

**VILNIAUS UNIVERSITETAS**  
**FIZIKOS FAKULTETAS**  
**PUSLAIDININKIŲ FIZIKOS KATEDRA**

Marek Kolenda

**InN/GaN *N-P* STRUKTŪRŲ AUGINIMAS MOVPE BŪDU IR  
TYRIMAI**

Magistrantūros studijų baigiamasis darbas

Studijų programa – Optoelektronikos medžiagos ir technologijos

Studentas: Marek Kolenda.....

Darbo vadovas: Dr. Arūnas Kadys.....

Recenzentas: Doc. Saulius Nargelas.....

Katedros vedėjas: Prof. Habil. Dr. Gintautas Tamulaitis.....

Vilnius 2017

# Turinys

Įvadas .....	2
1. Darbo užduotys .....	3
2. III – V grupės puslaidininkiai.....	4
2.1. III grupės nitridiniai puslaidininkiai: Struktūrinės savybės.....	4
2.2. III grupės nitridiniai puslaidininkiai: Cheminės savybės .....	6
2.3. III grupės nitridiniai puslaidininkiai: Energetinės savybės .....	7
2.4. InN savybės ir auginimas MOVPE būdu .....	9
3. P-N sandūros .....	16
3.1. Vienalytė sandūra (Homosandūra).....	16
3.2. Vienalytės p-n sandūros voltamperinė (VAch) charakteristika.....	18
3.3. Įvairiatarpė sandūra (heterosandūra) ir jos voltamperinė charakteristika .....	20
4. MOCVD (MOVPE) technologija.....	23
5. Charakterizavimo metodikos.....	25
5.1. Rentgeno spindulių difrakcinė analizė (XRD – X-ray diffraction).....	25
5.2. Skenuojanti elektronų mikroskopija (SEM – Scanning Electron Microscopy) .....	26
5.3. Elektronų pluoštelio indukuotos srovės metodas (EBIC – Electron Beam Induced Current).....	27
5.4. Rentgeno spindulių energijos dispersijos spektroskopija (EDX – Energy Dispersive X-ray spectroscopy).....	28
5.5. Krūvininkų koncentracijos ir judrio nustatymas Holo (Hall) metodu naudojant Van der Pauw kontaktų geometriją.....	29
5.6. NextNano <sup>3</sup> programinė įranga.....	31
6. InN/GaN n-p struktūros auginimas MOVPE būdu .....	33
7. InN/p-GaN sandūros struktūrinė analizė .....	35
7.1. InN/p-GaN struktūrų Rentgeno spindulių difrakcijos matavimai (XRD) .....	35
7.2. InN sluoksnio paviršiaus morfologija .....	37
7.3. InN/GaN n-p struktūros sauso ėsdinimo rezultatai .....	41
8. InN/GaN n-p struktūros elektriniai matavimai.....	45
Išvados ir pagrindiniai rezultatai .....	51
Literatūra .....	52
Summary .....	58
Padėka .....	59
Moksliniai pasiekimai .....	60

## Ivadas

Pastaraisiais metais indžio nitridas (InN) tampa vis populiareesnė medžiaga optoelektronikos (šviestukai, lazeriniai diodai, saulės elementai, detektoriai, teraheciniai emiteriai ir detektoriai) ir elektronikos (didelio elektronų judrio tranzistoriai) srityje dėka tokių savybių kaip didelio elektronų judrumo ir dreifo greičio, mažos elektronų efektinės masės [1,2]. Pagrindinė savybė, kuri yra labai vertinga tai, kad InN yra tiesiatarpis puslaidininkis [3]. Tai reiškia, kad ši medžiaga gali būti efektyvus optinės spinduliuotės šaltinis arba detektorius. Šios medžiagos draustinis tarpas yra apie  $0,7 \text{ eV}$  [4]. Maišant InN su kitais III – grupės nitridiniais puslaidininkiais, tokiais kaip galio nitridas (GaN;  $E_g = 3,4 \text{ eV}$  [5]) arba aliuminio nitridas (AlN;  $E_g = 6,04 \text{ eV}$  [5]), galima sudaryti trinarus, ar keturnarius junginius. Priklausomai nuo indžio (In) koncentracijos indžio galio nitride (InGaN) arba aliuminio indžio nitride (AlInN) galima parinkti draustinių energijų tarpo vertes taip, kad jos apimtų visą regimosios šviesos spektrą. Dėl to atsiranda galimybė gaminti šviestukus, ar detektorius visam regimosios šviesos spektro ruožui.

Auginti kokybiškus InN arba InGaN sluoksnius, turinčius didelę In koncentraciją, yra sudėtinga [6,7]. Visų pirma InN sluoksnio disociacijos temperatūra, palyginus su GaN arba su AlN, yra žema (apie  $600 \text{ }^\circ\text{C}$ ). Auginimo metu viršijus šią temperatūrą sluoksnis pradeda intensyviai garuoti. Greičiausiai iš InN sluoksnio garuoja azotas (N), nes jo pusiausvirasis garų slėgis virš InN yra didelis [1,7]. Susidaro azoto trūkumas, o In atomai dėl difuzijos pradeda segreguotis ir jungtis į metalo lašelius. Todėl tiekiamo į reaktorių amoniako srautas turi būti didelis tam, kad kompensuotų azoto trūkumą. Antra, tokiose žemose temperatūrose sumažėja metaloorganinių (MO) pirmtakų bei amoniako ( $\text{NH}_3$ ) skilimo efektyvumas. Neskilusios MO pirmtakų molekulės su  $\text{NH}_3$  molekulėmis gali sudaryti aduktus (angl. *adduct*), nusėsti ant padėklo ar auginamo sluoksnio paviršiaus ir suformuoti defektą [8]. Trečia, nėra tinkamų padėklų ant kurių galima būtų auginti neįtemptą InN sluoksnį. Pvz., gardelių nesutapimas tarp InN ir safyro yra 25%. Auginant InN ant buferinio GaN sluoksnio gardelių nesutapimas yra sumažinamas iki ~13% [7]. Ketvirta problema yra didelis elektronų tankis InN sluoksniuose. Nekokybiškuose InN sluoksniuose elektronų tankis gali sekti net  $10^{21} \text{ cm}^{-3}$  [9]. Kokybiškuose InN sluoksniuose, kurie užauginti metaloorganinių garų nusodinimo būdu (angl. *Metalorganic Vapor Phase Epitaxy* - MOVPE) mažiausias pasiektas elektronų tankis šiuo metu yra apie  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , o auginant molekulinį pluoštelių epitaksijos būdu (angl. *Molecular Beam Epitaxy* - MBE) mažiausias pasiektas elektronų tankis –  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . Esant tokiems dideliems elektronų tankiams užauginti InN sluoksniai visada yra n – tipo, dėl ko sunku yra užauginti p – tipo laidumo InN sluoksnius [10].

Šio darbo tikslas buvo užauginti InN/GaN  $n$ - $p$  struktūrą naudojant optimizuotus InN auginimo parametrus, esant skirtingam  $p$ -tipo GaN sluoksnio storiui ir ištirti šio darinio struktūrinės ir elektrinės savybes.

## 1. Darbo užduotys

1. Užauginti InN/GaN  $n$ - $p$  struktūras esant skirtingam  $p$ -tipo GaN sluoksnio storiui.
2. Ištirti užaugintų darinių struktūrinės savybes naudojant rentgeno spindulių difrakcijos (XRD) ir skenuojančios elektronų mikroskopijos (SEM) metodus.
3. Ištirti užaugintų darinių elektrinės savybes išmatuojant  $n$ -InN ir  $p$ -GaN sluoksnių krūvininkų koncentraciją ir jų judrį Van der Pauw metodu,  $n$ - $p$  struktūros voltamperinę charakteristiką, bei naudojant elektronų pluoštelio indukuotos srovės (EBIC) metodą įvertinti  $n$ - $p$  struktūros krūvininkų atskyrimo zoną.

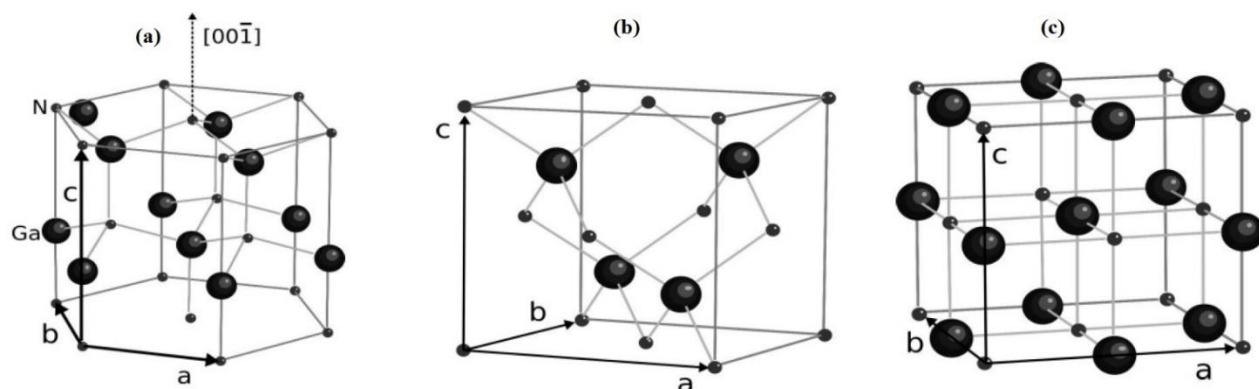
## 2. III – V grupės puslaidininkiai

Puslaidininkiais įprastai yra vadinamos tokios medžiagos, kurios turi draustinę energijų tarpą  $E_g$  ir kurias įmanoma legiruoti donorinėmis ir akceptorinėmis priemaišomis taip, kad šių priemaišų dėka būtų sukurtos laisvųjų elektronų ir skylių sistemos [11]. Plačiatarpiais puslaidininkiais vadinamos neorganinės puslaidininkinės medžiagos, kurių draustinių energijų tarpas didesnis nei 2 eV. Dėl šių savybių per pastaruosius kelis dešimtmečius plačiatarpių puslaidininkių sąvoką imta vis labiau taikyti medžiagoms, kurios anksčiau buvo laikomos dielektrikai: deimantas ( $E_g = 5,5$  eV), aliuminio nitridas ( $E_g = 6,2$  eV).

Plačiatarpiai puslaidininkiai yra sudėtinės medžiagos, todėl jų draustinių energijų tarpas pirmiausiai priklauso nuo kristalo sudėties. Dvinariuose III/V grupės junginiuose (GaN, AlN, InN, BN)  $E_g$  lemia stochiometrinė kristalo sudėtis (III grupės elementų kiekis yra lygus V grupės elementų kiekiui). Trinariuose (AlGaIn, InGaIn, BGaIn) ir keturnariuose (AlGaInN) junginiuose  $E_g$  galima keisti keičiant kristalo sudėtyje esančių elementų santykį. Tokių puslaidininkių auginimui galima taikyti draustinių energijų tarpo inžineriją – auginti puslaidininkinius sluoksnius su norimu  $E_g$  ir iš tokių sluoksnių formuoti heterosandūrinius darinius, kuriuose  $E_g$  gretimuose sluoksniuose yra skirtingi.

### 2.1. III grupės nitridiniai puslaidininkiai: Struktūrinės savybės

III grupės nitridiniai puslaidininkiai išskyrus BN yra joniniai kristalai. III grupės elementų atomas gali atiduoti savo tris valentinius elektronus azoto atomui ir tapti katijonu. Azoto atomas prisijungęs tris elektronus tampa anijonu. Šių atomų koordinacija yra tetraedrinė - kiekvienas atomas turi keturis artimiausius kaimynus, kurie yra išsidėstę tą atomą supančio taisyklingo tetraedro viršūnėse. Tokia koordinacija susidaro dėl to, kad s ir p orbitalės išoriniuose atomų sluoksniuose sąveikauja ir sudaro hibridines  $sp^3$  orbitales [11]. Priklausomai nuo auginimo sąlygų III grupės nitridiniai puslaidininkiai (GaN, AlN, InN, BN ir jų lydiniai) gali kristalizuotis į viurcito (wurtzite), kubinę arba žėručio tipo kristalines gardeles [12]. Jų pavyzdžiai yra pateikti 2.1 paveiksle. Viurcito tipo kristalinė gardelė susiformuoja auginant kristalus epitaksiniu būdu ant safyro, SiC arba GaN padėklų. Auginant nitridinius puslaidininkius ant GaAs, Si ir MgO padėklų ir parinkus specifines auginimo sąlygas, susiformuoja žėručio tipo kristalinė gardelė [13, 14]. Išskirtiniu atveju žėručio tipo gardelę galima gauti žematemperatūriniame GaN nukleaciniame sluoksnyje auginant ant safyro padėklo [14].



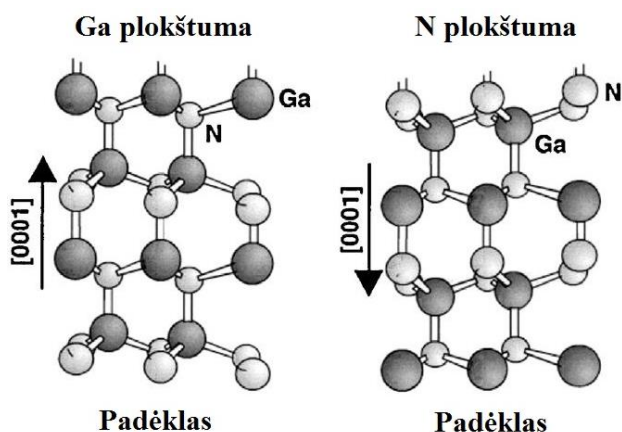
2.1 paveikslas. III grupės nitridinių puslaidininkių kristalinės gardelės. a) viurcito tipo; b) žėručio tipo; c) kubinė [13].

Lentelėje 1 yra pateiktos III grupės nitridinių puslaidininkių struktūrinių parametrų vertės. Gardelės  $c$  ir  $a$  parametrų santykis parodo kristalo gardelės tipą. Jei šis santykis  $c/a$  yra 1,633, tada kristalo gardelė yra idealaus viurcito tipo [18, 19]. AlN, GaN ir InN  $c/a$  santykiai yra artimi 1,633 vertei.

