

GaN-basierte Laserdioden - Epitaxie und Simulation

Vom Fachbereich für Physik und Elektrotechnik
der Universität Bremen

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktor der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)

von
Dipl. Phys. Stephan Figge
aus Bremen

1. Gutachter: Prof. Dr. rer. nat. D. Hommel
2. Gutachter: PD Dr. rer. nat. P. Michler
Eingereicht am: 05.06.2003
Tag des Promotionskolloquiums: 15.07.2003

Einleitung

Seit der Entwicklung des ersten Transistors im Jahre 1947 durch Bardeen, Shockley, Brattain (Nobelpreis 1955) nahm die Halbleiterforschung einen rasanten Verlauf und ermöglichte ein Vielzahl der heutigen Technologien, die im Alltag genutzt werden. Die zentrale Anwendung findet der Transistor in integrierten Schaltkreisen heutzutage am Computer. Gegenüber den leistungsfähigsten Rechnern in der Prä-Transistorzeit, die ca. 5000 Operationen in der Sekunde ausführen konnten (Eniac 1946) [1], sind heutige Computer selbst im Desktop-Bereich in der Lage eine Million mal mehr Operationen pro Sekunde durchzuführen. Die damaligen Superrechner kamen bei der Datenspeicherung mit Lochkarten aus, die eine Speicherdichte von ca. 400 Bytes je Meter aufwiesen und mit einer Geschwindigkeit von ca. 300 Spalten je Sekunde gelesen werden konnten. Die für diese Dissertation gespeicherten Daten würden auf einem solchen System einen Lochstreifen benötigen, der die Erde knapp einmal umspannt, das resultierende Dokument im Portable Document Format (PDF) brauchte 4 Stunden, um in den Computer eingeladen zu werden.

Diese rasante Steigerung der Computerleistung macht somit immanent die Weiterentwicklung von Speichersystemen notwendig. Neben den heute gebräuchlichen Festplatten, auf denen mittels magnetischer Speicherung und dem Auslesen der Daten auf Grund des Giant Magneto-Resistivity Effektes (GMR) Datendichten im Bereich von 5 Gb pro Quadratcentimeter möglich sind, werden auch andere Datenträger benötigt, die Austausch, Backup, Archivierung und den kommerziellen Erwerb (Filme, Musik, Computerprogramme) von Daten ermöglichen. Hierzu sind Datenträger notwendig, die kostengünstig herstellbar und unempfindlich gegen äußere Einflüsse sind. In dem letzten Jahrzehnt wurden diese Datenträger, die ursprünglich ebenfalls auf magnetischer Speicherung beruhten (Kassetten, Disketten und Wechselplattenlaufwerke), sukzessive durch Magneto-optische Speichermedien (MO's) und letztendlich durch optische Speichermedien ersetzt. Die Speicherdichte stieg hierbei in den letzten Jahren ausgehend von der Compact Disc (CD) von 0,06 Gb je Quadratcentimeter [2] auf 0,4 Gb je Quadratcentimeter bei der Digital Versatile Disc (DVD) an [3]. Um mit der Geschwindigkeit der Festplattenweiterentwicklung mitzuhalten, die

nach dem moorschen Gesetz mit einer Verdopplung der Festplattenkapazität in 18 Monaten vorausgesagt wird, ist es notwendig, Speichersysteme zu entwickeln, die ein Vielfaches der heutigen üblichen DVDs an Daten fassen. Der Erbe der optischen Speichertechnologie der DVD wird die so genannte Blu-Ray Disc sein, die eine Speicherdichte von 2,8 Gb je Quadratzentimeter und eine Speicherkapazität von 27 GB im Format einer CD/DVD verspricht [4]. Hierzu müssen bei der Blu-Ray Disc Strukturen mit einer Größe von 138 nm aufgelöst werden können [4].

Zum Auslesen und Schreiben der Daten auf diesen Speichermedien, die durch die Modulation der Reflektivität gespeichert sind, dienen Halbleiterlaser (englisch: Laser Diode (LD)), wie sie erstmals 1962 realisiert wurden. Hierfür ist die Fokussierung des Laserlichtes auf Strukturgrößen der Datenpunkte notwendig. Die Fokussierung von Licht ist jedoch durch die heisenbergsche Unschärferelation durch die Wellenlänge des Lichtes limitiert. Die erreichbare Strukturgröße hängt hierbei invers mit der Wellenlänge zusammen; durch die flächenförmige Datenspeicherung auf den Speichermedien geht somit eine Vervierfachung der Datenmenge mit einer Halbierung der Wellenlänge des verwendeten Lasers einher. Neben der Optimierung des Aufnahmeformates und der Verbesserung der mechanischen Toleranzen in den Geräten ist daher auch eine Reduzierung der Wellenlänge vonnöten. Die in den CDs benutzte Wellenlänge von 780 nm (infra-rot) musste für die DVD auf 650 nm (rot) reduziert werden und für die Blu-Ray-Disc kommen Laser mit einer Wellenlänge von 405 nm (violett) zum Einsatz.

Da die Wellenlänge des Halbleiterlasers mit der Bandlücke des verwendeten Materials verknüpft ist und diese innerhalb eines Materialsystems nur in begrenztem Umfang verändert werden kann, musste die Entwicklung der Halbleiterlaser für die Blu-Ray-Disc auf einem neuen Materialsystem von vorne begonnen werden. Während die bei CDs und DVDs verwendeten Laser auf dem Materialsystem GaAlAs beruhen, wurde in der Mitte der 90er Jahre das zukünftige Materialsystem für Laserdioden, die im grün-blauen Spektralbereich emittieren, gesucht. Anfangs standen auf der einen Seite ZnSe und zum Anderen GaN auf der Liste der vielversprechenden Kandidaten.

Nachdem Sony bereits 1993 eine blaue Laserdiode mit einer Lebensdauer von 400 Stunden auf Basis von ZnSe realisiert hatte, zeigte sich jedoch, dass die Instabilität dieses Materials nur schwer überwindbare Grenzen setzte, um zuverlässige, kommerziell taugliche Produkte zu erstellen. Im Jahre 1992 war dem Forscherteam um S. Nakamura in den Laboren von Nichia Chemical Industries die Herstellung der ersten auf GaN basierenden Leuchtdiode (englisch: Light Emitting Diode (LED)) gelungen, die als Vorstufe zur Realisierung eines Halbleiterlasers verstanden werden kann. Dieses Initial löste eine breite Forschungsaktivität auf dem Materialsystem GaN aus, das zu dem damaligen Zeitpunkt noch weitgehend unverstanden war. Im Laufe der Zeit gewann dieses Materialsystem zunehmend an Bedeutung, so dass

1996 in einem Bericht des Asian Technology Information Programs über die "Blue Laser and LEDs"-Konferenz in Chiba konstatiert werden musste [5]:

»Companies and researchers thinking about entering the field of blue laser and blue light emitting diode research, are of course faced with the decision whether to chose the novel Gallium-Nitride material family or to work on the more conventionally studied II-VI material family - such as ZnSe. However, each conference such as the present one, points more and more strongly in the direction that Gallium-Nitrides will eventually win this race. In principle, the race seems to be already settled: there are commercial light emitting blue diodes based on Gallium-Nitride materials sold today, while there are no commercial II-VI light emitting diodes. Many people have the opinion now, that the II-VI researchers are facing a loosing battle.«

Heute steht nun fest, dass GaN als Basismaterial für die Laserdioden in der Blu-Ray Disc verwendet wird. Seit 1996 gelang es verschiedenen Firmen blau-violette Laser herzustellen, die im Dauerstrichbetrieb funktionieren. Neben Nichia Chemical Industries, die als Erste im Jahres 1996 einen Laser im Dauerstrichbetrieb bei Raumtemperatur präsentieren konnten [6], der auf Saphir-Substraten hergestellt wurde, konnten auch Cree (1997, SiC) [7], Sony (1998, Saphir) [8], Fujitsu (1998, SiC) [9] und Osram (2001, auf SiC) Laser im Dauerstrichbetrieb demonstrieren.

Der universitären Forschung ist es bis heute verwehrt geblieben einen Laser zu realisieren, der im Dauerstrichbetrieb funktioniert. Bis heute konnten lediglich die Meijo Universität in Japan und die University of California in Santa Barbara in den USA Laserdioden im gepulsten Betrieb zeigen.

Darüber hinaus konnten wir an der Universität Bremen als erste nicht kommerziell unterstützte Forschungsgruppe in Europa in Kooperation mit der École Polytechnique Fédéral de Lausanne einen blau-violett emittierenden Laser herstellen, der im Rahmen des Schwerpunktprogramms "Gruppe III-Nitride und ihre Heterostrukturen: Wachstum, materialwissenschaftliche Grundlage und Anwendung" der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG), in das diese Dissertation einzugliedern ist, entstand.

Die Forschung an GaN-basierten Halbleitern begann im Jahre 1996 in der Arbeitsgruppe Halbleiterepitaxie des Instituts für Festkörperphysik an der Universität Bremen und befasste sich anfänglich mit dem Wachstum des Materials mit Hilfe von Molekularstrahlepitaxie (englisch: Molecular Beam Epitaxy (MBE)) schwerpunktmäßig mit der Untersuchung des Einflusses unterschiedlicher Plasmaquellen [10], verschiedener Nukleationsschemen [11, 12, 13], neuartiger Substrate [14] und der p-Dotierung mit alternativen Dopanden [15]. Diese Forschung auf der Wachstumsseite (Epitaxie) wurde in der Arbeitsgruppe durch eine weitreichende Forschungsaktivität im Bereich der Charakterisierung mittels hochaufgelöster Röntgenbeugung (englisch: High-Resolved X-Ray Diffraction (HRXRD)) unterstützt [16, 17].

Mit Beginn des Schwerpunktprogrammes der DFG rückte die Realisierung von

GaN-basierten Halbleiterlasern in den Mittelpunkt des Interesses. Hierzu wurde im Jahre 1999 ein Anlage zur metallorganischen Dampfphasenepitaxie (englisch: Metal-organic Vapor-Phase Epitaxy (MOVPE)) installiert, welche die Herstellung von hochqualitativen GaN-Schichten ermöglichte. Auf dem Weg zur Realisierung der Laserdiode war es zunächst notwendig, das Wachstum mittels MOVPE zu verstehen und die Defektdichte in dem hergestellten Material zu reduzieren [18].

Gliederung der Arbeit

Zunächst werden im Kapitel 1 die Grundlagen dargelegt, die zum Verständnis der Arbeit notwendig sind. Hierzu gehört die Vorstellung des Materialsystems, die experimentellen Methoden und der Stand der Forschung im Bereich GaN-basierter Laserdioden.

Das darauf folgende Kapitel 2 widmet sich der Realisierung, Strukturierung, sowie den Kenndaten der in Bremen hergestellten Laser und gibt somit einen Einblick in die Problematik der Laserfabrikation und stellt die Probleme heraus, die im Weiteren in dieser Dissertation abgehandelt werden.

Die Optimierung der p-Dotierung war eines der wesentlichen Probleme, die es zu lösen gab. Dieser Themenschwerpunkt wird in Kapitel 3 dargestellt. Die zentralen Punkte innerhalb dieses Themas sind die Dotierung mittels MBE (Abschnitt 3.2) und MOVPE (Abschnitt 3.3) und die Selbstkompensation des Materials auf Grund der Segregation von Magnesium und der Ausbildung von pyramidalen Defekten (Abschnitt 3.4).

Im Allgemeinen ist die Verteilung und Abführung der entstehenden Wärme in elektronischen Bauelementen ein immer wiederkehrendes Problem, das die Lebenszeit und Leistungsfähigkeit der Bauelemente deutlich limitiert und reduziert. In Kapitel 4 wird die Entstehung von Wärme und die damit verbundene Reduktion der Ausgangsleistung der Laser sowohl experimentell behandelt, als auch mit Hilfe von Finite-Elemente-Simulationen nachvollzogen.

Diese Simulationen werden in Kapitel 5 auf ein hinsichtlich der Stromverteilung und Wärmeentwicklung selbstkonsistentes Modell erweitert, um die Auswirkung der Stromdichteverminderung im aktiven Gebiet auf Grund der Aufspreizung des Strompfades im p-Gebiet zu analysieren.

Inhaltsverzeichnis

1. Grundlagen	11
1.1. Das Materialsystem	11
1.1.1. Gitterstruktur	11
1.1.2. Ternäre Nitride	13
1.1.3. Bandstruktur	14
1.2. Stand der Forschung	16
1.2.1. Erste Laser	18
1.2.2. Reduktion der Defektdichte	19
1.2.3. Index-geführte Strukturen	22
1.2.4. p-Dotierung	23
1.2.5. Optimierung der Kontakte	23
1.2.6. Präparation der Fassetten	23
1.2.7. Heutige Laser	24
1.3. Experimentelle Methoden	25
1.3.1. Molekularstrahlepitaxie	25
1.3.2. Metallorganische Dampfphasenepitaxie	28
1.3.3. Hall-Messungen in van der Pauw-Geometrie	33
1.3.4. Atomare Kraftmikroskopie	35
1.3.5. Transmissionselektronenmikroskopie	36
2. Wachstum, Prozessierung und Betriebsparameter der GaN-Lasern	39
2.1. Wachstum	39
2.1.1. Nukleation	39
2.1.2. Reduktion der Defektdichte	43
2.1.3. Wachstumsparameter	48
2.2. Prozessierung	50
2.2.1. Resonatorstrukturen	51
2.2.2. Prozessablauf	53

2.2.3. Präparation der Fassetten	55
2.3. Betriebsparameter	57
3. p-Dotierung	61
3.1. Grundlagen	62
3.1.1. Die Kandidaten	62
3.1.2. Einfluss von Oberflächen	65
3.1.3. Wasserstoff-Magnesium Komplex	67
3.1.4. Temperaturabhängige Ladungsträgerkonzentration	69
3.2. Dotierung in der MBE	71
3.2.1. Probenaufbau und Präparation	72
3.2.2. Magnesiumfluss	73
3.2.3. Substrattemperatur	75
3.2.4. Wasserstoff Kodotierung	80
3.2.5. Zusammenfassung	90
3.3. p-Dotierung mit Hilfe der MOVPE	90
3.3.1. Abhängigkeit vom Magnesiumfluss	91
3.3.2. Einfluss des Gruppe-V/Gruppe-III Verhältnisses	94
3.4. Pyramidale Defekte	96
3.4.1. Mikrostruktur der Defekte	96
3.4.2. Segregationsmodell	100
3.4.3. Polaritätsabhängigkeit	107
3.4.4. Zusammenfassung	109
4. Wärmedissipation	111
4.1. Die Kenngrößen	112
4.1.1. Wärmekapazität	112
4.1.2. Wärmeleitfähigkeit	115
4.1.3. Die Materialien	116
4.2. Simulation	121
4.2.1. Algorithmen	121
4.2.2. Details	123
4.3. Ergebnisse	124
4.3.1. Spektrale Verschiebung / Wärmewiderstand LED	124
4.3.2. Temperaturabhängige Messungen - Aktivierungsenergie	127
4.3.3. Erwärmung innerhalb eines Pulses	130
4.3.4. Tastverhältnis	131
4.3.5. Einfluss des Substrates auf den Wärmewiderstand	133
4.3.6. Einfluss des Metallkontaktes	139
4.3.7. Streifenbreite	140
4.4. Zusammenfassung	140

5. Strompfadaufweitung	143
5.1. Grundlagen	144
5.1.1. Anisotrope Leitfähigkeit	144
5.1.2. Grenzflächeneffekte / Supergitter	145
5.1.3. Wärme-induzierte Variation der Leitfähigkeit	146
5.2. Modell	146
5.3. Experiment und Ergebnisse	148
5.3.1. Probenaufbau	148
5.3.2. Elektrische Daten der Deckschichten	149
5.3.3. Stromdichte-Spannungscharakteristik	150
5.4. Zusammenfassung	156
6. Zusammenfassung der Arbeit	157
A . Veröffentlichungen	175
A .1. Veröffentlichungen als Erstautor	175
A .2. Veröffentlichungen als Koautor	176
A .3. Vorträge	177
B . Lebenslauf	179

1. Grundlagen

In diesem Kapitel werden die Grundlagen wiedergegeben, die als Voraussetzungen für diese Arbeit dienen. Hierzu gehört das Wissen über das Materialsystem (Abschnitt 1.1), der momentane Stand der Forschung (Abschnitt 1.2) und die benutzten experimentellen Methoden (Abschnitt 1.3).

1.1. Das Materialsystem

Dieser Abschnitt stellt die grundlegenden Eigenschaften des Gruppe-III-Nitrid Kristallsystems dar, die für das Verständnis und das Wachstum von Laserdioden notwendig sind. Hierzu gehören zum einen der Aufbau des Gitters und zum anderen die elektronischen und optischen Materialparameter der ternären Verbindungen.

1.1.1. Gitterstruktur

Die thermodynamisch stabilste Konfiguration der Gruppe-III-Nitride ist die wurzite Gitterstruktur. Neben der wurziten (hexagonalen) Phase können die Nitride auch in einer kubischen Struktur hergestellt werden, hierzu ist jedoch die Verwendung von entsprechenden kubischen Substraten notwendig [19]. Zwar wurden bereits LEDs auf Basis von kubischem Material präsentiert [20], doch konnte bis heute kein auf kubischem GaN basierender Laser hergestellt werden.

Die Einheitszelle der wurziten Kristallstruktur (Raumgruppensymmetrie C_{6v}^4) von den Nitriden ist in Abbildung 1.1 dargestellt. Das wurzite Kristallsystem hat in der Basalebene eine hexagonale Struktur, was sich in einer rautenförmigen Grundfläche der Einheitszelle mit einem Innenwinkel von 120° zwischen den Gittervektoren \vec{a}_1 und \vec{a}_2 widerspiegelt, die beide die Länge a besitzen. Senkrecht zu der Basalebene ist die Einheitszelle durch den Gittervektor \vec{c} aufgespannt und aus zwei Bilagen zusammengesetzt, die jeweils aus einer Monolage Stickstoff und einer Monolage der Gruppe-III-Elemente bestehen. Die beiden Monolagen innerhalb einer Bilage sind hierbei um $\vec{c} \cdot u$ gegeneinander versetzt. Der dimensionslose Materialparameter u

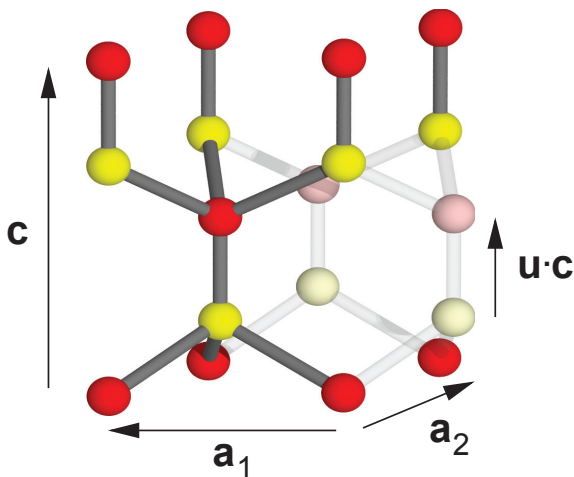


Abbildung 1.1.: Einheitszelle der wurziten GaN-Struktur. Die heller dargestellten Atome und Bindungen liegen außerhalb der Einheitszelle und sollen die hexagonale Struktur verdeutlichen.

wird als interner Parameter bezeichnet und besäße den Wert $3/8$, wenn alle Bindungslängen der Atome gleich wären. Die obere Bilage ist gegenüber der unteren um $0.5 \cdot \vec{c} + 1/3(2 \cdot \vec{a}_1 + \vec{a}_2)$ verschoben. Hierdurch ergibt sich im Kristall eine Stapelreihenfolge der Form $..ABAB..$ von den Bilagen. In Tabelle 1.1 sind die Gitterparameter der Gruppe-III Nitride zusammengefasst.

Parameter	AlN	GaN	InN	idealer Wert
a (nm)	0,3112	0,3189	0,3544	
c (nm)	0,4982	0,5185	0,5718	
u	0,3819	0,3768	0,3790	0,3750
a/c	0,6246	0,6150	0,6198	0,6123

Tabelle 1.1.: Gitterparameter des Materialsystems [21]

Die wurzite Kristallstruktur besitzt eine dreifache Rotationssymmetrie in der Basalebene, jedoch keine Spiegelsymmetrie entlang der c -Achse. Durch das Fehlen dieser Symmetrie hat die c -Achse eine ausgezeichnete Richtung, die sich unter anderem in einer spontanen Polarisierung entlang der c -Achse widerspiegelt. Diese Polarisierung wird allgemein als Pyroelektrizität bezeichnet und tritt in allen Kristallen ohne Spiegelsymmetrie auf (Raumgruppen C_n und C_{nv} mit $n=2, 3, 4, 6$, und Raumgruppen C_1 und C_{1h} [22]). Das hiermit verknüpfte elektrische Feld wird in starkem Maße von dem internen Gitterparameter u bestimmt. In Volumenkristallen wird dieses Feld durch Oberflächenladungen kompensiert, so dass es nur schwer nachweisbar ist. In Schichtstrukturen jedoch treten durch die unterschiedlichen Polarisierungen der Nitride Oberflächenladungen an der Grenzfläche auf. Durch eine biaxiale Verspannung in der Basalebene verändert sich Verhältnis der Gitterparameter c/a und der interne Parameter u , so dass sich ein zusätzliches Feld ausbildet, das als Piezoelektrizität bezeichnet wird. Das Zusammenspiel von Pyro- und Piezoelektrizität hat erhebliche

Auswirkungen auf GaN-basierte Bauelemente: So kann die Effizienz von Leuchtdioden und Lasern beeinträchtigt werden, da es durch die Felder im Quantentrog zu einer Trennung der Ladungsträger kommt (Quantum-Confined-Stark-Effect). Demgegenüber können diese Felder auch sehr nutzbringend sein, so werden sie in verspannten AlGaIn/GaN-Heterostrukturen für FETs ausgenutzt, um hohe Ladungsträgerdichten an Grenzflächen zu erzeugen.

Die fehlende Spiegelsymmetrie wird auch als Polarität des Kristalls bezeichnet. Hierdurch lassen sich die [0001]-Richtung und die $[000\bar{1}]$ -Richtung des Kristalles voneinander unterscheiden. In den Gruppe-III-Nitriden wird verallgemeinernd die [0001]-Richtung als Ga-polar bezeichnet und ist dadurch gekennzeichnet, dass sich an den Bindungen in c-Richtung die Gruppe-III Atome unterhalb des Stickstoffs befinden. Die Stickstoff-polare $[000\bar{1}]$ -Richtung ist dementsprechend an der Basalebene gespiegelt.

1.1.2. Ternäre Nitride

Wichtig zur Herstellung von Laserstrukturen ist das Wachstum von ternären Verbindungshalbleitern, da nur durch die Variation von Bandlücke und Brechungsindex die Ladungsträger und die optische Welle im Laser eingeschlossen werden können. Obwohl die Bandlücke eine der fundamentalen Größen eines Halbleiters darstellt, herrschte lange eine Unwissenheit über die Bandlücke von Indiumnitrid. Auf Grund des hohen Größenunterschiedes von Kationen und Anionen in dieser Verbindung ist die Epitaxie von hochqualitativem Indiumnitrid äußerst schwierig [21]. Erst innerhalb des letzten Jahres wurden vermehrt Daten veröffentlicht, in denen die Bandlücke des Indiumnitrids bei Raumtemperatur zu 0,7 eV bestimmt wurde [23, 24], nachdem sie vormals bei 1,8 eV vermutet wurde [25]. Demgegenüber sind die Bandlücken von Galliumnitrid (3,42 eV [26]) und Aluminiumnitrid (6,2 eV [27]) gut bekannt. Somit reichen die mit den Nitriden erreichbaren Wellenlängen vom InN im nahen Infrarot (1770 nm) über GaN im nahen UV (364 nm) bis hin zum AlN, dessen Bandkante im fernen UV liegt (200 nm). Während die Gitterkonstanten der ternären Nitride linear zwischen den binären Endpunkten interpoliert werden können (vegarsche Regel), weisen die Bandlücken im Allgemeinen einen nichtlinearen Verlauf auf. Für die Großzahl der Legierungshalbleiter kann der Bandlückenverlauf durch einen quadratischen Term $b_{A,B}$ (englisch: bowing parameter) angepasst werden. Der Bandlückenverlauf $E_g(x)$ des legierten Halbleiters A_xB_{1-x} lässt sich dann wie folgt wiedergeben:

$$E_g(x) = x \cdot E_A + (1 - x)E_B - x(1 - x)b_{A,B} \quad (1.1)$$

Hierbei entsprechen E_A und E_B den Bandlücken der binären Halbleiter A und B . Die aus der Literatur bekannten Daten für die ternären Nitride sind in Tabelle 1.2

1. Grundlagen

A	E_A (eV)	$b_{A,GaN}$ (eV)	$b_{A,AlN}$ (eV)
InN	0,7 [24]	2,5 [24]	1,2 (-0,4) [28]
	0,8 [23]	1.4 [23]	
GaN	3,42 [26]		0,0 [26]
			0,6 [29]
			0,62 [30]
AlN	6,2 [27]		

Tabelle 1.2.: Bandlücken der ternären Nitride bei Raumtemperatur. Der bowing-Parameter in Klammer ergibt sich aus einer Kalkulation mit der neu bestimmten InN-Bandlücke.

zusammengefasst und in Abbildung 1.2 gegenüber der Gitterkonstante a aufgetragen. Da die korrekte Bandlückenbestimmung des InN nicht lange zurückliegt, besteht in der Literatur noch eine Unklarheit über den Bandlückenverlauf von AlInN. Daher stammt der bowing-Parameter $b_{In,Al}$ aus Quellen, in denen noch mit der zu hohen InN-Bandlücke gerechnet wurde. Daher ist zusätzlich in Klammern der bowing-Parameter angegeben, der sich aus den in der Publikation angegebenen Werten des AlInN und der neu bestimmten Bandlücke des Indiumnitrids ergibt.

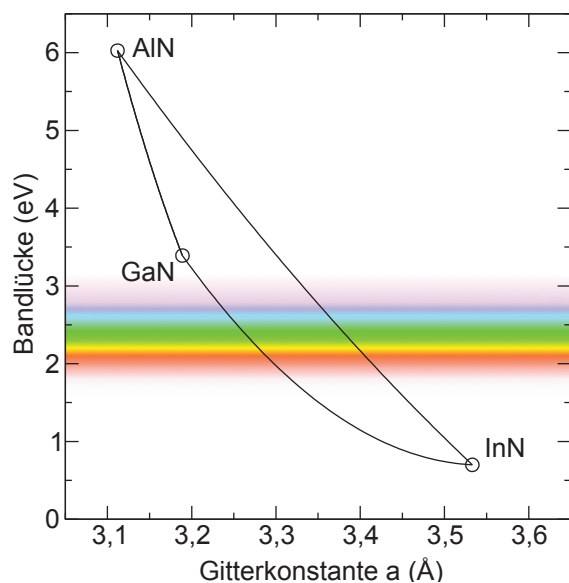


Abbildung 1.2.: Bandlücke der Nitride in Abhängigkeit der Gitterkonstante a .

1.1.3. Bandstruktur

Die vierzählige Bindung in den Nitriden erfordert, dass die Atome mit einer sp^3 -Hybridisierung ihre vier äußersten s - und p -Orbitale für σ -Bindungen zur Verfügung stellen. Einfluss nehmen auf diese Hybridisierung im Falle von InN und GaN die

energetisch unterhalb den sp^3 -Hybriden liegenden d -Zustände, die ebenfalls mit den Stickstoff- $2s$ -Zuständen hybridisieren [31]. Das Maximum des Valenzbandes wird fast ausschließlich durch die Stickstoff- $2p$ -Zustände gebildet, weswegen die Blochwellenfunktionen hier, wie bei allen Halbleitern, eine p -artige Parität aufweisen. Dies ist der Grund für die Aufspaltung in Schwerloch (HH) und Leichtloch (LH).

Diese Aufspaltung resultiert aus den verschiedenen Spin-Zuständen der Löcher: Am Γ -Punkt kann man das Elektron im wesentlichen wie in einem Atom betrachten: Die Spin-Bahnkopplung trennt hier die beiden p -Zustände. Entfernt man sich von dem Γ -Punkt, muss man berücksichtigen, dass der Spin des Elektrons mit seinem Impuls verknüpft ist. Der Impuls der leichten Löcher, die tiefer im Valenzband angeordnet sind, zeigt in die Richtung der Translationssymmetrie der zugehörigen Blochwellenfunktion, während die schweren Löcher senkrecht hierzu propagieren. Aus der unterschiedlichen Gesamtwellenfunktion erklärt sich die unterschiedliche effektive Masse der Löcher.

Diese Beschreibung ist für einen hexagonalen Kristall der Raumgruppensymmetrie D_{6h} ausreichend, da für die Beschreibung in effektiver-Masse-Näherung ein harmonisches Potential angenommen wird und dieses in einer tetraedrischen Anordnung isotrop ist. Die Wurzitgitter der Gruppe-III-Nitride sind jedoch in c -Richtung gedehnt und weisen daher eine ausgezeichnete Richtung auf. In dieser Richtung werden die Zustände mit dem Bahndrehimpuls $l=0$ gepinnt, während die Zustände in der c -Ebene davon unberührt bleiben. Dieses in c -Richtung gepinnte Loch wird im allgemeinen als Kristallfeldabspaltung (englisch: crystal field split-off hole (CH)) bezeichnet. Da der Bahndrehimpuls dieses Zustandes Null ist, existiert für ihn keine Spin-Bahn-Aufspaltung.

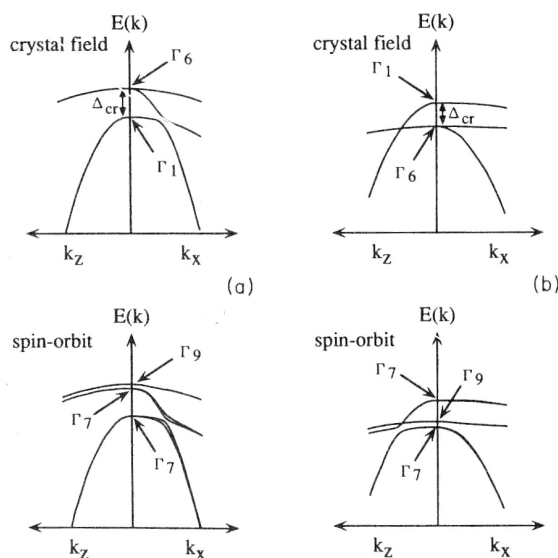


Abbildung 1.3.: Schematische Bandstruktur am Γ -Punkt von (a) GaN und (b) AlN mit und ohne Spin-Bahn Wechselwirkung [32].

Die genaue Bandstruktur am Valenzband-Maximum kann mit Hilfe der **k-p**-Methode gewonnen werden (siehe Abbildung 1.3). Es zeigt sich, dass die Valenzbandstruktur in den Nitriden am Γ -Punkt kein ideales parabolisches Verhalten aufweist, da das Leichtloch und das Kristallfeldloch die gleiche Symmetrie haben und ein "anticrossing" aufweisen. Zudem hat das AlN eine "umgekehrte" Valenzband-Anordnung, so dass das Kristallfeldloch zuoberst an dem Γ -Punkt liegt. Auf Grund des Kristallfelds unterscheiden sich die effektiven Massen für die Nitride in c-Richtung (m^{\parallel}) von denen in der c-Ebene (m^{\perp}) (siehe Tabelle 1.3).

Zustand	AlN [32]	GaN [32]	InN [33]
m_{HH}^{\parallel}	3,68	1,96	1,67
m_{LH}^{\parallel}	3,68	1,96	1,67
m_{CH}^{\parallel}	0,25	0,14	0,10
m_{HH}^{\perp}	6,33	1,87	1,61
m_{LH}^{\perp}	0,25	0,14	0,11
m_{CH}^{\perp}	3,68	1,96	1,67

Tabelle 1.3.: Effektive Massen der Löcher in den Nitriden

1.2. Stand der Forschung

Mitte bis Ende der 90er Jahre nahm die Entwicklung von Galliumnitrid-basierten Laserdioden eine rasante Entwicklung von der Präsentation der ersten gepulsten Laserdiode von Nichia Chemical Industries im Jahre 1995 bis hin zu kommerziell erhältlichen Produkten. Neben Nichia forschten auch eine Vielzahl anderer Unternehmen und Forschergruppen an der Entwicklung dieser Laser. In Tabelle 1.4 wird ein Überblick über die publizierten Kenndaten von Galliumnitrid-basierten Lasern gegeben. Trotz vieler Publikationen von Unternehmen über Laser im gepulsten Betrieb, sind kommerziell bis heute nur Laser von Nichia erhältlich. Neben Nichia ist auch Sony in der Lage, Laser mit vergleichbaren Kenndaten herzustellen, die bisher jedoch nicht einzeln erhältlich sind, sondern in die Produktion von Laser-Pickups für die Blu-Ray-Disc eingehen [34].

Mit der Erreichung der Marktreife dieser Produkte scheint ein Großteil der Forschung im Bereich der Galliumnitrid-basierten Halbleiter abgeschlossen zu sein. Dieser Abschnitt soll einen Überblick über die Forschung an Galliumnitrid-basierten Laserdioden der letzten Jahre geben, beginnend mit den ersten hergestellten Laserstrukturen soll darauf aufbauend die wichtigsten Schritten in der Entwicklung dargestellt werden.

Forscher- gruppe	1995	1996	1997	1998	1999	2000	2001	2002
Nichia	9,6 kA/cm ² , gepulst	4 kA/cm ² , 8 V	10000 h, 50 mW	420 mW, GaN:780 h	30mW, 3000 h	30 mW, 15000 h	455 nm	396-465 nm
XEROX	LED		25 kA/cm ² , 10 mW, gep.				100 mW, 68 mA, 5,9 V	
SONY			9,5 kA/cm ² , gepulst				150 mW, 4,3 kA/cm ²	15000 h, 4,2 W Module
Toshiba		50 kA/cm ² , 20 V, gepulst						
NEC					10,9 kA/cm ² 10,5 V, gep.			10 mA, 30 mW
Pioneer					41 kA/cm ² , 35 V, gepulst			
Fujitsu			12 kA/cm ² , 15 V, gepulst	7,7 kA/cm ² , 10,5 V, gep.	4 kA/cm ² , 8,3 V, 57 h			
Ostram					gepulste Laser		20 mW 5 min	
Cree			11 kA/cm, 1 min					
UCSB			17.6 mW, 12,7 kA/cm ² , 50 V, gep.					
Meijo	stimulierte Emission	16V		0,75 A				
Bremen								16,2 kA/cm ² , 260 mW, gep.

Tabelle 1.4.: Publizierte Laserstrukturen, im oberen Drittel auf Saphir, in der Mitte auf SiC, im unteren Drittel Ergebnisse der universitären Forschung [35, 36, 37, 38, 39, 6, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 9, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59].

1.2.1. Erste Laser

Die ersten Laser, die Mitte der 90er Jahre von Nakamura präsentiert wurden, basierten zunächst auf einfachen Injektionsstreifen-Strukturen auf Saphir-Substraten [38]. Wesentliche Probleme in diesen frühen Strukturen waren die relativ hohe Versetzungsdichte des Materials und verhältnismäßig hohe serielle Widerstände, die sich im Bereich von 20Ω bewegten [38].

Die damals angewandte epitaktische Struktur ist bis zum Jahre 2000 weitestgehend unverändert geblieben: Auf einem undotierten GaN-Puffer wurde eine n-dotierte dicke GaN-Schicht abgeschieden, um die laterale Kontaktierung zu ermöglichen. Hierauf wurde die Heterostruktur mit separatem Einschluss der Ladungsträger und der optischen Welle (englisch: Separate Confinement Heterostructure (SCH)) als zentrales Element des Lasers abgeschieden. Hierbei übernahmen auf der p- und der n-Seite jeweils 400 - 600 nm dicke AlGaN-Deckschichten die Führung der optischen Welle innerhalb des dazwischen liegenden GaN-Wellenleiters. Der Vielfachquantentrog (englisch: Multi Quantum Well (MQW)) in der Mitte des Wellenleiters wurde auf der p-Seite durch eine 20 nm dicke, p-dotierte AlGaN Blockschicht abgeschlossen. Die damalige Interpretation dieser Schicht war die Reduktion der Diffusion von Indium aus der MQW-Region beim anschließenden Überwachsen der p-Schichten. Nach heutigem Wissen ist die Funktion dieser Schicht jedoch das Verhindern des Eindringens von Elektronen in das p-Gebiet und dient somit der Verbesserung des Ladungsträgereinschlusses. Trotz dieser sich verändernden Interpretation sind die Parameter dieser Schicht lange Zeit unverändert geblieben. Als Kontaktschicht oberhalb der p-Deckschicht diente eine 0,5 μm dicke GaN:Mg Schicht.

Im Gegensatz zu heutigen Strukturen, die ein bis drei Quantentröge als aktive Region beinhalten, zeichneten sich die ersten Strukturen durch bis zu 26 Quantentröge aus [40, 37]. Diese hohe Anzahl der Quantentröge ist nach heutigen Erkenntnissen kontraproduktiv: Da die Injektion von Löchern wegen der schlechteren Dotierbarkeit des p-Gebietes in den Quantentrog wesentlich schwächer ist als die der Elektronen, kann nur in zwei bis drei der Quantentröge eine Inversion der Ladungsträger erreicht werden [60]. Durch das Aufwachsen dieser Vielzahl von Quantentrögen konnte in den damaligen Lasern jedoch die strukturelle Qualität der Quantentröge verbessert werden, da es hierdurch in dem aktiven Gebiet zu einer Homogenisierung des Materials kam. Die Großzahl der Quantentröge sollte auf Grund der nicht vorhandenen Inversion absorbierend wirken, so dass die Schwellstromdichte deutlich erhöht sein sollte. Es zeigte sich trotz dessen schon in den ersten von Nakamura *et al.* präsentierten Strukturen, die als Injektionsstreifenlaser (englisch: gain guided laser structure) strukturiert waren, dass Schwellstromdichten erreicht werden konnten, die bei 4 kA/cm^2 lagen [38]. Diese geringen Schwellstromdichten konnten in diesen Strukturen allerdings nur bei sehr breiten Injektionsstreifen von $30 \mu\text{m}$ Weite erreicht wer-

den. Diese geringen Schwellstromdichten deuten darauf hin, dass die Absorption in den "überflüssigen" Quantentrögen recht gering war, so dass zu vermuten ist, dass die spektrale Lage der Quantentröge in dem Vielfachquantentrog stark variierte und hierdurch die Absorption in den parasitären Quantentrögen gering war. Auf Grund der hohen Breiten der Injektionsstreifen spielte in diesen Strukturen die in dem p-Gebiet der Diode auftretende Aufweitung des Strompfades eine untergeordnete Rolle. Die Strukturgrößen hatten jedoch trotz geringer Stromdichte hohe Schwellströme von 1,7 A zur Folge, so dass es auf Grund der Wärmeentwicklung nicht möglich war, diese Strukturen im Dauerstrichbetrieb zum Lasen zu bringen.

Daher war das wesentliche Hindernis zum Erreichen eines Dauerstrichbetriebes dieser ersten Strukturen die Wärmeentwicklung. An der Laserschwelle betrug die Leistungsaufnahme der Dioden ca. 50 W, die auf einem Gebiet von unter einem Kubikmillimeter in Wärme umgesetzt wurde. Selbst unter optimalen Bedingungen zur Wärmeauskopplung (ideal wärmeleitfähiges Substrat) würden sich im Betrieb einer solchen Diode Temperaturen von mehreren 100 °C ergeben. Zudem verminderte die strukturelle Qualität der Proben, die zu dem damaligen Zeitpunkt typischerweise Versetzungsdichten im Bereich von $5 \cdot 10^7$ pro Quadratzentimeter aufwiesen, die Lebensdauer und die Quanteneffizienz der Laserdiode. Daher waren folgende Punkte wichtig, um die Leistungsfähigkeit der Dioden zu erhöhen:

- Reduktion der Defektdichte \Rightarrow Verringerung nichtstrahlender Rekombinationen
- Index-geführte Strukturen \Rightarrow Verringerung der Schwellstromdichte
 - \Rightarrow kleinere Strukturgrößen möglich
 - \Rightarrow Reduktion der Wärmeentwicklung
- Verbesserung der Fassettenqualität \Rightarrow Verringerung der Schwellstromdichte
- Reduktion des Widerstandes \Rightarrow Verringerung der Wärmeentwicklung

In den folgenden Abschnitten wird auf die Entwicklungen in diesen Punkten eingegangen werden, um dann einen Überblick über die heutigen Laserstrukturen zu geben.

1.2.2. Reduktion der Defektdichte

Einen wesentlichen Einfluss auf die Leistungsfähigkeit der Laserdioden nimmt die Versetzungsdichte in den Strukturen. Für Versetzungsdichten oberhalb von 10^8 $1/\text{cm}^2$ stellen Rekombinationen an den Versetzungen den dominanten Kanal für nichtstrahlende Rekombinationen (siehe Abbildung 1.4). Hierdurch kommt es zu einem reziproken Zusammenhang zwischen der Lumineszenzintensität und der Versetzungsdichte. Eng mit einer höheren Versetzungsdichte ist daher auch

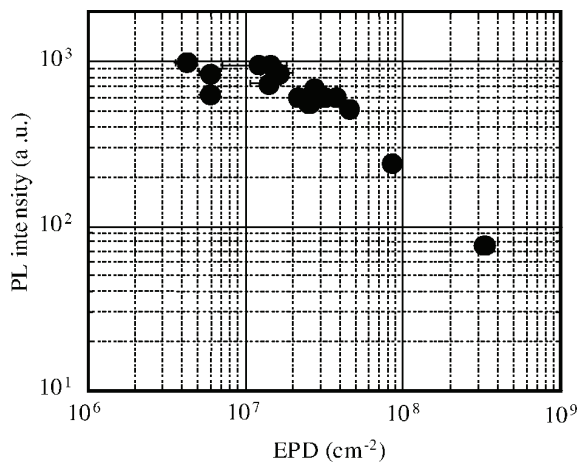


Abbildung 1.4.: Lumineszenzintensität in Abhängigkeit der Versetzungsdichte bestimmt über die Dichte von Ätzgrübchen (englisch: Etch Pit Density (EPD)) [56].

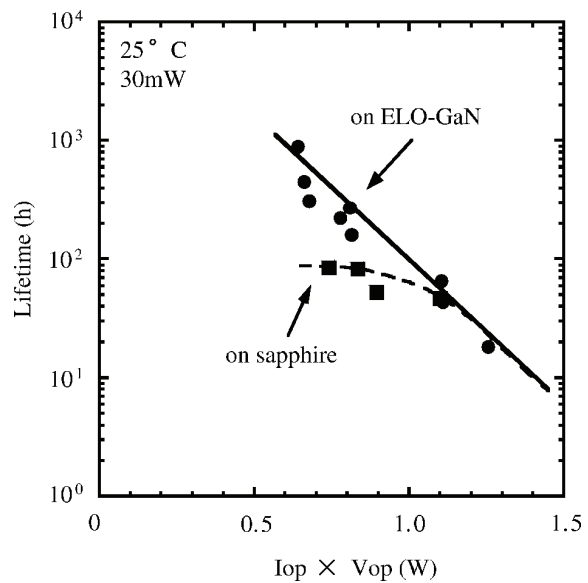


Abbildung 1.5.: Lebensdauer von Laserdioden gegenüber der an der Laserdiode abfallende Leistung bei einer Ausgangsleistung von 30 mW [56].

ein Anstieg der Schwellstromdichte verknüpft, da der Verlust von Ladungsträgern durch nichtstrahlende Rekombinationen kompensiert werden muss. Der genaue Prozess der Degeneration der Laserdioden ist bisher nicht geklärt, Versetzungen mit einem offenen Kern könnten jedoch als Diffusionskanäle dienen, die zu einem Zusammenbruch der p-n-Struktur im aktiven Gebiet führen. Als empirischer Befund wurde jedoch festgestellt, dass die Lebensdauer der Dioden stark von der im Betrieb abfallenden elektrischen Leistung an der Diode abhängig ist. So führt ein Anstieg der elektrischen Leistung um den Faktor zwei zu einer Reduzierung der Lebensdauer um den Faktor 10 (siehe Abbildung 1.5). Diese überaus starke Abhängigkeit resultiert wahrscheinlich auf einer Potenzierung der treibenden Mechanismen der Degeneration, die auf der Erwärmung, der Defektdichte und der Stromdichte basiert sein könnten.

Der wesentliche Durchbruch zu Strukturen mit geringen Versetzungsdichten gelang 1997 durch die Entwicklung von Verfahren, die auf dem lateralen Überwachsen von dielektrischen Streifenstrukturen beruht [61, 62] (englisch: Epitaxial Lateral Overgrowth (ELOG, ELO, LEO)). Hierzu wird auf einer GaN-Schicht eine SiO₂-Schicht aufgebracht, aus der mittels nasschemischen Ätzens Streifen in {11 $\bar{2}$ 0}-Richtung herauspräpariert werden (siehe Abbildung 1.6 (a)). Die unterhalb der Streifenmaske liegenden Versetzungen werden hierbei durch die Bildung von Versetzungsschleifen annihiliert, da das SiO₂ keine epitaktische Beziehung zum GaN aufweist. In den

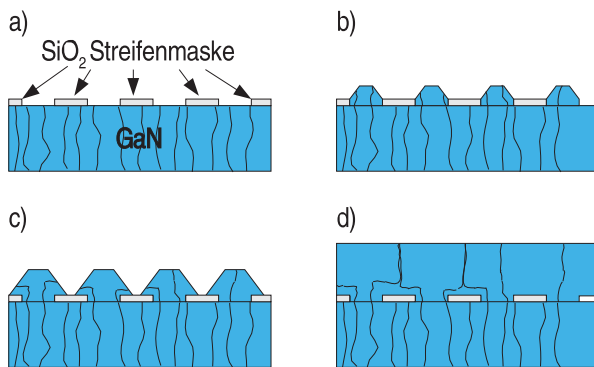


Abbildung 1.6.: Prinzip des lateralen Überwachens von Streifenstrukturen.

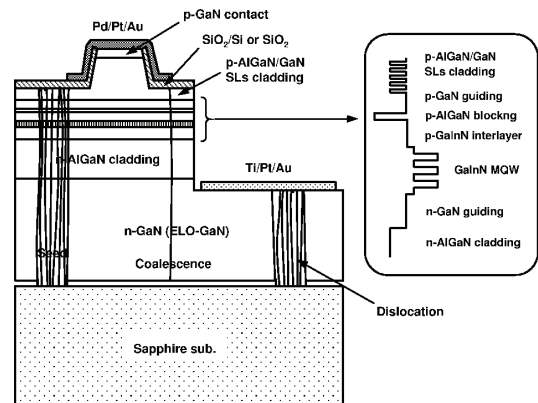


Abbildung 1.7.: Positionierung eines Lasers über einer ELO-Maske [63].

Öffnungen der Maske startet beim Überwachsen der Struktur das GaN-Wachstum (b), wobei sich $\{1\bar{1}01\}$ -artige Fassetten ausbilden. Die Versetzungen, die durch die Öffnungen der Maske weiter mit der GaN-Oberfläche propagieren, werden zum Teil an den $\{1\bar{1}01\}$ -artigen Fassetten in lateraler Richtung abgelenkt (c). Am Ende der Koaleszenz entstehen hierdurch Bereiche oberhalb der Streifen mit stark reduzierter Defektdichte (d). Durch Ausrichtung der Laser-Resonatoren entlang der Streifen können die Laser in Bereichen prozessiert werden, in denen die Versetzungsdichte typischerweise unterhalb von 10^7 $1/\text{cm}^2$ bis zu 10^5 $1/\text{cm}^2$ liegt (siehe Abbildung 1.7). Neben dieser Methode wurden auch eine Vielzahl anderer Techniken entwickelt, die zum Teil ohne dielektrische Streifenmasken auskommen und statt dessen eine direkte Strukturierung der GaN-Schicht oder des Substrates vornehmen (Air-Bridged Lateral Epitaxial Growth (ABLEG) [64], PENDEO-Epitaxie [65], Facet-Controlled Epitaxial Lateral Overgrowth (FACELO) [66]).

Neben diesen Techniken bestehen auch Bemühungen Laser auf GaN-Wafern herzustellen, die mit Hilfe von HVPE gewachsen wurden [53]. Auf Grund der reziproken Abhängigkeit zwischen Defektdichte und der Wachstumsdauer bei sehr dicken Schichten, kann eine Reduktion der Defektdichte dieser Materials erwartet werden. Eine Defektreduzierung um ca. 3 Größenordnungen, die mit Hilfe von ELOG möglich ist, würde aber Schichtdicken von mehreren 1000 μm zur Folge haben. Daher ist zum Erreichen der erforderlichen Defektdichten meist auch ein ELOG-Prozess involviert [67]. Zur Zeit sind jedoch noch keine hochqualitativen GaN-HVPE Wafer kommerziell erhältlich. Daher wird meist eine dicke HVPE-Schicht auf einer GaN-Grundlage gewachsen, die mit Hilfe von MOVPE und ELOG auf Saphir hergestellt wurde. Das für den Prozess verwendete Saphir-Substrat wird dann nach dem Wachstum der HVPE-Schicht abpoliert [58] oder durch einen Laser-Lift-Off Prozess entfernt [68, 69]. Bei dieser Technik wird der Wafer von der

Rückseite mit einem intensiven Laserstrahl ($0,3\text{--}0,6\text{ J/cm}^2$) bestrahlt, der in der GaN-Nukleationsschicht absorbiert wird. Hierzu kommen Nd:YAG (355 nm Emissionswellenlänge) oder KrF-Laser (Emissionswellenlänge 248 nm) in Frage, deren Emissionsenergie oberhalb der GaN-Bandlücke liegt. Auf Grund der Wärmeentwicklung kommt es im Absorptionsgebiet, das eine typische Dicke von 100 nm aufweist, zu einer thermischen Dekomposition des Galliumnitrids, so dass in der Grenzfläche metallisches Gallium und gasförmiger Stickstoff zurückbleibt [68]. Im Folgenden kann dann der Saphir-Wafer von der verbleibenden GaN-Schicht durch Heizen des Substrates auf Temperaturen oberhalb des Gallium-Schmelzpunktes ($30\text{ }^\circ\text{C}$) entfernt werden. Auf Grund der Verwendung von GaN-Substraten konnten die Schwellströme von Laserdioden gegenüber normalen ELOG-Strukturen noch einmal deutlich von 35 mA auf 25 mA reduziert werden [53]. In diesen Strukturen konnte jedoch keine weitere Verbesserung der Versetzungsdichte festgestellt werden, so dass der wesentliche Vorteil in der besseren Wärmeleitfähigkeit des Galliumnitrids zu sehen ist.

1.2.3. Index-geführte Strukturen

Index geführte Strukturen sind schon seit langem Standard in der Prozessierung von GaN-basierten Laserdioden. In der Optimierung der Struktur geht es heutzutage weniger um die Reduzierung der Stromdichte, sondern vielmehr um die Modellierung des Modenprofils und die Erhöhung der Ausgangsleistung, ab der es zu Leistungseinbrüchen auf Grund der Anregung von zusätzlichen transversalen Moden kommt (englisch: Kink-Level). Diese Optimierung läuft im Wesentlichen über die Anpassung der Geometrie, d.h. die Rippenbreite und Höhe, und über die Wahl der Isolatorschicht, die auf Grund ihres Brechungsindex und ihrer Absorption Einfluss auf die Moden nimmt. Die heutzutage benutzten Rippenbreiten liegen im Bereich zwischen $1,4\text{ }\mu\text{m}$ und $2,3\text{ }\mu\text{m}$ [56, 54], während der Bereich neben der Rippe bis auf ca. 140 nm oberhalb des aktiven Gebiets weggeätzt wird.

Neben der Prozessierung mittels reaktivem Ionenätzen ist ein weiteres interessantes Konzept zur Präparation der Rippe zu nennen: So wurden von der NEC Corporation die Rippen durch selektives Überwachsen hergestellt [70]. Hierzu wird die Deckschicht in einem separaten Wachstumsprozess gewachsen, nachdem auf dem Wellenleiter ähnlich der ELOG-Technik eine SiO_2 -Streifenmaske entlang der $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ -Richtung aufgebracht wurde, die das Injektionsgebiet definiert (englisch: Ridge by selective Regrowth (RiS)). Der Vorteil dieser Methode ist eine geringere Schädigung des Kristalls, da kein Trockenätzschritt involviert ist. Mit Hilfe dieser Methode konnten Laserdioden demonstriert werden, die eine Schwellstromdichte von $1,6\text{ kA/cm}^2$ aufweisen.

1.2.4. p-Dotierung

Die Rolle der p-Dotierung wird in der Literatur nicht im Zusammenhang mit Lasern diskutiert. Nichtsdestotrotz ist eine hohe p-Dotierung notwendig, um geringe serielle Widerstände in den Strukturen zu garantieren. Unabhängig von der Wachstumsmethode ergeben sich in Magnesium-dotierten GaN-Schichten die geringsten erreichten spezifischen Widerstände zu ca. $1 \text{ } \Omega\text{cm}$ [71, 72, 73, 74, 75, 76]. Meist ergibt sich in diesen Untersuchungen, dass bis zu einer Löcherkonzentration von $5 \cdot 10^{17} \text{ 1/cm}^3$ die Beweglichkeiten bei knapp $10 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ liegen, während bei höheren Löcherkonzentrationen der spezifische Widerstand auf Grund einer Reduktion der Beweglichkeit konstant bleibt. Nur wenige Publikationen berichten bessere Werte. Der geringste spezifische Widerstand wurde mit $0,1 \text{ } \Omega\text{cm}$ bei Löcherkonzentrationen von $5 \cdot 10^{18} \text{ 1/cm}^3$ [77] erreicht.

1.2.5. Optimierung der Kontakte

Die große Bandlücke und die hohe Elektronen-Affinität von Galliumnitrid resultiert in einer hohen Schottky-Barriere der Kontaktmetalle zum p-dotierten Galliumnitrid. Zusätzlich macht die hohe Aktivierungsenergie der Ladungsträger es schwierig hoch dotierte p-Schichten zu erzeugen, um die Tunnelbarriere schmal zu halten. Auf der Suche nach optimalen Kontaktcharakteristiken ist eine Großzahl von Metallisierungsschemen durchprobiert worden, wie z.B. Nickel/Gold [78, 79], Nickel [78, 80], Gold [78, 81], Palladium/Gold [82], Platin/Gold [83], Gold/Kohlenstoff/Nickel [84] und Nickel/Platin/Gold [85]. All diese Arbeiten wurden Mitte bis Ende der 90er Jahre durchgeführt und führen auf Kontaktwiderstände, die bestenfalls bei $10^{-4} \text{ } \Omega\text{cm}^2$ liegen.

Eine der derzeit vielversprechendsten Ansätze in neuerer Zeit ist die Kontaktierung der p-Schicht über eine verspannte p-dotierte InGaN-Schicht. Hierbei wird durch das piezoelektrische Feld in der Kontaktschicht das Valenzband an der Oberfläche zu niedrigeren Energien verschoben, so dass das Tunneln von Ladungsträgern deutlich verstärkt wird [86]. Bereits sehr dünne InGaN-Schichten von 2 nm Dicke können hierbei den Kontaktwiderstand auf Werte von $1,1 \cdot 10^{-6} \text{ } \Omega\text{cm}^2$ reduzieren [87]. Trotz des hohen Potenzials dieser Kontakttechnologie fand sie bisher noch keinen Einzug in die Laser-Technologie.

1.2.6. Präparation der Fassetten

Wesentlich für eine geringe Schwellendichte der Laser ist eine hohe Reflektivität der Fassetten. Die Herstellung der Fassetten durch Spalten der Struktur ist auf Saphir-Wafern schwierig, da das Galliumnitrid um 30° gedreht auf einem in c-Richtung ori-

entierten Saphir aufwächst. Die ersten funktionierenden Laser wurden daher auf der a-Fläche von Saphir hergestellt, so dass die r-Fläche des Saphirs mit der Spaltfläche des GaN übereinstimmte [37] oder die Fassetten wurden durch reaktives Ionenätzen präpariert. Die Fassetten, die mittels reaktivem Ionenätzen hergestellt wurden, zeigten jedoch eine Oberflächenrauigkeit von 50 nm [38]. Diese Rauigkeit verschlechtert die Leistungsfähigkeit der Laser signifikant, da sie knapp einem Viertel der Wellenlänge des Laserlichtes im Halbleiter entspricht. In der Anfangszeit wurde eine versucht eine Verbesserung der Oberflächenstruktur durch ein zusätzliches Polieren der Fasette mittels fokussierten Ionenstrahlen (englisch: Focused Ion beam, FIB) zu erreichen. Hierdurch konnte die mittlere Rauigkeit der Fasette auf 0,6 nm reduziert werden [45]. Diese Technik ist jedoch sehr aufwändig, so dass andere Auswege gesucht werden mussten.

Heutzutage werden die industriell auf Saphir-Substraten hergestellten Laser wieder durch Spalten präpariert. Um eine gute Spaltfähigkeit auf einem in c-Richtung orientierten Saphir zu gewährleisten wird das Substrat auf Dicken von 70 bis 100 μm abpoliert [47, 63]. Die Oberfläche der Fassetten wird standardmäßig mit je zwei Paaren $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ $\lambda/4$ -Schichten verspiegelt [58], die einen Reflektionsgrad von 95 % erreichen. Im Gegensatz hierzu kommt bei Hochleistungslaser mit Ausgangsleistungen oberhalb von 100 mW eine Anti-Reflex Beschichtung auf der Austrittsfasette zum Einsatz, die Reflektivitäten um 10 % aufweist [63].

1.2.7. Heutige Laser

Auf Grund der oben genannten Optimierungen liegen die besten heutigen GaN-basierten Laser in dem Wellenlängenbereich zwischen 400 und 420 nm schon nahe an dem Optimum. Typische Schwellströme der Laserdioden liegen bei 30 bis 50 mA [63] und sind vergleichbar mit AlGaAs Laserdioden, die bei 650 nm emittieren [88]. Diese Schwellströme entsprechen Schwellstromdichten im Bereich von 1,2–1,5 kA/cm^2 [67]. Insbesondere der differentielle Wirkungsgrad der Laser liegt mit bis zu 1,21 W/A [56, 89] sehr nahe am Optimum, das bei einer differentiellen Quanteneffizienz von 100 % bei 3 W/A liegt. Vergleicht man das Verhältnis des differentiellen Wirkungsgrades zum optimalen Wert, so erhält man eine differentielle Quanteneffizienz oberhalb von 40 %. Vergleicht man diesen Wert mit kommerziell erhältlichen GaAlAs-Laserdioden, die bei ca. 25 % liegen [88], so zeigt sich die heutzutage außerordentliche Qualität der bereits erhältlichen GaN-Laserdioden [89]. Auf GaN-HVPE Substraten konnte sogar ein differentielle Wirkungsgrad von 1,6 kA/cm^2 erreicht werden, was einer differentiellen Quanteneffizienz von über 50 % entspricht. Auch die Lebensdauern dieser Dioden sind mit über 10.000 h bei einer Dauerausgangsleistung von 30 mW ausreichend für kommerzielle Produkte.

Daher gehen die Ambitionen in Richtung der Erweiterung des Wellenlängenbe-

reiches und der Herstellung von Hochleistungslasern. Derzeitig kann von den GaN-basierten Laserdioden der Wellenlängenbereich von 400 bis 465 nm im Dauerstrichbetrieb abgedeckt werden [58]. Die Wellenlänge kann in diesem Bereich durch einfache Variation des Indium-Gehaltes eingestellt werden. Mit höher werdendem Indium-Gehalt nehmen jedoch die räumlichen Fluktuationen der Komposition zu und es bilden sich Bandausläufer aus, in denen die Ladungsträger lokalisiert werden [90, 91]. Das Lasing tritt jedoch nicht im Bereich der lokalisierten Zustände auf, sondern scheint aus den freien Bandzuständen gefüttert zu werden [58]. Hierdurch steigt die Schwellstromdichte mit zunehmendem/r Indiumgehalt/Wellenlänge an, so dass durch die höhere Wärmeentwicklung bei Wellenlängen um 480 nm im Moment nur Lasing im gepulsten Betrieb möglich ist [58].

1.3. Experimentelle Methoden

1.3.1. Molekularstrahlepitaxie

In der Molekularstrahlepitaxie (englisch: Molecular Beam Epitaxy (MBE)) werden die Elemente, die zum Wachstum eines Halbleiterkristalls benötigt werden, in Effusionszellen bereitgestellt. Jede dieser sogenannten Knudsen-Zellen besteht aus einem Keramiktiegel, der mit einem Element gefüllt ist, das entweder in fester oder flüssiger Form vorliegt. Dieser Tiegel kann mit einer außen liegenden Heizwendel mit Hilfe eines Temperaturreglers geheizt werden. Typische Temperaturen, auf welche die Quellen für die Evaporation gebracht werden, liegen in dem Bereich von 500 °C bis über 1000 °C, abhängig von der Sublimations- bzw. Verdampfungsenergie des Elementes und des Entropieunterschiedes zwischen dem gasförmigen und dem festen bzw. flüssigen Zustand. Jede der Zellen ist mit einem Shutter ausgestattet, der ein schnelles Ein- und Ausschalten der Quellen ermöglicht, so dass das Wachstum in der Größenordnung von einzelnen Atomlagen kontrolliert werden kann.

Der Prozess wird im Allgemeinen im Ultrahochvakuum durchgeführt, der Basisdruck im Ruhezustand liegt typischerweise in der Größenordnung von 10^{-10} Torr. Durch diese niedrigen Drücke wächst die mittlere freie Weglänge der Atome und Moleküle, die unter Standardbedingungen bei Atmosphärendruck (770 Torr) in der Größenordnung von 100 nm liegt, in der Kammer auf 100 km an. Die freie Weglänge ist somit um ein Vielfaches größer als die Dimension der Wachstumskammer, so dass die Atome und Moleküle ohne weitere Kollisionen direkt auf die Wachstumsoberfläche der Probe gelangen. Die Probe ist in der Kammer den Zellen gegenüberliegend auf einem rotierbaren Substrathalter montiert, der ebenfalls mit einer Temperaturregelung ausgestattet ist, so dass die Probe im Falle der GaN-Epitaxie bis auf Temperaturen von 850 °C geheizt werden kann. Auf der geheizten Probenoberflä-

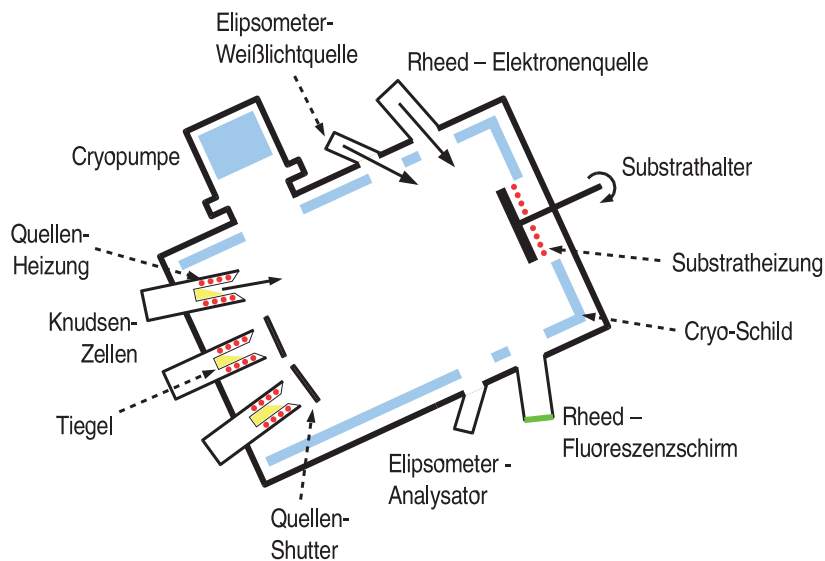


Abbildung 1.8.: Prinzipskizze des MBE-Systems

che können sich die durch die Effusionszellen angebotenen Spezies anlagern und der Kristall wächst. In der Molekularstrahlepitaxie wird das Wachstum fernab vom thermodynamischen Gleichgewicht ausgeführt, da im Vakuum kein Gleichgewicht zwischen der Gasphase und der Probe (Desorption und Adsorption) herstellbar ist, weil eine die Oberfläche stabilisierende Gasphase nicht vorhanden ist. Somit ist das Wachstum in der MBE durch kinetische Prozesse bestimmt, die durch die Regelung der Temperaturen von Effusionszellen und Probe kontrolliert werden können.

Elemente, die bei Standardbedingungen im gasförmigen Zustand vorliegen, können in der MBE mittels sogenannter Plasmaquellen hinzugeführt werden. Vielfach wird in diesem Fall von PAMBE (englisch: Plasma Assisted Molecular Beam Epitaxy) gesprochen. In der Plasmaquelle können starke molekulare Bindungen aufgebrochen bzw. angeregt werden, wofür die thermische Energie auf der Wachstumsoberfläche nicht ausreichend wäre. Diese Anregung geschieht je nach Quellentyp mittels Elektron-Zyklotron-Resonanz (englisch: Electron Cyclotron Resonance (ECR)) oder durch elektromagnetische Wellen im Radiofrequenzbereich (rf). Durch die Zufuhr des gasförmigen Plasmas steigt der Arbeitsdruck in der Kammer auf Werte bis zu 10^{-5} Torr. Unter diesen Bedingungen sinkt die mittlere freie Weglänge der Atome in die Größenordnung eines Meters und ist somit noch in der Dimension der Wachstumskammer.

Das Bremer MBE System

Das in unseren Laboren zur Verfügung stehende MBE-System wurde hergestellt von der *EPI MBE Products Group* (heute: *Veeco-Applied Epi Inc.*). Es besteht aus zwei *EPI 930* Wachstumskammern und einer Photoelektronenspektroskopie (englisch: X-ray Photon Spectroscopy (XPS)) Analysekommer, die durch ein UHV-Transportsystem miteinander verbunden sind. Die einzelnen Abschnitte dieses Systems können sowohl gegenseitig als auch von den Kammern mit Hilfe von Plattenventilen separiert werden. Zugehörig zu den Wachstumskammern sind in das Transfersystem je eine Ausheizstationen integriert, die eine thermische Reinigung der Proben vor Eintritt in die Kammern bei bis zu 500 °C ermöglichen. Die Beschickung des Transportsystems mit Proben erfolgt über ein Schleuse, die mit Blitzlampen bestückt ist, mit denen ein Ausheizen der Proben bei 140 °C während des Einschleusvorganges erfolgt. Je eine der beiden Wachstumskammern ist für das Wachstum von III-V bzw. II-VI Materialien vorgesehen. An dieser Stelle soll im Folgenden die III-V Kammer beschrieben werden, eine Darstellung der II-VI-Kammer kann an anderer Stelle nachgelesen werden [92].

Die Quellen

Die III-V-Kammer ist ausgestattet mit Knudsen Zellen für die Elemente Gallium und Indium (Dual Filament Cells mit zwei-Zonen Heizung) und Aluminium, Silizium und Magnesium (Single Filament Cells). Arsen wird in dieser Kammer mit Hilfe einer Cracker-Zelle zur Verfügung gestellt, Stickstoff und Wasserstoff werden über eine gemeinsame rf-Plasmaquelle des Typs *UNI-Bulb RF Plasma Source* eingeführt. Die Gasmengen dieser Quelle können im Fall von Stickstoff durch einen Massenflussregler und von Wasserstoff durch ein Nadelventil kontrolliert werden. Die Leistung der Plasmaquelle kann bis zu 500 W geregelt werden, die typische Anregungsleistung während des Wachstums beträgt 300 W.

Durch diese Quellenauswahl kann sowohl GaAs hergestellt werden, das als Grundlage für das Wachstum der II-VI Materialien dient, als auch Gruppe-III-Nitride (AlGaInN). Die Magnesium-Zelle dient zu der p-Dotierung des Materials, während die Si-Zelle zur n-Dotierung verwendet wird.

Die Analysemethoden

Die III-V-Wachstumskammer ist mit mehreren Ports versehen, die eine *in-situ* Charakterisierung und Kontrolle des Wachstums ermöglichen. Zur Kontrolle der Proben-temperatur ist die Kammer gegenüber dem Substrathalter mit einem Pyrometer ausgestattet, das über die Messung der infraroten Strahlung der Probe eine Temperaturbestimmung im Bereich oberhalb von 500 °C ermöglicht. Komplementär hierzu ist

die Druckmessröhre zu sehen, die für die Messung der Flüsse aus den Zellen in die Nähe der Probe gefahren werden kann. Eine zusätzliche Druckmessröhre steht zur Messung des Hintergrunddruckes in der Kammer zur Verfügung. Ein Quadrupol-Massenspektrometer erlaubt die nähere Analyse der Restgase und bietet die Möglichkeit der Lecksuche.

Zur Beobachtung des Wachstums bietet die Kammer sowohl die Analyse mittels RHEED (englisch: Reflection High Energy Electron Diffraction) als auch die optische Analyse mit Hilfe von Ellipsometrie. Im RHEED werden hochenergetisch Elektronen (Beschleunigungsspannung 15–30 keV) unter flachem Einfallswinkel auf die Probe geschossen und die abgebeugten Elektronen werden auf einem Fluoreszenzschirm, der sich auf der gegenüberliegenden Seite der Elektronenquelle befindet, beobachtet. Durch den flachen Einfallswinkel ist diese Methode oberflächensensitiv, so dass im wesentlichen Rekonstruktionen, die sich auf der Oberfläche befinden, beobachtet werden können. Zudem kann mit dieser Methode ein Übergang der Probenoberfläche zwischen zweidimensionalem und dreidimensionalem Wachstum festgestellt werden. Mit Hilfe der Ellipsometrie kann die Veränderung des Polarisationszustandes und des Reflektionsgrades der Probe gemessen werden. Hierüber ist ein Zugang zu den Brechungsindizes und somit der Probenkomposition und -dicke möglich.

