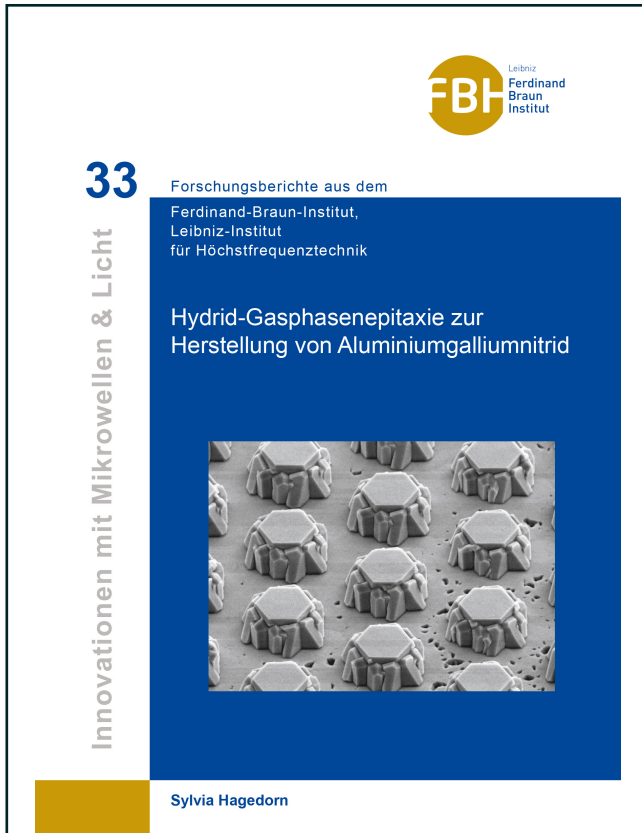




Sylvia Hagedorn (Autor)
**Hybrid-Gasphasenepitaxie zur Herstellung von
Aluminiumgalliumnitrid**



<https://cuvillier.de/de/shop/publications/6966>

Copyright:
Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen,
Germany
Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: info@cuvillier.de, Website: <https://cuvillier.de>



1 Einleitung und Aufgabenstellung

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

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

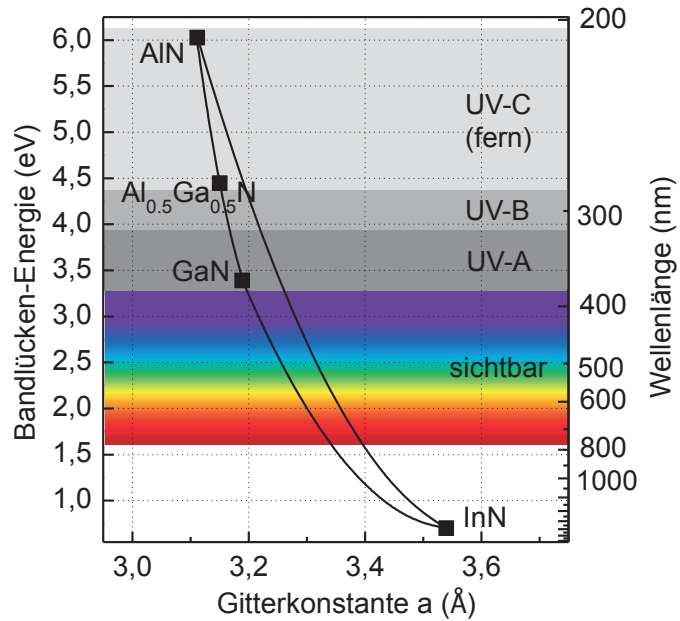


Abbildung 1.1: Energie der elektronischen Bandlücke der Halbleiter AlN, GaN, InN und deren Legierungen in Abhängigkeit von der a -Gitterkonstante.²⁻⁴ UV-A-, UV-B-, UV-C und sichtbarer Spektralbereich farblich gekennzeichnet.