Lentelė 1. III grupės nitridinių puslaidininkių struktūriniai parametrai 300 K temperatūroje [14].

Parametras	AlN	GaN	InN
Gardelės konstanta $a$ (nm)	0,3112	0,3189	0,3533
Gardelės konstanta $c$ (nm)	0,4982	0,5185	0,5693
$c/a$ santykis	1,6009	1,6259	1,6114
Katijono spindulys (nm)	0,039	0,047	0,079
Medžiagos tankis ( $\text{g/cm}^3$ )	3,32	6,15	6,81

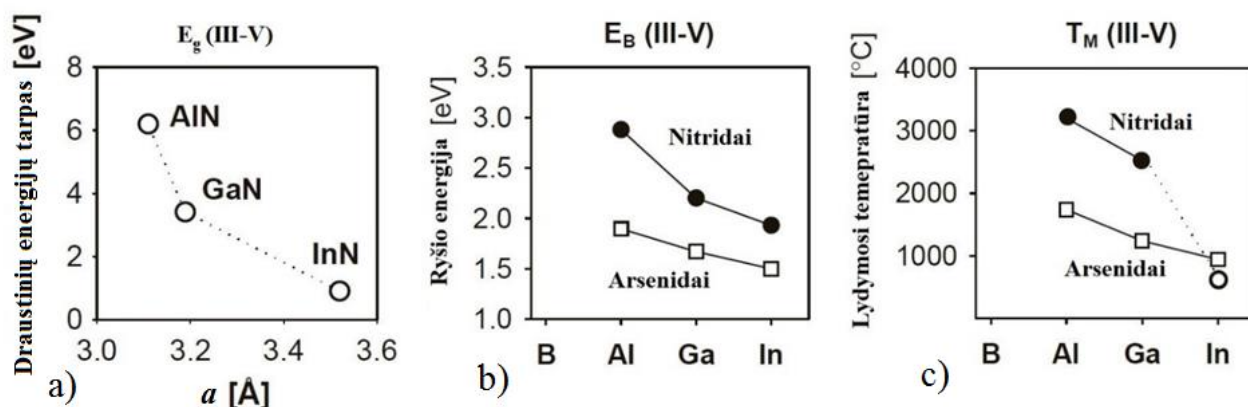
Nitridiniams puslaidininkiams yra būdinga spontaninė gardelės poliarizacija. Ši poliarizacija atsiranda dėl to, jog struktūra susideda iš dvigubų sluoksnių, kuriuose anijonai yra pasislinkę statmena kryptimi vienos iš katijonų plokštumų atžvilgiu. Dėl to kryptys  $[0001]$  ir  $[000-1]$  heksagoniniame kristale nėra ekvivalentiškos. Paveiksle 2.2 Ga atomai pavaizduoti juodais rutuliukais, o N atomai – baltais. GaN kristalas auga statmena padėklui kryptimi. Priklausomai nuo to, koks bus sluoksniu poliškumas - su galio paviršiumi (*Ga-face*) ar azoto paviršiumi (*N-face*), nuo to priklausys kristalo mechaninės ir cheminės savybės.



2.2 paveikslas. Ga ir N poliškumo sluoksniai [14].

## 2.2. III grupės nitridiniai puslaidininkiai: Cheminės savybės

Ga, Al ir In nitridiniai puslaidininkiai turi jonines jungtis. BN į šią grupę nepatenka, kadangi boras yra pusmetalas. L. Pauling sudaryta lentelė leidžia įvertinti medžiagos joniškumą (angl. *ionicity*) ir cheminės jungties tipą [15]. Kuo cheminė jungtis joniškesnė, tuo yra didesnis joniškumo skaičius (maksimali vertė 100%). Elektroneigiamumas yra atomo savybė, kuri apibrėžia kaip stipriai atomas gali pritraukti elektroną. III grupės nitridiniai puslaidininkiai turi 31 ÷ 40 % joniškumą (GaN – 31%, InN – 32%, AlN – 40%). Kaip pavyzdys, III grupės arsenidinių puslaidininkių joniškumas yra mažesnis nei 8%. Dėl skirtingų joniškumo faktorių skiriasi III grupės puslaidininkių fizikinės savybės (žiūrėti paveikslą 2.3).



2.3 paveikslas. Draustinių energijų tarpo priklausomybė nuo gardelės konstantos  $a$  (a), ryšio energijos ir lydymosi temperatūros priklausomybės (atitinkamai b) ir c)) nuo III- grupės elementų [16].

III grupės nitridinių puslaidininkių ryšio energijos ir lydymosi temperatūros yra [16]:

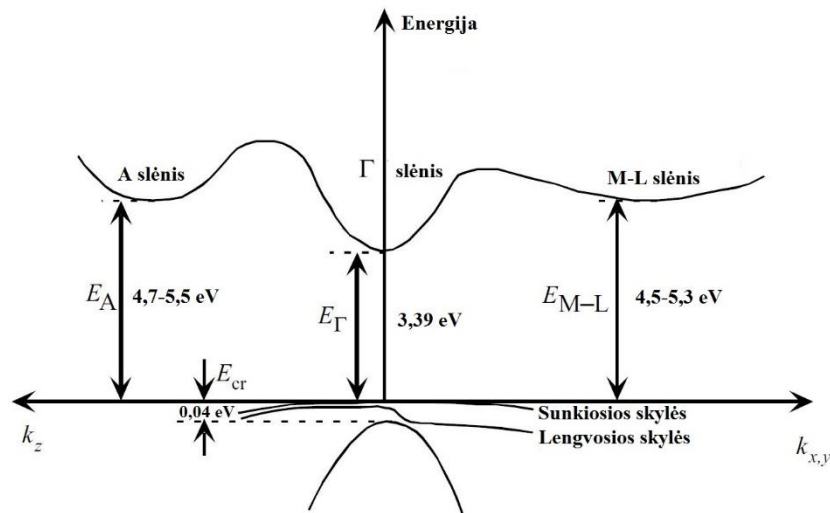
- InN –  $E_B = 1,93$  eV, 550°C temperatūroje sublimuoja;

- GaN –  $E_B = 2,2 \text{ eV}$ ,  $T_M = 2500^\circ\text{C}$ ;
- AlN –  $E_B = 2,88 \text{ eV}$ ,  $T_M = 3200^\circ\text{C}$ .

Aukščiau pateikti fizikiniai medžiagų parametrai paveikia šių medžiagų energetinius parametrus. Pavyzdžiui, InN yra auginamas žemesnėje nei  $800^\circ\text{C}$  temperatūroje tam, kad nesublimuotų. Tuo tarpu AlN ir GaN dėl tokių aukštų lydymosi temperatūrų yra auginami didesnėje nei  $1000^\circ\text{C}$  temperatūroje. AlN ir GaN dėl minėtų parametru yra termiškai ir chemiškai labai stabilios medžiagos.

### 2.3. III grupės nitridiniai puslaidininkiai: Energetinės savybės

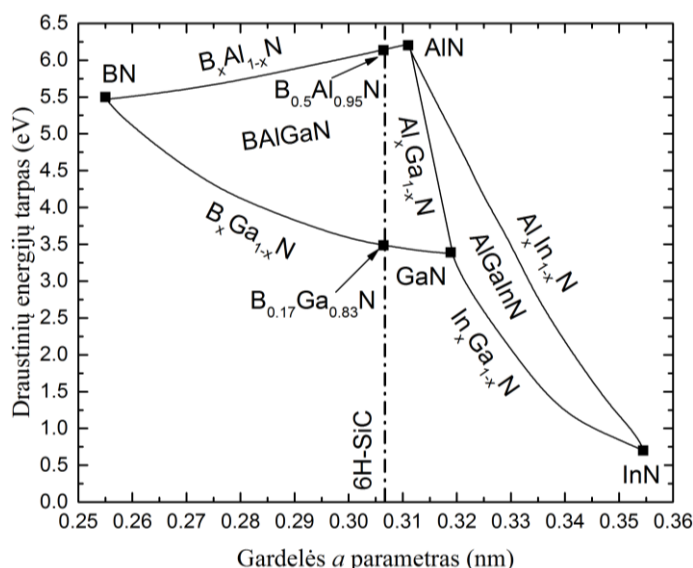
GaN, AlN, InN BN ir jų trinariai bei keturnariai junginiai yra tiesiatarpiai puslaidininkiai. Viurcito struktūros dispersinės kreivės pateiktos 2.4 paveiksle.



2.4 paveikslas. Viurcito struktūros GaN dispersinės kreivės ir jų parametrai 300 K temperatūroje [17].

GaN kristaluose draustinių energijų tarpą atitinka energijų skirtumas tarp laidumo ir valentinės juostos Briliueno zonos centriniame taške  $\Gamma$  ( $k = 0$ ). Viurcito struktūros GaN kristaluose taške  $k = 0$  valentinė juosta yra neišsigimusi ir suskilusi į tris pajuostas. Pirmosios dvi - sunkiųjų ir lengvųjų skylių juostos atsiranda dėl spinorbitinės sąveikos  $k_x$ ,  $k_y$  erdvėje.  $k_z$  ( $c$  - kryptimi) skylimas tarp sunkiųjų ir lengvųjų skylių beveik išnyksta. Trečia pajuostė atsiranda dėl viurcito tipo heksagionės simetrijos ir sąveikos su kristaliniu lauku [11, 17]. Trečiosios pajuostės skilimas yra stebimas tik viurcito struktūros nitridiniuose puslaidininkiuose.





2.5 paveikslas. Draustinių energijų tarpo priklausomybė nuo kristalinės gardelės  $a$  konstantos III-os grupės nitriduose ir jų trinariuose lydiniuose [18].

Paveiksle 2.5 pateikta draustinių energijų tarpo pločio priklausomybė nuo kristalinės gardelės konstantos  $a$  III-os grupės nitriduose ir jų trinariuose lydiniuose. Į GaN kristalą įterpus aliuminio, indžio arba boro atomus, galima sudaryti trinarus arba keturnarius lydiniai. Keičiant šių elementų koncentracijas lydinyje galima keisti draustinių energijų tarpo plotį nuo 0,7 eV (In) iki 6,2 eV (AlN). Dėl šios savybės pastaroji medžiagų grupė yra perspektyvi optoelektronikos technologijų srityje. Pastaruoju metu yra atliekami BN auginimo eksperimentai ir fizikiniai tyrimai, kadangi vis dar nėra tiksliai nustatytas šios medžiagos draustinių energijų tarpas. Literatūroje yra pateikiamos nuo 4,5 eV iki 5,5 eV draustinių juostų tarpo vertės [19].

Draustinis tarpas netiesiškai priklauso nuo trinarių ir keturnarių AlInGaN junginių sudėties. Trinariams junginiams šią priklausomybę galima aprašyti empirine formule:

$$E_g^{AB} = (1 - x)E_g^A + xE_g^B + bx(1 - x), \quad (1)$$

kur  $E_g^A$  ir  $E_g^B$  yra maišomų tarpusavyje binarinių junginių draustiniai tarpai, o  $b$  – išlinkio parametras (angl. *bowing parameter*), nuo kurio priklauso šios funkcijos nuokrypis nuo tiesinės priklausomybės. Literatūroje pateikiamos šio parametro vertės nesutampa gana plačiame intervale. Labai tikėtina, kad parametras  $b$  priklauso nuo epitaksinio sluoksnio auginimo sąlygų, todėl ir atsiranda toks skirtinguose bandiniuose nustatytų verčių nesutapimas [20].

Puslaidininkiuose draustinių energijų tarpas priklauso nuo temperatūros. Kylant temperatūrai didėja vidutinis atstumas tarp atomų kristale, todėl draustinis tarpas mažėja. Žemesnėse nei 30 K temperatūrose draustinis tarpas keičiasi silpnai, nes santykinis vidutinio atstumo padidėjimas, palyginti su atstumu tarp atomų yra nedidelis. Aukštesnėse temperatūrose tarpo mažėjimas pasidaro

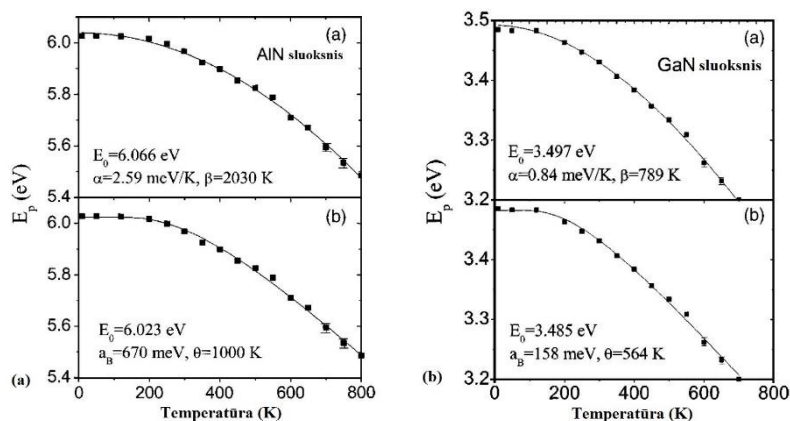
spartesnis ir kambario temperatūroje daugumoje puslaidininkių jis yra apie 0,4 meV/K [11]. Tiksliai aprašyti draustinio tarpo priklausomybę nuo temperatūros yra sudėtinga, todėl dažnai naudojama empirinė Varshni formulė [21]:

$$E(T) = E(T = 0) - \frac{\alpha T^2}{(T - \beta)}, \quad (2)$$

kur  $E(T = 0)$  yra draustinių juostų tarpas 0 K temperatūroje, o  $\alpha$  ir  $\beta$  – Varshni aproksimacijos parametrai. Taip pat aproksimuoti galima su išraiška panašia į Bose – Einstein formulę, aprašančia dalelių pasiskirstymą:

$$E(T) = E(T = 0) - a \left( \exp\left(\frac{\theta}{T}\right) - 1 \right)^{-1}, \quad (3)$$

čia  $a$  ir  $\theta$  – aproksimacijos parametrai. Paveiksle 2.6 (a, b) yra parodyta GaN ir AlN draustinio juostos tarpo priklausomybė nuo temperatūros. Šios priklausomybės buvo aproksimuotos formulėmis (2) (pav. 2.6 (a)) ir (3) (pav. 2.6 (b)) [22].