1.3.2. Metallorganische Dampfphasenepitaxie

Die metallorganische Dampfphasenepitaxie (englisch: Metalorganic Vapor Phase Epitaxy (MOVPE), auch Metalorganic Chemical Vapor Deposition (MOCVD)) ist eine der jüngsten Methoden der Epitaxie und wurde 1968 von Manasevit [93] entwickelt. Im Gegensatz zu der HVPE (englisch: Halide Vapor Phase Epitaxy), bei der die Ausgangsstoffe (englisch: Precursor) der Gruppe-III Elemente in elementarer Form vorliegen und durch eine Reaktion mit HCl oder einer anderen halogeniden Verbindung in dem Trägergas gelöst werden, stehen in der MOVPE die Ausgangsstoffe als metallorganische Verbindungen zur Verfügung, die durch ihren vergleichbar hohen Dampfdruck bei Temperaturen um den Nullpunkt direkt im Trägergas gelöst werden können. Diese Methode ermöglicht im Gegensatz zur HVPE das schnelle Umschalten von verschiedenen Ausgangsstoffen und eine Variation der Flussverhältnisse. Hierdurch ist die Kontrolle des Wachstums bis zu Schichtdicken in der Größenordnung von Monolagen möglich. Zudem ist durch die moderaten Arbeitsdrücke des Reaktors, die im Bereich zwischen einem Zehntel bis knapp oberhalb des Atmosphärendruckes liegen können, die Wartung eines solchen Systems im Vergleich zu der MBE mit geringerem Aufwand verbunden. Daher ist MOVPE die geeignetste Methode, um im kommerziellen Maßstab epitaktische Strukturen herzustellen.

Prinzipien des Wachstums

In der MOVPE findet die Reaktion statt zwischen den metallorganischen Verbindungen und Hydriden, die als Precursor der Gruppe-V Elemente dienen. Hierzu werden die metallorganischen Verbindungen in einem Trägergas gelöst und mit den Hydriden vermischt im Reaktor über die Proben geleitet, die sich auf einem rotierenden Substrathalter (englisch: Susceptor) befinden, der bis auf Temperaturen von 1100 °C geheizt werden kann. In der Grenzschicht, die sich auf Grund des Gasflusses oberhalb der Probe ausbildet, wird zum einen der Transport der Precursor durch Diffusion dominiert, zum anderen findet hier eine erste Dissoziation der Precursor statt. Die Geschwindigkeit dieser Prozesse ist sowohl von der Temperatur als auch von dem Druck der Gase abhängig. Im Allgemeinen kann das hieraus resultierende Wachstum in drei verschiedene Regime eingeteilt werden (siehe Abbildung 1.9):

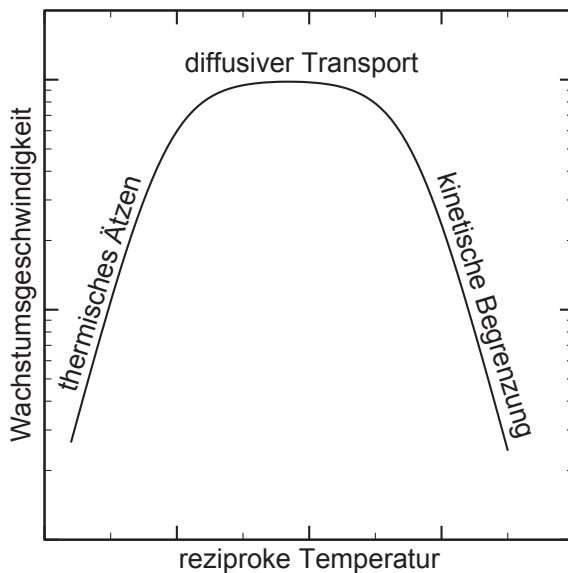


Abbildung 1.9.: Wachstumsregime im MOVPE-Wachstum.

Bei niedrigen Temperaturen wird das Wachstum durch die Reaktionskinetik, bei mittleren Temperaturen durch das Angebot der Precursor, die durch die Grenzschicht diffundieren müssen, begrenzt. Bei sehr hohen Temperaturen verschiebt sich das Reaktionsgleichgewicht zu Gunsten der Dissoziation der Wachstumsoberfläche, so dass durch zunehmendes thermisches Ätzen die Wachstumsrate wieder fällt.

Das Wachstum von GaN wird normalerweise bei Temperaturen von 1050 °C durchgeführt, was deutlich oberhalb der Dekompositionstemperatur im Vakuum (850 °C [94]) liegt. Bei diesen Temperaturen befindet sich somit das Wachstum in einem thermodynamischen Gleichgewicht und ist auf Grund der sehr Stickstoff-reichen Verhältnisse durch die Diffusion des Gallium (-Precursors) durch die Grenzschicht limitiert. Die thermische Ätzrate wurde in unserem System bei einer Temperatur von 1050 °C und einem Reaktordruck von 100 Torr zu ca. 200 nm/h bestimmt und

liegt weit unterhalb der typischen Wachstumsraten von $1,8 \mu\text{m/h}$. Unterhalb einer Temperatur von $550 \text{ }^\circ\text{C}$, wie sie für die Nukleationsschicht verwendet wird, tritt das Wachstum in den Bereich der kinetischen Limitierung.

Die Quellen

Die Precursor des Wachstums mittels MOVPE können prinzipiell in zwei Gruppen aufgeteilt werden: metallorganische Verbindungen und Hydride.

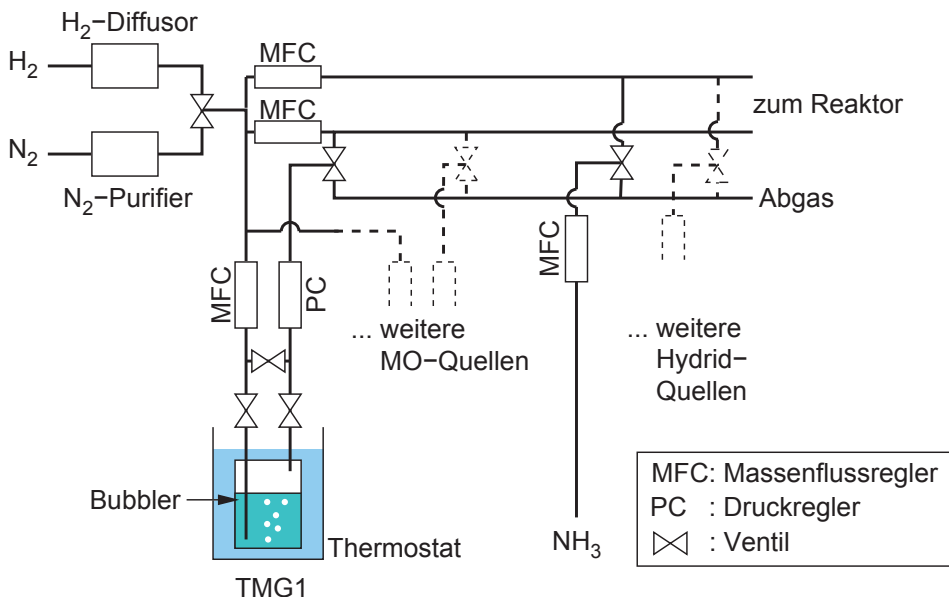


Abbildung 1.10.: Gassystem der MOVPE

Auf der Seite der metallorganischen Verbindungen stehen in der Epitaxie der Gruppe-III-Nitride die Elemente Gallium, Indium und Aluminium an die mehrere Methyl- oder Ethylgruppen geheftet sind. Zur Dotierung findet Bis-Cyclopentadienylmagnesium Verwendung. Diese Stoffe liegen in den Quellen entweder in flüssiger (Trimethylgallium (TMG), Triethylgallium (TEG), Trimethylaluminium (TMA)) oder fester (Trimethylindium (TMI), Bis-Cyclopentadienylmagnesium (Cp_2Mg)) Form vor. Die Precursor müssen daher in einem Trägergas gelöst werden, um in den Reaktor zu gelangen. Hierzu wird das Trägergas durch einen Metallzylinder geleitet, dem sogenannten Bubbler, in dem sich der Precursor befindet (siehe Abb. 1.10). Der Gasfluss des Trägergases F_T durch den Bubbler wird durch einen Massenflussregler (englisch: Mass Flow Controller (MFC)) kontrolliert, der an der Eingangsseite des Bubblers angebracht ist. Das Trägergas strömt an der Unterseite des Bubblers ein und löst beim Durchfließen des Bubblers den Precursor. Der Sättigungsdampfdruck p_s kann hierbei über die Temperatur des Bades bestimmt werden, in dem sich

der Bubbler befindet. Der Gesamtdruck p_g im Bubbler wird durch einen an der Ausgangsseite angeschlossenen Druckregler (englisch: Pressure Controller (PC)) konstant gehalten. Der molare Fluss f_{molar} des Precursors aus der Quelle ergibt sich dann unter diesen Bedingungen zu:

$$f_{molar} = \frac{p_s}{p_g} \frac{F_T}{22400 \text{ cm}^3/\text{mol}} \quad (1.2)$$

Für die Hydride, die zum Wachstum der Gruppe-III Nitride verwendet werden, sind zum einen Ammoniak (NH_3) als Stickstoff-Precursor und Silan (SiH_4) zur n-Dotierung zu nennen. Da diese Stoffe bei Standardbedingungen gasförmig vorliegen, können ihre Flüsse einfach über Massenflussregler kontrolliert werden. Das Silan wird nur in sehr geringen Mengen zur Dotierung benötigt und wird deswegen zu 10 ppm verdünnt in Wasserstoff eingesetzt.

In der Bremer MOVPE-Anlage befinden sich zur Zeit zwei TMG- und TMI-Quellen und jeweils eine TMA, Cp_2Mg , Silan und eine Ammoniak-Quelle. Um die Dynamik des Regelbereiches zu erhöhen, sind eine TMA-Quelle und die Silanquelle als sogenannte *double dilution lines* ausgeführt, bei denen die Gase in einem Verdünnungssystem in ihrer Konzentration herabgesetzt werden können. Die Indiumquelle ist mit einer Epison-Sonde ausgestattet, die mit Hilfe der Messung der Schallgeschwindigkeit die Konzentration des TMIs im Trägergas detektieren kann. Dieses ist notwendig, da sich das TMI in der Quelle in festem Zustand befindet. Durch den im Vergleich zur Verdampfung langsamer ablaufenden Sublimationsprozess kann es in dieser Quelle zu einer Untersättigung der Gasphase kommen, so dass die Konzentration von den Flussverhältnissen und dem Füllstand der Quelle abhängig ist. In die Steuerungssoftware der Anlage ist ein Regelkreis integriert, der über diese Sonde die Untersättigung des Trägergases mit TMI durch einen höheren Trägergasfluss ausgleichen kann.

Die Quellen werden in einem zweistufigen Prozess auf den Reaktor geleitet: Zunächst werden sie in den sogenannten "toxischen" Zustand geschaltet. Dies bedeutet, dass die Überbrückungsventile der Bubbler geschlossen werden und das Trägergas die Bubbler durchströmt. Die Gase werden in dieser ersten Stufe in eine Abgasleitung geleitet, die auf dem selben Druck wie die Reaktorleitungen gehalten werden. Wird ein Precursor zum Wachstum benötigt, wird der Gasfluss von der Abgasleitung auf die Reaktorleitungen umgeschaltet. Durch diesen zweistufigen Prozess ist gewährleistet, dass zum einen sich zunächst in den Quellen ein stabiles dynamische Gleichgewicht einstellen kann und durch den Umschaltvorgang keine Stoßwellen in den Leitungen durch abrupte Druckschwankungen entstehen.

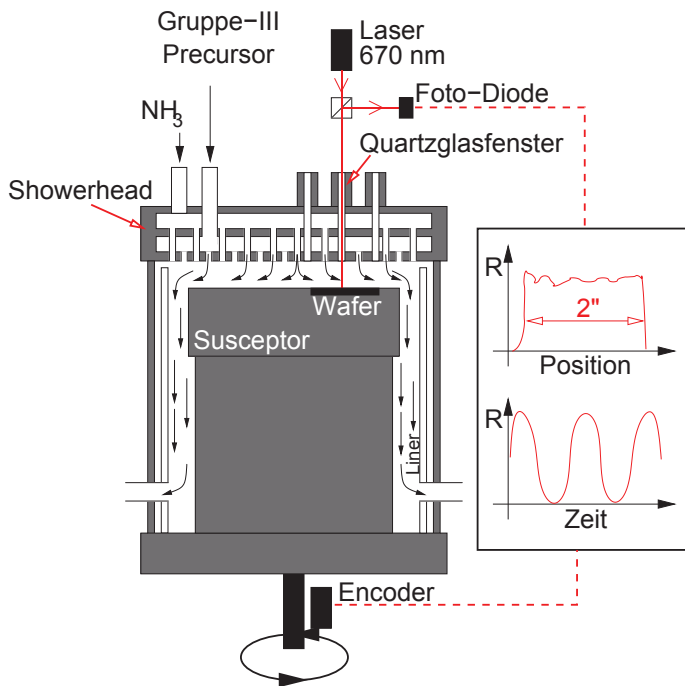


Abbildung 1.11.: Prinzipskizze des Reaktoraufbaus und der Reflektometrie.

Der Reaktor

Der Reaktor des in unseren Laboren verwendeten Systems ist ein sogenannter vertikaler *closed coupled Showerhead Reactor* der Firma *Thomas Swan Scientific Equipment Limited* (siehe Abbildung 1.11). Bei diesem Reaktortyp werden die Trägergase, die mit Gruppe-V- und Gruppe-III-Elementen angereichert sind, bis zum Erreichen des Reaktors voneinander getrennt geführt. Im Oberteil des Reaktors münden die Gasleitungen in zwei getrennte Durchmischungskammern, von denen Durchführungen auf der gesamten Grundfläche in den Reaktor führen. Dieser so genannte Showerhead (deutsch: Duschkopf) befindet sich nur 1 cm oberhalb des Proben-tellers (Suszeptor), auf dem die Proben rotiert werden. Der kurze Abstand des Duschkopfs und die getrennte Gasführung unterdrücken eine Vorreaktion der Precursor untereinander, so dass die Bildung von kristallinem Staub in der Gasphase verhindert wird. Der drehbare Suszeptor aus Graphit kann mittels einer resistiven Heizung, die starr unter dem Suszeptor angebracht ist, bis auf Temperaturen von 1100 °C geheizt werden.

Die äußere Reaktorhülle besteht aus Edelstahl und wird mittels einer Wasserkühlung auf Raumtemperatur gehalten. Die Verwendung von Stahl für diese Hülle hat zwei Konsequenzen: Zum einen muss der Gasstrom von der Innenseite der Reaktorwand durch sogenannte Liner aus Quarzglas separiert werden um Reaktionen mit der Reaktorwand zu vermeiden, zum anderen sind die *in-situ*-Analysemethoden stark begrenzt, da nur kleine optische Ports an der Oberseite des Reaktors zur Ver-

fügung stehen. Daher steht als einzige *in-situ*-Analysemethode eine optische Reflektometrie mit einer zur Oberfläche normalen Einfallrichtung zur Verfügung. Hierzu wird durch einen optischen Port an der Oberseite des Reaktors der Strahl einer AlGaAs-Laserdiode eingekoppelt und die Reflektion der Oberfläche mittels einer Si-Fotodiode durch den selben Port detektiert. Durch die Probenrotation, kann die Reflektivität entlang eines Schnittes Probe gemessen werden. Dieses Signal kann sowohl mittels eines Oszilloskopes visualisiert als auch mit Hilfe eines an einen Computer angeschlossenen Analog-Digitalwandlers aufgezeichnet werden. Durch einen Winkelencoder, der an der Substratrotation befestigt ist, kann innerhalb der Rotation des Suszeptors eine definierte Stelle ausgemessen werden. Da die Photodiode auch im infraroten Spektralbereich empfindlich ist, wird zur Messung der Reflektivität stets das Differenzsignal der Probenoberfläche und dem diffus reflektierenden Suszeptor genommen. Die Auswertung des Transienten dieses Signals ermöglicht die Bestimmung der Rauigkeit der Oberfläche, der Wachstumsgeschwindigkeit und der Schichtdicke der Probe. Eine genaue Beschreibung der Methodik ist in der Dissertation von Tim Böttcher nachzulesen [95].

1.3.3. Hall-Messungen in van der Pauw-Geometrie

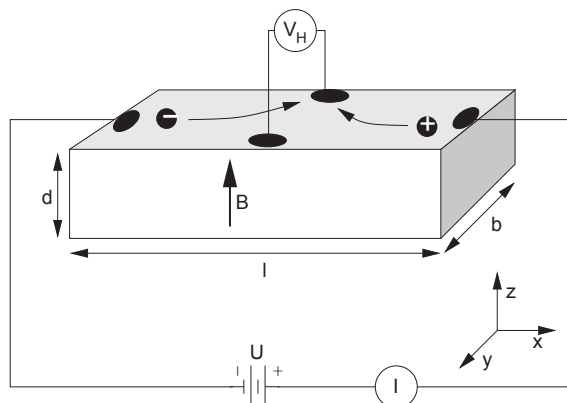


Abbildung 1.12.: Prinzipskizze der Hall-Messung.

Um Informationen über die Ladungsträgerdichte und die Beweglichkeit der Ladungsträger zu bekommen, bedient man sich der Hall-Messung. Hierzu wird eine Probe mit streifenförmiger Geometrie mit Kontakten an vier Stirnseiten benutzt (siehe Abbildung 1.12). Diese Probe wird in einem Magnetfeld vermessen, dessen Feldvektor \vec{B} parallel zu dem Normalenvektor der Ebene ist, die durch die Kontakte aufgespannt wird. Lässt man nun einen Strom I durch ein gegenüberliegendes Kontaktpaar fließen, so werden die Ladungsträger auf Grund der Lorentzkraft $\vec{F}_L = Q\vec{v} \times \vec{B}$ abgelenkt. Q stellt hierbei die Ladung des Ladungsträger dar ($\pm e$) und v ist die Geschwindigkeit der Ladungsträger im untersuchten Medium und hängt mit dem Strom

I über die Ladungsträgerdichte n wie folgt zusammen:

$$v = \frac{I}{nQdb} \quad (1.3)$$

Die abgelenkten Ladungsträger bauen ein Potential in der Probe auf, das an dem anderen Kontaktpaar als Spannung U_H gemessen werden kann. Auf die Ladungsträger wirkt nun zusätzlich die Kraft des elektrischen Potentials $\vec{F}_E = -q \cdot \vec{E}$, die der Lorentz-Kraft entgegenwirkt. Im Gleichgewicht kompensieren sich die Kräfte $\vec{F}_E = -\vec{F}_L$, so dass die gemessene Spannung $U_H = E/b$ mit der Dicke der Probe d und dem Strom I wie folgt verknüpft ist:

$$U_H = \frac{vB}{d} = \frac{IB}{nQd} = R_H \frac{IB}{d} \quad (1.4)$$

Je nachdem, ob in dem Halbleiter Löcher oder Elektronen zur Leitfähigkeit beitragen, kehrt sich die Hall-Spannung um. In den breitlückigen Halbleitern wie GaN ist nicht davon auszugehen, dass gleichzeitig freie Löcher und Elektronen existieren. Über diese Messung lässt sich somit die Ladungsträgerdichte n bestimmen, wenn die Dicke d der Probe bekannt ist. Die Beweglichkeit μ der Ladungsträger kann mit Hilfe der zusätzlichen Messung der Leitfähigkeit σ bei ausgeschaltetem Magnetfeld bestimmt werden:

$$\sigma = qn\mu = \frac{1}{\rho} = \frac{I l}{U db} \quad (1.5)$$

Der Nachteil dieser Messung ist, dass sämtliche Dimensionen des Probenstücks bekannt sein müssen, um die Leitfähigkeit zu bestimmen. Zudem muss die Geometrie für die Hall-Messungen bestimmten Anforderungen genügen: So muss die Länge l deutlich größer als die Dimensionen von d und b sein, damit die Stromverteilung im Gebiet der Messung homogen ist. Zudem müssen die Kontakte zur Messung der Hall-Spannung exakt senkrecht zum Stromfluss liegen, da sonst der ohmsche Widerstand diese Messung verfälscht.

Um diesen Nachteilen zu entgehen, hat L. J. van der Pauw die nach ihm benannte Methode der Hall-Effekt-Messung für beliebig geformte Proben entwickelt [96]. Mit Hilfe von konformanten Abbildungen konnte van der Pauw für willkürlich geformte Proben ähnliche Gleichungen wie für die Streifengeometrie herleiten. Für diese Messung sind an die Probe folgende leicht zu realisierende Bedingungen zu stellen:

- Die Probe muss aus einer zusammenhängenden Schicht ohne Löcher und nichtleitende Bereiche mit konstanter Dicke bestehen
- Die Messung darf durch die Kontakte nicht beeinflusst werden, die Kontakte sollten möglichst punktförmig sein
- Die Kontakte müssen am Rand der Probe liegen

Eine genaue Herleitung der Gleichungen kann in [97] nachgelesen werden, hier sollen nur kurz die Ergebnisse der Arbeit von van der Pauw dargestellt werden:

In der van der Pauw Messung wird zunächst ohne Magnetfeld der spezifische Widerstand ρ bestimmt. Hierzu wird an jeweils zwei Kontakten i und j die abfallende Spannung $U_{i,j}$ gemessen, wenn durch die verbleibenden Kontakte k und l der Strom $I_{k,l}$ fließt. Mit den Größen $R_{i,j,k,l} = U_{i,j}/I_{k,l}$ lässt sich dann der spezifische Widerstand wie folgt berechnen:

$$\rho = \frac{\pi d}{\ln 2} \left(\frac{R_{2,1,3,4} + R_{3,2,4,1}}{2} \right) f \quad (1.6)$$

f ist hierbei von der Probenstruktur abhängig und lässt sich aus den $R_{i,j,k,l}$ über folgende transzendente Gleichung bestimmen:

$$\frac{R_{2,1,3,4}/R_{3,2,4,1} - 1}{R_{2,1,3,4}/R_{3,2,4,1} + 1} = \frac{f}{\ln 2} \arccos \left[\frac{1}{2} \exp \left(\frac{\ln 2}{f} \right) \right] \quad (1.7)$$

Die Messung des Hall-Koeffizienten R_H erfolgt über die Spannungsmessung zweier gegenüberliegender Kontakte, während der Strom durch die beiden anderen Kontakte geführt wird. Durch Vertauschen der Kontakte und Umpolen des Magnetfeldes B ergibt sich R_H zu:

$$R_H = \frac{d}{8B} [R_{3,1,4,2}(B) - R_{1,3,4,2}(B) + R_{4,2,1,3}(B) - R_{2,4,1,3}(B) - R_{3,1,4,2}(-B) + R_{1,3,4,2}(-B) - R_{4,2,1,3}(-B) + R_{2,4,1,3}(-B)] \quad (1.8)$$

Aus dem Hall-Koeffizienten kann nach Gleichung 1.4 die Ladungsträgerdichte und über Gleichung 1.5 die Beweglichkeit der Ladungsträger bestimmt werden.

1.3.4. Atomare Kraftmikroskopie

Die atomare Kraftmikroskopie (englisch: Atomic Force Microscopy (AFM)) dient dazu, die Topologie der Oberfläche einer Probe zu untersuchen. Der Mechanismus im AFM basiert auf der Wechselwirkung einer feinen Messspitze mit dem Oberflächenpotenzial der Probe. Hierzu wird entweder die Probe (englisch: moving sample) oder die Messspitze (englisch: moving probe) auf einem piezoelektrischen Verstärker gehalten, so dass Probe und Messspitze mit einer Genauigkeit von unter einem Nanometer zueinander bewegt werden können und somit eine Fläche auf der Probe abgescannt werden kann. Die Spitze besteht meist aus einem Silizium oder Siliziumnitridkristall, an dessen Ende ein schmaler Steg mit einer feinen Spitze herauspräpariert ist, deren Verrundungsradius am Ende der Spitze in der Größenordnung von 10 nm liegt. Diese Spitze wird in Kontakt mit der Probe gebracht (siehe Abbildung 1.13), so dass es auf Grund der wirkenden Kraft zu einer Auslenkung des Steges kommt. Mit Hilfe eines Lasers und eines positionsempfindlichen Photodetektors kann diese Auslenkung detektiert werden. Prinzipiell kann das Mikroskop in zwei verschiedenen Messmodi betrieben werden:

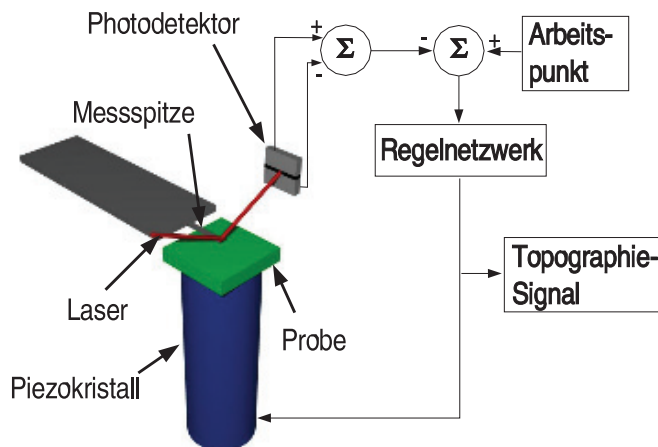


Abbildung 1.13.: Prinzipieller Aufbau eines atomaren Kraftmikroskops.

1. Kontaktmodus (englisch: contact mode)
2. Modi mit schwingender Messspitze (englisch: non contact mode / tapping mode)

Im Kontaktmodus befindet sich die Spitze in mechanischem Kontakt mit dem abstoßenden Oberflächenpotenzial der Probe. Der angeschaltete Regelkreislauf regelt hierbei die Entfernung der Probe zur Messspitze in der Art nach, dass es zu einer konstanten Auslenkung der Messspitze kommt. Dieses Regelsignal kann direkt als Höheninformation (Topographie) der Oberfläche ausgewertet werden. In den Modi mit schwingender Messspitze wird diese durch einen zusätzlichen Piezokristall nahe der Resonanzfrequenz zum Schwingen angeregt. Mit Hilfe des Photodetektors kann die Oszillationsamplitude der Spitze bestimmt werden. In diesem Messmodus schwingt die Spitze entweder im Bereich des abstoßenden Potentials (tapping mode) oder wird in dem Bereich der Van-der-Waals Kräfte geführt (non-contact mode). Durch den im Potenzial vorhanden Kraftgradienten verschiebt sich die Resonanzfrequenz der Messspitze, wodurch sich die Oszillationsamplitude ändert. In diesem Messmodus wird nun durch den Regelkreis die Amplitude auf einem vorher eingestellten Arbeitspunkt konstant gehalten und so eine konstante Entfernung eingestellt. Auch hier ergeben sich aus der Höhenverstellung der Probe/Messspitze direkt die Topographieinformationen der Oberfläche.

1.3.5. Transmissionselektronenmikroskopie

Die Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) war das erste Mikroskopieverfahren, das sich der höheren Auflösung von Elektronen im Vergleich zu Lichtwellen bediente. In Transmission können dünne Proben (ca. 30–100 nm) mit einer 100 bis 500.000-

fache Vergrößerungen und einem Auflösungsvermögen von etwa 0,2 nm abgebildet werden.

Bildgebung

In dem TEM werden Elektronen aus einer Elektronenquelle (Glühkathode, Kaltkathode) in einem elektrischen Feld von 10 kV bis zu 300 kV zu einer ringförmigen Anode hin beschleunigt. Der mit einer Kondensorlinse präparierte Elektronenstrahl durchläuft die sehr dünne Probe (einige 10 nm) und wird mit Hilfe weiterer Linsen auf einem Leuchtschirm, einer Photoplatte oder einer CCD abgebildet. Alle beschriebenen Teile des Elektronenmikroskops sind in der sog. Säule untergebracht, die luftdicht verschlossen und durch entsprechendes Pumpen auf ein Vakuum von ca. 10^{-5} mbar evakuiert sein muss, damit die Elektronen weder an Gasmolekülen gestreut noch von diesen absorbiert werden können.

Die Elektronen interagieren mit der Probe, indem sie elastisch und unelastisch gestreut werden. Bei der unelastischen Streuung wird die verlorene Energie an Kernnahe Elektronen in der Probe übertragen. Die Relaxation der Elektronen in der Atomhülle sendet hierdurch eine charakteristische Röntgenstrahlung aus. Diese Strahlung ist spezifisch für das streuende Atom, so dass durch die Detektion der Strahlung eine Elementanalyse möglich ist (englisch: Energy Dispersive X-Ray Analysis (EDX)). Die elastische Streuung erfolgt in Form von Rutherford-Streuung. Der Wirkungsquerschnitt dieser Streuung ist von der Masse der Atome abhängig, so dass in der Abbildung hierdurch ein Massenkontrast beim Durchstrahlen einer Probe mit unterschiedlichen Zusammensetzungen sichtbar wird.

Beim Durchstrahlen einer kristallinen Probe überlagern sich die gestreuten Elektronenwellen, so dass nach den Bragg-Bedingungen Beugungsreflexe der Gitterebenen auftreten. Diese Bragg-Reflexe können im reziproken Abbild im Strahlengang mit Hilfe einer Blende selektiert werden. Hierdurch sind Abbildungen möglich die aus der Interferenz unterschiedlicher Bragg-Reflexe entstehen. Im Wesentlichen können hier die Hellfeld- und die Dunkelfeld-Aufnahme genannt werden. In der Hellfeld-Aufnahme wird nur der ungebeugte Strahl zur Bildgebung verwendet, während im Dunkelfeld ein gebeugter Reflex benutzt wird.

Im Umfeld von Versetzungen sind die Gitterebenen des Kristalls verbogen, wodurch eine Variation des Streuquerschnittes der einzelnen Reflexe auftritt. In der Hellfeld-Aufnahme werden die Elektronen durch die Störung aus dem Reflex herausgestreut, so dass hier eine Versetzung im Abbild dunkler erscheint. In der Dunkelfeld-Aufnahme werden demgegenüber nur die gebeugten Elektronen verwendet und die Versetzung erscheint hell. Dieses ist nur möglich, wenn der Beugungsvektor \vec{g} des verwendeten Strahls eine Komponente in Richtung des Burgersvektors \vec{b} der untersuchten Versetzung besitzt. Hierdurch ist es möglich nur bestimmte Versetzungen

sichtbar zu machen und so z. B. Schraubenversetzung von Stufenversetzungen zu unterscheiden.

Abbildung mit konvergenten Elektronenstrahlen

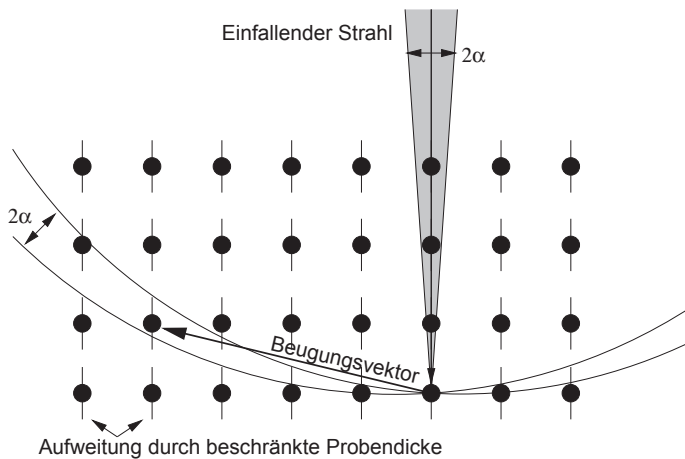


Abbildung 1.14.: Ewaldkonstruktion bei der Abbildung mit konvergenten Elektronenstrahlen.

Während für die oben dargestellten Aufnahmen die Probe flächig durchleuchtet wird (typischer Weise auf einem Gebiet von mehreren μm), kann zur Analyse der kristallinen Struktur, wie z.B. der Polarität, der Elektronenstrahl auf die Probe konvergiert werden (englisch: Convergent Beam Electron Diffraction (CBED)). Die durchleuchtete Fläche ist hierbei bestenfalls in der Größenordnung von 10 nm. Durch die wesentlich höheren Strahlintensitäten ist das Beugungsbild vermehrt durch dynamische Prozesse charakterisiert. Zusätzlich ist durch die Konvergenz des Elektronenstrahles der Einstrahlwinkel nicht mehr scharf definiert, so dass in der Ewald-Konstruktion die Kugelschale, in der sich die reziproken Gitterpunkte zur Reflexbildung befinden müssen, vergrößert wird (siehe Abb. 1.14). Insbesondere tragen hierdurch auch Beugungen höherer Laue Ordnungen (englisch: Higher Order Laue Zones, (HOLZ)) zu dem Beugungsbild bei. Hierdurch ist eine direkte Analyse des Beugungsbildes nicht mehr möglich, sondern es ist notwendig, Simulationen durchzuführen. Insbesondere ist das Beugungsbild auf Grund der dynamischen Anteile von der Dicke der Probe abhängig. Im Vergleich von Beugungsbildern aus benachbarten Probenbereichen, die eine ähnliche Schichtdicke aufweisen, kann jedoch eine Polaritätsumkehr des Materials durch ein spiegelbildliches Beugungsmuster detektiert werden, so dass mit Hilfe dieser Methodik eine schnelle Analyse von Inversionsdomänen möglich ist.

2. Wachstum, Prozessierung und Betriebsparameter der GaN-Lasern

In diesem Kapitel wird die Herstellung und die Charakteristik der Laserdioden, wie sie in Bremen gewachsen und in Kooperation mit dem Institute of Micro- and Optoelectronics an der École Polytechnique Fédéral de Lausanne prozessiert wurden, dargestellt werden. Dies umschließt das Wachstum von GaN mittels MOVPE auf Saphir-Substraten, die Wachstumsparameter der einzelnen Schichten, die externe Prozessierung und die Kenndaten der so prozessierten Laserdioden.

2.1. Wachstum

Die an der Universität Bremen hergestellten Laserdioden wurden mittels MOVPE auf Saphir-Substraten aufgewachsen. Diese Substrate zeichnen sich durch eine große Gitterfehlpassung in der Basalebene aus, die bei einer Drehung der GaN-Einheitszelle um 30° gegenüber dem Saphir 16,1 % beträgt. Diese große Fehlanpassung macht es unmöglich, Galliumnitrid kohärent auf dem Saphir aufzuwachsen. In der MBE stellt sich eine Epitaxiebeziehung von 5:6 des GaN gegenüber dem Saphir ein, so dass in den ersten Bilagen ein Großteil der Fehlanpassung abgebaut wird. Nichtsdestotrotz ist die Versetzungsdichte in so hergestelltem Material sehr groß.

2.1.1. Nukleation

Beim Wachstum mittels MOVPE wird daher ein spezielles Nukleationsschema verwendet, wie es erstmals 1986 von Amano *et al.* vorgestellt wurde [98]. Die Nukleation gemäß dieses Schemas unterteilt sich in folgende Schritte:

- thermisches Ausheizen des Substrates unter Wasserstoff-Atmosphäre

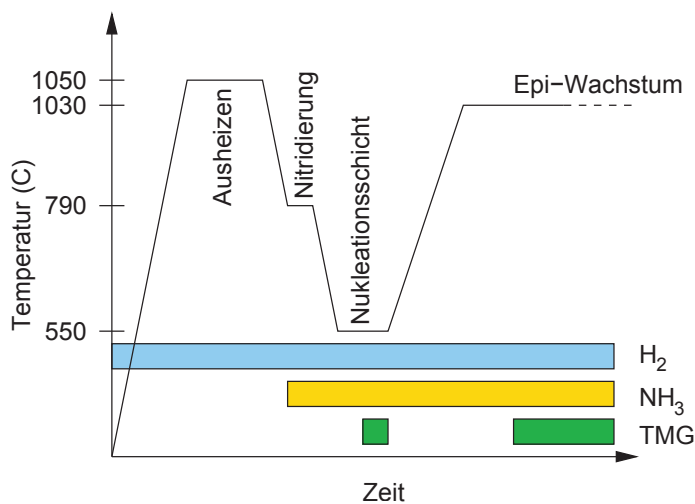


Abbildung 2.1.: Nukleationsschema des GaN-Wachstums mittels MOVPE [95].

- Nitridierung der Substrat-Oberfläche
- Abscheiden einer GaN oder AlN Nukleations-Schicht bei niedrigen Temperaturen
- Rekristallisation der Nukleationsschicht bei Wachstums-Temperatur
- Wachstum der Epitaxie-Schicht

Eine graphische Repräsentation des Schemas ist in Abbildung 2.1 zu sehen. Die Nukleation wurde von uns mit Hilfe von *in-situ* Reflektometrie und *ex-situ*-Messung mittels atomarer Kraftmikroskopie untersucht. In Abbildung 2.2 ist sowohl der Reflektometrieverlauf, als auch AFM-Aufnahmen von bestimmten Zuständen der Oberfläche während des Wachstums zu sehen. Die einzelnen Stufen der Nukleation, werden im Folgenden kurz beschrieben, eine ausführliche Darlegung findet sich in der Doktorarbeit von Tim Böttcher [95].

Zunächst wird das Substrat bei einer Temperatur, die ca. 20 °C oberhalb der Wachstums-Temperatur liegt, ausgeheizt, um die Oberfläche von Adsorbaten zu reinigen und um Sauerstoff aus der Oberfläche zu entfernen, so dass eine Aluminiumterminierte Oberfläche des Saphirs präpariert wird. Dieses ist notwendig, da die Bindung der Nitride am Aluminium-Subgitter des Saphirs erfolgt. Höhere Temperaturen sind nachteilig, da hierdurch von vorherigen Wachstumsprozessen im Reaktor verbliebenes Material zersetzt wird und es zur Bildung von Stäuben im Reaktor und Gallium-Tröpfchen auf dem Suszeptor und dem Substrat führen kann. Dieses kann reduziert werden, indem vor dem Wachstums ein Prozess im mit Blindproben bestückten Reaktor durchgeführt wird, in welchem der Reaktor bei 1100 °C ausgeheizt und danach eine AlGaIn-Schicht abgeschieden wird. Das AlGaIn besitzt eine höhere thermische Stabilität, so dass hierdurch die Kontamination der Substrate während

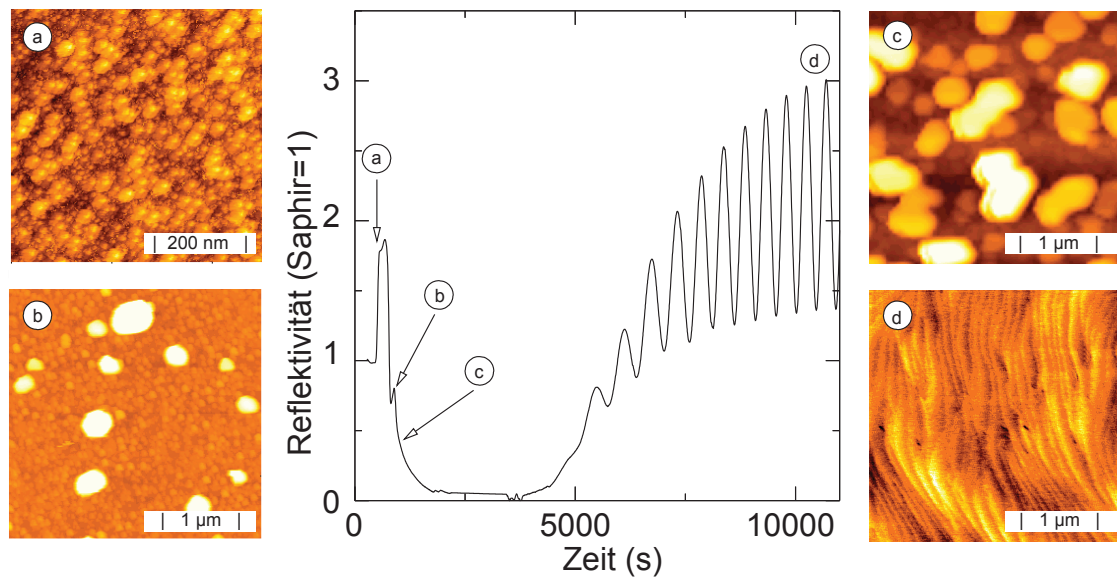


Abbildung 2.2.: Reflektometrie-verlauf während des Wachstums einer typischen Puffer-Schicht. In den AFM-Aufnahmen ist die Morphologie nach dem Abscheiden der Nukleationsschicht (a), nach der Rekristallisation (b), am Beginn des Wachstums der Epi-Schicht (c) und nach Vollendung der Koaleszenz (d) zu sehen [18].

der Nukleationsphase im folgenden Wachstumsprozess vermindert wird. Zusätzlich wird hierdurch eine definierte Oberfläche im Reaktor geschaffen, welche die Reproduzierbarkeit der Temperaturverteilung im Reaktor erhöht.

Die in der Reflektometrie gemessene Intensität am Ende des Ausheizschrittes wird auf 1 kalibriert und dient somit als Referenzwert (Beginn der Reflektometriekurve in Abbildung 2.2). In dem nachfolgenden Nitridationsschritt wird die Probe auf Temperaturen um $790\text{ }^{\circ}\text{C}$ abgekühlt und ein Teil des Wasserstoffs im Reaktor durch Ammoniak ersetzt. In diesem Schritt lagert sich Stickstoff an der durch das Ausheizen präparierten, Aluminium-terminierten Oberfläche an. Hierdurch entsteht eine dünne AlN-Schicht, welche die Nukleation erleichtert. In der Reflektometrie ist dieser Schritt nicht zu detektieren, da AlN bei der verwendeten Wellenlänge von 670 nm einen ähnlichen Brechungsindex wie das Saphir aufweist (AlN: $1,95$ [99] / Saphir: $1,76$ [100]) und zudem nur die Oberfläche des Substrates in AlN verwandelt wird.

Die Nukleationsschicht wird bei niedrigen Temperaturen um $550\text{ }^{\circ}\text{C}$ abgeschieden. Die niedrige Temperatur setzt die Mobilität der Atome auf der Wachstums-Oberfläche herab, so dass sich Inseln mit einer geringen Strukturgröße von einigen 10 nm bilden (siehe AFM-Aufnahme (a) in Abbildung 2.2). Da diese Temperatu-

ren kein thermodynamisches Gleichgewicht ermöglichen, ist zudem das Wachstum durch kinetische Prozesse auf der Wachstums-Oberfläche begrenzt. Dies führt dazu, dass sich auch thermodynamisch ungünstige Phasen (kubisch und amorph) in der Nukleationsschicht bilden. Die optimale Dicke dieser Schicht beträgt etwa 15 bis 20 nm [21, 101]. Für das Wachstum der Nukleationsschicht werden Wachstumspareparameter gewählt, bei denen auf der Wachstums-Oberfläche weitgehend stöchiometrische Bedingungen herrschen. Während die Dissoziation von TMG bei diesen Temperaturen nur schwach variiert, ist das Stickstoff-Angebot an der Oberfläche von der Temperatur abhängig. Um stabile Wachstums-Bedingungen zu gewährleisten, wird unter leicht Stickstoff-reichen Bedingungen gewachsen, so dass kleine Temperatur-Änderungen nicht die Wachstumsrate und somit die Dicke beeinflussen können.

In der Reflektometrie ist das Wachstum der Nukleationsschicht als ein Anstieg der Reflektivität der Probe zu sehen, da GaN mit ca. 2,4 (hexagonales Material bei 670 nm/550 °C [95]) einen höheren Brechungsindex als Saphir aufweist (Punkt (a) in Abbildung 2.2). Auf Grund der vorhandenen kubischen und amorphen Phasen in dieser Schicht wird wegen der kleineren Bandlücken der effektive Brechungsindex höher liegen. Da die Schicht sehr dünn ist und somit die zu erwartende effektive Oberflächenrauigkeit maximal im Bereich von 10 nm liegt, ist die Reflektivität im wesentlichen durch die Schichtdicke gegeben. Daher ermöglicht die Reflektometrie eine gute Kontrollmöglichkeit für das Dickenwachstum der Nukleationsschicht. Die Reflektivität bei der optimalen Dicke der Nukleationsschicht liegt im Bereich von 1,7 bis 2,3 bezogen auf die Reflektivität des Saphirs.

In der Rekristallisationsphase wird die Schicht auf die normale GaN-Wachstums-Temperatur von 1030 °C bis 1050 °C hochgeheizt und bei dieser Temperatur für ca. 100 – 200 s belassen. Bei dieser Temperatur nimmt der Massentransport auf der Oberfläche zu, da die Temperatur oberhalb der Dekompositionstemperatur von GaN liegt. Die Oberfläche wird durch den vorhandenen Ammoniak-Fluss stabilisiert, so dass die Dekomposition begrenzt wird und Transportprozesse auf der Oberfläche gefördert werden. Da die kubische und amorphe Phase des GaN thermodynamisch instabiler ist, kommt es zu einer Rekristallisation der Nukleationsschicht. So wachsen hexagonale Keime auf Kosten von amorphem und kubischem Material. Am Ende der Rekristallisationsphase benetzt die GaN Schicht nicht mehr das Substrat und es bleiben einzelne hexagonale Inseln mit einem typischen Durchmesser von 200 nm übrig (AFM-Aufnahme (b) in Abbildung 2.2).

Durch die Erhöhung der Temperatur steigt zunächst der Brechungsindex des Materials, was in einer Zunahme der Reflektivität zu beobachten ist. Während des Hochrampens der Temperatur beginnt dann oberhalb von 800 °C die Rekristallisation, die durch die starke Aufrauung der GaN-Schicht als eine Abnahme der Reflektivität zu sehen ist. Auf einem Großteil der Fläche verschwindet die Benetzungsschicht fast vollständig, so dass sich die Reflektivität der des Saphirs annähert. Am Ende der Re-

kristallisation ist oft ein leichter Anstieg der Reflektivität zu sehen, der durch die größer werdenden Inseln, die auf der (0001)-Fassette eine geringe Oberflächenrauigkeit aufweisen, hervorgerufen wird (Reflektometriekurve Punkt (b) in Abbildung 2.2).

Das Wachstum der Epitaxie-Schicht wird am Ende der Rekristallisationsphase direkt durch das Zuschalten des Ga-Precursors initiiert. Von den aus der Rekristallisation verbliebenen hexagonalen Inseln [102] startet das Wachstum sowohl über die (0001)-Fassette in c-Richtung als auch über die $\{10\bar{1}1\}$ -Fassetten in lateraler Richtung [103]. Diese Inseln wachsen zunächst fast versetzungsfrei. Das relative Verhältnis von lateraler zu vertikaler Wachstums-Geschwindigkeit ist durch verschiedene Wachstumsparameter gegeben. So verstärkt ein höherer Ammoniak-Fluss das Wachstum in lateraler Richtung, da so die instabileren $\{10\bar{1}1\}$ -Fassetten durch das höhere Stickstoff-Angebot stabilisiert werden und durch den gleichzeitig geringeren Wasserstoff-Partialdruck diese Fassetten weniger durch Wasserstoff angegriffen werden.

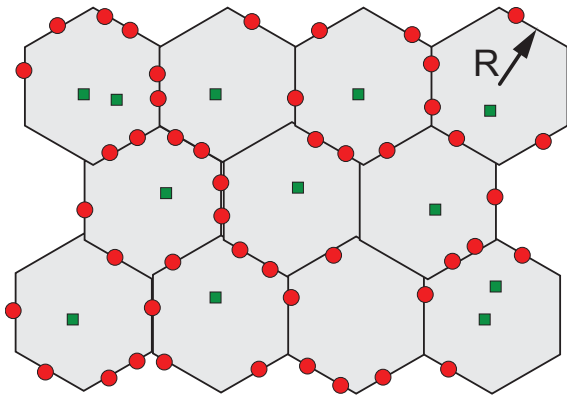
Durch das laterale Überwachsen nimmt zunächst die Rauigkeit der Schicht zu. Durch die unterschiedliche Dicke der einzelnen Inseln kommt es zu destruktiver Interferenz zwischen den Reflexen der unterschiedlichen Inseln. Erreicht diese Inhomogenität Werte, die in der Größenordnung von $\lambda/(2n)$ liegen, so geht die Reflektivität der Schicht gegen Null (siehe Punkt (c) in Abbildung 2.2). Im weiteren Verlauf koaleszieren die einzelnen Inseln und bilden einen kompakten Film. Während der Koaleszenz der Inseln nimmt die Reflektivität der Probe wieder zu und es werden zunehmend Oszillationen in der Reflektometrie sichtbar, die durch Schichtdickeninterferenzen der dicker werdenden Schicht hervorgerufen werden (Punkt (d) in Abbildung 2.2).

Bei der Koaleszenz der Inseln muss an den entstehenden Korngrenzen die zwischen den Körnern bestehende Verdrehung und Verkipfung durch Schrauben- bzw. Stufenversetzungen kompensiert werden. Insbesondere die Verdrehung zwischen den einzelnen Inseln, die in der Nukleationsschicht ca. $1,4^\circ$ beträgt [104], führt zu einer hohen Versetzungsdichte an den Korngrenzen. Eine solche Verdrehung würde zu einer Stufenversetzungsdichte entlang der Korngrenze in der Größenordnung von $1 \cdot 10^5$ 1/cm führen. Auf Grund dessen ist die Stufenversetzungsdichte in dem Kristall stark von der Korngröße abhängig.

2.1.2. Reduktion der Defektdichte

Einfluss der Koaleszenz

Mit dem Ansatz, dass die Versetzungsdichte hauptsächlich aus der Koaleszenz der Körner entspringt, wurde versucht, durch Variation der Wachstums-Bedingungen diese Defektdichte zu reduzieren. In Untersuchungen mittels AFM, TEM und HRXRD



- Stufenversetzung
- Schraubenversetzung

Abbildung 2.3.: Verteilung von Stufen- und Schraubenversetzungen im koaleszierten GaN-Kristall.

stellte sich heraus, dass die Stufenversetzungsdichte recht stark mit den Wachstumsparametern variierten, während die Versetzungen mit Schraubenanteil im Wesentlichen hiervon unberührt blieben. Geht man von einer modellhaften Verteilung der Defekte aus, bei der die Stufenversetzungen an den Korngrenzen entstehen, während die Schraubenversetzungen statistisch über den Kristall verteilt sind (siehe Abbildung 2.3), so ist die Gesamtzahl der Stufenversetzungen N_D gleich dem Produkt aus der Liniendichte der Defekte λ und dem Umfang des Kornes U :

$$N_D = U \cdot \lambda = 6r \cdot \lambda \quad (2.1)$$

r ist hierbei der Radius eines Kornes. Um die Versetzungsdichte D zu bestimmen, muss die Anzahl der Versetzungen N_D auf die Grundfläche A des Kornes bezogen werden:

$$D = \frac{N_D}{2A} = \frac{N_D}{3r^2\sqrt{5/4}} = \frac{2\lambda}{r\sqrt{5/4}} \quad (2.2)$$

Der zusätzliche Faktor von 1/2 ergibt sich daraus, dass an jeder Korngrenze zwei Körner beteiligt sind. Die Defektdichte hängt nach Formel 2.2 reziprok mit der Korngröße zusammen. Die Liniendichte λ hängt hierbei für Stufenversetzungen mit dem Betrag b des Burgersvektors der Versetzung parallel zu der Normalen der Korngrenze und der Verdrehung α zwischen den Körnern wie folgt zusammen:

$$\lambda = \tan(\alpha)/b \quad (2.3)$$

Die Korngröße kann mittels der Reflektometrie durch Auswerten der Transienten bestimmt werden. Da das Wachstum nur über bestimmte Fassetten stattfindet, ist der

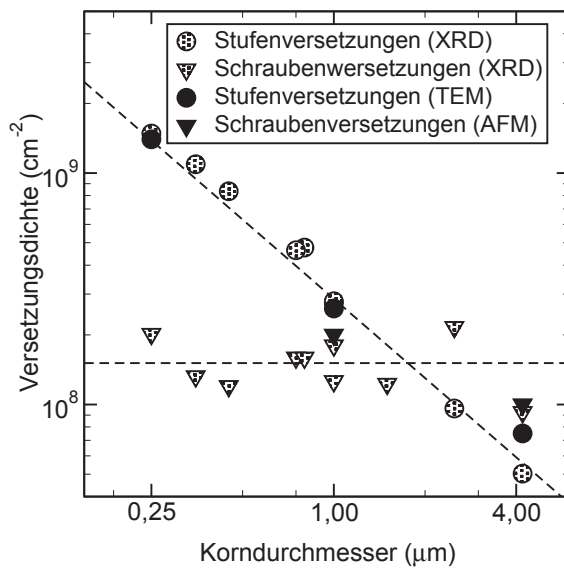


Abbildung 2.4.: Stufen- und Schraubenversetzungsdichte in Abhängigkeit der Korngröße.

Reflektionsgrad im Maximum einer Schichtdickenoszillation mit dem Koaleszenzgrad der Probe verbunden. Zusätzlich wurde das Verhältnis von lateralem zu vertikalem Wachstums mittels AFM an unkoaleszierten Proben für verschiedene Wachstumsparameter bestimmt, so dass über dieses Verhältnis aus der Dicke, die zur Koaleszenz der Schicht notwendig ist (Koaleszenzdicke), die Korngröße bestimmt werden konnte. Von diesen Proben wurde mittels Röntgendiffraktometrie, TEM und AFM die Versetzungsdichte ermittelt und ist in Abbildung 2.4 gegenüber der Korngröße aufgetragen. In dieser doppellogarithmischen Auftragung ist der reziproke Zusammenhang zwischen Korngröße und Stufenversetzungsdichte zu sehen, während sich die Schraubenversetzungsdichte von der Korngröße weitestgehend unabhängig zeigt. Die Abflachung der Abnahme der Stufenversetzungsdichte bei hohen Korndurchmessern ist auf eine zusätzliche statistische Verteilung von Versetzungen mit Stufenanteilen zurückzuführen, die eine ähnliche Dichte die der Schraubenversetzungen aufweisen.

Die Auswertung der Steigung gemäß des Modells in Gleichung 2.2 ergibt eine Versetzungsdichte entlang der Korngrenzen von ca. 10^4 1/cm. Dieser Wert entspricht einer mittleren Verdrehung der Körner zueinander von $0,1^\circ$ und liegt somit um eine Größenordnung unter der Verdrehung der Keime am Ende der Rekristallisation [104]. Es ist zu vermuten, dass beim lateralen Überwachsen eine Selektion stattfindet: Während in der Untersuchung der Nukleationsschicht sämtliche Phasen detektiert werden, setzen sich beim lateralen Überwachsen nur die Keime durch, die hinlänglich gut in (0001)-Richtung ausgerichtet sind. Die Halbwertsbreiten von ϕ -scans aus der hochauflösenden Röntgenbeugung an diesen Proben weisen Halbwertsbreiten von etwa $0,2^\circ$ auf. Diese ϕ -scans sollten direkt die Verteilungsfunktion der Verdrehung der Körner wiedergeben. Da bei dieser Messung der Schlitz des Analysators in

der Ebene liegt, die durch die Drehung um ϕ erzeugt wird, kommt es zu einer Faltung mit der Gerätefunktion des Analysators. Daher liegen die tatsächlichen Verdrehungen der Körner unterhalb der in diesen Messungen bestimmten Halbwertsbreite. Die aus der Abnahme der Defektdichte bestimmte Verdrehung der Körner stimmt jedoch zumindest in der Größenordnung mit den Halbwertsbreiten aus den Röntgenuntersuchungen überein.

In der Anfangsphase dieser Arbeit wurde das Nukleationsverhalten unter der Variation einer Vielzahl der Wachstumsparameter durchgeführt, aus denen auch die oben aufgeführten Daten entspringen. Eine genaue Beschreibung dieser Optimierung findet sich in der Dissertation von Tim Böttcher [95]. Als Ergebnisse dieser Untersuchungen seien an dieser Stelle zu nennen:

- Die Druckverhältnisse im Reaktor beeinflussen die Korngröße stark. Durch einen höheren Wasserstoff-Partialdruck bei höherem Gesamtdruck während des Wachstums der Nukleationsschicht wird die Anzahl der verbleibenden Nukleationskeime reduziert. Die typische Korngröße liegt bei Atmosphärendruck (700 Torr) in der Größenordnung von μm , bei Drücken um 100 Torr in der Größenordnung von einigen 100 nm.
- Ein geringer Ammoniak-Fluss und damit höherer Wasserstoff-Partialdruck während des Wachstums der Nukleationsschicht und der Rekristallisation hat eine geringere Nukleationsdichte zur Folge. Der Einfluss ist jedoch nicht so stark wie der des Gesamtdruckes.
- Ein höherer Ammoniak-Fluss während des Überwachsens führt zu einer höheren lateralen Wachstumsrate und beschleunigt den Koaleszenz-Prozess. Im Bereich der verwendeten Wachstumsparameter konnte bei Atmosphärendruck das Verhältnis von lateralem zu vertikalem Wachstum von 1 bis 4 variiert werden.

SiN-*in-situ* Mikromasken

Wie aufgeführt, lässt sich durch die Variation der Wachstumsparameter die Defektdichte entscheidend beeinflussen. Eine geringe Defektdichte ist aber immer verbunden mit einer hohen Koaleszenzdicke. Dieses führt zu hohen GaN-Pufferschichtdicken, die zum Erreichen einer Stufenversetzungsdichte von 10^8 $1/\text{cm}^2$ im Bereich von einigen μm liegen. Wie in Kapitel 1.2 beschrieben, wird das ELOG-Verfahren verwendet, um die Versetzungsdichte oberhalb der Isolatorstreifen auf Werte unterhalb von 10^6 $1/\text{cm}^2$ zu drücken. Diese Methode erfordert jedoch eine aufwändige *ex-situ*-Prozessierung und konnte bisher in unseren Laboren nicht realisiert werden. In Anlehnung hieran wurde zuerst von Tanaka *et al.* [105] ein Verfahren

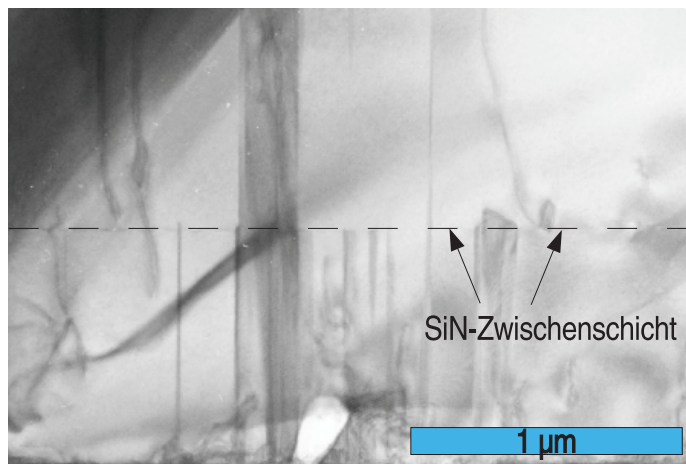


Abbildung 2.5.: TEM Querschnittsaufnahme einer GaN-Schicht mit SiN-Zwischenschicht im Hellfeld entlang der $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ -Achse.

vorgeschlagen, bei dem *in-situ* eine dünne Schicht SiN abgeschieden wird, die eine Dicke im Bereich einer Bilage aufweist. Diese Schicht zeichnet sich dadurch aus, dass sie die Oberfläche des GaN nicht vollständig bedeckt, sondern Öffnungen lässt, aus denen das GaN beim weiteren Prozess wächst. Das Wachstum von GaN auf der SiN-Zwischenschicht wird durch den geringen Haft-Koeffizient von GaN effektiv unterdrückt. Hierdurch kommt es zu einem dreidimensionalen Inselwachstum aus den Öffnungen der SiN-Schicht. Es folgt ähnlich der Nukleationsphase ein laterales Überwachsen der SiN-Schicht und es findet eine erneute Koaleszenz des GaN statt.

In Abbildung 2.5 ist eine solche Probe, die mit einer SiN-Zwischenschicht hergestellt wurde, abgebildet. Es ist zu sehen, dass die Versetzungsdichte an der SiN-Schicht deutlich reduziert wird. Durch diese Methode konnten die Stufenversetzungsdichten von typischer Weise $2 \cdot 10^9$ $1/\text{cm}^2$ auf einen Wert $2 \cdot 10^8$ $1/\text{cm}^2$ reduziert werden. Der Mechanismus, der zu der Abnahme der Versetzungsdichte führt, ist bis jetzt noch nicht eindeutig geklärt. In TEM-Oberflächenaufnahmen ist zu sehen, dass sich in der SiN-Schicht Versetzungsschleifen bilden, in denen sich zwei Versetzungen mit entgegengesetzt gleichem Burger-Vektor annihilieren. Es kann vermutet werden, dass sich das SiN bevorzugt an Versetzungen anlagert, da hier eine erhöhte Anzahl von freien Bindungen vorliegt. Durch Punktdefekte an dem SiN-Interface könnten die Versetzungen in die Wachstumsebene abgebogen werden. Ebenso ist auch vorstellbar, dass die Versetzungen abgebogen werden, wenn sie beim lateralen Überwachsen durch eine $\{10\bar{1}1\}$ -artige Fassade treten, wie es aus ELOG-Proben bekannt ist [66, 65, 106].

Eine genaue Analyse des Wachstums der SiN-Zwischenschichten findet sich in der Diplomarbeit von Jens Dennemarck, die in unserer Arbeitsgruppe entstanden ist [107].

Auf Grund des doppelten Koaleszenzprozesses sind die resultierenden Dicken einer Puffer-Schicht mit SiN-Zwischenschicht vergleichbar mit spät koaleszierten Pro-

ben, die eine ähnliche Defektdichte haben. Der wesentliche Vorteil dieses Prozesses ist seine Stabilität: Um eine geringe Defektdichte zu erreichen, müssen die Nukleationskeime weit voneinander entfernt sein. Auf Saphir kann es hier zu der Nukleation von unerwünschten Phasen auf dem Saphir kommen, die das Wachstum stören. Im Falle der SiN-Zwischenschichten ist diese Gefahr wesentlich geringer, da bei beiden Koaleszenzen die Nukleationsdichte hoch ist. Zum Anderen ist der Haftkoeffizient auf SiN wesentlich kleiner als auf Saphir, so dass die Nukleation auf der Maske stärker unterdrückt ist.

Dieses Verfahren ist jedoch in seiner Wirksamkeit begrenzt, da es nicht, wie es bei ELOG der Fall ist, ausgezeichnete Gebiete existieren, die defektfrei sind, sondern nur eine statistische Reduktion der Versetzungsdichte stattfindet. Zudem ist es notwendig Versetzungsschleifen zwischen Defekten mit antiparallelem Burger-Vektor zu erzeugen. Die Annihilationswahrscheinlichkeit zweier solcher Defekte sinkt mit dem Abstand der Versetzungen, so dass man durch mehrmalige Wiederholung des Prozesses keine weitere Verbesserung erreicht.

2.1.3. Wachstumsparameter

In einer Laserstruktur finden sich eine Vielzahl von verschiedenen Schichten wieder, die alle ihrer eigenen Optimierung bedürfen. Während die Optimierung der p-dotierten Schichten im Rahmen dieser Arbeit in Kapitel 3 erläutert wird, soll an dieser Stelle ein kurzer Überblick über die Parameter der einzelnen Schichten gegeben werden. In Tabelle 2.1 sind hierzu die Wachstumsparameter der Laserstruktur, mit der erstmals Lasing in unserer Arbeitsgruppe erreicht werden konnte, dargestellt.

Die Nukleation wurde gemäß des mehrstufigen Prozesses, wie er in Abschnitt 2.1.1 beschrieben wurde, ausgeführt. Ein guter Kompromiss zwischen geringer Defektdichte und Koaleszenzdichte wurde bei einem Reaktordruck von 200 Torr erzielt. Das zunächst hohe Gruppe-V zu Gruppe-III Verhältnis von ca. 2500 sichert hohe laterale Wachstumsraten und eine schnelle Koaleszenz. Diese Pufferschicht wurde undotiert gewachsen, da Silizium als anti-Surfactant wirkt und damit den Koaleszenzprozess beeinflussen könnte. Auf dieser Pufferschicht wurde eine 1,5 µm dicke Si-dotierte GaN-Schicht abgeschieden, deren Ladungsträgerdichte bei $2 \cdot 10^{18} \text{ 1/cm}^2$ liegt. Für diese Schicht wird der Reaktordruck auf 100 Torr herabgesetzt, um eine höhere Wachstumsrate zu erreichen. Die Schichtdicke wurde möglichst gering gehalten, um eine parasitäre Führung der Lasermode in diesem Bereich zu vermeiden.

Als Deckschicht wird hierauf eine 500 nm dicke Schicht mit 7 % Aluminiumanteil gewachsen. Die Limitierung auf diese Schichtparameter ergibt sich aus der kleineren Gitterkonstante von AlGaIn, wodurch die Deckschichten unter erheblicher tensiler Verspannung aufwachsen. Übersteigt die Verspannungsenergie einen kritischen Wert, wird diese durch Rissbildung abgebaut [108]. Ein Reißen der Schicht hätte zur

Schicht	Dicke (nm)	Dauer (s)	Temp. (C)	Druck (Torr)	NH ₃ (slm)	TMG (sccm)	TMA (sccm)	TMI (sccm)	Cp ₂ Mg (sccm)	SiH ₄ (sccm)
Ausheizen	-	600	1050	200						
Nitridation	-	100	790	200	1,3					
Nukleation-GaN	20	60	530	200	3,7	44,4				
Rekristallisation	-	240	530-1030	200	5					
Rekristallisation	-	140	1030	200	5					
GaN-Koaleszenz	300	700	1030	200	5					
GaN-Koaleszenz	1500	3000	1030	200	5	47				
GaN:Si	1200	2400	1030	100	5	47				10
Al _{0,7} Ga _{0,3} N:Si	500	1010	1030	75	4	36,1	18			8
GaN:Si	100	200	1030	100	5	47				10
GaN:Si	6	132	750	700	3	4,5				1
InGaN	4	80	750	700	3	4,5		400		
GaN	6	132	750	700	3	4,5				
Al _{0,2} Ga _{0,8} N:Mg	20	400	750	100	3	6	11		140	
GaN:Mg	80	600	1050	100	5	20			400	
Al _{0,7} Ga _{0,3} N:Mg	500	3000	1050	100	5	20	10,5		425	
GaN:Mg	80	600	1050	100	5	20			400	

Precursor		NH ₃	TMG	TMA	TMI	Cp ₂ Mg	SiH ₄
Bubblen-Temperatur (°C)			0	20	25	23	
Bubblen-Druck (Torr)			1500	1500	1000	900	
Gleichgewichts-Dampfdruck (Torr)			86,44	8,74	2,58	0,036	
Umrechnungsfaktor (μmol/sccm)		44,64	2,03	0,259	0,114	18E-3	45E-6

Tabelle 2.1.: Wachstumsparameter einer Laserstruktur.

Folge, dass sich an den Rissen Kurzschlüsse zwischen n- und p-Gebiet ausbilden. Zudem würde die Lasermode an den Rissen gestreut werden. Die Deckschicht wird bei einem Reaktordruck von 75 Torr gewachsen, da das TMA zu starken Vorreaktionen neigt, die durch einen geringeren Reaktordruck reduziert werden.

Demgegenüber müssen die Indium-haltigen Quantentröge bei hohen Drücken (hier: 700 Torr) und geringeren Temperaturen (780 °C) gewachsen werden, da InN eine geringere thermische Stabilität gegenüber dem GaN aufweist. Für die Quantentrogregion muss als Trägergas Stickstoff verwendet werden, da die Ätzwirkung des Wasserstoffs gegenüber InN sehr hoch ist und bei Vorhandensein von Wasserstoff ein Einbau von Indium unmöglich ist [109].

Hinter dem letzten Quantentrog ist eine weitere GaN-Barriere eingefügt, um den Einschluss der Ladungsträger in allen Quantentrögen gleich zu gestalten. Nach dieser GaN-Barriere wurde die AlGaIn-Blockschicht gewachsen, die ein Eindringen der Elektronen in das p-Gebiet verhindern soll. Diese Blockschicht wird noch bei den niedrigen Temperaturen des InGaIn-Wachstums hergestellt, um eine thermisch stabile Oberfläche in der darauffolgenden Wachstumsunterbrechung während des Hochheizens auf Wachstumstemperaturen von 1050 °C zu haben. Die Magnesium-dotierten Schichten wurden bei relativ geringen Wachstumsraten und einem hohen molaren Gruppe-V zu Gruppe-III Verhältnis von ca. 5500 hergestellt, um eine ausreichende Dotierung mit Magnesium zu erhalten (siehe Kapitel 3).

Die obere Deckschicht ist symmetrisch zu der unteren hergestellt und hat die selben Parameter bezüglich Komposition und Dicke. Als letztes in der Struktur wird eine 100 nm dicke GaN-Kontaktschicht aufgebracht, welche die Kontaktierbarkeit der Struktur gewährleistet.

In Abbildung 2.6 ist die daraus resultierende Laserstruktur dargestellt. Die wesentlichen Punkte, die gegenüber vorherigen Strukturen verändert wurden, waren die Verspiegelung der Fassetten, die weitere Optimierung des aktiven Gebietes und die Verbesserung der Leitfähigkeit der p-dotierten Schichten. Die Optimierung der p-dotierten Schichten wurde anhand der Analyse der Bildung der pyramidalen Defekte gemacht, wie es in Abschnitt 3.4 beschrieben wird. In der Tat zeigt diese Laserstruktur keine pyramidalen Defekte, wie es in der TEM-Aufnahme in Abbildung 2.6 zu sehen ist.

