


**Tosja K. Zywietz**

Thermodynamische und kinetische Eigenschaften von  
Galliumnitrid-Oberflächen

Weißensee **Verlag** 

---

# Inhaltsverzeichnis

---

<b>1</b>	<b>GaN: Nur ein weiterer III-V-Halbleiter?</b>	<b>5</b>
1.1	Technologische Bedeutung der Gruppe-III-Nitride . . . . .	5
1.2	Mikrostruktur und Wachstum . . . . .	7
1.3	Ziel der vorliegenden Arbeit . . . . .	9
1.4	Aufbau der Arbeit . . . . .	10
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>13</b>
2.1	Das quantenmechanische Vielteilchensystem . . . . .	13
2.2	Die Born-Oppenheimer-Näherung . . . . .	14
2.3	Die Dichte-Funktional-Theorie . . . . .	15
2.3.1	Die Theoreme der Dichte-Funktional-Theorie . . . . .	15
2.3.2	Die Kohn-Sham-Gleichungen . . . . .	16
2.3.3	Das Austausch-Korrelations Potential . . . . .	18
2.4	Das Gesamtenergieverfahren . . . . .	18
2.4.1	Verwendung von Pseudopotentialen . . . . .	18
2.4.2	Periodische Superzellen mit der Basis ebener Wellen . . . . .	21
2.4.3	Die Berechnung der Gesamtenergie . . . . .	23
2.4.4	Die Minimierung der Gesamtenergie . . . . .	24
2.4.5	Das „ebene Wellen“ Programm . . . . .	25
<b>3</b>	<b>Die Oberflächen von GaN</b>	<b>31</b>
3.1	Die Oberflächenenergie . . . . .	31
3.1.1	Chemische Potentiale: Grundlagen . . . . .	31
3.1.2	Die chemischen Potentiale von Ga, In, N, As, und O . . . . .	35
3.1.3	Die Druck- und Temperaturabhängigkeit der Oberflächenenergie . . . . .	36
3.1.4	Technische Details und Konvergenztests . . . . .	42
3.2	Gruppe-III-Nitride: Ein Vergleich mit GaAs . . . . .	44
3.2.1	Einführung: Die Mechanismen der Rekonstruktion . . . . .	44
3.2.2	Die unrekonstruierten GaN und GaAs Oberflächen . . . . .	45

3.3	Die atomare Struktur der GaN Oberflächen . . . . .	52
3.3.1	Die kubischen GaN Oberflächen . . . . .	52
3.3.2	Die wurzlit GaN-Oberflächen . . . . .	64
3.4	Zusammenfassung . . . . .	67
<b>4</b>	<b>Die Adsorption von Sauerstoff</b>	<b>71</b>
4.1	Thermodynamik der Adsorption . . . . .	72
4.1.1	Adsorptionsenergien . . . . .	72
4.1.2	Die elektronische Struktur der Sauerstoff-terminierten Oberflächen	79
4.2	Kinetik der Adsorption . . . . .	80
4.3	Zusammenfassung . . . . .	86
<b>5</b>	<b>Adatomdiffusion auf den GaN-Oberflächen</b>	<b>87</b>
5.1	Die Berechnung adiabatischer Potentialhyperflächen . . . . .	87
5.1.1	Einleitung . . . . .	87
5.1.2	Konvergenztests . . . . .	88
5.2	Diffusion auf der (001) Oberfläche . . . . .	90
5.3	Diffusion auf den polaren Wurtzitoberflächen . . . . .	93
5.4	Vergleich mit experimentellen Ergebnissen . . . . .	96
5.5	Zusammenfassung . . . . .	103
<b>6</b>	<b>Die Adsorption von Indium</b>	<b>105</b>
6.1	Wie kann ein Surfactant das Wachstum beeinflussen? . . . . .	106
6.2	Oberflächenenergien für ternäre Systeme . . . . .	108
6.3	Indium auf GaN (0001) und (000 $\bar{1}$ ) . . . . .	111
6.3.1	Experimentelle Arbeiten . . . . .	111
6.3.2	Der Einfluß von Indium auf die Oberflächenenergien . . . . .	113
6.3.3	Der Einfluß von Indium auf die Kinetik der (0001) Orientierung .	123
6.3.4	Ist Indium ein Surfactant? . . . . .	131
6.4	Ausblick . . . . .	133
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>135</b>
<b>8</b>	<b>Zukunftstrends</b>	<b>139</b>
8.1	Wohin geht die Entwicklung der Gruppe-III-Nitride? . . . . .	139

---

8.2	Aufgaben der Theorie . . . . .	140
<b>A</b>	<b>GaN Volumenrechnungen</b>	<b>141</b>
A.1	Gleichgewichtsgitterkonstante und Kohäsionsenergien . . . . .	141
A.1.1	Konvergenztest des Energie-Cutoffs . . . . .	142
A.1.2	Konvergenztest des $k$ -Punktsatzes . . . . .	142
A.1.3	Konvergenztest der Kohäsionseigenschaften . . . . .	143