2.6 paveikslas. AlN (a) ir GaN (b) sluoksnių  $E_g$  priklausomybė nuo  $T$  [22].

## 2.4. InN savybės ir auginimas MOVPE būdu

InN kristalas turi viurcito tipo kristalinę gardelę, nes toje konfigūracijoje InN yra termodinamiškai stabilus. Buvo padaryta labai daug InN auginimo eksperimentų ir visi rezultatai buvo skirtingi, bet visi jie tilpdavo į galimų InN gardelės parametų verčių intervalą. Šio intervalo ruožai yra  $a = (3,501 \div 3,536)$  Å ir  $c = (5,690 \div 5,705)$  Å. Naujesniuose darbuose irgi nėra visiško konsensuso dėl InN kristalinės gardelės parametų, bet visos vertės patenka į jau minėtą gardelės parametų intervalą. Dažniausiai literatūroje sutinkamos gardelės parametro  $c$  vertės yra 5,693 Å arba 5,705 Å, o  $a$  yra 3,533 Å arba 3,54 Å [14, 23, 24]. Buvo aiškinamasi, kodėl InN kristalinės gardelės parametrai taip skiriasi ir prieita išvados, kad jie labai priklauso nuo InN sluoksnio kristalinės kokybės

ir nuo priemaišų (galimai deguonies (O)) įterpimo [25]. Hipotezė, kad deguonies atomai galėjo sukelti gardelės parametrų kitimą buvo atmesta. Buvo pasiūlyta, kad gardelės parametrai gali fliukuoti dėl per didelio kiekio azoto (N) užaugintuose InN sluoksniuose [26]. Azotas InN kristalinėje gardelėje gali sudaryti taškinius defektus, kitaip sakant gali būti tarpmazginis atomas. Dėl to gali padidėti kristalinės gardelės  $c$  parametro vertę. *Dimakis* pastebėjo, kad auginant tolygius sluoksnius jų gardelės  $c$  parametras buvo mažesnis, o  $a$  parametras didesnis nei sluoksniuose, kuriuose aiškiai buvo matomos salelės [27]. Tai buvo sukelta tuo, kad InN sluoksnis, kuriame buvo matomos salelės buvo relaksavęs, todėl jo kristalinės gardelės vertės buvo artimos teorinėms vertėms. Tolygus InN sluoksnis buvo įtemptas. Padėklo ir sluoksnio gardelės nesutapimai ir skirtingi šiluminiai plėtimosi koeficientai gali paskatinti kraštinių ir sraigtnių dislokacijų generavimą, kurios tęsiasi per visą auginamą sluoksnį. *Specht* apibrėžė trijų tipų įtempimus InN sluoksniuose, tai hidrostatinis, dviašis, kuris yra  $c$  plokštumoje ir linijinis, kuris yra išilgai  $c$  ašies [28]. Hidrostatinio įtempimo atsiradimą galima aiškinti tuo, kad InN sluoksnyje yra homogeniškai pasiskirstę taškiniai defektai. Dviašis įtempimas dažniausiai atsiranda iš gardelių nesutapimų tarp auginamo sluoksnio ir padėklo. Linijinis įtempimas atsiranda tuomet, kai taškiniai defektai įterpiami kristalo pagrindo plokštumoje ir ekvivalentinėse plokštumose (pvz.: (0001) plokštumoje). *Yamaguchi* ir jo grupė pastebėjo, kad auginant InN sluoksnį MOVPE būdu ant GaN/safyro ruošinių jo relaksacija prasideda, kai jo storis viršija 120 nm [29]. Buvo apibrėžta dviejų tipų įtempimai: vidinis ir išorinis. Vidiniam įtempimui buvo priskirtas dviašis įtempimas [30]. Išorinis įtempimas atsiranda dėl to, kad padėklo ir auginamo sluoksnio šiluminio plėtimosi koeficientai yra skirtingi. Skirtingi šiluminio plėtimosi koeficientai daro įtaką dviašiam įtempimui, kai struktūra yra šildoma ar šaldoma. Ištinis InN sluoksnis, kuris nuo pradžių buvo auginamas iš užuomazgų, turėjo tempimo įtempį.

Paprastai InN sluoksniai būna  $n$ -tipo ir turi labai didelį krūvininkų tankį [7]. Teoriškai buvo paskaičiuoti krūvininkų judriai. Teorinės judrio vertės kambario temperatūroje gali būti  $4400 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ , o  $77 \text{ K}$  temperatūroje – net  $33000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  [31]. Eksperimentiškai tokių verčių niekada nebuvo pasiekta. Pradėjus auginti InN sluoksnius MOVPE ar MBE metodu elektriniai parametrai pagerėjo. Visų pirma, sumažėjo krūvininkų koncentracija iki  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  eilės auginant MOVPE būdu [30]. Krūvininkų judris taip pat buvo pagerintas, jo vertė buvo  $700 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ . Teoriškai ir eksperimentiškai buvo aiškinamasi, kas sukuria dideles krūvininkų koncentracijas InN sluoksniuose. Buvo pateiktos kelios hipotezės:

- I) Deguonies (O) atomai vietoj azoto (N) atomo [32];
- II) Silicio (Si) atomai vietoj In atomo [32];
- III) Vandenilio (H) įterpimas [33];

IV) N vakansijos [34]

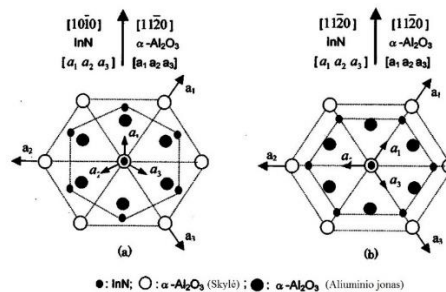
V) Elektronų akumuliacija ties sluoksnio paviršiumi [35].

Populiariausias paaiškinimas, kodėl InN kristale yra tokią didelę krūvininkų koncentraciją, yra N vakansijos. Bet po to, kai *Stampfl* paskaičiavo defektų formavimosi energijas, šį paaiškinimą atmetė [32]. Jis parodė, kad tokių defektų, kaip pakaitinių atomų atsiradimas ( $O_N$  arba  $Si_{In}$ ), formavimosi energijos yra mažesnės už N vakansijų formavimosi energiją. Todėl buvo padaryta išvada, kad Si ir O atomai InN sluoksnyje yra donorai. *Butcher* teigė, kad ne N vakansijos yra atsakingos už didelę krūvininkų koncentraciją, o tarpmazginiai N atomai, kurie yra kaip donorai InN sluoksniuose [27]. *Gallinat* ir jo grupė pastebėjo, kad yra tiesioginė koreliacija tarp krūvininkų tankio ir H, ir O atomų koncentracijos InN sluoksniuose. Padarė išvadą, kad H atomai daro didesnę įtaką krūvininkų tankiui nei O atomai [36]. Buvo pastebėta, kad InN sluoksnio paviršiuje yra krūvininkų akumuliacijos reiškinys [35]. *Mahboob* ir jo grupė paaiškino tuo, kad viurcito tipo InN sluoksniuose  $\Gamma$  slėnio energetinė padėtis, palyginus su GaN ir AlN, yra labai žemai. Todėl sluoksnio paviršiaus Fermi lygmuo gali atsidurti arba prie pat  $\Gamma$  slėnio laidumo juostos minimumo, arba net įsiskverbti į laidumo juostą, taip sukurdamas donorinio tipo paviršines būsenas.

Daugiausiai diskusijų sukėlė InN sluoksnio draudžiamųjų energijų juostos vertė (angl. *band gap*,  $E_g$ ). Buvo labai daug diskutuojama apie InN  $E_g$ , nes kiekviena grupė pateikdavo labai skirtingas  $E_g$  vertes. Bėgant laikui, tobulėjant kristalų auginimo technologijoms ir InN sluoksnio kristalinei kokybei buvo paskelbta, kad InN sluoksnio  $E_g$  dydis yra 0,7 eV. Nustatant InN sluoksnių  $E_g$  vertę dažniausiai buvo remiamasi fotoluminescencijos (PL) arba optinės sugerties matavimo rezultatais. Labai daug atsirado hipotezių, kuriomis buvo bandoma paaiškinti tokias skirtingas gaunamas  $E_g$  vertes. Vieną iš jų yra Burstein – Moss efektas. Taip pat buvo manoma, kad O priemaišos arba InN – In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> pseudobinarinė sistema gali įtakoti  $E_g$  dydį [37]. Hipotezė su InN – In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> formavimusi buvo atmesta. 2002 metais *Davydov* ir jo grupė MBE būdu užaugino gan aukštos kokybės InN sluoksnį [23]. To sluoksnio  $E_g$  buvo 0,9 eV. Taip pat *Davydov* padarė skaičiavimus ir rezultate gavo, kad teorinę InN  $E_g$  vertė yra 0,7 eV. Šį rezultatą patvirtino *Matsuoka* ir jo mokslininkų grupė [38]. Augindami InN sluoksnį MOVPE būdu ant GaN/ safyro ruošinių jie stebėjo stiprią fotoluminescenciją, kurios maksimumo vertė buvo ties 0,76 eV. Šiuo metu yra sutarta, kad InN  $E_g$  yra tarp 0,65 ÷ 0,7 eV verčių.

InN auginimo procesas prasideda nuo padėklo parinkimo. Aukštose temperatūrose chemiškai stabilūs ir sąlyginai pigūs safyro padėklai yra dažniausiai naudojami nitridinių sluoksnių epitaksiniam MOVPE ir MBE auginimams. Gardelių nesuderinamumas tarp safyro ir InN yra ~25% [7]. Dėl didelio gardelių nesutapimo auginamame sluoksnyje generuojasi daugiau defektų. Didelis

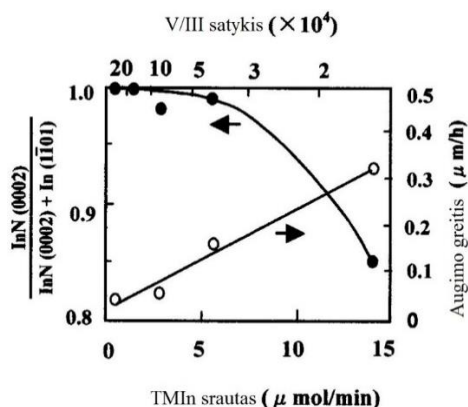
proveržis InN sluoksnių auginimuose buvo tuomet, kai panaudojo AlN arba GaN buferinius sluoksnius [39]. Šiuo atveju gardelių nesutapimai sumažėja nuo ~25% iki ~13% AlN atveju ir ~11% esant GaN buferiui [40]. InN sluoksniai užauginti tiesiai ant safyro turi viurcito tipo kristalinę struktūrą. InN sluoksnio kristalinės gardelės  $c$  ašies orientacija yra tokia pati kaip ir safyro padėklo  $c$  – ašies atžvilgiu, bet  $a$  ašys nesutampa [7]. Auginant InN sluoksnį ant pvz. buferinio AlN sluoksnio epitaksinė priklausomybė tarp InN, AlN ir safyro yra  $[10\text{-}10]_{\text{InN}}//[10\text{-}10]_{\text{AlN}}//[11\text{-}20]_{\text{safyras}}$ . Tai reiškia, kad InN ir AlN sluoksnių primityvusis narvelis yra pasuktas aplink  $c$  ašį  $30^\circ$  kampu safyro primityviojo narvelio atžvilgiu. Taip yra dėl to, kad gardelių nesutapimas pasuktų kristalinių gardelių atžvilgiu yra mažesnis  $[10\text{-}10]_{\text{AlN}}$  arba  $\text{GaN}/[11\text{-}20]_{\text{safyras}}$  nei  $[11\text{-}20]_{\text{AlN}}$  arba  $\text{GaN}/[11\text{-}20]_{\text{safyras}}$ . Schematiškai galimi gardelių sąryšiai tarp auginamo sluoksnio ir safyro padėklo yra pavaizduota 2.7 paveiksle.



2.7 paveikslas. Schematiškai pavaizduoti galimi sąryšiai tarp (0001) InN ir (0001) safyro gardelių plokštumų: (a)  $[10\text{-}10]_{\text{InN}}//[11\text{-}20]_{\text{safyras}}$ ; (b)  $[11\text{-}20]_{\text{InN}}//[11\text{-}20]_{\text{safyras}}$  [41].