2.2. Prozessierung

Die Prozessierung der Laserdioden wurde in Kooperation mit dem Institut für Mikro- und Optoelektronik an der École Polytechnique Fédérale de Lausanne von Christoph Zellweger vorgenommen. Eine detailliertere Beschreibung der Prozessierungstechnologie wird sich in der aus dieser Kooperation hervorgehenden Dissertation

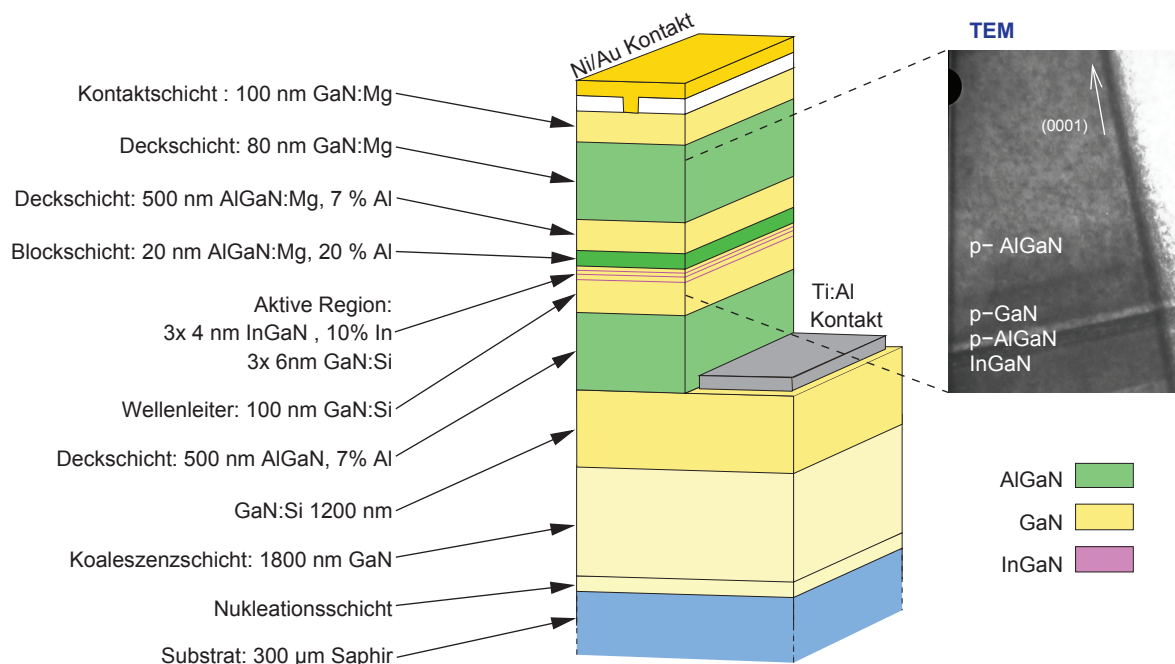


Abbildung 2.6.: Laserstruktur der ersten in Bremen hergestellten, funktionierenden Laserdiode. In der TEM-Aufnahme ist das p-Gebiet der Diode zusehen, das keine pyramidalen Defekte aufweist.

von Christoph Zellweger finden [110]. An dieser Stelle sollen daher nur die Grundlagen der Prozessierung wiedergegeben werden. In dem ersten der beiden folgenden Abschnitte wird zunächst ein Überblick über den Prozessablauf gegeben, um in den darauffolgenden Abschnitten näher auf das kristallographische Ätzen der Fassetten einzugehen.

2.2.1. Resonatorstrukturen

Die beiden wesentlichen Aufgaben, welche die Prozessierung zu leisten hat, sind die Kontaktierung der Struktur und die Präparation des Resonators. Prinzipiell kann man bei Halbleiterlasern mit lateralem Resonator drei verschiedene Strukturtypen unterscheiden, die durch verschiedenartige Resonatoren ausgezeichnet sind:

- Gewinn-geführte Strukturen / Injektionsstreifenlaser
- Index-geführte Strukturen / Rippenwellenleiter
- Laserstrukturen mit verteilter Rückkopplung

In Abb. 2.7 sind diese drei Laserstrukturen dargestellt. In diesen Strukturen nimmt von a) nach c) die Struktur einen größeren Einfluss auf die Wellenführung.

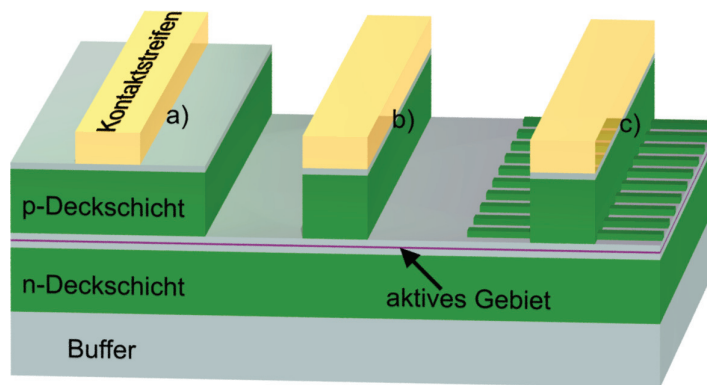


Abbildung 2.7.: Laserstrukturen mit lateraler Wellenführung: a) Gewinn-geführte Struktur, b) Rippenwellenleiter mit Index-Führung und c) Laser mit verteilter Rückkopplung.

In den Gewinn-geführten Strukturen wird der Resonator durch die Endflächen des Kristalls gebildet, die als Spiegel fungieren und somit die Resonatorlänge definieren. Über den Kontaktstreifen wird der Strom in ein definiertes Gebiet des aktiven Mediums injiziert. Hierdurch wird senkrecht zu der Resonatorlängsachse der komplexe Brechungsindex moduliert und die optische Welle geführt. Die Wellenführung geschieht hierbei allein durch den Gewinn in dem Injektionsgebiet, währenddessen durch das Absinken des Realteils des Brechungsindex im invertierten Gebiet ein anti-guiding auftritt. Bei einer solchen Struktur kann sich zudem der Strompfad im p-dotierten Bereich aufweiten, so dass der invertierte Bereich im aktiven Gebiet nur schlecht definiert ist. Der Vorteil einer solchen Struktur ist jedoch seine einfache Prozessierung.

Um eine bessere Führung des Stromes und der optischen Welle zu erreichen, wird in den Rippenwellenleiterstrukturen die Kontaktschicht und die p-Deckschicht weggeätzt, so dass nur ein Steg auf der Breite des Injektionsstreifens stehen bleibt. Hierdurch ist der Strompfad durch das aktive Gebiet klar definiert und die optische Welle wird durch den Brechungsindexsprung an der Stegkante geführt. Die Prozessierung einer solchen Struktur ist jedoch mit einem wesentlich höheren Aufwand verbunden.

Der Fabry-Perot Resonator eines Halbleiterlasers ist über 1000mal länger als die Wellenlänge des emittierten Laserlichtes. Hierdurch kommt es in Laserstrukturen mit Fabry-Perot-Resonatoren oftmals zu einer mehrmodigen Emission. In den Laserstrukturen mit verteilter Rückkopplung (englisch: Distributed Feedback, DFB) werden zusätzlich quer zum Laserstreifen Stege auf der Struktur stehen gelassen oder als Isolatormaske aufgebracht. Der Periode dieser Struktur ist hierbei die Hälfte der Emissionswellenlänge des Lasers oder ein Vielfaches hiervon. Dieses führt zu einer periodischen Modulation des effektiven Brechungsindex, an der die Lasermode reflektiert wird. Hierdurch wird eine Selektion der Lasermode möglich, die gemäß den Bragg-Bedingungen an der periodischen Struktur reflektiert wird.

2.2.2. Prozessablauf

Die in Lausanne prozessierten Laser wurden sowohl als Gewinn-geführte Strukturen als auch als Rippenwellenleiterstrukturen prozessiert. Im Laufe der Zeit wurden diverse Prozessabläufe getestet. An dieser Stelle soll nicht auf die Vielzahl der verwendeten Techniken eingegangen werden, sondern vielmehr ein Überblick über den generellen Ablauf der Prozessierung gegeben werden.

Beispielhaft ist hierzu in Abbildung 2.8 ein Prozessschema zur Herstellung einer Gewinn-geführten Laserstruktur vereinfacht dargestellt. Dieses ist der Prozess, mit dem erstmals Laser erfolgreich aus den an unserem Institut gewachsenen Laserstrukturen in Lausanne prozessiert werden konnten.

Am Anfang des Prozesses steht zunächst eine Reinigung der Oberfläche mit Aceton, Methanol und Isopropanol (AMI). Hiernach wird die p-Dotierung durch ein thermisches Ausheilen (englisch: Annealing) in Stickstoffatmosphäre bei 900 °C für 30 Sekunden und bei 600 °C für 5 Minuten aktiviert. In einem PECVD-Prozess (englisch: Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition) wird dann 400 nm des Isolators SiO₂ aufgebracht und mit positivem Photolack in einem Spin-off Prozess beschichtet. Die dazugehörige Lithographiemaske, welche die Resonatorstruktur definiert, wird aufbelichtet und der Lack bei 120 °C gehärtet. Nachdem die Maske präpariert ist, wird der Photolack außerhalb der aufbelichteten Maske mit Hilfe eines Sauerstoffplasmas entfernt und der Isolator mit einem Plasma unter Verwendung von CF₄ geätzt. Die Lithographiemaske kann nun mit Lösungsmitteln (AMI) entfernt werden und der Resonator wird unter Verwendung des Isolators als Maske mit einem Argon-Plasma unter Zuhilfenahme von Cl₂ geätzt. An diesem Punkt (Bild c) in Abbildung 2.8) ist der Resonator prinzipiell vollständig präpariert, die Fassetten des Resonators weisen jedoch auf Grund des Trockenätzschrittes noch eine hohe Oberflächenrauigkeit auf und sind um ca. 8° gegenüber der Senkrechten verkippt.

In den nachfolgenden Schritten wird die Öffnung des Injektionsstreifens präpariert. Hierzu wird eine negativ-Maske auf die Struktur aufgebracht, belichtet, gehärtet und entwickelt. Die Öffnung wird in den Isolator mit BHF geätzt und hiernach der Photolack mit AMI entfernt. Eventuell verblieben Photolack-Reste werden unter einem Sauerstoff-Plasma entfernt und die ganze Struktur nochmals mit AMI gespült. An diesem Punkt d) in Abbildung 2.8 ist nun die Struktur vollständig bis auf die Metallisierung der Kontakte.

Hierzu wird zunächst die p-Kontakt-Öffnung mit Hilfe von oben beschriebenen Schritten definiert und die Kontaktfläche des Injektionsstreifens mit HCl deoxidiert. Als Kontaktmaterial werden 20 nm Nickel und 100 nm Gold aufgedampft. Die Metallisierung oberhalb der Maske wird in einem Lift-Off Prozess entfernt und die Struktur in AMI gereinigt. Hierauf erfolgt eine Kontrolle der Struktur mit Hilfe von Sekundärelektronenmikroskopie (SEM). Bei erfolgreicher Prozessierung werden nun die Fassetten in einer kristallographischen Ätze, die zu gleichen Teilen aus Ethylenglykol und KOH

2. Wachstum, Prozessierung und Betriebsparameter der GaN-Lasern

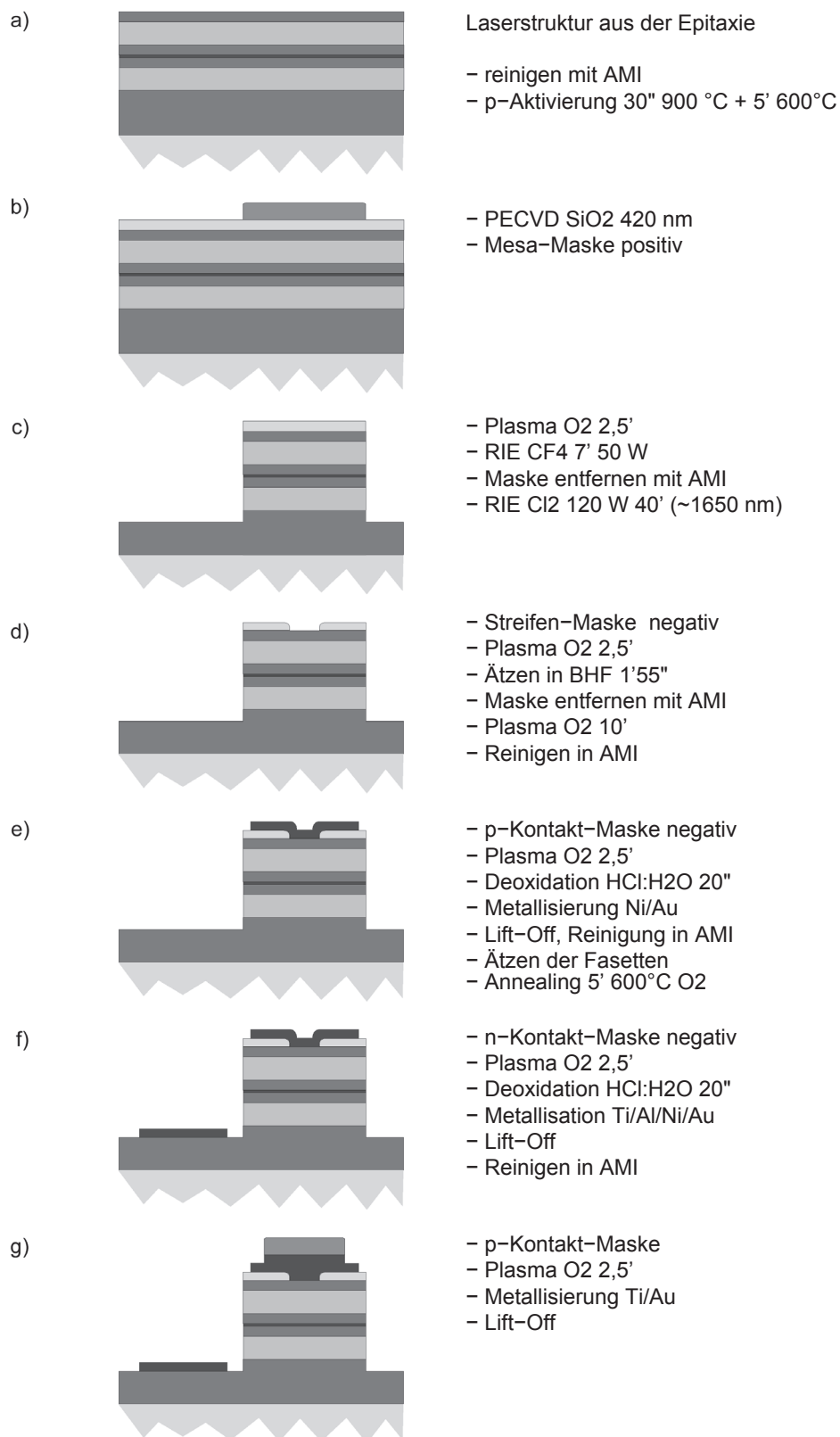


Abbildung 2.8.: Prozessablauf einer Gewinn-geführten Laserstruktur [110].

besteht bei 135 °C geätzt. Eine genauere Beschreibung der Auswirkungen dieses Schrittes werden im nächsten Abschnitt gegeben. Die Struktur wird nochmals im SEM kontrolliert und danach der Metallkontakt unter Sauerstoffplasma für 5 Minuten bei 600 °C ausgeheilt. In einem ähnlichen Prozessablauf wird nun der n-Kontakt bestehend aus 15 nm Titan, 220 nm Aluminium, 40 nm Nickel und 50 nm Gold aufgebracht. Als letztes wird der p-Kontakt durch nochmaliges Aufbringen von 10 nm Titan und 300 nm Gold verstärkt, um eine höhere Stabilität des Kontaktes im Betrieb zu gewährleisten.

Als letztes wird die Struktur mit Photolack beschichtet, um die Kontakte bei dem nachfolgenden Verspiegeln der Fassetten zu schützen. Diese Verspiegelung wurde wiederum in Bremen vorgenommen und von Christian Petter in unserer Arbeitsgruppe durchgeführt [111].

2.2.3. Präparation der Fassetten

Die Verdrehung um 30° des GaNs gegenüber dem Saphir-Substrat verhindert die Herstellung der Laserfassetten durch eine einfache Spalttechnik, wie sie bei GaAs Laserdioden angewandt werden kann. Um die Proben entlang der $\langle 11\bar{1}0 \rangle$ -Achse der GaN-Einheitszelle zu spalten, muss daher das Saphir-Substrat abgedünnt werden. Dieser Prozess ist technologisch nicht einfach zu handhaben. Alternativ hierzu können die Fassetten der GaN-Laserdioden durch reaktives Ionen-Ätzen (englisch: Reactive Ion Etching, RIE) hergestellt werden. Auf Grund der hohen Stabilität des GaNs benötigt dieser Prozessschritt einen stabilen Photolack, um eine Degeneration desselben unter den aggressiven Ätzbedingungen zu verhindern. Die mit RIE präparierten Fassetten weisen jedoch trotz der Verwendung eines stabilen Photolacks meist eine hohe Oberflächenrauigkeit auf [39], welche die Schwellströme des Lasers erhöht.

Ätzen

In Abbildung 2.9 a) ist eine Laserfasette nach dem reaktiven Ionen-Ätzen zu sehen, die nach diesem Ätzschritt eine hohe Rauigkeit aufweist und an deren Flanke Überreste stehen geblieben sind. Diese schlechte Fasette wird im Folgenden mit einer kristallographischen Nassätzbehandlung behandelt. Diese besteht aus KOH, das zu gleichem Gewichtsanteil in Ethylenglykol gelöst wird. Der Ätzschritt wird bei einer Temperatur von 135 °C ausgeführt und präpariert Fassetten der $\{10\bar{1}0\}$ -Familie. Diese Ätze zeichnet sich durch eine hohe Selektivität aus, so dass nach diesem Ätzschritt die Rauigkeit der Oberfläche weit unter der Wellenlänge des Lichtes liegt, so wie es in Abbildung 2.9 zu sehen ist. Die Ätzrate ist für aluminiumhaltige und dotierte Schichten identisch zum GaN, wodurch eine Fasette entsteht, die gespaltenen

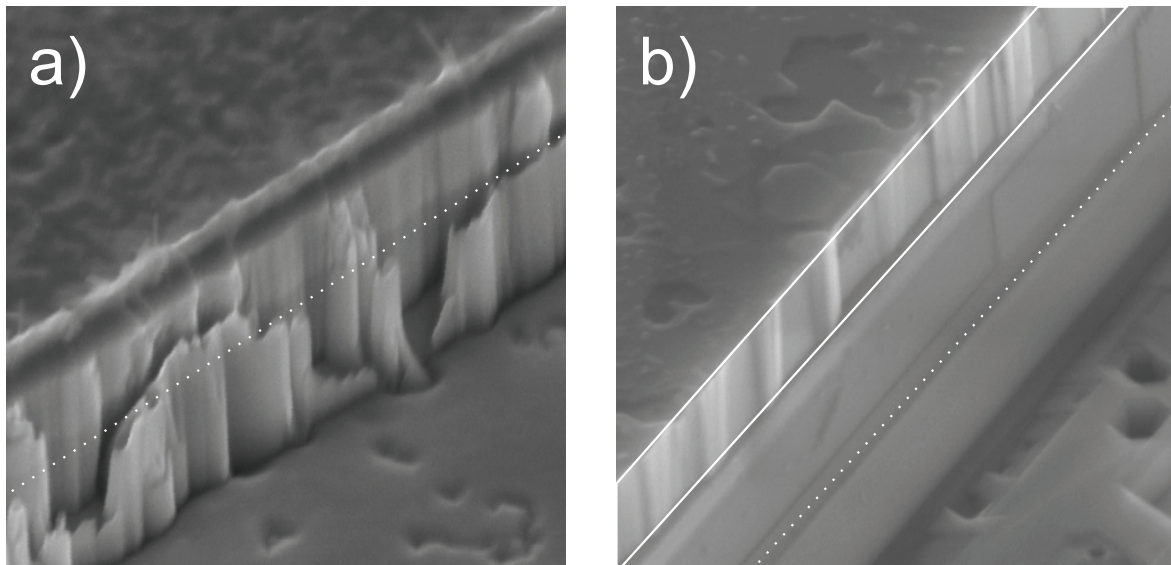


Abbildung 2.9.: Rasterelektronenmikroskopische Aufnahme der Fasette eines Laser direkt nach dem Ionenstrahlätzen (a) und nach dem kristallographischen Nassätzen mit KOH gelöst in Ethylenglykol (b). Die gestrichelten Linien markieren die Position des Quantentroges in der Struktur. In Bild (b) ist der aufgebrauchte Isolator im oberen Bereich zwischen den durchgezogenen Linien zu sehen.

Fassetten gleich kommt. Damit dieser Nassätzschritt gut funktioniert, muss vor dem Ionenstrahlätzen die Maske sehr genau entlang der kristallographischen Achse ausgerichtet sein.

Der Effekt, der sich durch eine Fehlausrichtung von wenigen Grad ergibt, ist in Abbildung 2.10 zu sehen. Um eine Fehlausrichtung zu vermeiden, kann die Lithographiemaske an der Spaltebene des Saphirs oder an eventuell vorhandenen Rissen der Laserstruktur ausgerichtet werden. Auf Grund der Verdrehung des GaNs gegenüber dem Saphir müssen im Falle einer Ausrichtung zum Saphir die Laser-



Abbildung 2.10.: Ausrichtungskreuz auf einer prozessierten Laserschicht nach dem Nassätzen, deren Maske schlecht gegenüber der kristallographischen Achse ausgerichtet war.

barren parallel zu der Spaltfläche ausgerichtet sein. Insgesamt bietet es eine hohe Reproduzierbarkeit und garantiert eine hohe Qualität der Fassetten.

Verspiegelung

Der Brechungsindex von GaN bei einer Emissionswellenlänge von 400 nm weist einen Wert von ca. 2,5 auf, daher haben selbst atomar flache Fassetten lediglich eine Reflektivität von ca 40 %. Um Lasing zu erreichen, muss jedoch folgende Bedingung erfüllt sein [112]:

$$R \exp [(\Gamma g - \alpha)L] \geq 1 \quad (2.4)$$

Hierbei ist R die Reflektivität der Fassetten, Γ der Einschluss-Faktor der optischen Welle, g der Gewinn im aktiven Gebiet, α der Verlust durch Absorption und Streuung und L die Länge des Resonators. Aus der Gleichung ist ersichtlich, dass der fürs Lasen benötigte Nettogewinn $\Gamma g - \alpha$ in der Struktur mit sinkender Reflektivität der Fassetten steigt. Um niedrige Schwellströme zu erreichen ist es daher essentiell wichtig, eine hohe Reflektivität der Fassetten zu gewährleisten. Hierzu werden die Fassetten mit Spiegeln versehen, die aus dielektrischen $\lambda/$ -Schichten bestehen, die sich im Brechungsindex unterscheiden. Die Laserstrukturen wurden hierzu mit 2-4 Paaren $\text{TiO}_x/\text{SiO}_x$ Schichten verspiegelt. Hierzu wurden Titandioxid und Siliziumdioxid unter Zugabe von Sauerstoff aufgesputtert, um die Stöchiometrie der gesputterten Schichten zu erhalten und die Bildung von metallischen Phasen zu vermeiden. Diese Dielektrika zeichnen sich durch einen hohen Unterschied in der Brechzahl aus, die bei Titandioxid je nach kristalliner Struktur 2,6 bis 2,9 und bei Siliziumdioxid 1,5 beträgt.

2.3. Betriebsparameter

Erst mit Beginn dieser Promotion startete die Forschung an GaN-basierten Laserdioden an der Universität Bremen. Daher wiesen die ersten Laserdioden, die Ende 1999 hergestellt wurden, noch sehr schlechte Betriebsparameter auf und konnten nicht zum Lasen gebracht werden. Im Rahmen dieser Arbeit gelang es dann im Februar 2002 die ersten elektrisch gepumpten Laserdioden herzustellen. Eine der wichtigsten Optimierungsschritte war hierbei die Verbesserung der p-Dotierung, die in Kapitel 3 näher erläutert wird. Die Maximierung der Leitfähigkeit des p-Gebietes schlägt sich vor allen Dingen in einem reduzierten seriellen Widerstand nieder. Um die erreichte Verbesserung darzustellen, sind in Abbildung 2.11 Strom-Spannungskennlinien einer der ersten Laserstrukturen und einer aktuellen Laserdiode gegenübergestellt. Zu sehen ist eine deutliche Reduzierung der Betriebsspannung, die vor

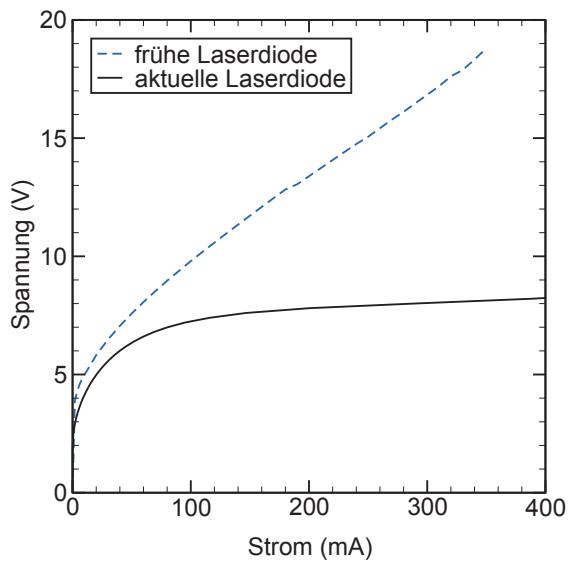


Abbildung 2.11.: IV-Kennlinien einer Struktur die zu Beginn dieser Arbeit hergestellt wurde im Vergleich zu einer Struktur, die am Ende der Arbeit entstanden ist. In diesen Strukturen beträgt die Resonatorlänge 1 mm und die Streifenbreite ist 10 μm .

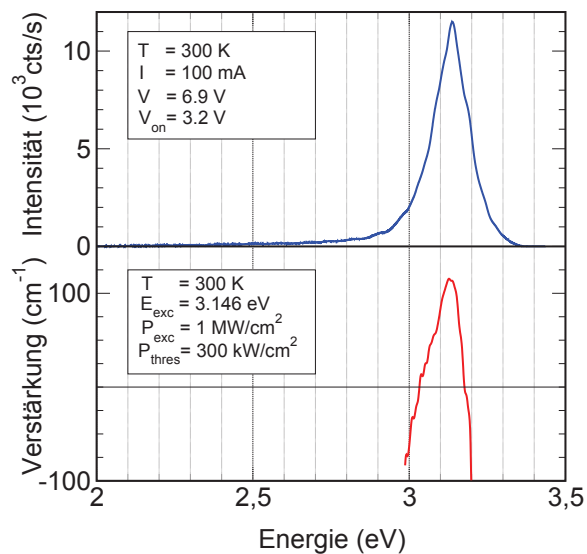


Abbildung 2.12.: Emissionsspektrum einer frühen Laserstruktur und modaler Gewinn durch optisches Pumpen.

allein aus einem geringeren differentiellen Widerstand bei Strömen oberhalb von 50 mA resultiert. Die Senkung des differentiellen Widerstandes ist im wesentlichen auf die Verbesserung der Leitfähigkeit des p-Gebietes zurückzuführen. So konnte der differentielle Widerstand von anfänglich über 30 Ω auf unter 3 Ω reduziert werden.

Auf Grund der hohen Widerstände der ersten in Bremen hergestellten Laserdioden war die Wärmeentwicklung in den Strukturen sehr hoch und sie konnten daher nur als LED betrieben werden. An diesen Strukturen konnte jedoch in Messungen mit variabler Streifenlänge, die von Martin Vehse durchgeführt wurden, bereits optisch gepumpte Verstärkung nachgewiesen werden (siehe Abbildung 2.15).

Neben der Reduktion des seriellen Widerstandes der Strukturen waren die Optimierung des aktiven Gebietes und die Verbesserung der Fassettenqualität durch kristallographisches Ätzen und der Aufbringung von dielektrischen Spiegeln die Kernpunkte, die zum Erreichen des Lasings führten. Abbildung 2.14 zeigt das Spektrum einer der Laserdioden bei einem Strom, der 10 % oberhalb des Schwellstromes liegt. Die meisten Laserdioden zeigten ein einmodiges Spektrum; es ist zur Zeit jedoch unklar, ob diese Einmodigkeit mit der Präparation der Fassetten zusammenhängt oder durch welche anderen Parameter sie beeinflusst wird. Die bisher höchste Ausgangsleistung, die innerhalb des Pulses gemessen werden konnte, beträgt 263 mW (siehe Abbildung 2.13). Typische Bedingungen für den Laserbetrieb sind Pulslängen im Be-

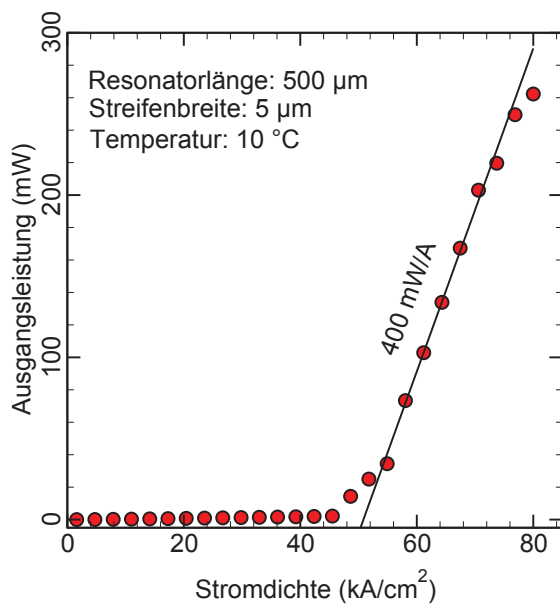


Abbildung 2.13.: Ausgangsleistung eines Lasers in Abhängigkeit der Stromdichte.

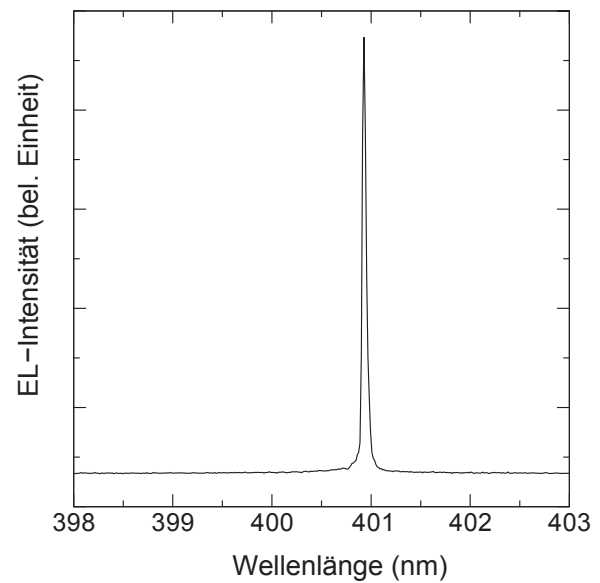


Abbildung 2.14.: Spektrum des Lasers 10 % oberhalb des Schwellstroms.

reich von 60 –100 ns, das Tastverhältnis der Pulse ist auf unter 1 % beschränkt. Diese Limitierung in den Pulsparametern ist, wie in Kapitel 4 ausgeführt wird, auf die Wärmeentwicklung in der Laserstruktur zurückzuführen. Daher stellt trotz der verringerten Widerstände die im Betrieb entstehende joulesche Wärme einen begrenzenden Parameter dar. Die starke Wärmeentwicklung liegt im Besonderen in den hohen Schwellströmen der Dioden begründet, die oberhalb von 15 kA/cm² liegen. Da diese Laser als Gewinn-geführte Strukturen prozessiert wurden, ist die hohe Schwellstromdichte zum Teil durch die Aufspreizung des Strompfades im p-Gebiet zu erklären. Dieses wird sichtbar in der Zunahme der Schwellstromdichte mit kleiner werdender Breite des Injektionsstreifens (siehe Abbildung 2.15). Nimmt man an, dass der Strompfad im aktiven Gebiet um den Betrag x zu beiden Seiten des Injektionsstreifens der Breite w_{Str} vergrößert ist, so wird die Stromdichte im Kontakt J_K mit der Stromdichte im aktiven Gebiet J_A wie folgt verknüpft sein:

$$J_K \cdot w_{Str} = J_A \cdot (w_{Str} + 2x) \Rightarrow J_K = J_A \frac{w_{Str} + 2x}{w_{Str}} \quad (2.5)$$

Mit Hilfe dieser Formel lässt sich die Abhängigkeit der gemessenen Schwellstromdichte, die auf die Breite des Kontaktes bezogen ist, von der Streifenbreite beschreiben, wenn man von einer von einer konstanten Schwellstromdichte in dem aktiven Gebiet ausgeht (gestrichelte Linie in Abbildung 2.15). Aus der Anpassung des Modells erhält man eine Schwellstromdichte im aktiven Gebiet von 4,7 kA/cm², die wesentlich geringer als die gemessenen Stromdichten ist. Das Verständnis der

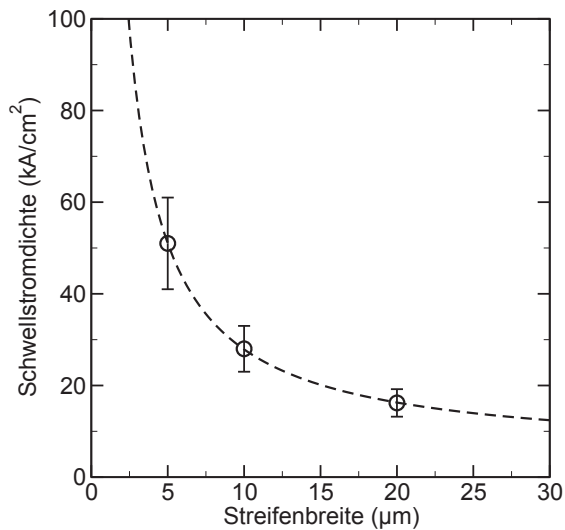


Abbildung 2.15.: Schwellstromabhängigkeit von der Streifenbreite Gewinn-geführter Strukturen.

Strompfadaufweitung ist daher für die Gewinn-geführten Strukturen wichtig und wird in Kapitel 5 näher analysiert.

Neben den Gewinn-geführten Strukturen wurden auch erste Rippenwellenleiterstrukturen prozessiert. Im Gegensatz zu den Gewinn-geführten Strukturen, die im gepulsten Betrieb bei einem Tastverhältnis von 0,1 % Lebensdauern von bis zu 5 Minuten haben, weisen die Rippenwellenleiterstrukturen deutlich geringere Lebensdauern im Bereich von einer Sekunde auf. Die mechanische Stabilität des p-Kontaktes erweist sich in diesen Strukturen als das derzeit größte Problem. Auf Grund der besseren Wellenführung und der Verringerung der Strompfadaufspreizung zeigten diese Strukturen bereits Lasing ohne eine Verspiegelung der Fassetten. Wegen der geringen Lebensdauern der Index-geführten Strukturen war es bisher nicht möglich, Leistungskennlinien der Dioden aufzunehmen.

3. p-Dotierung

In breitlückigen Halbleiter stellt die bipolare Dotierung ein großes Problem dar, da entweder die Niveaus der Donatoren oder die der Akzeptoren relativ weit vom Leitungs- respektive Valenzband entfernt liegen [113]. Der energetische Abstand zu dem jeweiligen Band muss jedoch überwunden werden, damit die Ladungsträger zu der Leitfähigkeit in den Bändern beitragen können. Ist die Aktivierungsenergie der Ladungsträger wesentlich größer als die zur Verfügung stehende thermische Energie $k_B T$, so befindet sich nur ein geringer Anteil der Ladungsträger in den freien Bandzuständen. Während bei einigen II-VI-Halbleitern die n-Dotierung schwierig ist (z.B. ZnTe), stellt die p-Dotierung bei der weit größeren Zahl breitlückiger Halbleiter (Nitride, Selenide, ZnO, CdS) das Problem dar.

Die hohe Aktivierungsenergie hat noch einen weiteren Einfluss auf die elektrische Leitfähigkeit: Da sehr hohe Mengen des Dotierstoffes eingebracht werden, um eine genügend hohe Ladungsträgerkonzentration zu erreichen ($\approx 5 \cdot 10^{19} \text{ 1/cm}^3$ bei GaN:Mg), ist die Beweglichkeit der Ladungsträger auf Grund der hohen Störstellendichte sehr gering. Zudem ist bei den Nitriden die Masse der schweren Löcher, insbesondere in (0001) Richtung, mit $m_h^{\parallel} = 1,4 \pm 0,4 m_0$ [32, 114, 33] sehr hoch. Durch die Verknüpfung der Masse mit der mittleren Geschwindigkeit der Ladungsträger liegen die typischen Beweglichkeiten der Löcher in Magnesium-dotierten Galliumnitrid bei $10 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$.

Die Dotierung von Halbleitern kann im Allgemeinen auf drei verschiedene Arten erfolgen:

- Eindiffusion
- Ionenimplantation
- *in-situ*

Während die Eindiffusion limitiert ist durch das Lösungslimit, das im thermodynamischen Gleichgewicht bestimmt ist, können durch Ionenimplantation prinzipiell beliebig hohe Dotierkonzentrationen erzeugt werden. Die Schädigung, die der Kristall durch den Implantations-Prozess erleidet, muss jedoch in vielen Materialsystemen

durch nachträgliches thermisches Ausheilen (englisch: annealing) rückgängig gemacht werden. So wurde in GaN bereits eine Dotierung mit Magnesium durch Implantation realisiert, zur Aktivierung der Dotierung ist jedoch ein Ausheilschritt bei 1100 °C nötig [115]. Eine typische Anwendung der Implantation ist die Dotierung der Kontaktregion, bei der es weniger auf gute kristalline Qualität und somit hohe Beweglichkeiten ankommt, sondern eine hohe Ladungsträgerkonzentration wichtig ist, um ohmsche Kontakte zu dem Material zu ermöglichen. Dieses Verfahren wurde z.B. an ZnCdSe-Lasern durchgeführt, die in unserem Institut hergestellt wurden und führte zu einer deutlichen Verbesserung der Kontakte [116]. Im Bereich der GaN-Laserdioden fand bisher ein solches Verfahren keine Verwendung. Grundlegende Voraussetzung für die Herstellung von GaN-Laserdioden ist daher eine hohe Kontrolle der *in-situ*-Dotierung.

In den folgenden Abschnitten über die Grundlagen der Dotierung wird zunächst ein Überblick über die möglichen Kandidaten zur p-Dotierung gegeben und erläutert, weswegen Magnesium als einziger Akzeptor für hochdotiertes p-GaN in Frage kommt. Hierbei werden grundlegende Themen, wie die Löslichkeit der Dopanden und die Aktivierungsenergie der Ladungsträger, behandelt, die wichtig für das Verständnis der Dotierbarkeit sind. Des Weiteren wird in den Grundlagen auf den Einfluss der Wachstumsoberfläche und des Magnesium-Wasserstoff-Komplexes eingegangen und die Temperaturabhängigkeit der freien Ladungsträgerdichte behandelt.

Hierauf folgend wird in den experimentellen Abschnitten auf die Dotierung des GaNs sowohl in der MBE (Kap. 3.2) als auch in der MOVPE (Kap. 3.3) eingegangen. Als gesonderter Abschnitt folgt dann die Diskussion der Bildung von pyramidalen Defekten, die als Hauptkompensationsmechanismus der Dotierung in der MOVPE identifiziert werden konnte.

3.1. Grundlagen

3.1.1. Die Kandidaten

Für die p-Dotierung von Gruppe-III-Nitriden kommen prinzipiell Elemente mit 2 und 4 Valenzelektronen in Frage, wenn sie substitutionell auf einem Gallium- (II_{Ga}) bzw. Stickstoffgitterplatz (IV_{N}) eingebaut werden. Alkalimetalle, die nur ein Valenzelektron besitzen, könnten prinzipiell auch als Akzeptoren eingesetzt werden, auf Grund der doppelten Ladung ist jedoch die Bildungsenergie des Akzeptordefektes relativ hoch. Dopanden der vierten Hauptgruppe sind amphoter, da sie in der IV_{III} -Konfiguration als Donator fungieren. Teilweise gelingt es jedoch diese Elemente zur p-Dotierung von III-V-Halbleitern zu verwenden. Zum Beispiel wird Kohlenstoff als Akzeptor in GaAs verwendet, wohingegen Silizium in demselben Materialsystem selbstkom-

pensiert eingebaut wird. Demgegenüber ist es für die Dopanden der Gruppe-I und Gruppe-II recht unwahrscheinlich auf einem Gruppe-V-Platz eingebaut zu werden, da die Größenunterschiedes zwischen Kationen und Anionen in GaN recht hoch sind.

Allgemein muss sich die Güte eines Akzeptors an den folgenden drei Kriterien messen lassen:

- Löslichkeit
- Stabilität gegenüber Kompensation (z. B. durch Einbau auf Zwischengitterplätzen)
- Aktivierungsenergie der Löcher

Nur wenn alle drei Kriterien hinlänglich gut erfüllt sind, kann eine für Bauelemente hinreichende Dotierung mit freien Lochdichten im Bereich von 10^{18} $1/\text{cm}^3$ erzeugt werden. In den folgenden Abschnitten soll diskutiert werden, welche Elemente als Akzeptoren für GaN in Frage kommen.

Bildungsenergie und Löslichkeit der Akzeptoren

Die Löslichkeit des Dopanden kann mit Hilfe der Dichte-Funktionaltheorie berechnet werden und ist durch die Bildungsenergie des Defektes gegeben. Ein bestimmender Parameter der Bildungsenergie des Defektes ist auf Grund entstehender Verspannungsenergie ein zum Wirtsplatz passender Atomradius. Insbesondere wenn der kovalente Atomradius des Akzeptor den des substituierten Atoms übersteigt, nimmt die Bildungsenergie drastisch zu [117]. Ein Einbau auf Zwischengitterplätzen tritt vor allem bei Dotieratomen auf, die einen kleinen kovalenten Atomradius besitzen. Somit sind die besten Ergebnisse zu erwarten, wenn der kovalente Atomradius eine möglichst gute Übereinstimmung mit dem zu ersetzenden Atom hat. Ein weiteres Maß für die Löslichkeit der Akzeptoren ist nach Neugebauer *et al.* die Bildungswärme in Bezug auf die Löslichkeit-limitierende Phase [117].

In Tabelle 3.1 sind die kovalenten Radien verschiedener potentieller Akzeptoren zusammengetragen, gemeinsam mit den von Neugebauer *et al.* errechneten Bildungsenergien der substitutionellen Defekte bei einer Fermi-Energie von 0 eV. Bei dieser Fermi-Energie ist die Bildungsenergie der Akzeptoren maximal und kann als Maß für die Löslichkeit der Akzeptoren dienen. Für die Elemente, für welche die Bildungsenergie eines Defektes auf Zwischengitterplatz niedriger liegt als die für den substitutionellen Defekt, sind die Bildungsenergien ebenfalls in der Tabelle aufgeführt; in diesem Fall stellt die hier eingetragene Bildungsenergie den unteren Grenzwert dar, da diese Defekte als Donatoren fungieren. Aus diesen Berechnungen ergeben sich

3. p-Dotierung

Akzeptor	limitierende Phase	ΔH_f (eV)	E^f	r_{cov} (Å)
Ga	GaN	-1,15		1,26
Gruppe-IA Li Li interst. Na K	Li ₃ N	-2,05	3,1	1,23
			-0,6	
	Na		4,2	1,54
	K		11	2,03
Gruppe-IIA Be Be interst. Mg Ca Zn	Be ₃ N ₂	-6,11	2,2	0,90
			-0,5	
	Mg		2,4	1,36
	Ca		3,8	1,74
	Zn	Zn ₃ N ₂	-0,24	2,8

Tabelle 3.1.: Bildungswärme ΔH_f bezogen auf die limitierende Phase [117], Bildungsenergie E^f [117] und kovalenter Radius r_{cov} [118] von möglichen Akzeptoren.

für Beryllium, Magnesium, Zink und Lithium die niedrigsten Bildungsenergien, womit für diese Elemente die höchste Löslichkeit zu erwarten ist. Allerdings zeigt sich auch, dass für Lithium und Beryllium die Bildungsenergie des Zwischengitterdefektes niedriger liegt, womit diese beiden Elemente für die p-Dotierung nicht in Frage kommen. Somit sind in Hinsicht auf die Löslichkeit Magnesium und Zink die beiden besten Kandidaten für die p-Dotierung.

Aktivierungsenergie

Die Aktivierungsenergie der Akzeptoren kann nicht über eine *ab-initio* Methode berechnet werden, ein theoretischer Ansatz von Wang *et al.* [119] basiert auf der **k·p**-Theorie [120, 121, 122].

Es zeigt sich, dass die mit Hilfe dieser Methode berechneten Aktivierungsenergien mit experimentell bestimmten Werten in guter Übereinstimmung sind und im GaN denselben Trends folgen wie in den anderen III-V-Halbleitern wie GaAs, InP und GaP (siehe Tab. 3.2). Lediglich die experimentell bestimmte Aktivierungsenergie für den Kohlenstoff-Akzeptor in GaN weicht von den theoretisch bestimmten Werten deutlich ab. Die in Lumineszenzuntersuchungen für den Kohlenstoffakzeptor bestimmte Bindungsenergie ähnelt jedoch der von einem intrinsisch vorhandenen Akzeptor [126].

Sowohl aus Sicht der experimentellen, als auch der theoretisch berechneten Daten, weisen die Akzeptoren Beryllium, Kohlenstoff, Magnesium und Silizium die geringsten Aktivierungsenergien auf. Silizium ist jedoch als effektiver Donator bei den Nitriden bekannt und wird auf einem Galliumgitterplatz eingebaut (Si_{Ga}). Kohlenstoff verhält sich amphoter und es konnte bisher keine signifikante p-Dotierung realisiert werden [15]. An Beryllium-dotierten pn-Strukturen wurde bereits eine

Akzeptor		Bindungsenergie (meV)							
		GaAs		InP		GaP		GaN	
		exp.	theo.	exp.	theo.	exp.	theo.	exp.	theo.
Gruppe-IIA	Be	28,0 ²	28,1		40,4	56,6 ²	56,7	250 ¹	209
	Mg	28,8	28,8	48	41,2	59,5	60,2	250	224
	Ca		30,4	43,0 ²	43,0		67,4		302
G.-IIB	Zn	30,7	30,7	46,4	47,2	69,7	70,4	340	364
	Cd	34,4	34,6	57	57,8	102,2	95	550	625
Gruppe-IVB	C	27	27,4	41,3	40,3	54	54,9	230	152
	Si	35,2 ²	35,2		123,0	210,0 ²	169,3	224	224
	Ge	40,4 ²	40,4	210,0 ²	205,3	265,0 ²	281,7	281	281

Tabelle 3.2.: Akzeptor-Bindungsenergien in verschiedenen III-V Halbleitern. Die theoretischen Werte stammen aus [119], die experimentellen aus [123] mit Ausnahme von ¹[124] und ²[125].

p-Dotierung nachgewiesen durch die gleichrichtende Wirkung des Überganges nachgewiesen [124], es konnten bisher jedoch keine für Laser relevanten Leitfähigkeiten erreicht werden. Auf Grund der theoretischen Bindungsenergien ist zu vermuten, dass Beryllium auf Zwischengitterplätzen als Donator eingebaut wird. Zink, dessen Löslichkeit besser als die des Magnesium sein sollte weist eine wesentlich höhere Aktivierungsenergie der Ladungsträger auf, so dass Magnesium die beste Kombination aus geringer Aktivierungsenergie und Löslichkeit darstellt.

3.1.2. Einfluss von Oberflächen

Um die Dotierung zu verstehen, muss nicht nur das Verhalten der Atome im Volumenmaterial begriffen werden, sondern man muss auch die Prozesse während des Einbaus auf der Wachstumsoberfläche bescheid wissen. So ist die Terminierung der Oberfläche entscheidend für die Wachstumskinetik. Neben den kinetischen Prozessen kann auch das Lösungslimit an der Oberfläche variieren, da in der freien Oberfläche die durch den Dopanden erzeugte Verspannung abgebaut werden kann [127]. Dieses führt meist zu einer erhöhten Löslichkeit nahe der Oberfläche, so dass es im Volumenkristall zu Dotierkonzentrationen oberhalb des Löslichkeitslimits kommen kann, wenn Diffusions- und Segregationsprozesse langsamer als das Wachstum ablaufen und hierdurch die Oberfläche eingefroren wird [128].

Polaritätsabhängigkeit

Die Kation-Stickstoff Bindung entlang der (0001)-Achse weist bei den hexagonalen Nitriden einen sehr starken ionische Charakter auf. Dieses führt zu großen Unterschieden zwischen dem Wachstum auf Ga- und N-polaren Oberflächen, wodurch schon anhand der Morphologie dieser Schichten auf die Polarität geschlossen werden kann [129, 130, 131, 132]. Dieses führt zu unterschiedlichen Einbauprozessen der Störstellen auf den beiden Oberflächen, deren Bildungsenergien von Bungaro *et al.* [128] mit Hilfe der Dichte-Funktionaltheorie berechnet wurden.

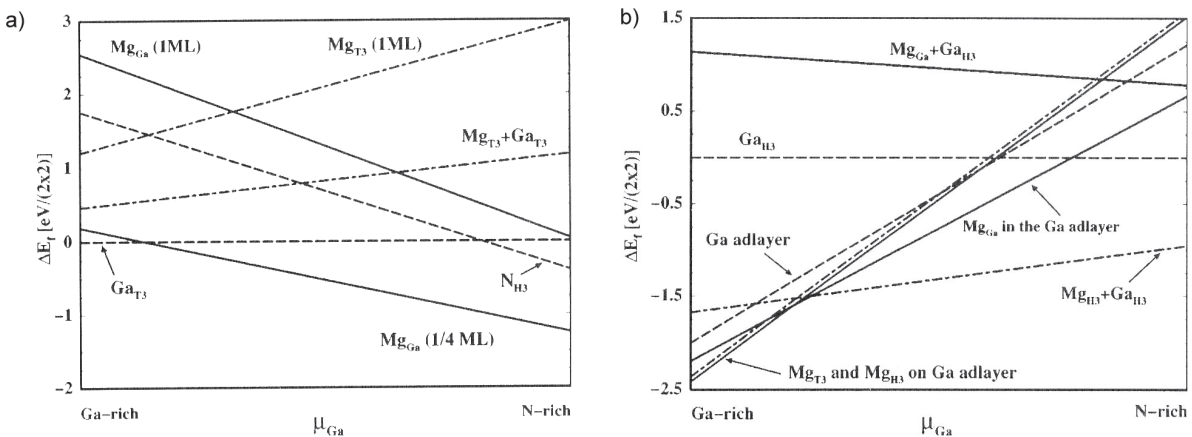


Abbildung 3.1.: Bildungsenergie von Mg korrelierten Defekten auf (a) Gallium- und (b) Stickstoffpolaren Oberflächen. Die Werte in Klammern geben die Bedeckungsdichte der Oberfläche mit Magnesium in ML an [128].

In Abbildung 3.1 sind die berechneten Bildungsenergien für Magnesium-korrelierte Defekte auf Stickstoff- und Gallium-polaren Oberflächen in Abhängigkeit des chemischen Potentials des Galliums dargestellt. Auf Grund dieser Ergebnisse lässt sich folgendes für die Prozesse auf der Wachstumsoberfläche ableiten:

Im Falle einer Gallium-polaren Oberfläche nimmt die Bildungsenergie für einen Magnesiumdefekt auf einem Gallium-Gitterplatz (Mg_{Ga}) mit zunehmendem Stickstoffangebot ab. Dieses deutet darauf hin, dass Magnesium auf dieser Oberfläche unter stickstoffreichen Bedingungen leichter eingebaut wird. Plausibel scheint dies, da Magnesium leichter eingebaut werden kann, wenn durch den Mangel an Gallium Vakuen erzeugt werden, die von dem Magnesium ausgefüllt werden können. Unter Stickstoff-reichen Bedingungen nimmt aber auch die Bildungsenergie von Konstruktionen mit Magnesiumadatomen in Mg_{T3} Konfiguration auf der Oberfläche zu. Dies deutet darauf hin dass unter Stickstoff-reichen Bedingungen die Adsorption von Magnesium zunehmend gehemmt wird. Die Bildungsenergien für den Einbau von Magnesium in den Kristall sind jedoch bedeutend geringer, so dass das Magnesium sehr effektiv in den Kristall eingebaut werden sollte.

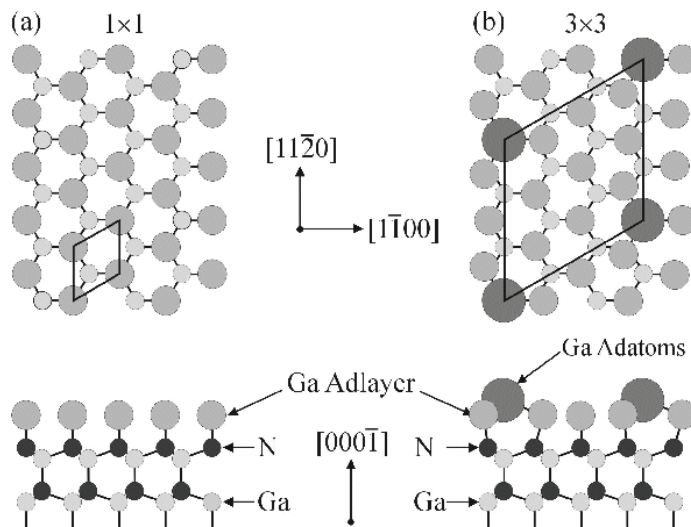


Abbildung 3.2.: Stickstoff-polare Oberfläche mit einer Gallium-Adlage (a) und einer zusätzlichen Gallium 3x3 Rekonstruktion (b).

Die Stickstoff-polare Oberfläche bildet unter stöchiometrischen Wachstumsbedingungen eine Ga-Adlage auf der Oberfläche aus, die bei Gallium-reichen Bedingungen von zusätzlichen Ga-Adatomen in einer 3×3 -Rekonstruktion auf der Oberfläche bedeckt sind (siehe Abbildung 3.2) [133]. Unter sehr Stickstoff-reichen Bedingungen konnte demgegenüber auch eine 2×2 Rekonstruktion beobachtet werden, die auf einer unvollständigen Bedeckung der Oberfläche mit Gallium beruht und durch die Anwesenheit von Arsen in der Kammer verstärkt werden kann [134]. Die hier vorgestellten Rechnungen wurden auf einer 2×2 großen Zelle durchgeführt, wodurch eine Modellierung der 3×3 -Rekonstruktion nicht möglich ist. Die Rechnungen zeigen jedoch, dass der Einbau von Magnesium über die Ersetzung von Gallium in der Adlage geschieht und unter Gallium-reichen Bedingungen die niedrigsten Bildungsenergien aufweist. Der Einbau von Magnesium unter einer 2×2 Ga_{H_3} -Rekonstruktion ist schwieriger, da die Bildungsenergie einer gemischten Rekonstruktion ($\text{Mg}_{\text{H}_3} + \text{Ga}_{\text{H}_3}$) geringer ist als die für den Einbau von Magnesium unter der Rekonstruktion ($\text{Mg}_{\text{Ga}} + \text{Ga}_{\text{H}_3}$). Für das Magnesiumatom ist es somit energetisch günstiger in der Oberflächenrekonstruktion zu verbleiben. Es ist für die Stickstoff-polare Oberfläche daher zu erwarten, dass die Dotierung unter Gallium-reichen Bedingungen am besten funktioniert.

3.1.3. Wasserstoff-Magnesium Komplex

Als es zum ersten Mal 1989 gelang mit Hilfe der Bestrahlung mit niederenergetischen Elektronen (englisch: Low Energy Electron Beam Irradiation (LEEBI)) p-leitfähiges GaN zu erzeugen [135], war man sich über den Passivierungsprozess von p-Dotiertem GaN auf Grund der Bildung eines Magnesium-Wasserstoff-Komplexes noch nicht bewusst. Erst über die Untersuchungen des thermischen Ausheizens

(englisch: Annealing) in verschiedenen Atmosphären von Nakamura *et al.* wurde die Bedeutung des Wasserstoffs für die p-Dotierung erkannt [136]. So ist es möglich, in einer inerten Stickstoff-Atmosphäre bei Temperaturen oberhalb von 700 °C den Wasserstoff-Magnesium-Komplex zu dissoziieren und den Wasserstoff aus dem Kristall zu entfernen. Die Dissoziation des Komplexes kann durch die Bestrahlung mit Mikrowellen [137] oder die Injektion von Minoritätsladungsträgern [138] gefördert werden, die heute jedoch gängigste Methode bleibt das thermische Annealen.

Inkorporation

Wasserstoff kann auf Grund seines geringen Atomdurchmessers (der kovalente Radius beträgt 53 pm [139]) sehr leicht in die verschiedensten Materialien eingebaut werden. Insbesondere in p-dotiertem GaN ist die Diffusivität sehr hoch [140], da sich hier der Wasserstoff in seiner ionisierten Form, als Proton, durch den Kristall bewegt. In dieser Umgebung bildet der Wasserstoff einen Komplex mit dem Magnesium und wirkt als kompensierender Donator, da er dem Kristall ein zusätzliches Elektron zur Verfügung stellt [141].

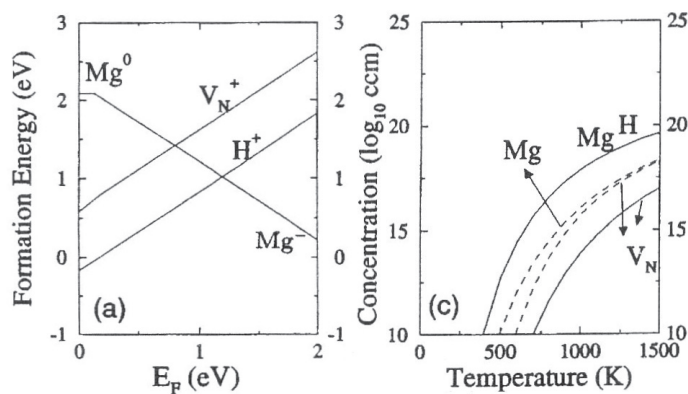


Abbildung 3.3.: Bildungsenergien (a) und Löslichkeiten (c) vom Magnesium-Akzeptor und kompensierenden Defekten in Abhängigkeit der Temperatur bzw. Fermi Energie [141].

Die Bildungsenergie eines solchen Defektes liegt unterhalb der von Stickstoffvakanzanzen (siehe Abb. 3.3 (a)), die ebenfalls als kompensierende Donatoren fungieren können. Dieses hat zur Folge das präferenziell Wasserstoff als kompensierender Defekt in der Kristall eingebaut wird und die Bildung von Stickstoffvakanzanzen, die nicht durch thermisches Ausheilen zu entfernen sind, unterdrückt wird. Im thermodynamischen Gleichgewicht unter Wasserstoff-reichen Bedingungen wird durch die Anwesenheit des Wasserstoffs die Fermi-Energie im Kreuzungspunkt der Bildungsenergien von H^+ - und Mg^- -Defekten gepinnt (Abb.3.3 (b)). Dieses hat zur Folge, dass sich zum einen die Löslichkeit des Magnesiums um über eine Größenordnung erhöht und zum anderen die Bildung von Stickstoffvakanzanzen in dem selben Umfang unterdrückt wird [141]. Es erscheint daher sinnvoll, die Magnesium-Dotierung in einer Wasserstoff-Atmosphäre vorzunehmen. Arbeiten über die Dotierung unter unter-

schiedlichen Atmosphären zeigen jedoch, dass im Wachstum mittels MOVPE auch unter Stickstoffatmosphäre ähnlich hohe Dotierniveaus erreichbar sind [72].

Diffusion

Die Diffusion des Wasserstoffes ist sehr stark durch seinen Ladungszustand und die Fermi-Energie im Kristall bestimmt. Einen wesentlichen Beitrag zu dem Verständnis der Diffusion haben hierzu Neugebauer *et al.* [142] geleistet. In Abbildung 3.4 sind die Potenzialflächen für Wasserstoff in den verschiedenen Ladungszuständen dargestellt. Liegt die Fermi Energie nahe dem Leitungsband, so wird sich der Wasserstoff vornehmlich in der H^- -Konfiguration befinden. Hier zeigt sich, dass der Wasserstoff in diesem Fall stark gebunden ist. In p-dotiertem GaN hingegen wird der Wasserstoff ionisiert und die Barrieren in der Potenzialfläche sind wesentlich schmaler und flacher. Der Magnesiumakzeptor hat hierbei nur einen untergeordneten Einfluss auf die Potenzialbarrieren. Auf Grund dessen lässt sich der Magnesium-Wasserstoff-Komplex leicht dissoziieren und der Wasserstoff kann effektiv aus dem Kristall entfernt werden.

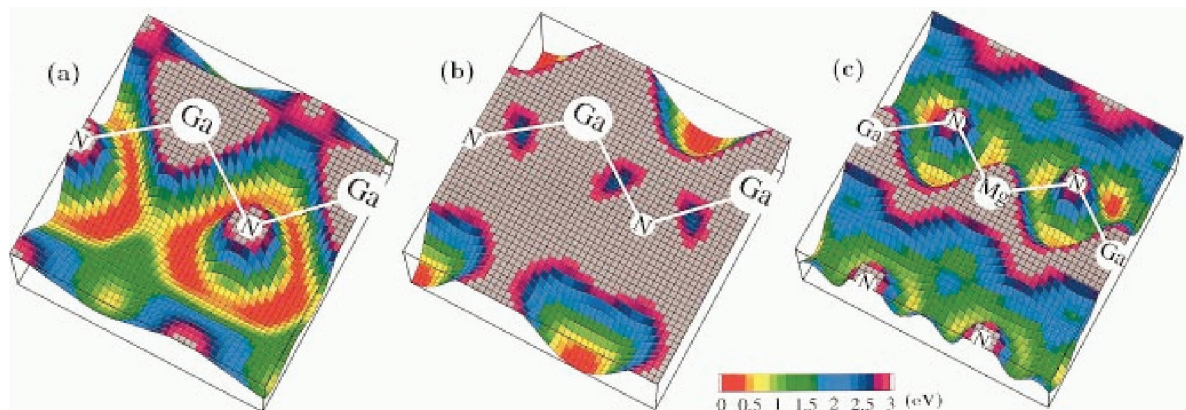


Abbildung 3.4.: Potenzialflächen von H^+ (a) und H^- in undotiertem GaN (b) und H nahe einem Magnesiumakzeptor [142].

3.1.4. Temperaturabhängige Ladungsträgerkonzentration

In diesem Abschnitt wird die Statistik der Ladungsträger von Schichten, die mit einem tiefen Magnesium-Akzeptor mit der Dichte N_A dotiert wurden und teilweise durch Donatoren der Dichte N_D kompensiert sind, betrachtet. Die Konzentration der freien Löcher p kann bei den tiefen Störstellen über eine Boltzmann-Statistik genähert

3. p-Dotierung

werden [143]:

$$p = N_V \exp\left(\frac{E_F - E_V}{kT}\right) \quad (3.1)$$

Hierbei sind k die Boltzmann-Konstante, E_F die Fermi-Energie, E_V die Energie der Valenzband-Kante und N_V die Dichte der Zustände im Valenzband. Die Dichte N_V an der Valenzbandkante kann mit Hilfe der effektiven Loch-Masse m_h^* mit folgenden Ausdruck genähert werden:

$$N_V = \frac{2(2\pi m_h^* kT)^{3/2}}{h^3} \quad (3.2)$$

Die Dichte der ionisierten Akzeptoren N_A^- ist durch die Akzeptorbindungsenergie E_A und die Entartung g des Valenzbandes gegeben als:

$$N_A^- = \frac{N_A}{1 + g \exp\left(\frac{E_A - E_F}{kT}\right)} \quad (3.3)$$

Auf Grund der Ladungsneutralitätsbedingung kann die Konzentration der freien Löcher berechnet werden. Da die Bandlücke im GaN sehr hoch ist, wird in einem p-leitfähigen Kristall die Anzahl der Elektronen im Leitungsband vernachlässigbar sein. Daher ergibt sich:

$$p + N_D = N_A^- \quad (3.4)$$

Aus Gleichungen 3.3 und 3.4 folgt:

$$\frac{p(p + N_D)}{N_A - N_D - p} = \phi \quad (3.5)$$

Hierbei ist ϕ definiert durch:

$$\phi = \frac{N_V}{g} \exp\left(\frac{-\Delta E_A}{kT}\right) \quad \text{mit } \Delta E_A = E_A - E_V \quad (3.6)$$

Die Gleichung der Ladungsneutralität 3.5 kann nun wie folgt aufgelöst werden:

$$p = \frac{\phi + N_D}{2} \left(-1 + \sqrt{1 + \frac{4\phi(N_A - N_D)}{(\phi + N_D)^2}} \right) \quad (3.7)$$

Diese Gleichung kann für drei Grenzfälle vereinfacht werden:

- $\phi \gg N_D$ und $(N_A - N_D) \gg \phi$

Dieses ist der Fall, wenn die Konzentration der kompensierenden Donatoren klein ist. In diesem Fall ergibt sich:

$$p = \sqrt{(N_A - N_D)\phi} \quad (3.8)$$

Die Ladungsträgerkonzentration wird somit in einem halblogarithmischen Plot gegenüber der reziproken Temperatur mit einer Steigung von $-\Delta E_A/2k$ fallen. Außerdem nimmt für geringe Kompensationsgrade die Ladungsträgerdichte mit der Wurzel der Akzeptordichte N_A zu.

- $\phi \ll N_D$ und $N_D^2/(N_A - N_D) \gg \phi$

Dieses ist der Fall bei starker Kompensation durch Donatoren. Es ergibt sich:

$$p = \frac{N_A - N_D}{N_D}\phi \quad (3.9)$$

Hier skaliert die freie Ladungsträgerdichte direkt mit der Differenz der Akzeptor- und Donatorkonzentration, in der halblogarithmischen Auftragung gegen die reziproke Temperatur ergibt sich die Steigung $-\Delta E_A/k$

- $\phi \gg N_D$ und $(N_A - N_D) \ll \phi$

Diese Bedingung tritt bei sehr hohen Temperaturen auf, die Vereinfachung von 3.7 ergibt sich dann zu:

$$p = (N_A - N_D) \quad (3.10)$$

Somit befinden sich bei hohen Temperaturen sämtliche Ladungsträger der un-kompensierten Akzeptoren im Valenzband und die Aktivierung befindet sich in der Sättigung. Daher ist in diesem Bereich auch keine Temperaturabhängigkeit sichtbar.

3.2. Dotierung in der MBE

Der Mechanismus des Einbaus von Magnesium in der Molekularstrahlepitaxie ist durch verschiedene Faktoren begrenzt. Orton *et al.* [144] haben gezeigt, dass die Inkorporation im Wesentlichen durch kinetische Prozesse limitiert ist und dass unter Stickstoff-reichen Bedingungen die höhere Wahrscheinlichkeit der Bildung von Galliumvakanz an der Oberfläche den Einbauprozess von Magnesium fördert. Da in der MBE in der Regel Stickstoff-polares Material gewachsen wird, steht dieses in Kontrast zu den theoretischen Ergebnissen von Bungaro, nach denen die Löslichkeit von Magnesium von dem chemischen Potenzial des Stickstoffs auf der Oberfläche bestimmt wird (siehe Kap. 3.1.2) und die eine erhöhte Löslichkeit unter

Gallium-reichen Bedingungen vorhersagen. Unabhängig von den kinetischen Prozessen kann die Löslichkeit in beiden Fällen den Einbau von Magnesium beeinflussen. In der Tat haben Studien von Guha *et al.* [145] gezeigt, dass die Magnesiumkonzentration im Kristall für hohe Magnesiumflüsse konstant bleibt. Neben diesen Limitierungen wird auch die Haftung von Magnesium auf der Oberfläche einen wesentlichen Einfluss auf die Dotierung nehmen.

In diesem Kapitel sollen die zwei wesentlichen Parameter, der Einfluss der Substrattemperatur und die Abhängigkeit von dem Magnesiumfluss, untersucht werden, um herauszufinden, welches die limitierenden Prozesse bei der p-Dotierung mittels MBE sind. Hierzu wurden zwei Probenserien hergestellt, deren Probenaufbau im folgenden Abschnitt beschrieben wird.

3.2.1. Probenaufbau und Präparation

Die untersuchten Schichten, die aus der Molekularstrahlepitaxie stammen und hier betrachtet werden, haben eine Dicke von 1 μm und wurden direkt nach einer 10 nm dicken, undotierten GaN-Nukleationsschicht auf einem Viertelstück eines Saphirwafers abgeschieden (siehe Abb. 3.5). Für alle Proben wurde ein Stickstofffluss von 1,3 sccm bei einer rf-Plasma-Leistung von 300 W verwendet, der Galliumfluss betrug $1,8 \times 10^{-6}$ Torr BEP bei einer Zell-Temperatur von ca. 850 °C. Alle Proben zeigten während des Wachstums der Magnesium-dotierten Schicht einen deutlichen Übergang im RHEED zu einem gitterartigen Beugungsmuster, das auf eine starke Aufrauung der Schicht hindeutet.

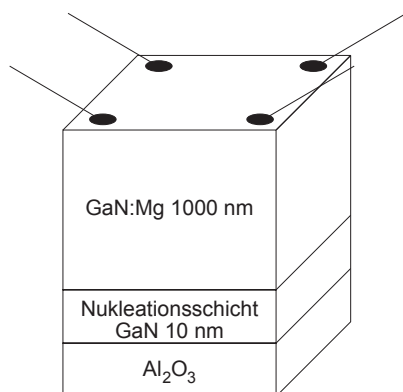


Abbildung 3.5.: Probenstruktur zur Untersuchung der elektrischen Eigenschaften. Die p-dotierte Schicht befindet sich direkt auf einem undotierten Nukleationsbuffer. Die Kontakte sind in Van-der-Pauw Geometrie auf den Ecken der Probe angebracht.