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

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



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

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

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

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

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

2.1 Kristallstruktur

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

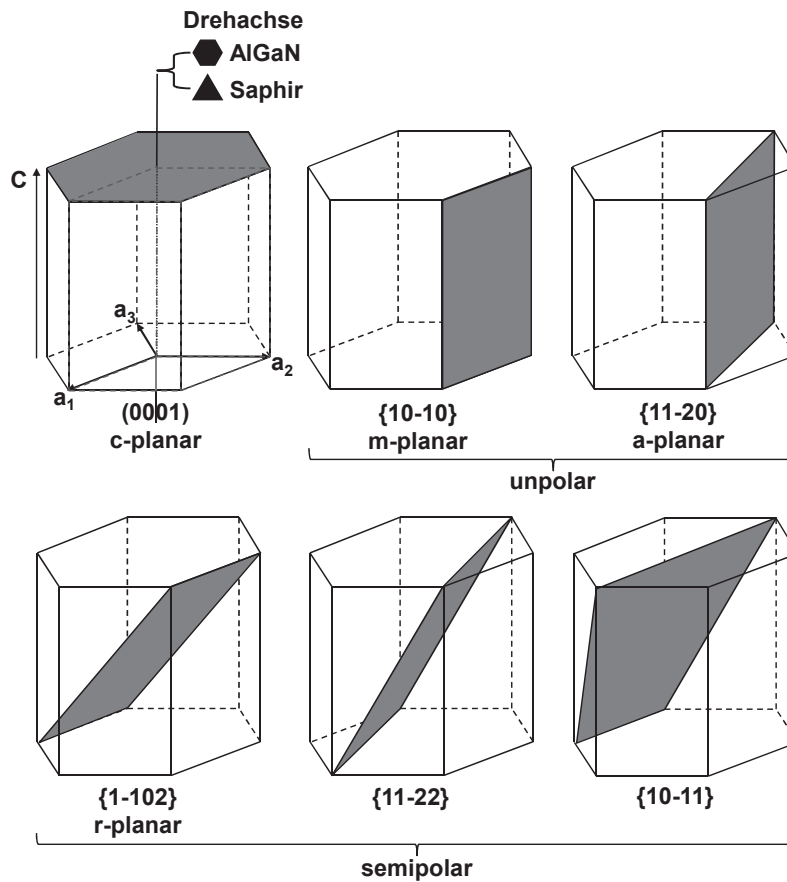


Abbildung 2.1: Bezeichnung von Kristallflächen und ihre Ausrichtung in der hexagonalen Gitterzelle der hexagonalen Kristallfamilie. Die durch \vec{a}_1 , \vec{a}_2 und \vec{c} aufgespannte Einheitszelle des Kristallgitters ist rot gekennzeichnet. Die hexagonale Symmetrie des AlGaN und die trigonale Symmetrie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

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

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

2 Eigenschaften und Charakterisierung von $Al_xGa_{1-x}N$

Aufgrund der Symmetrie des Gitters erfüllt dieser die Bedingung:

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

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

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

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

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

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

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

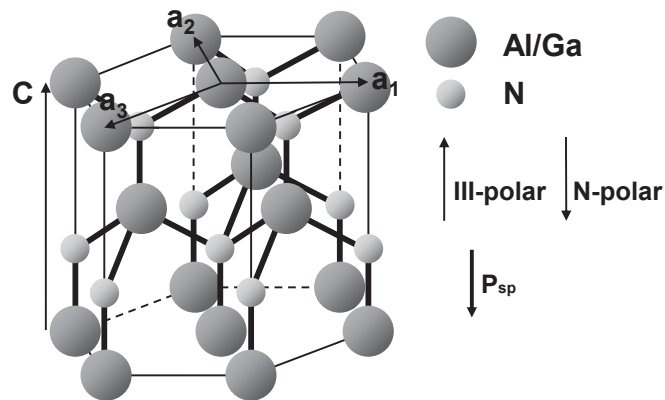


Abbildung 2.2: Schrägansicht der Struktur der hexagonalen Gitterzelle von AlGaN. Die Lage und Richtung der vier Basisvektoren \vec{a}_1 , \vec{a}_2 , \vec{a}_3 und \vec{c} , sowie die positive bzw. negative Richtung von \vec{c} , die der III- bzw. N-Polarität entsprechen sind angegeben. Die spontane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