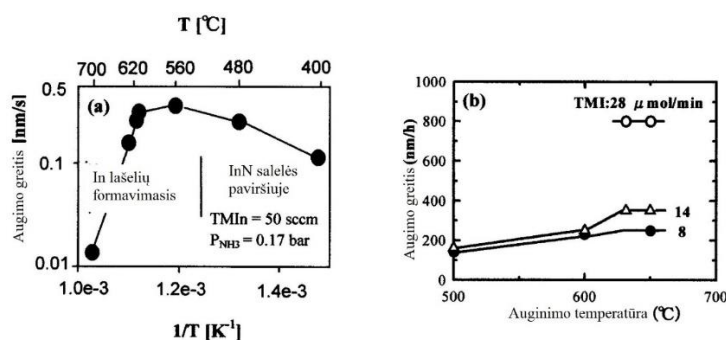
InN turi būti auginamas gana žemuose auginimo temperatūrose, nes jo disociacijos temperatūra yra žema, o azoto pusiausvirasis slėgis – didelis [42]. Kuomet azoto slėgis yra mažesnis už pusiausvirąjį slėgį tam tikroje temperatūroje, iš InN sluoksnio azoto atomai desorbuoja. Paprastai InN sluoksniams auginti MOVPE būdu yra naudojamas  $\text{NH}_3$  ir TMIIn. InN auginimo procese dujos nešėjos yra azoto dujos ( $\text{N}_2$ ). Dėl to, kad InN yra auginamas gana žemuose temperatūrose ( $500\text{ }^\circ\text{C} \div 600\text{ }^\circ\text{C}$ ), jo auginimo greitis yra ribotas  $\text{NH}_3$  dujų skilimo greičiui. Padidinus auginimo temperatūrą InN sluoksnis pradeda intensyviai garuoti. Sumažinus auginimo temperatūrą iki  $400\text{ }^\circ\text{C}$ , sluoksnio paviršiuje dėl azoto trūkumo pradeda formotis metalinio In lašeliai. *Matsuoka* ir jo grupė atliko eksperimentus keičiant V/III medžiagų santykį. Jų rezultatai yra pavaizduoti 2.8 paveiksle [43]. Jeigu V/III santykis yra mažesnis nei  $1,6 \times 10^4$ , sluoksnio paviršiuje formavosi metaliniai In lašeliai. Kuomet V/III yra didesnis nei  $8 \times 10^4$ , In lašelių formavimasis stipriai sumažėja. Dar padidinus V/III santykis iki  $1,6 \times 10^5$ , In lašelių formavimasis sustabdomas. Šis rezultatas parodo, kad reikalingas didelis kiekis  $\text{NH}_3$ , kad InN sluoksnis augtų be In lašelių. Tačiau toks didelis V/III santykis reikalingas, kuomet InN sluoksnio auginimas vyksta iki  $600\text{ }^\circ\text{C}$  temperatūroje. Aukštesniuose auginimo temperatūrose auginimo mechanizmas yra skirtingas. Maždaug  $650\text{ }^\circ\text{C}$  ir aukštesnėse temperatūrose tokio didelio V/III

santykio nereikia. Tose temperatūrose  $\text{NH}_3$  skilimas yra efektyvesnis nei žemose temperatūrose. Dėl to, kad  $\text{NH}_3$  skilimas yra efektyvesnis, reaktoriuje padidėja vandenilio ( $\text{H}_2$ ) parcialinis slėgis. To pasekoje InN sluoksnis yra išdinamas  $\text{H}_2$  molekulėmis ir jo augimo greitis krenta [44].



2.8 paveikslas. InN (0002) XRD smailės intensyvumo santykio su InN (0002) ir In metalinių lašelių (1-101) XRD smaile suminiu intensyvumu priklausomybė nuo TMIn srauto. Taip pat pavaizduota V/III santykis ir augimo greitis [43].

InN augimo greitis stipriai priklauso nuo temperatūros. 2.9 (a) paveiksle yra pavaizduota augimo greičio priklausomybė nuo auginimo temperatūros, o 2.9 (b) paveiksle parodyta TMIn srauto įtaka augimo greičiui. Augimo greitis, didinant auginimo temperatūrą ir TMIn srautą, didėja. *Adachi* ir jo grupė nustatė parametrus, kurie riboja InN sluoksnių auginimą [45]. Jie parodė, kad esant pastoviam TMIn srautui ir keičiant temperatūrą 400 °C ÷ 630 °C intervale, augimo greitis didėja. Didinant TMIn srautą šiame temperatūrų intervale sluoksnio augimo greitis buvo pastovus. Šis rezultatas dar kartą patvirtina, kad žemose auginimo temperatūrose sluoksnio auginimo greitis yra

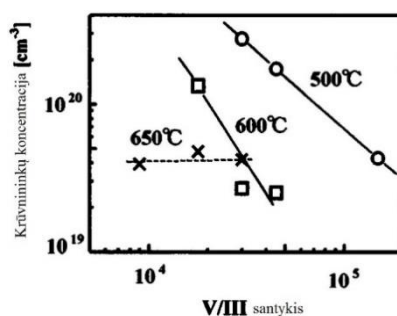


2.9 paveikslas. (a) Augimo greičio priklausomybė nuo auginimo temperatūros [46]. (b) Augimo greičio priklausomybė nuo auginimo temperatūros, esant skirtingiems TMIn srautams [47].

apribotas  $\text{NH}_3$  skilimo efektyvumu. 630°C ÷ 650°C temperatūrų intervale InN sluoksnio augimo greitis yra proporcingas TMIn srautui. Virš 650 °C augimo greitis mažėja, nes InN sluoksnis pradeda greičiau garuoti. Atsiranda azoto trūkumas ir prasideda In lašelių formavimasis. Kai kuriuose

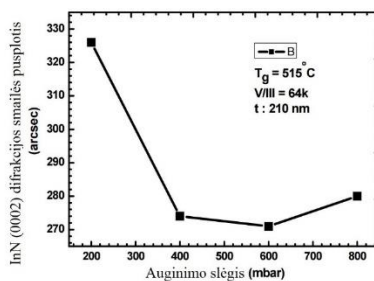
darbuose didelis augimo greičio kritimas buvo stebimas nuo 620 °C. Dėl skirtingų temperatūros matavimo metodų ir reaktoriaus konstrukcijų, išmatuotos temperatūros gali skirtis.

Auginimo temperatūra turi įtakos tokiems elektriniams parametrams, kaip krūvininkų tankis ir krūvininkų Holo (*Hall*) judris. *Keller* ir jo grupė paskelbė, kad didinant auginimo temperatūra nuo 400 °C iki 620 °C krūvininkų tankis sumažėjo nuo  $2,2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  iki  $5,8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  [46]. *Yamamoto* ir jo grupė pastebėjo, kad didinant auginimo temperatūrą mažėja krūvininkų tankis ir didėja Holo judris [47]. Taip pat buvo parodyta, kad didinant V/III santykį, esant 600 °C auginimo temperatūrai, krūvininkų tankis irgi mažėja. Eksperimento rezultatai yra pateikti 2.10 paveiksle. Iš rezultatų buvo padarytos išvados, kad didinant V/III santykį ir esant 500°C ÷ 600 °C auginimo temperatūroms, taškinių defektų, o kartu ir pusiausvirųjų krūvininkų tankis InN sluoksnyje mažėja. Aukštesnėje temperatūroje krūvininkų tankis nepriklauso nuo V/III santykio. Šis efektas greičiausiai yra susijęs su InN sluoksnio padidėjusiu garavimu.



2.10 paveikslas. Krūvininkų koncentracijos priklausomybė nuo V/III santykio skirtingoms auginimo temperatūroms. Auginimo slėgis 0,1 atm [47].

Trečias svarbus auginimo parametras, kuris stipriai įtakoja InN sluoksnių kokybę yra auginimo metu naudojamas slėgis. *Tuna* ir jo grupė atliko šioje srityje eksperimentus ir jų rezultatai yra pateikti 2.11 paveiksle [48]. Didinant auginimo slėgį InN sluoksnio kristalinė kokybė gerėja.



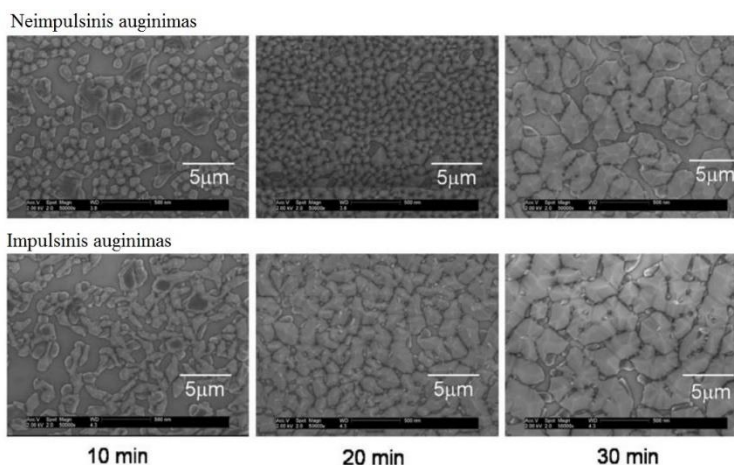
2.11 paveikslas. InN (0002) difrakcijos smailės puspločio priklausomybė nuo auginimo slėgio [48].

Panašūs eksperimentai buvo padaryti *Kadir* ir jo grupės mokslininkų [49]. Darbe yra teigiama, kad tokiu būdu yra sumažinamas azoto garavimas iš sluoksnio paviršiaus, o taip pat sumažinamas In segregavimasis. Auginimo slėgis taip pat turi įtakos InN sluoksnio elektriniams parametrams.



Yamamoto ir jo grupė padarė auginimus 76 Torr ir 760 Torr slėgiuose [47]. InN sluoksnių, kurie buvo užauginti 760 Torr slėgyje, esant skirtingoms auginimo temperatūroms, elektrinės savybės yra geresnės. Tose InN sluoksniuose krūvininkų tankis yra mažesnis, o Holo judris didesnis. Šiame darbe taip pat padaryta tą patį išvadą apie sumažintą azoto garavimą. Kita išvada teigia, kad didesniuose slėgiuose reagentų molekulių greičiai link padėklo yra mažesni, todėl reagentai spėja skilti ir atiduoti In ir N atomus [47, 49].

Taip pat InN sluoksnių kokybės pagerinimui naudojamas impulsinis auginimo režimas. Šis būdas skiriasi nuo paprasto auginimo būdo tuo, kad III ir V grupės medžiagos į reaktorių gali būti tiekiamos pakaitomis arba vienos grupės medžiagos į reaktorių tiekiamos pastoviai, o kitos grupės medžiagos (pvz. TMIIn) – su pertrūkiais (impulsais). Keli darbai buvo padaryti toje srityje [46, 50, 51]. InN sluoksniai buvo auginti ant GaN/safyro ruošinių. Iš karto buvo pastebėta, kad sluoksnio kristalinė kokybė auginant impulsiniu būdu yra geresnė, nei auginant standartiniu būdu. Aukštesnėse temperatūrose In lašelių formavimasis yra sumažintas. Auginant impulsiniu būdu auginimo greitis yra mažesnis, nes dalis sluoksnio nugaruoja per tą laiką, kai medžiagų tiekimas į reaktorių yra nutraukiamas. Vis tiek auginant impulsiniu būdu InN sluoksnis nesuauga į vientisą sluoksnį. Salelės tarpusavyje suauginėja, bet augimo greitis į viršų yra didesnis nei augimo greitis į šonus. Tai yra parodyta 2.11 paveiksle.



2.11 paveikslas. InN paviršiaus morfologija esant skirtingoms auginimo trukmėms ir režimams [26].



### 3. *P-N* sandūros

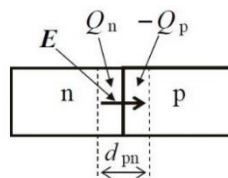
#### 3.1. Vienalytė sandūra (Homosandūra)

*p-n* sandūra yra sudaroma puslaidininkinėje medžiagoje iš dviejų skirtingo laidumo *n*-tipo ir *p*-tipo sričių. Šios sritys yra elektriškai neutralios, nes jose esančių elementariųjų dalelių elektrinių krūvių suma yra lygi 0. Sujungus tas sritis pagrindiniai krūvininkai *n* srityje – elektronai difunduoja į *p* sritį, o pagrindiniai krūvininkai *p* srityje – skylės – difunduoja į *n* sritį. Difuzijos reiškinys, esant  $T > 0$  K, vyksta dėl krūvininkų tankio skirtumo. Šalutinių krūvininkų koncentracijos – skylių koncentracija *n* srityje yra mažesnė nei *p* srityje ( $p_n < p_p$ ), o elektronų koncentracija *p* srityje yra mažesnė nei *n* srityje ( $n_p < n_n$ ). Fundamentalus sąryšis puslaidininkių fizikoje tarp pagrindinių ir šalutinių krūvininkų yra:

$$n_n p_n = p_p n_p = n_i^2 = p_i^2, \quad (1)$$

čia  $n_i = p_i$  – laisvųjų krūvininkų tankis nelegiruotame *i* laidumo (savitojo laidumo) puslaidininkyje.

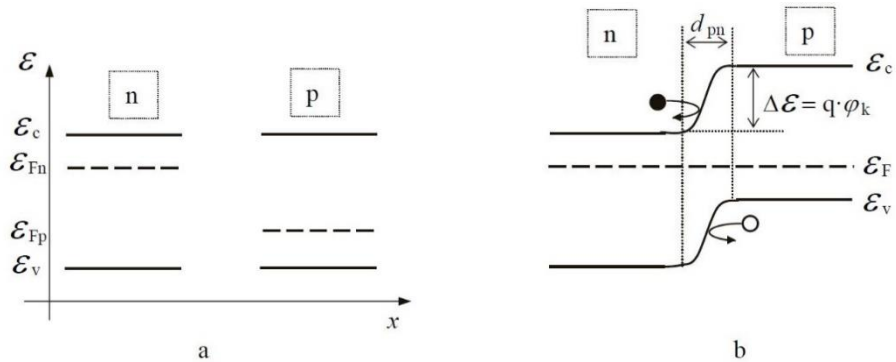
Elektronai difundavę į *p* sritį sukuria jame perteklinį krūvį, kaip ir skylės *n* srityje. Pažeista termodinaminė pusiausvyra *n* ir *p* srityse yra atkurama rekombinacijos būdu, kurio metu pertekliniai šalutiniai krūvininkai rekombinuoja atitinkamai su priešingo ženklo pagrindiniais laisvaisiais krūvininkais, dėl to tam tikra *n* sritis įgauna teigiamą krūvį, o *p* sritis – neigiamą krūvį. Tai vyksta dėl to, kad po kiekvieno rekombinacijos vyksmo *n* srityje lieka nesukompensuotas legiruojančių priemaišų  $N_d$  teigiamas donoro atomas, o *p* srityje –  $N_a$  – neigiamas akceptorius atomas. Rekombinacijos procese visada galioja krūvio neutralumo sąlygą visam *p-n* dariniui. Jonizuotos priemaišos sudaro krūvį, kuris yra vadinamas erdviniu krūviu. Jos yra lokalizuotos arti *p-n* sandūros metalurginės ribos, nes ties riba rekombinacijos tikimybė yra didžiausia. Ta sritis vadinasi nuskurdintąja sritimi, nes joje nėra stacionarių laisvųjų krūvininkų. Visa puslaidininkio struktūra su *n-p* sandūra yra pavaizduota 3.1 paveiksle. Nuskurdintos srities storis pažymėtas  $d_{pn}$  simboliu.