Für die elektrischen Messungen wurden 5 mm x 5 mm große Stücke aus den Zentren der Proben herausgespalten. Auf Grund der zum Teil sehr Gallium-reichen Bedingungen wurden die Proben zunächst in Salzsäure geätzt um eventuell auf der Oberfläche verbliebene Gallium-Tröpfchen zu entfernen. Hiernach wurde eine Kontaktschicht, bestehend aus 5 nm Nickel und 200 nm Gold, auf die Oberfläche gedampft. Die Kontakte wurden nach dem Aufbringen bei 600 °C für 10 Minuten ge-

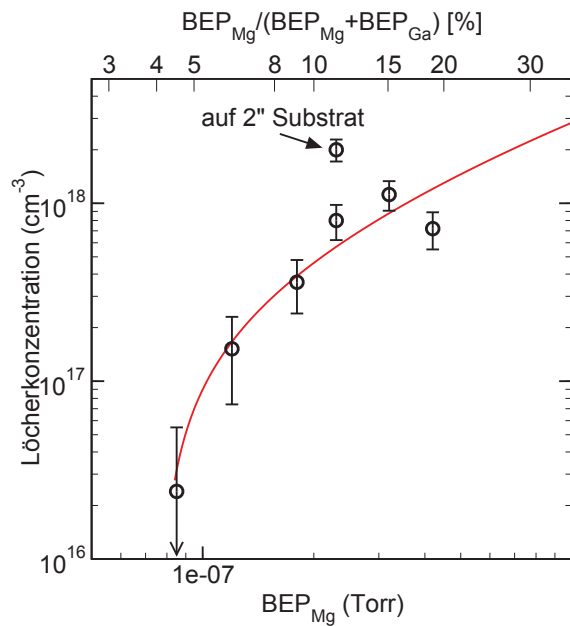


Abbildung 3.6.: Abhängigkeit der freien-Löcher-Dichte bei Raumtemperatur von dem Magnesiumfluss.

tempert. Die Kontaktpunkte wurden wie in Abbildung 3.5 in Van-der-Pauw Geometrie in den Ecken der Probe durch manuelles Aufbringen eines Schutzlackes definiert und mit Hilfe einer Kaliumjodid/Jod-Ätze herauspräpariert. Die Hall-Messungen an diesen Proben zeigten für alle Proben p-Leitfähigkeit. Ein Einfluss des n-leitfähigen Nukleationsbuffer, der auf Grund seiner hohen Defektdichte typischerweise sehr hohe Elektronenkonzentrationen aufweist, konnte nicht festgestellt werden.

3.2.2. Magnesiumfluss

Um den optimalen Magnesiumfluss zu bestimmen, bei dem vor Eintritt der Selbstkompensation die höchste Löcherkonzentration zu erreichen ist, wurde eine Serie bei einer konstanten Substrattemperatur von 680 °C hergestellt. Der Magnesiumfluss wurde in einem Bereich von $8,5 \cdot 10^{-8}$ bis $4,2 \cdot 10^{-7}$ Torr BEP variiert, was Magnesium-Quellen-Temperaturen im Bereich von 512 °C bis 556 °C entspricht. Von diesen Proben wurde in Hall-Messungen die Ladungsträgerdichten bei Raumtemperatur bestimmt (siehe Abbildung 3.6).

Wie erwartet ist eine Zunahme der freien Löcherkonzentration mit steigendem Magnesium-Fluss zu erkennen, die im unteren Bereich sehr steil verläuft, um dann bei hohen Magnesium-Flüssen zu sättigen. In der Probe mit dem höchsten Magnesiumfluss ist die freie Ladungsträgerdichte wieder geringer, was sowohl auf die Sättigung des Magnesium-Gehalts in der Probe auf Grund des Löslichkeitslimits oder auf eine einsetzende Selbstkompensation zurückgeführt werden kann.

Außerhalb der Probenserie wurde auch die Probe mit einem Mg-Fluss von

$2,3 \cdot 10^{-7}$ Torr auf einem 2-Zoll Substrat reproduziert. Es zeigte sich, dass diese Probe eine deutlich höhere Ladungsträgerkonzentration aufweist. Dieses abweichende Verhalten ist auf leicht unterschiedliche Wachstumstemperaturen zurückzuführen. Da über die Halterung der Substrate an dem Rand der Probe Wärme abgeführt wird, weisen die kleineren Viertelstücke eine deutlich höhere Temperaturinhomogenität gegenüber ganzen 2-Zoll Substraten auf. Am Rand der Probe bildete sich auf den Proben der Serie unter den Gallium-reichen Bedingungen des Wachstums ein metallischer Film aus, der die Abstrahlcharakteristik der Wärme während des Wachstums verändert. Die Temperatur des Substrates kann mit Hilfe des Pyrometers nur vor Beginn des Wachstums bestimmt werden, da im weiteren Verlauf die Schichtdickeninterferenzen der aufgewachsenen Schicht das Ergebnis verfälschen. Deswegen ist die genaue Temperatur während des Wachstums unbekannt und es ist zu vermuten, dass es bei den kleineren Viertelstücken auf Grund der Metallisierung zu einer Aufheizung der Probe kam, da durch sie die Wärme der Substratheizung besser absorbiert wird.

Der starke nichtlineare Verlauf der freien Ladungsträgerkompensation mit dem Magnesiumfluss lässt sich auf die Kompensation durch Versetzungen im Kristall zurückführen. Für Schraubenversetzungen ist bekannt, dass sie elektrisch aktiv sind [146, 147, 148] und als Einfangzentrum für Löcher dienen können [149]. Die Konzentration der Schraubenversetzungen in diesen Proben wurde mittels Röntgenbeugung für alle Proben unabhängig vom Magnesiumfluss zu ca. $9 \cdot 10^8$ $1/\text{cm}^2$ bestimmt. Die Stufenversetzungsdichte der Proben zeigte eine leichte Abnahme von $3 \cdot 10^8$ auf $2 \cdot 10^8$ mit steigendem Magnesiumfluss. Da die Proben unter sehr Gallium-reichen Bedingungen gewachsen wurden, ist zudem davon auszugehen, dass der Einfluss von Stickstoff-Vakanzen auf die Kompensation gering ausfällt.

Ausgehend von einer konstanten Donatorkonzentration und einer zum Magnesiumfluss proportionalen Akzeptorkonzentration kann der nichtlineare Verlauf der Löcherkonzentration nachgebildet werden: Für sehr kleine Magnesiumflüsse befindet sich die Akzeptorkonzentration nur geringfügig oberhalb der Donatorkonzentration. In diesem Bereich ist die Ladungsträgerkonzentration proportional zu $N_A - N_D$. Die Anstieg der Löcherkonzentration ist . Für hohe Dotierniveaus geht diese Abhängigkeit über in ein Verhalten das proportional zu der Wurzel der Akzeptorkonzentration ist (siehe Abschnitt 3.1.4). In Abbildung 3.6 ist die Anpassung der Gleichung 3.7 an die Daten als Kurve eingetragen, unter der Annahme einer probenunabhängigen Donatorkonzentration. Als Anpassungsparameter ergaben sich eine Donatorkonzentration von $1 \cdot 10^{19}$ $1/\text{cm}^3$, eine Akzeptorbindungsenergie von 240 meV und ein Einbaukoeffizient von $1,3 \cdot 10^{26}$ $1/(\text{Torr} \cdot \text{cm}^3)$ für Magnesium in Abhängigkeit des Strahldrucks. Aus dem Einbaukoeffizienten lässt sich die Akzeptorkonzentration bei der Probe mit der höchsten Lochkonzentration von $4,2 \cdot 10^{19}$ $1/\text{cm}^3$ abschätzen. Dieser Wert liegt etwas unterhalb der Werte, für die normalerweise die höchsten Löcherkonzentrationen

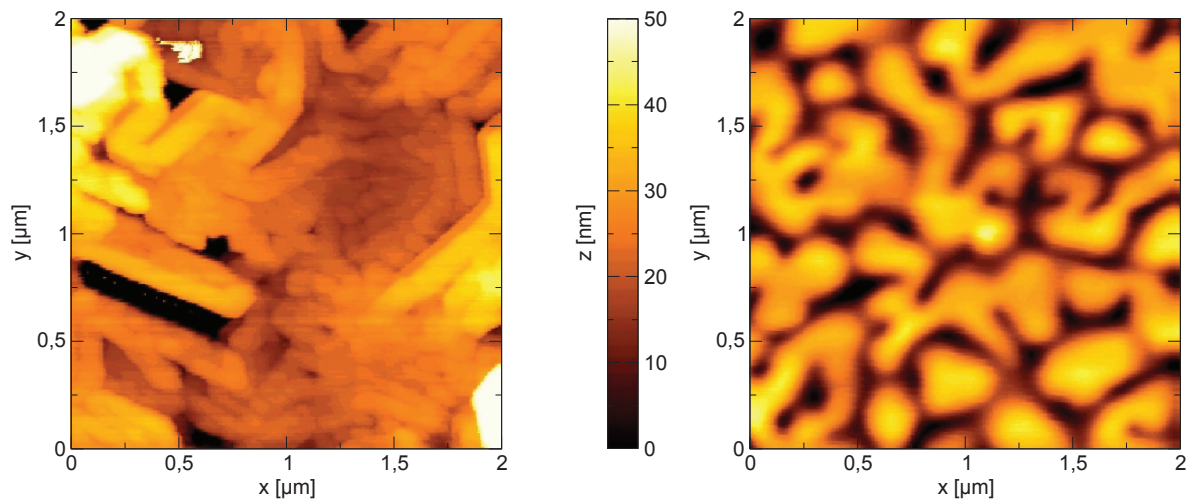


Abbildung 3.7.: Kraftmikroskopische Aufnahmen der Magnesium-dotierten Schichten gewachsen bei 650 C (links) und 750 C (rechts).

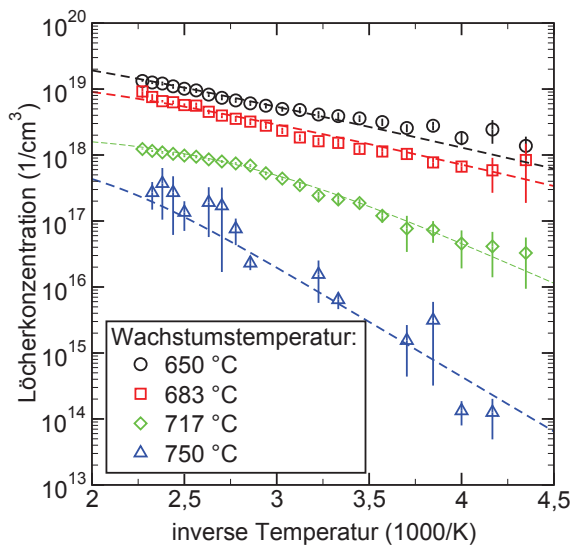
nen bestimmt werden [145]. Das Modell kann jedoch grob die Abhängigkeit der Ladungsträgerkonzentration von dem Magnesiumangebot wiedergeben. Lediglich die am höchsten dotierte Probe zeigt eine Abweichung, die auf eine Limitierung der Dotierung hindeuten könnte. Die Abweichung ist jedoch zu klein, um hier direkt auf eine Limitierung auf Grund der Löslichkeit zu schließen.

3.2.3. Substrattemperatur

Um den Einfluss der Substrattemperatur auf das Dotierungsverhalten in der MBE zu untersuchen, wurde eine Probenserie aus vier Proben mit einem gleichbleibenden Magnesiumfluss von $2,3 \cdot 10^{-7}$ Torr BEP gewachsen, bei der die Wachstumstemperatur zwischen 650 °C und 750 °C variiert wurde. Dieser Temperaturbereich wurde gewählt, da bekannt war, dass bei noch geringeren Temperaturen die strukturelle Qualität der Strukturen abnimmt und es zur Bildung von kubischen Einschlüssen kommen kann. Zudem war bei Magnesium-dotierten Proben, die in unserer Arbeitsgruppe von Udo Birkle gewachsen wurden, keine p-Leitfähigkeit messbar, wenn sie bei höheren Wachstumstemperaturen hergestellt wurden. Der Galliumfluss war für alle Proben $1,8 \cdot 10^{-7}$ Torr BEP. Die Wachstumsraten der Proben zeigten sich als unabhängig von der Temperatur und ergeben sich zu 580 nm/h.

Trotz dessen zeigen kraftmikroskopische Aufnahmen, wie sie in Abbildung 3.7 exemplarisch für die Proben dargestellt sind, die bei 650 °C und 750 °C gewachsen wurden, deutliche Unterschiede in der Morphologie der Oberfläche. Die bei 750 °C gewachsene Probe zeigt eine typische Oberflächenstruktur, wie sie auch bei undotierten Proben, die aus der Molekularstrahlepitaxie stammen, zu sehen ist. Die

3. p-Dotierung



Wachstumstemperatur (°C)	$N_A(300\text{ K})$ (1/cm³)	E_{Akt} (meV)
650	$4,2 \cdot 10^{19}$	227
683	$1,2 \cdot 10^{19}$	220
717	$4,1 \cdot 10^{18}$	244
750	$3,0 \cdot 10^{18}$	330

Abbildung 3.8.: Temperaturabhängige Ladungsträgerkonzentration der Serie mit variierender Substrattemperatur. Die Daten wurden mit Gleichung 3.7 angepasst, die zugehörigen Anpassungsparameter finden sich in obiger Tabelle.

Oberfläche dieser Probe zeigt wellige Strukturen mit einem Durchmesser von ca. 100 nm. Eine ähnliche Oberflächenmorphologie zeigten auch die Proben, die bei mittleren Temperaturen gewachsen wurden. Demgegenüber sind in der bei 650 °C hergestellten Probe stäbchenförmige Strukturen zusehen, die durch die hexagonale Symmetrie des Kristalls geprägt sind. Diese Strukturbildung zeigt, dass sich bei dieser Temperatur der Wachstumsmodus deutlich verändert. Deswegen ist die zusätzliche Bildung von Defekten bei dieser Probe nicht auszuschließen.

Elektrische Daten

In Abbildung 3.8 sind die mittels Hall-Messungen bestimmten temperaturabhängigen Löcherkonzentrationen der Proben dieser Serie dargestellt. Die Löcherkonzentrationen wurden mit Hilfe der Gleichung 3.7 angepasst. Nur die bei 717 °C gewachsene Probe zeigt eine Ladungsträgerdichte, die nicht monoexponentiell von der inversen Temperatur abhängig ist. Auf Grund dieses Überganges konnte für sie eine Donatorkonzentration von $2 \cdot 10^{18}$ 1/cm³ bestimmt werden. Da die übrigen Proben in dem gemessenen Temperaturbereich einen monoexponentiellen Zusammenhang aufweisen, war für diese Proben eine Anpassung der Donatorkonzentration nicht möglich. Daher wurde für alle Proben eine konstante Donatorkonzentration von $2 \cdot 10^{18}$ 1/cm³ angenommen. Die Anpassung der Gleichung zeigt bei den Proben mit geringerer Wachstumstemperatur keinen solchen Übergang, da hier der Kompensationsgrad geringer ist, während die bei 650 °C gewachsene Probe unter dieser Donatorkonzentration als stark kompensiert einzustufen ist. Aus den Anpassungen ergibt sich für die Proben, die bis zu einer Temperatur von 717 °C gewachsen wurden, eine Akzeptor-Bindungsenergie im Bereich zwischen 220 und 244 meV. Diese Energie ist in hohem

Einklang mit Ergebnissen aus optischen Untersuchungen, bei denen die Akzeptor-Bindungsenergie auf Grund der (e, A^0) Linienlage zu Werten von 213 bis 230 meV bestimmt wurde [123, 149, 150]. Demgegenüber zeigte die bei 750 °C gewachsene Probe eine deutlich höhere Aktivierungsenergie von 330 meV. Eine solch hohe Aktivierungsenergie wurde bisher in der Literatur in Verbindung mit dem Magnesium-Akzeptor nicht beschrieben. Es ist daher an dieser Stelle nicht zu klären woher diese Aktivierungsenergie resultiert.

Es zeigt sich, dass die Ladungsträgerkonzentration der Proben sehr stark von der Wachstumstemperatur abhängig ist. So variiert die Löcherkonzentration bei Raumtemperatur von $5,5 \cdot 10^{16}$ 1/cm bei der bei 650 °C gewachsenen Probe hinunter bis auf $3,9 \cdot 10^{18}$ 1/cm bei 750 °C Substrattemperatur. Die Löcherkonzentration der bei 650 °C gewachsenen Probe ist im Vergleich zu Werten in der Literatur [71, 72, 73, 74, 75, 76] sehr hoch. Allerdings zeigte diese Schicht bei Raumtemperatur eine Beweglichkeit der Ladungsträger von lediglich $1,2 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$ und bleibt daher im Bereich der typischen spezifischen Widerstände von $1 \text{ } \Omega\text{cm}$. Es ist zu vermuten, dass die starke kolumnare Struktur, die sich in den AFM-Aufnahmen in der streifigen Morphologie widerspiegelt, einen Einfluss auf die Beweglichkeit der Ladungsträger nimmt. Nichtsdestotrotz eignen sich solche Schichten hervorragend für Kontaktstrukturen, da durch die hohe Ladungsträgerkonzentration die Verarmungszone an dem Kontakt dünn gehalten wird und hierdurch geringe Kontaktwiderstände realisiert werden können. In diesen dünnen Schichten spielt der spezifische Widerstand daher eine untergeordnete Rolle.

Die starke Abhängigkeit von der Wachstumstemperatur lässt sich auf zwei verschiedene Ursachen zurückführen:

- Auf Grund einer veränderten Oberflächenstöchiometrie verändert sich die Hintergrundladungskonzentration durch Bildung von Störstellen.
- Auf Grund von geringerer Desorption des Magnesiums von der Wachstumsoberfläche steigt der Haftkoeffizient von Magnesium bei kleineren Wachstumstemperaturen.

Obwohl die Donorkonzentration aus den temperaturabhängigen Hall-Messungen nicht für alle Proben bestimmbar war, können die unterschiedlichen Ladungsträgerkonzentrationen nicht auf die Generation von Störstellen und eine Erhöhung der Hintergrundladungskonzentration zurückgeführt werden. In diesem Fall müsste die Donorkonzentration der bei 683 °C gewachsenen Probe bei mindestens $3 \cdot 10^{19}$ 1/cm liegen, um eine so starke Reduktion der Ladungsträgerdichte zu erklären. Es ist jedoch bekannt, dass bei einer erhöhten Störstellenkonzentration die thermischen Aktivierungsenergie sinkt. So fanden Pearson und Bardeen [151] in Silizium-Proben als

empirischen Zusammenhang zwischen der Störstellenkonzentration N , der mit Hilfe von optischen Untersuchungen bestimmten Akzeptorbindungsenergie E_A und der beobachteten thermischen Aktivierungsenergie E_{therm} :

$$E_{therm} = E_A - \alpha N^{1/3} \quad (3.11)$$

Diese Relation konnte auch für Galliumnitrid-Proben in der Dissertation von Stefan Strauf [126] nachgewiesen werden. In dieser Arbeit konnte der Parameter α für GaN zu $3,6 \cdot 10^{-5}$ meV·cm in Abhängigkeit der Donatorkonzentration bestimmt werden. Aus der erforderlichen Donatorkonzentrationen würde sich daher die thermische Aktivierungsenergien zu ca. 120 meV ergeben. Die in der Hall-Messung bestimmten Aktivierungsenergien entsprechen jedoch den Akzeptor-Bindungsenergien und nehmen nicht mit sinkender Ladungsträgerkonzentration ab, so dass die Donatorkonzentration in diesen Proben als sehr gering einzustufen ist. Daher soll im Folgenden untersucht werden, inwieweit die Zunahme der freien Löcherkonzentration mit sinkender Wachstumstemperatur durch die Verringerung der Desorption von Magnesium zu erklären ist.

Desorptionsmodell

In diesem Abschnitt soll diskutiert werden, ob die Limitierung des Magnesiumeinbaus in dieser Probenserie durch die Desorption von Magnesium auf der Wachstumsoberfläche begrenzt ist. Dass die Haftung auf der Oberfläche einen entscheidenden Einfluss ausüben kann, zeigt schon der Vergleich der typischen Magnesium-Zelltemperatur, die für die Dotierung zwischen 500 °C und 550 °C beträgt, und der Substrattemperatur, die während des Wachstums bei 650 °C bis 750 °C liegt. Die höhere Temperatur des Substrates deutet schon darauf hin, dass die Desorption von der Wachstumsoberfläche einen entscheidenden Einfluss nehmen kann. Dieses erkennt man auch an den typischen Flussverhältnissen während der Magnesiumdotierung: In der MBE liegt das typische Verhältnis von Magnesium-Strahldruck zum Gallium-Strahldruck bei 10 bis 20 %. Da in diesen Strahldruck die Masse der Atome eingeht, wird das relative Verhältnis von Magnesium zu Gallium noch höher liegen. Der relative Magnesiumgehalt in der Probe ist demgegenüber um drei Größenordnungen geringer [152]. Es wird somit nur ein geringer Prozentsatz des angebotenen Magnesiums in die Probe eingebaut.

Als Modell soll hier ein Ratengleichungssystem eingeführt werden, das die Desorption in den Wachstumsprozess einbezieht (siehe Abbildung 3.9). Das Modell geht davon aus, dass die Adsorption von Magnesium auf der Oberfläche proportional zu dem Fluss aus der Magnesium Zelle f_{Mg} ist. Die adsorbierten Atome befinden sich auf der Oberfläche in der Adlage oder als Adatome in der Oberflächenrekonstruktion. Diese Atome sind auf der Oberfläche nur schwach gebunden und man

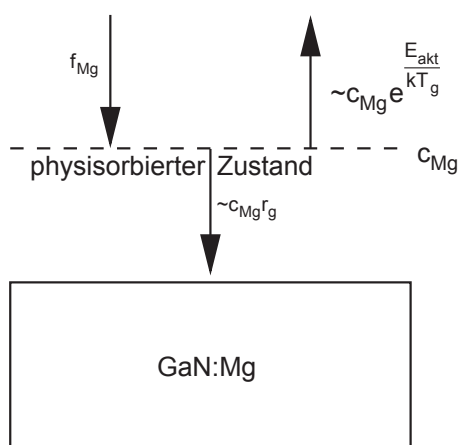


Abbildung 3.9.: Ratengleichungsmodell zur Desorption von Magnesium auf der Wachstumsoberfläche.

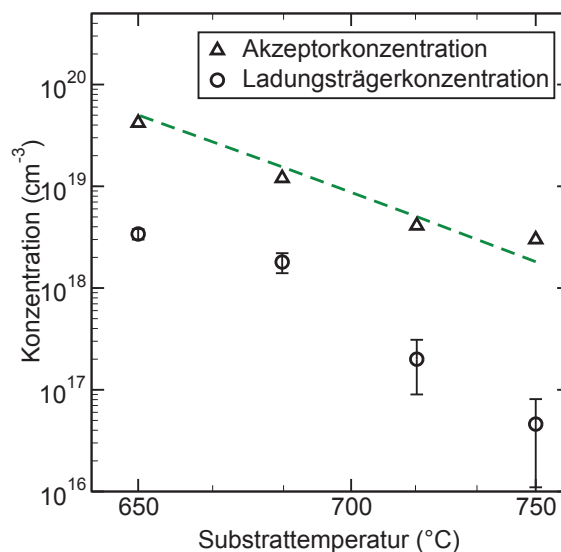


Abbildung 3.10.: Frei-Löcher-Dichte und aus Abbildung 3.8 bestimmte Akzeptorkonzentrationen in Abhängigkeit der Substrattemperatur.

spricht von einem physisorbierten Zustand. Die Inkorporation in den Kristall aus diesem physisorbierten Zustand ist in dem Modell proportional mit dem Faktor k_{inc} zu der Oberflächenbedeckung mit Magnesium c_{Mg} und zu der Wachstumsgeschwindigkeit r_g . Die Desorption erfolgt über eine Aktivierungsenergie E_{akt} in Abhängigkeit der Wachstumstemperatur T_g und ist proportional zu der Oberflächenbedeckung mit dem Faktor k_{des} . Die Ratengleichung kann als Differenzialgleichung der Dichte der Magnesiumatome im physisorbierten Zustand c_{Mg} gelöst werden:

$$\frac{d}{dt}c_{Mg} = f_{Mg} - k_{des}c_{Mg} \cdot e^{-\frac{E_{akt}}{kT_g}} - k_{inc}c_{Mg} \cdot r_g \quad (3.12)$$

Während des Wachstums stellt sich ein dynamisches Gleichgewicht ein, so dass die Oberflächenbedeckung mit Magnesium konstant ist ($\frac{d}{dt}c_{Mg} = 0$). Dieses Gleichgewicht wird schnell erreicht, wenn die Desorption die Oberflächenbedeckung stärker dominiert als der Einbau von Magnesium in den Kristall. Als Lösung des Gleichgewichtszustandes dieser Differenzialgleichung ergibt sich:

$$c_{Mg} = \frac{f_{Mg}}{k_{inc} \cdot r_g + k_{des} \cdot e^{-\frac{E_{akt}}{kT_g}}} \quad (3.13)$$

Nach diesem Modell ist die eingebaute Magnesiummenge proportional zu der Oberflächenbedeckung c_{Mg} . In Abbildung 3.10 sind die aus den temperaturabhängigen Hall-Messungen bestimmten Akzeptorkonzentrationen zusammen mit den Löcherdichten gegenüber der Substrattemperatur aufgetragen. Die Akzeptorkonzentra-

tion zeigt einen exponentiellen Zusammenhang mit der inversen Substrattemperatur. Die Anpassung des Modells (gestrichelte Linie) gibt diesen Verlauf wieder. Da in diesem Bereich keine Sättigung der Akzeptorkonzentration zu sehen ist, muss davon ausgegangen werden, dass die Magnesiumkonzentration des physisorbierten Zustandes in dem Modell vollständig durch die Desorption dominiert wird und der Term $k_{inc} \cdot r_g$ vernachlässigbar klein ist. Aus der Steigung der Kurve ergibt sich die Desorptionsenergie zu 2,6 eV. Diese Energie könnte in der Tat auf eine Desorptionsenergie von der GaN-Oberfläche zurückzuführen sein, da sie mit Literaturwerten für die Desorptionsenergie von Gallium, die mit 2,2 eV [153] bis 2,72 eV [154] angegeben werden, vergleichbar ist. Nach den in Abschnitt 3.1.2 gezeigten Rechnungen von Bungaro *et al.* [128] weist die Bildungsenergie von Magnesium auf der GaN-Oberfläche etwas größere Werte auf, als die von Gallium. Unter Gallium-reichen Bedingungen ergibt sich für Magnesium nach diesen Rechnungen in Abhängigkeit der Oberflächen-Rekonstruktion eine Bildungsenergie von 2,25 bis 2,4 eV. Die hier berechnete Desorptionsenergie stimmt somit hinreichend mit der Bildungsenergie des Defektes auf der Oberfläche überein. Der die Dotierung limitierende Prozess kann somit mit der Desorption von Magnesium von der Oberfläche identifiziert werden.

3.2.4. Wasserstoff Kodotierung

Die theoretischen Ergebnissen von Neugebauer *et al.* [141] sagen eine erhöhte Löslichkeit des Magnesium-Akzeptors unter der Anwesenheit von Wasserstoff voraus. Der Einfluss von Wasserstoff auf die Inkorporation von Magnesium kann im Wachstum mit Hilfe von MOVPE nur schwer nachgewiesen werden, da auf Grund der Dissoziation von Ammoniak stets ein signifikanter Wasserstoff-Partialdruck vorhanden ist. In SIMS-Messungen an MOVPE-Proben, die sowohl mit dem Trägergas Wasserstoff als auch mit Stickstoff hergestellt wurden, konnte daher auch nur eine Reduktion des Wasserstoff-Gehaltes von 50 % in den unter Stickstoff-Atmosphäre gewachsenen Proben nachgewiesen werden [72]. Nichtsdestotrotz wurde in diesen Proben eine p-Leitfähigkeit ohne nachfolgendes thermisches Annealen erreicht, was auf einen geringen Kompensationsgrad der Magnesiumakzeptoren durch Wasserstoff hindeutet. Ein Einfluss des Wasserstoffs auf den Einbau der Magnesium-Akzeptoren ist aber trotzdem in diesen Proben nicht auszuschließen, da der Wasserstoff-Partialdruck auf Grund der Dissoziation von Ammoniak deutlich höher als der des Gallium-Precursors ist.

Das Wachstum mit Hilfe von MBE ist daher die geeignetste Methode, um den Einfluss des Wasserstoffs auf die Inkorporation von Magnesium zu untersuchen, da die Proben hier unter Wasserstoff-freien Bedingungen hergestellt werden können. Durch die geringen Temperaturen beim Wachstum ist jedoch auch ein Einbau von Magnesium oberhalb des Löslichkeitslimits vorstellbar.

Experimenteller Setup

Um den Einfluss von Wasserstoff auf die Inkorporation von Magnesium zu untersuchen, wurde die *rf*-Plasmaquelle der GaN MBE Anlage modifiziert, so dass zusätzlich zu der Stickstoffversorgung Wasserstoff in die Quelle eingespeist werden konnte. Die Regelung des Wasserstoff-Flusses geschieht in diesem System über ein Nadelventil, währenddessen der Stickstofffluss über ein Massenflussregler kontrolliert wird. Während der Stickstofffluss reproduzierbar über den Massenflussregler einstellbar ist, muss der Wasserstoff-Fluss vor Beginn des Schichtwachstums manuell eingeregelt werden. Als Maßstab für den Wasserstoff-Fluss wurde der durch ihn erzeugte H_2 -Hintergrunddruck in der Wachstumskammer genommen, der mit Hilfe des Massenspektrometers der Wachstumskammer im Restgasanalysemodus bestimmt wurde. In den hier vorgestellten Proben wurden H_2 -Hintergrunddrücke bis zu $8 \cdot 10^{-7}$ Torr verwendet. Demgegenüber beträgt der N_2 -Partialdruck in der Kammer bei einem Stickstofffluss von 1,3 sccm typischer Weise $1,52 \cdot 10^{-5}$ Torr. Durch die unterschiedliche Pumpwirkung der Cryopumpe auf die beiden Gase, lässt sich das Mischungsverhältnis der Gase in der *rf*-Plasmaquelle hieraus jedoch nicht direkt ableiten.

Proben

Für diese Untersuchung wurde eine Probenserie hergestellt, bei der jeweils eine nominell 1 μm dicke Schicht auf einer 20 nm dicken Nukleationsschicht auf einem Viertelstück eines Saphir-Substrates bei einer Wachstumstemperatur von 680 °C abgeschrieben wurde. In der Serie entstanden folgende Proben:

- undotierte Probe, Wasserstoff-Stickstoff Mischplasma
- Magnesium-dotierte Probe, Stickstoff-Plasma
- Magnesium-dotierte Probe, Wasserstoff-Stickstoff Mischplasma

Für die Magnesium-Zelle wurde für diese Proben eine Temperatur von 536 °C gewählt entsprechend einem Gallium-Strahldruck von ca. $2,5 \cdot 10^{-7}$ Torr. Der H_2 -Partialdruck in der Kammer betrug für die unter Mischplasma hergestellten Proben ca. $8 \cdot 10^{-7}$ Torr.

Neben dieser Serie wurde für SIMS-Untersuchungen eine Multischichtstruktur hergestellt, in deren dotierten Schichten sowohl der Wasserstoff-Fluss durch die *rf*-Plasmaquelle, als auch die Magnesium-Zellentemperatur variiert wurde. Die dotierten Schichten in dieser Struktur wurden auf einem 100 nm dicken, undotierten GaN-Puffer aufgewachsen und sind untereinander durch undotierte GaN-Schichten

3. *p*-Dotierung

separiert, die ohne Wasserstoff-Plasma gewachsen wurden. Zwischen den einzelnen Schichten wurde das Wachstum unterbrochen, um den Wasserstoff-Fluss einzuregulieren, bzw. um den Wasserstoff-Partialdruck in der Kammer absinken zu lassen. Die einzelnen Schichten dieser Struktur haben eine Dicke von 100 nm. Die Parameter der dotierten Schichten sind in der folgenden Tabelle dargestellt:

Schichtnummer	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Mg-Zellentemperatur (°C)	536	536	536	556	556	556	516	516	516
H ₂ -Druck (10 ⁻⁷ Torr)	0	8	40	0,2	8	40	0,2	8	40

Tabelle 3.3.: Schichtparameter der Multischichtstruktur.

Für die undotierten GaN-Schichten, die zwischen den dotierten Schichten sind, wurde der Wasserstoff-Fluss durch die *rf*-Plasmaquelle abgestellt und gewartet, bis der Wasserstoff-Partialdruck in der Kammer auf $2 \cdot 10^{-8}$ Torr abgesunken war. In diesem Bereich lässt die Pumpwirkung der Cryopumpe gegenüber dem Wasserstoff nach, so dass eine weitere Absenkung des Wasserstoffdrucks mit einer Wachstumsunterbrechung von über einer halben Stunde verbunden gewesen wäre. Auf Grund dessen ist in den ohne Wasserstoff-Plasma gewachsenen Schichten mit den Nummern 4 und 7 ein Wasserstoff-Hintergrunddruck von $2 \cdot 10^{-8}$ Torr in der Kammer verblieben. Die zu den Magnesium-Zellentemperaturen gehörigen Strahldrücke ergeben sich für 516 °C Zell-Temperatur zu $1,4 \cdot 10^{-7}$ Torr, für 536 °C zu $2,5 \cdot 10^{-7}$ Torr und für 556 °C zu $3,9 \cdot 10^{-7}$ Torr. Die Wachstumstemperatur dieser Probe betrug 680 °C.

SIMS-Ergebnisse

Diese Multischichtstruktur wurde an der Universität Giessen in der Arbeitsgruppe von B. K. Meyer mit Hilfe von SIMS-Messungen untersucht. Aus diesen Messungen konnten die Magnesium-Konzentrationen der einzelnen Schichten extrahiert werden und sind in Abbildung 3.11 für die unterschiedlichen Magnesium-Zellentemperaturen gegenüber dem während des Wachstums herrschenden Wasserstoff-Partialdrucks aufgetragen.

Diese Messungen zeigen, dass die Anwesenheit von Wasserstoff den Einbau in die Proben wesentlich verstärkt, so ist in dem untersuchten Bereich ein Anstieg der Magnesium-Konzentration in dem GaN von ca. einer Größenordnung von ca. $4 \cdot 10^{20}$ 1/cm³ auf $4 \cdot 10^{21}$ 1/cm³ zu sehen. Für die Schichten, die ohne Wasserstoff-Plasma hergestellt wurden, korreliert der Magnesiumgehalt mit dem Magnesium-Strahldruck. Die Zunahme der Magnesiumkonzentration mit dem Magnesiumfluss ist mit ca. +70 % jedoch deutlich geringer als die Variation des Strahldruckes (+180 %). Die Peaks in den SIMS-Messungen variieren mit der Tiefe der Schichten um ca. 20 %.

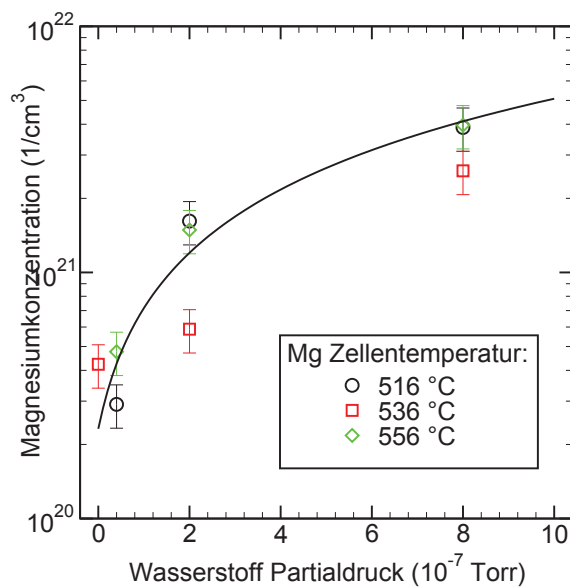


Abbildung 3.11.: Mit SIMS bestimmte Magnesiumkonzentration in Abhängigkeit des Wasserstoff-Hintergrunddrucks für verschiedene Magnesium-Zelltemperaturen. Die eingezeichnete Kurve gibt die Abhängigkeit bei einer linearen Zunahme des Magnesiumgehalts mit dem Wasserstoff-Partialdruck an.

Nimmt man diese Variation als Maß für den Fehler der Datenpunkte, so ist die maximale Variation des Magnesiumgehaltes in den Proben immer noch geringer als die Variation des Strahldrucks. Somit können die SIMS-Daten als Indiz für eine Sättigung des Magnesium-Gehaltes auf Grund des Lösungs-Limits dienen. Ebenso zeigt sich in den elektrischen Messungen aus der Magnesiumfluss-Serie genau in diesem Bereich ein Rückgang der Ladungsträgerkonzentrationen bei Raumtemperatur. Der Einfluss des Wasserstoffs auf diese Messungen ist auszuschließen, da die mit $516\text{ }^{\circ}\text{C}$ und $556\text{ }^{\circ}\text{C}$ Magnesium-Zelltemperatur gewachsenen Proben bei dem selben Wasserstoff-Hintergrunddruck gewachsen wurden.

An den Schichten mit Magnesium-Zelltemperaturen von $516\text{ }^{\circ}\text{C}$ und $536\text{ }^{\circ}\text{C}$ ist zu sehen, dass der Magnesium-Gehalt in der Probe im Wesentlichen durch das Wasserstoff-Angebot bestimmt ist. In die Graphik ist als Hilfslinie eine Kurve eingezeichnet, die eine lineare Zunahme des Magnesium-Gehaltes mit dem Wasserstoff-Fluss von $4,8 \cdot 10^{27}\text{ } 1/(\text{cm}^3\text{ Torr})$ wiedergibt. Es ist zu erkennen, dass der Magnesium-Gehalt für die Proben mit Magnesium-Zelltemperaturen von $516\text{ }^{\circ}\text{C}$ und $556\text{ }^{\circ}\text{C}$ durch diesen Zusammenhang erklärbar ist.

Die bei $536\text{ }^{\circ}\text{C}$ Magnesium-Zelltemperatur hergestellten Schichten zeigen demgegenüber ein abweichendes Verhalten. Eine Erklärung für dieses Verhalten kann durch die strukturelle Qualität der Probe in dem unteren Bereich der Probe gegeben werden: So sind die ersten 300 bis 400 nm der Probe beim Wachstum in der MBE durch eine erhöhte Anzahl von Stufen-Versetzungen gekennzeichnet (siehe auch Abschnitt 3.2.4). Es könnte in diesem Probenbereich zu einer Wechselwirkung mit diesen Versetzungen kommen, die den zusätzlichen Einbau von Magnesium auf Grund des Wasserstoffplasmas unterdrücken. Dieses wird auch durch den Befund unter-

stützt, dass bei der Schicht mit dem geringeren Wasserstoff-Fluss der Einbau des Magnesiums stärker unterdrückt ist gegenüber der mit dem höheren Wasserstoff-Fluss. Gerade in dem Bereich zwischen den beiden Schichten ist auch die Reduktion der Versetzungsdichte zu erwarten. Eine weitere Erklärung für dieses abweichende Verhalten könnte auch eine Polaritätsumkehr während der ersten Schichten in dieser Struktur sein, die auf Grund eines zu hohen Magnesiumbedeckung auf der Oberfläche hervorgerufen werden kann. Eine genauere Diskussion dieser Möglichkeit findet sich in dem Abschnitt über die strukturellen Eigenschaften der Proben.

Der vermehrte Magnesium-Einbau unter der Anwesenheit von Wasserstoff muss auf Grund der Ergebnisse aus der Magnesium-Flussreihe mit einem erhöhten Haftkoeffizienten des Magnesiums auf der Oberfläche verbunden sein, da in dem Bereich der verwendeten Magnesiumflüsse ohne Wasserstoff eine starke Variation der Ladungsträgerdichte mit dem Magnesiumangebot messbar ist und die Serie mit variierender Substrattemperatur gezeigt hat, dass der Magnesium-Einbau durch die Desorption von Magnesium begrenzt ist. Zusätzlich zu einem erhöhten Haftkoeffizienten kann jedoch auch ein erhöhtes Lösungslimit und ein schnellerer Einbauprozess aus dem physisorbierten Zustand in die Probe der Desorption von Magnesium entgegenwirken, da die Verweildauer des Magnesiums in dem physisorbierten Zustand verringert wird. Die Analyse der strukturellen Qualität und der elektrischen Eigenschaften der Probenserie soll daher in den nächsten Abschnitten herausstellen, welchen Einfluss die unterschiedlichen Prozesse auf den Einbau des Magnesiums nehmen.

Elektrische Eigenschaften

Auf Grund der deutlichen Erhöhung der Magnesiuminkorporation unter der Verwendung eines Wasserstoff-Stickstoff-Mischplasmas bestand die Hoffnung Magnesium-dotierte Schichten mit einer wesentlich höheren Löcherkonzentration herstellen zu können. Hall-Messungen bei Raumtemperatur an den drei Proben aus der oben dargestellten Probenserie zeigen jedoch ein ganz anderes Bild: Während die unter reinem Stickstoff-Plasma gewachsene Probe eine Ladungsträgerkonzentration von $2 \cdot 10^{18} \text{ 1/cm}^3$ bei einer Beweglichkeit von 2 Vs/cm^2 zeigte, erwies sich die unter Mischplasma hergestellte Probe nach dem Wachstum eine schwache n-Leitfähigkeit mit einem spezifischen Widerstand von $132 \text{ } \Omega\text{cm}$. Auf Grund dieses hohen Widerstandes war eine Messung der Ladungsträgerkonzentration an dieser Probe nicht möglich. Demgegenüber konnte an der nominell undotierten Probe, die mit Hilfe des Mischplasmas hergestellt wurde, eine Elektronendichte von $1,3 \cdot 10^{20} \text{ 1/cm}^3$ nachgewiesen werden. Diese Ladungsträgerkonzentration ist bedeutend höher als die von anderen undotierten Proben, die in dieser Wachstumskammer hergestellt wurden und typischerweise eine Ladungsträgerkonzentration um die $5 \cdot 10^{17} \text{ 1/cm}^3$ aufwei-

sen [155]. Durch das Wachstum unter Mischplasma wird somit eine hohe Störstellenkonzentration erzeugt, die einen drastischen Anstieg der Elektronendichte nach sich zieht. Diese Störstellenkonzentration ist jedoch nicht ausreichend, um die schwache n-Leitfähigkeit der Magnesium-dotierten Probe, die mit Mischplasma gewachsen wurde, zu erklären, da die per SIMS bestimmte Magnesiumkonzentration der vergleichbaren Schicht in der Multischichtstruktur mit ca. $4 \cdot 10^{21} \text{ 1/cm}^3$ eine Größenordnung oberhalb der Ladungsträgerkonzentration der Magnesium-undotierten Probe liegt. Es zeigte sich außerdem, dass auch durch thermischen Annealen an dieser Probe keine p-Leitfähigkeit erreichbar war; lediglich nach dem Annealen bei Temperaturen von $750 \text{ }^\circ\text{C}$ war eine Erhöhung des spezifischen Widerstandes auf einen Wert von $1,8 \text{ k}\Omega\text{cm}$ zu beobachten, was auf eine Reduktion der Donatoren in dieser Schicht schließen lässt. Da jedoch der Magnesium-Wasserstoff-Komplex bei diesen Temperaturen ausheilbar ist, kann die Bildung eines Magnesium-Wasserstoff-Komplexes als alleinige Ursache für die Kompensation der Probe ausgeschlossen werden.

Planare Defekte

Einen Aufschluss über den Kompensationsmechanismus und den Einbauprozess des Magnesiums ergaben TEM-Querschnittsbilder, die von Angelika Vennemann in der Gruppe von Dr. R. Kröger in unserem Institut erstellt wurden (siehe Abbildung 3.12). Diese Aufnahmen entstanden an Querschnitten, die bei den mit Wasserstoff gewachsenen Proben aus der $\{2\bar{1}\bar{1}0\}$ -artigen und bei der nur mit Magnesium-dotierten Probe aus der $\{01\bar{1}0\}$ -artigen Querschnittsfläche entstammen. Die zur Dunkelfeld-Abbildung genutzten Reflexe waren für die ersten Proben der $\{01\bar{1}0\}$ und für die letztere der $\{2\bar{1}\bar{1}0\}$ -Reflex. Auf Grund dieser Bedingungen sind die Querschnittsaufnahmen sensitiv auf Versetzungsvektoren innerhalb der c-Ebene des Galliumnitrids liegen.

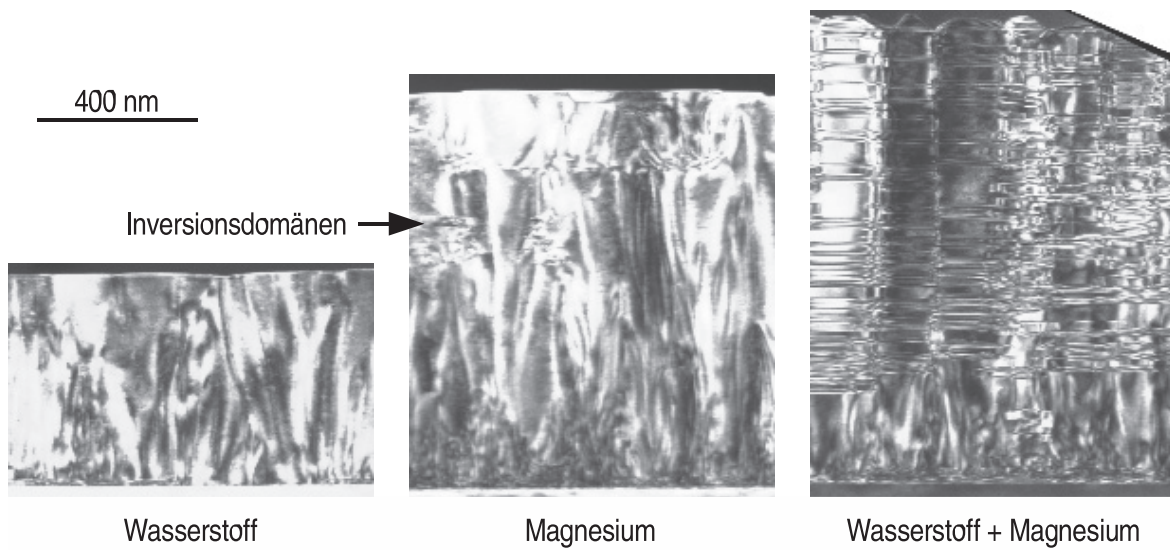


Abbildung 3.12.: TEM-Querschnittsaufnahmen im Dunkelfeld ($g \perp (0001)$) der unter Wasserstoff-Stickstoff-Mischplasma gewachsenen Probe (links), der Magnesium-dotierten Probe (Mitte) und der unter Mischplasma gewachsenen Magnesium-dotierten Probe (rechts).

In den Aufnahmen der beiden Magnesium-dotierten Proben sind planare Defekte sichtbar, die in der unter Mischplasma hergestellten Probe eine deutlich höhere Dichte aufweisen und über den gesamten Kristall verteilt sind, während in der undotierten Probe keine solchen Defekte sichtbar waren. Diese Defekte sind wahrscheinlich verantwortlich für die hohe Kompensation der unter Mischplasma gewachsenen Magnesium-dotierten Probe. Bisher konnte für diese Defekte mittels TEM nicht verifiziert werden, ob es sich um Stapelfehler oder um Inversionsdomänen handelt. Es sprechen jedoch Indizien dafür, dass es sich um Inversionsdomänen handelt:

- Die Defektebenen treten, soweit in den Aufnahmen erkennbar, gepaart auf. Für Stapelfehler wäre das paarige Auftreten nicht notwendig.
- Der Kontrast an den Defekten ist in homogenen Bereich symmetrisch als Hell-Hell oder Dunkel-Dunkel zu identifizieren und ist für Inversionsdomänen typisch [156]

Solche planaren Inversionsdomänen wurden bereits in der Literatur für Stickstoff-polares GaN berichtet [156] und mit der Magnesium-Dotierung in Verbindung gebracht. Für diese durch Magnesium hervorgerufenen Inversionsdomänen wurden zwei verschiedene Modelle vorgeschlagen, die beide eine Versetzung in der c-Ebene und eine Magnesium-Monolage an der Domänengrenze beinhalten (siehe Abbildung 3.13). Anhand von EDX-Messungen konnte für diese Inversionsdomänen bereits die Beteiligung von Magnesium nachgewiesen werden [157]. Die Modelle ge-

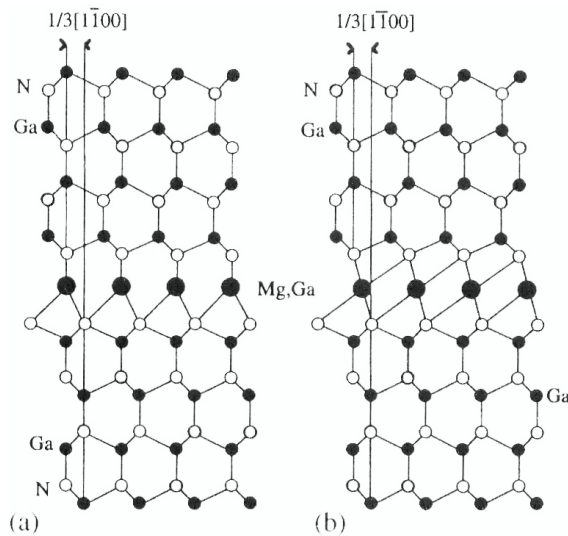


Abbildung 3.13.: Vorgeschlagene Defektstrukturen für planare Inversionsdomänen.

hen beide von einer kompletten Magnesium-Monolage an der unteren Inversionsdomänengrenze und einer Versetzung der Inversionsdomänen um $1/3[1\bar{1}00]$ gegenüber der umgebenden Matrix aus. Aus der TEM-Aufnahme lässt sich eine Dichte der Inversionsdomänen entlang der c-Achse von ca. $\lambda=40$ $1/\mu\text{m}$ abschätzen und aus der Gitterkonstante von GaN ergibt sich die Grundfläche A einer Einheitszelle zu $(3,3189 \text{ \AA})^2 \cdot \cos(60^\circ)=5,5 \text{ \AA}^2$. Die Magnesiumkonzentration N_{Mg} , die unter der Annahme einer Magnesium-Monolage an der Inversionsdomänengrenze in Kristall eingebracht wird, errechnet sich dann zu:

$$N_{Mg} = \lambda/A = 7,2 \cdot 10^{20} \text{ 1/cm}^3 \quad (3.14)$$

Diese Konzentration ist wesentlich geringer als die an der Multischichtprobe bestimmten Magnesiumkonzentrationen von $4 \cdot 10^{21} \text{ 1/cm}^3$ für vergleichbare Wachstumsparameter. Auch unter der Annahme, dass sowohl an der unteren als auch an der oberen Domänengrenze eine Monolage Magnesium eingebaut wird, ist die Zunahme der Magnesiumkonzentration nicht vollständig durch den Einbau in den planaren Defekten zu erklären. Es ist somit davon auszugehen, dass nur ein geringer Teil des Magnesiums, das zusätzlich durch den Wasserstoff in den Kristall eingebracht wird, an den Domänengrenzen und der größere Teil in den Kristall eingebaut wird. Da auch an der Magnesium-dotierten Probe ohne Wasserstoff-Plasma die Bildung von planaren Defekten beobachtet wird, ist anzunehmen, dass sich diese Probe bereits am Lösungslimit für den Magnesium-Akzeptor befindet. Somit ist von einer erhöhten Löslichkeit des Magnesium-Akzeptors bei der Beteiligung von Wasserstoff auszugehen. Die hohe Kompensation der Probe ist auf die Bildung der planaren Defekte zurückzuführen. Zusätzlich wird eine erhöhte Anzahl donatorartigen Defekten, die in der undotierten Probe durch den Wasserstoff hervorgerufen

wurde, zu der Kompensation beitragen.

Schraubenversetzungen / Polaritätsumkehr

In Abbildung 3.14 sind TEM-Querschnittsaufnahmen im Dunkelfeld unter Verwendung des (0002)-Reflexes dargestellt. Unter diesem Reflex sind die Versetzungen mit Schraubenanteil sichtbar, die in beiden Proben teilweise in Senken der Oberfläche münden.

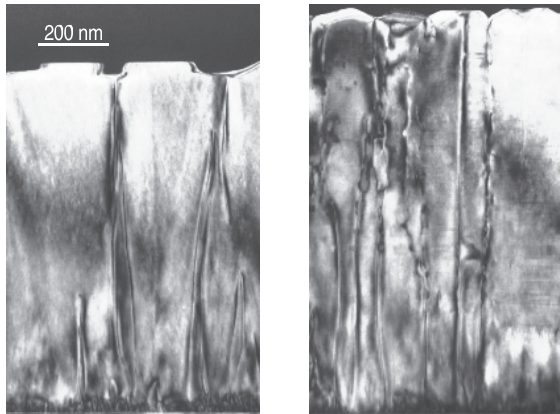


Abbildung 3.14.: TEM-Querschnittsaufnahmen im Dunkelfeld ($g \parallel (0001)$) der Magnesium-dotierten Proben gewachsen unter Stickstoff-Plasma (links) und Mischplasma (rechts).

Somit nehmen die als elektrisch aktiv bekannten Schraubenversetzungen [146, 147, 148] Einfluss auf die Diffusion von Magnesium auf der Oberfläche oder modifizieren die De- bzw. Adsorption von Magnesium. Zusätzlich ist zu erkennen, dass in der unter Stickstoff-Plasma gewachsenen Probe diese Senken durch senkrechte Fassetten begrenzt sind, während in der mit Mischplasma hergestellten Probe die Fassetten geneigt sind. Wie im Abschnitt 3.4 näher erläutert wird, werden die $\{11\bar{2}N\}$ -artigen Fassetten ($N=2,3$) unter Magnesium-reichen Bedingungen stabilisiert. Die Ausrichtung der Fasette deutet jedoch auf eine Gallium-Polarität der Schicht hin. Dieses wird unterstützt durch eine Beobachtung, die in der Abbildung 3.15 gemacht werden kann: An dem planaren Defekt, der um die Versetzung herumläuft, ist die sichtbare Fasette in dem Defekt an der c-Ebene gespiegelt.

Die Spiegelung der Fassettenausrichtung in den Defekten legt nahe, dass es sich in der Tat um Magnesium-stabilisierte Fassetten handelt. Leider konnte bisher nicht mittels CBED-Aufnahmen die Polaritätsumkehr nachgewiesen werden, da in der Probe keine ausreichend großen Bereiche mit vergleichbaren Querschnittsdicken vorliegen, um die Polaritätsumkehr durch eine direkte Inversion des CBED-Abbildung nachzuweisen. Daher ist für die Bestimmung der Polarität eine aufwändige Simulation der CBED-Bilder notwendig, für die eine genaue Bestimmung der Querschnittsdicke vorliegen muss. Die Ausrichtung der Fassetten ist jedoch ein starker Hinweis auf die Polaritätsumkehr der Schicht und zeigt, dass die planaren Defekte mit hoher Wahrscheinlichkeit Inversionsdomänen sind.

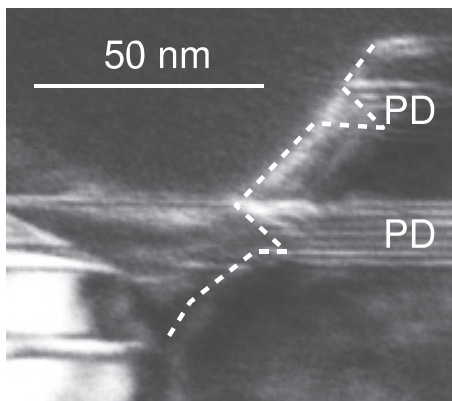


Abbildung 3.15.: Ausschnitt aus Abbildung 3.12 der Magnesium-dotierten und Mischplasma gewachsenen Probe. Die gestrichelte Linie verdeutlicht den Verlauf der Oberfläche. Im Bereich der planaren Defekte ist eine Spiegelung der Oberflächenfasette an der c-Ebene zu sehen.

In der mit Stickstoff-Plasma hergestellten Probe sind diese Magnesium-stabilisierten $\{11\bar{2}N\}$ -artigen Fassetten nicht zu sehen. Da diese Probe nur wenige planare Defekte zeigt, ist davon auszugehen, dass die Stickstoffpolarität über die ganze Probe erhalten ist. Bei dieser Polarität zeigen die Oberflächen der Magnesium-stabilisierten Fassetten entgegen der Wachstumsrichtung, weswegen die Ausbildung solcher Fassetten unwahrscheinlicher ist. Zusätzlich kann hieraus auf ein geringeres Magnesium-Angebot auf der Oberfläche geschlossen werden, das für eine Stabilisierung der $\{11\bar{2}N\}$ -artigen Fassetten nicht ausreichend ist. Dieses lässt auf eine Erhöhung des Haft-Koeffizienten von Magnesium unter der Anwesenheit von Wasserstoff schließen.

Wachstumsraten

Wie in Abbildung 3.12 zu sehen war, unterscheiden sich die Schichtdicken der Proben erheblich untereinander, obwohl die Wachstumszeiten gleich sind. Insbesondere die undotierte Probe zeichnet sich durch eine geringere Schichtdicke von 527 nm aus. Da unter Gallium-reichen Bedingungen gewachsen wurde, könnte vermutet werden, dass bei dieser Probe durch das Zumischen von Wasserstoff in die Plasma-Quelle die Aktivierung des Stickstoffs in der Quelle reduziert wurde und dadurch das durch den Stickstoff limitierte Wachstum verlangsamt wurde. Dieser Effekt der *rf*-Plasmaquelle wurde von Carsten Kruse in einer Diplomarbeit nachgewiesen [158]. Hierzu steht jedoch im Kontrast, dass die mit Mischplasma gewachsene Magnesium-dotierte Probe sogar eine höhere Wachstumsrate aufweist als die unter Stickstoff-Plasma gewachsene (Schichtdicken 1160 nm bzw. 987 nm). Daraus folgt, dass es durch den Wasserstoff bei der undotierten Probe zu einem Ätzen der Oberfläche kommt. So ist anzunehmen, dass sich auf der Oberfläche leicht flüchtiges Galliumhydrid bildet, das einen Siedepunkt von 0 °C hat [159], und somit das Wachstum Gallium-arm wird. In der dotierten Probe passiviert das Magnesium die Oberfläche gegenüber dem Wasserstoff. Magnesiumhydrid ist in kristalliner Form bekannt als ei-

ner der effektivsten Medien zur Wasserstoffspeicherung, so dass durch das Magnesium der Wasserstoff an der Oberfläche gebunden wird. Eine weitere Erklärung für die höhere Wachstumsrate der unter Mischplasma gewachsenen Magnesium-dotierten Schicht ergibt sich, wenn man von einer Polaritätsumkehr der Schicht ausgeht. So ist bekannt, dass die Gallium-polare Oberfläche höhere Wachstumsraten aufweisen kann [145].

3.2.5. Zusammenfassung

Die Untersuchungen an den Magnesium-dotierten Schichten, die in der MBE hergestellt wurden, zeigen, dass der Einbau von Magnesium durch zwei Prozesse begrenzt wird: Zum einen spielen kinetische Prozesse auf der Wachstumsoberfläche eine Rolle und zum anderen ist der Einbau von Magnesium durch die Bildung von planaren Defekten begrenzt.

In der Magnesiumflussserie wurde gezeigt, dass die Löcher-Konzentration über einen weiten Bereich mit dem Magnesiumfluss skaliert. Die Kompensation der Dotierung bei hohen Magnesium-Flüssen lässt sich auf die Bildung von planaren Defekten zurückführen, die in der unter Stickstoff-Plasma und vergleichbaren Bedingungen gewachsenen Magnesium-dotierten Schicht in den Untersuchungen zum Wasserstoff-Mischplasma zu sehen sind. Die Serie mit variierender Substrattemperatur zeigt, dass der Haftkoeffizient und die Desorption von Magnesium von der Oberfläche einen entscheidenden Einfluss auf die Dotierung nehmen.

Mit den Experimenten zum Wasserstoff-Plasma konnte gezeigt werden, dass die Anwesenheit von Wasserstoff den Einbau von Magnesium wesentlich verstärken kann. Das Magnesium wird jedoch zu einem großen Teil in planaren Defekten eingebaut, die wahrscheinlich Inversionsdomänen sind. Der höhere Magnesiumgehalt der Proben ist somit nicht nur auf eine höhere Löslichkeit bei Wasserstoff-Zufuhr zurückzuführen. Eine Erhöhung der p-Leitfähigkeit durch Verwendung eines Misch-Plasmas konnte nicht erreicht werden, die hohe Kompensation der Schicht ist sowohl auf die planaren Defekte als auch auf die Erzeugung von Punktdefekten durch den Wasserstoff zurückzuführen.

3.3. p-Dotierung mit Hilfe der MOVPE

Die am besten untersuchte Methode zur Dotierung von GaN mittels Magnesium ist die metallorganische Dampfphasenepitaxie, mit der auch als erstes p-dotierte Schichten hergestellt werden konnten. Seitdem haben viele Forscher die Optimierung der Mg-Dotierung mittels MOVPE und die elektrischen, optischen und strukturellen Eigenschaften der hieraus entstandenen Proben untersucht [160, 161, 162,

163, 72, 164]. Die aus diesen Untersuchungen berichteten Werte für die Leitfähigkeit der Schichten und der Löcherkonzentrationen variieren in einem weiten Bereich. Der geringste spezifische Widerstand wurde mit $0,1 \Omega\text{cm}$ bei Löcherkonzentrationen von $5 \cdot 10^{18} \text{ 1/cm}^3$ [77] erreicht.

Der Kompensationsmechanismus, der zur Limitierung der Dotierung führt, wird unterschiedlich diskutiert. Eine hohe Kompensation beeinflusst sowohl die freie Ladungsträgerdichte als auch die Beweglichkeit der Ladungsträger. Eine Kompensation, die von den Wachstumsbedingungen und dem Reaktor-Design abhängt, könnte die große Variation der berichteten Werte erklären. In SIMS Messungen zeigen sich jedoch gewöhnlicherweise keine hohen Konzentrationen einer bestimmten Verunreinigung, die eine solche Kompensation erklären könnten, daher wird der kompensierende Donator oftmals einem intrinsischen Defekt, wie z.B. einer Stickstoffvakanz zugeschrieben [73, 165].

Der Einbau von Magnesium in ausgedehnte Defekte und die hiermit verbundene Reduzierung der Magnesium-Dotierung hat bisher jedoch relativ geringe Beachtung gefunden. Die Ergebnisse von Neugebauer *et al.* sagen ein Lösungslimit vorher, das durch die Bildung einer Magnesiumnitrid-Phase gegeben ist [117]. Auf Grund des Wachstums in der MOVPE, das näher am thermodynamischen Gleichgewicht ist, sollte der Einfluss des Lösungslimits größer sein als in der MBE. Erst in den letzten Jahren wurde vermehrt über die Defektbildung von ausgedehnten Defekten in Magnesium-dotiertem GaN berichtet [166, 167] und deren Einfluss auf die Charakteristik von Bauelementen diskutiert [168]. Bisher ist jedoch unverstanden, unter welchen Bedingungen es zu der Defektbildung kommt.

In der Arbeit an den GaN-Laserdioden wurde schnell klar, dass die Bildung von ausgedehnten Defekten einen erheblichen Einfluss auf die p-Dotierung nimmt und die Betriebsspannungen der Laserdioden in die Höhe treibt (siehe Abschnitt 2.3). Daher stand im Zentrum der Optimierung der p-dotierten Schichten die Untersuchung dieser ausgedehnten Defekte, die in Proben, die mit Hilfe von MOVPE hergestellt wurden, eine pyramidale Form aufweisen. In diesem Abschnitt wird daher nur kurz auf den Einfluss der Flussverhältnisse im Reaktor auf die p-Dotierung eingegangen, um dann auf die Bildung der pyramidalen Defekte und deren Struktur einzugehen.

3.3.1. Abhängigkeit vom Magnesiumfluss

Dieser Abschnitt beschreibt die Untersuchungen, die an Proben vorgenommen wurden, die einen weiten Bereich der Magnesiumdotierung abdecken. Das Ziel dieser Untersuchungen war die optimale Dotierkonzentration zu finden, die unterhalb des Einsetzens von Selbstkompensation liegt. Hierzu wurde eine Probenserie hergestellt, in welcher der Magnesiumfluss in der p-dotierten Schicht im Bereich von 200 sccm bis 500 sccm, entsprechend einem molaren Fluss von $0,36 \mu\text{Mol/min}$ bis

0,9 $\mu\text{Mol}/\text{min}$, variiert wurde. Aus anderen Arbeiten war bekannt, dass eine bessere Dotierung bei kleinen Wachstumsraten erreicht werden kann [143]. Daher wurde der Gallium-Fluss für diese Proben mit 20 sccm (40,6 $\mu\text{Mol}/\text{min}$) im Vergleich zu dem Wachstum von n-dotierten Schichten (33 sccm bis 47 sccm) relativ gering gehalten. Aus diesen Flüssen ergibt sich ein molares Magnesium- zu Gruppe-III-Precursor Verhältnis von 0,0088 bis 0,022. Da Stickstoff-Vakanzen als mögliche Ursache einer Kompensation der Schichten sein können [145], wurde für diese Schichten ein hoher Ammoniakfluss von 5000 sccm gewählt, resultierend in einem Gruppe-V/Gruppe-III-Verhältnis von ca. 5500. Die Schichten wurden bei einem Reaktordruck von 100 Torr und einer Wachstumstemperatur von 1050 °C gewachsen. Aus den oben genannten Wachstumsparametern ergab sich für diese Schichten eine Wachstumsrate von ca. 600 $\mu\text{m}/\text{h}$.

Für diese Schichten wurde eine Probe auf einem 2-Zoll-Wafer gewachsen, die aus einer 1 μm dicken undotierten GaN-Schicht und einer 500 nm dicken schwach p-dotierten Schicht bestand (Magnesiumfluss 50 sccm) und als Grundlage für die verschiedenen dotierten Schichten dient. Die undotierte Schicht dieser Probe wurde unter Standardbedingungen (100 Torr, 47 sccm Ga-Fluss, 1050 °C) hergestellt, um eine von der Dotierung unbeeinflusste Nukleation und Koaleszenz der Schicht zu gewährleisten. Um die Beeinflussung der Hall-Messungen durch diese intrinsisch n-leitfähige Schicht zu verhindern, diente die schwach dotierte Schicht, die auf Grund des geringen Magnesium-Flusses kompensiert ist. Diese Probe wurde in Sechstel geteilt und die 500 nm dicken Schichten der Dotierungs-Serie aufgewachsen. Nach dem Wachstum wurden die Proben in Stickstoffatmosphäre für 20 Minuten bei 850 °C getempert und danach mittels Hall-Messungen und SIMS charakterisiert.

Die SIMS-Messungen an diesen Proben wurden am Institute of Electron Technology in Warschau vorgenommen. Die ermittelten Magnesiumkonzentrationen der Proben sind in Abbildung 3.16 gegenüber dem verwendeten Magnesiumfluss der Proben aufgetragen. Die Werte für einen Fluss von 50 sccm wurden aus allen vier Proben aus der unterliegenden kompensiert gewachsenen Schicht bestimmt. Die Werte für diese Schicht zeigen einen mittleren Magnesiumgehalt von $2,27 \cdot 10^{18} \text{ 1}/\text{cm}^3$ und eine Standardabweichung von $0,54 \cdot 10^{18} \text{ 1}/\text{cm}^3$. Da diese Schicht bei allen Proben aus demselben Wachstumsprozess stammt, deutet diese relativ hohe Standardabweichung von über 20 % auf Schwankungen im Einbau von Magnesium in die Schichten an, welche auf Fluss- oder Temperaturinhomogenitäten im Reaktor zurückzuführen sind. Ebenso kann dieser Fehler auf Ungenauigkeiten in den SIMS-Messungen begründet liegen. Die Standardabweichung kann als Maß für die Fehler in der Magnesiumkonzentration dienen, die an den hoch-dotierten Schichten gemessen wurden. Diese verhalten sich weitgehend linear mit dem angebotenen Magnesiumfluss und es sind keine Sättigungseffekte bei höheren Magnesiumflüssen erkennbar, die auf ein Lösungslimit hindeuten könnten. Lediglich die Probe mit einem Magnesium-Fluss

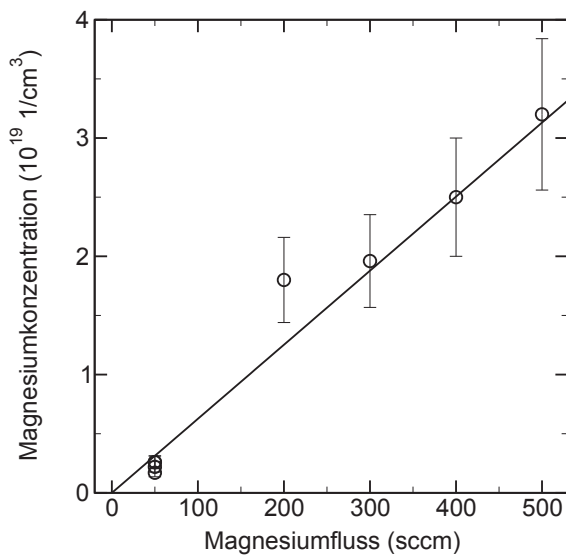


Abbildung 3.16.: Mit SIMS ermittelte Magnesiumkonzentrationen in Abhängigkeit des Magnesiumflusses.

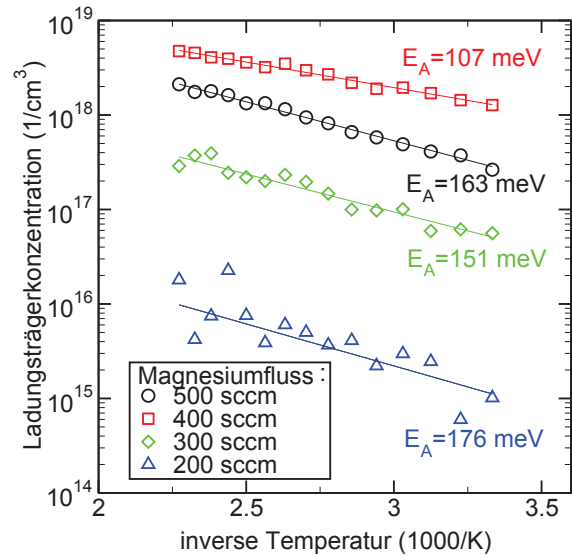


Abbildung 3.17.: Temperaturabhängige Löcherkonzentrationen der Magnesium-Fluss Serie.

von 200 sccm weicht von diesem linearen Verlauf ab.

