

Termodynamika ab initio i inżynieria defektów punktowych w nanometrycznych obszarach przypowierzchniowych półprzewodników azotkowych

Jedną z kluczowych umiejętności w rozwoju technologii półprzewodnikowych jest zdolność do wytwarzania kryształów i warstw o doskonałej jakości strukturalnej i określonych właściwościach elektrycznych i optycznych. Niestety, jak to w prawdziwym świecie bywa, nic nie jest doskonałe, w każdej strukturze krystalograficznej występują pewne defekty. Defekty punktowe występują, gdy brakuje atomu lub znajduje się on w nieregularnej pozycji w strukturze sieci, a także gdy w sieci znajdują się jakiegokolwiek obce atomy. Wszystkie defekty punktowe w kryształach podlegają podstawowym zasadom termodynamiki. Określona liczba obcych atomów zawsze wbudowuje się do materiału, albo w sieci krystalicznej powstają puste przestrzenie (wakanse). Musimy jednak znaleźć sposób na radzenie sobie z tymi wadami. Modelowanie teoretyczne, w tym analizy termodynamiczne dotyczące defektów w materiałach są wysoce zalecane i oczekiwane przez eksperymentatorów. Niestety ilościowa, a czasami nawet jakościowa, zgodność koncentracji defektów przewidywanych w modelach teoretycznych z rzeczywiście obserwowanymi ilościami defektów nadal wymaga poprawy. Powszechnie wiadomo, że w eksperymentach obserwuje się silną zależność koncentracji defektów punktowych od orientacji krystalograficznej powierzchni na której prowadzony jest wzrost. Natomiast większość modeli teoretycznych bazuje na równowagowym modelu objętościowym. Pionierski aspekt naszego projektu będzie polegał na analizie zachowania wybranych defektów punktowych w nanometrycznych obszarach najbliższych powierzchni. W tym obszarze następuje złamanie symetrii translacyjnej sieci krystalicznej i pojawiają się silne interakcje między stanami kwantowymi defektów a stanami powierzchniowymi. To zagadnienie jest z pewnością niewypełnioną niszą, którą widzimy na polu badań teoretycznych dotyczących defektów punktowych w azotkach metali grupy III. Procesy zachodzące w kilku pierwszych warstwach atomowych znajdujących się najbliższej powierzchni są zdecydowanie jednym z kluczowych czynników wpływających na wbudowywanie domieszek i mechanizm tworzenia wakansów. Zaplanowane zadania dostarczą informacji, które nie są łatwo dostępne w typowych eksperymentach wzrostu materiałów półprzewodnikowych, np. związek między mikroskopowym stanem powierzchni a możliwością wprowadzenia obcych atomów do kryształu.

Badania będą prowadzone w oparciu o obliczenia kwantowo-mechaniczne z pierwszych zasad oraz prawa fizyki statystycznej i termodynamiki. Zaplanowane zadania dostarczą informacji o zjawiskach zachodzących na poziomie atomowym. Chcemy wyznaczyć profile energetyczne atomów domieszek i wakansów, począwszy od powierzchni, a skończywszy na objętości kryształu. Dodatkowo chcemy wyznaczyć zmianę tych energii w funkcji temperatury w oparciu o wyliczone widma oscylacyjne defektów. Wtedy będziemy mogli wyznaczyć zmiany energii swobodnej Gibbsa każdego analizowanego układu i zbudować termodynamiczny model stabilności defektów w warstwie przypowierzchniowych. W ramach projektu zamierzamy zbadać zachowanie się kilku ważnych z technologicznego punktu widzenia domieszek: germanu, magnezu i węgla oraz luk sieciowych. Kontrolowanie tych domieszek ma kluczowe znaczenie dla uzyskania wysokiej jakości materiału o przewodnictwie typu n (elektronowego), typu p (dziurowego) i materiału nieprzewodzącego. Ważnym aspektem będą również badania termodynamiki i właściwości elektronowych azotku galu domieszkowanego atomami pierwiastków z grupy V: arsenem i fosforem oraz ich kodomieszkowania z magnezem. Ten ostatni aspekt rozważa się w kontekście poprawienia w GaN przewodnictwa typu dziurowego. Chcemy zidentyfikować zasady wyboru preferowanego położenia sieciowego defektów punktowych przy powierzchni, które w ogólności może być inne niż miejsce w głębokiej objętości materiału. Planujemy porównać właściwości elektroniczne i energie tworzenia tych samych defektów przy powierzchniach o różnych orientacjach krystalograficznych i w warunkach wzrostu różnymi metodami epitaksjalnymi.

Jesteśmy przekonani, że badania zaproponowane w tym projekcie będą znakomitym rozszerzeniem dotychczasowych modeli wbudowywania defektów punktowych. Nasze badania dostarczą danych, które można będzie wykorzystać w zaawansowanych modelach opartych na algorytmach uczenia maszynowego. Po zintegrowaniu całej tej wiedzy będzie ją można później z powodzeniem wykorzystać w eksperymentach, albo do kontrolowania rodzaju i koncentracji defektów punktowych podczas procesów wzrostu, albo do planowania coraz bardziej wyrafinowanych procesów wygrzewania po wzroście.