3.1 paveikslas. *p-n* struktūra [52].

Šie jonizuotų priemaišų erdviniai krūviai sukuria elektrinį lauką, nukreiptą iš *n* srities į *p* sritį, o tarp jų atsiranda kontaktinis potencialų skirtumas ( $\varphi_k$ ). Šis vidinis elektrinis laukas skatina priešingos krypties šalutinių krūvininkų dreifinės dedamosios atsiradimą. Skylės iš *n* srities dreifuoja į *p* sritį, o elektronai atvirkščiai – iš *p* srities į *n* sritį. Esant termodinaminei pusiausvyrai, šios difuzinės ir

dreifinės srovės dedamosios kompensuoja viena kitą, todėl per  $p$ - $n$  sandūrą srovė neteka, o  $n$  ir  $p$  sričių Fermi lygmenys yra viename lygyje. 3.2 paveikslas vaizduoja atskirų  $n$  ir  $p$  sričių energetines diagramas (a) ir  $p$ - $n$  sandūros energetines diagramas (b).



3.2 paveikslas. (a) Neutralių  $n$  ir  $p$  sričių energetinės diagramos. (b) termodinamiškai nusistovėjusios  $p$ - $n$  sandūros energetinė diagrama [52].

Kontaktinis potencialų skirtumas išlenkia laidumo ir valentinę juostas dydžiu  $\varphi_k$ . Žinant krūvininkų koncentracijas  $n$  ir  $p$  srityse, bei grynojo puslaidininkio krūvininkų tankį galima apskaičiuoti kontaktinio potencialo dydį:

$$\varphi_k = \frac{k_B T}{e} \ln \left( \frac{n_n p_p}{n_i^2} \right), \text{ kur} \quad (2.1)$$

$$n_{n,(p)} = N_{c,(v)} \exp \left[ \frac{-(E_{c,(f)} - E_{F,(v)})}{k_B T} \right]; \quad (2.2)$$

$$n_i = N_c N_v \exp \left[ \frac{E_g}{k_B T} \right]. \quad (2.3)$$

Išsprendus Puasono lygčių sistemą, užrašytų  $n$  ir  $p$  sritims, galima rasti erdvinio krūvio elektrinio potencialo pasiskirstymą  $p$ - $n$  sandūroje ir nuskurdintos srities storį. Erdvinio krūvio kuriamo elektrinio lauko stiprio išraiška atrodo taip:

$$E_n = \frac{e n_n}{\epsilon_0 \epsilon} (x - b_n) - n \text{ srityje}; \quad (3.1)$$

$$E_p = -\frac{e p_p}{\epsilon_0 \epsilon} (x + b_p) - p \text{ srityje}; \quad (3.2)$$

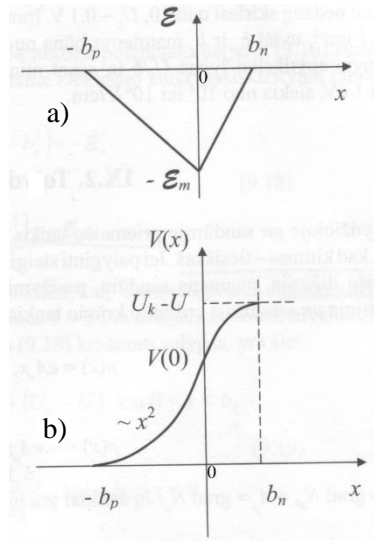
$$b = b_n + b_p - \text{nuskurdintos srities storis.} \quad (3.3)$$

Elektrinis laukas nuskurdintoje srityje nuo koordinatės priklauso tiesiškai. Suintegravę elektrinio lauko stiprio išraiškas pagal koordinatę, šių lygčių sprendinys bus potencialo pasiskirstymas nuskurdintoje srityje:

$$V(x) = -\frac{1}{2} \frac{en_n}{\epsilon_0 \epsilon} (x - b_n)^2 + (\varphi_k - U) - n \text{ srityje} \quad (4.1)$$

$$V(x) = \frac{1}{2} \frac{ep_p}{\epsilon_0 \epsilon} (x + b_p)^2 - p \text{ srityje.} \quad (4.2)$$

(4.1) išraiškoje  $U$  reiškia prijungtą išorinę įtampą. Minus prieš  $U$  reiškia, kad teigiama išorinė įtampa mažina potencialo barjerą. Elektrinio lauko stiprio ir potencialo pasiskirstymai  $p$ - $n$  sandūroje parodyti 3.3 paveiksle.



3.3 paveikslas. Elektrinio lauko stiprio (a) ir potencialo (b) pasiskirstymas  $p$ - $n$  sandūroje [53].

Taške  $x = 0$  potencialų ir elektrinio lauko stiprio vertės turi sutapti. Sulyginus elektrinio lauko stiprio vertes taške  $x = 0$ , rezultatas yra toks:

$$n_n b_n = p_p b_p. \quad (5)$$

Sulyginus potencialo vertes taške  $x = 0$  ir pasirėmę (3.3) ir (5) lygtimis, gautas rezultatas yra nuskurdintos srities storis:

$$b(U) = b_n + b_p = \sqrt{\frac{2\epsilon_0 \epsilon (n_n + p_p) (\varphi_k - U)}{en_n p_p}}. \quad (6)$$

### 3.2. Vienalytės $p$ - $n$ sandūros voltamperinė (VAch) charakteristika

Kai prie  $p$ - $n$  sandūros prijungta tiesioginė įtampa, skylės injektuojamos iš  $p$  į  $n$  sritį, o elektronai atvirksčiai. Injektuoti krūvininkai difunduoja tolyn nuo nuskurdinto sluoksnio ir pakeliui rekombinuoja. Šalia nuskurdinto sluoksnio elektrinis laukas yra silpnas, todėl vyrauja difuzinė tiesioginė srovė. Didėjant nuotoliui, ir elektronų, ir skylių difuzinės srovės eksponentiškai silpsta. Injektuoti į priešingo laidumo sritį šalutiniai krūvininkai erdvinio krūvio nesukuria, nes jų krūvį

kompensuoja iš kontaktų atėję priešingo ženklo pagrindiniai krūvininkai. Kitaip tariant, per kristalą tekanti srovė turi nepriklausyti nuo koordinatės, todėl, greta šalutinių krūvininkų srovės, teka pagrindinių krūvininkų srovė [53]. Jų stiprumai tokie, kad kiekviename taške srovių suma išlieka pastovi.

Kai išorinė įtampa yra atvirkštinė, per  $p-n$  sandūrą laisvai praeina tik šalutiniai krūvininkai: elektronai iš  $p$  srities į  $n$  sritį ir skylės – iš  $n$  srities į  $p$  sritį. Ši jų judėjimą palaiko padidėjęs elektrinis laukas nuskurdintoje srityje, susisumavus vidiniam ir išoriniam potencialo barjero laukams. Šis laukas ir stabdo pagrindinius krūvininkus, tai yra šalutinių krūvininkų judėjimas per sandūrą vyksta dėl jų dreifo. Kadangi jų tankis yra mažas, tai ir sandūros varža užtvarine kryptimi yra didelė, o atgalinė srovė – silpna.

Norėdami apskaičiuoti  $p-n$  sandūros voltamperinę charakteristiką, reikia rasti skylių ir elektronų difuzinės srovės. Tai galima pasiekti išsprendžiant tolydumo, srovės ir Puasono lygčių sistemą [53].  $p-n$  sandūros voltamperinę charakteristiką atrodo taip:

$$j = \left( \frac{eD_n n_p}{L_n} + \frac{eD_p p_n}{L_p} \right) \left[ \exp\left(\frac{eU}{k_B T}\right) - 1 \right]. \quad (7)$$

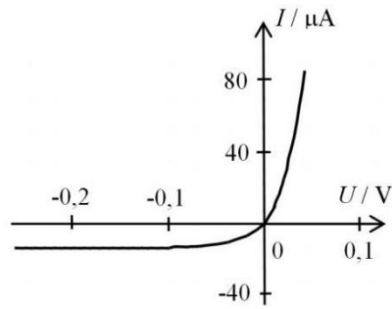
(7) formulėje  $D_n$ ,  $D_p$  yra elektronų ir skylių difuzijos koeficientai, o  $L_n$ ,  $L_p$  – elektronų ir skylių difuzijos nuotoliai. Iš (7) formulės matyti, kai prijungta išorinė įtampa yra teigiama srovės tankis eksponentiškai didėja, o kai neigiama – įsisotina ir yra lygus:

$$j_S = \frac{eD_n n_p}{L_n} + \frac{eD_p p_n}{L_p}. \quad (8)$$

Atgalinę  $p-n$  sandūros srovę sukuria šalutiniai krūvininkai, ištraukiami iš šalia nuskurdinto sluoksnio esančių sričių, kurių storis lygus krūvininkų difuzijos nuotoliui. Iš  $p$  srities ištraukiami  $L_n g_{nT}$  elektronų, o iš  $n$  srities –  $L_p g_{pT}$ ; čia  $g_{nT}$ ,  $(g_{pT})$  – elektronų ir skylių šiluminės generacijos spartos. Todėl atgalinės srovės tankis:

$$j_S = e(L_n g_{nT} + L_p g_{pT}) = e \left( n_p \frac{L_n}{\tau_n} + p_n \frac{L_p}{\tau_p} \right). \quad (9)$$

Kadangi  $D_p/L_p = L_p/\tau_p$  ir  $D_n/L_n = L_n/\tau_n$  ( $\tau$  – krūvininkų gyvavimo trukmė) tai, palyginus (8) ir (9), matyti, kad atgalinę srovę sudaro šiluminiu būdu generuoti šalutiniai krūvininkai.  $p-n$  sandūros voltamperinės charakteristikos pavyzdys yra pavaizduotas 3.4 paveiksle.

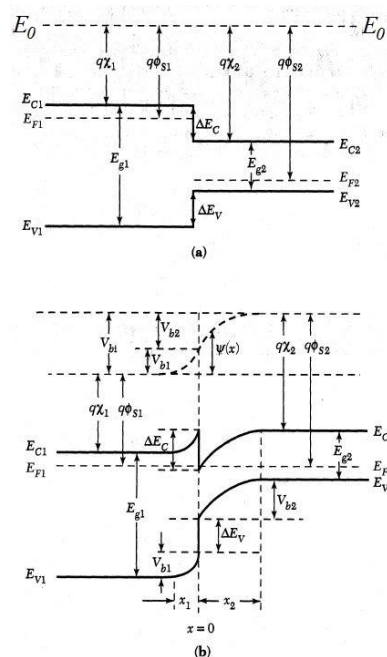


3.4 paveikslas.  $P-N$  sandūros  $V_{Ach}$  [54].

### 3.3. Įvairiatarpė sandūra (heterosandūra) ir jos voltamperinė charakteristika

Heterosandūros gaminamos užauginant vieno puslaidininkio monokristalinį ploną sluoksnį ant kito puslaidininkio monokristalinio sluoksnio. Heterosandūros gali būti pagamintos ne iš bet kokių puslaidininkių poros. Reikia, kad puslaidininkiai būtų tos pačios kristalinės struktūros, o jų gardelės konstantos nedaug skirtųsi [53].

Kol sandūra nesudaryta, abiejose medžiagose energijos juostos yra horizontalios, puslaidininkiuose nėra nei elektrinio lauko, nei erdvinio krūvio. Tai yra pavaizduota 3.5 (a) paveiksle.



3.5 paveikslas. Dviejų skirtingų puslaidininkių energijos juostų schema (a) ir jų sandūros modelis (b) [55].

Suliestų puslaidininkių heterosandūros juostinė schema pateikta 3.5 (b) paveiksle. Kol nėra srovės, puslaidininkių Fermio lygmenys yra viename energijos lygyje. Kadangi išlaisvinimo darbai iš puslaidininkių yra skirtingi, tai paviršiniuose sluoksniuose susidaro atitinkamo ženklo erdvinis krūvis

ir tarp jų susiformuoja kontaktinis potencialų skirtumas  $U_k = (\Phi_{S1} - \Phi_{S2})/e$ . Dėl to juostos išlinksta. Vieno ir kito puslaidininkio paviršiuje susiformuoja nuskurdinta sritis. Vakuomo lygmens eiga vaizduoja kreivė  $E_0 = -eV(x)$ ; čia  $V(x)$  – erdvinio krūvio sukurtas elektrostatinis potencialas. Nuo šios kreivės žemyn atidėjus elektroninius giminingumus, gaunasi abiejų puslaidininkių laidumo juostos apačios energija. Kadangi elektroniniai giminingumai yra skirtingi, tai sandūroje atsiranda laidumo juostos trūkis  $\Delta E_c = e(\chi_1 - \chi_2)$ . Trūkis  $\Delta E_v = E_{g1} + e\chi_1 - (E_{g2} + e\chi_2)$  taip pat atsiranda ir valentinėje juostoje.