Die temperaturabhängigen Ladungsträgerkonzentrationen zeigen bei allen Proben eine einfache exponentielle Abhängigkeit von der inversen Temperatur (siehe Abbildung 3.17). Es ist daher nicht möglich anhand der Gleichung 3.7 die Donator und Akzeptorkonzentrationen zu bestimmen. In der Abbildung ist daher nur die Aktivierungsenergie der Ladungsträger eingetragen, die sich aus der monoexponentiellen Angleichung ergibt.

Für die Proben bis zu einem Magnesiumfluss von 400 sccm nimmt die Aktivierungsenergie mit steigendem Magnesiumfluss ab, startend von 176 meV bei der am niedrigsten dotierten Probe bis hin zu 107 meV. Wie schon in dem Abschnitt über die Dotierung in der MBE beschrieben, kann eine Reduktion der Aktivierungsenergie auf eine erhöhte Konzentration an Störstellen zurückgeführt werden. Dieses Phänomen ist für Magnesium-dotierte Proben aus der MOVPE bekannt und wurde schon an anderer Stelle beobachtet [143].

Einen ähnlichen Verlauf findet man in den Ladungsträgerkonzentrationen: Mit steigendem Magnesiumangebot bis zu einem Magnesiumfluss von 400 sccm ist ein Anstieg der Ladungsträgerkonzentration zu sehen, während dessen bei der Probe mit dem höchsten Magnesiumfluss die Ladungsträgerkonzentration einbricht. Für diese Probe beginnt bereits die Selbstkompensation; als wahrscheinlichste Ursache hierfür ist die Bildung von pyramidalen Defekten zu nennen, deren Bildungsschwelle bei einem Magnesiumfluss ist, der zwischen den beiden am stärksten dotierten Proben liegt (siehe Abschnitt 3.4). Gleichzeitig weist diese Probe eine deutlich höhere Ak-

tivierungsenergie auf. Dieses deutet auf einen geringeren Kompensationsgrad auf Grund von Punktdefekten hin, welche die Aktivierungsenergie herabsetzen, und ist ein weites Indiz dafür, dass die Kompensation nicht auf der vermehrten Bildung von Punktdefekten beruht, sondern ausgedehnte Defekte Magnesium binden und hierdurch den Einbau von Magnesium auf Gitterplätzen reduzieren. Durch die geringere Akzeptordichte steigt die Fermi-Energie und in Folge dessen auch die Bildungsenergie der kompensierenden Störstellen an, so dass eine kleinere Donatorkonzentration zu erwarten ist.

Obwohl die beiden Proben mit den geringsten Magnesium-Flüssen in den SIMS-Messungen ähnliche Magnesium-Konzentrationen zeigen, weichen die Ladungsträgerkonzentrationen doch deutlich voneinander ab. Die für die SIMS-Messungen verwendeten Probenstücke liegen nahe dem Rand der Probe, während die Probenstücke für die Hall-Messungen aus dem zentralen Gebiet der Probe genommen wurden. Es ist davon auszugehen, dass bei diesen am Rand liegenden Probenstücken der Magnesium-Einbau auf Grund von Turbulenzen der Gas-Phase oder Temperaturinhomogenitäten stark von der Position auf der Probe abhängig ist und deswegen in der SIMS-Messung die eine Probe ein abweichendes Verhalten zeigt.

3.3.2. Einfluss des Gruppe-V/Gruppe-III Verhältnisses

Wie in den Grundlagen dieses Kapitels beschrieben, ist nach den Rechnungen von Bungaro der Einbau von Magnesium auf dem Galliumplatz leichter, wenn man unter Stickstoff-reichen Bedingungen wächst. Die hierdurch erzeugten Gallium Vakanzen können leicht mit Magnesiumatomen besetzt werden, so dass die Bildungsenergie des Magnesiumakzeptors sinkt. Um dieses zu überprüfen, muss hierzu in der MOVPE entweder der Ammoniak- oder der Galliumfluss verändert werden. Da stets unter Stickstoff-reichen Bedingungen gewachsen wird, führt die Variation des Galliumflusses eine Änderung der Wachstumsrate mit sich. Zudem muss hierbei der Magnesium-Fluss dem Galliumfluss angepasst werden, um ein konstantes Magnesium zu Gruppe-III Precursor-Verhältnis aufrecht zu erhalten. Die Veränderung der Wachstumsrate kann jedoch einen starken Einfluss auf den Einbau von Magnesium in den Kristall haben, insbesondere wenn mit dem Wachstum Segregationsprozesse verknüpft sind. Daher wurde für diese Probenserie stattdessen der Ammoniakfluss in einem Bereich von 3 bis 5 slm variiert. Um vergleichbare Bedingungen im Reaktor zu schaffen, wurde der Gesamtfluss durch den Reaktor für alle Proben bei 12 slm konstant gehalten. Hierzu wurde für die Proben mit geringerem Ammoniakfluss der Differenzfluss durch einen entsprechend höheren Fluss des Trägergases Wasserstoff ersetzt. Auf Basis der Probenserie im vorherigen Abschnitt wurde das Magnesium/Gallium-Verhältnis der besten Probe übernommen. Um höhere Wachstumsraten zu erreichen wurde jedoch ein größerer Gallium-Fluss von 25 sccm ge-

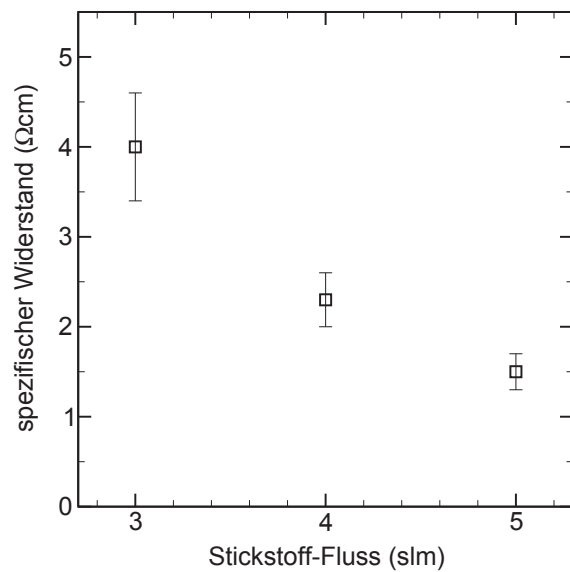


Abbildung 3.18.: Abhängigkeit des spezifischen Widerstandes von dem molaren Gruppe-V zu Gruppe-III Verhältnis.

wählt und der Magnesium-Fluss dementsprechend auf 500 sccm angepasst. Diese Schichten wurden – wie oben beschrieben – auf eine mit Magnesium kompenzierte Schicht mit einer Dicke von 500 nm abgeschieden.

Die elektrischen Eigenschaften dieser Proben wurden mittels Hall-Messungen bei Raum-Temperatur charakterisiert. Die Beweglichkeit der Ladungsträger ergab sich in allen drei untersuchten Proben zu ca. $9 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. Demgegenüber nahm die Ladungsträgerkonzentration von $5,4 \cdot 10^{17} \text{ 1/cm}^3$ bei der Probe mit einem Ammoniakfluss von 5 slm auf Werte von $2,1 \cdot 10^{17} \text{ 1/cm}^3$ bei der Probe mit dem geringsten Ammoniakfluss ab. Hiermit verknüpft ist ein Anstieg des spezifischen Widerstandes, wie er in Abbildung 3.18 zu sehen ist. Neben dem vermehrten Einbau von Magnesium an Gallium-Gitterplätzen kann die Erhöhung der Ladungsträgerkompensation durch eine geringere Kompensation der Schicht hervorgerufen werden. Dieses ist plausibel, wenn davon ausgegangen wird, dass die Kompensation über Stickstoff-Vakanzen geschieht, wie es von diversen Forschergruppen vorgeschlagen wurde [169, 170, 171]. Durch den höheren Ammoniak-Partialdruck bei höheren Flüssen könnte die Bildung dieser Vakanzen unterdrückt werden. Diese Vermutung wird von Ergebnissen von Kozodoy [172] unterstützt, die einen geringeren Kompensationsgrad bei Proben aufzeigen, die bei Atmosphärendruck gewachsen wurden. Auf Grund des höheren Reaktordruckes ist unter diesen Wachstumsbedingungen der Ammoniak-Partialdruck ebenfalls höher und somit der Einbau von Stickstoff-Vakanzen unwahrscheinlicher. Unabhängig von dem Mechanismus ist jedoch festzustellen, dass sich ein hoher Ammoniak-Fluss günstig auf die p-Dotierung von GaN auswirkt.

3.4. Pyramidale Defekte

3.4.1. Mikrostruktur der Defekte

Parallel zu der Optimierung der Magnesium-Dotierung in der MOVPE wurden bereits erste Laser-Strukturen an unserem Institut hergestellt. In der Anfangsphase wurde für die Dotierung des p-Gebietes ein hoher Magnesiumfluss von 500 sccm bei einem Gallium-Fluss von 20 sccm benutzt, was einem Magnesium zu Gruppe-III Verhältnis von 0,022 entspricht. In TEM-Querschnittsaufnahmen dieser Strukturen, die von Roland Kröger angefertigt wurden, sind ausgedehnte Defekte in der p-dotierten Deckschicht sichtbar (siehe Abbildung 3.19), die in der Literatur als pyramidale Defekte bezeichnet werden. Diese Defekte sind in den Querschnittsaufnahmen als Dreieckförmige Strukturen zu erkennen, deren Spitzen in die $\{000\bar{1}\}$ -Richtung des GaNs zeigen, während sie in der Wachstumsebene eine hexagonale Grundfläche aufweisen. In Abbildung 3.20 ist eine schematische Repräsentation dieser pyramidalen Defekte abgebildet. Der typische Durchmesser der Defekte in der Wachstumsebene betrug in den Laserstrukturen 2,5 bis 5 nm.

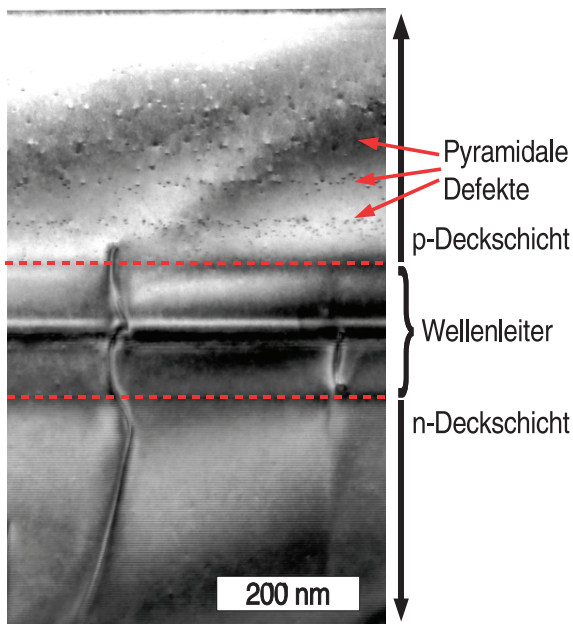


Abbildung 3.19.: Laserstruktur mit pyramidalen Defekten in der Mg-dotierten Region.

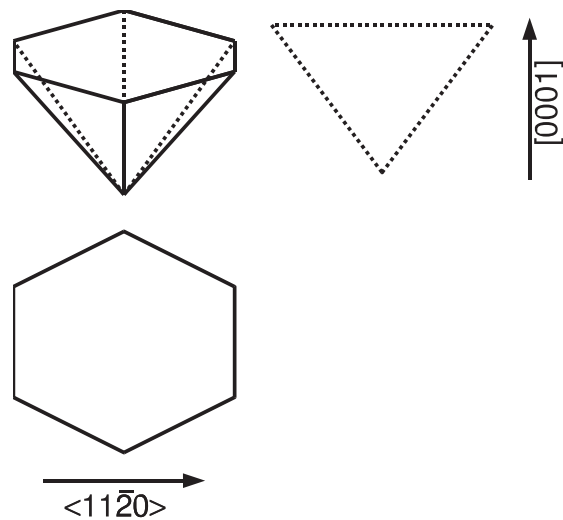


Abbildung 3.20.: Schematische Struktur der pyramidalen Defekte.

Obwohl in den letzten Jahren die pyramidalen Defekte als ein möglicher Ursprung der Selbstkompensation von Magnesium-dotierten Gruppe-III-Nitriden immer stärker in das Bewusstsein gerückt sind, wird bis heute die Mikrostruktur der Defekte kontrovers diskutiert. Es stehen sich verschiedene Modelle gegenüber, die von verschie-

denen Strukturen im Inneren des Defektes ausgehen, jedoch alle auf der Beteiligung von Magnesium an der Grenzfläche des Defektes beruhen. In diesen Modellen wird der Kern des Defektes wie folgt beschrieben:

- ungefüllter Defekt [156]
- Magnesiumausscheidung [173, 174]
- Inversionsdomäne [166]

In den folgenden Unterabschnitten soll auf diese Modelle eingegangen werden, um die Natur der Defekte zu klären.

Modell 1: ungefüllte Defekte

Das Modell der ungefüllten Defekte wird von der Forschergruppe um die Professorin Liliental-Weber vertreten. Diese Forschergruppe begann schon recht frühzeitig mit der TEM-Untersuchung von Magnesium-korrelierten Defekten. Die ersten Arbeiten zu diesem Thema wurden an planaren Defekten in hochdotiertem Volumenmaterial vorgenommen [167]. In diesen Untersuchungen wurde festgestellt, dass die Anwesenheit von Magnesium eine Inversion des Materials auf der c-Ebene ermöglicht.

Im Weiteren wurden an Volumenproben und an MOVPE-Proben pyramidale Defekte nachgewiesen. Nach Ansicht dieser Gruppe verhindert die Magnesiumbedeckung der Oberfläche das weitere Wachstum von Galliumnitrid und es kommt zu einem lateralen Überwachsen eines Hohlraumes.

Das Modell stützt sich im Wesentlichen auf die Beobachtung des sehr starken Kontrastes, der im TEM zwischen Defekt und umgebenden Material sowohl als hell erscheinender Defekt auf dunkler Matrix als auch invertiert zu sehen ist. Nach der Ansicht dieser Gruppe sei solch ein Kontrast typisch für Hohlräume [175]. In dieser Untersuchung wird jedoch vermutet, dass die Innenseite des Defektes mit Magnesium bedeckt ist. Das Magnesium bildet hierbei an der inneren Oberfläche eine Rekonstruktion aus, die eine geringere Symmetrie aufweist. Dieses wurde mit Hilfe der Abbildungen von konvergenten Elektronenstrahlen in Aufsichts-Geometrie festgestellt, bei denen die die 6-fache Symmetrie des GaN im Bereich der Defekte gebrochen wurde [175]. Hieraus wurde auf eine Bedeckung der basalen Fläche des Defektes mit einer Magnesiumnitrid-Phase geschlossen, die eine kubische Struktur besitzt. Die Beteiligung von Magnesium an den Defekten wurde mit Hilfe energiesdispersiver Röntgenuntersuchungen im TEM nachgewiesen. Die Grenzflächen der pyramidalen Defekte wurde in diesen Arbeiten als $\{1\bar{1}\bar{2}2\}$ -artige identifiziert.

Modell 2: Magnesiumausscheidung

In diesem Modell wird angenommen, dass sich in den Defekten ein Magnesiumnitridphase als Ausscheidung aus dem dotierten Gruppe-III-Nitrid bildet. Diese Annahme stützt sich auf die Zunahme der Dichte dieser Defekte mit einer erhöhten Magnesiumkonzentration. Aus der Abnahme der freien Löcherdichte wird hier auf die Menge an Magnesium geschlossen, die in diesen Defekten eingefangen wird [174]. Die starke Abnahme der Lochkonzentration lässt sich in diesen Berechnungen nur durch eine fast vollständige Füllung dieser Defekte mit Magnesiumnitrid erklären. Hierbei wurde vernachlässigt, dass die Defekte als Donatoren fungieren könnten und somit die Löcherdichte zusätzlich reduziert werden könnte.

Modell 3: Inversionsdomäne

Das dritte Modell geht von der Erfahrung aus, dass Magnesium die Möglichkeit bietet die Polarität zu invertieren [176, 177]. Hierzu wurden *ab-initio* Rechnungen über die Stabilität von verschiedenen Fassetten an Inversionsdomänengrenzen durchgeführt und es wurde festgestellt, dass $\{11\bar{2}3\}$ -artige Inversionsdomänengrenzen unter der Anwesenheit von Magnesium am stabilsten sind, aber auch Fassetten vom Typ $\{11\bar{2}2\}$ vorstellbar wären [166]. Der Kern des Defektes ist in diesem Modell eine Inversionsdomäne, deren Dotierung ähnlich der Matrix ist. Unklar ist nach diesen Untersuchungen, wie die Basalfläche der Pyramide terminiert ist. Als mögliche Varianten werden eine Magnesiumnitrid-Phase oder eine Magnesium-Monolage in Betracht gezogen.

Vergleich der Modelle

Obwohl der starke im TEM zu sehende Kontrast ein Hinweis auf ungefüllte Defekte sein könnte, kann dieser Kontrast auch durch Phasenverschiebungen hervorgerufen werden, die zwischen dem Matrixmaterial und dem Defekt im TEM entstehen. Aus den Untersuchungen an Magnesium-dotierten Proben aus der MBE ist zudem bekannt, dass es auf Magnesium-terminierten Oberflächen zu einem Aufwachsen von invertiertem Material kommen kann und dieses die für die pyramidalen Defekte typischen Fassetten zeigt. Zudem wurden die pyramidalen Defekte sowohl in Stickstoff- als auch an Gallium-polaren Material beobachtet, wobei sich die Ausrichtung der Defekte mit der Polarität änderte [166].

Daher ist nach unserer Ansicht das dritte Modell, welches besagt, dass der Kern des Defektes aus einer Inversionsdomäne besteht, am plausibelsten. Die Mikrostruktur eines solchen Defektes ist in Abb. 3.21 dargestellt. Diese Abbildung entspricht einem Schnitt durch die $\{1\bar{1}00\}$ -Ebene eines pyramidalen Defektes. In diesem Schnitt

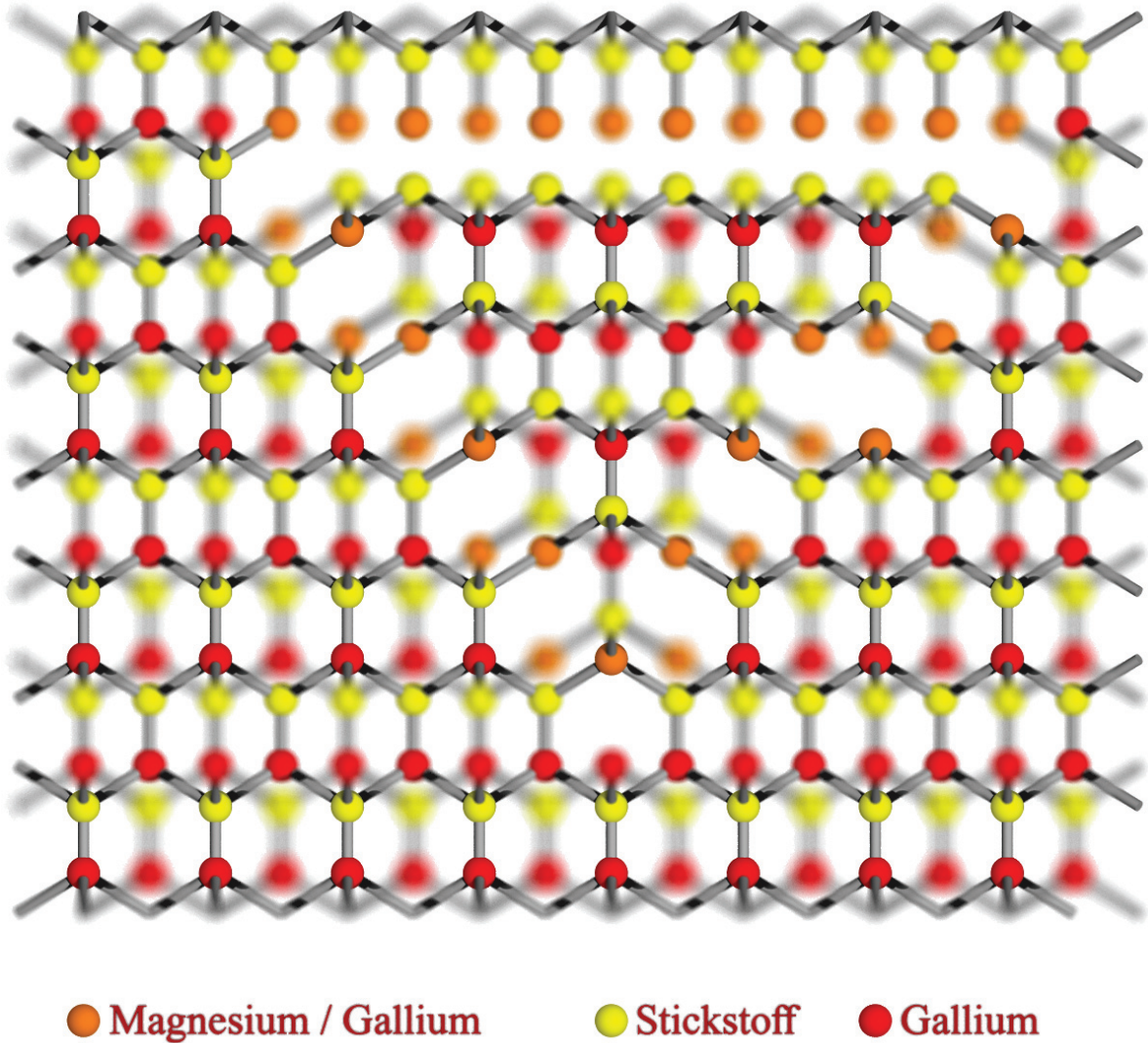


Abbildung 3.21.: Atomare Struktur eines pyramidalen Defektes mit einer Inversionsdomäne als Kern. Die linke Fassade ist vom Typ $\{11\bar{2}2\}$, während die rechte eine zusätzliche Stufe enthält und $\{11\bar{2}3\}$ -artig ist.

sind nur die Atome, die in der Schärfeebene der Abbildung liegen, vollständig koordiniert, während für die übrigen dargestellten Atome Bindungen, die aus diesem Schnitt herauslaufen, weggelassen wurden. Die Inversionsdomäne wurde in diesem Bild durch einen Austausch der Gallium- und Stickstoffatome und einer anschließenden Verschiebung um $(1-u)[0001]$ generiert. Die in der Abbildung sichtbaren Fassetten entsprechen dem Modell von Romano *et al.* [176]. Die linke Fasette des Defektes ist hierbei $\{11\bar{2}2\}$ -artig, während die rechte von $\{11\bar{2}3\}$ -artiger Natur ist. Die oben liegende Fasette ist in dieser Abbildung nur durch Magnesium-Atome angedeutet, da hierfür noch kein Modell zu Grunde liegt. Da in TEM-Untersuchungen gezeigt wurde, dass in dem Defekt die 6-fache Symmetrie gebrochen ist, kann davon ausgegangen werden, dass hier eine kompliziertere Struktur, ähnlich z.B. Magnesiumnitrid vorhanden ist. Nach den Modellen für die planaren Defekte (siehe Abschnitt 3.2) beinhaltet die Inversionsdomänengrenze in der $[0001]$ -Ebene eine Versetzung des Materials um $1/3[1\bar{1}00]$, die in dem Modell in Abbildung 3.21 nicht vorhanden ist. Eine solche Inversionsdomänengrenze wäre mit der Erzeugung von Verspannungsenergie verbunden, da hierdurch das Gitter im Defekt und in der Matrix verzerrt wird, so dass dieses Modell hier nicht direkt anwendbar ist. Die Struktur an der oberen Grenzfläche des Defektes muss daher an dieser Stelle ungeklärt bleiben.

Es ist zu erkennen, dass sämtliche Magnesiumatome, die in der $\{11\bar{2}2\}$ -Fasette und in der Schärfeebene liegen, in sp^2 -Hybridisierung in den Kristall eingebaut werden und dreifach koordiniert sind. Zählt man die zur Verfügung stehenden Bindungselektronen in dieser Fasette, so fehlt pro Magnesiumatom ein Viertel Elektron, da von den Stickstoffatomen jeweils $1\frac{1}{4}$ Elektronen zur Verfügung gestellt werden können und Magnesium 2-wertig ist. Es wäre daher vorteilhaft, jedes vierte Magnesiumatom in der Fasette durch ein Galliumatom zu ersetzen, um die Bindungen abzusättigen. In der Tat bestätigen die *ab-initio*-Rechnungen, dass die teilweise Substitution der Magnesiumatome die Bildungsenergie dieser Inversionsdomänengrenze senkt [166]. Diese Ersetzung kann auch ein Grund dafür sein, dass die $\{11\bar{2}3\}$ -artigen Fassetten in diesen Rechnungen eine niedrigere Bildungsenergie aufweisen. In diesen Fassetten existieren zusätzliche Stufen, an denen die Atome eine unterschiedliche Bindungsgeometrie haben. Durch den Einbau von Gallium auf diesen Stufen können die zusätzlich benötigten Elektronen zur Verfügung gestellt werden.

3.4.2. Segregationsmodell

Ausgehend von der Bedeckung der Fassetten mit Magnesium, kann der ungefähre Magnesium-Gehalt der Defekte bestimmt werden. In unseren Proben ist die typische laterale Ausdehnung der Defekte 2,5–5 nm. Aus der Geometrie der Defekte ergibt sich, dass ca. 150–600 Magnesiumatome die Oberfläche der Fassetten bedecken, wenn man ein Verhältnis der Oberflächenbedeckung von 3:1 von Magnesium zu Gal-

lium einbezieht. Demgegenüber errechnet sich das Gesamtvolumen des Defektes zu 500–3500 Atomen. Selbst wenn im Kern des Defektes kein Magnesium eingebaut wird, ergibt sich, dass der durchschnittliche Magnesiumgehalt bezogen auf das Gesamtvolumen des Defektes bei den kleineren Defekten ca. 30 % beträgt und bei den größeren auf 15 % abfällt. Demgegenüber beträgt die Magnesiumkonzentration im GaN mit ca. $4 \cdot 10^{19} \text{ 1/cm}^3$ weniger als 0,1 % der Atome. Damit ist die Magnesiumkonzentration innerhalb der Defekte um mehr als zwei Größenordnungen höher als im umgebenden Matrixmaterial. Um eine solch hohe Magnesiummenge an der Stelle des Defektes zur Verfügung zu haben, muss der Bildung des Defektes die Segregation oder Diffusion von Magnesium vorhergehen. Dieses wird durch Untersuchungen unterstützt, die eine Ansammlung von Magnesium auf der Oberfläche nach dem Wachstum nachgewiesen haben [178].

In den Magnesium-dotierten Proben wurde beobachtet, dass die Bildung der Defekte nicht mit dem Beginn der Magnesiumdotierung zusammenfällt, sondern erst nach einer gewissen Schichtdicke erfolgt. Dieses ist ein weiteres Indiz, dass die Segregation von Magnesium zur Defektbildung beiträgt. Um diese Segregation zu untersuchen, wurden Proben mit unterschiedlichem molarem Magnesium- zu Gruppe-III-Precursor Flussverhältnis hergestellt. Die Proben wurden bei einem Reaktordruck von 100 Torr gewachsen und das molare Flussverhältnis von Ammoniak zu Gruppe-III-Precursor betrug 8000. Unter diesen Bedingungen ergibt sich eine Wachstumsrate des GaN von 600 nm/h. Von diesen Proben wurden von Roland Kröger TEM-Querschnittsaufnahmen angefertigt, in denen sich zeigt, dass die Dicke der Schicht, die am Anfang der Dotierung ohne die Bildung von pyramidalen Defekten gewachsen werden konnte, abhängig ist von dem Magnesium- zu Gruppe-III-Precursor Verhältnis. Um diesen Zusammenhang zu verstehen, wird im Folgenden ein einfaches Segregationmodell entwickelt, das die Verzögerung der Defektbildung modellieren kann und die Segregation quantifiziert.

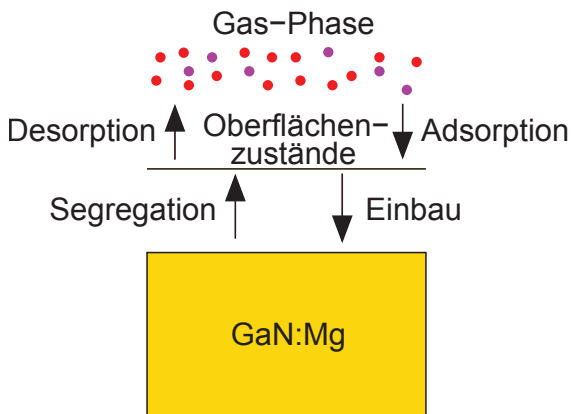


Abbildung 3.22.: Modell zur Segregation von Magnesium.

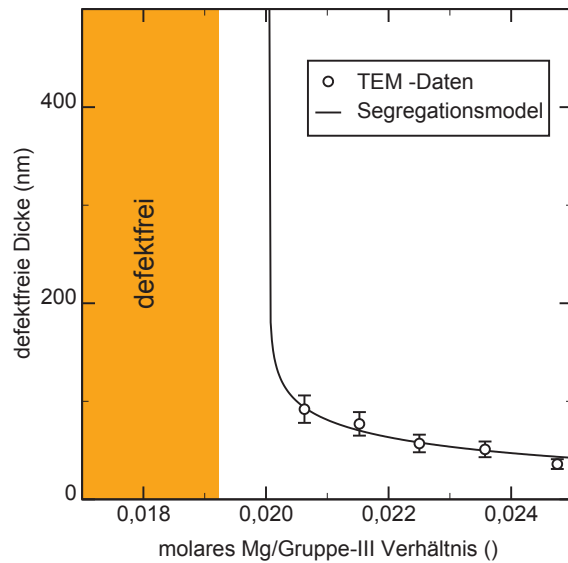


Abbildung 3.23.: Defektfreie Dicke in Abhängigkeit des molaren Magnesium- zu Gruppe-III-Precursor Verhältnisses.

Modell

Das zugrundeliegende Modell ist in Abbildung 3.22 dargestellt. Es geht davon aus, dass die Adsorption von Magnesium an der Oberfläche proportional mit dem Adsorptionskoeffizienten c_a zu dem angebotenen Magnesium-Precursor-Fluss F_{Mg} ist. Der Adsorption entgegen wirkt die Desorption von Magnesium, durch welche die Magnesium-Oberflächenbedeckung N reduziert wird. Die Desorption kann als proportional zu der Oberflächenbedeckung mit einer Konstante c_d angenommen werden, da alle Proben bei der gleichen Temperatur hergestellt wurden, kann die für eine Desorption typische Temperaturabhängigkeit vernachlässigt werden. Die Segregation ist der zum Einbau von Magnesium komplementäre Prozess. In diesem Modell soll angenommen werden, dass Segregation und Einbau in einem Gleichgewicht stehen, so dass der effektive Einbau von Magnesium in das GaN proportional mit der Konstante c_i zu der Magnesium-Bedeckungsdichte der Wachstumsoberfläche ist.

Auf Grund dieser Annahmen kann ein Ratengleichungsmodell für die Oberflächenbedeckung mit Magnesium in Abhängigkeit der gewachsenen Dicke z der Schicht aufgestellt werden. Es ergibt sich:

$$\frac{dN(z)}{dz} = -c_i N - c_d \frac{N}{dz/dt} + c_a \frac{F_{Mg}}{dz/dt} \quad (3.15)$$

Da die Desorption und die Adsorption Raten bezogen auf die Zeit sind, müssen

diese Terme zusätzlich mit der Wachstumsrate dz/dt in eine Rate der Schichtdicke gewandelt werden. Bei den hier verwendeten V/III-Flussverhältnissen von ca. 8000 ist die Wachstumsrate mit der Konstante c_f proportional zu dem molaren Fluss der angebotenen Gruppe-III Precursor F_{III} . Daher lässt sich die Adsorptionrate über den Fluss der Gruppe-III Precursor ausdrücken:

$$c_a \frac{F_{Mg}}{dz/dt} = \frac{c_a}{c_f} \frac{F_{Mg}}{F_{III}} = c_{a,f} \frac{F_{Mg}}{F_{III}} \quad (3.16)$$

$c_{a,f}$ stellt somit den auf den Gruppe-III Fluss bezogenen Adsorptionskoeffizienten dar. Für die Desorption soll in diesem Modell die Abhängigkeit von der Wachstumsgeschwindigkeit vernachlässigt werden, da die Wachstumsraten in den untersuchten Schichten nur schwach variieren. Mit dieser Vereinfachung sind sowohl Inkorporation als auch Desorption proportional zu der Oberflächenbedeckung und können in der kombinierten Desorptions-/Inkorporationskonstante $c_{i,d}$ zusammengefasst werden. Das vereinfachte Ratengleichung ergibt sich somit zu:

$$\frac{dN}{dz} = -c_{i,d}N + c_{a,f}F_{Mg}/F_{III} \quad (3.17)$$

Die Bedeckungsdichte mit Magnesium in Abhängigkeit von der gewachsenen Dicke z ergibt sich aus der Lösung der Differenzialgleichung:

$$N(z) = \frac{F_{Mg}}{F_{III}} \frac{c_{a,f}}{c_{i,d}} (1 - e^{-c_{i,d}z}) \quad (3.18)$$

Da zu der Bildung der pyramidalen Defekte eine große Menge an Magnesium benötigt wird, kann angenommen werden, dass eine kritische Bedeckungsdichte der Oberfläche mit Magnesium N_k überschritten werden muss, um die Bildung von Defekten auszulösen. Ebenso ist als Bildungskriterium das Erreichen einer kritischen Fermienergie in Betracht zu ziehen. Da jedoch die Dotierungskonzentration in diesem Modell proportional zu der Oberflächenbedeckung ist, sind beide Kriterien gleichwertig. Die Dicke der Schicht z_f , die ohne die Bildung von Defekten hergestellt werden kann, wird durch Auflösen der Gleichung $N(z_f) = N_k$ berechnet:

$$z_f = \frac{-\ln\left(1 - c_{i,d} \frac{N_k}{c_{a,f}} \frac{F_{III}}{F_{Mg}}\right)}{c_{i,d}} \quad (3.19)$$

Das so gewonnene Modell wurde in Abbildung 3.23 an die defektfreien Dicken, die mit Hilfe der TEM-Aufnahmen von den verschiedenen Schichten bestimmt wurden, angepasst. Der Verlauf dieser defektfreien Schichtdicke wird von dem Modell korrekt wiedergegeben, das Wesentliche an diesem Modell ist jedoch der abrupte Übergang zu vollkommen defektfreien Schichten, wie es in der Abbildung bei einem Magnesium zu Gruppe-III Verhältnis von 0,02 zu sehen ist. Diese Grenze lässt sich im Experiment nicht genau bestimmen, da es auch nahe dem kritischen Flussverhältnis auf

Grund von Fluktuationen zu der Bildung von Defekten kommen wird. Es zeigte sich jedoch, dass alle Proben, die mit einem Flussverhältnis von unter 0,0192 gewachsen wurden, keine pyramidalen Defekte aufweisen. Unter diesen Flussverhältnissen wird die kritische Bedeckungsdichte der Oberfläche nicht überschritten, da die Gleichgewichtsbedeckung zwischen Desorption, Adsorption und Inkorporation niedriger liegt.

Aus der Anpassung des Modells an die experimentellen Daten ergibt sich der kombinierte Koeffizient $c_{i,d}$ zu 1 % pro Bilage. Es wird somit in jede gewachsene Bilage weniger als 1 % des sich auf der Oberfläche befindenden Magnesiums in die Schicht eingebaut. Dieser Wert ist in guter Übereinstimmung mit Werten, die mittels SIMS-Messungen an überwachsenen Magnesium-dotierten Schichten gewonnen wurden [145]. In diesen Messungen zeigte sich, dass die Magnesium-Konzentration oberhalb der p-dotierten Schicht auf 10 % bei einer Schichtdicke von 40 nm abfällt. Diese Abnahme des Magnesium-Gehaltes in der Schicht lässt sich mit dem Segregationsmodell mit einer Einbaurrate von ca. 1,4 % je Bilage erklären. Dieser Wert liegt somit leicht oberhalb des hier bestimmten Wertes, da jedoch auch die Wachstumsbedingungen wie der Reaktordruck und der Wasserstoff-Partialdruck die Desorption und den Einbau in die Schicht beeinflussen können, ist dies eine Bestätigung des hier gezeigten Modells.

Die kritische Bedeckungsdichte lässt sich aus diesem Modell nicht direkt bestimmen, da in der Anpassung mit Gleichung 3.19 nur der Koeffizient $N_k/c_{a,f}$ bestimmt werden kann. Aus der Inkorporationsrate ergibt sich jedoch, dass sich auf der Oberfläche des GaN etwa hundertmal so viel Magnesium befindet, als in die Schicht eingebaut wird. Da die Magnesiumkonzentration im Kristall einige Promille beträgt, kann abgeschätzt werden, dass die Oberflächenbedeckung oberhalb von 10 % liegt.

Mit diesem einfachen Modell lässt sich die Bildung der pyramidalen Defekte durch Segregation erklären. Die stärkste Vereinfachung liegt sicherlich in der Annahme, dass die Segregation unabhängig von der Wachstumsgeschwindigkeit ist. Dieses Modell genügt jedoch der Genauigkeit der experimentell bestimmbareren Daten und kann insbesondere durch die korrekte Beschreibung des Übergangs zu defektfreien Schichten als veritable Beschreibung des Phänomens dienen.

Verteilung der Defekte

Neben der auftretenden Verzögerung der Bildung von pyramidalen Defekten, lässt sich in den Schichten feststellen, dass nach dem erstmaligen Auftreten der Defekte die Dichte der Defekte periodisch schwankt. Diese Art der Selbstorganisation der Defekte ist in Abbildung 3.24 deutlich zu sehen. Aus dieser Aufnahme wurde die Defektdichte entlang der Wachstumsrichtung ausgewertet und in Grafik 3.25 aufgetragen. Die an die Datenpunkte angepasste Funktion ist aus äquidistanten Gauss-Kurven zusammengesetzt, deren Halbwertsbreite um einen konstanten Wert für aufeinander-

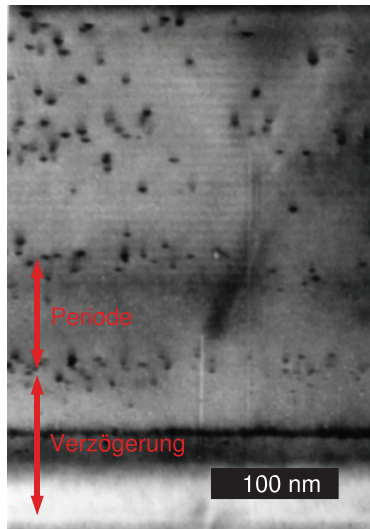


Abbildung 3.24.: TEM-Querschnittsaufnahme einer Laser p-Deckschicht mit periodischer Defektverteilung.

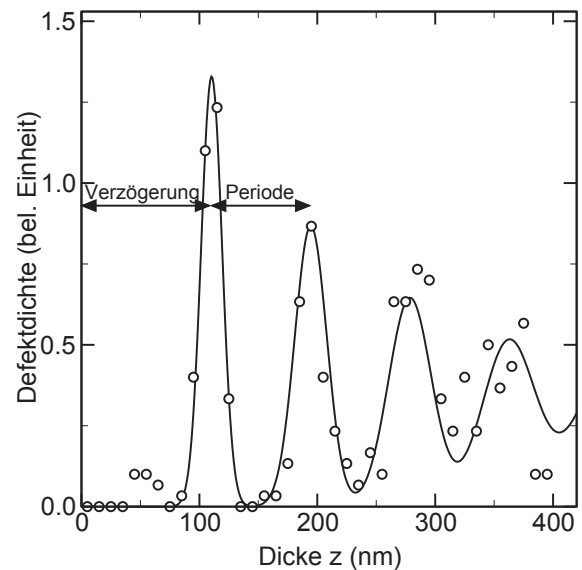


Abbildung 3.25.: Verteilung der pyramidalen Defekte entlang der Wachstumsrichtung.

der folgende Maxima zunimmt und deren eingeschlossene Fläche jedoch konstant ist. Diese Anpassung zeigt, dass die Periode der defektreichen Schichten geringfügig kleiner ist als die Verzögerung, die zwischen dem Beginn der Dotierung und dem erstmaligem Auftreten der Defekte besteht. Die Anzahl der gebildeten Defekte ist für alle Defekt-reichen Bereiche konstant. Es ist daher anzunehmen, dass die Defekte einen erheblichen Anteil des Magnesiums von der Oberfläche aufnehmen. Im Verlauf des folgenden Wachstums muss sich so nach dem Auftreten einer Defekt-reichen Schicht zunächst das Magnesium wieder auf der Oberfläche ansammeln, bis es wieder zu einer erneuten Bildung von Defekten kommt. Die Aufweitung der Gauskurven lässt sich ungezwungen durch statistische Schwankungen erklären, die mit der Schichtdicke zunehmen.

Einfluss auf die Ladungsträgerkonzentration

Wie aus dem vorherigen Abschnitt hervorgeht, reduziert das Auftreten der pyramidalen Defekte die Magnesiumkonzentration auf der Oberfläche der Proben. Hierdurch kommt es nach dem Modell ebenso zu einer Reduzierung der Akzeptorkonzentration im Volumenmaterial. Vielfach wird in der Literatur eine Abnahme der Löcherkonzentration für Schichten mit einem Magnesiumgehalt oberhalb von $5 \cdot 10^{19} \text{ 1/cm}^3$ berichtet [179]. In der Tat ist an der Magnesiumfluss-Serie aus Abschnitt 3.3.1 eine Abnahme der freien Löcherkonzentration bei Raumtemperatur bei der am stärksten dotier-

3. p-Dotierung

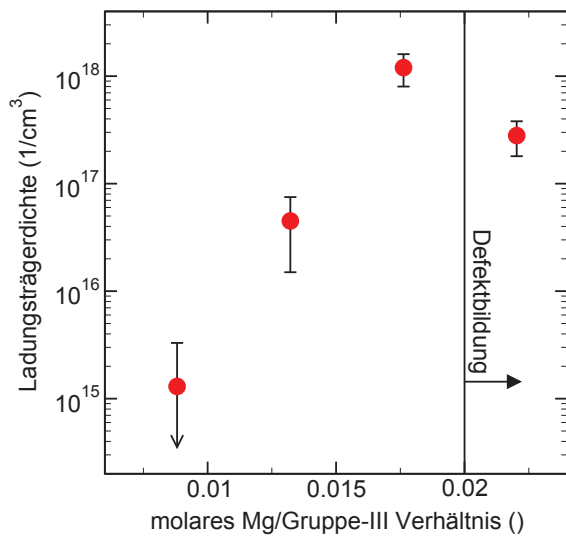


Abbildung 3.26.: Einfluss der Bildung von pyramidalen Defekten auf die Ladungsträgerkonzentration.

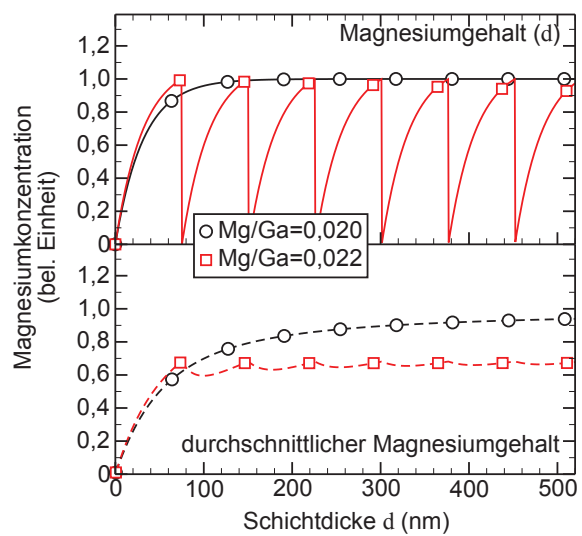


Abbildung 3.27.: Akzeptorkonzentration in der Schicht in Abhängigkeit der Schichtdicke (oben) und durchschnittlicher Akzeptorkonzentration bezogen auf die gewachsene Schichtdicke (unten).

ten Probe zu sehen (siehe Abbildung 3.26). Die Abnahme der Löcherkonzentration kann daher mit der Bildung der pyramidalen Defekte in Verbindung gebracht werden. Aus den SIMS-Daten der Proben lässt sich die maximale Magnesium-Konzentration an der Defektbildungsgrenze bei einem molaren Magnesium- zu Gallium-Precursor Verhältnis von 0,02 zu $3 \cdot 10^{19} \text{ 1/cm}^3$ abschätzen und liegt knapp unterhalb der Literaturwerte. Die genaue Grenze zur Defektbildung wird jedoch auch von weiteren Wachstumsparametern wie z. B. Temperatur, Druck, Wachstumsrate etc. abhängen.

Geht man davon aus, dass alle auf der Oberfläche befindlichen Magnesiumatome in einer defektreichen Zone eingebaut werden, ergibt sich eine Verteilung der Akzeptorkonzentration, wie sie im oberen Teil der Abbildung 3.27 für einen Magnesiumfluss direkt an der Defektbildungsgrenze und für einen 10 % höheren Magnesiumfluss dargestellt ist. Bei den hier untersuchten Schichtdicken von 500 nm befinden sich bei einem Magnesiumfluss, der 10 % oberhalb des kritischen Flussverhältnis liegt, bereits mehrere defektreiche Schichten in dem Kristall. Die auf die gesamte Schicht bezogene durchschnittliche Akzeptorkonzentration konvergiert in diesem Bereich gegen eine Wert der ca. 30 % unterhalb der Akzeptorkonzentration der Probe mit dem kritischen Flussverhältnis liegt (siehe unterer Teil in Abbildung 3.27). Dieser Wert kann als obere Grenze für die Reduzierung der Akzeptorkonzentration dienen, da nicht alle Magnesiumatome in die Defekte eingebaut werden. Die gemessene Löcherkonzentration der oberhalb der Defektbildungsgrenze gewachsenen Schicht nimmt jedoch um mehr als 30 % gegenüber der unterhalb der Defektbildungsgrenze gewachsenen

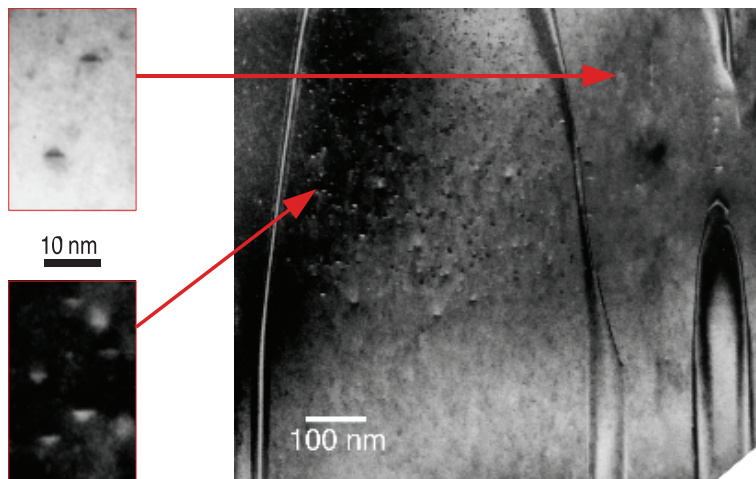


Abbildung 3.28.: Magnesium-dotierte Schicht, die sowohl Ga-Polarität (Mittlere Domäne und unten rechts) als auch N-Polarität zeigt (Domänen zu beiden Seiten). Die pyramidalen Defekte haben in den Polaritäten eine entgegengesetzte Ausrichtung.

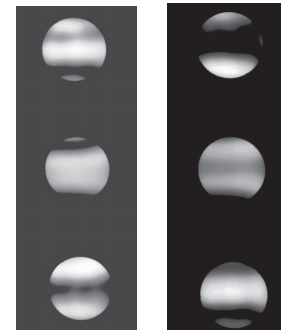


Abbildung 3.29.: CBEDE-Abbildung der unterschiedlichen Domänen.

Probe ab. Die übrigen Schichten aus der Magnesiumfluss-Serie zeigen, dass die Löcherkonzentration stark mit dem Magnesiumangebot variiert. Es ist daher nicht eindeutig zu sagen, ob die Reduktion der freien Löcherdichte alleine mit dem Einbau von Magnesium in den Defekten zu erklären ist. Daher ist eine donatorartige Wirkung der pyramidalen Defekte an dieser Stelle nicht auszuschließen.

3.4.3. Polaritätsabhängigkeit

Wie in Kapitel 3.1.2 beschrieben, hat die Polarität der Schicht einen entscheidenden Einfluss auf Oberflächenprozesse und Dotierung. Die Segregation von Magnesium sollte daher entscheidend von der Polarität des verwendeten Materials beeinflusst werden. In einer von mir gewachsenen Magnesium-dotierten Schicht traten Domänen mit unterschiedlicher Polarität auf. Diese Probe wurde ursprünglich hergestellt, um die Grenze des Auftretens von pyramidalen Defekten zu bestimmen. Hierzu wurde eine Schicht mit einem ansteigenden Magnesium zu Gallium-Verhältnis gewachsen, dass von 0,012 bis auf 0,024 zunahm.

Eine TEM-Querschnittsaufnahme der Schicht ist in Abbildung 3.28 dargestellt. In der Aufnahme zu erkennen ist im Zentrum eine Gallium-polare Domäne, die an den Seiten von Stickstoff-polaren Domänen begrenzt ist. Die Polarität dieser Domänen wurde im TEM mit Hilfe der Abbildung von konvergenten Elektronenstrahlen von den Domänen bestimmt (siehe Abbildung 3.29). Die entgegengesetzte Polarität der Domänen ist an den invertierten Interferenzmustern der beiden Abbildungen zu erkennen. Aus der invertierten Polarität des umliegenden Materials ergibt sich auch eine

unterschiedliche Ausrichtung der Defekte: In der zentralen Domäne zeigen die Spitzen der pyramidalen Defekte zum Substrat, wie es in Ga-polaren MOCVD-Schichten zu sehen ist, während in den anderen Domänen die Spitzen der Pyramiden in Wachstumsrichtung zeigen.

In Abbildung 3.28 ist eine deutlich höhere Dichte an pyramidalen Defekten in der Gallium-polaren Domäne gegenüber der Stickstoff-polaren Domäne zu erkennen. Dieses Phänomen kann auf drei verschiedene Ursachen zurückgeführt werden:

- Unterschiedliche Einbaukoeffizienten c_i / Segregation
- Unterschiedliche kritische Bedeckungsdichte N_k
- Diffusion auf der Oberfläche / in der Gasphase

Wie in Kapitel 3.1.2 beschrieben, wird der Einbaukoeffizient von der Polarität des Materials abhängig sein. Nach den dort vorgestellten Rechnungen neigt die Stickstoff-polare Oberfläche stärker zur Segregation. Ebenso konnte in Wachstumsexperimenten gezeigt werden, dass der Einbau von Magnesium auf der Stickstoff-polaren Oberfläche schwieriger ist [180, 181]. Auf dieser Grundlage sollte die Anreicherung der Oberfläche mit Magnesium auf einem Stickstoff-polaren Material schneller erfolgen und bei höheren Werten sättigen. Dieses hätte zur Folge, dass pyramidale Defekte in dem Stickstoff-polaren Material schneller auftreten, da die defektfreie Schichtdicke sehr empfindlich von dem Segregationskoeffizienten abhängt. Dieses widerspricht der hier gezeigten Beobachtung, da hier die Defekte dominant in Gallium-polarem Material auftreten.

Eine plausible Erklärung hierfür könnte sein, dass in Stickstoff-polarem Material die Basalfläche der pyramidalen Defekte zuerst gebildet werden muss und daher wegen der größeren Fläche hierzu eine wesentlich größere Menge an Magnesium notwendig ist, um die Defektbildung auszulösen. Hierdurch wäre somit die kritische Bedeckungsdichte höher. Trotz der höheren Bedeckung der Oberfläche mit Magnesium ist der Einbau in die Stickstoff-polaren Domänen auf Grund des kleineren Einbaukoeffizienten geringer. Zusätzlich kann die Diffusion von Magnesium über die Domänengrenzen hinweg eine wichtige Rolle spielen. Dieses wird durch den experimentellen Befund unterstützt, dass in dieser Probe die Defektbildung im Gallium-polaren GaN bereits bei einem molaren Magnesium- zu Gruppe-III-Precursor Flussverhältnissen von ca. 0,16 stattfindet, der deutlich unter dem in Kapitel 3.4.2 berechneten liegt. Somit scheint auf den Gallium-polaren Domänen mehr Magnesium zur Verfügung zu stehen als in den rein Gallium-polaren Schichten. Typische Diffusionslängen von Magnesium, die in der Literatur für das Wachstum in der MBE berichtet werden, liegen in der Größenordnung von 10 nm [182] und reichen nicht aus, um einen signifikanten Transport von Magnesium über die Korngrenzen hinweg zu ermöglichen. Diese Diffusionslängen werden im Wachstum mittels MOVPE auf Grund der höheren

Temperatur deutlich höher liegen, hierfür sind jedoch keine Daten aus der Literatur bekannt. In der MOVPE kann auch zusätzlich Diffusion durch die Gasphase eine Rolle spielen. Die mittlere freie Weglänge von Wasserstoff-Molekülen direkt oberhalb der Probe liegt in der Größenordnung von Mikrometern bei einer Wachstumstemperatur von 1050 °C und einem Druck von 100 Torr. Die Desorption und Readsorption von Magnesium auf der Oberfläche kann somit zu einem Ausgleich der Bedeckung zwischen den einzelnen Domänen beitragen, so dass sich ein Gleichgewicht der Bedeckung zwischen den einzelnen Domänen einstellt. Da in dem Bereich der Probe, der in dem TEM-Querschnittsbild zu sehen ist, der Anteil der Stickstoff-polaren Domänen in etwa dem der Gallium-polaren Domänen entspricht, ist eine solche Diffusion mehr als ausreichend, um die Defektbildung im Gallium-polaren Material bei Magnesium/Gallium-Flussverhältnissen zu erklären, das 20 % unterhalb der Defektbildungsgrenze liegt, die an den rein Gallium-polaren Schichten bestimmt wurde.

3.4.4. Zusammenfassung

Die Ergebnisse der Untersuchung von pyramidalen Defekten geben ein geschlossenes Bild über die Ursache, Bildung und Art der Defekte. Mit Hilfe der Optimierung über das Segregationsmodell anhand der im TEM-gewonnenen Daten, war es möglich p-dotierte Schichten herzustellen, die knapp unter der Defektbildungsgrenze liegen. Diese Optimierung führte zu Laserstrukturen, die deutlich reduzierte serielle Widerstände aufweisen und zum Lasen gebracht werden konnten. Die Reduzierung der Ladungsträgerdichte bei Auftreten der pyramidalen Defekte kann zum sowohl auf den Einfang von Magnesium in den Defekten als auch auf Donatoreigenschaften der Defekte zurückgeführt werden. In jedem Fall zeigt sich, dass die Bildung von pyramidalen Defekten mit der Kompensation des Materials einhergeht.

4. Wärmedissipation

Der Betrieb eines jeden elektronischen Bauelements geht mit der Erzeugung von Wärme einher. In vielen Anwendungen führt diese Wärme zu einer beschleunigten Degradation der Bauelemente durch die Aktivierung von Diffusionsprozessen oder der thermischen Generation von Defekten. Obwohl die Gruppe-III-Nitride eine hohe Temperaturstabilität aufweisen und ein vielversprechender Kandidat für Hochtemperatur-Anwendungen sind, verringert Wärme die Leistungsfähigkeit der Laserdioden. Sie führt im Besonderen zu der Reemission von Ladungsträgern aus dem Quantentrog und somit zu einer Reduzierung der Besetzungsdichte. Dieses kann so weit gehen, dass das Zustandekommen einer Besetzungsinversion verhindert wird. Dieses wird offensichtlich in der Begrenzung der derzeit in Bremen hergestellten Laserdioden auf den gepulsten Betrieb bei kleinen Tastverhältnissen: Während im gepulsten Betrieb die Wärme zwischen den einzelnen Pulsen zu der Wärmesenke dissipieren kann, kann im Dauerstrombetrieb auf Grund der erhöhten Temperatur in der Diode kein Lasing erreicht werden.

Dieses Kapitel zeigt auf, wie der Einfluss der Wärme auf die Laserdioden wirkt und unter welchen Parametern noch Lasing zu erwarten ist. Hierzu wurde zunächst die Elektrolumineszenz in Abhängigkeit der Temperatur der Wärmesenke gemessen und die Aktivierungsenergie des thermischen Quenchens bestimmt. Mit Hilfe dieser Daten wurden elektrooptische Messungen mit unterschiedlichen Tastverhältnissen und Pulslängen ausgewertet. Durch diese Messungen konnte die Wärmeentwicklung und -dissipation beobachtet werden. Begleitend zu den Experimenten wurden Simulationen durchgeführt, um die Wechselwirkung zwischen der Wärmeausbreitung im Laser und den elektrooptischen Kenndaten nachvollziehen zu können. Weitergehende Simulationen zeigten, welche Parameter in dem Design der Laserdioden signifikant sind, um die Temperatur in der aktiven Zone zu minimieren, um so zukünftige Laserstrukturen zu optimieren.

4.1. Die Kenngrößen

Der Transport der Wärme in den Laserstrukturen ist durch die Materialparameter Wärmeleitfähigkeit und -kapazität bestimmt. Die Leitfähigkeit gibt an, wie stark der Wärmetransport über eine Distanz durch einen Querschnitt bei einer gegebenen Temperaturdifferenz ist. Diese hat besondere Bedeutung im Gleichgewichtszustand, da sich alleine auf ihrer Grundlage die Temperaturverteilung in der Diode ergibt. Demgegenüber nimmt die Wärmekapazität insbesondere eine Rolle in der Zeitentwicklung der Temperaturverteilung ein. Sie gibt die Wärme an, die von dem Material unter einer bestimmten Temperaturerhöhung aufgenommen werden kann. Bei einer hohen Wärmekapazität ist der betreffende Stoff in der Lage Wärme zu absorbieren, selbst wenn seine Leitfähigkeit gering ist. Demgegenüber propagiert ein Wärmepuls besonders schnell durch einen Festkörper, wenn die Wärmekapazität gering und die Leitfähigkeit hoch ist. Diese Größe wird als Diffusivität bezeichnet und bestimmt, wie schnell ein System in das thermodynamische Gleichgewicht relaxiert. Sowohl die Wärmekapazität als auch die thermische Leitfähigkeit sind von der Ladungsträgerdichte und der Temperatur des Festkörpers abhängig. Diese Zusammenhänge sind in einem realen Kristall recht komplex und werden in den hier vorgestellten Simulationen nicht berücksichtigt. Um eine Abschätzung für die resultierenden Fehler in der Simulation zu erhalten, beschreiben die folgenden beiden Abschnitte die Grundlagen der Temperaturabhängigkeit der Wärmekapazität und -leitfähigkeit.

4.1.1. Wärmekapazität

Die Wärmekapazität eines Systems kann verstanden werden als die Änderung der aufgenommenen Wärme mit der Temperatur. Hierzu tragen in einem Festkörper zwei Systeme bei: das Kristallgitter und die Ladungsträger. Beide Systeme verhalten sich ganz unterschiedlich, da der Kristall die Wärmeenergie in Form von Phononen speichert, die bosonisch sind, währenddessen das fermionische Ladungsträgersystem auf Grund des Pauli-Prinzips in der Wärmeaufnahme begrenzt ist. Der Beitrag der beiden Systeme wird in den folgenden Abschnitten dargestellt werden.

Phononische Wärmekapazität im Debye-Modell

Im Debye-Modell wird die unterschiedliche Dispersion der akustischen und optischen Phononen vernachlässigt und die Zustandsdichte durch ein System genähert, bei dem – ähnlich wie bei den akustischen Phononen – die Energie der Phononen proportional zum Wellenvektor ist. Um auf die N phononischen Zustände der ersten Brillouin-Zone eines Kristallsystems des Volumens V mit r Atomen in der Einheitszelle zu normieren, wird diese lineare Dispersion bei der Energie

$k_B\Theta_D = \hbar c(6\pi^2 rN/V)^{1/3}$ abgeschnitten [183]. Auf Grund des dreidimensionalen Impulsraumes ergibt sich im Debye-Modell die phononische Zustandsdichte als:

$$D(E) = \frac{9N\hbar^2}{(k_B\Theta_D)^3} E^2 \text{ mit } E \leq k_B\Theta_D \quad (4.1)$$

Somit ist über die so genannte Debye-Temperatur Θ_D das gesamte Verhalten des phononischen Systems bestimmt.

Selbst in diesem einfachen Modell ist die Wärmekapazität als Funktion der Temperatur nicht analytisch lösbar, es ist jedoch möglich Näherungen für Temperaturen nahe Null und oberhalb der Debye-Temperatur anzugeben. Für kleine Temperaturen ist die obere Grenze der Dispersion irrelevant. Auf Grund der quadratischen Zustandsdichte im Energieraum ergibt sich die phononische Wärmekapazität C_P für kleine Temperaturen zu [183]:

$$C_P = \frac{12\pi^4}{5} rNk_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \text{ bei } T \ll \Theta \quad (4.2)$$

Diese Näherung für kleine Temperaturen ist auch als das debyesche T^3 -Gesetz bekannt. Für Temperaturen oberhalb Θ_D liegt die Quantisierungsenergie sämtlicher phononischer Zustände unterhalb von $k_B T$, die im phononischen System gespeicherte Wärme ist daher $Q = 3rNk_B T$. Die Wärmekapazität, die als Ableitung der gespeicherten Wärme dQ/dT dargestellt werden kann, ist somit konstant:

$$C_P = 3rNk_B \text{ bei } T \gg \Theta_D \quad (4.3)$$

Diese Gleichung nennt sich die Regel von Dulong und Petit und gibt sehr gut die experimentellen Befunde für hohe Temperaturen wieder. Doch auch schon bei Temperaturen $T \approx \Theta_D/2$ erreicht die Wärmekapazität bereits 80 % des endgültigen Wertes [183]. Da typische Debye-Temperaturen von Halbleitern um 500 K liegen (Die Debye-Temperatur von GaN beträgt 600 K [184]), kann die Wärmekapazität der Phononen als annähernd konstant betrachtet werden. Das Interessante an diesem Ergebnis ist, dass die volumenbezogene Wärmekapazität bei hohen Temperaturen nur von der Zustandsdichte und somit von den Gitterabständen des Kristalls abhängig ist.

Wärmekapazität des elektronischen Subsystems

Die im elektronischen Subsystems gespeicherte Energie setzt sich aus zwei Anteilen zusammen:

- Aktivierungsenergie der Ladungsträger in die Bänder

- kinetische Energie der freien Ladungsträger

Klassisch betrachtet besitzt ein System mit einer Ladungsträgerdichte n nach der Regel von Dulong-Petit die Wärmekapazität $C_e^{kl} = 3/2nk_B$. Da die Ladungsträger als Fermionen jedoch dem Pauli-Prinzip gehorchen, können entgegen der klassischen Annahme nur wenige Ladungsträger ihren Energiezustand um $k_B T$ ändern. So haben lediglich Ladungsträger nahe der Fermi-Energie die Möglichkeit unter Wärmezufuhr ihren kinetischen Zustand zu verändern. Als Annahme kann die Anzahl der Ladungsträger in einem Volumen, die sich in dem Übergangsbereich der Fermi-Funktion befinden, der so genannten Fermi-Schicht, als proportional zu der Temperatur und somit zu $\propto n(k_B T/E_F)$ angesetzt werden. Die Veränderung der inneren Energie U des Fermi Gases unter einer Temperaturerhöhung ΔT ergibt sich aus dem Produkt der Wärme aufnehmenden Zustände und der aufgenommenen Energie zu $\Delta U(T) \approx n(k_B T/E_F)k_B \Delta T$. Die Wärmekapazität stellt die Ableitung der inneren Energie nach der Temperatur dar und ist unter obiger Annahme proportional zu der Temperatur. Die mathematische korrekte Ableitung der Wärmekapazität ergibt [183]:

$$C_e = \frac{n\pi^2 k_B^2}{2} \cdot \frac{T}{E_F} = \frac{n\pi^2 k_B}{2} \cdot \frac{T}{T_F} \quad (4.4)$$

Für die Wärmekapazität der Ladungsträger ist die Fermi-Temperatur $T_F = E_F/k_B$ kennzeichnend für das System, ähnlich wie die Debye-Temperatur für die Phononen. Typische Fermi-Temperaturen T_F liegen in Metallen in der Größenordnung von 10000 K. In Halbleitern kann die Fermi-Temperatur niedriger liegen, da jedoch die freie Ladungsträgerdichte gegenüber der Atomdichte gering ist, kann die Wärmekapazität der freien Elektronen vernachlässigt werden.

Der zweite Beitrag, den die Ladungsträger an der Wärmekapazität nehmen, rührt von der Aktivierung aus den lokalisierten Zuständen in das Leitungs- respektive Valenzband her. Vereinfacht kann die durch die Aktivierung hervorgerufene Wärmekapazität mit Hilfe eines 2-Niveau-Systems veranschaulicht werden. Die innere Energie dieses Systems entspricht der Produkt aus der Besetzung des oberen Niveaus und der Differenzenergie ΔE . Die Anzahl der Elektronen im angeregten Zustand ergibt sich aus der Fermi-Verteilung und der Dichte der lokalisierten Niveaus N_D . Die Wärmekapazität des 2-Niveau-Systems C_2 ergibt sich wiederum aus der Ableitung der inneren Energie nach der Temperatur. Da N_A und ΔE temperaturunabhängige Größen sind, ist die Wärmekapazität direkt eine Funktion der abgeleiteten Fermi-Funktion:

$$C_2 = N_D \Delta E \frac{d}{dT} \frac{1}{1 + e^{\frac{\Delta E - \mu}{k_B T}}} = 2N_D k_B \frac{x^2 e^x}{(1 + e^x)^2} \text{ mit } x = \frac{\Delta E}{2k_B T} \quad (4.5)$$

In der Vereinfachung eines 2-Niveau-Systems mit gleichen Zustandsdichten in beiden Niveaus liegt das chemische Potenzial μ in der Mitte zwischen den beiden Zu-

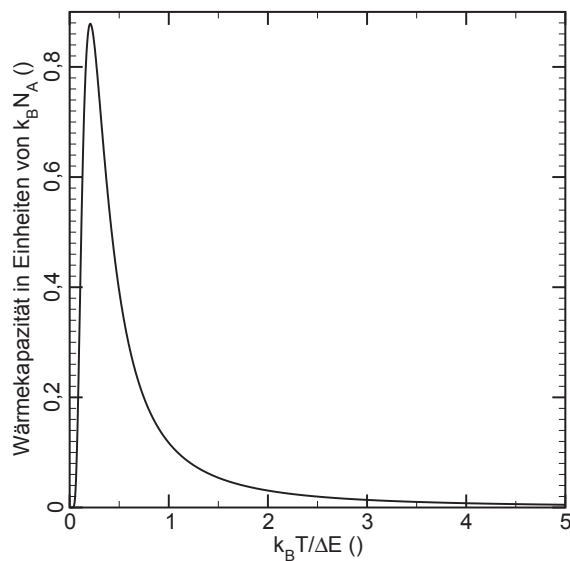


Abbildung 4.1.: Wärmekapazität eines 2-Niveau-Systems in normierten Einheiten

ständen bei $\Delta E/2$. Die hieraus resultierende Wärmekapazität in normierten Einheiten ist in Abb.4.1 abgebildet. Für ein solches 2-Niveau-System ist die Wärmekapazität stets $< N_D k_B$ und somit ebenso vernachlässigbar klein gegenüber der phononischen Wärmekapazität. In einem realen Halbleiter wird diese Funktion durch den parabolischen Verlauf der Zustandsdichte an der Bandkante verzerrt sein, der prinzipielle Verlauf wird jedoch erhalten bleiben. Da N_D jedoch klein gegenüber der Atomdichte ist, hat auch die Aktivierung von Ladungsträgern nur einen geringen Einfluss auf die Wärmekapazität des Systems.

4.1.2. Wärmeleitfähigkeit

Die Wärmeleitfähigkeit κ ist eng mit der Wärmekapazität C verknüpft, da für alle Systeme prinzipiell gilt [185]:

$$\kappa = \frac{1}{3} C \cdot v \cdot l \quad (4.6)$$

Hierbei ist v die Teilchengeschwindigkeit (im Falle der Phononen die Schallgeschwindigkeit) und l die mittlere freie Weglänge. Der Wärmetransport ist also proportional zu der Wärmekapazität und der Ausbreitungsgeschwindigkeit des Wärme tragenden Mediums. Daher bildet die Wärmeleitfähigkeit für tiefe Temperaturen auch das Debyesche- T^3 -Gesetz ab. Während die Wärmekapazität nur geringfügig von der Materialqualität abhängig sein sollte, sind für die Wärmeleitfähigkeit die Eigenschaften des Festkörpers von entscheidender Bedeutung. Eingebaute Störstellen und Korngrenzen reduzieren die mittlere freie Weglänge der Ladungsträger bzw. Phononen und hemmen dadurch den Wärmetransport bei tiefen Temperaturen. Bei Tempe-

raturen oberhalb der Raumtemperatur limitieren Streuprozesse zwischen Phononen den Transportprozess, wodurch bei hohen Temperaturen die Wärmeleitfähigkeit typischerweise von T^{-1} abhängig ist [186].

Im Gegensatz zur Wärmekapazität kann für den Wärmetransport das elektronische System einen höheren Einfluss nehmen, da die Ladungsträger auf Grund ihrer geringen Masse eine um zwei bis drei Größenordnungen höhere Geschwindigkeit v_F an der Fermikante besitzen. Dies spielt im Besonderen bei Metallen eine große Rolle, aber auch bei Halbleitern ist der Wärmetransport von der Ladungsträgerkonzentration abhängig. Die Wärmeleitfähigkeit der Ladungsträger ist hierbei proportional zu der elektrischen Leitfähigkeit σ , da diese sich ebenfalls aus dem Produkt der Ladungsträgerdichte und der Beweglichkeit der Ladungsträger ergibt.

