

## Abstract

The investigation of non-polar III-V semiconductor surfaces by cross-section scanning tunneling microscopy (X-STM) and spectroscopy (X-STs) with and without laser excitation may reveal physical effects that could have a major impact on novel electrical devices, such as light-emitting diodes, lasers, and solar cells. For a quantitative analysis and hence the extraction of physical properties, a quantitative description of the tunnel current is needed, taking into account the tip-induced band bending and light-excited carriers.

Laser-excited X-STs on non-polar  $p$ -GaAs(110) surfaces show an increased tunnel current under illumination for negative sample voltages. For positive voltages, no difference between the current measured under illuminated and dark conditions is detectable. Qualitatively, this result is attributed to the generation of light-excited minority carriers (electrons), screening the electric field at the sample surface and tunneling from the sample into the tip at negative voltages. Here, a quantitative description of the tunnel current is developed, employing a finite-difference algorithm that solves not only the Poisson equation, but also the continuity equations of electrons and holes. Light-excited carriers are introduced in the electrostatic part of the calculation as well as in the derivation of the tunnel current by generation and recombination terms and a modified tunnel model, respectively. Using the irradiation of the laser beam as only fitting parameter for the current under illumination, good agreement between the measurement and the calculation is obtained, validating the accuracy of the developed model. Furthermore, it is found that the GaAs(110)  $C_3$  surface state can be charged by light-excited electrons, limiting the band bending.

Focusing on nitride-based semiconductors, X-STs on  $n$ -GaN( $10\bar{1}0$ ) surfaces and the application of the newly developed tunnel current simulation reveal a polarity depended Fermi level pinning: The intrinsic empty surface state in the fundamental band gap pins the Fermi level at small positive voltages only, but not at negative voltages. In equilibrium, the surface state is shifted below the Fermi energy by band bending for negative voltages. Hence, it is expected to be partially filled. However, in non-equilibrium, when electrons can tunnel from the surface state into the tip, one has to take into account the rates of the charging and discharging processes. It is found that the optical transition of electrons from the conduction band to the surface state (charging process) is prohibited by quantum mechanical selection rules due to the same orbital character of the surface state and the conduction band minimum. Hence, the surface state does not reach its equilibrium occupation and therefore does not pin.

Furthermore, InN layers grown on GaN(0001) are probed by combining the advantages of X-STM, X-STs, the simulation model, and transmission electron microscopy (TEM). The lattice mismatch of GaN and InN is found to be dissipated directly at the GaN/InN interface by introducing a dislocation network. As a result, the overgrown InN layer is of highest quality with a low defect concentration. On the  $m$ -plane cleavage surface, the interface dislocations induce steps in [0001] direction in the InN region. These steps lead to an extrinsic pinning of the Fermi level. An electron accumulation layer near the surface (previously observed on low-quality InN layers), induced by intrinsic surface states, is not observed on the high-quality samples. Thus, the electron accumulation layer is not an intrinsic property and hence InN appears to be as conventional as other III-V semiconductors.

## Abstract

Mittels Querschnitts-Rastertunnelmikroskopie (X-STM) und Spektroskopie (X-STs) mit und ohne Laseranregung können neue physikalische Eigenschaften untersucht werden, die großen Einfluss auf künftige elektronische Bauteile, zum Beispiel Leuchtdioden, Laser und Solarzellen, haben könnten. Eine quantitative Analyse und die Ermittlung von physikalischen Halbleitereigenschaften setzt eine quantitative Beschreibung des Tunnelstroms unter besonderer Berücksichtigung der spitzeninduzierten Bandverbiegung und der angeregten Lichtladungsträger voraus.

Unter Lasereinstrahlung wird auf nicht-polaren  $p$ -GaAs(110) Oberflächen bei negativen Probenspannungen ein erhöhter Tunnelstrom gemessen. Bei positiven Spannungen führt die Lasereinstrahlung zu keinem messbaren Unterschied. Qualitativ wird dies durch die Erzeugung von licht-angeregten Minoritätsladungsträgern (Elektronen) erklärt, die das elektrische Feld an der Probenoberfläche abschirmen und von der Probe in die Spitze tunneln. In dieser Arbeit wird eine quantitative Beschreibung des Tunnelstroms entwickelt. Zum Berechnen der Bandverbiegung und der Ladungsträgerkonzentrationen wird nicht nur die Poisson-Gleichung, sondern auch die Kontinuitätsgleichungen für Elektronen und Löcher durch eine Finite-Differenzen Methode gelöst. Über einen Generations- und Rekombinationsterm werden dem System licht-angeregten Ladungsträger zugeführt. Außerdem wird der Tunnelstrom über die Einführung von Quasi-Fermi Niveaus und Quasi-effektive Massen erweitert. Unter Verwendung der Lichtintensität als einziger Fit-Parameter wird eine gute Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung erreicht. Dies unterstreicht die Güte des physikalischen Modells. Zudem kann gezeigt werden, dass der  $C_3$  Zustand der GaAs(110) Oberfläche durch licht-angeregte Elektronen besetzt werden kann, wodurch die Bandverbiegung begrenzt wird.

Schwerpunkt von weiteren Untersuchungen sind Nitrid-Halbleiter. Mittels X-STs auf  $n$ -dotierten GaN(10 $\bar{1}$ 0) Oberflächen und der Anwendung der neu entwickelten Simulation konnte ein polaritätsabhängiges Pinning des Fermi Energie nachgewiesen werden: Der unbesetzte, intrinsische Oberflächenzustand (OZ) in der Bandlücke pinnt die Fermi Energie nur für kleine positive Probenspannungen, jedoch nicht für negative. Im Gleichgewicht wird der OZ bei negativen Spannungen durch die Bandverbiegung unter die Fermi Energie geschoben und damit partiell besetzt. Im Ungleichgewicht, also wenn Elektronen aus dem OZ in die Spitze tunneln, muss man die Auf- und Entladeraten des OZ berücksichtigen. Aufgrund der quantenmechanischen Auswahlregeln ist der optische Übergang von Elektronen aus dem Leitungsband in den OZ verboten. Somit erreicht der OZ seine Gleichgewichtsbesetzung nicht und kann daher auch nicht die Fermi-Energie pinnen.

Desweiteren werden InN Schichten auf GaN(0001) mittels X-STM, X-STs, der neu entwickelten Simulation und Transmissionselektronenmikroskopie untersucht. Die Gitterfehlpassung zwischen GaN und InN wird in einem Versetzungsnetzwerk direkt an der Grenzschicht abgebaut, wodurch hochqualitative InN-Schichten mit niedriger Defektkonzentration wachsen. Die Versetzungen an der Grenzschicht führen zu Stufen in [0001] Richtung auf der InN-Spaltoberfläche, die die Fermi-Energie pinnen. Eine Elektronen- Akkumulationsschicht an der InN(10 $\bar{1}$ 0) Oberfläche (wie zuvor in anderen InN Schichten gefunden) wird bei diesen hoch-qualitativen Proben nicht beobachtet. Dies zeigt, dass die Elektronen- Akkumulationsschicht keine intrinsische Eigenschaft von InN ist.