Tegul sandūrą sudarančių puslaidininkių donoriai ir akceptoriai visiškai jonizuoti, o jų tankiai tūryje lygūs  $n_0$  ir  $p_0$ . Taip pat  $n$  ir  $p$  puslaidininkiuose yra nuskurdinta sritis. Pasinaudojus (4.1) ir (4.2) sprendiniais, atsižvelgiant į tai, kad puslaidininkių dielektrinės skvarbos yra skirtingos:

$$V_1(x) = V_{01} + \frac{1}{2} \frac{ep_0}{\varepsilon_0 \varepsilon_1} (x + x_1)^2, \text{ kai } -x_1 < x < 0, \quad (10.1)$$

$$V_2(x) = V_{02} - \frac{1}{2} \frac{en_0}{\varepsilon_0 \varepsilon_2} (x - x_2)^2, \text{ kai } 0 < x < x_2, \quad (10.2)$$

Čia  $V_{01}$  ir  $V_{02}$  – potencialai taškuose  $x = -x_1$  ir  $x = x_2$ . Sandūros taške  $x=0$  (10.1) ir (10.2) turi tenkinti elektrinės indukcijos normaliosios komponentės tolydumo sąlyga:

$$\varepsilon_1 \left( \frac{dV_1}{dx} \right)_{x=0} = \varepsilon_2 \left( \frac{dV_2}{dx} \right)_{x=0}. \quad (11)$$

Pasinaudojus (10.1), (10.2) ir (11) išraiškėmis galima apskaičiuoti kontaktinio potencialo dydį ir nuskurdintos srities storį. Kontaktinio potencialo išraiška yra:

$$V_{bi} = V_{b1} + V_{b2} = \frac{e}{2} \left( \frac{p_0 x_1^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_1} + \frac{n_0 x_2^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_2} \right). \quad (12)$$

Nuskurdintos srities storio išraiška:

$$x_1 = \sqrt{\frac{2V_{bi} \varepsilon_0 \varepsilon_1 \varepsilon_2 n_0}{ep_0(p_0 \varepsilon_1 + n_0 \varepsilon_2)}}, \quad (13.1)$$

$$x_2 = \sqrt{\frac{2V_{bi} \varepsilon_0 \varepsilon_1 \varepsilon_2 p_0}{en_0(p_0 \varepsilon_1 + n_0 \varepsilon_2)}}. \quad (13.2)$$

Prijungus prie  $p$ - $n$  heterosandūros tiesioginę įtampą, kontaktinis potencialo barjeras sumažėja ir elektronai injektuojami iš  $n$  į  $p$  puslaidininkį, o skylės – iš  $p$  į  $n$  puslaidininkį, todėl krūvininkų tankis padidėja. Prijungę užtvarinę įtampą, pasireikš šalutinių krūvininkų ekstrakcija.

Pasinaudojus Andersono modeliu ir atsižvelgus tik į difuzinę srovę,  $p$ - $n$  heterosandūros voltamperinę charakteristiką galima užrašyti taip [53]:

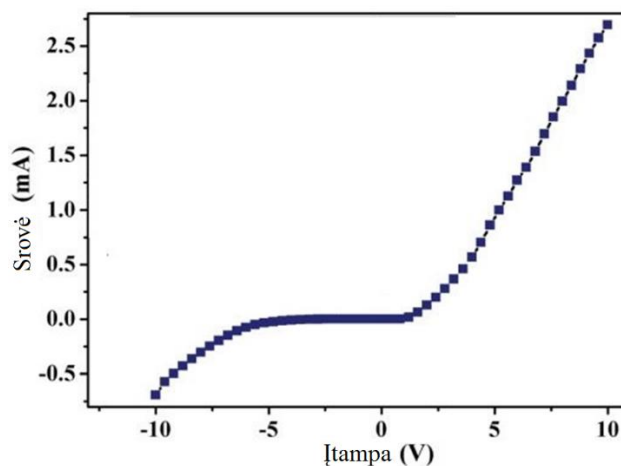
$$J = A \exp\left(-\frac{eV_{b2}}{k_B T}\right) \left[ \exp\left(-\frac{eU_1}{k_B T}\right) - \exp\left(-\frac{eU_2}{k_B T}\right) \right], \quad (14)$$

čia  $U_1$  ir  $U_2$  – išorinės įtampos kritimai pirmojo ir antrojo puslaidininkio barjere.  $A$  – koeficientas, kuris priklauso nuo puslaidininkio legiravimo ir krūvininkų efektinių masių. Iš (14) matyti, kad tekanti per heterosandūrą srovė eksponentiškai stiprėja prijungus ir laidumo, ir užtvarinės krypties įtampą [53]. Didinant atvirkštinę įtampą, kai

$$e(V_{b1} + U_1) > \Delta E_c, \quad (15)$$

barjeras  $V_{b1}$  išnyksta. Toliau didinant įtampą, srovė įsisotina.

Čia išnagrinėtas idealiosios  $p$ - $n$  heterosandūros difuzinės srovės modelis praktiškai sunkiai realizuojamas, nes, gaminant  $p$ - $n$  heterosandūrą, sudaroma daug paviršinių lygmenų. Gardelės defektai, esantys realios  $p$ - $n$  heterosandūros sąlyčio plokštumoje, sudaro paviršinius lygmenis ir atsiranda papildomų elektroninių šuolių galimybė. Dėl to realios  $p$ - $n$  heterosandūros srovės mechanizmas gali skirtis nuo idealiosios. InN ir  $p$  tipo GaN heterosandūros pavyzdinė voltamperinė charakteristika yra pateikta 3.6 paveiksle.

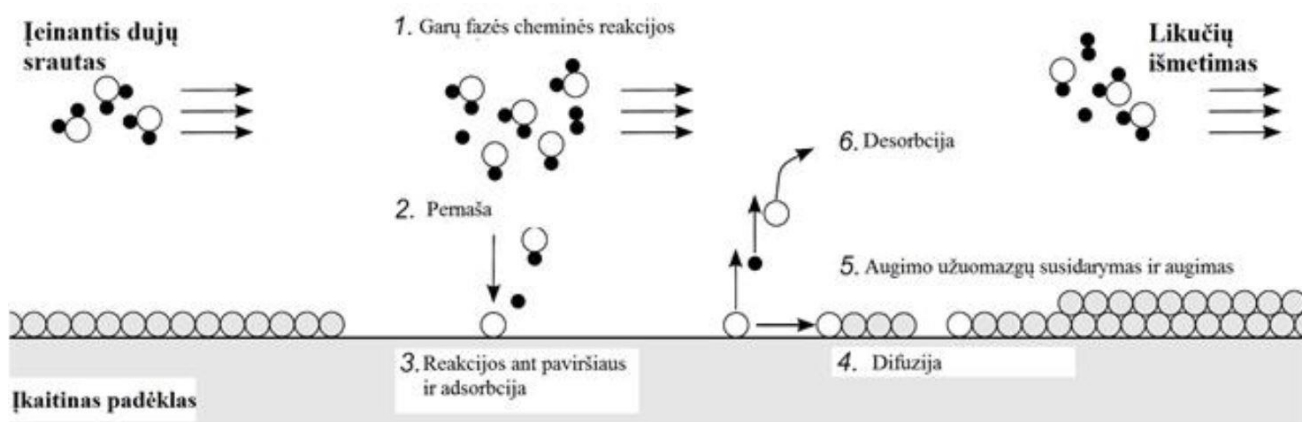


3.6 paveikslas. InN/ $p$ -GaN heterosandūros Vach [56].

## 4. MOCVD (MOVPE) technologija

MOCVD proceso metu medžiaga yra nusodinama ant padėklo dėka cheminių reakcijų tarp tų medžiagų pirmtakų (angl. precursor) esančių garų fazėje [57]. Tam, kad reagentai reaguotų vienas su kitu reikalinga energija, skatinanti chemines reakcijas, pvz. šiluma. Trumpinio MOCVD dalis „MO“ rodo, kad metalų pirmtakai yra metalo-organinės medžiagos. Kiti elementai gaunami iš hidridinių dujų.

CVD procesas yra aprašomas termodinaminiais, hidrodinaminiais ir cheminės kinetikos dėsniais [58]. Kiekviena sritis yra atsakinga už tam tikrus reiškinius. Termodinaminiai dėsniai aprašo augimo greitį tam tikru metu, arba didžiausią augimo greitį. Cheminės kinetikos dėsniai parodo cheminių reakcijų greičius ir mechanizmus. Hidrodinamika aprašo dujų srautus, greičio profilius atsirandančius reaktoriuje, temperatūros pasiskirstymą ir slėgį. Visi šie dalykai labai priklauso nuo reaktoriaus konstrukcijos ir parametrų. Pagrindiniai augimo procesai yra (Pav. 4.1): (1) pirmtakų pernaša į augimo sritį, (2) garų fazėje esančių pirmtakų cheminės reakcijos, (3) pirmtakų ir reagentų pernešimas ant padėklo paviršiaus, (4) atomų adsorbicija ant padėklo paviršiaus, (5) difuzija ant paviršiaus, augimo užuomazgų susidarymas, sluoksnio augimas, (6) desorbicija nuo padėklo paviršiaus [58].



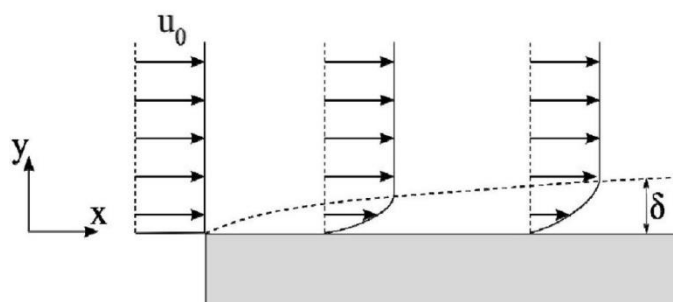
4.1 paveikslas. Schematiškai pavaizduotas CVD procesas [58].

Reaktorius yra konstruojamas taip, kad būtų užtikrintas laminarinis dujų srautas. Turint laminarinį dujų srautą, sluoksnio augimas vyksta tolygiai. Ties paviršiumi dujų srauto greitis yra nulis, dėl trinties jėgų. Tolstant nuo paviršiaus, dujų greitis didėja ir tam tikrame atstume nuo paviršiaus – nesikeičia (Pav. 4.2), pasiekia laminarinio srauto greitį  $u_0$ . Tas atstumas  $\delta$  yra vadinamas ribine sritimi (angl. *boundary layer*) ir yra atvirkščiai proporcingas laminarinio greičio šakniai [59].

$$\delta(x) \propto \sqrt{\frac{\nu x}{u_0}}, \nu = \frac{\mu}{\rho}, \quad (1)$$

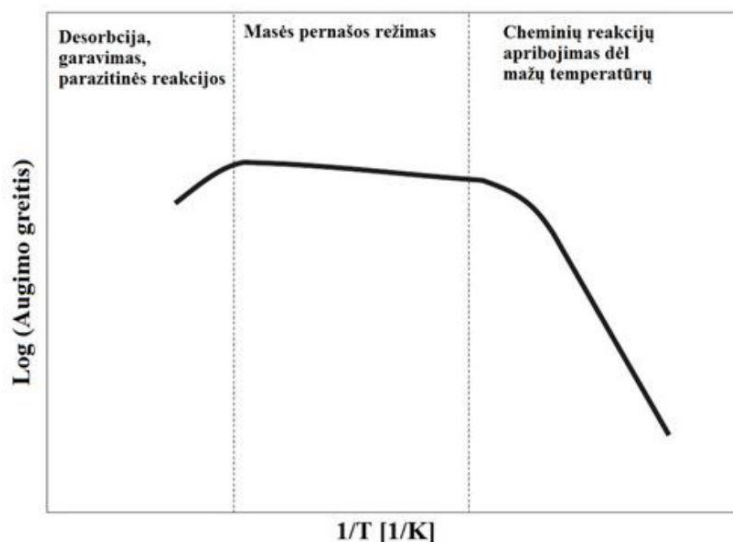


$\nu$  - kinematinis klamos koeficientas,  $\mu$  – klamos koeficientas,  $r$  – medžiagos tankis. Molekulės turi difunduoti per visą ribinę sritį, kad galėtų inicijuoti augimą ant padėklo.



4.2 paveikslas. Dujų srauto greičio profilis virš lygaus paviršiaus [75].

MOCVD yra egzoterminis procesas (Pav. 4.3) [60]. Aukštose temperatūrose augimo greitis yra apribotas termodinamiškai, kitaip sakant, vienu metu vyksta desorbcija, garavimas nuo padėklo paviršiaus ir parazitinės reakcijos tarp pirmtakų garų fazėje. Vidutinėse temperatūrose turime masės pernašos režimą, kur augimo greitis praktiškai nepriklauso nuo temperatūros. Šiame režime augimo greitis priklauso nuo metalo-organinių reagentų parcialinio slėgio. Reakcijos ant paviršiaus vyksta greitai ir ribojantis veiksnys yra tų reagentų srautas, difunduojantis per ribinę sritį. Žemose temperatūrose augimo greitį riboja cheminių reakcijų kinetika [58], tai reiškia, kad augimo greitį apibrėžia cheminė reakcija, kuri vyksta lėčiausiai. Tiesės polinkis (pav. 4.3) šioje dalyje parodo lėčiausiai vykstančios reakcijos aktyvacijos energiją.



4.3 paveikslas. Augimo greičio kokybinė priklausomybė nuo atvirkštinės temperatūros [58].

## 5. Charakterizavimo metodikos

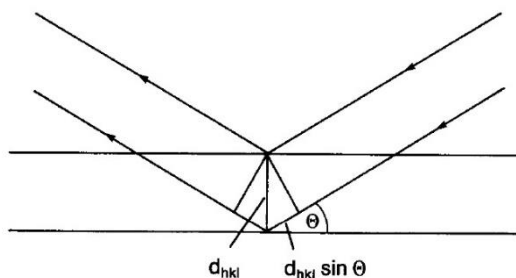
### 5.1. Rentgeno spindulių difrakcinė analizė (XRD – X-ray diffraction)

Rentgeno spindulių difrakcinė analizė (angl. X-ray diffraction (XRD)) - tai vienas iš svarbiausių įvairių kristalinių medžiagų, taip pat epitaksinių sluoksnių, struktūros charakterizavimo būdų. Šis metodas leidžia nustatyti epitaksinio sluoksnio kristalinės gardelės ašių orientaciją, gardelės konstantą, sluoksnio įtempimą ir dislokacijų tankį [61]. Metodas yra ganėtinai greitas ir nesudėtingas, nereikalauja specialiai paruoštų bandinių.