4.1.3. Die Materialien

Einen Überblick auf die in einer auf GaN-basierenden Laserstruktur verwendeten Materialien und deren thermischen Eigenschaften bietet die Tabelle 4.1. Von den Kontaktmetallen ist nur Gold aufgeführt, da die dünnen Schichten von Nickel bzw. Palladium auf Grund ihrer geringen Dicke von unter 10 nm keinen Einfluss auf die Wärmeleitfähigkeit des Gesamtsystems haben. Es zeigt sich, dass die Wärmeleitfähigkeit von GaN und AlN durchaus vergleichbar mit der vom Gold ist. Demgegenüber weist Saphir eine schlechte Wärmeleitfähigkeit aus, weswegen der Einsatz von GaN als Substratmaterial auch in thermischer Hinsicht deutliche Vorteile gegenüber Saphir bringen sollte. Das dritte technologisch relevante Substrat, Siliziumcarbid, besitzt gegenüber GaN eine noch höhere thermische Leitfähigkeit und eignet sich daher insbesondere für Bauelemente mit hohen thermischen Verlustleistungen. Die Isolatoren haben mit Abstand die schlechteste Wärmeleitfähigkeit, daher stellen sie in vielen Anwendungen ein Problem für den Wärmetransport dar.

Ternäre Halbleiter

In den ternären Halbleitern ist die Wärmeleitfähigkeit durch die Massenunordnung in dem Kristall deutlich reduziert. Leider existiert hierzu in der Literatur lediglich eine einzelne Veröffentlichung über Messungen an AlGaIn-Proben [186]. Der Effekt, der sich hier zeigt, ist jedoch dramatisch: Die thermische Leitfähigkeit bricht auf Werte von unter 10 % gegenüber dem von Galliumnitrid bei einem Aluminiumgehalt von 44 % ein. Dieses rührt aus der vermehrten Streuung der Phononen in dem durch die unterschiedlichen Massen fluktuierendem Potenzial her. Die Streurate der Phononen ist nach dem Modell von Klemens und Abeles [199, 200] proportional zu dem

Material	Thermische Leitfähigkeit (W/cmK)	Wärme- kapazität (J/gK)	Dichte (g/cm ³)	Wärme- kapazität (J/cm ³ K)	Diffu- sivität (cm ² /s)
GaN	1,30 [187, 188] 1,87 [190]	0,49 [189]	6,15 [21]	3,01	0,42
AlN	2,85 [191]	0,6 [191]	3,23 [192]	1,94	1,47
InN	0,45 [193] 0,8 [188]	0,32 [194]	6,81 [195]	2,18	0,21
Gold	3,174 [196]	0,128 [196]	19,29 [196]	2,47	1,29
Saphir	0,26 c-Achse [197] 0,25 a-Achse [197]	0,39 [197]	3,98 [197]	1,55	0,15
SiO ₂	0,014 [198]	0,787 [198]	2,648 [198]	2,08	0,007

Tabelle 4.1.: Thermische Eigenschaften der in Laserstrukturen verwendeten Materialien

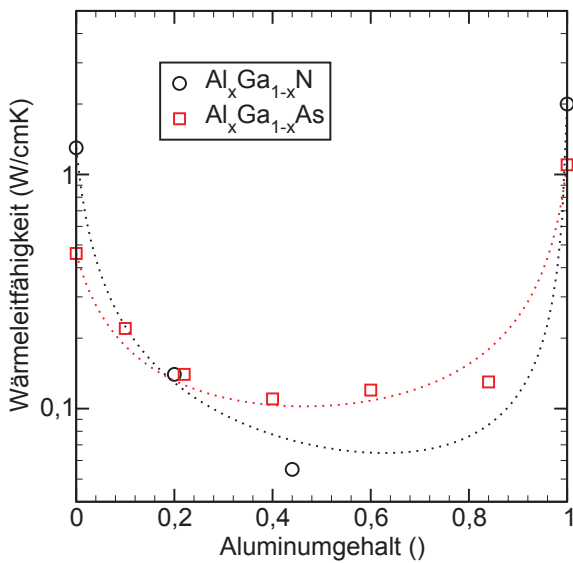


Abbildung 4.2.: Wärmeleitfähigkeit von ternären Halbleitern. Die gepunktete Linie gibt die Anpassung des Modells an die experimentellen Daten.[201, 186]

Massen-Unordnungs-Parameter Γ_D :

$$\Gamma_D = \sum_i f_i (1 - M_i/M_0)^2 \quad \text{mit} \quad M_0 = \sum_i f_i M_i \quad (4.7)$$

Hierbei sind für die Massen M_i die Gesamtmassen der Einheitszellen der binären Halbleiter zu nehmen und f_i stellt den fraktionellen Anteil des binären Halbleiters i dar. Es zeigt sich, dass dieser Parameter für AlGa₃N um den Faktor 2 höher ausfällt als für das besser untersuchte AlGaAs-System. Dieses resultiert aus der geringeren Masse des Stickstoffs: Während im AlGaAs-System die Masse des Arsens zu einer Homogenisierung der Massenverteilung führt, sind bei den Nitriden die Auswirkungen wesentlich stärker. Doch auch im AlGaAs-System wird die thermische Leitfähigkeit durch die Massenunordnung bis auf 1/8 reduziert, so dass es plausibel erscheint, für AlGa₃N eine noch stärkere Auswirkung anzunehmen.

Die Wärmeleitfähigkeit ist wie besprochen proportional zu der mittleren freien Weglänge l , die invers mit der Streurrate der Phononen verknüpft ist. Nimmt man an, dass sich die Gesamtstreurate in dem ternären System aus einer Streurrate, die alle übrigen Streuprozesse der Phononen enthält und proportional zu dem Parameter Γ_0 ist, und der Streuung auf Grund des Massenunordnungsparameters Γ_D zusammensetzt, so wird die Wärmeleitfähigkeit in dem ternären System gegenüber einem vergleichbaren System ohne Massenunordnung um den Faktor $\Gamma_0/(\Gamma_0 + \Gamma_D)$ vermindert sein. Unter der Annahme, dass der Parameter Γ_0 , der die übrigen Streuprozesse in dem ternären System beinhaltet, unabhängig von der Materialkomposition ist, kann die Wärmeleitfähigkeit zwischen den beiden binären Halbleitern A und B wie folgt interpoliert werden:

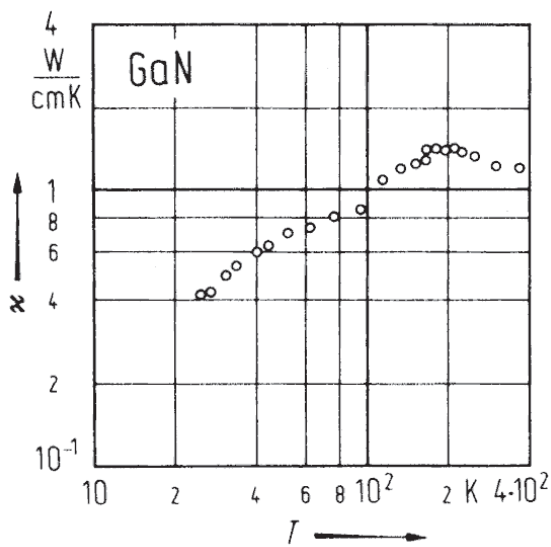


Abbildung 4.3.: Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von GaN [187].

$$\kappa_{A_xB_{1-x}} = \frac{\Gamma_0(x\kappa_A + (1-x)\kappa_B)}{\Gamma_0 + \Gamma_D} \quad (4.8)$$

Die Anpassung dieses Modells an die Datenpunkte aus den Quellen [201, 186], ist in Abbildung 4.2 dargestellt. Als einziger freier Parameter geht in diese Anpassung der Parameter Γ_0 ein, der sich für AlGaAs zu $4,6 \times 10^{-3}$ und für AlGaIn zu $5,1 \times 10^{-3}$ ergibt. Der Parameter Γ_0 ist somit in beiden Systemen vergleichbar, so dass trotz der wenigen verfügbaren Datenpunkte aus Quelle [186] die Anpassung gemäß Gleichung 4.8 glaubhaft erscheint. Daher wird im Folgenden für die Simulationen die thermische Leitfähigkeit der ternären Schichten gemäß dieses Modells bestimmt.

Temperaturabhängigkeit

Für die Simulationen ist es wichtig, die Abhängigkeit der Leitfähigkeit und der Kapazität von der Temperatur zu wissen, um den Fehler abschätzen zu können, der durch als konstant angenommene Parameter gemacht wird. In der Epitaxieschicht variieren die Temperaturen während des Betriebs am stärksten, da hier die Wärme in dem p-Gebiet generiert wird. Deswegen ist davon auszugehen, dass die Temperaturabhängigkeit der thermischen Parameter in diesen Schichten den größten Fehler produzieren wird. Hierzu wird an dieser Stelle beispielhaft in Abbildung 4.3 die Wärmeleitfähigkeit von GaN gezeigt. Zu sehen ist ein Anstieg der Wärmeleitfähigkeit unterhalb von 200 K, während dessen für höhere Temperaturen die Leitfähigkeit leicht abfällt. Andere Publikationen zeigen, dass die Wärmeleitfähigkeit des GaN im Bereich von 300 K bis 400 K konstant ist [186]. Theoretische Kalkulationen ergeben, dass die Wärmeleitfähigkeit in diesem Bereich um ca. 10 % abnimmt [202].

4. Wärmedissipation

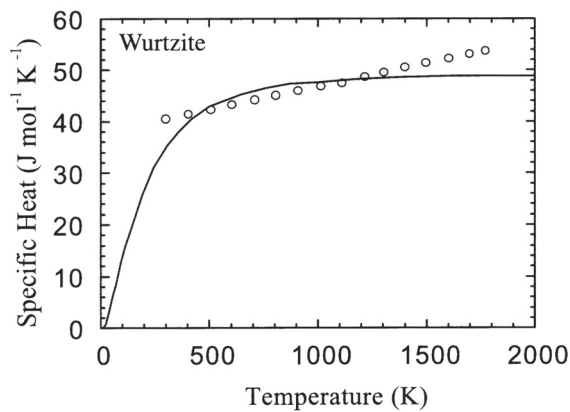


Abbildung 4.4.: Temperaturabhängigkeit der Wärmekapazität von GaN. Die Datenpunkte stammen von Barin *et al.* [194], die theoretische Kurve von Nipko *et al.* [204].

Die Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit ist somit als gering einzustufen. Viel größeren Einfluss nimmt jedoch die Störstellendichte auf die thermische Leitfähigkeit. Rechnungen von Zou *et al.* [203] ergeben, dass oberhalb eines Dotierniveaus von 10^{17} $1/\text{cm}^3$ die thermische Leitfähigkeit um den Faktor 2 abnimmt, wenn die Dotierkonzentration um einen Faktor 10 zunimmt. In diesen Rechnungen ergibt sich auch eine typische Wärmeleitfähigkeit von $1,3 \text{ W}/(\text{Kcm})$ bei einer Dotierung von knapp 10^{18} $1/\text{cm}^3$, wie sie für Schichten in einer Laserdiode typisch ist. Die Fehler, die durch eine temperaturunabhängige thermische Leitfähigkeit gemacht werden, sind somit wesentlich geringer als der Fehler, der durch die mangelnde Kenntnis der Wärmeleitfähigkeit bei Raumtemperatur entsteht. Daher ist die Annahme der Temperaturunabhängigkeit gerechtfertigt, die hierdurch entstehenden Fehler sind vernachlässigbar.

Die Wärmekapazität zeigt eine ähnlich schwache Abhängigkeit von der Temperatur wie die Wärmeleitfähigkeit. Da die Debye-Temperatur von Galliumnitrid mit 600 K oberhalb der Raumtemperatur liegt, nimmt in dem für die Laserdioden relevanten Bereich zwischen 300 K und 400 K die Wärmekapazität um ca. 5 % zu (Datenpunkte in Abbildung 4.4). Die Anpassung nach dem Debye-Modell (durchgezogene Linie in Abbildung 4.4) gibt nur mäßig den wirklichen Verlauf der Wärmekapazität wieder. Nach Barin *et al.* [194] beträgt die Wärmekapazität des Galliumnitrids C_{GaN} im Bereich zwischen 298 K und 1773 K:

$$C_{\text{GaN}} = 38,1 \text{ J}/(\text{molK}) + T \cdot 8,06 \cdot 10^{-3} \text{ J}/(\text{molK}^2) \quad (4.9)$$

Insgesamt ist die Temperaturabhängigkeit der Wärmekapazität der Gruppe-III-Nitride in dem relevanten Temperaturbereich als gering anzusehen, so dass der Fehler auf Grund von konstant gehaltener Wärmekapazität in den Simulationen ebenfalls vernachlässigbar ist.

4.2. Simulation

4.2.1. Algorithmen

Die mathematische Beschreibung von zeitabhängigen Diffusionsproblemen führt auf eine parabolische Differentialgleichung für die gesuchte, von der Zeit- und von Ortsvariablen abhängigen Größe (ficksches Gesetz) [205]. Dies bedeutet, dass die zeitliche Veränderung der Größe proportional zu den zweiten Ableitungen in den Ortskoordinaten ist. Für einen Festkörper mit von der Ortskoordinate abhängiger Wärmekapazität $c(\vec{x})$, Wärmeleitfähigkeit $\kappa(\vec{x})$ und einer lokalen Wärmequelle der Dichte $q(\vec{x})$ ist die Entwicklung der Temperatur T an einem Punkt \vec{x} in j Dimensionen:

$$\frac{dT}{dt} = \sum_j \frac{1}{c(\vec{x})} \frac{d}{dx_j} \left(\kappa(\vec{x}) \frac{d}{dx_j} T \right) + \frac{q(\vec{x})}{c(\vec{x})} \quad (4.10)$$

Bei der Simulation auf einem diskreten Gitter mit diskreten Zeitschritten können die Ableitungen durch die entsprechenden Differenzenquotienten ersetzt werden, für den eindimensionalen Fall folgt somit:

$$\frac{T_{i,t+\Delta t} - T_{i,t}}{\Delta t} = \frac{1}{c_i} \frac{\kappa_{i+1/2} \frac{T_{i+1,t} - T_{i,t}}{x_{i+1} - x_i} - \kappa_{i-1/2} \frac{T_{i,t} - T_{i-1,t}}{x_i - x_{i-1}}}{x_{i+1/2} - x_{i-1/2}} + \frac{q_{i,t}}{c_i} \quad (4.11)$$

Die tiefgestellten Indizes i geben in dieser Notation die Ordinale der Position an. Durch Umstellen nach $T_{i,t+\Delta t}$ ergibt sich ein einfaches Integrationsschema, das als explizite Methode von Richardson bezeichnet wird: Der folgende Zeitschritt wird nur auf Grundlage der Temperaturverteilung des vorherigen Zeitschrittes berechnet, daher zeichnet sich diese Methode durch eine einfache Programmierung aus, die nur wenig Speicherplatz verbraucht. Ein Nachteil dieser Methode ist die geringe Stabilität, die antiproportional zum Quadrat der Gitterabstände ist. Als Stabilitätskriterium gilt [206]:

$$\frac{2\kappa\Delta t}{c(\Delta x)^2} \leq 1 \quad (4.12)$$

Die physikalische Interpretation des Kriteriums ist, dass der verwendete Zeitschritt kleiner sein muss als die Diffusionszeit durch eine Zelle der Breite Δx . Neben der großen Instabilität überschätzt diese Methode die Diffusion, da bereits während des Zeitschrittes ein Wärmeaustausch stattfindet und sich somit der Temperaturgradient während der Zeit des Integrationsschrittes verringert. Die Genauigkeit ist hierbei in erster Ordnung proportional zu der Größe des Zeitschrittes Δt .

Bei der Verwendung eines impliziten Integrationsschemas wird der umgekehrte Weg gegangen, indem der Wärmetransport anhand des Temperaturgradienten am

Ende des Zeitschrittes bestimmt wird:

$$\frac{T_{i,t+\Delta t} - T_{i,t}}{\Delta t} = \frac{1}{c_i} \frac{\kappa_{i+1/2} \frac{T_{i+1,t+\Delta t} - T_{i,t+\Delta t}}{x_{i+1} - x_i} - \kappa_{i-1/2} \frac{T_{i,t+\Delta t} - T_{i-1,t+\Delta t}}{x_i - x_{i-1}}}{x_{i+1/2} - x_{i-1/2}} + \frac{q_{i,t+\Delta t}}{c_i} \quad (4.13)$$

Dieses Verfahren ist vollständig implizit, da die Wärmediffusion auf Grund der Werte $T_{i,t+\Delta t}$ am Ende des Zeitschrittes errechnet wird. Hierzu muss für jeden Zeitschritt ein lineares Gleichungssystem gelöst werden, was den Rechenaufwand je Zeitschritt gegenüber der expliziten Methode wesentlich erhöht. Der Vorteil der impliziten Methode ist jedoch die hohe Stabilität. Der Verstärkungsfaktor ξ dieser Methode, der angibt, wie stark die Diffusion über- oder unterschätzt wird, ist nach [206]:

$$\xi = \frac{1}{1 + 4 \frac{\kappa \Delta t}{c(\Delta x)^2} \sin^2 \left(\frac{k \Delta x}{2} \right)} \quad (4.14)$$

Der Verstärkungsfaktor ist somit für alle Schrittgrößen Δt kleiner gleich 1, die Methode ist daher unbegrenzt stabil. Für große Zeitschritte wird die Diffusion lediglich unterschätzt. Die Stabilität dieses Verfahrens ist dadurch gegeben, dass bei Zeitschritten $\Delta t \rightarrow \infty$ die linke Seite der Gleichung 4.13 gegen Null strebt. In diesem Grenzfall löst diese Integrationsmethode den Gleichgewichtsfall $d/dt(T) = 0$, der durch folgende Gleichung beschrieben wird:

$$\text{div}[\kappa(\vec{x}) \text{grad}[T(\vec{x})]] = q \quad (4.15)$$

Somit ist es möglich mit Hilfe der impliziten Lösung den Gleichgewichtsfall mit einem einzelnen Schritt zu errechnen. Zur Lösung eines jeden Schritts des impliziten Verfahrens muss jedoch die Matrix des Gleichungssystems mit den Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Gitterplätzen diagonalisiert werden. Dieses ist im eindimensionalen Fall relativ einfach möglich, da die resultierende Matrix des Gleichungssystems nur Elemente auf der Hauptdiagonalen und den ersten Nebendiagonalen besitzt. Für mehrdimensionale Probleme wird das Lösen des linearen Gleichungssystems schnell umfangreich, da die Größe der zu lösenden Matrix quadratisch mit der Anzahl der simulierten Gitterpunkte n ist und sich nicht auf eine einfache Diagonalform zurückführen lässt. Ist m die Anzahl der Gitterpunkte entlang der größten Dimension, so ist die Anzahl der zu berücksichtigten Nebendiagonalen (die so genannte Bandbreite b) gleich n/m . Solche Bandmatrizen können mit Hilfe von gängigen Algebrapaketten, die für die lineare Algebra zur Verfügung stehen (BLAS - Basic Linear Algebra Subprograms / LAPACK - Linear Algebra PACKage), in gepackter Form abgespeichert werden. Der Speicherbedarf einer um die Bandbreite reduzierten Matrix ist von der Größenordnung n^2/m . Bei einem quadratischen Gitter von 200 Punkten in jeder Dimension ergibt sich trotz dessen ein Speicherbedarf allein für die Matrix

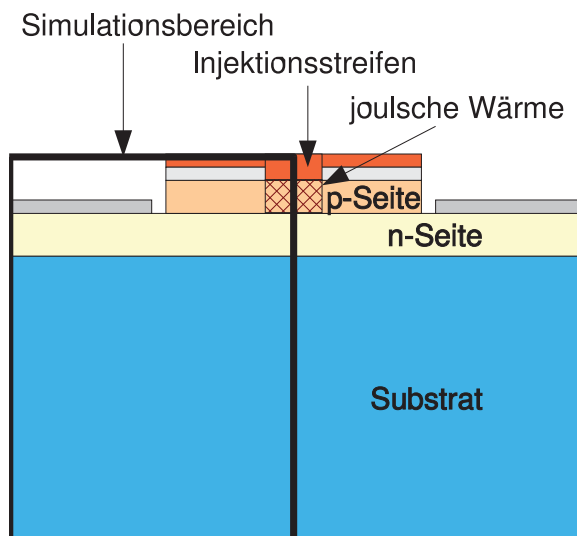


Abbildung 4.5.: Anordnung des Gitters der Simulationen in Bezug auf die Laserstruktur.

von 128 MB. Somit limitiert im Wesentlichen der Anspruch an die Speicherkapazität die Verwendung eines impliziten Verfahrens. Die Zeitschritte dieses Verfahrens können, im Gegensatz zu einem expliziten Verfahren, auf Grund der hohen Stabilität wesentlich größer gewählt werden, was jedoch eine Auslöschung lokaler Strukturen zur Folge hat.

In den folgenden Simulationen wurde das explizite Verfahren angewandt, um die Temperaturentwicklung im Bereich von μs zu errechnen, während für die Langzeitentwicklung und die Gleichgewichtszustände das implizite Verfahren zur Anwendung kam.

4.2.2. Details

Die Simulationen wurden auf einem zweidimensionalen Gitter mit orthogonalen Maschen durchgeführt, das einen Querschnitt der Laserdiode abbildet (siehe Abbildung 4.5). Da so die Wärmedissipation entlang des Streifens vernachlässigt wird, entsprechen die Simulationsergebnisse einem Laserstreifen mit unendlicher Länge. Die Resonatorlänge ist jedoch groß gegenüber den anderen Strukturgrößen, so dass eine zweidimensionale Simulation der Laser gerechtfertigt ist. Für die Simulation wird angenommen, dass der Laser spiegelsymmetrisch zu einem senkrechten Schnitt entlang des Resonators ist. Unter dieser Annahme tritt kein Wärmetransport durch diese Symmetrieebene auf, so dass die Simulation – wie in Abbildung 4.5 zu sehen – nur auf der einen Hälfte der Laserdiode ausgeführt werden muss, wenn Neumannsche Randbedingungen mit $\delta T / \delta x_i = 0$ angenommen werden. Die Substratseite des Gitters wurde durch eine Dirichlet-Bedingung auf konstanter Temperatur gehalten, wäh-

rend dessen die übrigen Ränder ebenso durch Neumannsche-Bedingungen simuliert werden. Somit wird der Wärmetransport an der Oberfläche in die Umgebungsluft vernachlässigt. Dieses ist gerechtfertigt, solange der Wärmetransport in der Luft diffuser Natur ist, da Luft eine um drei Größenordnungen geringere Wärmeleitfähigkeit besitzt. In der Regel wird der Wärmetransport in der Umgebungsluft konvektiver Art sein, allerdings würde eine solche Simulation den Rahmen dieser Arbeit sprengen.

Das in den Simulationen verwendete Gitter hat eine Ausdehnung von $600\ \mu\text{m}$ in lateraler Richtung und $310\ \mu\text{m}$ in vertikaler Richtung. Es umschließt somit die gesamte Struktur einschließlich Substrat und besitzt eine Größe von 200×200 Punkten. Um eine hinreichende Genauigkeit in der Nähe des Quantentroges zu erreichen, sind die Positionen der Gitterpunkte in einer geometrischen Reihe mit einem Exponenten von 1.03 angeordnet. Hierdurch beträgt die Auflösung im aktiven Gebiet ca. $100\ \text{nm}$ in lateraler Richtung und $50\ \text{nm}$ in Wachstumsrichtung. Aus dieser Ortsgenauigkeit heraus ergibt sich auf Grund des Stabilitätskriteriums in Gleichung 4.12 ein zulässiger Zeitschritt von $50\ \text{ps}$ als obere Grenze im expliziten Verfahren. Aus anderen Publikationen ist bekannt, dass der Hauptteil der Wärmeverluste im p-Gebiet auf Grund des ohmschen Widerstandes entstehen [207]. Daher wird als alleinige Wärmequelle in diesen Simulationen die im p-Gebiet entstehende joulesche Wärme angenommen. Hierbei wird von einem direkten Stromfluss durch das Gebiet ohne eine Strompfadaufweitung ausgegangen. Die Wärmeentwicklung in der n-dotierten Seite des Lasers wird nicht betrachtet, da hier auf Grund des deutlich geringeren spezifischen Widerstandes die Wärmeentwicklung um zwei Größenordnungen geringer ausfällt. Zudem befinden sich die n-dotierten Schichten näher an der Wärmesenke, so dass die Wärme besser abgeführt werden kann.

4.3. Ergebnisse

4.3.1. Spektrale Verschiebung / Wärmewiderstand LED

Typisch für optoelektronische Bauelemente ist eine spektrale Verschiebung des emittierten Lichts mit der zugeführten Leistung auf Grund der Veränderung der Bandlücke durch die Erwärmung. Diese Verschiebung entsteht durch die Anregung von optischen Phononen, die auf Grund von anharmonischen Anteilen in den Potenzialen der Atome zu einer Ausdehnung des Kristalls führen. Diese Ausdehnung ist verknüpft mit einer Veränderung der elektronischen Struktur und führt im Allgemeinen zu einer Erniedrigung der Bandlücke mit zunehmender Temperatur. Die physikalisch korrekte Beschreibung der Phononenanregung ist die Bose-Einstein-Verteilungsfunktion. Da die Verschiebung der Bandlücke jedoch nicht direkt proportional der Phononendichte folgt, wird diese oftmals mit Hilfe der empirischen Varshni-Formel [208] beschrieben.

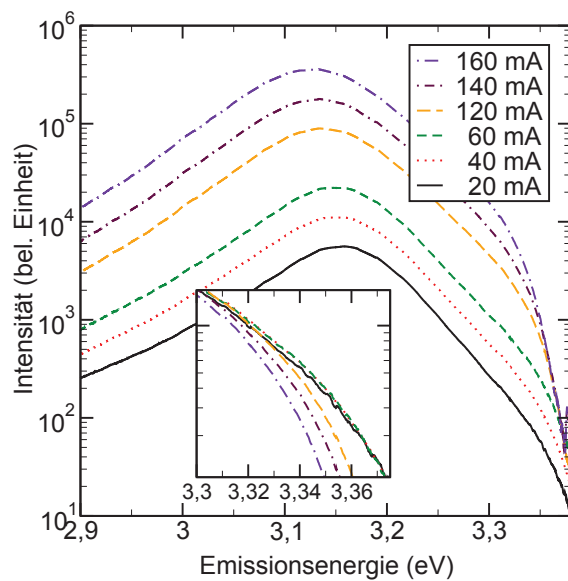


Abbildung 4.6.: Elektrolumineszenzspektren einer Leuchtdiode in Abhängigkeit des Betriebsstromes. Im Inset ist der Bereich der Spektren, in denen die Absorptionskante des GaN sichtbar ist, vergrößert dargestellt.

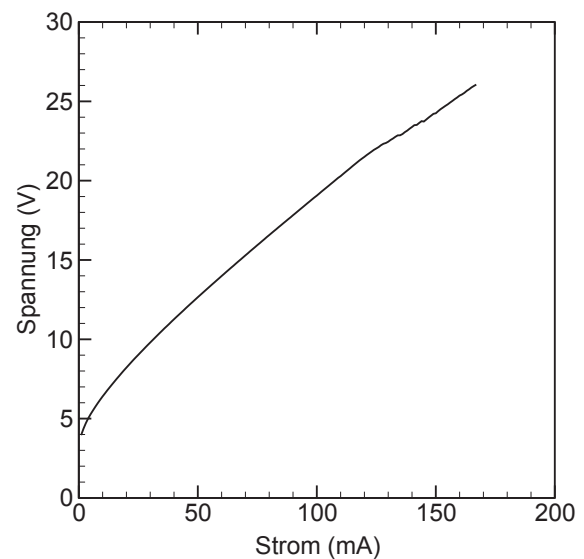


Abbildung 4.7.: IV-Kennlinie der untersuchten Leuchtdiode.

Nach Bougrov *et al.* ergibt sich die Bandlückenabhängigkeit gemäß dieser Formel zu [189]:

$$E_G(T) = 3,47\text{eV} - \frac{T^2 \cdot 7,7 \cdot 10^{-4}\text{eV/K}}{T + 600\text{K}} \quad (4.16)$$

Durch Kenntnis dieser Abhängigkeit lässt sich aus der relativen Verschiebung der Elektrolumineszenz eines elektrooptischen Bauelementes die Erwärmung abschätzen.

Um diese Verschiebung zu untersuchen, wurde eine Leuchtdiode auf einer Wärmesenke aus Kupfer montiert und elektrisch betrieben. Die Elektrolumineszenz dieser Probe wurde lateral aus der Bruchkante heraus mit Hilfe eines Monochromators detektiert. In Abbildung 4.6 sind die Emissionsspektren einer GaN-Leuchtdiode aufgenommen worden, die bei verschiedenen Betriebsströmen zu sehen sind. Hierzu wurde eine Leuchtdiode aus dem Beginn dieser Promotion genommen, die sich noch durch eine hohe Betriebsspannung auszeichnete (siehe Abbildung 4.7). Auf Grund der hieraus resultierenden hohen Verlustleistung der Diode ist in dieser Struktur besonders gut die Verschiebung des Emissionsmaximums mit zunehmenden Strömen hin zu niedrigeren Emissionsenergien zu erkennen. Bei ca. 3,4 eV ist in den Spektren die Absorptionskante des Galliumnitrids als eine deutliche Abnahme der Lumineszenzintensität zu sehen. Zur Verdeutlichung ist der Bereich der Absorptionskante

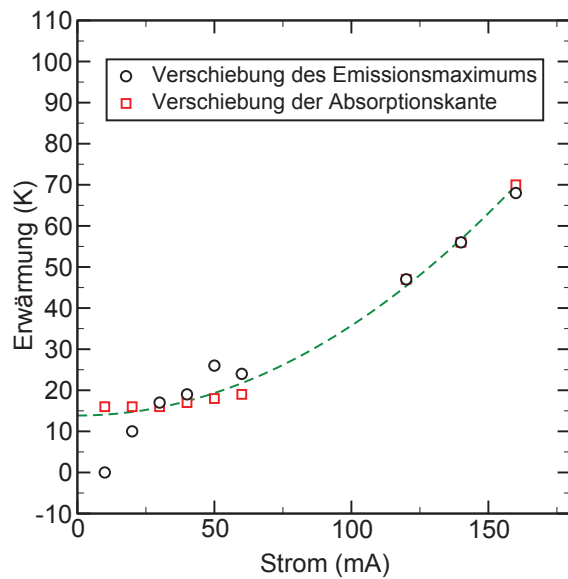


Abbildung 4.8.: Errechnete Erwärmung der Leuchtdioden aus der Verschiebung des Emissionsmaximums (Kreise) und der Verschiebung der Absorptionskante des GaN (Quadrate). Die Anpassung resultiert aus der IV-Kennlinie in Abbildung 4.7.

im Inset des Graphen dargestellt. In dem Inset wurden die Lumineszenzspektren so übereinander aufgetragen, dass die Intensitäten oberhalb der Absorptionskante des GaN vergleichbar sind. In dieser Auftragung ist zu sehen, dass auch die Absorptionskante des GaN mit steigenden Betriebsströmen zu niedrigeren Energien verschiebt.

Unter Zuhilfenahme der Temperaturabhängigkeit der Bandlücke wurde aus den dargestellten Elektrolumineszenzspektren die Erwärmung des Bauelementes extrahiert. In Abbildung 4.8 sind diese Daten, die sowohl aus dem Emissionsmaximum als auch aus der Absorptionskante des GaN bestimmt wurden, aufgetragen. Die Temperaturerhöhung im Betrieb der Diode liegt für beide Datenreihen bei ungefähr 55 K. Das Emissionsmaximum schiebt dabei etwas stärker als die Absorptionskante des Galliumnitrids. Insbesondere schiebt das Emissionsmaximum schon deutlich bei kleinen Strömen, bei denen noch keine signifikante Erwärmung zu erwarten wäre. Dieses kann jedoch auf Lokalisationseffekte im Quantentrog zurückzuführen sein. So ist aus Elektro- und Photolumineszenzuntersuchungen bekannt, dass Quantentröge, die Kompositionsfluktuationen aufweisen, eine zusätzliche spektrale Verschiebung mit der Temperatur zeigen [209, 210]. Daher sind die Daten, die aus der Veränderung der Absorptionskante resultieren, aussagekräftiger; hier ist jedoch zu berücksichtigen, dass die auf Grund der Absorptionskante bestimmten Temperaturen kleiner als die im aktiven Gebiet sind, da ein Großteil der absorbierenden Schicht kälter als das direkt an der Kontaktregion liegende aktive Gebiet ist.

Die thermische Last kann aus den I-V-Kennlinien der Diode abgeschätzt werden (siehe Abbildung 4.7). So wurde die Anpassung, die in der Abbildung 4.8 zu sehen ist, aus der IV-Kennlinie der Diode gewonnen, indem ein proportionaler Zusammenhang der elektrischen Leistung der Diode und der Erwärmung der Struktur angenom-

men wurde. Die hierdurch ermittelte Proportionalitätskonstante stellt den Wärmewiderstand der Struktur da. Bei einer Verlustleistung der Diode von $0,16 \text{ A} \cdot 25,4 \text{ V} = 4 \text{ W}$ und einer Erwärmung der Diode um 55 K ergibt sich für diese Struktur ein Wärmewiderstand von 13 K/W . Dieser Wert kann als untere Grenze für die zu erwartenden Wärmewiderstände in den Laserdioden dienen, da auf Grund der wesentlich größeren Fläche des p-Kontakts die Wärme in einer Leuchtdiode besser abgeführt werden kann.

4.3.2. Temperaturabhängige Messungen - Aktivierungsenergie

Um aus den elektrooptischen Daten auf die Temperatur schließen zu können, muss die Temperaturabhängigkeit der Elektrolumineszenz geklärt sein. Da für diese Messungen kein temperaturgeregelter Messplatz zur Verfügung stand, wurde für diese Messungen eine Peltier-Kühlung verwendet. Der erreichbare Temperaturbereich des Peltier-Elements liegt zwischen 0 °C und 200 °C und ist an der unteren Grenze durch die im Peltier-Element erzeugte joulesche Wärme auf Grund des inneren Widerstandes begrenzt. Um Taubildung auf der Struktur zu verhindern, wurde trockener Stickstoff über die Probe geleitet. Trotz dessen konnte eine Bildung von Eis am Rand der Probe im Betrieb bei 0 °C nicht verhindert werden.

Auf dem Peltier-Element wurde für die Messungen der Elektrolumineszenz ein Barren mit Laserdioden mit Hilfe von Silberleitlack befestigt, das einen guten Kontakt zu der Wärmesenke gewährleistet. Diese Laserdiode wurde unterhalb der Laserschwelle betrieben und aus der Fassung des Resonators die Elektrolumineszenz mittels einer Photodiode detektiert. Die Photodiode wurde mit einem $50 \text{ }\Omega$ -Widerstand terminiert und die an dem Widerstand abfallende Spannung mittels eines digitalen Speicheroszilloskops aufgenommen.

Mit Hilfe dieses Messaufbaus wurde in dem Temperaturbereich von 0 °C bis 200 °C die Temperaturabhängigkeit der Elektrolumineszenz bestimmt. Hierzu wurden gepulste Messungen verwendet, um die thermische Belastung der Diode möglichst gering zu halten. Als Puls-Bedingungen wurde ein duty-cycle von $0,01 \text{ \%}$ und ein Betriebsstrom von 800 mA gewählt. Bei der verwendeten Pulslänge von $10 \text{ }\mu\text{s}$ ergibt sich aus dem duty-cycle eine Periode der Pulse von $0,1 \text{ s}$. Diese Zeit ist ausreichend, um die Wärmeabfuhr der Diode ausreichend zu gewähren, wie es in Abschnitt 4.3.4 näher ausgeführt werden wird. Die Photoströme wurden über 256 Pulse gemittelt, um das Rauschen der Messungen zu minimieren.

In Abbildung 4.9 sind diese Transienten in Abhängigkeit des Peltier-Stromes dargestellt. Die Messungen zeigen starke Oszillationen zum Anfang des Pulses. Die Oszillationen rühren von Induktionsspannungen in der Photodiode und den Zuleitungen her, da im gepulsten Betrieb starke elektromagnetische Felder in der Laserdiode und deren Zuleitungen entstehen. Immerhin ergeben sich bei einer Anstiegszeit der Pul-

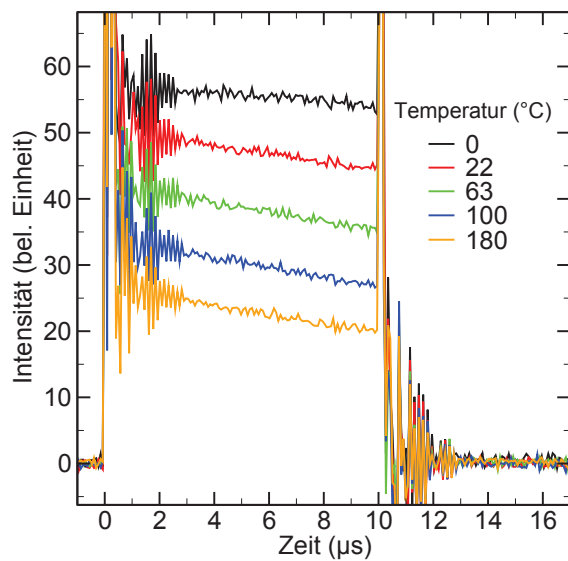


Abbildung 4.9.: Transienten der Lumineszenzintensität für verschiedene Temperaturen der Wärmesenke.

se von unter 10 ns und Strömen I von 0,8 A Werte von 8 TA/s für den Stromanstieg \dot{I} . Die hierdurch verursachten Spannungsschwankungen in der Photodiode werden in dieser Messung bei einer Sampling-Rate von 20 MHz nicht vollständig aufgelöst. Daher ist auf den Oszillationen am Beginn der Transienten zusätzlich eine Schwebung zu erkennen. Die Transienten zeigen außerdem eine Abnahme der Ausgangsleistung während des Pulses. Dieses deutet auf eine Aufheizung der aktiven Region während des Pulses hin. Für den Transienten bei einer Temperatur von 0 °C ist der Abfall der Lumineszenzintensität deutlich geringer gegenüber den anderen Messungen. Da das am Rand der Probe gebildete Eis am Gefrierpunkt eine sehr hohe Wärmekapazität aufweist, wurde in dieser Messung ein Großteil der Wärme in die Vereisung abgeleitet.

Die Abnahme der Intensität im Puls deutet auf eine erhebliche Erwärmung der Struktur während des Pulses hin. Daher kann nur am Anfang des Pulses davon ausgegangen werden, dass die Temperatur in der Diode der Temperatur der Wärmesenke entspricht. Somit muss die Intensität der Elektrolumineszenz zu Beginn des Pulses ausgewertet werden. Hierzu wurde eine Ausgleichsfunktion durch den Transienten während des Pulses gelegt und die Ausgangsleistung zum Pulsbeginn extrapoliert.

Die so gewonnenen Daten ergeben in einer Arrhenius-Auftragung (siehe Abb. 4.10) einen mono-exponentiellen Zusammenhang zwischen der Temperatur der Wärmesenke und der Ausgangsleistung der Laserdiode. Die Aktivierungsenergie lässt sich aus dieser Auftragung zu 50 meV bestimmen. Die Ausgangsleistung der Diode lässt sich somit für eine Temperaturerhöhung ΔT gegenüber einer Grundtemperatur von

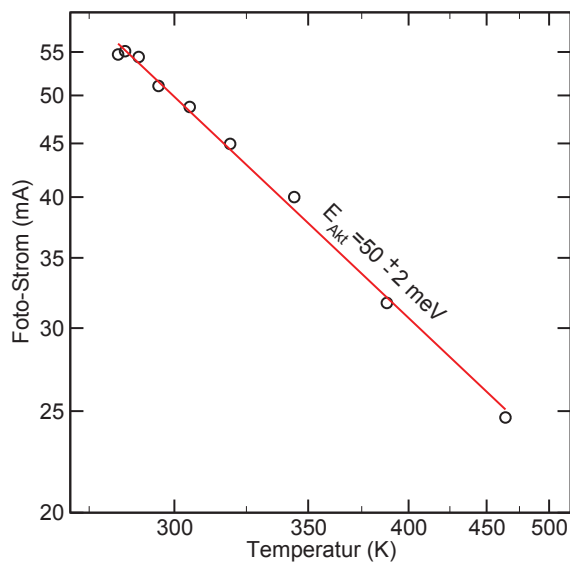


Abbildung 4.10.: Arrhenius Auftragung der Elektrolumineszenz gegenüber der Temperatur der Wärmesenke.

0 °C beschreiben als:

$$I(\Delta T) = I(273 \text{ K}) \frac{e^{E_{Akt}/(k(273 \text{ K} + \Delta T))}}{e^{E_{Akt}/(k \cdot 273 \text{ K})}} \quad (4.17)$$

Wie spätere Simulationen zeigen werden (siehe Kapitel 4.3.5), ist jedoch die Aufwärmung des aktiven Gebietes innerhalb der ersten ns nicht vernachlässigbar, da gerade zu Beginn des Pulses der Temperaturanstieg stark ist. Daher könnten die in der aktiven Region herrschenden Temperaturen in dieser Messung unterschätzt sein. Nach Abschätzungen aus den Simulationen kann daher die Temperaturskala um bis zu 30 K verschoben sein. Hieraus ergibt sich ein systematischer Fehler für die Aktivierungsenergie, die um ca. 10 meV höher liegen könnte.

Betrachtet man den Abstand der Emissionsenergie von 3 eV zu der Bandlücke der umgebenden Barrieren, die aus Galliumnitrid ($E_g = 3.41 \text{ eV}$) bestehen, so scheint die Aktivierungsenergie der Elektrolumineszenz zu klein, als dass es sich bei diesem Prozess um die Aktivierung von Ladungsträgern in die Barriere handeln könnte. Daher scheint in diesen Strukturen vielmehr eine Aktivierung von Ladungsträgern aus lokalen Potenzialminima zu erfolgen, wie sie oftmals an InGaN-Quantentrögen beobachtet wird [209]. Neben dieser Möglichkeit könnte es sich auch um die Dissoziationsenergie von Exzitonen handeln, deren Bindungsenergie im Quantentrog auf Grund des zusätzlichen Einschusses erhöht ist, oder um die thermische Anregung eines nichtstrahlenden Rekombinationsprozesses. Wie auch immer die Aktivierungsenergie zu erklären ist, gibt sie in diesem Temperaturbereich eine exakte Beschreibung der Intensitätsabhängigkeit der Elektrolumineszenz.

4.3.3. Erwärmung innerhalb eines Pulses

Bei den Messungen zur Bestimmung der Aktivierungsenergie der Elektrolumineszenz zeigte sich in den Pulsen eine deutliche Abnahme der Intensität. Im Folgenden soll untersucht werden, ob diese Abnahme als die thermische Aktivierung von Ladungsträgern im aktiven Gebiet der Laserstruktur zu verstehen ist. Hierzu wurde die Temperaturentwicklung im aktiven Gebiet mit Hilfe der impliziten Integration der partiellen Differenzialgleichung simuliert und mit den Lumineszenzdaten aus einem Puls aus den vorhergehenden Messungen verglichen. Da die Aktivierungsenergie aus diesen Messungen bekannt ist, sollte sich die Temperatur im aktiven Gebiet aus der Intensität abschätzen lassen. Durch Umformung der Intensitätsabhängigkeit in Formel 4.17 kann somit aus der Intensität auf die Erwärmung innerhalb des Pulses zurückgeschlossen werden:

$$\Delta T(I) = -\frac{\frac{k \cdot (273 \text{ K})^2}{E_{Akt}} \ln\left(\frac{I}{I_0}\right)}{1 + \frac{k \cdot 273 \text{ K}}{E_{Akt}} \ln\left(\frac{I}{I_0}\right)} \text{ mit } I_0 = I(273 \text{ K}) \quad (4.18)$$

Die so errechneten Temperaturdaten werden in Abb. 4.11 mit den aus der Simulati-

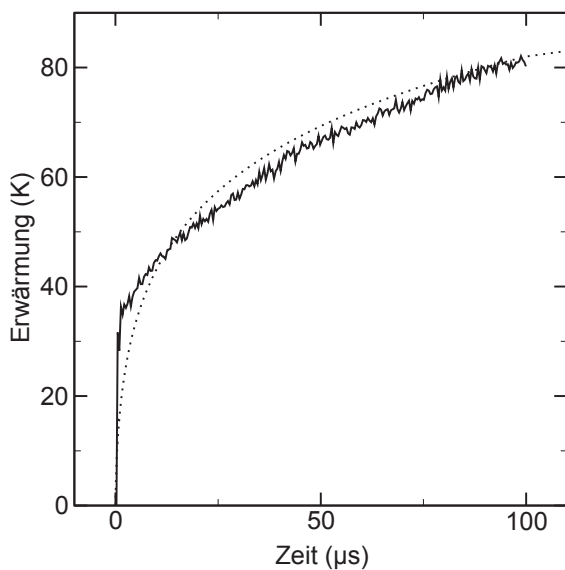


Abbildung 4.11.: Extrahierte Temperatur des Quantentroges aus den Intensitäts-Transienten eines 100 µs-Pulses (durchgezogene Linie) und simulierte Temperatur (gestrichelte Linie).

on gewonnen Daten verglichen. Die aus den Intensitäten extrahierte Temperatur gibt prinzipiell die in der Simulation gewonnen Temperaturverlauf wieder. Es ist jedoch zu sehen, dass in den experimentellen Daten die Temperatur zunächst schneller ansteigt als in der Simulation. Dieses deutet vor allem auf eine zusätzliche Wärmegeneration auf Grund von nichtstrahlenden Rekombinationen innerhalb des Quantentroges hin, da in der Simulation als Wärmequelle das p-Gebiet angenommen wurde und so die Aufwärmung des aktiven Gebietes um die Diffusionszeit verringert ist.

Zum Anderen eliminiert die implizite Integrationsmethode lokale Strukturen, so dass die Simulation den Temperaturanstieg zu Beginn unterschätzt.

Im Ganzen stimmen die aus der Simulation gewonnenen Daten mit dem Experiment gut überein, so dass sich die Daten gegenseitig bestätigen. Die zeitliche Abnahme der Ausgangsintensität der Dioden ist somit auf die Erwärmung der Struktur im aktiven Gebiet zurückzuführen. Auf Grund der relativ geringen Aktivierungsenergie reagieren die Strukturen empfindlich auf eine Erhöhung der Temperatur innerhalb des Pulses.

4.3.4. Tastverhältnis

Die weitere Methode, den Einfluss der Wärme auf die Leistung der Bauelemente nachzuweisen, sind Messungen mit variablen Tastverhältnis im gepulsten Betrieb. Als Tastverhältnis wird das Verhältnis von der Dauer des eingeschalteten Zustandes zu der Periodendauer der Pulse bezeichnet. Da die Zeiten zwischen den Pulsen im Bereich von Mikrosekunden liegen und größer sind als die Zeitskalen der Elektrodynamik in Halbleitern, kann davon ausgegangen werden, dass sich die Pulse aus Sicht der Ladungsträgerdynamik nicht gegenseitig beeinflussen. Daher kann in Messungen mit variablem Tastverhältnis, aber konstanten Pulslängen die Wärmeabhängigkeit der Elektrolumineszenz untersucht werden.

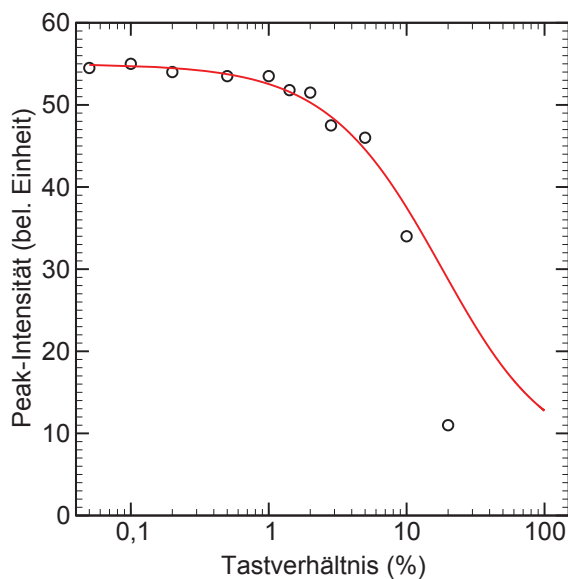


Abbildung 4.12.: Abhängigkeit der Ausgangsleistung im LED-Betrieb vom verwendeten Tastverhältnis. Die Anpassung (durchgezogene Linie) geht von den in der Simulation errechneten Temperaturen aus.

In Abbildung 4.12 ist die Abhängigkeit der Ausgangsleistung im LED-Betrieb von dem Tastverhältnis aufgetragen. Für diese Messungen wurden kurze Pulse von 100 ns verwendet, um die Wärmeentwicklung während des Pulses möglichst gering zu halten. Die Proben wurden mit einem Pulsstrom von 800 mA bei einer

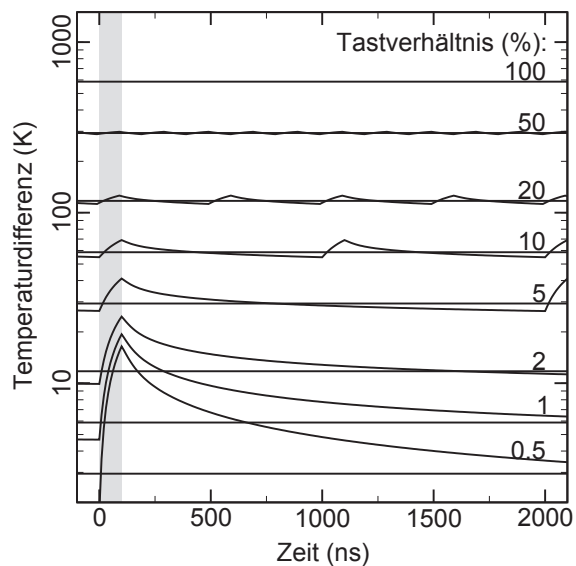


Abbildung 4.13.: Simulierte Erwärmung im gepulsten Betrieb für Tastverhältnisse von 0,5 – 100 % bei 100 ns dauernden Pulsen. Die horizontale Linie gibt die Temperatur im ungepulsten Betrieb mit um das Tastverhältnis reduzierter Leistung an.

Spannung von ca. 24 V betrieben, wodurch sich im Puls eine thermische Last von ungefähr 19 W ergibt. Es ist zu sehen, dass die Ausgangsleistung der Leuchtdiode bis zu einem Tastverhältnis von einem Prozent nahezu konstant ist und dann zu höheren Tastverhältnissen abfällt. Bei einem Tastverhältnis oberhalb von 20 % wurde die Struktur auf Grund der zu hohen thermischen Belastung zerstört. Parallel zu den Experimenten wurde die Temperatur im aktiven Gebiet mit Hilfe von Simulationen für die in der Messung benutzten Parameter durchgeführt. Die Probe befindet sich in dieser Simulation in einem Langzeit-Gleichgewicht, so dass die Temperatur in aufeinanderfolgenden Pulsen identisch zueinander ist. Hierzu wurde zunächst der stationäre Zustand ermittelt, der sich einstellt, wenn man die Diode mit einer um das Tastverhältnis reduzierten Leistung belastet. Ausgehend von dem stationären Zustand wurde dann der gepulste Betrieb simuliert. Auf Grund ähnlicher Temperaturverteilung des stationären Zustandes und der durchschnittlichen Temperaturverteilung, die sich gemittelt über eine Periode im gepulsten Betrieb ergibt, konnte so in der Simulation schnell das Langzeit-Gleichgewicht erreicht werden.

In Abbildung 4.13 sind die errechneten Transienten der Erwärmung im aktiven Gebiet dargestellt. Die Erwärmung, die sich aus dem stationären Zustand mit einer um das Tastverhältnis verringerten Leistung ergibt, ist in der Abbildung als horizontale Linie eingetragen. Von diesem Zustand aus wurde 50 μ s des gepulsten Betriebs simuliert. Die Abweichung der Temperatur in aufeinander folgenden Pulsen ist am Ende dieses Intervalls kleiner als 1 Promille und somit hinreichend nahe am Langzeit-Gleichgewicht.

Die Simulationen zeigen, dass die mittlere Erwärmung im Puls für Tastverhältnisse größer als 1 % im Wesentlichen dem stationären Zustand des Dauerbetriebes folgt. Dieses ist leicht verständlich, da im Zeitmittel die gleiche Wärmemenge aus dem

p-Gebiet diffundieren muss und der Wärmetransport proportional zu der Temperaturdifferenz ist. Es zeigt sich jedoch auch, dass die Temperatur im Puls bei kleinen Tastverhältnissen durch die Erwärmung während des Pulses dominiert ist. Hierdurch ist die Erwärmung nicht proportional zum Tastverhältnis, insbesondere bei sehr kleinen Tastverhältnissen ist die Temperatur im Puls unabhängig vom Tastverhältnis und entspricht der Erwärmung, die in einem einzelnen Puls erzeugt wird. Immerhin beträgt diese Erwärmung in der Laserdiode am Ende eines einzelnen Pulses ca. 20 K. Der Temperaturgradient zu Beginn des Pulses, normiert auf die in die Diode eingebrachte elektrische Leistung, beträgt somit über 10^7 K/Ws. Die zu erwartende Erwärmung unter Konstantstrom-Bedingungen ergibt sich aus der Simulation zu 600 K. Der Wärmewiderstand, der sich hieraus ergibt, beträgt 42 K/W.

Mit Hilfe der simulierten Temperaturen und der gewonnenen Aktivierungsenergie der Elektrolumineszenz aus Abschnitt 4.3.2 lässt sich der Verlauf der Ausgangsleistung der Diode in Abhängigkeit des Tastverhältnisses gut wiedergeben (siehe Abbildung 4.12). Dies zeigt, dass der in der Simulation errechnete Wärmewiderstand der Struktur von 42 K/W die Erwärmung der Struktur korrekt wiedergibt. Der experimentelle Wert bei einem Tastverhältnis von 20 % weicht deutlich von den simulierten Daten ab. Unter diesen Bedingungen beträgt die errechnete Temperatur ca. 120 K und liegt somit noch in dem in Abschnitt 4.3.2 untersuchten Bereich. Die geringere Ausgangsleistung kann daher nicht durch einen zusätzlichen Aktivierungskanal der Ladungsträger erklärt werden, vielmehr ist davon auszugehen, dass in dieser Messung bereits eine Degradation der Struktur einsetzte.

Aus den Simulationen wird verständlich, warum die Laserdioden typischerweise nur bis zu einem Tastverhältnis von maximal 1 % betrieben werden können, da in diesem unteren Bereich die Temperatur im Puls fast unabhängig von dem Tastverhältnis ist. Wie stark abhängig das Lasing von der Temperatur ist, zeigt sich daran, dass der Laserbetrieb schon bei geringfügig höheren Tastverhältnissen zusammenbricht. Aus demselben Grund sind auch die Pulslängen auf Grund des starken Temperaturgradienten zu Beginn des Pulses auf Werte unter 100 ns begrenzt.

4.3.5. Einfluss des Substrates auf den Wärmewiderstand

Einen wesentlichen Einfluss auf die Wärmeabfuhr aus dem aktiven Gebiet nimmt das Substrat auf Grund seiner hohen Dicke. Der Weg, den die Wärme durch das Substrat zu nehmen hat, ist ca. 100 mal länger als der durch die epitaktische Schicht. Der Anteil, den das Substrat an dem Wärmewiderstand des Lasers nimmt, ist jedoch durch die Aufweitung des Wärmeleitpfades geringer als das Dickenverhältnis vom Substrat zur Epitaxieschicht. Der Einfluss des Materials und der Dicke des Substrates soll in den folgenden Abschnitten dargestellt werden.

Abhängigkeit vom Substratmaterial

Den wesentlichen Einfluss auf den Wärmewiderstand der Laser hat das Substratmaterial. Bei den von uns hergestellten Laserstrukturen wurde Saphir als Substrat verwendet, das sich durch eine relativ geringe Wärmeleitfähigkeit von 27 W/Km auszeichnet. Wesentlich bessere Wärmewiderstände lassen sich auf Substraten aus GaN (130 W/Km) und Siliziumcarbid (330 W/Km) erwarten, weswegen diese beiden Substrattypen von besonderem technologischen Interesse sind. Neben diesen Substraten wird in diesem Abschnitt ebenfalls AlGaN als Substratmaterial untersucht. Ein solches Substrat mit einem geringen Aluminiumanteil von ca. 5 % könnte effektiv die parasitäre Wellenleitung unterdrücken, die mit der Verwendung von Galliumnitrid einhergeht. Der Nachteil von AlGaN ergibt sich durch die geringere Wärmeleitfähigkeit auf Grund der Massenunordnung (siehe Abschnitt 4.1.3). So weist AlGaN mit einem Aluminiumgehalt von 5 % eine Wärmeleitfähigkeit von nur 37 W/Km auf und ist somit fast vergleichbar mit Saphir.

In den Abbildungen 4.16 und 4.17 ist für diese vier Substrattypen die Temperaturverteilung nahe dem Injektionsstreifen des Lasers gegenübergestellt. Als Laserstrukturen wurden hier Index-geführte Laser mit einer Streifenbreite von 10 μm gewählt. Die große Streifenbreite wurde zur besseren Visualisierung gewählt, da die Abhängigkeit des Wärmewiderstandes nur gering zu kleineren Streifenbreiten variiert (siehe Abschnitt 4.3.7). Neben dem Rippenwellenleiter ist in diesen Strukturen das herunter geätzte Gebiet vollständig mit Isolator aufgefüllt, so dass das Kontaktpad auf einer ebenen Struktur liegt. In der Struktur auf AlGaN- und GaN-Substrat ist die Wellenleiter-Struktur direkt auf dem Substrat aufgebracht, währenddessen in den anderen beiden Strukturen zusätzlich eine GaN-Pufferschicht eingefügt wurde. Die Deckschichten in den Strukturen besitzen eine Dicke von 500 nm und einen Aluminium-Gehalt von 7 %. Die Dicke des GaN-Wellenleiters beträgt 200 nm, die AlGaN-Blockschicht ist 20 nm dick und hat einen Aluminium-Gehalt von 20 %. Die Dicke der Substrate wurde mit 300 μm angenommen.

In den Abbildungen ist der Injektionsstreifen in der oberen rechten Ecke zu erkennen. Auf Grund der Spiegelsymmetrie der Struktur ist nur die eine Hälfte des Injektionsgebietes zu sehen. In den Bildern ist die Wärmeleitfähigkeit durch unterschiedliche Graustufen vollflächig dargestellt (siehe Skala in Abbildung 4.17), während dessen die Temperatur in Falschfarben kodierten Isolinien eingetragen ist (Skala in Abbildung 4.16). Die Temperaturverteilung wurde für eine konstante thermische Belastung von 1 W je Millimeter Länge des Injektionsstreifens gerechnet. Auf Grund der Linearität der Diffusionsgleichungen in der Temperatur, skaliert die Erwärmung direkt mit der eingebrachten Leistung. Der Abstand der Isolinien zueinander beträgt 0,5 K.

Die aus den Simulationen resultierenden Wärmewiderstände bezogen auf die thermische Leistung je Längeneinheit des Resonators ergeben sich zu 40,4 K/(W/mm)

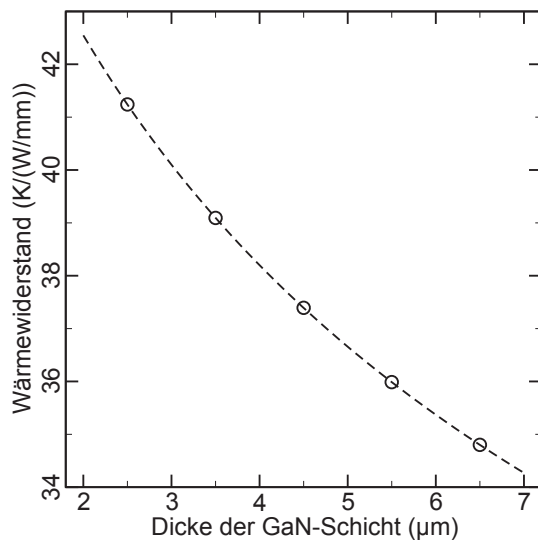


Abbildung 4.14.: Abhängigkeit des Wärmewiderstandes in Abhängigkeit der Dicke der GaN-Pufferschicht bei der Verwendung von Saphir als Substratmaterial.

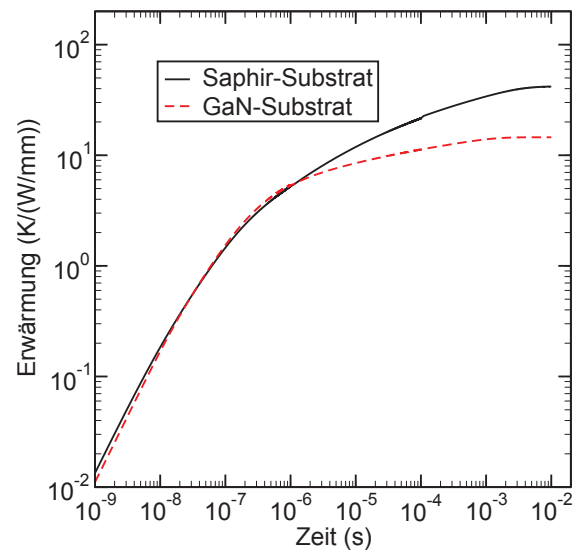


Abbildung 4.15.: Zeitentwicklung der Erwärmung im aktiven Gebiet bezogen auf die eingebrachte thermische Leistung pro Resonatorlänge.

in der Struktur auf Saphir, zu 12,9 K/(W/mm) in der GaN-Struktur, zu 37,6 K/(W/mm) auf AlGaIn und zu 7,2 K/(W/mm) auf Siliziumcarbid. Die Verwendung von Galliumnitrid oder Siliziumcarbid hat also entscheidende Vorteile in Bezug auf die Wärmeentwicklung in den Strukturen. Strukturen auf diesen Substraten erfahren eine um einen Faktor 3,3 (GaN) bis 5,6 (SiC) geringere Erwärmung. Auffallend ist der geringe Unterschied zwischen der Struktur auf Aluminiumgalliumnitrid und der Struktur auf Saphir, obwohl der Wärmeleitfähigkeit des AlGaIn um ca. 1/3 besser ist. Dieses ist auf die fehlenden Galliumnitrid-Puffer zurückzuführen, der auf Grund seiner guten Wärmeleitfähigkeit für eine bessere Verteilung der Wärme oberhalb des Substrates sorgt. Hierbei verhält sich die GaN-Schicht im Wesentlichen wie ein eindimensionaler Wärmeleiter, was an den fast senkrechten, äquidistanten Isolinien zu erkennen ist. Somit trägt die Puffer-Schicht auf einem Saphir-Substrat zu der Verringerung des Wärmewiderstandes bei. Eine dickere GaN-Pufferschicht kann daher deutlich den Wärmewiderstand der Strukturen reduzieren (siehe Abbildung 4.14). Der Nachteil einer dickeren GaN-Schicht ist jedoch die hierdurch verursachte stärkere Wellenführung in der Puffer-Schicht.

Neben diesen Rechnungen für den Gleichgewichtsfall wurden die Transienten der Erwärmung im aktiven Gebiet beim Einschalten des Lasers für die Strukturen auf Galliumnitrid und Saphir gerechnet (siehe Abbildung 4.15). Bis zu einer Zeit von 1 µs gleichen sich die beiden Kurven. Diese Zeit kann als Diffusionszeit durch die Epitaxieschicht angesehen werden, denn erst bei größeren Zeiten nimmt das Sub-

4. Wärmedissipation

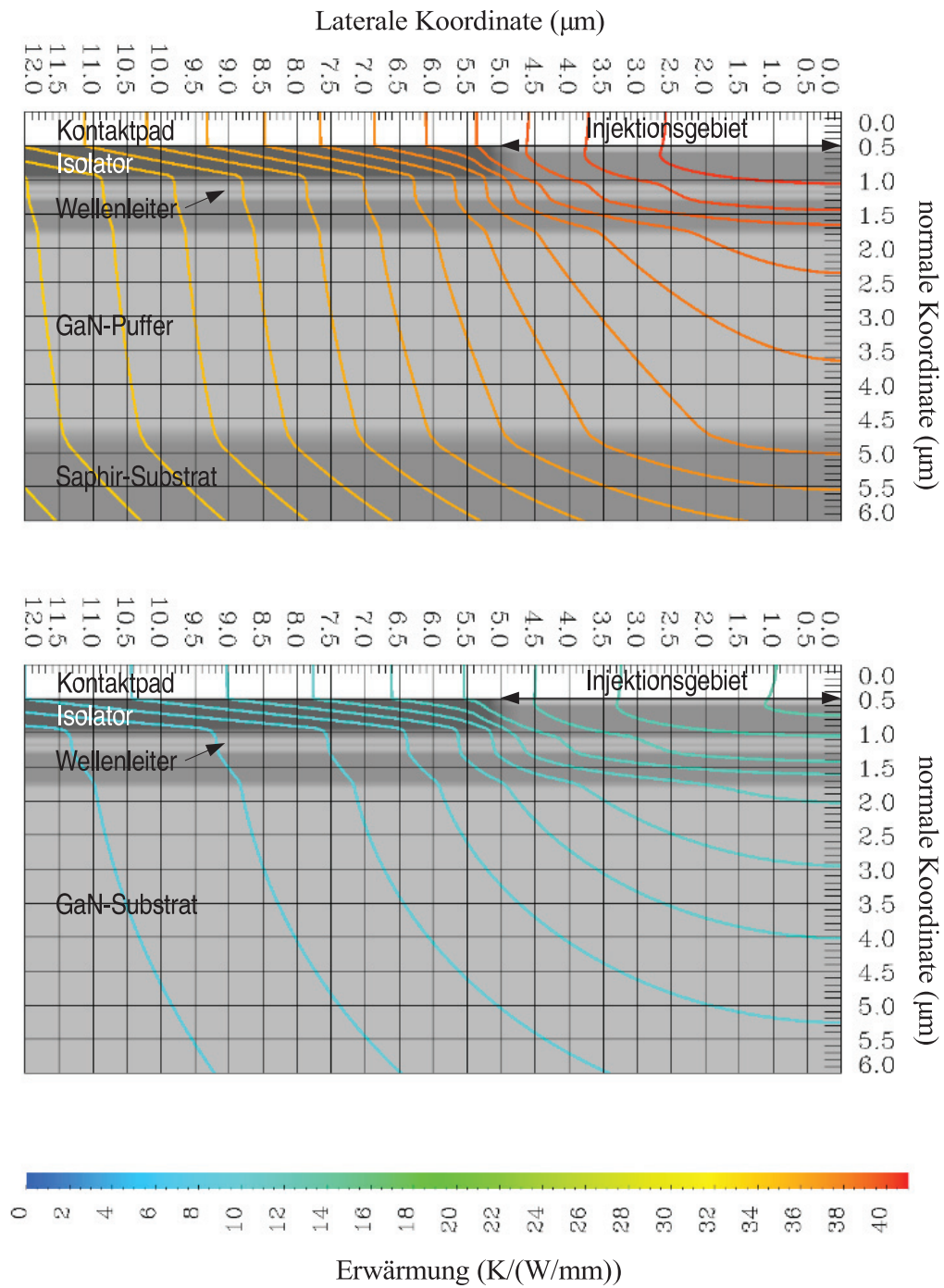


Abbildung 4.16.: Temperaturverteilung normiert auf eine thermische Belastung von 1 W/mm in Laserstrukturen auf Saphir-Substrat (oben) und GaN-Substrat(unten).

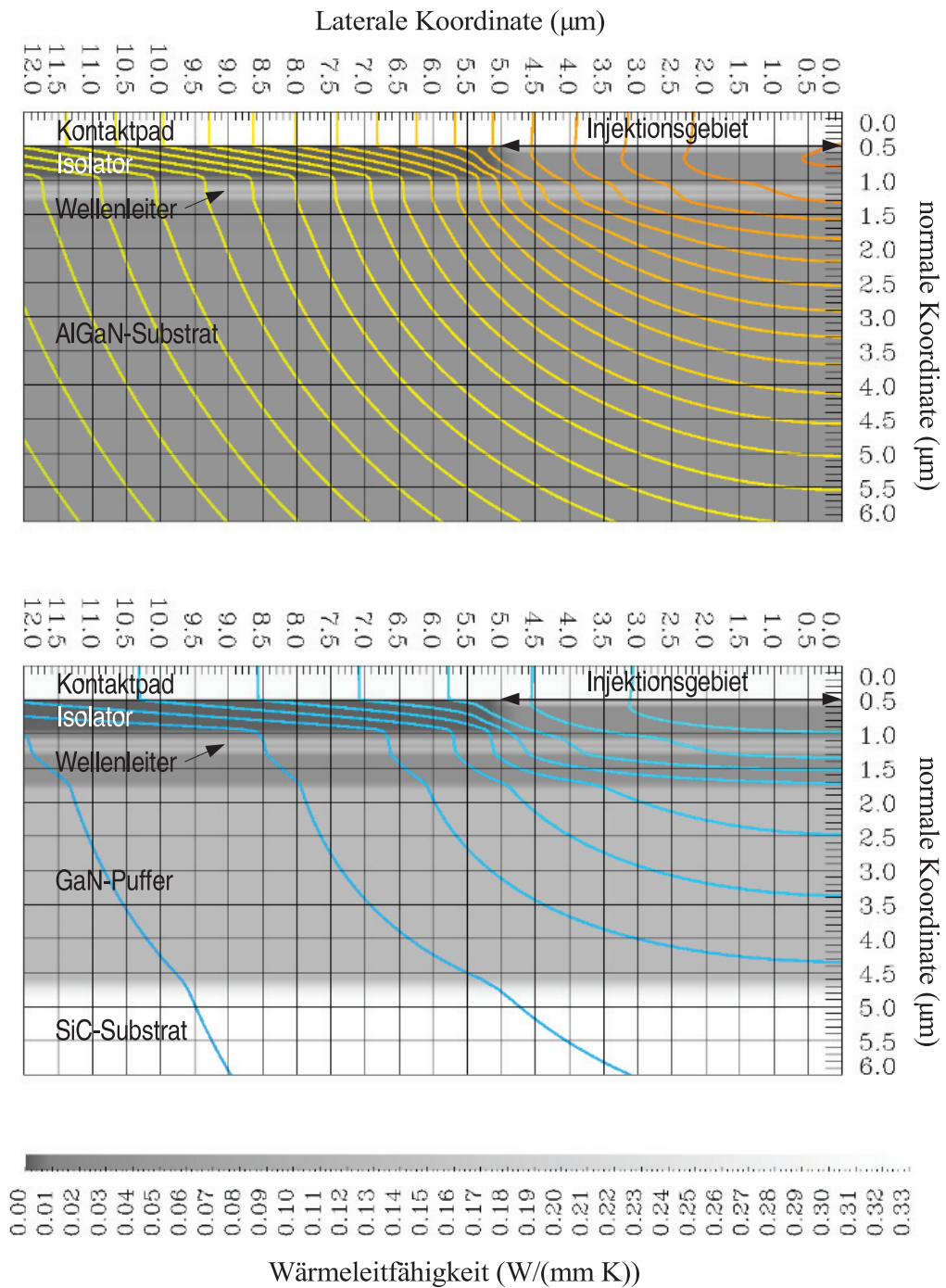


Abbildung 4.17.: Temperaturverteilung normiert auf eine thermische Belastung von 1 W/mm in Laserstrukturen auf AlGaIn-Substrat (oben) und SiC-Substrat(unten).