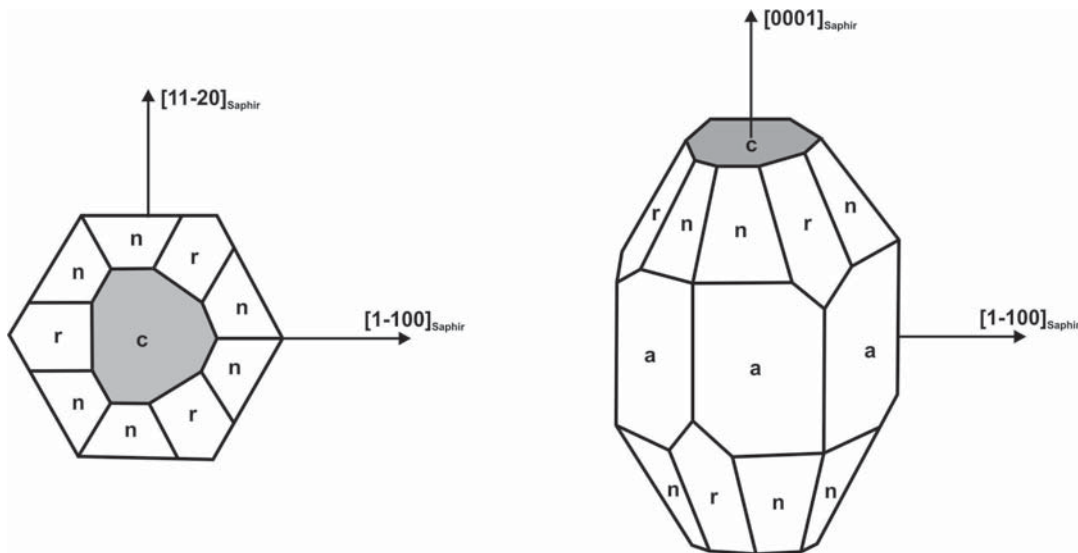


Abbildung 2.3: Lage der Facetten im Saphirkristall.^{16,17}



2.2 Epitaxiegesetze für das Wachstum auf Saphir

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

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

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

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

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

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

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



2.2 Epitaxiegesetze für das Wachstum auf Saphir

| Saphir | (Al,Ga)N |
|---------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (0001) c-planar | (0001) c-planar $[11-20]_{\text{Saphir}} \parallel [1-100]_{(\text{Al,Ga})\text{N}}, [1-100]_{\text{Saphir}} \parallel [-1-120]_{(\text{Al,Ga})\text{N}}$ ¹⁹ |
| (10-10) m-planar | (11-22) $[0001]_{\text{Saphir}} \parallel [-1-123]_{(\text{Al,Ga})\text{N}}, [1-210]_{\text{Saphir}} \parallel [1-100]_{(\text{Al,Ga})\text{N}}$ ^{20,21} (1-103) $[0001]_{\text{Saphir}} \parallel [1-210]_{(\text{Al,Ga})\text{N}}, [1-210]_{\text{Saphir}} \parallel [30-3-2]_{(\text{Al,Ga})\text{N}}$ ^{20,22} (1-100) m-planar $[0001]_{\text{Saphir}} \perp [0001]_{(\text{Al,Ga})\text{N}}$ ^{22,23} |
| (11-20) a-planar | (0001) c-planar $[0001]_{\text{Saphir}} \parallel [-1100]_{(\text{Al,Ga})\text{N}}, [1-100]_{\text{Saphir}} \parallel [-1-120]_{(\text{Al,Ga})\text{N}}$ ^{19,24-26} oder $[0001]_{\text{Saphir}} \parallel [11-20]_{(\text{Al,Ga})\text{N}}, [1-100]_{\text{Saphir}} \parallel [1-100]_{(\text{Al,Ga})\text{N}}$ ²⁴⁻²⁶ |
| (1-102) r-planar | (1-210) a-planar $[-1101]_{\text{Saphir}} \parallel [0001]_{(\text{Al,Ga})\text{N}}, [11-20]_{\text{Saphir}} \parallel [10-10]_{(\text{Al,Ga})\text{N}}$ ^{27,28} |
| (11-23) n-planar | (0001) c-planar $[1-100]_{\text{Saphir}} \wedge [1-100]_{\text{AlN}}$ ^{15^o25,29} |

