

Wzrost i domieszkowanie półprzewodników w procesach z fazy gazowej - analiza ab initio

1. Cel projektu

Celem projektu badawczego "Wzrost i domieszkowanie półprzewodników w procesach z fazy gazowej - analiza ab initio" jest sformułowanie i weryfikacja nowej hipotezy dotyczącej natury wzrostu półprzewodnikowych kryształów i warstw w celu otrzymania molekularnego obrazu wzrostu, domieszkowania i efektów surfaktantów. Podstawą do sformułowania modelu będzie ostatnio odkryty wkład od transferu ładunku do energii adsorpcji różnych substancji na powierzchniach różnych półprzewodników. Zmiana energii związana z transferem elektronów może osiągnąć wielkość kilku elektronowoltów, przy czym wielkość efektu zależy od położenia poziomu Fermiego. Otrzymane wyniki badań wstępnych sugerują, że wzrost zachodzi w wąskim przedziale składów adsorbentu, odpowiadających stanowi spełniającemu regułę liczenia elektronów (ECR). Jednak jest to wyłącznie hipoteza badawcza, sformułowana dla przypadku adsorpcji wodoru, który nie jest składnikiem bezpośrednio biorącym udział w krystalizacji. Dlatego symulacje wielkiej skali, przy zastosowaniu dużych slabów zostaną użyte dla wyjaśnienia związku poziomu Fermiego ze zjawiskami domieszkowania oraz wpływu surfaktantów.

Dynamiczny aspekt transferu ładunku będzie związany z konwersją energii kinetycznej na energię cieplną drgań sieci. Hipoteza badawcza użyta w sformułowaniu tego projektu zakłada, że termalizacja zachodzi na skutek silnego odejścia układu od przybliżenia Borna-Oppenheimera podczas szybkich procesów zderzenia adsorbentu z powierzchnią. Procesy te mogą odgrywać kluczową rolę w konwersji energii kinetycznej na energię cieplną. Stabilizuje to adsorbat na powierzchni, co jest ważne dla wbudowywania domieszek podczas wzrostu. Podsumowując, projekt posłuży do sformułowania molekularnego obrazu wzrostu, domieszkowania oraz wpływu surfaktantów.

2. Zadania badawcze

Następujące zadania badawcze zostaną wykonane podczas realizacji projektu:

- 1. Wyznaczenie struktury stanów kwantowych na wybranych, podstawowych, czystych powierzchniach półprzewodników, w tym GaN, AlN, InN, SiC oraz ZnO.*
- 2. Wyznaczenie stabilnych konfiguracji molekuł, rodników i atomów w tym również domieszek, na powierzchniach wybranych półprzewodników.*
- 3. Wyznaczenie stanów kwantowych związanych z adsorpcją wybranych cząsteczek na powierzchniach półprzewodników, w tym adsorpcji molekularnej i dysocjatywnej.*
- 4. Zastosowanie rozszerzonej reguły liczenia elektronów (extended electron counting rule - EECR) dla określenia obszarów związanych z określonym położeniem poziomu Fermiego*
- 5. Intensywne badania adsorpcji w celu weryfikacji przewidywań otrzymanych przy pomocy reguły EERC. Określenie podstawowych parametrów dynamicznych procesów związanych z transferem ładunku do i od powierzchni*
- 6. Określenie zależności termodynamicznych dla układów badanych w projekcie*

3. Uzasadnienie podjęcia tematyki badawczej

Rezultaty otrzymane w projekcie pozwolą wyznaczyć zależność szybkości wzrostu oraz wbudowywania domieszek i efektów surfaktantów od elektronowych własności powierzchni i wnętrza kryształów półprzewodnikowych. Oznacza to, że w przypadku powierzchni ze spinningowanym poziomem Fermiego, występuje zależność od rodzaju stanu powierzchniowego pinningującego. Wpływa to na procesy adsorpcji, wzrostu kryształów i warstw oraz wbudowywania domieszek.

Pełny, atomowy obraz wzrostu półprzewodników nie został dotychczas opracowany. Jedyne proponowane wyjaśnienia zakładają uwzględnienie wyłącznie własności objętościowych, zaniedbując własności powierzchniowe, i dlatego te modele nie mają zdolności przewidywania wyników procesów domieszkowania podczas wzrostu.

Proponowane wyjaśnienie jest pierwszym modelem opisującym procesy domieszkowania podczas wzrostu i epitaksji półprzewodników. Procesy te są podstawą technologiczną technologii informacyjnych współczesnej cywilizacji. Dlatego sformułowanie proponowanego modelu i jego weryfikacja może mieć wpływ na rozwój technologii przyszłości.