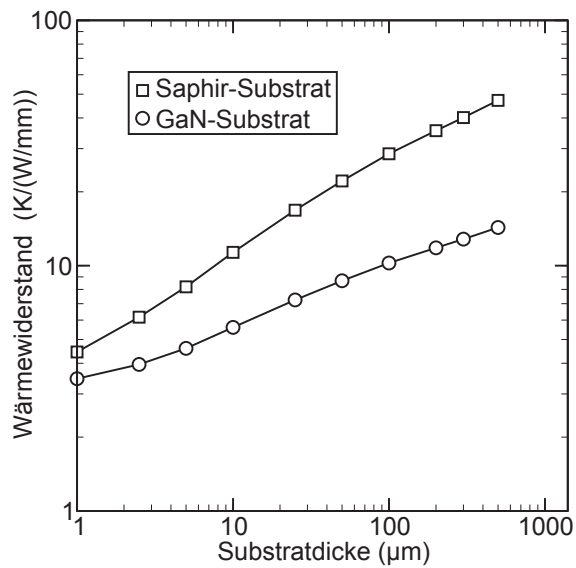


Abbildung 4.18.: Wärmewiderstand der Laserstruktur in Abhängigkeit der Substratdicke bei der Verwendung von Saphir und GaN als Substratmaterial.

strat Einfluss auf die Wärmeentwicklung im aktiven Gebiet. Nach einer Zeit von ca. 1 ms befinden sich die Strukturen im thermischen Gleichgewicht, wobei dieses auf Galliumnitrid-Substrat auf Grund der höheren Diffusivität des Galliumnitrids geringfügig schneller erreicht wird.

Substratdicke

Eine weitere Möglichkeit, den Wärmewiderstand der Struktur zu verringern, ist die Verwendung von dünneren Substraten bzw. das Abdünnen desselben nach dem Wachstumsvorgang. Um die Abhängigkeit des Wärmewiderstandes von der Substratdicke abzuschätzen, wurden die in dem vorherigen Abschnitt dargestellten Laserstrukturen auf Galliumnitrid- und Saphir-Substrat verwendet und in der Simulation die Dicke des Substrates variiert. In Abbildung 4.18 sind die so errechneten Wärmewiderstände aufgetragen. Relevant in dieser Auftragsung ist die Reduktion des Wärmewiderstandes von Substratdicken von 300 μm, wie sie typischerweise in der Epitaxie verwendet werden, auf eine Dicke von 100 μm, die normalerweise beim Abdünnen von Substraten erreicht werden kann. Auf Saphir-Substrat reduziert sich in diesem Bereich der Wärmewiderstand um 31 % auf 27,8 K/(W/mm) und fällt beim GaN-Substrat mit 29 % auf 9,2 K/(W/mm) nur unwesentlich geringer aus. Der Gewinn im Wärmewiderstand ist somit nicht linear mit der Substratdicke, die um 2/3 reduziert wurde, da tiefer im Substrat der Wärmepfad bereits aufgeweitet ist und somit der Wärme einen geringeren Widerstand entgegensetzt. Eine weitere Reduktion der Substratdicke auf 50 μm reduziert den Wärmewiderstand auf annähernd 55 % des ursprünglichen Wertes bei einer Substratdicke von 300 μm. Durch den schmaleren Wärmepfad in diesem Bereich lässt sich daher durch die weitere Abdünnung

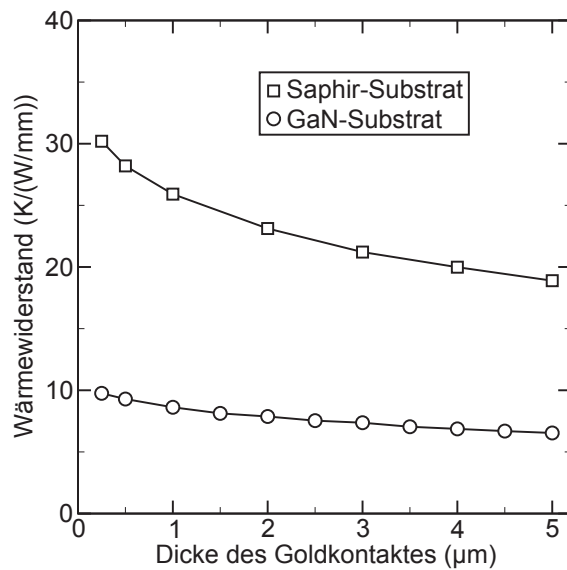


Abbildung 4.19.: Wärmewiderstand der Laserstruktur in Abhängigkeit der Kontaktdicke bei der Verwendung von Saphir (Quadrate) und GaN (Kreise) als Substratmaterial.

des Substrates ein deutlicher Gewinn erzielen.

4.3.6. Einfluss des Metallkontaktes

Auf Grund der hohen Wärmeleitfähigkeit von Metallen, kann der Kontakt wesentlich zu der Wärmeverteilung im Kontaktbereich beitragen und somit den Wärmewiderstand der Diode verringern. Der Einfluss des Kontaktes wird jedoch durch die schlechten thermischen Eigenschaften des unter dem Kontaktpad liegenden Isolators vermindert. In den von uns prozessierten Lasern wird der p-Kontakt durch einen Lift-Off Prozess präpariert. Daher ist die Dicke des Kontaktes auf Dicken kleiner 500 nm beschränkt, da sich sonst die Metallschicht oberhalb der Lithographiemaske nur schwer lösen lässt. Trotz der derzeit fehlenden technischen Möglichkeiten stellt sich die Frage, ob durch den Einsatz einer zusätzlichen Galvanisierung der Kontakte die thermische Last in der aktiven Region vermindert werden könnte.

In Abbildung 4.19 sind die für verschiedenen Kontaktdicken simulierte Daten aufgetragen. In dieser Simulation wurde eine Substratdicke von 100 μm angenommen. Es zeigt sich, dass bei dieser Substratdicke der Wärmewiderstand durch dickere Kontaktschichten erheblich reduziert werden kann. Der Gewinn, der sich hier erzielen lässt, beträgt bei einer Erhöhung der Kontaktdicke auf 5 μm ca. 30 % gegenüber einer Kontaktdicke von 0,5 μm . Obwohl bei einer Substratdicke von 300 μm der Wärmewiderstand der Struktur in viel stärkerem Maße beeinflusst wird, beträgt der Gewinn in dem Widerstand bei einer Erhöhung der Kontaktdicke auf 5 μm auch hier noch 25 %. Somit bringt die Aufbringung einer dicken Kontaktschicht einen ähnlichen Gewinn wie die Abdünnung des Substrates auf 100 μm .

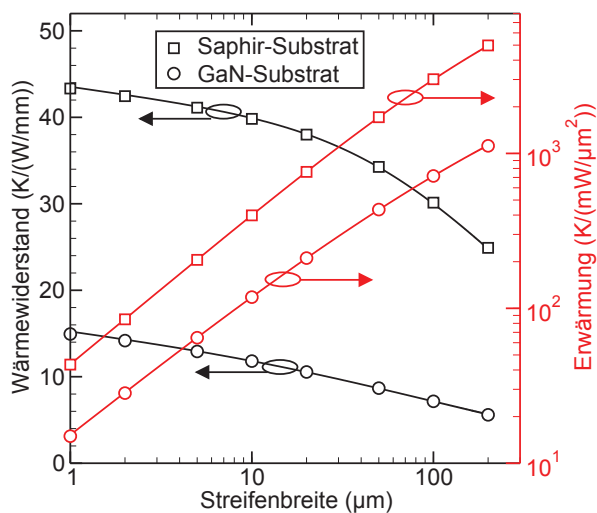


Abbildung 4.20.: Wärmewiderstand und Erwärmung unter einer konstanten Leistungsdichte in Abhängigkeit der Streifenbreite.

4.3.7. Streifenbreite

Einen wichtigen Einfluss auf den Wärmewiderstand der Laserstruktur nimmt die Streifenbreite, da sie die Ausdehnung des wärmeerzeugenden Gebietes vorgibt. Mit zunehmender Streifenbreite nimmt auch die Fläche zu, durch welche die Wärme dissipieren kann, daher sollte mit zunehmender Streifenbreite der Wärmewiderstand der Struktur sinken. Da bei gleichen Stromdichten die in die Struktur eingebrachte Leistung mit größeren Streifenbreiten steigt, sollten die Temperaturen in den Strukturen mit der Streifenbreite zunehmen.

Abbildung 4.20 gibt die berechneten Wärmewiderstände gegenüber der Streifenbreite wieder. In dieser Auftragung ist zu sehen, dass für Streifenbreiten unterhalb von $10 \mu\text{m}$ der Wärmewiderstand nahezu konstant ist. Geht man davon aus, dass die Verlustleistung eines Lasers proportional zu der Streifenbreite ist, d.h. dass die Stromdichten im Betrieb des Lasers vergleichbar sind, so muss die Erwärmung der Diode für gleiche Leistungsdichten betrachtet werden. Diese Erwärmung ist auf der rechten Achse der Abbildung 4.20 aufgetragen. Durch die schwache Variation des Wärmewiderstandes bei kleinen Streifenbreiten resultiert, dass die Erwärmung der Struktur proportional mit der Streifenbreite abnimmt. Dieses kann jedoch nur für Indexgeführte Strukturen gelten, da in Gewinngeführten Strukturen bei kleinen Streifenbreiten auf Grund der Aufweitung des Strompfades im p-Gebiet die im Kontakt vorliegende Stromdichte zum aktiven Gebiet hin abnimmt.

4.4. Zusammenfassung

Es zeigt sich, dass das thermische Design einen starken Einfluss auf die Leistungsfähigkeit der Laserdioden hat. So ist die Begrenzung der Betriebsparameter unserer

derzeitigen Laserdioden in Bezug auf Tastverhältnis und Pulslänge allein durch die Wärmeentwicklung zu erklären. Die größte Reduktion der Aufheizung der Dioden kann durch eine weitere Verkleinerung der Streifenbreite der Laser erreicht werden, hierzu sind jedoch Index-geführte Strukturen nötig, um die nötigen Stromdichten im aktiven Gebiet zu gewährleisten. Durch einen dickeren Goldkontakt auf dem Laserstreifen und durch das Abdünnen des Saphir-Substrates auf 100 μm lässt sich der Wärmewiderstand der Dioden um insgesamt bis zu 50 % reduzieren. Die so erreichbaren Wärmewiderstände sind trotzdem noch um einen Faktor 2 höher gegenüber dem Wärmewiderstand einer Standardstruktur auf GaN-Substrat und um den Faktor 3 höher gegenüber einer SiC-Struktur. Die geringere Wärmeleitfähigkeit der ternären Nitride lässt das Wachstum auf AlGaN-Substraten als unvorteilhaft erscheinen, der Wärmewiderstand ist aber immer noch geringer als der von Saphir. Das Wachstum auf AlGaN-Substraten wird daher seine Vorteile bei Laserdioden geringerer Leistung haben, die auf kleine Schwellldichten optimiert sind.

5. Strompfadaufweitung

Wichtig für den Betrieb von Gewinn-geführten Laserdioden ist ein definierter Strompfad, der auf einen kleinen Bereich konzentriert ist, um in der aktiven Region eine Inversion der Ladungsträgerdichte realisieren zu können. Daher werden industriell hergestellte Laser mit einem sogenannten Rippenwellenleiter, bei denen durch das Herunterätzen der Kontaktschicht und der p-Deckschicht neben dem Injektionsstreifen verhindert, dass der Strompfad sich aufweiten kann. Im Laufe dieser Arbeit wurden jedoch vornehmlich Gewinn-geführte Laser hergestellt, die sich durch eine einfachere Technologie auszeichnen.

In den Gewinn-geführten Strukturen fehlt die Führung des Strompfades, der nur durch die Weite der Streifenöffnung vorgegeben wird. Der um ca. 2 Größenordnungen höheren Widerstand von p-dotiertem GaN gegenüber der n-dotierten Schichten verhindert eine zu starke Aufweitung des Strompfades, da ein längerer Weg durch das p-Gebiet einen hohen Spannungsabfall verursachen würde und somit der Strom einen möglichst direkten Weg durch das p-Gebiet nimmt. In den von uns untersuchten Gewinn-geführten Strukturen zeigt sich jedoch, dass die Laserschwelle deutlich zu kleineren Streifenbreiten zunimmt (siehe Abschnitt 2.3). Wie die Rechnungen zu den Wärmewiderständen zeigen (siehe Abschnitt 4.3.7), kann die Wärmeentwicklung als Grund hierfür nicht in Betracht kommen. Zwar nimmt der Wärmewiderstand der Strukturen mit der Streifenbreite ab, die in der p-dotierten Region erzeugten Wärme nimmt jedoch viel stärker auf Grund des höheren Gesamtstromes mit der Streifenbreite zu. Die in der aktiven Region herrschenden Temperaturen steigen daher mit der Streifenbreite und die höhere Laserschwelle kann nicht auf die Erwärmung zurückgeführt werden.

Dieses deutet darauf hin, dass trotz der geringeren Leitfähigkeit des p-dotierten Materials die Strompfadaufweitung in diesen Strukturen einen Einfluss auf deren Leistungsfähigkeit nimmt. In diesem Kapitel soll ein Modell entwickelt werden, mit dessen Hilfe die Beschreibung der Strompfadaufweitung möglich ist. Hierzu wurden zwei Strukturen mit Volumen- und Übergitter-Deckschichten untersucht, die eine unterschiedliche Aufweitung des Strompfades hervorrufen sollten.

5.1. Grundlagen

Drei wesentliche Effekte tragen grundsätzlich zu der Aufweitung des Strompfades bei:

- Anisotrope Leitfähigkeit
- Grenzflächeneffekte
- Wärmeinduzierte Variation der Leitfähigkeit

5.1.1. Anisotrope Leitfähigkeit

Im Gegensatz zu einer Großzahl der Verbundhalbleiter sind die Gruppe-III-Nitride durch die fehlende Inversionssymmetrie entlang der c-Achse ausgezeichnet. Dieses resultiert in der unterschiedlichen Ausbildung des Valenzbandes in den verschiedenen Dimensionen des Impulsraumes [32, 114] und somit in unterschiedlichen effektiven Massen der Löcher. Hierdurch ergeben sich prinzipiell unterschiedliche elektrische Eigenschaften in der Wachstumsebene und senkrecht hierzu [211].

Im Fall von GaN liegen die Bänder mit hohen effektiven Massen in der transversalen Richtung an der Oberkante des Valenzbandes, getrennt zu einem Band mit geringer Lochmasse, das durch die Kristallfeldaufspaltung zu niedrigeren Energien verschoben ist. Demgegenüber liegen in lateraler Richtung im Maximum des Valenzbandes ein schweres und ein leichtes Loch. Diese Anordnung der Bänder sprechen für eine höhere Leitfähigkeit in transversaler Richtung, da diese proportional zu der Summe der inversen Massen am Valenzbandmaximum ist [212]. Aus dem Massenverhältnis zwischen Leicht- und Schwerloch lässt sich die der Leitfähigkeit unter der Voraussetzung abschätzen, dass das durch das Kristallfeld abgespaltene Loch nur gering zur Leitfähigkeit beiträgt:

$$\frac{\sigma_{\parallel}}{\sigma_{\perp}}(HH/LH) = \frac{m_{HH}^{\parallel -1} + m_{LH}^{\parallel -1}}{m_{HH}^{\perp -1} + m_{LH}^{\perp -1}} = \frac{2 \cdot 1,96^{-1}}{0,14^{-1} + 1,87^{-1}} = 0,13 \quad (5.1)$$

Unter dieser Annahme ist die Anisotropie der Leitfähigkeit sehr hoch. So ist die Leitfähigkeit in der c-Ebene über siebenmal höher als entlang der c-Achse. Die Abspaltung des CH-Bandes beträgt bei GaN jedoch nur 22 meV [213] und ist zu gering, um dieses Band effektiv von den anderen zu trennen. Bezieht man alle drei Bänder in die Berechnung der effektiven Masse ein, so ergeben sich keine signifikanten Unterschiede in lateraler und transversaler Richtung:

$$\frac{\sigma_{\parallel}}{\sigma_{\perp}}(HH/LH/CH) = \frac{m_{HH}^{\parallel -1} + m_{LH}^{\parallel -1} + m_{CH}^{\parallel -1}}{m_{HH}^{\perp -1} + m_{LH}^{\perp -1} + m_{CH}^{\perp -1}} = \frac{2 \cdot 1,96^{-1} + 0,14^{-1}}{0,14^{-1} + 1,87^{-1} + 1,96^{-1}} = 0,997 \quad (5.2)$$

In AlN ist die Anordnung der Bänder umgedreht, so dass das CH-Band zuoberst an der Bandkante liegt. Für diesen Fall ergibt sich das Verhältnis der Leitfähigkeiten genau andersherum.

Zusätzlich zu diesen Effekten, die in der Bandstruktur des Materials begründet liegen, können auch die Defekte im GaN zu einer Anisotropie der Leitfähigkeit beitragen. So ist für n-dotierte Schichten bekannt, dass die Korngrenzen und die darin enthaltenen Stufenversetzungen als Streuzentren für die Ladungsträger wirken [214]. Zudem können die Korngrenzen Oberflächenladungen tragen, die eine Aktivierung der Ladungsträger über das hierdurch erzeugte Potenzial nötig machen [215]. Diese Effekte verringern die Leitfähigkeit in lateraler Richtung und wirken somit der möglichen intrinsischen Anisotropie der Leitfähigkeit entgegen.

Auf Grund der nicht vorhandenen Volumenkristalle sind jedoch keine Daten über die Isotropie der Leitfähigkeit von GaN bekannt, da durch Hall-Messungen lediglich die Leitfähigkeit in lateraler Richtung bestimmt werden kann. Es ist daher schwer die Anisotropie der Leitfähigkeit zu beurteilen. Für das ternäre AlGaIn liegen die Bänder näher zusammen, da von GaN nach AlN hin ein Übergang der Valenzbandanordnung stattfindet. Die intrinsische Anisotropie wird hier somit geringer ausfallen. Einen zusätzlichen Einfluss kann aber auch die biaxiale Verspannung der Schichten auf die Leitfähigkeit nehmen, da hierdurch eine weitere Aufspaltung der Valenzbänder stattfindet. Für die Simulationen wird daher eine isotrope Leitfähigkeit für die Volumenschichten angenommen.

5.1.2. Grenzflächeneffekte / Supergitter

Einen wesentlichen Beitrag zu der Aufspreizung des Strompfades können die Grenzflächen in der Heterostruktur geben. Durch den Bandversatz von der AlGaIn-Deckschicht und der Blockschicht gegenüber dem GaN kommt es zu einer Anhäufung der Löcher an der oberen Grenzfläche zwischen p-Kontaktschicht und Deckschicht. An diesen Heteroübergängen müssen die Ladungsträger die Barriere zu der höheren Bandlücke des AlGaIn überwinden; ein Modell, das für diese Grenzflächen angewandt werden kann, ist die thermionische Emission von Ladungsträgern [212]. Diese Grenzflächen besitzen eine gleichrichtende Wirkung auf Grund ihrer Nichtlinearität und weisen eine starke Temperaturabhängigkeit auf.

Vielfach wird in den Lasern zusätzlich die Deckschicht in den Lasern als ein verspanntes AlGaIn/GaN-Übergitter ausgeführt, da der Aktivierungsgrad der Ladungsträger bei Raumtemperatur in diesen Übergittern stärker ist [216, 217, 218]. An den Grenzflächen zwischen den AlGaIn- und GaN-Schichten bildet sich bei diesen Übergittern auf Grund der piezoelektrischen Feldern ein zweidimensionales Löchergas aus [219]. Diese Löchergase haben die Eigenschaft, dass sie die laterale Mobilität der Ladungsträger im Supergitter deutlich erhöhen. An Proben aus unseren Laboren

wurde eine Erhöhung der Mobilität in lateraler Richtung um einen Faktor von ca. 2,5 gemessen (siehe Abschnitt 5.3.2). Dieser Wert deutet an, dass in diesen Übergittern eine starke Anisotropie der Leitfähigkeit existiert, der genaue Unterschied zwischen lateraler Leitfähigkeit und der Leitfähigkeit in c-Richtung kann aber auch hier auf Grund fehlender Messmöglichkeiten nicht quantifiziert werden.

5.1.3. Wärme-induzierte Variation der Leitfähigkeit

Die Erwärmung der Laserdioden im Betrieb kann einen starken Beitrag zu der Strompfadaufweitung in den Lasern bieten. Durch die Zunahme der Aktivierung der Ladungsträger in den p-dotierten Regionen und der Abnahme der Mobilität der Ladungsträger auf Grund von Elektron-Phonon-Streuung in den n-dotierten Schichten verschiebt sich das Verhältnis der Leitfähigkeiten. Dieses Verhältnis hat einen direkten Einfluss auf die Strompfadaufweitung. Durch die zunehmende Aktivierung der Ladungsträger in den p-dotierten Schichten und der Reduktion der Leitfähigkeit in den n-dotierten Schichten durch Phononen-Streuung bei hohen Temperaturen kann es sogar zu einer Inversion der Leitfähigkeit kommen, d.h. dass die Leitfähigkeit im p-Gebiet unterhalb der im n-Gebiet liegt. Da der n-Kontakt in den auf Saphir gewachsenen Laserstrukturen seitlich vom p-Kontakt liegt, können die p-Schichten als paralleler Stromleiter zum n-dotierten Gebiet wirken, wodurch der Strompfad durch das aktive Gebiet in Richtung des n-Kontakts verzerrt wird.

5.2. Modell

Das hier verwendete Modell besteht aus zwei prinzipiellen Teilen: dem elektrischen Modell, das die Strompfadaufweitung auf Grund der Laplace-Gleichung beschreibt und dem bereits beschriebenen thermischen Modell. Die Wechselwirkungen zwischen dem Wärme- und elektrischen Modell wurden in vereinfachter Form hinzugefügt, wie sie in der Art von Nakwaski und Osiński angewandt wurden [220, 221]. Im Speziellen sind die Wechselwirkungen in Form von temperaturabhängigen Ladungsträgerkonzentrationen und -beweglichkeiten und der Wärmeentwicklung auf Grund von Joulescher Wärme integriert.

Das elektrische Modell basiert auf der Laplace-Gleichung mit positionabhängiger elektrischer Leitfähigkeit:

$$\operatorname{div}[\sigma(\vec{x})\operatorname{grad}(V(\vec{x}))] = 0 \quad (5.3)$$

Hierbei ist $V(\vec{x})$ das ortsabhängige elektrische Potenzial und $\sigma(\vec{x})$ die Leitfähigkeit. Die Leitfähigkeit hängt sowohl von der Materialkomposition und deren Dotierung als auch von der temperaturabhängigen Ladungsträger-Konzentration und -Mobilität ab.

Hierbei wird für die p-dotierten GaN-Schichten eine exponentielle Zunahme der Ladungsträgerkonzentration mit der Temperatur angenommen, wie sie in Kapitel 3 an allen p-dotierten Schichten gesehen wurde. Demgegenüber wurde für die n-dotierten Schichten die Ladungsträgerkonzentration temperaturunabhängig gehalten, da die Ladungsträger bereits bei Raumtemperatur fast vollständig aktiviert sind. Der dominierende Streumechanismus ist in den Si-dotierten Schichten für Temperaturen oberhalb der Raumtemperatur die Streuung an Phononen [214]. Die Leitfähigkeit in den n-dotierten Schichten folgt daher einer $T^{-3/2}$ artigen Abhängigkeit mit der Temperatur T .

Die Leitfähigkeit σ_{pn} des aktiven Gebiets wird für dieses Modell über die ideale Diodengleichung bestimmt [212]:

$$\sigma_{pn} = \frac{\beta_{pn} j_{pn} d_A}{\ln \left[\frac{j_{pn}}{j_s} + 1 \right]} \quad (5.4)$$

j_{pn} stellt hierbei die Stromdichte im aktiven Gebiet dar, j_s ist die Sättigungsstromdichte in Sperrrichtung und d_A die Dicke des aktiven Gebiets. Der Diodenparameter β_{pn} wird ausgedrückt durch:

$$\beta_{pn} = \frac{e}{n_{pn} k_B T} \quad (5.5)$$

Wobei e die Elektronenladung und $n_{pn} \approx 2$ der Idealitätsfaktor ist. Die Heterogrenzflächen werden in diesem Modell über die thermionische Emission beschrieben [212]. Der Strom durch die Grenzfläche kann definiert werden als:

$$J_{hp} = \gamma_{hp} \bar{v}_{bp}^{therm} (p_b - p_{b0}) \quad (5.6)$$

Wobei p_b die Löcherkonzentration auf der Barrierenseite und p_{b0} die dazugehörigen Konzentration, wenn das Quasi-Ferminiveau auf den gegenüberliegenden Seiten gleich ist. γ_{hp} stellt einen Korrekturfaktor da, der zusätzliche Prozesse, wie z.B. Tunneln von Ladungsträgern, durch die Barriere enthält. Die thermische Rekombinationsgeschwindigkeit der Löcher \bar{v}_{bp}^{therm} ist eine Funktion der Temperatur T und der Masse der Ladungsträger auf der Barrierenseite m_{bp} :

$$\bar{v}_{bp}^{therm} = \sqrt{\frac{kT}{2m_{bp}\pi}} \quad (5.7)$$

Da in den hier angewandten Simulationen keine Ladungsträgerdichten betrachtet werden, wurde die typische I-V-Charakteristik eines solchen Heteroübergangs extern mit Hilfe des Programms [222] simuliert und als innere Grenzfläche in das Programm integriert. Die Temperaturabhängigkeit der Grenzfläche wurde gemäß der Gleichung 5.7 als $T^{1/2}$ -artig angenommen.

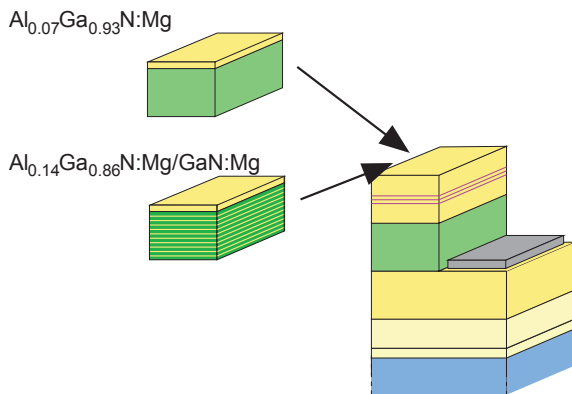


Abbildung 5.1.: Verwendete Laserstruktur zur Untersuchung der Strompfadaufweitung mit den verwendeten p-Deckschichten: a) AlGaIn:Mg Volumenschicht und b) kontinuierlich dotiertes AlGaIn:Mg/GaN:Mg Übergitter.

Um mit Hilfe dieser Annahmen die Potenzialverteilung zu errechnen, wurden dieselben mathematischen Algorithmen benutzt, wie sie in Kapitel 4.2.1 dargestellt wurden. Da das gesamte Modell selbstkonsistent gerechnet wird, ist eine zeitabhängige Simulation sehr aufwändig. Daher werden hier durchgehend die Ergebnisse durch Lösung des impliziten Gleichungssystems gewonnen. Die so erhaltenen Daten des thermischen und des elektrischen Modells werden gegenseitig ineinander eingesetzt und so schrittweise gegen eine konvergente Lösung iteriert.

Die Stromdichteverteilung kann aus dem Potenzial mit Hilfe des ohmschen Gesetzes gewonnen werden:

$$j(\vec{x}) = -\sigma(\vec{x})\text{grad}[V(\vec{x})] \quad (5.8)$$

Aus diesen Stromdichten kann direkt die lokale jousche Wärmeentwicklung $q(x)$ berechnet werden, die dann im thermischen Modell verwendet wird:

$$q(\vec{x}) = j^2(\vec{x})/\sigma(\vec{x}) \quad (5.9)$$

Die Simulation wurde auf einem 200 x 200 Punkte großen Gitter durchgeführt, das die selbe Geometrie wie in den Wärmesimulationen aufweist.

5.3. Experiment und Ergebnisse

5.3.1. Probenaufbau

Um den Effekt der anisotropen Leitfähigkeit von Übergittern zu untersuchen, wurden Laserdioden hergestellt, bei denen lediglich die obere Deckschicht variiert wurde. Hierzu wurde als Grundlage die n-Seite der Laserdiode einschließlich der aktiven Region und einem Teil des p-GaN Wellenleiters auf einem 2-Zoll Saphir-Substrat aufgewachsen. Die Deckschicht auf der n-Seite der Struktur wurde als Volumenschicht ausgeführt, um den Einfluß von Grenzflächen auf der n-Seite zu minimieren. Aus

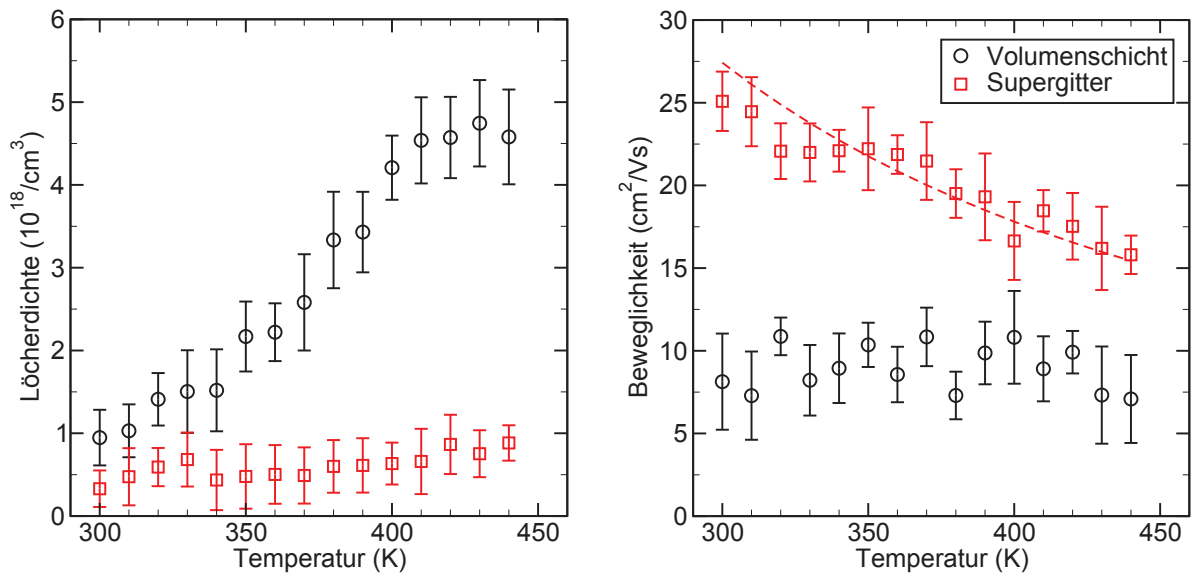


Abbildung 5.2.: Hall-Daten der AlGaIn Volumenschicht (Kreise) und des Supergitters (Quadrate).

dem gleichen Grund wurde deshalb auf die Elektronen-Blockschicht auf der p-Seite der aktiven Region verzichtet.

Die so hergestellte Struktur wurde in Stücke gespalten und auf die Teilstücke folgende Strukturen aufgewachsen (siehe auch Abb. 5.1):

1. Volumen AlGaIn-Deckschicht mit 7 % Aluminiumgehalt
2. verspanntes AlGaIn/GaN Übergitter, mit 14 % Aluminiumgehalt in den Barrieren und einer Periode von 5 nm

Der mittlere Aluminiumgehalt der Strukturen ist somit gleich für beide Strukturen, um einen vergleichbaren Brechungsindexsprung gegenüber dem dem Wellenleiter zu erzeugen.

5.3.2. Elektrische Daten der Deckschichten

Um die elektrischen Eigenschaften der Deckschichten zu bestimmen, wurden im Vorfeld Strukturen für Hall-Messungen hergestellt, bei denen 500 μm dicke Schichten, die vergleichbar mit den Deckschichten sind, auf einer GaN-Pufferschicht aufgewachsen wurden. Die an diesen Proben gewonnenen Hall-Daten sind in der Grafik 5.2 aufgetragen.

Das Übergitter zeigt eine wesentlich schwächere Aktivierung der Ladungsträger zu höheren Temperaturen und zeichnet sich zudem durch eine höhere Beweglichkeit der Ladungsträger aus, die durch die Ausbildung der Löchergasen an den Grenzflächen zu erklären ist. Das Verhältnis der Ladungsträgermobilität von ca. 2,5 zwischen

Supergitter und Volumenschicht kann als Maß für die Anisotropie der Leitfähigkeit in dem Supergitter gelten. Durch die höhere Grundbeweglichkeit der Ladungsträger ist bei dieser Probe der Einfluss der Elektron-Phonon-Streuung deutlicher sichtbar als in den Volumenschichten, bei denen die Streuung an Störstellen dominiert. Dieses ist in Übereinstimmung mit anderen Publikationen, die ein ähnliches Verhalten von p-dotierten Supergitter beobachtet haben [219]. Die Abhängigkeit der Beweglichkeit der Ladungsträger von der Temperatur folgt in dem durch Phononen-Elektronen-Streuung dominierten Regime einer $T^{-3/2}$ -Abhängigkeit (gestrichelte Linie in Abbildung 5.2)

Für die Simulationen wurden die so bestimmten Eigenschaften der Deckschichten wie folgt umgesetzt: Für die Volumen-Deckschicht wurde ein isotroper elektrischer Widerstand angenommen, der durch die Aktivierung der Ladungsträger mit der Temperatur abnimmt; die Mobilität der Löcher wird für diese Schicht als temperaturunabhängig betrachtet. Für das Supergitter wurde ein Volumen-Widerstand angenommen, der über einen Anisotropiefaktor von 2,5 modifiziert wurde, um den Einfluss der höheren Beweglichkeit in der c-Ebene zu implementieren. Für diese Schicht wurde neben der thermischen Aktivierung der Ladungsträger auch eine $T^{-3/2}$ -Abhängigkeit für die Mobilität der Löcher angenommen.

5.3.3. Stromdichte-Spannungscharakteristik

In Abbildung 5.3 sind sowohl die experimentell ermittelten als auch die simulierten Daten der Stromdichte in Abhängigkeit der angelegten Spannung aufgetragen (JV-Kennlinien). An diesen Kurven ist zu sehen, dass die Probe mit der Volumen-Deckschicht eine deutlich geringere Betriebsspannung gegenüber der Probe mit der Übergitter-Deckschicht aufweist. Bei der Probe mit Volumen-Deckschicht folgen die experimentell ermittelten Kennlinien unterschiedlicher Streifenbreiten alle dem selben Verlauf und weisen nur einen leichten Versatz in der Spannung auf. Allerdings konnte in den breiten Streifen nur eine geringe Stromdichte realisiert werden, da die zur Verfügung stehende Spannungsquelle maximale Ströme von 500 mA erlaubte. Die geringen Abweichungen in der Spannung in den einzelnen Strukturgrößen deuten auf einen kleinen Einfluss des Widerstandes im n-dotierten Gebiet hin, da in ihm auf Grund der lateralen Stromführung die Stromdichte mit der Streifenbreite zunimmt und dieser Widerstand daher durch eine Zunahme der Spannung mit der Streifenbreite sichtbar ist.

Demgegenüber zeigt die Probe mit der Übergitter-Deckschicht eine deutliche Abhängigkeit der Stromdichte von der Kontaktbreite bei gleichen anliegenden Spannungen. Der differentielle Widerstand dieser Proben ist jedoch auch deutlich höher und nimmt zusätzlich zu höheren Stromdichten zu. Die Spannung, die für gleiche Stromdichten in dieser Struktur benötigt wird, nimmt mit der Streifenbreite zu. Da

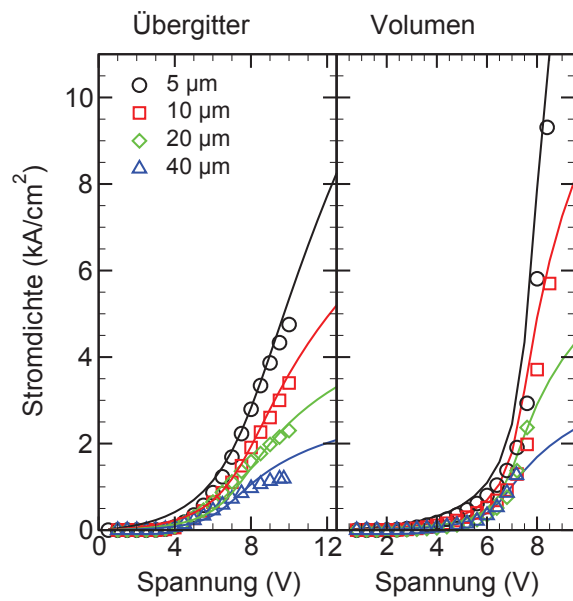


Abbildung 5.3.: J-V-Charakteristik der Laserdioden mit Übergitter-Deckschicht (links) und Volumen-Deckschicht (rechts). Die experimentellen Daten sind als Symbole aufgetragen, die durchgezogenen Linien geben die simulierten Werte wieder.

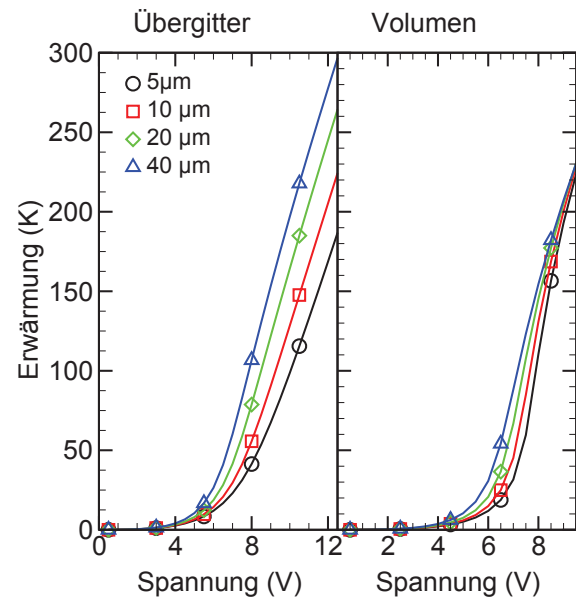


Abbildung 5.4.: Simulierte Erwärmung in Abhängigkeit der anliegenden Spannung der Strukturen mit Übergitter-Deckschicht (links) und Volumen-Deckschicht (rechts).

die n-Seite dieser Struktur aus demselben Wachstums-Prozess stammt, kann die n-dotierten Schichten nicht die Ursache für diese Spannungszunahme sein.

Wenn keine Aufweitung des Strompfades stattfindet, so ist die Stromdichte in dem p-Gebiet unabhängig von der Streifenbreite und entspricht der Stromdichte im Kontakt. Da der Widerstand der n-Schichten eine untergeordnete Rolle spielen, sollte hieraus für alle Streifenbreiten der gleiche Zusammenhang zwischen Stromdichte und Spannung folgen, wie es an der Struktur mit Volumen-Deckschicht zu sehen ist. Tritt nun in den p-dotierten Schichten eine signifikante Strompfadaufweitung auf, so verringert sich der serielle Widerstand der Schicht, da ein größerer Querschnitt von dem Strom durchflossen wird. Dieser Effekt wird stärker ausgeprägt sein sein für schmale Injektionsstreifen, da hier durch eine geringe Strompfadaufweitung die Stromdichte im p-Gebiet stärker sinkt. Dieses ist an der Probe mit Übergitter-Deckschicht zu sehen: Mit abnehmender Streifenbreite nimmt die Stromdichten im Kontakt zu, der Widerstand der Struktur sinkt. Da jedoch auch noch erhebliche Unterschiede zwischen den Strukturen mit 20 und 40 μm Streifenbreite zu sehen sind, müsste die Strompfadaufweitung im Bereich von mehreren 10 μm liegen um den unterschied in den Stromdichten zu erklären. Dieses Ergebnis deckt sich jedoch nicht mit Beobachtungen an diesen Laserdioden, wo keine solche starke Verbreiterung

des lumineszierenden Gebietes zu sehen ist. Die einfache Annahme, aus den JV-Kennlinien die Aufweitung des Strompfades abschätzen zu können, erweist sich als untauglich. Daher sollen im Folgenden die Daten anhand der Simulation nachvollzogen werden.

Die simulierten Daten in Abbildung 5.3 zeigen eine hinlänglich gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Für die Übergitter-Deckschicht musste jedoch ein höherer spezifischer Widerstand von $4 \Omega\text{cm}$ angenommen werden, um die experimentellen Daten wiedergeben zu können. Da diese Proben vor der Optimierung auf Grund der pyramidalen Defekte hergestellt wurden und der Magnesium-Fluss für die Deckschichten nahe der Defektbildungsgrenze war, ist davon auszugehen, dass das Übergitter zum Teil durch pyramidale Defekte kompensiert ist.

Die Simulationen zeigen, dass die JV-Kennlinien nur durch das ausgeprägte Wechselspiel zwischen Strompfadaufweitung und Erwärmung, die in Abbildung 5.4 aufgetragen ist, erklärbar sind. In den Kennlinien konnte der Einfluss der unterschiedlichen Schichten separiert werden, indem die Parameter der einzelnen Schichten in der Simulation variiert wurden. Eine Analyse dieser Variationen ergibt:

- Der geringe serielle Widerstand der Probe mit Volumen-Deckschicht ist nur durch thermische Aktivierung der Ladungsträger zu erklären. Der sinkende Widerstand der p-Schicht mit der Temperatur führt zu einer Stabilisation des Systems.
- Das Abflachen der simulierten JV-Kennlinie der Probe mit Volumen-Deckschicht im Bereich oberhalb der experimentellen Daten ist auf eine Erhöhung des Widerstandes im n-Gebiet auf Grund von Phonon-Streuung zu erklären.
- In den Übergitter-Strukturen ist das im Vergleich stärkere Abflachen nicht alleine auf eine Erhöhung des Widerstandes im n-Gebiet zurückzuführen, sondern resultiert auch aus der Erhöhung des Widerstandes des Übergitters.
- Der steigende Widerstand der Übergitter-Deckschicht mit der Temperatur auf Grund von Phononen-Streuung führt zu einer Rückkopplung mit der Temperatur, die das System instabil macht und zu den deutlichen Unterschieden in den JV-Kennlinien der unterschiedlichen Streifenbreiten führt. Insbesondere bei größeren Streifenbreiten nimmt daher die Temperatur mit der Streifenbreite deutlich zu.

Stromdichte im Trog

Die JV-Kennlinien sind im Wesentlichen durch die unterschiedliche Aufwärmung der Strukturen bei verschiedenen Streifenbreiten zu erklären und daher kann aus ihnen

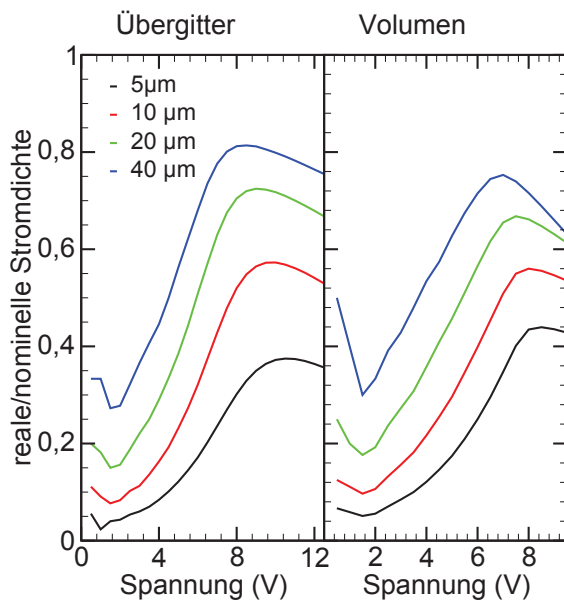


Abbildung 5.5.: Maximale Stromdichte im Trog bezogen auf die Stromdichte im Kontakt in Abhängigkeit der anliegenden Spannung der Strukturen mit Übergitter-Deckschicht (links) und Volumen-Deckschicht (rechts).

nicht direkt auf die Strompfadaufweitung geschlossen werden. Als ein Maß für die Strompfadaufweitung kann das Verhältnis von der maximalen Stromdichte im Trog zu der nominellen Stromdichte, die auf die Kontaktbreite bezogen ist, genommen werden. Hierzu ist in Abbildung 5.5 dieses aus der Simulation gewonnene Verhältnis der realen Stromdichte im aktiven Gebiet zu der nominellen Stromdichte als Funktion der anliegenden Spannung aufgetragen. Je kleiner dieser Wert ist, desto höher ist der Einfluss der Strompfadaufweitung. Es ist zu sehen, dass mit abnehmender Streifenbreite dieses Verhältnis zu kleineren Werten verschiebt, wie es aus der Aufweitung des Strompfades zu erwarten ist.

Prinzipiell sind in dem Verlauf drei Bereiche beobachtbar:

1. Für kleine Ströme hat der pn-Übergang einen hohen Widerstand und wird deswegen auf einer breiten Fläche von dem Strom durchflossen.
2. Schaltet der pn-Übergang durch, so sinkt der Widerstand in den Bereichen höherer Stromdichte. Hierdurch kommt es zu einer "Selbstfokussierung" des Strompfades, die Strompfadaufweitung nimmt ab.
3. Für hohe Ströme ist der Widerstand des pn-Überganges schwächer von der Stromdichte abhängig und die Erwärmung der Struktur führt zu einer Verschiebung des Leitfähigkeitsverhältnisses zu Gunsten des p-Gebiets gegenüber dem n-Gebiet, die Strompfadaufweitung nimmt zu.

Das Verhältnis zwischen der Stromdichte im Trog und der nominellen Stromdichte ergibt sich in den Simulationen oberhalb des Durchschaltens des pn-Gebietes in Abhängigkeit der Streifenbreite zu Werten von 35–75 %. Dies bedeutet, dass ein

5. Strompfadaufweitung

Großteil des Stromes nicht direkt unterhalb des Kontaktes, sondern seitlich davon durch das aktive Gebiet tritt. Die Werte der Struktur mit Übergitter- und Volumendeckschicht weichen jedoch kaum voneinander ab. Dieses ist vor allen Dingen auf den höheren Widerstand der Übergitter-Deckschicht zurückzuführen, da hierdurch trotz der angenommenen Anisotropie der Leitfähigkeit der Strom relativ direkt durch das p-Gebiet fließt. Bei großen Streifenbreiten zeigt sich hier sogar, dass die Übergitter-Struktur in der Simulation eine kleinere Aufweitung des Strompfades gegenüber der Volumen-Deckschicht vorhersagt. Insbesondere bei hohen Spannungen ist in der Übergitter-Struktur der Abfall des Stromdichteverhältnisses geringer, da die Aktivierung der Löcher im p-Gebiet weniger stark ist und hierdurch der Widerstand der Übergitterschicht bei höheren Betriebstemperaturen nicht zu gering wird.

Für die Struktur mit der Volumen-Deckschicht und einer Streifenbreite von 5 μm ist beispielhaft die Verteilung der simulierten Stromdichte, die parallel zur c-Achse fließt, in Abbildung 5.6 dargestellt für eine nominelle Stromdichte von 10 kA/cm^2 . Bei dieser Stromdichte ergibt sich die maximale Stromdichte im Trog zu ca. 4,5 kA/cm^2 . Zu erkennen ist, dass die Stromdichte bereits unterhalb des Randes des Streifens auf unter 3,5 kA/cm^2 abfällt.

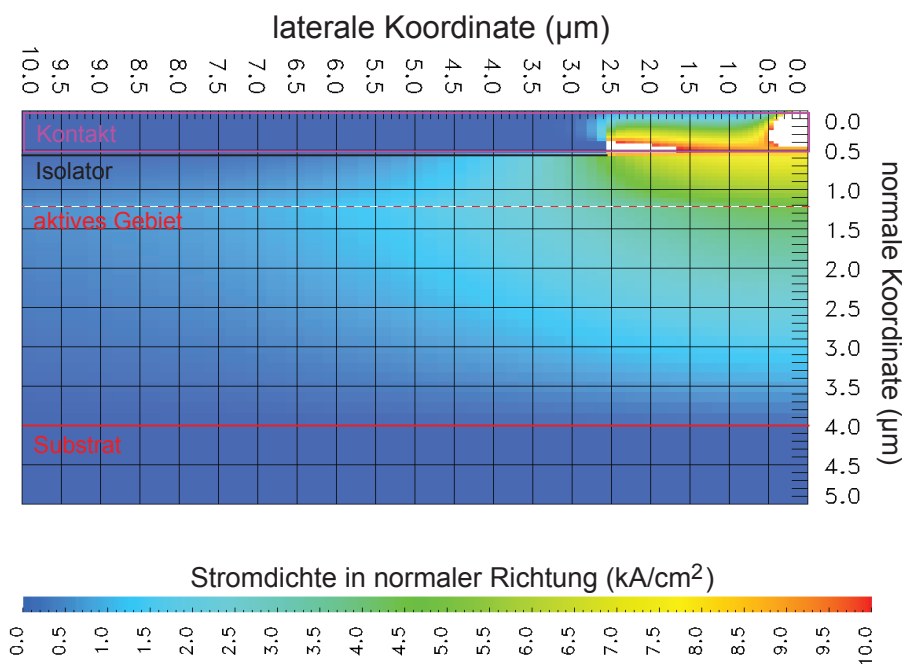


Abbildung 5.6.: Stromdichte in normaler Richtung bei einer nominellen Stromdichte von 10 kA/cm^2 im Kontakt für die Laserdiode mit Volumen-Deckschicht und einem 5 μm breiten Injektionsstreifen.

Einfluss der anisotropen Leitfähigkeit

Trotz der angenommenen Anisotropie der Leitfähigkeit des Übergitters zeigt sich in diesen Simulationen, dass beide Strukturen ähnliche Verhältnisse zwischen nomineller Stromdichte und der Stromdichte im Trog aufweisen und sogar die Übergitter-Struktur leicht bessere Werte in der Simulation zeigt. Dieses ist durch den höheren Widerstand des Übergitters zu erklären, der eine Aufweitung des Strompfades verhindert.

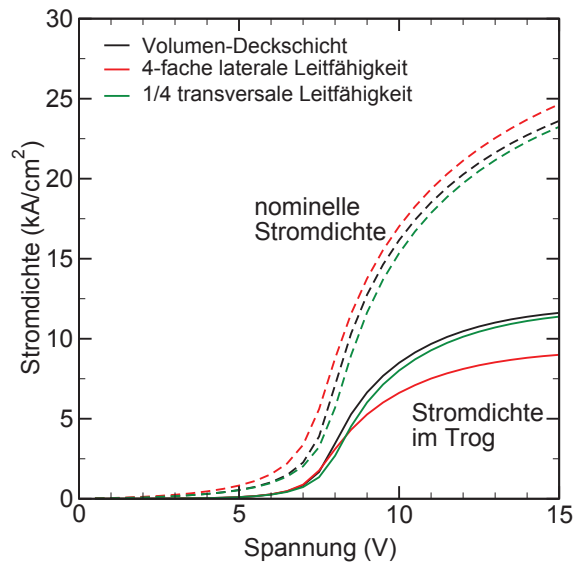


Abbildung 5.7.: Stromdichte in der Kontaktregion und in dem aktiven Gebiet für Strukturen mit unterschiedlicher Anisotropie der Leitfähigkeit in der Deckschicht.

Um zu ergründen, ob eine Anisotropie der Leitfähigkeit in den Supergittern zu einer signifikanten Verschlechterung des Strompfades führt, wurden Strukturen simuliert, bei der für die Deckschicht die Parameter der Volumenschicht angenommen wurden und ein Anisotropiefaktor von 4 für die Leitfähigkeit hinzugefügt wurde. Hierzu wurde in einer Simulation die laterale Leitfähigkeit konstant gehalten und die transversale Leitfähigkeit reduziert. Für die zweite Simulation wurde demgegenüber die laterale Leitfähigkeit erhöht und die transversale Leitfähigkeit unverändert gelassen. Diese Simulationen werden in Abbildung 5.7 mit der Simulation der Volumen-Deckschicht verglichen. Es ist zu sehen, dass die beiden Strukturen mit derselben lateralen Leitfähigkeit fast dem gleichen Verlauf folgen und die geringere transversale Leitfähigkeit nur zu einer geringen Erhöhung der Spannung führt. Die Simulation der Struktur mit der höheren lateralen Leitfähigkeit zeigt, dass durch die höhere laterale Leitfähigkeit die Stromdichte im Trog deutlich geringer ausfällt. Der entscheidende Parameter für die Strompfad-Aufweitung ist daher die laterale Leitfähigkeit und nicht die Anisotropie der p-Deckschicht, solange der spezifische Widerstand dieser Schicht gering ist. Der Einfluss der Übergitter auf die Strompfadaufweitung ist somit als gering einzustufen.

5.4. Zusammenfassung

Es wurde basierend auf der Laplace-Gleichung ein Modell entwickelt, das den Strompfad durch die Laserdiode beschreiben kann. Mit Hilfe dieses Modelles konnten die Strom-Spannungs-Kennlinie der untersuchten Laser-Strukturen mit Volumen- und Übergitter-Deckschicht reproduziert werden. Es zeigte sich, dass die Anisotropie der Leitfähigkeit in Übergitter-Deckschichten eine untergeordnete Rolle für die Aufweitung des Strompfades spielt, solange die laterale Leitfähigkeit vergleichbar mit denen von Volumenschichten ist. Die Erwärmung der Struktur spielt für die Aufweitung des Strompfades eine entscheidende Rolle: Die Reduktion des spezifischen Widerstandes der p-dotierten Schichten auf Grund der stärkeren Aktivierung der Ladungsträger und dem Anstieg des Widerstandes auf Grund von Phononen-Streuung in den n-dotierten Schichten führt zu einer Verbreiterung des Strompfades und zu deutlich geringeren Stromdichten in dem aktiven Gebiet. Die Übergitter könnten hierdurch sogar von Vorteil sein, da die Aktivierung der Löcher geringer von der Temperatur abhängig ist und daher die Strompfadaufweitung stabiler gegenüber Temperaturänderungen ist.

6. Zusammenfassung der Arbeit

Das Hauptziel dieser Arbeit war die Realisierung von GaN-basierten Laserdioden, die mit Hilfe von metallorganischer Dampfphasenepitaxie hergestellt werden. Erst im Verlauf dieser Dissertation im Jahre 1999 wurde die hierzu notwendige Anlage in den Reinräumen unseres Institutes installiert. Im Zuge dieser Arbeit gelang es dann Laserdioden herzustellen, die im gepulsten Betrieb eine Ausgangsleistung von bis zu 263 mW zeigen. Diese als Gewinn-geführte Strukturen prozessierten Laser weisen jedoch eine starke Aufweitung des Strompfades unterhalb des Kontaktstreifens im aktiven Gebiet auf. Hierdurch ist die Schwellstromdichte in diesen Lasern von der Streifenbreite abhängig. Eine Extrapolation der Schwellstromdichte zu hohen Streifenbreiten zeigt, dass ohne die Aufweitung des Strompfades die Schwellstromdichte bei $4,7 \text{ kA/cm}^2$ liegt. In den realen Strukturen liegen die Schwellstromdichten jedoch wesentlich höher und führen zu einer starken Erwärmung, welche die möglichen Pulsparameter begrenzt.

Einen wichtigen Beitrag zur Realisierung der Laserdiode trug die Optimierung der p-Dotierung bei. Da am Anfang der Promotion die MOVPE-Anlage noch nicht zur Verfügung stand, wurde die Dotierung mit Magnesium zunächst in der MBE untersucht. In der MBE sind die Wachstumstemperaturen relativ gering und daher ist das Wachstum stark durch kinetische Prozesse bestimmt. In einer Dotierungsserie mit variierendem Magnesium-Fluss zeigte sich, dass die Akzeptorkonzentration in den Schichten mit dem angebotenen Fluss skaliert und erst bei sehr hohen Magnesiumflüssen eine Kompensation der dotierten Schichten eintritt. Die Abhängigkeit der Dotierung von der Wachstumstemperatur zeigt, dass der Einbau von Magnesium durch den Haftkoeffizienten des Magnesiums auf der Wachstumsoberfläche begrenzt ist. Aus diesen Untersuchungen konnte eine Desorptionsenergie von 2,6 eV für Magnesium von der GaN-Oberfläche bestimmt werden. Dieser Wert ist in guter Übereinstimmung mit theoretischen Berechnungen zur Bildungsenergie von Magnesium-Störstellen auf der Stickstoff-polaren Oberfläche. Innerhalb dieser Serie entstanden Proben, die Löcherkonzentrationen von bis zu $3,4 \cdot 10^{18} \text{ 1/cm}^3$ bei Raumtemperatur aufweisen. Dieser Wert ist vergleichbar mit den bisher besten in der Literatur berichteten Werten.

Unter Wasserstoff-Stickstoff Mischplasma hergestellte Proben zeigen, dass der Einbau von Magnesium in die Schichten durch die Anwesenheit von Wasserstoff um

über eine Größenordnung erhöht werden kann. Es stellte sich jedoch heraus, dass die unter Mischplasma gewachsenen Schichten stark kompensiert sind und die p-Dotierung nicht durch ein thermisches Annealen aktiviert werden kann. Die hohe Kompensation lässt sich auf die Bildung von planaren Defekten zurückführen, die durch eine erhöhte Bedeckung der Oberfläche mit Magnesium hervorgerufen werden. Zudem zeigen nominell undotierte Proben, die unter Mischplasma hergestellt wurden, eine hohe Elektronendichte bei Raumtemperatur. Diese hohe Ladungsträgerdichte muss auf den zusätzlichen Einbau von Punktdefekten in Anwesenheit des Wasserstoffs zurückgeführt werden. Diese Punktdefekte können zu einer zusätzlichen Kompensation der p-dotierten Schichten führen. TEM-Aufnahmen der unter Mischplasma hergestellten Proben zeigen, dass die Diffusion von Magnesium auf der Oberfläche durch Schraubenversetzungen beeinflusst wird. Die Fassettierung der planaren Defekte, die um die Schraubenversetzungen herumlaufen, deutet stark darauf hin, dass es sich bei den planaren Defekten um Inversionsdomänen handelt, an deren Grenzflächen Magnesium eingebaut wird. Es ist davon auszugehen, dass ein Großteil des zusätzlich eingebauten Magnesiums in den unter Mischplasma hergestellten Proben an den Domänengrenzen dieser Defekte eingebaut wird.

Ebenso wurde im weiteren Verlauf der Arbeit die Magnesium-Dotierung in der MOVPE untersucht. Es konnte gezeigt werden, dass die Dotierung durch ein hohes Gruppe-V- zu Gruppe-III-Precursor Verhältnis verbessert werden kann. Aus den Untersuchungen geht hervor, dass bei hohen Magnesiumflüssen die Dotierung durch die Bildung von pyramidalen Defekten limitiert wird. Diese pyramidalen Defekte bilden sich mit einer Verzögerung relativ zum Beginn der p-Dotierung. Auf Grund der Abhängigkeit der Dicke der Bereiche, die ohne Defektbildung gewachsen werden können, von dem Precursor-Verhältnis konnte die Entstehung der pyramidalen Defekte mit der Segregation von Magnesium verknüpft werden. Es wurde ein Ratenmodell entwickelt, mit dessen Hilfe ein Bildungskriterium für die pyramidalen Defekte aufgestellt wurde. Aus dem periodischen Auftreten der pyramidalen Defekte und Berechnungen über den Magnesiumgehalt der Defekte folgt, dass die Reduktion der Leitfähigkeit beim Auftreten der pyramidalen Defekte zu einem Großteil durch den Einfang von Magnesium in diesen Defekten zu erklären ist. Aus dem Segregationsmodell ergibt sich, dass nur ca. 1 % des auf der Oberfläche befindlichen Magnesiums pro gewachsener Bilage in den Kristall eingebaut wird. Dieser Wert ist in guter Übereinstimmung mit Publikationen über die Segregation von Magnesium in überwachsenen, Magnesium-dotierten Schichten. Auf Grund der Auswertung des Segregationsmodelles konnte die p-Dotierung entscheidend verbessert werden.

Laserstrukturen in denen die p-dotierten Schichten mit einem optimierten Magnesiumfluss gewachsen wurden, zeigen keine pyramidalen Defekte und weisen auf Grund dessen deutlich reduzierte serielle Widerstände von 3Ω auf, im Gegensatz zu Strukturen mit pyramidalen Defekten, die typische serielle Widerstände im Bereich

von 30Ω zeigen. Auf Grund dessen konnte die thermische Belastung der Dioden im Betrieb deutlich reduziert werden. Diese Optimierung führte zu der ersten funktionierenden Laserdiode, die elektrisch gepulst betrieben werden konnte. Trotz dessen spielt die Wärmeentwicklung in diesen Dioden eine entscheidende Rolle.

Um den Einfluss der Wärme nachvollziehen zu können, wurde ein Programm geschrieben, mit dessen Hilfe sowohl die zeitliche Temperaturentwicklung als auch die Temperaturverteilung in den Strukturen simuliert werden kann. Anhand von zeitabhängigen Elektrolumineszenzdaten konnte gezeigt werden, dass die Abnahme der Elektrolumineszenzintensität in den Pulsen durch einen Anstieg der Temperatur während des Pulses zu erklären ist. Aus temperaturabhängigen Elektrolumineszenzmessungen konnte die Aktivierungsenergie, mit der die Reduktion der Elektrolumineszenzintensität verknüpft ist, bestimmt werden. Die mit Hilfe dieser Aktivierungsenergie bestimmten Temperaturen innerhalb des Pulses sind in hoher Übereinstimmung mit dem Temperaturanstieg, der in den zeitabhängigen Simulationen bestimmt wurde. Ebenso konnte die Abhängigkeit der Ausgangsleistung der Dioden im LED-Betrieb vom Tastverhältnis mit Hilfe dieser Simulationen nachvollzogen werden. Darüber hinaus wurde der Einfluss von Parametern wie Substratdicke und die Dicke der Metallisierung des p-Kontaktes auf den Wärmewiderstand der Strukturen untersucht. Hieraus geht hervor, dass der Wärmewiderstand durch die Abdünnung des Saphir-Substrate auf Dicken von $100 \mu\text{m}$ und eine Erhöhung der Dicke der Metallisierung auf die Hälfte reduziert werden kann. Trotz dessen ist der Wärmewiderstand solcher optimierter Strukturen noch deutlich höher gegenüber nicht optimierten Strukturen, die auf GaN-Substraten hergestellt werden.

Das Programm zur Wärmedissipation wurde erweitert um eine auf der Laplace-Gleichung basierende elektrische Simulation der Bauelemente. Mit Hilfe dieser Simulation wurden Laserstrukturen mit Volumen- und Übergitter-Deckschichten betrachtet, die mittels MOVPE gewachsen und elektrisch charakterisiert wurden. In den Simulationen konnten die Strom-Spannungs Kennlinien der Strukturen reproduziert werden. Aus den Simulationen geht hervor, dass die Stromdichten in dem aktiven Gebiet durch die Aufweitung des Strompfades stark reduziert sind. Insbesondere bei kleinen Streifenbreiten der Strukturen beträgt die Stromdichte in dem aktiven Gebiet nur 40 % der nominellen Stromdichte. Auf Grund dieser Strompfadaufweitung kann der Anstieg der Schwellstromdichte bei kleineren Streifenbreiten in den Gewinn-geführten Strukturen erklärt werden. Es konnte gezeigt werden, dass eine Anisotropie der Leitfähigkeit der Deckschichten nur einen geringen Einfluss auf die Strompfadaufweitung ausübt und diese im Wesentlichen durch die laterale Leitfähigkeit bestimmt wird.

Literaturverzeichnis

- [1] **CHRISTIAN WURSTER:** *Computer History - Eine illustrierte Geschichte*. Taschen Deutschland (2002).
- [2] **EUROPEAN COMPUTER MANUFACTURERS ASSOCIATION:** *Standard - ECMA 130 2nd Edition - June 1996* (1996).
<http://www.ecma-international.org/publications/files/ecma-st/Ecma-130.pdf>.
- [3] **EUROPEAN COMPUTER MANUFACTURERS ASSOCIATION:** *Standard - ECMA 267 3rd Edition - April 2001* (2001). <http://www.ecma-international.org/publications/files/ecma-st/Ecma-267.pdf>.
- [4] **PHILIPS:** *Blu-ray Disc Key Characteristics* (2002).
<http://www.licensing.philips.com/information/bd/documents531.html>.
- [5] **D. K. KAHANER:** *ATIP96.042 : Blue Laser and LEDs, Chiba Japan 3/96*. ASIAN TECHNOLOGY INFORMATION PROGRAM (ATIP)
<http://www.cs.arizona.edu/japan/www/atip/public/atip.reports.96/atip96.042r.html> (1996).
- [6] **S. NAKAMURA, M. SENOH, S. NAGAHAMA, N. IWASA, T. YAMADA, T. MATSUSHITA, Y. SUGIMOTO und H. KIYOKU:** *Continuous-wave operation of InGaN multi-quantum-well-structure laser diodes at 233 K*. In: Applied Physics Letters **69**, 3034 (1996).
- [7] **K. DOVERSPIKE, G. E. BULMAN, S. T. SHEPPARD, H. S. KONG, M. LEONARD, H. DIERINGER, T. W. WEEKS, J. EDMOND, J. D. BROWN, J. T. SWINDLE, J.-F. SCHETZINA, Y.-K. SONG, M. KUBALL und A. NURMIKKO:** *Status of nitride based light emitting and laser diodes on SiC*. In: Nitride Semiconductors Symposium. Materials Research Society **482**, 69 (1997).
- [8] **T. KOBAYASHI, F. NAKAMURA, K. NAGAHAMA, T. TOJYO, H. NAKAJIMA, T. ASATSUMA, H. KAWAI und M. IKEDA:** *Room-Temperature Continuous-Wave Operation of InGaN/GaN Multiquantum Well Laser Diode*. In: Electronic Letters **34**, 1494 (1998).
- [9] **A. KURAMATA, S. KUBOTA, R. SOEJIMA, K. DOMEN, K. HORINO und T. TANAHASHI:** *Room-Temperature Continuous Wave Operation of InGaN Laser Diodes with Vertical Conducting Structure on SiC Substrate*. In: Japanese Journal of Applied Physics **37**, L1373 (1998).
- [10] **M. FEHRER, S. EINFELDT, U. BIRKLE und D. HOMMEL:** *Carrier transport in GaN grown by MBE with different plasma sources*. *E-MRS 98, Abstract Booklet L-27* (1998).
- [11] **R. EBEL, M. FEHRER, S. FIGGE, S. EINFELDT, H. SELKE und D. HOMMEL:** *Buffer layers for the growth of GaN on sapphire by molecular beam epitax*. In: Journal of Crystal Growth **201/20**, 433 (1999).
- [12] **S. EINFELDT, U. BIRKLE, C. THOMAS, M. FEHRER, H. HEINKE und D. HOMMEL:** *Plasma assisted molecular beam epitaxy growth of GaN*. In: Materials Science and Engineering B **50**, 12 (1997).