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

ausgebildet werden, wohingegen beim MOVPE-Wachstum durch Tempern bei 1100°C unter H_2 -Atmosphäre eine Desoxidation der Saphiroberfläche stattfindet und so Al-N-Bindungen zum GaN ausgebildet werden. Einen Einfluss der Nitridierungstemperatur auf die Ausrichtung von c-planar orientiertem AlN auf a-planar orientiertem Saphir publizierten Goriki et al.²⁵ Mit steigender Nitridierungstemperatur wurde ein geringerer Sauerstoffgehalt in der Nähe der Saphir/AlN-Grenzfläche festgestellt und mit der Orientierung des a-planaren AlN in Zusammenhang gebracht. Paskova et al. und Goriki et al. kommen übereinstimmend zu dem Schluss, dass sauerstoffterminierte Substratoberflächen zur Abscheidung mit $[11-20]_{\text{AlN/GaN}}$ parallel $[0001]_{\text{Saphir}}$ führen, während sauerstoffarme Substratoberflächen Wachstum mit $[1-100]_{\text{AlN/GaN}}$ parallel $[0001]_{\text{Saphir}}$ zur Folge haben.

Für das Wachstum auf n-planar orientierten Saphirsubstraten fanden Takami et al.²⁹ und Goriki et al.²⁵ eine c-planare Ausrichtung des aufgewachsenen GaN und AlN. Goriki et al. zeigten auch, dass die n-planar orientierten Netzebenen des Saphirkristalls eine Verkippung von $1,2^\circ$ gegenüber den c-planar orientierten Kristallebenen der aufgewachsenen AlN-Schicht aufweisen. Die Lage der Elementarmasche der n-planaren Oberfläche führt zur Ausbildung eines Winkels von 15° zwischen der $[1-100]_{\text{Saphir}}$ -Richtung und der $[1-100]_{\text{AlN}}$ -Richtung des aufgewachsenen AlN (siehe 2.2).

2.3 Versetzungen im c-planar orientierten AlGaN

Im Zuge dieser Arbeit erfolgte eine Bestimmung der Materialqualität von HVPE gewachsenem AlGaN. Neben Punktdefekten, wie Fehlstellen und Fremdatomen im AlGaN-Kristallgitter, treten insbesondere zum Beginn des heteroepitaktischen Wachstums Versetzungen (Liniendefekte) und Stapelfehler (Flächendefekte) des Gitters auf. Es wird angenommen, dass diese entstehen, um die Fehlanpassung des Gitters zum Substrat und um die relative Verdrehung und Verkippung der Netzebenen koaleszierender Nukleationskeime gegeneinander auszugleichen. Neben dieser gängigen Modellvorstellung existieren auch andere Erklärungsansätze, insbesondere zur Entstehung von Versetzungen. Einen Überblick gibt beispielsweise der Review-Artikel von Bennett.³¹ Im Zuge der vorliegenden Doktorarbeit wurde hauptsächlich c-planar gewachsenes AlGaN untersucht, das typischer Weise keine in das gewachsene Material propagierende Stapelfehler aufweist. Dahingegen können sich Versetzungen in das c-planar gewachsene Material ausbreiten und so die Materialqualität verringern. Versetzungen wirken beispielsweise in aktiven Schichten von LEDs als Zentren nichtstrahlender Rekombination und verringern so die Effizienz der Bauelemente.⁵ Eine Untersuchung der Versetzungsdichte ist daher zur Optimierung der Materialqualität von AlGaN in Hinblick auf eine mögliche Verwendung als Substrat notwendig.

Abb. 2.4 zeigt schematisch die Anordnung der Netzebenen eines Kristalls um eine Schraubenversetzung (siehe Abb. 2.4 a), die zum Ausgleich zweier um den Winkel α verkippter Kristallbereiche führt. Fehlanpassungs-Versetzungen (siehe Abb. 2.4 b) entstehen zum Angleichen verschiedener a-Gitterkonstanten beim heteroepitaktischen Wachstum. Durch Stufenversetzung (siehe Abb. 2.4 c) kann ein Ausgleich gegeneinander um einen Winkel β verdrehter Netzebenen erfolgen. Verschiedene Versetzungstypen werden durch den Burgers-Vektor \vec{b} beschrieben, der Richtung und Länge, um die der lokale Versatz des Kristallgitters erfolgt, angibt. Die durch