.99 | 7.5 | 8.5 |

Tabelle 2.1: Gitterkonstanten a_0 bzw. c_0 und thermische Ausdehnungskoeffizienten α von relaxiertem GaN und Saphir (Al_2O_3).

kompressive Verspannung der GaN-Schicht zu beobachten (vgl. Abbildung 2.4). Die Verspannung äußert sich in der Regel in einer makroskopischen Krümmung der Probe. Sind die auftretenden Kräfte jedoch zu groß, so kommt es durch die Ausbildung von Rissen zu einem Abbau der thermisch induzierten Verspannung. ϵ_{therm} kann folgendermaßen beschrieben werden:

$$\epsilon_{\text{therm}} = \Delta\alpha \cdot \Delta T = (\alpha_{\text{GaN}} - \alpha_{\text{Al}_2\text{O}_3}) \cdot (T_{\text{P}} - T_{\text{RT}}) \quad . \quad (2.4)$$

Die Temperaturdifferenz ΔT ergibt sich dabei aus der Differenz von Raum- (T_{RT}) und Prozesstemperatur (T_{P}). Das tatsächliche Maß der Verspannung einer epitaxiierten Schicht kann z.B. anhand einer Charakterisierung mittels Photolumineszenz bestimmt werden. Je nach Verspannung ist eine Verschiebung ΔE der exzitonen Übergangsenergien zu beobachten. Zunehmende kompressive Verspannung führt dabei zu einer Blauverschiebung der charakteristischen Übergangsenergien, tensile Verspannung entsprechend zu einer Rotverschiebung. In dieser Arbeit wird die Übergangsenergie des Donator-gebundenen Exzitons (D^0X) für die Berechnung der Verspannung herangezogen. Dabei wird die D^0X -Übergangsenergie von unverspanntem GaN zu 3.471 eV (10K) angenommen [8].

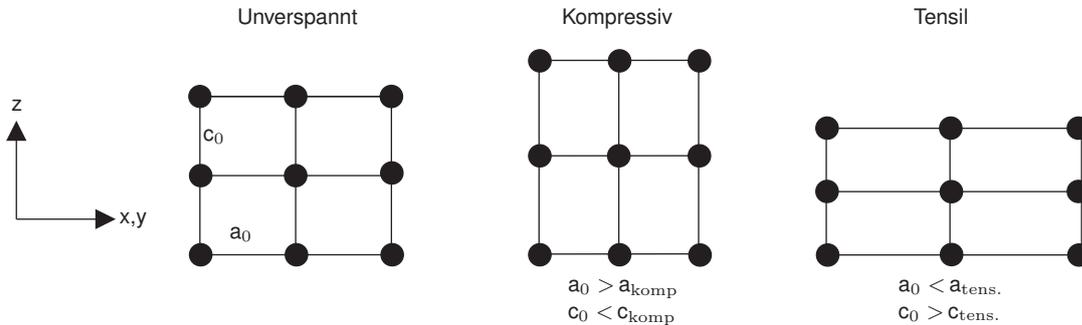


Abbildung 2.4: Schematische Darstellung der a- und c-Gitterkonstanten eines Kristallgitters unter kompressiver (Mitte) bzw. tensiler Verspannung (rechts).

2.1 Das Materialsystem $(Al_xGa_{1-x})In_{1-y}N$

Aus ΔE kann folglich die Kompressivität ϵ_z berechnet werden [13]:

$$\Delta E = (a_2 + b_2)(\epsilon_x + \epsilon_y) + (a_1 + b_1)\epsilon_z \quad . \quad (2.5)$$

Für die Deformationspotentiale a_i bzw. b_i werden die entsprechenden Literaturwerte von Wagner und Bechstedt angesetzt [14]:

$$\begin{aligned} a_1 &= -5.55 \text{ eV}, \quad a_2 = -9.38 \text{ eV} \\ b_1 &= -6.61 \text{ eV}, \quad b_2 = +3.55 \text{ eV} \quad . \end{aligned}$$

Zur Vereinfachung der Rechnung wird eine homogene Verspannung in der Ebene senkrecht zur Wachstumsrichtung angenommen, wodurch $\epsilon_x = \epsilon_y$ gesetzt werden kann. Die Poissonbeziehung liefert folglich den Zusammenhang zwischen den Verspannungen ϵ_z und ϵ_x mit den Elastizitätskoeffizienten C_{ij} :

$$\epsilon_x = -\frac{C_{33}}{2C_{13}}\epsilon_z = -\frac{1}{\nu}\epsilon_z \quad . \quad (2.6)$$

Hierbei ist ν die so genannte Poissonzahl, die sich nach Tabelle 2.2 zu 0.5 (GaN) berechnen lässt. Für ϵ_z ergibt sich folglich nach Gleichung 2.5 der vereinfachte Zusammenhang:

$$\epsilon_z \approx 90 \cdot 10^{-3} \cdot \Delta E \quad . \quad (2.7)$$

Der konstante Vorfaktor besitzt dabei die Einheit 1/eV, wohingegen ΔE in eV einzusetzen ist. Typische Werte für die Kompressivität von GaN auf Saphir werden in Kapitel 3 aufgeführt. Hier wird außerdem gezeigt, dass die Verspannung der GaN Schicht grundsätzlich durch den Epitaxieprozess stark beeinflusst werden kann.

Auch bei der Heteroepitaxie von InGaN bzw. AlGaN auf GaN (vgl. Abbildung 2.3) treten große Verspannungen auf. InGaN ist unter der Annahme des pseudomorphen Wachstums ($a_{v,\text{InGaN}} = a_{v,\text{GaN}}$) auf GaN stets biaxial-kompressiv verspannt ($a_{0,\text{InGaN}} > a_{0,\text{GaN}}$), wohingegen AlGaN stets biaxial-tensil verspannt aufwächst ($a_{0,\text{AlGaN}} < a_{0,\text{GaN}}$). Die resultierende Verspannung innerhalb der Wachstumsebene lässt sich wie folgt berechnen [15]:

$$\epsilon_x = \frac{a_{0,\text{GaN}} - a_{0,\text{Ternär}}}{a_{0,\text{Ternär}}} \quad . \quad (2.8)$$

Die Verspannung hat eine Störung der Kristallsymmetrie zur Folge, die wiederum in Verbindung mit der Piezoelektrizität eine lokale Bandverbiegung bewirkt. Diese Bandverbiegung beeinflusst die Eigenschaften von elektronischen und optoelektronischen stark. Der *Quantum Confined Stark Effect* (QCSE) bei InGaN-Quantenfilmen [16] oder die Entstehung eines zweidimensionalen Ladungsträrgases an einer AlGaN/GaN-Grenzfläche sind nur zwei Phänomene, die auf die Piezoelektrizität der nitridischen