- [13] **H. SELKE**, S. EINFELDT, U. BIRKLE, D. HOMMEL und P. RYDER: *On the microstructure of GaN buffer layers grown at low temperatures on (0001) sapphire*. In: Institute of Physics Conference Series **157**, 231 (1997).
- [14] **C. FECHTMANN**, V. KIRCHNER, S. EINFELDT, H. HEINKE, D. HOMMEL, T. LUKASIEWICZ, L. LUCZYNSKI und J. BARANOWSKI: *MBE growth of GaN on NdGaO₃ (101)*. In: Material Research Society Symposium Proceedings **482**, 295 (1998).
- [15] **U. BIRKLE**, M. FEHRER, V. KIRCHNER, S. EINFELDT, D. HOMMEL, S. STRAUF, P. MICHLER und J. GUTOWSKI: *Studies on carbon as an alternative p-type dopant for GaN*. In: Internet Journal of Nitride Semiconductor Research **4S1**, G5.6 (1999).
- [16] **H. HEINKE**, V. KIRCHNER, S. EINFELDT, U. BIRKLE und D. HOMMEL: *Thermally induced strain in MBE grown GaN layers*. In: Journal of Crystal Growth **189/190**, 375 (1998).
- [17] **V. KIRCHNER**, H. HEINKE, U. BIRKLE, S. EINFELDT, D. HOMMEL, H. SELKE und P. L. RYDER: *Ion-induced crystal damage during plasma-assisted MBE growth of GaN layers*. In: Physical Review B **58**, 15749 (1998).
- [18] **S. FIGGE**, T. BÖTTCHER, S. EINFELDT und D. HOMMEL: *In situ and ex situ evaluation of the film coalescence for GaN growth on GaN nucleation layers*. In: Journal of Crystal Growth **221**, 262 (2000).
- [19] **A. BARSKI**, U. RÖSSNER, J. L. ROUVIERE und M. ARLERY: *Epitaxial growth of cubic GaN and AlN on Si(001)*. In: Internet Journal of Nitride Semiconductor Research **1**, 21 (1996).
- [20] **H. YANG**, L. X. ZHENG, J. B. LI, X. J. WANG, D. P. XU, Y. T. WANG, HU X. W. und P. D. HAN: *Cubic-phase GaN light-emitting diodes*. In: Applied Physics Letters **74**, 2498 (1999).
- [21] **S. NAKAMURA** und G. FASOL: *The Blue Laser Diode*. Springer Berlin (1997).
- [22] **C. WETZEL**, T. TAKEUCHI, S. YAMAGUCHI, H. KATOH, H. AMANO und I. AKASAKI: *Optical band gap in GaInN on GaN by photoreflection spectroscopy*. In: Applied Physics Letters **73**, 1994 (1998).
- [23] **J. WU**, W. WALUKIEWICZ, K. M. YU, J. W. AGER, E. E. HALLER, H. LU und W. J. SCHAFF: *Small band gap bowing in In(1-x)Ga(x)N alloys*. In: Applied Physics Letters **80**, 4741 (2002).
- [24] **V. Y. DAVYDOV**, A. A. KLOCHIKHIN, V. V. EMTSEV, D. A. KURDYUKOV, S. V. IVANOV, V. A. VEKSHIN, F. BECHSTEDT, J. FURTHMULLER, ADERHOLD J., J. GRAUL, A. V. MUDRYI, H. HARIMA, A. HASHIMOTO, A. YAMAMOTO und E. E. HALLER: *Band Gap of Hexagonal InN and InGaN Alloys*. In: physica status solidi (b) **234**, 787 (2002).
- [25] **G. POPOVICI**, H. MORKOC und S. MOHAMMAD: *Group III Nitride Semiconductor Compounds*. Clarendon Univeristy Press Oxford (1998).
- [26] **T. J. OCHALSKI**, B. GIL, P. LEFEBVRE, N. GRANDJEAN, M. LEROUX, J. MASSIES, S. NAKAMURA und S. MORKOÇ: *Photorefectance investigations of the bowing parameter in AlGaIn alloys lattice-matched to GaN*. In: Journal of Applied Physics **44**, 292 (1973).
- [27] **H. JIANG**, G. Y. ZHAO, H. ISHIKAWA, T. EGAWA, T. JIMBO und M. UMENO: *Determination of exciton transition energy and bowing parameter of AlGaIn alloys in AlGaIn/GaN heterostructure by means of reflectance measurement*. In: Journal of Applied Physics **89**, 1046 (2001).
- [28] **K. KUBOTA**, Y. KOBAYASHI und K. FUJIMOTO: *Preparation and properties of III-V nitride thin films*. In: Journal of Applied Physics **66**, 2984 (1989).
- [29] **G. STEUDE**, B. K. MEYER, A. GÖLDNER, A. HOFFMANN, F. BERTRAM, J. CHRISTEN, H. AMANO und I. AKASAKI: *Optical investigations of AlGaIn on GaN epitaxial films*. In: Applied Physics Letters **74**, 2456 (1999).
- [30] **S. R. LEE**, A. F. WRIGHT, M. H. CRAWFORD, G. A. PETERSEN, J. HAN und R. M. BIEFELD: *The band-gap bowing of Al(x)Ga(1-x)N alloys*. In: Applied Physics Letters **74**, 3344 (1999).

- [31] **M. SUZUKI** und T. UENOYAMA: *Optical Gain and symmetry in III-V nitride lasers*. In: Applied Physics Letters **69**, 3378 (1996).
- [32] **MASAKATSU SUZUKI**, T. UENOYAMA und A. YANASE: *First-Principle Calculations of Effective-Mass Parameters of AlN and GaN*. In: Physical Review B **52**, 8132 (1995).
- [33] **Y. C. YEO**, T. C. CHONG und M. F. LI: *Electronic Band Structures and Effective-Mass Parameters of Wurzite GaN and InN*. In: Journal of Applied Physics **83**, 1429 (1998).
- [34] **K. MANOH**, H. YOSHIDA, T. KOBAYASHI, M. TAKASE, K. YAMAUCHI, S. FUJIWARA, T. OHNO, N. NISHI, M. OZAWA, M. IKEDA, T. TOJYO und T. TANIGUCHI: *Small Integrated Optical Head Device Using a Blue-Violet Laser Diode for Blu-ray Disc System*. In: Japanese Journal of Applied Physics **42**, 880 (2003).
- [35] **S. D. LESTER**, F. PONCE, M. CRAFTORD und D. STEIGERWALD: *High dislocation densities in high efficiency GaN-based light-emitting diodes*. In: Applied Physics Letters **66**, 1249 (1995).
- [36] **S. NAKAMURA**, M. SENOH, N. IWASA, S. NAGAHAMA, T. YAMADA und T. MUKAI: *Superbright Green InGaN Single-Quantum-Well-Structure Light-Emitting Diode*. In: Japanese Journal of Applied Physics **34**, L1332 (1995).
- [37] **S. NAKAMURA**, M. SENOH, S. NAGAHAMA, N. IWASA, T. YAMADA, T. MATSUSHITA, H. KIYOKU und Y. SUGIMOTO: *InGaN Multi-Quantum-Well-Structure Laser Diodes with Cleaved Mirror Cavity Facets*. In: Japanese Journal of Applied Physics **35**, L217 (1996).
- [38] **S. NAKAMURA**, M. SENOH, S. NAGAHAMA, N. IWASA, T. YAMADA, T. MATSUSHITA, H. KIYOKU und Y. SUGIMOTO: *InGaN-Based Multi-Quantum-Well-Structure Laser Diodes*. In: Japanese Journal of Applied Physics **35**, L74 (1996).
- [39] **S. NAKAMURA**, M. SENOH, S. NAGAHAMA, N. IWASA, T. YAMADA, T. MATSUSHITA, Y. SUGIMOTO und KIYOKU H.: *Room-temperature continuous-wave operation of InGaN multi-quantum-well structure laser diodes*. In: Journal of Applied Physics **69**, 4056 (1996).
- [40] **K. ITAYA**, M. ONOMURA, J. NISHIO, L. SUGIURA, S. SAITO, M. SUZUKI, J. RENNIE, S. NUNOUE, M. YAMAMOTO, H. FUJIMOTO, Y. KOKUBUN, Y. OHBA, G. HATAKOSHI und M. ISH: *Room Temperature Pulsed Operation of Nitride Based Multi-Quantum-Well Laser Diodes with Cleaved Facets on Conventional C-Face Sapphire Substrates*. In: Japanese Journal of Applied Physics **35**, L1315 (1996).
- [41] **S. NAKAMURA**, M. SENOH, S. I. NAGAHAMA, N. IWASA, T. YAMADA, T. MATSUSHITA, H. KIJOKU, Y. SUGIMOTO, T. KOZAKI, H. UMEMOTO, M. SANO und K. CHOCHO: *InGaN/GaN/AlGaIn-based laser diodes with modulation-doped strained-layer superlattices*. In: Japanese Journal of Applied Physics **36**, L1568 (1997).
- [42] **S. NAKAMURA**, M. SENOH, S. NAGAHAMA, N. IWASA, T. YAMADA, T. MATSUSHITA, SUGIMOTO Y. und HIROYUK: *High-Power, Long-Lifetime InGaN Multi-Quantum-Well-Structure Laser Diodes*. In: Japanese Journal of Applied Physics **36**, L1059 (1997).
- [43] **M. P. MACK**, A. ABARE, M. AIZCORBE, P. KOZODOY, S. KELLER, U. K. MISHRA, L. COLDREN und S. DENBAARS: *Characteristics of Indium-Gallium-Nitride Multiple-Quantum-Well Blue Laser Diodes Grown by MOCVD*. In: Internet Journal of Nitride Semiconductor Research **2**, 41 (1997).
- [44] **A. KURAMATA**, K. DOMEN, R. SOEJIMA, K. HORINO, S. KUBOTA und T. TANAHASHI: *InGaN Laser Diode Grown on 6H-SiC Substrate Using Low-Pressure Metal Organic Vapor Phase Epitaxy*. In: Japanese Journal of Applied Physics **36**, L1130 (1997).
- [45] **H. KATOH**, T. TAKEUCHI, C. ANBE, R. MIZUMOTO, A. YAMAGUCHI, C. WETZEL, H. AMANO, I. AKASAKI, Y. KANEKO und N. YAMADA: *GaN Based Laser Diode with Focused Ion Beam Etched Mirror*. In: Japanese Journal of Applied Physics **37**, L444 (1998).
- [46] **S. NAKAMURA**, M. SENOH, S. NAGAHAMA, N. IWASA, T. YAMADA, T. MATSUSHITA, H. KIYOKU, Y. SUGIMOTO, T. KOZAKI, H. UMEMOTO, M. SANO und K. CHOCHO: *Continuous-wave operation of InGaN/GaN/AlGaIn-based laser diodes grown on GaN substrates*. In: Applied Physics Letters **72**, 2014 (1998).

- [47] **S. NAKAMURA**, M. SENOH, S. NAGAHAMA, N. IWASA, T. YAMADA, T. MATSUSHITA, H. KIYOKU, Y. SUGIMOTO, T. KOZAKI, H. UMEMOTO, M. SANO und K. CHOCHO: *Violet InGaN/GaN/AlGaIn-Based Laser Diodes with an Output Power of 420 mW*. In: Japanese Journal of Applied Physics **37**, L627 (1998).
- [48] **R. SOEJIMA**, A. KURAMATA, S. KUBOTA, K. DOMEN, K. HORINO und T. TANAHAS: *Continuous-Wave Operation at 250 K of InGaN Multiple Quantum Well Laser Diodes Grown on 6H-SiC with Vertical Conducting Structure*. In: Japanese Journal of Applied Physics **37**, L1205 (1998).
- [49] **Y. KIMURA**, M. MIYACHI, H. TAKAHASHI, T. TANAKA, M. NISHITSUKA, A. WATANABE, H. OTA und K. CHIKUMA: *Room-Temperature Pulsed Operation of GaN-Based Laser Diodes on a-Face Sapphire Substrate Grown by Low-Pressure Metalorganic Chemical Vapor Deposition*. In: Japanese Journal of Applied Physics **37**, L1231 (1998).
- [50] **S. NAKAMURA**, M. SENOH, S. NAGAHAMA, T. MATSUSHITA, H. KIYOKU, Y. SUGIMOTO, T. KOZAKI, H. UMEMOTO, M. SANO und T. MUKAI: *Violet InGaN/GaN/AlGaIn-Based Laser Diodes Operable at 50 °C with a Fundamental Transverse Mode*. In: Japanese Journal of Applied Physics **38**, L226 (1999).
- [51] **M. KURAMOTO**, C. SASAOKA, Y. HISANAGA, A. KIMURA, A. A. YAMAGUCHI, H. SUNAKAWA, N. KURODA, M. NIDO, A. USUI und M. MIZUTA: *Room-Temperature Continuous-Wave Operation of InGaN Multi-Quantum-Well Laser Diodes Grown on an n-GaN Substrate with a Backside n-Contact*. In: Japanese Journal of Applied Physics **38**, L184 (1999).
- [52] **A. KURAMATA**, S. KUBOTA, R. SOEJIMA, K. DOMEN, K. HORINO, P. HACKE und T. TANAHASHI: *Continuous Wave Operation at Room Temperature of InGaN Laser Diodes Fabricated on 4H-SiC Substrat*. In: Japanese Journal of Applied Physics **38**, L481 (1999).
- [53] **S. NAGAHAMA**, N. IWASA, M. SENOH, T. MATSUSHITA, Y. SUGIMOTO, H. KIYOKU, T. KOZAKI, M. SANO, H. MATSUMURA, H. UMEMOTO, K. CHOCHO und T. MUKAI: *High-Power and Long-Lifetime InGaN Multi-Quantum-Well Laser Diodes Grown on Low-Dislocation-Density GaN Substrates*. In: Japanese Journal of Applied Physics **39**, L647 (2000).
- [54] **S. KIJIMA**, T. TOJYO, S. GOTO, M. TAKEYA, T. ASANO, T. HINO, S. UCHIDA und M. IKEDA: *Novel Techniques for Stabilizing Transverse Mode in AlGaInN-Based Laser Diodes*. In: Physica Status Solidi A **188**, 55 (2001).
- [55] **M. KNEISSL**, W. S. WONG, D. W. TREAT, M. TEEPE, N. MIYASHITA und N. M. JOHNSON: *CW InGaN Multiple-Quantum-Well Laser Diodes on Copper Substrates*. In: Physica Status Solidi A **188**, 23 (2001).
- [56] **T. TOJYO**, T. ASANO, M. TAKEYA, T. HINO, S. KIJIMA, S. GOTO, S. UCHIDA und M. IKEDA: *GaN-Based High Power Blue-Violet Laser Diodes*. In: Japanese Journal of Applied Physics **40**, 3206 (2001).
- [57] **M. TAKEYA**, T. TOJYO, T. ASANO, S. IKEDA, T. MIZUNO, O. MATSUMOTO, S. GOTO, Y. YABUKI, S. UCHIDA und M. IKEDA: *High-Power AlGaInN Lasers*. In: Physica Status Solidi A **192**, 269 (2002).
- [58] **S. NAGAHAMA**, T. YANAMOTO, M. SANO und T. MUKAI: *Characteristics of Laser Diodes Composed of GaN-Based Semiconductor*. In: Physica Status Solidi A **190**, 235 (2002).
- [59] **T. BÖTTCHER**, C. ZELLWEGGER, S. FIGGE, R. KRÖGER, C. PETTER, H.-J. BÜHLMANN, M. ILEGEMS, P. L. RYDER und D. HOMMEL: *Realization of a GaN Laser Diode with Wet Etched Facets*. In: Physica Status Solidi A **191**, R3 (2002).
- [60] **J.-Y. CHANG** und Y.-K. KUO: *Simulation of blue InGaN quantum-well lasers*. In: Journal of Applied Physics **93**, 4992 (2003).
- [61] **A. USUI**, H. SUNAKAWA, A. SAKAI, A. ATSUSHI und YAMAGUCHI: *Thick GaN Epitaxial Growth with Low Dislocation Density by Hydride Vapor Phase Epitaxy*. In: Japanese Journal of Applied Physics **36**, L899 (1997).

- [62] **O. NAM**, M. D. BREMSER, T. S. ZHELEVA und R. F. DAVIS: *Lateral epitaxy of low defect density GaN layers via organometallic vapor phase epitaxy*. In: Applied Physics Letters **71**, 2638 (1997).
- [63] **T. TOJYO**, S. UCHIDA, T. MIZUNO, T. ASANO, M. TAKEYA, T. HINO, S. KIJIMA, S. GOTO, Y. YABUKI und M. IKEDA: *High-Power AlGaInN Laser Diodes with High Kink Level and Low Relative Intensity Noise*. In: Journal of Applied Physics **41**, 1829 (2002).
- [64] **I. KIDOGUCHI**, A. ISHIBASHI, G. SUGAHARA, A. TSUJIMURA und Y. BAN: *Improvement of Crystalline Quality in GaN Films by Air-Bridged Lateral Epitaxial Growth*. In: Japanese Journal of Applied Physics **39**, L453 (2000).
- [65] **T. S. ZHELEVA**, O.-H. NAM, M. D. BREMSER und R. F. DAVIS: *Dislocation density reduction via lateral epitaxy in selectively grown GaN structures*. In: Applied Physics Letters **71**, 2472 (1997).
- [66] **K. HIRAMATSU**, K. NISHIYAMA, M. ONISHI, H. MIZUTANI, M. NARUKAWA, A. MOTOGAITO, H. MIYAKE, Y. IYETCHIKA und T. MAEDA: *Fabrication and characterization of low defect density GaN using facet-controlled epitaxial lateral overgrowth (FACELO)*. In: Journal of Crystal Growth **221**, 316 (2000).
- [67] **S. NAGAHAMA**, T. YANAMOTO, M. SANO und T. MUKAI: *Wavelength dependence of InGaN Laser Diode Characteristics*. In: Journal of Applied Physics **40**, 3975 (2001).
- [68] **W. S. WONG**, T. SANDS und N. W. CHEUNG: *Damage-free separation of GaN thin films from sapphire substrates*. In: Applied Physics Letters **72**, 599 (1998).
- [69] **M. K. KELLY**, R. P. VAUDO, V. M. PHANSE, L. GÖRGENS, O. AMBACHER und M. STUTZMANN: *Large Free-Standing GaN Substrates by Hydride Vapor Phase Epitaxy and Laser-Induced Liftoff*. In: Japanese Journal of Applied Physics **38**, L217 (1999).
- [70] **M. KURAMOTO**, C. SASAOKA, N. FUTAGAWA, M. NIDO und A. A. YAMAGUCHI: *Reduction of Internal Loss and Threshold Current in a Laser Diode with a Ridge by Selective Re-Growth (RiS-LD)*. In: Physica Status Solidi A **192**, 329 (2002).
- [71] **W. GÖTZ**, N. M. JOHNSON, J. WALKER, D. P. BOUR, H. AMANO und I. AKASAKI: *Hydrogen passivation of Mg acceptors in GaN grown by metalorganic chemical vapor deposition*. In: Applied Physics Letters **67**, 2666 (1995).
- [72] **LISA SUGIURA**, M. SUZUKI und J. NISHIO: *P-type conduction in as-grown Mg-doped GaN grown by metalorganic chemical vapor deposition*. In: Applied Physics Letters **72**, 1748 (1998).
- [73] **WOOK KIM**, A. SALVADOR, A. E. BOTCHKAREV, O. AKTAS, S. N. MOHAMMAD und H. MORÇOÇ: *Mg-Doped P-Type GaN Grown by Reactive Molecular Beam Epitaxy*. In: Applied Physics Letters **69**, 559 (1996).
- [74] **M. S. BRANDT**, P. HERBST, H. ANGERER, O. AMBACHER und M. STUTZMANN: *Thermopower Investigation of N- and P-Type GaN*. In: Physical Review B **58**, 7786 (1998).
- [75] **J. M. MYOUNG**, K. H. SHIM, C. KIM, O. GLUSCHENKOV, K. KIM, S. KIM, D. A. TURNBULL und S. G. BISHOP: *Optical Characteristics of P-Type GaN Films Grown by Plasma-Assisted Molecular Beam Epitaxy*. In: Applied Physics Letters **69**, 2722 (1996).
- [76] **J. K. SHEU**, Y. K. SU, G. C. CHI, B. PONG, C. Y. CHEN, C. N. HUANG und W. C. CHEN: *Photoluminescespectroscopy of Mg-doped GaN*. In: Journal of Applied Physics **84**, 4590 (1998).
- [77] **C. YUAN**, T. SALAGAI, A. GURARY, A. G. THOMPSON, W. KROLL, R. A. STALL, C. Y. HWANG, M. SCHURMAN, Y. LI, W. E. MAYO, Y. LU, S. KRISHNANKUTTY, I. K. SHMAGIN, R. M. KOLBAS und J. PEARTON: *Investigations of n- and p-type doping of GaN during epitaxial growth in a mass production scale multiwafer-rotating-disk reaktor*. In: Journal of Vacuum Science and Technology **B 13**, 2075 (1995).

- [78] **H. ISHIKAWA**, S. KOBAYASHI, Y. KOIDE, S. YAMASAKI, S. NAGAI, J. UMEZAKI, M. KOIKE und M. MURAKAMI: *Effects of surface treatments and metal work functions on electrical properties at p-GaN/metal interfaces*. In: Journal of Applied Physics **81**, 1315 (1997).
- [79] **K. V. VASSILEVSKI**, M. G. RASTEGAEVA, A. I. BABANIN, I. P. NIKITINA und V. A. DMITRIEV: *Fabrication of GaN mesa structures*. In: Internet Journal of Nitride Semiconductor Research **1**, 38 (1996).
- [80] **I. AKASAKI**, H. AMANO, S. SOTA, H. SAKAI, T. TANAKA und M. KOIKE: *Stimulated Emission by Current Injection from an AlGaIn/GaN/GaInN Quantum Well Device*. In: Japanese Journal of Applied Physics **34**, L1517 (1995).
- [81] **T. MORI**, T. KOZAWA, T. OHWAKI, Y. TAGA, S. NAGAI, S. YAMASAKI, S. ASAMI, N. SHIBATA und M. KOIKE: *Schottky barriers and contact resistances on p-type GaN*. In: Applied Physics Letters **69**, 3537 (1996).
- [82] **T. KIM**, J. KHIM, S. CHAE und T. KIM: *Low Resistance Contacts to p-Type GaN*. In: Materials Research Society Symposium Proceedings **468**, 427 (1997).
- [83] **D. J. KING**, L. ZHANG, J. C. RAMER, S. D. HERSEE und L. F. LESTER: *Temperature Behavior of Pt/Au Ohmic Contacts to p-GaN*. In: Materials Research Society Symposium Proceedings **468**, 421 (1997).
- [84] **J. T. TREXLER**, S. J. MILLER, P. H. HOLLOWAY und M. A. KHAN: *Interfacial reactions between metal thin films and p-GaN*. In: Materials Research Society Symposium Proceedings **395**, 819 (1996).
- [85] **J.-S. JANG**, K.-H. PARK, H.-K. JANG, H.-G. KIM und S.-J. PARK: *Ohmic contacts to p-type GaN using a Ni/Pt/Au metallization scheme*. In: Journal of Vacuum Science and Technology B **16**, 3105 (1998).
- [86] **TH. GESSMANN**, J. W. GRAFF, Y.-L. LI, E. L. WALDRON und E. F. SCHUBERT: *Ohmic contact technology in III nitrides using polarization effects of cap layers*. In: Journal of Applied Physics **92**, 3740 (2002).
- [87] **K. KUMAKURA**, T. MAKIMOTO und N. KOBAYASHI: *Low-resistance nonalloyed ohmic contact to p-type GaN using strained InGaIn contact layer*. In: Applied Physics Letters **79**, 2588 (2001).
- [88] *Datenblatt DL-4038-021*. www.eu.sc-sanyo.com/ProductInfo/LaserDiode/Datasheet/DL-4038-021.htm.
- [89] *Nichia Laser Diodes Product List*. <http://www.nichia.co.jp/product/laser.html> (2002).
- [90] **Y. NARUKAWA**, Y. KAWAKAMI, M. FUNATO, S. FUJITA, S. FUJITA und S. NAKAMURA: *Role of self-formed InGaIn quantum dots for exciton localization in the purple laser diode emitting at 420 nm*. In: Applied Physics Letters **70**, 981 (1997).
- [91] **S. CHICHIBU**, T. AZUHATA, T. SOTA und S. NAKAMURA: *Luminescences from localized states in InGaIn epilayers*. In: Applied Physics Letters **70**, 2822 (1997).
- [92] **M. KLUDGE**: *ZnSe-based laser diodes with quaternary CdZnSSe quantum wells as active region: - Chances and limitations -*. Doktorarbeit Universität Bremen (2002).
- [93] **H. M. MANASEVIT**. In: *Applied Physics Letters* **12**, 156 (1968).
- [94] **O. AMBACHER**: *Growth and applications of Group III-nitrides*. In: Journal of Physics D **31**, 2653 (1997).
- [95] **T. BÖTTCHER**: *Heteroepitaxy of Group-III-Nitrides for the Application of Laser Diodes*. Doktorarbeit Universität Bremen (2002).
- [96] **L. J. VAN DER PAUW**. In: *Philips Research Reports* **13**, 1 (1958).
- [97] **D. C. LOOK**: *Electrical Characterization of GaAs Materials and Devices*. John Wiley & Sons (1989).

- [98] **H. AMANO**, N. SAWAKI, I. AKASAKI und Y. TOYODA: *Metalorganic vapor phase epitaxial growth of a high quality GaN film using an AlN buffer layer*. In: Applied Physics Letters **48**, 353 (1986).
- [99] **J. F. MUTH**, J. D. BROWN, M. A. L. JOHNSON, Z. YU, R. M. KOLBAS, J. W. COOK und J. F. SCHETZINA: *Absorption coefficient and refractive index of GaN, AlN and AlGaIn alloys*. In: Internet Journal of Nitride Semiconductor Research **4S1**, G5.2 (1999).
- [100] **RODITI**: *Sapphire Specification Sheet* (2001).
- [101] **K. S. KIM**, C. S. OH, K. J. LEE, G. M. YANG, C.-H. HONG, K. Y. LIM, H. J. LEE und A. YOSHIKAWA: *Effects of growth rate of a GaN buffer layer on the properties of GaN on a sapphire substrate*. In: Journal of Applied Physics **85**, 8441 (1999).
- [102] **K. HIRAMATSU**, S. ITOH, H. AMANO, I. AKASAKI, N. KUWANO, T. SHIRAISHI und K. OKI: *Growth mechanism of GaN grown on sapphire with AlN buffer layer by MOVPE*. In: Journal of Crystal Growth **115**, 628 (1991).
- [103] **X. H. WU**, P. FINI, S. KELLER, E. J. TARSA, B. HEYING, U. K. MISHRA, S. P. DENBAARS und J. S. SPECK: *Morphological and Structural Transitions in GaN Films Grown on Sapphire by Metal-Organic Chemical Vapor Deposition*. In: Japanese Journal of Applied Physics **35**, L1648 (1996).
- [104] **A. MUNKHOLM**, C. THOMPSON, C. M. FOSTER, J. A. EASTMAN, O. AUCIELLO, G. B. STEPHENSON, P. FINI, S. P. DENBAARS und J. S. SPECK: *Determination of the cubic to hexagonal fraction in GaN nucleation layers using grazing incidence x-ray scattering*. In: Applied Physics Letters **72**, 2972 (1998).
- [105] **S. TANAKA**, M. TAKEUCHI und Y. AOYAGI: *Anti-Surfactant in III-Nitride Epitaxy – Quantum Dot Formation and Dislocation Termination*. In: Japanese Journal of Applied Physics **39**, L831 (2000).
- [106] **P. VENNÉGUÈS**, B. BEAUMONT, V. BOUSQUET, M. VAILLE und P. GIBART: *Reduction mechanisms for defect densities in GaN using one- or two-step epitaxial lateral overgrowth methods*. In: Journal of Applied Physics **87**, 4175 (2000).
- [107] **J. DENNEMARCK**: *Defektreduzierung in der Heteroepitaxie von GaN*. Diplomarbeit Universität Bremen (2003).
- [108] **S. EINFELDT**, M. DIESELBERG, H. HEINKE, D. HOMMEL, D. RUDLOFF, J. CHRISTEN und R. F. DAVIS: *Strain in cracked AlGaIn layers*. In: Journal of Applied Physics **92**, 118 (2002).
- [109] **A. KOUKITU**, A. KUMAGAI und H. SEKI: *Thermodynamic analysis of the MOVPE growth of InGaAlN quaternary alloy*. In: Journal of Crystal Growth **221**, 743 (2000).
- [110] **CHRISTOPH ZELLWEGER**: *Design, Realization and Characterization of GaN-based Devices*. Doktorarbeit Ecole Polytechnique Federale de Lausanne (2003).
- [111] **C. PETTER**. Diplomarbeit Universität Bremen (2002).
- [112] **S. M. SZE**: *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley & Sons (1981).
- [113] **G. MANDEL**: *Self-Compensation Limited Conductivity in Binary Semiconductors. Theory*. In: Physical Review **134**, A1073 (1964).
- [114] **KWISEON KIM**, W. R. L. LAMBRECHT und B. SEGALL: *Effective Masses and Valence-Band Splittings in GaN and AlN*. In: Physical Review B **56**, 7363 (1998).
- [115] **E. V. KALININA**, V. A. SOLOV'EV, S. A. ZUBRILOV, V. A. DIMITRIEV und A. P. KOVARSKY: *GaN p-n Structures Fabricated by Mg Ion Implantation*. In: Internet Journal of Nitride Semiconductor Research **4S1**, G6.53 (1999).
- [116] **O. SCHULZ**: *Lateral indexgeführte ZnCdSe-Laser*. Doktorarbeit Technische Universität Berlin (2000).
- [117] **J. NEUGEBAUER** und C. G. V. DE WALLE: *Chemical Trends for Acceptor Impurities in GaN*. In: Journal of Applied Physics **85**, 3003 (1999).

- [118] *Periodic Table of the Elements*. Sargent-Welch Scientific Company Skokie (1980).
- [119] **H. WANG** und **A.-B. CHEN**: *Calculations of Acceptor Ionization Energies in GaN*. In: *Physical Review B* **63**, 125212–1 (2001).
- [120] **J. M. LUTTINGER** und **W. KOHN**: *Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields*. In: *Physical Review* **97**, 869 (1955).
- [121] **J. M. LUTTINGER**: *Quantum Theory of Cyclotron Resonance in Semiconductors: General Theory*. In: *Physical Review* **102**, 1030 (1956).
- [122] **G. L. BIR** und **G. E. PIKUS**: *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors*. Wiley New York (1974).
- [123] **S. FISCHER**, **C. WETZEL**, **E. E. HALLER** und **B. K. MEYER**: *On P-Type Doping in GaN-Acceptor Binding Energies*. In: *Applied Physics Letters* **67**, 1298 (1995).
- [124] **A. SALVADOR**, **W. KIM**, **Ö. AKTAS**, **A. BOTCHKAREV**, **Z. FAN** und **H. MORKOÇ**: *Near Ultraviolet Luminescence of Be Doped GaN Grown by Reactive Molecular Beam Epitaxy Using Ammonia*. In: *Applied Physics Letters* **69**, 2692 (1996).
- [125] **O. MADELUNG** (Editor): *Semiconductors-Basic Data*. Springer Marburg (1996).
- [126] **S. STRAUF**: *Störstellen-Lumineszenz breitlückiger Halbleiterschichten*. Doktorarbeit Universität Bremen (2002).
- [127] **J. TERSOFF**: *Enhanced Solubility of Impurities and Enhanced Diffusion Near Crystal Surfaces*. In: *Physical Review Letters* **74**, 5080 (1995).
- [128] **C. BUNGARO**, **K. RAPCEWICZ** und **J. BERNHOLC**: *Surface Sensitivity of Impurity Incorporation: Mg at GaN (0001) Surfaces*. In: *Physical Review B* **59**, 9771 (1999).
- [129] **F. A. PONCE**, **D. P. BOUR**, **W. T. YOUNG**, **M. SAUNDERS** und **J. W. STEEDS**: *Determination of Lattice Polarity for Growth of GaN Bulk Single Crystals and Epitaxial Layers*. In: *Applied Physics Letters* **69**, 337 (1996).
- [130] **B. DAUDIN**, **J. L. ROUVIÈRE** und **M. ARLERY**: *Polarity Determination of GaN Films by Ion Channeling and Convergent Beam Electron Diffraction*. In: *Applied Physics Letters* **69**, 2480 (1996).
- [131] **Z. LILIENTAL-WEBER**, **Y. CHEN**, **S. RUVIMOV** und **J. WASHBURN**: *Formation Mechanism of Nanotubes in GaN*. In: *Physical Review Letters* **79**, 2835 (1997).
- [132] **A. R. SMITH**, **R. M. FEENSTRA**, **D. W. GREVE**, **M.-S. SHIN**, **M. SKOWRONSKI**, **J. NEUGEBAUER** und **J. E. NORTHRUP**: *Determination of Wurtzite GaN Lattice Polarity Based on Surface Reconstruction*. In: *Applied Physics Letters* **72**, 2114 (1998).
- [133] **A. R. SMITH**, **R. M. FEENSTRA**, **D. W. GREVE**, **J. NEUGEBAUER** und **J. E. NORTHRUP**: *Reconstructions of the $\overline{\text{GaN}(0001)}$ Surface*. In: *Physical Review Letters* **79**, 3934 (1997).
- [134] **V. RAMACHANDRAN**, **C. D. LEE**, **R. M. FEENSTRA**, **A. R. SMITH**, **J. E. NORTHRUP** und **D. W. GREVE**: *Structure of clean and arsenic-covered GaN(0001) surfaces*. In: *Journal of Crystal Growth* **209**, 355 (2000).
- [135] **H. AMANO**, **M. KITO**, **K. HIRAMATSU** und **I. AKASAKI**: *P-Type Conduction in Mg-Doped GaN Treated with Low-Energy Electron Beam Irradiation*. In: *Japanese Journal of Applied Physics* **28**, L2112 (1989).
- [136] **S. NAKAMURA**, **N. IWASA**, **M. SENOH** und **T. MUKAI**: *Hole Compensation Mechanism of P-Type GaN Films*. In: *Japanese Journal of Applied Physics* **31**, 1258 (1992).
- [137] **S.-J. CHANG**, **Y.-K. SU**, **T.-L. TSAI**, **C.-Y. CHANG**, **C.-L. CHIANG**, **C.-S. CHANG**, **T.-P. CHEN** und **K.-H. HUANG**: *Acceptor Activation of Mg-Doped GaN by Microwave Treatment*. In: *Applied Physics Letters* **78**, 312 (2001).

- [138] **S. J. PEARTON**, S. BENDI, K. S. JONES, V. KRISHNAMOORTHY, R. G. WILSON, F. REN, J. R. F. KARLICEK und R. A. STALL: *Reactivation of Acceptors and Trapping of Hydrogen in GaN/InGaN Double Heterostructures*. In: Applied Physics Letters **69**, 1879 (1996).
- [139] *WebElements*. <http://www.webelements.com/webelements/elements/text/H/radii.html>.
- [140] **A. Y. POLYAKOV**, N. B. SMIRNOV, S. J. PEARTON, F. REN, B. THEYS, F. JORMARD, Z. TEUKAM, V. A. DIMITREV, A. E. NIKOLAEV, A. S. USIKOV und I. P. NIKITA: *Fermi Level Dependence of Hydrogen Diffusivity in GaN*. In: Applied Physics Letters **79**, 1834 (2001).
- [141] **J. NEUGEBAUER** und C. G. V. DE WALLE: *Role of Hydrogen in Doping of GaN*. In: Applied Physics Letters **68**, 1829 (1996).
- [142] **JÖRG NEUGEBAUER** und CHRIS. G. VAN DE WALLE: *Hydrogen in GaN: Novel Aspects of a Common Impurity*. In: Physical Review Letters **75**, 4453 (1995).
- [143] **P. KOZODOY**: *Magnesium-Doped Gallium Nitride for Electronic and Optoelectronic Device Applications*. Doktorarbeit University of California, Santa Barbara, USA (1999).
- [144] **J. W. ORTON**, C. T. FOX, T. S. CHENG, S. E. HOOPER, S. V. NOVIKOV, B. Y. BER und Y. A. KUDRIAVTSEV: *Incorporation of Mg in GaN grown by molecular beam epitaxy*. In: Journal of Crystal Growth **197**, 7 (1999).
- [145] **S. GUHA**, N. A. BOJARCZUK und F. CARDONE: *Mg in GaN: Incorporation of a Volatile Species at High Temperatures During Molecular Beam Epitaxy*. In: Applied Physics Letters **71**, 1685 (1997).
- [146] **P. J. HANSEN**, Y. E. STRAUSSER, A. N. ERICKSON, E. J. TARSA, P. KOZODOY, E. G. BRAZEL, J. P. IBBETSON, U. MISHRA, V. NARAYANAMURTI, S. P. DENBAARS und J. S. SPECK: *Scanning capacitance microscopy imaging of threading dislocations in GaN films grown on (0001) sapphire by metalorganic chemical vapor depositio*. In: Applied Physics Letters **72**, 2247 (1998).
- [147] **A. F. WRIGHT** und U. GROSSNER: *The effect of doping and growth stoichiometry on the core structure of a threading edge dislocation in GaN*. In: Applied Physics Letters **73**, 2751 (1998).
- [148] **D. C. LOOK**: *Dislocation Scattering in GaN*. In: Physical Review Letters **82**, 1237 (1999).
- [149] **M. LEROUX**, N. GRANDJEAN, B. BEAUMONT, G. NATAF, F. SEMOND, J. MASSIES und P. GIBART: *Temperature quenching of photoluminescence intensities in undoped and doped GaN*. In: Journal of Applied Physics **86**, 3721 (1999).
- [150] **B. MONEMAR**: *Semiconductors and Semimetals Vol. 50*. Academic Press Inc. (1998).
- [151] **G. L. PEARSON** und J. BARDEEN: *Electrical Properties of Pure Silicon and Silicon Alloys Containing Boron and Phosphorus*. In: Physical Review **37**, 164 (1949).
- [152] **J. M. MYOUNG**, K. H. SHIM, O. GLUSCHENKOV, C. KIM, K. KIM und S. KIM: *Effect of Growth Temperature on the Properties of P-Type GaN Grown by Plasma-Assisted Molecular Beam Epitaxy*. In: Journal of Crystal Growth **182**, 241 (1997).
- [153] **S. GUHA**, N. A. BOJARCZUK und D. W. KISKER: *Surface lifetimes of Ga and growth behavior on GaN (0001) surfaces during molecular beam epitaxy*. In: Applied Physics Letters **69**, 2879 (1996).
- [154] **R. E. HONIG** und D. A. KRAMER: *Studies of Mg-GaN grown by MBE on GaAs(111)B substrates*. In: RCA Rev. **30**, 285 (1969).
- [155] **M. FEHRER**: *Untersuchung der elektrischen Eigenschaften breitlückiger Hableiterschichten für optoelektronische Anwendung*. Doktorarbeit Universität Bremen (1999).
- [156] **Z. LILIENTAL-WEBER**, M. BENAMARA, W. SWIDER, J. WASHBURN, I. GRZEGORY, S. POROWSKI, R. D. DUPUIS und C. J. EITING: *Ordering in bulk GaN:Mg samples: defects caused by Mg doping*. In: Physica B **273-274**, 124 (1999).
- [157] **Z. LILIENTAL-WEBER**, M. BENAMARA, J. WASHBURN, I. GRZEGORY und S. PROWSKI: *Spontaneous Ordering in Bulk GaN:Mg Samples*. In: Physical Review Letters **83**, 2370 (1999).

- [158] **C. KRUSE**: *Surfactant modifiziertes Wachstum von GaN*. Diplomarbeit Universität Bremen (2000).
- [159] *WebElements*.
<http://www.webelements.com/webelements/compounds/text/Ga/Ga2H6-13572935.html>.
- [160] **S. NAKAMURA**, M. SENOH und T. MUKAI: *Highly Mg-doped GaN films grown with GaN buffer layers*. In: Japanese Journal of Applied Physics **30**, L1708 (1991).
- [161] **T. TANAKA**, A. WATANABE, H. AMANO, Y. KOBAYASHI, I. AKASAKI, S. YAMAZAKI und M. KOIKE: *p-type conduction in Mg-doped GaN and Al(0.08)Ga(0.92)N grown by metalorganic vapor phase epitaxy*. In: Applied Physics Letters **65**, 593 (1994).
- [162] **H. LU** und I. BHAT: *Magnesium doping of GaN by metalorganic chemical vapor deposition*. In: Materials Research Society Symposium Proceedings **395**, 497 (1996).
- [163] **A. CROS**, R. DIMITROV, H. ANGERER, O. AMBACHER, M. STUTZMANN, S. CHRISTIANSEN, M. ALBRECHT und H. P. STRUNK: *Influence of Magnesium Doping on the Structural Properties of GaN Layers*. In: Journal of Crystal Growth **181**, 197 (1997).
- [164] **H. TOKUNAGA**, I. WAKI, A. YAMAGUCHI, N. AKUTSU und K. MATSUMOTO: *Growth condition dependence of Mg-doped GaN film grown by horizontal atmospheric MOVPE system with three layered laminar flow gas injection*. In: Journal of Crystal Growth **189-190**, 519 (1998).
- [165] **S. N. MOHAMMAD**, A. E. BOTCHKAREV, A. SALVADOR, W. KIM, O. AKTAS und H. MORKOC: *Proposed explanation of the anomalous doping characteristics of III-V nitrides*. In: Philosophical Magazine B **76**, 131 (1997).
- [166] **P. VENNÉGUÈS**, M. BENAÏSSA, B. BEAUMONT, E. FELTIN, P. D. MIERRY, S. DALMASSO, M. LEROUX und P. GIBART: *Pyramidal Defects in Metalorganic Vapor Phase Epitaxial Mg Doped GaN*. In: Applied Physics Letters **77**, 880 (2000).
- [167] **Z. LILIENTAL-WEBER**, M. BENAMARA, W. SWIDER, J. WASHBURN, I. GRZEGORY, S. POROWSKI, D. J. H. LAMBERT, C. J. EITING und R. D. DUPUIS: *Mg-Doped GaN: Similar Defects in Bulk Crystals and Layers Grown on Al₂O₃ by Metal-Organic Chemical-Vapor Deposition*. In: Applied Physics Letters **75**, 4159 (1999).
- [168] **M. HANSEN**, A. C. ABARE, P. KOZODOY, T. M. KATONA, M. D. CRAVEN, J. S. SPECK, U. K. MISHRA, L. A. COLDREN und S. P. DENBAARS: *Effect of AlGaIn/GaN Strained Layer Superlattice Period on InGaIn MQW Laser Diodes*. In: Internet Journal of Nitride Semiconductor Research **5** (2000).
- [169] **W. KIM**, A. E. BOTCHKAREV, A. SALVADOR, G. POPOVICI, H. TANG und H. MORKOÇ: *On the incorporation of Mg and the role of oxygen, silicon, and hydrogen in GaN prepared by reactive molecular beam epitaxy*. In: Journal of Applied Physics **82**, 219 (1997).
- [170] **U. KAUFMANN**, M. KUNZER, M. MAIER, H. OBLOH, A. RAMAKRISHNAN, B. SANTIĆ und P. SCHLOTTER: *Nature of the 2.8 eV Photoluminescence Band in Mg Doped GaN*. In: Applied Physics Letters **72**, 1326 (1998).
- [171] **C. G. VAN DE WALLE**, C. STAMPFL und J. NEUGEBAUER: *Theory of doping and defects in III-V nitrides*. In: Journal of Crystal Growth **189/190**, 505 (1998).
- [172] **P. KOZODOY**, S. KELLER, S. P. DEN BAARS und U. K. MISHRA: *MOVPE growth and characterization of Mg-doped GaN*. In: Journal of Crystal Growth **195**, 265 (1998).
- [173] **I. P. SMORCHKOVA**, E. HAUS, B. HEYING, P. KOZODOY, P. FINI, J. P. IBBETSON, S. KELLER, S. P. DENBAARS, J. S. SPECK und U. K. MISHRA: *Mg Doping of GaN Layers Grown by Plasma-Assisted Molecular-Beam Epitaxy*. In: Applied Physics Letters **76**, 718 (2000).
- [174] **M. HANSEN**, L. F. CHEN, J. S. SPECK und S. P. DENBAARS: *Observation of Mg-rich precipitates in the p-type doping of GaN-based laser diodes*. In: Physica Status Solidi B **228**, 353 (2001).

- [175] **Z. LILIENTAL-WEBER**, M. BENAMARA, W. SWIDER, J. WASHBURN, I. GRZEGORY, S. POROWSKI, R. D. DUPUIS und C. J. EITING: *Ordering in Bulk GaN:Mg Samples: Defects Caused by Mg Doping*. In: *Physica B* **273-274**, 124 (1999).
- [176] **L. T. ROMANO**, J. E. NORTHRUP, A. J. PTAK und T. H. MYERS: *Faceted Inversion Domain Boundary in GaN Films Doped with Mg*. In: *Applied Physics Letters* **77**, 2479 (2000).
- [177] **V. RAMACHANDRAN**, R. M. FEENSTRA, W. L. SARNEY, L. SALAMANCA-RIBA, J. E. NORTHRUP, L. T. ROMANO und D. W. GREVE: *Inversion of Wurtzite GaN(0001) by Exposure to Magnesium*. In: *Applied Physics Letters* **75**, 808 (1999).
- [178] **T. S. CHENG**, S. V. NOVIKOV, C. T. FOXON und J. W. ORTON: *Mechanisms of magnesium incorporation into GaN layers grown by molecular beam epitaxy*. In: *solid state communications* **109**, 439 (1999).
- [179] **U. KAUFMANN**, P. SCHLOTTER, H. OBLOH, K. KÖHLER und M. MAIER: *Hole conductivity and compensation in epitaxial GaN:Mg layers*. In: *Physical Review B* **62**, 10867 (2000).
- [180] **L. K. LI**, M. J. JURIKOVIC, W. I. WANG, J. M. V. HOVE und P. P. CHOW: *Surface Polarity Dependence of Mg Doping in GaN Grown by Molecular-Beam Epitaxy*. In: *Applied Physics Letters* **76**, 1740 (2000).
- [181] **T. H. MYERS**, A. J. PTAK, L. WANG und N. C. GILES: *Magnesium and Beryllium Doping During rf-Plasma MBE Growth of GaN*. In: *Proceedings of the International Workshop on Nitride Semiconductors, Conference Series 1* 451 (2000).
- [182] **B. DAUDIN**, G. MULA und P. PEYLA: *Mg-Modified Surface Kinetics of the GaN Growth by Molecular Beam Epitaxy*. In: *Physical Review B* **61**, 10330 (2000).
- [183] **W. NOLTING**: *Grundkurs: Theoretische Physik, 6. Statistische Physik*. Zimmermann-Neufang Ulmen (1994).
- [184] **J. PETALAS**, S. LOGOTHEDIS, S. BOULTADASKIS, M. ALOUANI und J. M. WILLS: *Optical and electronic-structure study of cubic and hexagonal GaN thin films*. In: *Physical Review B* **52**, 8082 (1995).
- [185] **M. ALONSO** und E. J. FINN: *Physik*. Addison-Wesley (1988).
- [186] **B. C. DALY**, H. J. MARIS, V. NURMIKKO, M. KUBAL und J. HAN: *Optical pump-and-probe measurements of the thermal conductivity of nitride films*. In: *Journal of Applied Physics* **92**, 3820 (2002).
- [187] **E. K. SICHEL** und J. I. PANKOVE: *Thermal conductivity of GaN. 25-360 K*. In: *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **38**, 330 (1977).
- [188] **J. H. EDGAR** und S. J. PEARTON (Editoren): *GaN and Related Materials*. Gordon and Breach (1997).
- [189] **V. BOUGROV**, M. E. LEVINSHTEIN, S. L. RUMYANTSEV und A. ZUBRILOV: *Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe* 3–30. John Wiley & Sons, Inc. New York (2001).
- [190] **D. I. FLORESCU**, V. M. ASNIN, FRED H. POLLAK, A. M. JONES, J. C. RAMER, M. J. SCHURMAN und I. FERGUSON: *Thermal conductivity of fully and partially coalesced lateral epitaxial overgrown GaN/sapphire (0001) by scanning thermal microscopy*. In: *Applied Physics Letters* **77**, 1464 (2000).
- [191] **G. A. SLACK**, R. A. TANZILLI, R. O. POHL und J. W. VANDERSANDE: *The intrinsic thermal conductivity of AlN*. In: *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **48**, 641 (1987).
- [192] **Y. GOLDBERG**: *Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe* 31–47. John Wiley & Sons, Inc. New York (2001).
- [193] **S. KRUKOWSKI**, Q. WITEK, J. ADAMCZYK, J. JUN, M. BOCKOWSKI, I. GRZEGORY, B. LUCZNIK, G. NOWAK, M. WROBLEWSKI, A. PRESZ, S. GIERLOTKA, S. STELMACH, B. PALOSZ, S. POROWSKI und P. ZINN: *Thermal properties of indium nitride*. In: *J. Phys. Chem. Solids* **59**, 289 (1998).

- [194] **I. BARIN**, O. KNACKE und O. KUBASCHEWSKI: *Thermo dynamical Properties of Inorganic Substances*. Springer-Verlag Berlin (1977).
- [195] **W. B. PEARSON**: *A Handbook of Lattice Spacings and Structures of Metals and Alloys*. Pergamon Press Oxford-London (1967).
- [196] **H. KUCHLING**: *Taschenbuch der Physik*. Fachbuchverlag Leipzig (1991).
- [197] **L. M. BELYAEV**: *Rubby and Sapphire*. Amerind Publishing Co. New Delhi (1980).
- [198] **Korth Kristalle GmbH**, *SiO₂-Datenblatt*. <http://www.korth.de/material/sio2.htm>.
- [199] **P. G. KLEMENS**: *Thermal Resistance due to point Defects at High Temperatures*. In: *Physical Review* **119**, 507 (1960).
- [200] **B. ABELES**. In: *Physical Review* **131**, 1906 (1963).
- [201] **M. A. AFRAMOWITZ**. In: *Journal of Applied Physics* **44**, 1292 (1973).
- [202] **D. KOTCHETKOV**, J. ZOU, A. A. BALANDIN, D. I. FLORESCU und F. H. POLLAK: *Effect of dislocations on thermal conductivity of GaN layers*. In: *Applied Physics Letters* **79**, 4316 (2001).
- [203] **J. ZOU**, D. KOTCHETKOV, A. BALANDIN, D. FLORESCU und F. POLLAK: *Thermal conductivity of GaN films: Effects of impurities and dislocations*. In: *Journal of Applied Physics* **5**, 2534 (2002).
- [204] **J.C. NIPKO**, C.-K. LOONG, C. M. BALKAS und R. F. DAVIS: *Phonon density of states of bulk gallium nitride*. In: *Applied Physics Letters* **73**, 34 (1998).
- [205] **H. R. SCHWARZ**: *Numerische Mathematik*. B. G. Teubner Stuttgart (1993).
- [206] **W. H. PRESS**, S. A. TEUKLOWSKY, W. T. VETTERLING und B. P. FLANNERY: *Numerical Recipes in C++*. Cambridge University Press (2002).
- [207] **H. KIM**, S.-J. PARK und H. HWANG: *Effects of Current Spreading on the Performance of GaN-based Light-Emitting Diodes*. In: *IEEE Transactions on Electron Devices* **48**, 1065 (2001).
- [208] **Y. P. VARSHNI**: *Temperature dependence of the energy gap in semiconductors*. In: *Physica* **34**, 149 (1967).
- [209] **S. FIGGE**: *Photolumineszenzuntersuchungen an InGaN-Strukturen*. Diplomarbeit Universität Bremen (1998).
- [210] **P. G. ELISEEV**, P. PERLIN, J. LEE und M. OSINSKI: *“Blue“ temperature-induced shift and band-tail emission in InGaN-based light sources*. In: *Applied Physics Letters* **71**, 569 (1997).
- [211] **Y. C. YEO**, T. C. CHONG und M. F. LI: *Uniaxial Strain Effect on the Electronic and Optical Properties of Wurtzite GaN/AlGaIn Quantum Well Lasers*. In: *IEEE Journal of Quantum Electronics* **34**, 2224 (1998).
- [212] **S. M. SZE**: *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley & Sons (1981).
- [213] **R. DINGLE** und M. ILEGEMS: *Donor-acceptor pair recombination in GaN*. In: *solid state communications* **9**, 175 (1971).
- [214] **H. M. NG**, D. DOPPALAPUDI, T. D. MOUSTAKAS, N. G. WEIMANN und L. F. EASTMAN: *The role of dislocation scattering in n-type GaN films*. In: *Applied Physics Letters* **73**, 821 (1998).
- [215] **M. FEHRER**, S. EINFELDT, U. BIRKLE, T. GOLLNIK und D. HOMMEL: *Carrier transport in GaN grown by MBE with different plasma sources*. *Proceedings of the 2nd International Conference for Nitride Semiconductors* 394 (1997).
- [216] **PETER KOZODOY**, Y. P. SMORCHKOVA, M. HANSEN, H. XING, S. P. DENBAARS, U. K. MISHRA, A. W. SAXLER, R. PERRIN und W. C. MITCHEL: *Polarization-enhanced Mg doping of AlGaIn/GaN superlattices*. In: *Applied Physics Letters* **75**, 2444 (1999).

- [217] **A. SAXLER**, W. C. MITCHEL, P. KUNG und M. RAZEGHI: *Aluminum Gallium Nitride Short-Period Superlattices Doped with Magnesium*. In: Applied Physics Letters **74**, 2023 (1999).
- [218] **E. F. SCHUBERT**, W. GRIESHABER und I. D. GOEPFERT: *Enhancement of deep acceptor activation in semiconductors by superlattice doping*. In: Applied Physics Letters **79**, 3737 (1996).
- [219] **ERIK L. WALDRON**, J. W. GRAFF und E. F. SCHUBERT: *Improved mobilities and resistivities in modulation-doped p-type AlGaN GaN superlattices*. In: Applied Physics Letters **79**, 2737 (2001).
- [220] **W. NAKWASKI** und M. OSINSKI: *Temperature profiles in etched-well surface-emitting semiconductor lasers*. In: Japanese Journal of Applied Physics **30**, L596 (1991).
- [221] **W. NAKWASKI** und M. OSINSKI: *Thermal properties of etched-well surface-emitting semiconductor lasers*. In: IEEE Journal of Quantum Electronic **27**, 1391 (1991).
- [222] **D. WINSTON**: *SimWindows*. <http://www-ocs.colorado.edu/SimWindows/simwin.html>.

A . Veröffentlichungen

A .1. Veröffentlichungen als Erstautor

1. S. Figge, T. Böttcher, D. Hommel, Chr. Zellweger, M. Ilegems
Heat generation and dissipation in GaN-based light emitting devices
Angenommen für phys. stat. sol.
2. S. Figge, R. Kröger, T. Böttcher, P. L. Ryder, D. Hommel
Magnesium segregation and the formation of pyramidal defects in p-GaN
Appl. Phys. Lett. **(81)**, 4748 (2002)
3. S. Figge, R. Kröger, T. Böttcher, P. Ryder, D. Hommel
Pyramidal defect formation in view of magnesium segregation
phys. stat. sol. (a) **192**, 456 (2002).
4. S. Figge, T. Böttcher, M. Dießelberg, C. Zellweger, S. Einfeldt, D. Hommel
Current spreading in AlGaB:Mg cladding layers of laser structures
Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **693**, 683 (2002).
5. S. Figge, T. Böttcher, S. Einfeldt, D. Hommel
In-situ and ex-situ evaluation of the film coalescence for GaN growth on GaN nucleation layers
J. Cryst. Growth **221**, 262 (2000).
6. S. Figge, T. Böttcher, S. Einfeldt, D. Hommel, H. Selke, P. L. Ryder, S. Keller, S. P. DenBaars
On the photoluminescence of InGaN quantum well structures grown by different techniques
Proc. 8th Europ. Workshop on Metal-Organic Vapour Phase Epitaxy an Related Growth Techniques, 65 (1999).

A .2. Veröffentlichungen als Koautor

1. R. Chierchia, T. Böttcher, H. Heinke, S. Einfeldt, S. Figge, and D. Hommel
Microstructure of heteroepitaxial GaN revealed by x-ray diffraction J. Appl. Phys. **93**, 8918 (2003)
2. R. Kröger, S. Figge, T. Böttcher, P. L. Ryder, D. Hommel
Mg related defect formation during MOVPE growth of GaN based films studied by transmission electron microscopy
Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **693**, 615 (2002).
3. T. Böttcher, Ch. Zellweger, S. Figge, R. Kröger, Ch. Petter, H.-J. Bühlmann, M. Illegems, P. L. Ryder, D. Hommel
Realization of a GaN laser diode with wet etched facets
phys. stat. sol. (a) **191**, R3 (2002).
4. M. Vehse, P. Michler, J. Gutowski, S. Figge, D. Hommel, H. Selke, S. Keller, S. P. DenBaars
Influence of composition and well-width fluctuations on optical gain in (In,Ga)N multiple quantum wells
Semicond. Sci. Technol. **16**, 406 (2001).
5. S. Einfeldt, T. Böttcher, S. Figge, D. Hommel
Thermally induced stress in GaN layers with regard to film coalescence
J. Cryst. Growth **230**, 357 (2001).
6. M. Schubert, A. Kasic, S. Figge, M. Dießelberg, S. Einfeldt, D. Hommel, U. Köhler, D. J. As, J. Off, B. Kuhn, F. Scholz, J. A. Woollam, C. M. Herzinger
Infrared Spectroscopic Ellipsometry fo nondestructive characterization of free-carrier and crystal-structure properties of group-III-nitride semiconductor device heterostructures
Proc. SPIE **4449**, 58 (2001).
7. S. Strauf, S. M. Ulrich, P. Michler, J. Gutowski, T. Böttcher, S. Figge, S. Einfeldt, D. Hommel
Analysis of time-resolved donor-acceptor-pair recombination in MBE and MOV-PE grown GaN:Mg
phys. stat. sol. (b) **228**, 379 (2001).
8. R. Chierchia, T. Böttcher, S. Figge, M. Dießelberg, H. Heinke, D. Hommel
Mosaicity of GaN epitaxial layers: simulation and experiment
phys. stat. sol. (b) **228**, 403 (2001).

9. T. Böttcher, S. Einfeldt, S. Figge, R. Chierchia, H. Heinke, D. Hommel, J. Speck
The role of high-temperature island coalescence in the development of stresses in GaN films
Appl. Phys. Lett. **78**, 1976 (2001).
10. S. Strauf, S. Ulrich, P. Michler, J. Gutowski, V. Kirchner, S. Figge, S. Einfeldt, D. Hommel
Temperature dependence of magnesium related optical transitions in GaN:Mg
Proc. of Int. Workshop on Nitride Semiconductors, IPAP Conf. Series **1**, 721 (2000).
11. S. Einfeldt, C. Kruse, S. Figge, D. Hommel
Molecular beam epitaxy of GaN (0001) under hydrogen
Proc. of Int. Workshop on Nitride Semiconductors, IPAP Conf. Series **1**, 170 (2000).
12. V. Kirchner, M. Fehrer, S. Figge, H. Heinke, S. Einfeldt, D. Hommel
Correlations between structural, electrical and optical properties of GaN layers grown by molecular beam epitaxy
phys. stat. sol. (b) **216**, 659 (1999).
13. T. Böttcher, S. Einfeldt, S. Figge, V. Kirchner, H. Heinke, D. Hommel, D. Rudloff, T. Riemann, J. Christen
On the impact of microstructure on luminescence of InGaN/GaN multi quantum wells grown by molecular beam epitaxy
phys. stat. sol. (a) **176**, 291 (1999).
14. R. Ebel, M. Fehrer, S. Figge, S. Einfeldt, D. Hommel
Buffer layers for the growth of GaN on sapphire by molecular beam epitaxy
J. Cryst. Growth **201/202**, 433 (1999).
15. M. Vehse, P. Michler, J. Gutowski, S. Figge, D. Hommel, H. Selke, P. L. Ryder, S. Keller, S. P. DenBaars
Influence of barrier doping and barrier composition on optical gain in (In,Ga)N MQWs
phys. stat. sol. (b) **216**, 331 (1999).

A .3. Voträge

1. S. Figge, T. Böttcher, M. Dießelberg, C. Petter, D. Hommel, R. Kröger, P. Ryder, C. Zellweger, M. Ilegems

- GaN based laserdiodes: growth and design*
31st Int. School on the Physics of Semiconductors, Jaszowiec/Poland, 2002.
2. . Figge, T. Böttcher, A. Gust, H. Heinke, D. Hommel, Chr. Zellweger, M. Ilegems
GaN based LDs, electrical characterization and heat dissipation
Institutsseminar, Riezlern, 2002
 3. S. Figge, T. Böttcher, A. Gust, H. Heinke, D. Hommel, Chr. Zellweger, M. Ilegems
Optimization of GaN based light emitting devices
Schwerpunktstreffen der DFG "Gruppe III-Nitride und ihre Heterostrukturen: Wachstum, materialwissenschaftliche Grundlage und Anwendung", Giessen, 2001.
 4. S. Figge, T. Böttcher, S. Einfeldt, D. Hommel
Stand der Forschung an GaN Lichtemittern in Bremen
Seminar des Institutes für Festkörperphysik, Bremen, 2001
 5. S. Figge, A. Gust, T. Böttcher, S. Einfeldt, M. Klude, D. Hommel
GaN based light emitting devices
Institutsseminar, Drochtersen, 2001.
 6. S. Figge, T. Böttcher, S. Einfeldt, V. Kirchner, H. Heinke, D. Hommel, H. Tran, P. L. Ryder
Evolution des MOVPE-Wachstums von GaN bei atmosphärischem Druck
Frühjahrstagung der DPG, Regensburg, 2000.
 7. S. Figge, S. Einfeldt, D. Hommel
Magnesiumdotierung von GaN in der Molekularstrahlepitaxie
DGKK-Workshop: Epitaxie von III-V-Halbleitern, Stuttgart, 1999.
 8. S. Figge, S. Einfeldt, D. Hommel
Mg doping of GaN by MBE
Institutsseminar, Riezlern, 1999
 9. S. Figge, T. Böttcher, D. Hommel
Photolumineszenzuntersuchungen an InGaN Quantenstrukturen
Seminar des Institutes für Festkörperphysik, Bremen, 1999.

B . Lebenslauf

Stephan Figge

geboren am 24.07.1972

Familienstand: ledig

Schulbildung

- 1978-1982 Besuch der Grundschule in der Vahr, Bremen
- 1982-1984 Besuch des Schulzentrums des Sekundarbereichs I
an der Carl-Goerdeler-Straße, Orientierungsstufe, Bremen
- 1984-1988 Besuch des Schulzentrums des Sekundarbereichs I
an der Carl-Goerdeler-Straße, gymnasialer Zweig, Bremen
- 1988-1991 Besuch des Schulzentrums des Sekundarbereichs II
an der Kurt-Schumacher-Allee, gymnasiale Oberstufe, Bremen
- 19.06.1991 Abitur, Leistungskurse Physik und Mathematik

Hochschulausbildung

- 01.10.1992 Beginn des Studiums an der Universität Bremen,
Studiengang Physik (Diplom)
- 19.10.1994 Vordiplom
- 1998 Diplomarbeit bei Prof. Dr. Hommel,
Institut für Festkörperphysik, Bereich Halbleiterepitaxie,
Universität Bremen
Thema: Photolumineszenzuntersuchungen an InGaN-Strukturen
- 12.01.1999 Diplom
- 1999-2003 Promotion am Institut für Festkörperphysik,
Bereich Halbleiterepitaxie, Universität Bremen

Danksagung

Die wohl wichtigste Voraussetzung, um ein so umfangreiches Projekt, wie die Realisierung einer Laserdiode, zu bewerkstelligen, ist die Zusammenarbeit in einem großen Team, in dem viele ihre kleinen und größeren Beiträge leisten. Daher geht der Dank an dieser Stelle an alle, die in den letzten Jahren zu dem Erfolg dieser Arbeit und dem wissenschaftlichen Fortschritt beigetragen und nicht zuletzt die erste Laserdiode aus Bremen zum Leuchten gebracht haben.

Hierzu hat vor allem die von Professor D. Hommel geschaffene, freie Arbeitsatmosphäre in der Arbeitsgruppe beigetragen, die es ermöglichte, die Forschungsschwerpunkte in einem weiten Bereich selbst zu setzen. Jedoch wurden wir auch immer wieder von ihm animiert, einen neuen Versuch für eine Laserdiode zu starten. Der Erfolg verwehrte ihm letztendlich einen längeren Aufenthalt an der Elfenbeinküste.

Doch nicht nur der Zusammenhalt in der Arbeitsgruppe, sondern auch die Kooperation im gesamten Institut mit den Arbeitsgruppen von Professor J. Gutowski, Professor P. L. Ryder und Professor J. Falta brachte notwendige Impulse für das Fortkommen der Arbeit. Ein besonderer Dank geht hierbei an Privatdozent P. Michler, der sich als Gutachter für diese Arbeit zur Verfügung gestellt hat.

Den wichtigsten Beitrag zu der Arbeit tragen jedoch die Kollegen und Studenten mit denen in direkter Zusammenarbeit die Forschung vorangetragen wurde. Als erstes sind hier alle MOVPE-Wachser zu nennen, die mit mir ein schlagfähiges Team bildeten. Gerade in der Anfangszeit waren Großteile der Arbeit sehr eng miteinander verflochten und die Proben flossen nur so von Hand zu Hand. Die Grundstützen dieses Teams wurden von Sven Einfeldt und Tim Böttcher gebildet, die nicht nur ein weites Wissen und treffende Analysen beitrugen, sondern auch als Freunde eine wertvolle Hilfe für diese Arbeit waren. Im weiteren trugen in diesem Team Marc Diesselberg und Jens Denmark, die sich um die AlGaIn-Deck- bzw. um die SiN-Zwischenschichten gekümmert haben, ihren Teil bei.

Die Laserdioden hätten ohne die Zusammenarbeit mit Christoph Zellweger nie ihre endgültige Form erreicht. Nur durch seine unermüdliche Optimierung der Technologie-Prozesse war es möglich, die Dioden zu mehr als nur zum Leuchten zu

bringen. Leider war der Fortschritt durch die weiten Wege der Proben nach Lausanne begrenzt. Immerhin für kurze Zeit konnten wir durch Christoph die schweizerische Lebensart erfahren, das Käse-Fondue wird einigen von uns in bleibender Erinnerung bleiben (ich hoffe der Abend ist nicht ganz ausgelöscht).

Einen wesentlichen Fortschritt zum Verständnis der Magnesium-Dotierung brachte die Zusammenarbeit mit Dr. Roland Kröger und Angelika Vennemann, die mir mit Hilfe der TEM-Untersuchungen zeigten, dass die Auswirkungen der Magnesium-Dotierung mehr als nur nulldimensional sind. Ohne diese Ergebnisse wäre die Optimierung der Dotierung nicht so schnell vorangeschritten.

Eine große Hilfe für die in dieser Arbeit vorgestellten Simulationen war mir Stefan Albensoeder, der mir das BLASen und sämtliche anderen Kniffe beibrachte.

Wertvoll war die Zusammenarbeit mit den vielen Leuten, die sich um die Charakterisierung der Proben gekümmert haben. Die Röntgen-Truppe hatten viel zu messen. Vielen Dank an Heidrun Heinke, Verena Kirchner, Rosa Chierchia und Claudia Rholder, mit denen mich auch viele Gespräche unter Frauen verbinden. Die elektrische Charakterisierung wurde in Studienarbeiten von Arne Gust und Kolja Beckmann vorangetrieben. Mit Stefan Strauf, Martin Vehse, Kathrin Sebald und Manfred Röwe bestand eine gute Zusammenarbeit mit den "Optikern".

Karlheinz Vennen-Damm, Denise Loske und Sonja Hesselmann sorgten dafür, dass die Maschinen bzw. die Chemie am Laufen blieben. Ohne diese Hilfe, die viel im Stillen verläuft, würden die Prozesse schnell zum Erliegen kommen.

Matthias Klude war mir stets ein guter Freund und Zimmerkammerad. Die Zusammenarbeit über die Materialgrenzen hinweg brachte Anregungen und machte Freude. Darüber hinaus hatten wir viele Gelegenheiten die Volleyball- und Nachtszene in Bremen unsicher zu machen.

Die Arbeitsgruppe wäre nicht komplett ohne die übrigen Mitstreiter. Einen Dank an alle, die mit mir die Zeit als Doktorand geteilt haben, auch wenn ich sie hier nicht alle nennen kann.

Die Arbeit ist nur ein Teil des Lebens und tritt in Wechselwirkung mit den vielen anderen Fassetten desselben. Dank daher an Barbara, Tobias, Max und Heike, mit denen ich mein Zuhause teile. Vielen Dank an meine Mutter für die orthographische und syntaktische Korrektur der Arbeit.

Als letztes gilt mein Dank meiner kleinen "Familie" die mich am Boden hielt. Heidi, schön ist die Zeit, die wir miteinander verbringen. Lluvia, Dir vielen Dank für die vielen kleinen Bilder, die Du für mich in der Zeit des Zusammenschreibens gemalt hast.

Synopsis of the thesis

The demand for higher recording densities in optical storage devices requires the development of semiconductor lasers with short wavelengths. This thesis deals with the realisation and simulation of GaN-based laser diodes with an emission wavelength of 400 nm.

One of the key issues is the reduction of the resistivity of the Magnesium doped epitaxial layers in order to achieve lasing in such devices. The p-type doping of GaN utilizing both metalorganic vapor phase deposition (MOVPE) and molecular beam epitaxy (MBE) is investigated. High room temperature hole concentrations of $4 \cdot 10^{18} \text{ 1/cm}^3$ have been achieved in samples grown by MBE. Compared to published data, these data belong to the best. The incorporation of Magnesium in these samples is limited by the desorption of Magnesium during growth. Therefore the doping is sensitive to the growth temperature. It could be shown that the incorporation of Magnesium can be enhanced by the use of a Hydrogen-Nitrogen mixed plasma. Nevertheless, these layers are compensated due to the formation of both Magnesium related planary defects and Hydrogen induced point defects. Therefore these layers exhibited high resistivities of $130 \text{ }\Omega\text{cm}$. The formation of pyramidal defects was realised to be the crucial factor in the limitation of p-type doping in MOVPE grown samples. The segregation of Magnesium on the growth surface is identified by transmission electron microscopy to be the driving force of defect formation. A rate equation model is employed and a defect formation criterion is established.

Gain guided GaN-based laser diodes were produced on sapphire substrates with a Magnesium doping level just below defect formation. These laser structures showed a light output power of up to 263 mW in pulsed operation mode. However, the driving parameters are limited due to the generation of joule heat to pulse lengths and duty cycles of 100 ns and 2 %, respectively.

The heat dissipation in the devices was simulated. These simulations are in good agreement with time dependent electroluminescence data collected in pulsed operation. The decay of luminescence intensity during the pulses is identified as a thermal activation process. Different laser structures were simulated and it was found, that the thickness of both p-contact metallization and substrate has a major influence on the thermal resistivity of the laser diodes.

The heat dissipation model has been extended by an electrical model based on the laplace equation. The influence of current spreading on the current densities in the active region of gain guided laser structures is investigated. The activation of carriers in the p-type layers and the reduction of the conductivity by phonon scattering in the n-type layers at elevated temperatures during operation has been identified to be the main reason for high threshold current densities of the gain-guided laser diodes.