

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

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

2.1 Kristallstruktur

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

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

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

2 Grundlagen zu Gruppe III-Nitriden

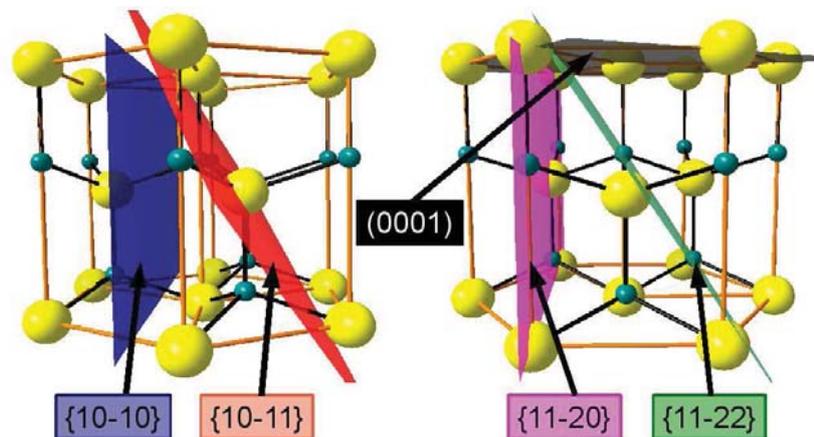


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung ausgewählter nicht- und semipolarer Ebenen innerhalb der Wurtzit-Struktur. Zu beachten gilt, dass die zwei Hexagone zur besseren Darstellung um 30° zueinander verdreht abgebildet sind.

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

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

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

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

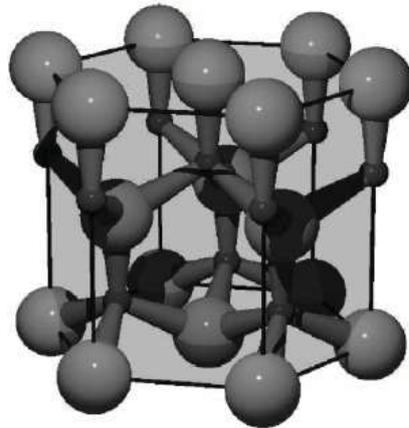


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung der Einheitszelle der hexagonalen Wurtzit-Struktur.

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

2.2 Bandstruktur

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

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

2 Grundlagen zu Gruppe III-Nitriden

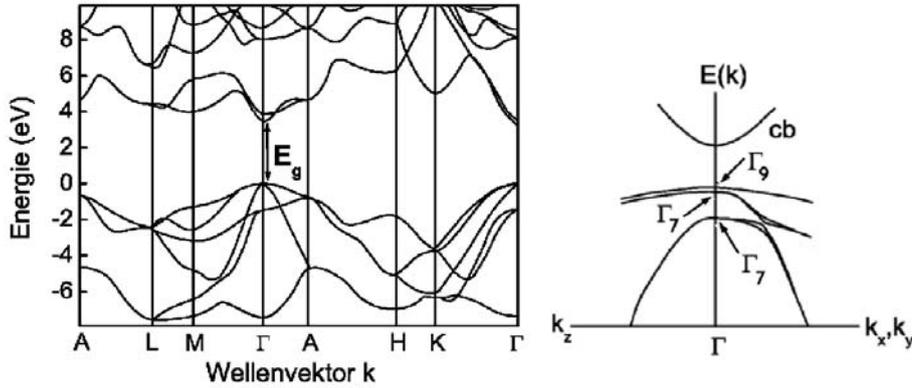


Abbildung 2.3: Bandstruktur von GaN berechnet nach der Pseudopotential-Methode, rechts in der Nähe des Γ -Punktes [28]. Man erkennt die Aufspaltung des Valenzbandes aufgrund der Unsymmetrie der Wurtzit-Struktur [29].

da sie über

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

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

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