Rentgeno spinduliuotės bangos ilgiai yra tos pačios angstromų (Ångström,  $1\text{Å} = 1\cdot 10^{-10}\text{ m}$ ) eilės, kaip ir kristalinės gardelės konstantos. Rentgeno spinduliai difraguoja (išsisklaido) nuo vienodai išsidėsčiusių, lygiagrečių atominių plokštumų [62]. Šie difragavę spinduliai interferuoja, todėl pasinaudojus Brego (*Sir William Lawrence Bragg*) dėsnio konstruktyviai interferencijai gauname:

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin(\theta), \quad (1)$$

kur  $\lambda$  yra rentgeno spinduliuotės bangos ilgis,  $d_{hkl}$  - kristalinės gardelės konstanta ir  $n$  – difrakcinio maksimumo eilė,  $\theta$  – kampas tarp kritusių rentgeno spindulių ir atominių plokštumų. Toliau iš susidariusio rentgeno spindulių interferencinio vaizdo yra užrašoma difraktograma.

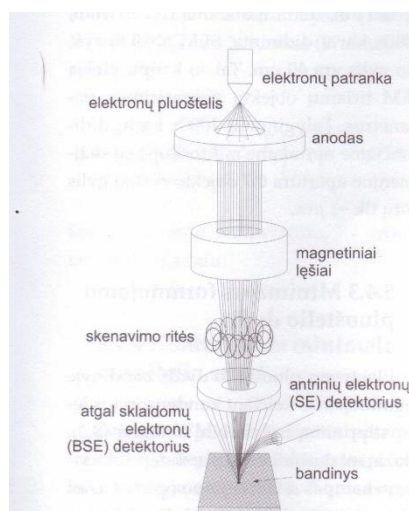


5.1 paveikslas. Rentgeno spindulių difrakcija nuo atominių plokštumų [62].

InN sluoksnių rentgeno spindulių difraktometrijos matavimai buvo atlikti aukštos rezoliucijos difraktometru SmartLab (Rigaku, Japonija, 2011m.) turinčiu 9 kW rentgeno spindulių šaltinį su besisukančiu Cu anodu. Duomenų analizė buvo atlikta specializuotomis programomis. Daugiausiai naudota – GlobalFit programa, skirta svyravimo kreivių analizei. Įranga yra Nacionaliniame Fizinių ir Technologijos Mokslų Centre (dr. Tadas Malinauskas).

## 5.2. Skenuojanti elektronų mikroskopija (SEM – *Scanning Electron Microscopy*)

Skenuojantis elektronų mikroskopas yra vienas iš labiausiai paplitusių tokio tipo mikroskopų. Jis yra daug lankstesnis tiriamo objekto pasirinkimo atveju nei elektronų pralaidumo mikroskopas (TEM - *Transmission Electron Microscope*). Jeigu elektronų pralaidumo mikroskopui reikia ypatingai plonų bandinių, tai SEM nėra svarbūs bandinių tūriniai geometriniai parametrai.



5.2 paveikslas. SEM mikroskopo principinė schema [63].

SEM mikroskopo principinė schema yra pavaizduota 5.2 paveiksle [63]. Mikroskopą sudaro šios pagrindinės sudėtinės dalys:

- Apšvietimo sistema;
- Centrinė dalis;
- Detektavimo sistema.

Apšvietimo sistema sudaryta iš elektronų šaltinio ir kondensatoriaus. Šioje dalyje yra suformuojamas reikiamo dydžio elektronų pluoštelis ir nukreipiamas į tiriamą objektą. SEM atveju apšvietimo sistema formuoja siaurėjantį elektronų pluoštelį. Elektronų šaltinis yra plonas „V“ forma sulenktas volframo siūlelis. Tai yra elektronų patrankos katodas. Iš šio katodo elektronų generacija gali vykti dviem būdais. Vienas iš jų yra terminės elektronų emisijos būdas, kuris yra paremtas siūlelio (katodo) kaitinimu. Elektronai aukštoje temperatūroje įgauna pakankamai energijos, kad išlėktų iš metalo ir kaupiasi siūlelio aplinkoje. Juos reikia įgreitinti. Įjungus aukštą įtampą tarp katodo ir anodo taip, kad katodo potencialas būtų neigiamas anodo potencialo atžvilgiu, išspinduliuoti elektronai greitunami teigiamo anodo link. Kitas elektronų generacijos būdas yra lauko emisijos metodas. Volframo siūlelio paviršių paveikus stipriu elektriniu lauku ( $>10^9$  V/m), elektronas gali tuneliuoti pro paviršių net ir neįgijęs pakankamai energijos išėjimo darbui nugalėti. Lauko emisijos

elektronų patrankos privalumas yra fiksuotos energijos elektronų spinduliavimas. Terminiu metodu išspinduliuotų elektronų energijų išbarstymas siekia  $1 \div 2$  eV, o šalto katodo atveju – iki 0,5 eV [64].

Centrinė dalis – tiriamasis objektas – tai mikroskopo vieta, kur vyksta elektronų pluoštelio ir objekto sąveika. SEM elektronų pluoštelis greitinamas  $1 \div 30$  kV įtampa link bandinio. Po sąveikos su bandiniu elektronai yra sklaidomi arba sugeriami. Informacijos nešėjai SEM mikroskope yra neelastinę sklaidą patyrę antriniai elektronai, atgal sklaidyti elektronai, Rentgeno spinduliuotė, Ožė (*Auger*) elektronai.

SEM detektoriai skirstomi į antrinių elektronų, atgal sklaidomų elektronų ir katodoluminescencijos detektorius. Populiariausias antrinių elektronų ir atgal sklaidytų elektronų detektorius – Everharto – Tornlio (Everhart - Thornley) detektorius, kurio pagrindinės dalys yra scintiliatorius ir fotodaugintuvas. Katodoluminescencija matuojama specializuotais spektrometrais ir fotodaugintuvais. Rentgeno spinduliai detektuojami specialiais silicio arba germanio mikrokalorimetriniais detektoriais [64].

InN sluoksnių ir InN/*p*-GaN struktūrų paviršiaus morfologijos tyrimai buvo atlikti naudojantis Apollo 300 CamScan skenuojančių elektronų mikroskopu. Matavimo metu elektronai buvo greitinami 10 kV įtampa. Matavimo įranga yra Vilniaus Universitete, Taikomųjų Mokslų Institute.

### **5.3. Elektronų pluoštelio indukuotos srovės metodas (EBIC – *Electron Beam Induced Current*)**

EBIC matavimas duoda galimybę vizualizuoti puslaidininkinio pavienio kristalo ar sudėtinės struktūros elektriškai aktyvias sritis, defektus ir tarpkristalines sritis [64, 65]. Didelės energijos elektronai, sąveikaudami su puslaidininkine medžiaga, sukuria elektronų ir skylių poras, kurių kiekį paprasčiausiu atveju galima įvertinti kaip:

$$n_m = \frac{E_0}{E_{exm}}, \quad (2)$$

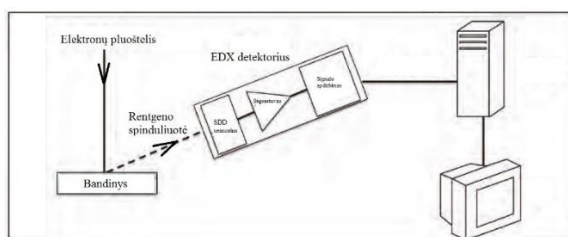
kur  $E_0$  – pluoštelio elektrono energija,  $E_{exm}$  – energija, reikalinga sukurti vieną elektrono ir skylės porą. Sugeneruotos poros, nesant jokiam elektriniam laukui, rekombinuos, nes nėra jokios jėgos kuri atskirtų elektroną ir skylę. Jeigu tos poros yra generuojamos struktūroje, kurioje yra vidinis elektrinis laukas, pavyzdžiui *p-n* sandūros nuskurdintoje srityje ar netoli jos, tada elektronas ir skylė bus atskirti. Prijungus tą struktūrą prie ampermetro galima matuoti tekančios srovės dydį. Išmatavus srovę skirtinguose bandinio taškuose ir apibendrintus rezultatus galima atvaizduoti elektronų pluoštelio indukuotų srovių žemėlapi. Iš gautųjų rezultatų galima nustatyti kur tiriamoje struktūroje yra ir kaip

atrodo  $p$ - $n$  sandūros sritis, kur yra defektai arba rekombinacijos sritys ir paskaičiuoti jų tankį, įvertinti krūvininkų difuzijos nuotolius ir gyvavimo trukmes [64, 65].

InN/ $p$ -GaN struktūrų elektronų pluoštelio indukuotų srovių žemėlapiui sudaryti buvo naudojamas Gatan įmonės EBIC priedas SEM mikroskopui. EBIC signalai yra analizuojami su Digiscan II priedu (modelis 778). Rezultatams vizualizuoti buvo naudojama Gatan specializuota programine įranga. Visa matavimo įranga yra Vilniaus Universitete, Taikomųjų Mokslų Institute.

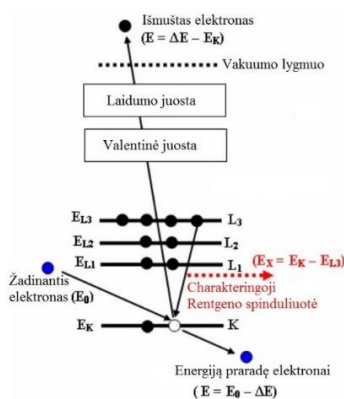
#### 5.4. Rentgeno spindulių energijos dispersijos spektroskopija (EDX – *Energy Dispersive X-ray spectroscopy*)

Rentgeno spinduliuotė yra bene svarbiausias antrinis signalas, gaunamas iš elektronais apšvitintos medžiagos (bandinio). Rentgeno spindulių spektrometrija elektroniame mikroskope leidžia nustatyti vaizduojamo objekto medžiagų elementinę sudėtį. Šio metodo esmė – elektronų ir skylių porų, kurių skaičius proporcingas Rentgeno spindulių kvanto energijai, sužadinimas puslaidininkiniame detektoriuje [63]. Principinė EDX matavimo schema pavaizduota 5.3 paveiksle.



5.3 paveikslas. EDX principinė matavimo schema [66].

Didelės energijos elektronas, sužadindamas atomą, suteikia atomo orbitalės elektronui tiek energijos, kad šis, nugalėdamas branduolio traukos jėgą palieką atomą. Išmušto elektrono vietoje atsiranda skylė. Elektronai, esantys aukštesnėse orbitalėse, gali nušokti į sužadinto elektrono žemesnę orbitalę. Elektrono šuolio metu išsiskiria energija. Tas procesas gali vykti trimis pagrindiniais būdais, tai katodoluminescencija, Rentgeno spindulių ir Ožė elektronų išspinduliavimu. Rentgeno spindulių energija yra fiksuota ir atitinka konkrečiam atomui būdingą energijų skirtumą tarp dviejų sužadintų būsenų. Šie Rentgeno spinduliai vadinami charakteringais. Jų išspinduliavimo sąveikos mechanizmo schema pavaizduota 5.4 paveiksle.



5.4 paveikslas. Charakteringų Rentgeno spindulių išspinduliavimo sąveikos mechanizmo schema [67].

Šie atomams būdingi energetiniai lygmenų skirtumai leidžia atpažinti bandinio elementinę sandarą, o tai yra analitinės elektronų mikroskopijos bei elektronų zondo mikroanalizės pagrindas [63]. Skaičiuojant visus galimus perėjimus tarp energetinių lygmenų, gaunamas didelis perėjimų kombinacijų skaičius. Padėtį gelbėja atrankos taisyklės, draudžiančios kai kuriuos perėjimus. Dažniausiai registruojami Rentgeno spinduliai atitinka didžiausios energijos perėjimus, t. y. K, L, ir M lygmenų jonizacijas.

Rentgeno spindulių kvanto energija yra įvertinama registruojant detektoriuje sužadintų elektronų ir skylinių porų skaičių. Ličių kompensuoti silicio detektoriai yra naudojami iki 20 keV Rentgeno spinduliuotei registruoti [63]. Pats matavimas remiasi lygiagreto duomenų kaupinimo metodika, todėl į detektorių patenka visų energijų Rentgeno spinduliai. Detektavus Rentgeno kvantą, pastarojo sukurtas signalas analizuojamas ir paskirstomas pagal įvertintą kvanto energiją. Kaupiant kvantų pasiskirstymo pagal energijas statistiką, nustatomi Rentgeno spindulius skleidę atomai.

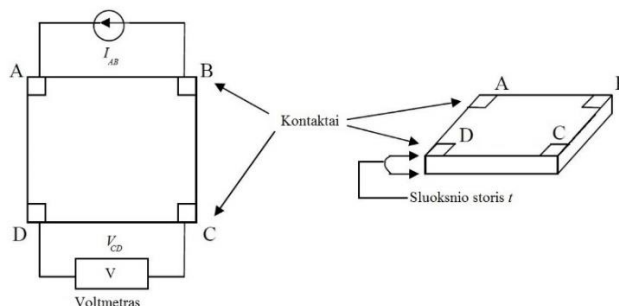
InN/p-GaN struktūrų elementinei sandarai ištirti buvo naudojamas Oxford Instruments EDX priedas, kurio pavadinimas yra X-Max. Detektoriaus medžiaga yra 50 mm<sup>2</sup> silicio plokštelė. Detektoriaus signalai yra analizuojami dviem priedais, tai X-Stream, kuris nuskaityto pačio EDX detektoriaus signalą, o Mics – SEM signalą. Apdoroti signalai yra siunčiami į kompiuterį. Visa matavimo įranga yra Vilniaus Universitete, Taikomųjų Mokslų Institute.

## 5.5. Krūvininkų koncentracijos ir judrio nustatymas Holo (Hall) metodu naudojant Van der Pauw kontaktų geometriją

Keturių zondų metodas leidžiantis išmatuoti sluoksnio laidumą arba savitąją varžą [68] yra vadinamas Van der Pauw metodu. Bandinio paruošimas matavimams turi tenkinti keturis

reikalavimus: i) kontaktai kraštuose, ii) labai maži kontaktai lyginant su bandinio plotu, iii) bandinys homogeniškai legiruotas ir vienodo storio, iv) bandinyje nėra įtrūkimų ar skylių.

