

Zusammenfassung

Mit einer direkten Bandlücke von ca. 3.4 eV ist GaN ein vielversprechendes Material für die Herstellung von blauen und grünen Leuchtdioden und Lasern. Die energetisch tiefstliegende und damit am einfachsten produzierbare Phase von GaN ist hexagonal. Noch gibt es jedoch beim Wachstum von hochwertigem hexagonalem Material Probleme, da das Fehlen geeigneter Substrate eine Vielzahl von ausgedehnten Defekten und oft rauhe Oberflächen hervorruft. Die Strukturen dieser Defekte und Oberflächen sowie ihr Einfluss auf die optischen Eigenschaften des Materials sind noch weithin ungeklärt. In der vorliegenden Arbeit werden strukturelle und elektronische Eigenschaften und die Bildungsenergien von Oberflächen und ausgedehnten Defekten in GaN in der hexagonalen Phase theoretisch untersucht. Insbesondere werden Versetzungen und Oberflächen in reiner Form sowie mit angelagertem Sauerstoff charakterisiert. Die verwendeten Verfahren basieren auf der Dichtefunktionaltheorie und ermöglichen eine Beschreibung mit bestmöglicher Genauigkeit.