Bandinio ir kontaktų išdėstymo geometrija yra pavaizduota 5.5 paveiksle. Srovės šaltinis yra prijungiamas prie AB kontaktų, o voltmetro – prie DC kontaktų. Voltmetro varža yra labai didelė, todėl srovė teka tik iš A į B kontaktą. Tokia matavimo geometrija yra matuojama bandinio (sluoksnio) varža, kuri yra lygi  $R_{AB,CD} = V_{CD}/I_{AB}$  ir išvengiama kontaktinių varžų įtakos. Van der Pauw metodu galima matuoti ir nesimetriinių bandinių varžą arba savitąją varžą.



5.5 paveikslas. Bandinio (sluoksnio) ir kontaktų geometrija [68].

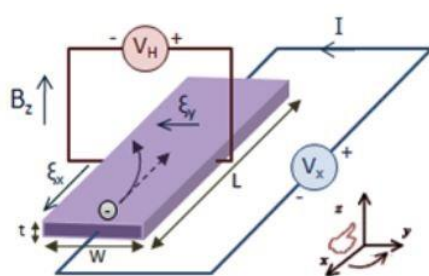
Šiuo atveju yra įvedamas korekcijos faktorius  $f$ , kuris yra priklausomas nuo varžų santykio  $R_r = R_{AB,CD}/R_{AD,BC}$ . Savitosios varžos išraišką, matuojant Van der Pauw metodu, yra:

$$\rho = \frac{\pi t}{\ln(2)} \left( \frac{R_{AB,CD} + R_{AD,BC}}{2} \right) f. \quad (3)$$

Simetriškos geometrijos bandinio atveju koeficientai  $f$  ir  $R_r$  yra lygus 1, o  $R_{AB,CD} = R_{AD,BC}$  ir (3) išraišką supaprastėja:

$$\rho = \frac{\pi t}{\ln(2)} \left( \frac{2R_{AB,CD}}{2} \right) f = \frac{\pi t}{\ln(2)} R_{AB,CD} = \frac{\pi t V_{CD}}{\ln(2) I_{AB}}. \quad (4)$$

Pasinaudojus Van der Pauw matavimo ir kontaktų geometrija bei Holo (*Hall*) efektu galima išmatuoti pagrindinių krūvininkų koncentraciją, jų judrį ir nustatyti kokio laidumo tipo yra matuojamas bandinys (puslaidininkis). Holo matavimuose vienalyčio magnetinio lauko vektorius yra nukreipiamas statmenai srovės kryptims. Judančius krūvininkus pradeda veikti Lorencio jėga, kuri yra statmena ir krūvininkų judėjimo kryptims (srovės kryptims), ir magnetinio lauko vektoriui. Matavimo schema yra pavaizduota 5.6 paveiksle. Prijungus įtampa kaip pavaizduota 5.6 paveiksle elektronai pradės judėti  $-x$  kryptimi.



5.6 paveikslas. Holo įtampos matavimo schema n-tipo puslaidininkiu [69].

Paveikus juos magnetiniu lauku, kuris yra nukreiptas  $+z$  kryptimi elektronus veiks Lorencio jėga, kuri nukreips juos  $-y$  kryptimi. Elektronai kaupsis bandinio dešinėje pusėje, o jonizuoti donorai liks kairėje pusėje. Tada susikurs elektrinis laukas, kuris yra nukreiptas  $-y$  kryptimi. Prijungus bandinio šonuose voltmetrą, matuojamos įtampos dydis yra  $V_H = -E_y w$ . Ta įtampa vadinama Holo įtampa. Turint žinomus dydžius, tokius kaip Holo įtampa, magnetinio lauko dydį, bandinio storį ( $t$ ) ir plotį ( $w$ ), ir srovės dydį galima apskaičiuoti krūvininkų koncentraciją:

$$n = \frac{1}{q} \frac{I_x B_z}{t V_H}. \quad (5)$$

Krūvininkų judris yra skaičiuojamas pagal formulę:

$$\mu_n = \frac{\sigma_n}{qn} = R_H \sigma_n, \text{ kur } R_H = \frac{V_H t}{I_x B_z}. \quad (6)$$

$R_H$  – Holo konstanta,  $\sigma_n$  – laidumas.

InN ir  $p$ -GaN sluoksnių Holo matavimai buvo atlikti naudojantis Microworld įmonės matavimo įranga (modelis: HMS-3000). Matavimo įranga yra Vilniaus Universitete, Taikomųjų Mokslų Institute.

## 5.6. NextNano<sup>3</sup> programinė įranga

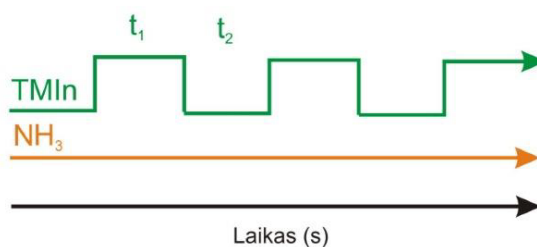
Ši programinė įranga buvo naudota modeliuojant InN ir  $p$ -tipo GaN sudėtinės struktūros energetines juostas. Programos kūrėjas yra dr. Stefan Birner [70]. NextNano<sup>3</sup> yra puslaidininkinių struktūrų modeliavimo programa. Ji leidžia modeliuoti 1D, 2D ir 3D puslaidininkines struktūras arba prietaisus. Programos architektūra nėra labai sudėtinga. Pradžioje yra sukuriamas įvesties failas (ang. *input file*). Jame reikia apibrėžti prietaiso arba struktūros matiškumą ir geometriją, dydį, ir kristalinę kryptį. Po to prietaisas arba struktūra yra suskirstoma į norimo dydžio sektorius. Kiekvienam sektoriui reikia priskirti skaičiavimo žingsnį. Sektoriams yra priskiriamas matematinis modelis, tai yra arba skaičiuoti kvantmechanškai (Šredingerio lygtis), arba klasikiniu būdu (Puasono lygtis). Darbe pateikti rezultatai buvo skaičiuojami naudojant Puasono, Šredingerio ir krūvininkų pernašos lygčių



sistemos bendrą sprendinį. Skaičiavimas pradedamas nuo įtempimų skaičiavimo ir toliau, naudojant Van de Walle modelį yra skaičiuojamos energetinės juostos. Apibrėžiami piezoelektriniai ir piroelektriniai (spontaniniai) poliarizaciniai krūviai. Po šių pradinių veiksmų programa užduoda tam tikrą potencialą ir sprendžia Puasono lygtį, kuomet struktūra yra termodinaminėje pusiausvyroje. Puasono lygties sprendinys yra struktūros vidinis potencialas. Nuo tos vietos programa skaičiuoja, tai kas buvo nurodyta operatoriaus.

## 6. InN/GaN *n-p* struktūros auginimas MOVPE būdu

Šiame darbe InN/ p-tipo GaN struktūros buvo auginamos ant 5  $\mu\text{m}$  GaN/safyro ruošinių. InN sluoksniai buvo auginami impulsiniu MOVPE būdu. Impulsinio auginimo metu TMIn į reaktorių buvo tiekiamas su pertrūkiais (TMIn srauto impulso trukmė  $t_1$ , pauzės tarp impulsų trukmė  $t_2$ , vieną auginimo ciklą sudaro vienas impulsas ir pauzė). Schematinis proceso vaizdas pateiktas 6.1 paveiksle.  $\text{NH}_3$  ir nešančių azoto dujų srautas buvo pastovus per visą auginimo procesą. Sluoksnį auginant impulsiniu būdu galima pasiekti pavienių atominių sluoksnių epitaksijos režimą. Vienas iš šio auginimo būdo privalumų yra galimybė auginti sluoksnius žemesnėse temperatūrose neprarandant geros kristalinės kokybės [71].



6.1 paveikslas. Impulsinio būdo auginimo schema.

2017 rudens semestro kursinio darbo metu optimizuojant auginimo parametrus ( $\text{NH}_3$  ir TMIn srautai,  $t_1$  ir  $t_2$ , auginimo temperatūra  $T$ ) buvo atlikta virš 30 technologinių eksperimentų. Pirminis sluoksnio paviršiaus šiurkštumo įvertinimas auginimo metu buvo reflektometro duomenys. Reflektometro rezultatai parodė, ar auginamo InN sluoksnio paviršius šiurkštėja, ar ne. Taip pat iš reflektometro matavimų rezultatų buvo nustatomas sluoksnio augimo greitis ir paskaičiuojamas užauginto sluoksnio storis. Toliau naudojant optimizuotus parametrus buvo užauginti skirtingo storio InN sluoksniai ant 5  $\mu\text{m}$  storio GaN ruošinių. Ištirti jų struktūriniai ir optiniai parametrai. Pagal matavimų rezultatus buvo atrinktas geriausias užauginto (kokybiškiausio) InN sluoksnio auginimo receptas, kuris buvo panaudotas šiame darbe.

GaN ir InN *p-n* struktūros auginimai buvo atliekami ant dviejų colių safyro padėklo *c* plokštumos, nupjautos  $0,35^\circ$  *m* plokštumos atžvilgiu. Trimetilgalis (TMGa), trimetilindis (TMIn) ir amoniakas ( $\text{NH}_3$ ) buvo naudojami kaip galio (Ga), indžio (In) ir azoto (N) šaltiniai. Bi-ciklopentadienilio magnis ( $\text{Cp}_2\text{Mg}$ ) buvo naudojamas kaip magnio (Mg) šaltinis. Magnio atomai GaN kristale sudaro akceptorines būsenas, kurios yra nutolusios nuo valentinės juostos viršaus 0,2 eV [72, 73].

Struktūros auginimas prasideda nuo safyro padėklo paviršiaus valymo procedūros, kurios metu padėklas yra iškaitinamas aukštoje temperatūroje vandenilio atmosferoje. Po iškaitinimo proceso yra auginamas 5  $\mu\text{m}$  storio nelegiruotas GaN naudojant dviejų žingsnių auginimą [74]. Toliau yra auginamas Mg atomais legiruotas GaN (GaN:Mg) vandenilio atmosferoje. Auginimo parametrai

yra pateikti 1 lentelėje ( $Cp_2Mg$  pirmtako srautas  $7.72 \times 10^{-7}$  mol/min) Auginimui pasibaigus GaN:Mg sluoksnis yra 20 minučių kaitinamas  $850^\circ C$  temperatūroje, azoto atmosferoje. Šio proceso metu yra aktyvuojami Mg atomai, susidaro akceptorinės būsenos. Auginimo metu Mg atomai sudaro su vandenilio (H) atomais kompleksus  $((Mg-H)^0)$ , kurie nėra aktyvūs, kitaip sakant Mg susijungęs su vandeniliu nesudaro akceptorinės būsenos [75,76], bet suformuoja elektriškai neutralų kompleksą. Taip pat Mg nesudaro akceptorinių būsenų kuomet augimo metu įterpia į kristalinės gardelės tarpmazgius [77, 78]. Pakaitinus GaN sluoksnį  $800 \div 850^\circ C$  temperatūroje ryšiai tarp Mg ir H suardomi. H atomai migruoja per dislokacijas ir pasišalina iš GaN sluoksnio [76, 79]. Kitu atveju, dėl padidėjusių GaN kristalinės gardelės vibracijų, Mg atomai gali lengviau migruoti ir radę Ga vakansiją ją užpildo sudarydami akceptorinę būseną [77, 78].

Lentelė 1. *p*-tipo GaN sluoksnio auginimo parametrai.

Bandinio nr.	Auginimo T ( $^\circ C$ )	V/III santykis	Auginimo slėgis (mbar)	Storis (nm)
1276	1030	6298 (NH <sub>3</sub> 0.268 [ mol/min] / TMGa $4.25 \cdot 10^{-5}$ [ mol/nin])	150	300
1277				600
1278				100

InN sluoksnio auginimas sudarytas iš dviejų etapų. InN sluoksnis pradamas auginti žemesnėje temperatūroje  $T_1=570^\circ C$  ir per keletą dešimčių ciklų auginimo temperatūra tolygiai pakeliama iki  $T_2=610^\circ C$ . Toliau tęsiamas pagrindinio sluoksnio auginimas nekeičiant jokių parametrų. InN auginimo parametrai yra pateikti 2 lentelėje.

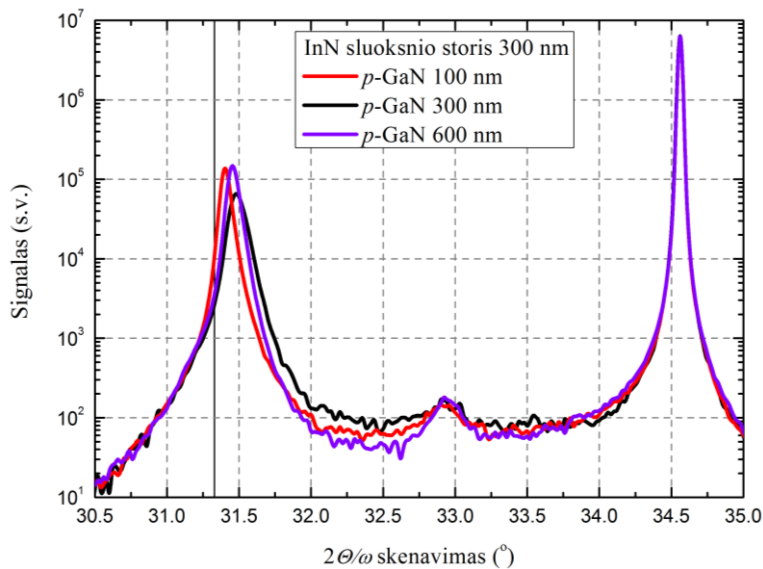
Lentelė 2. InN sluoksnių auginimo parametrai.

Bandinio nr.	Auginimo T ( $^\circ C$ )	Ciklų skaičius	TMin tiekimo trukmė, $t_1$ (s)	Pauzės trukmė, $t_2$ (s)	V/III santykis	Auginimo slėgis (mbar)	Storis (nm)
1276 - 1278	$T_1$ 570 $T_2$ 610	600	7	20	9968 (NH <sub>3</sub> 0.268 [ mol/min] / TMin $2.688 \cdot 10^{-5}$ [ mol/nin])	400	300

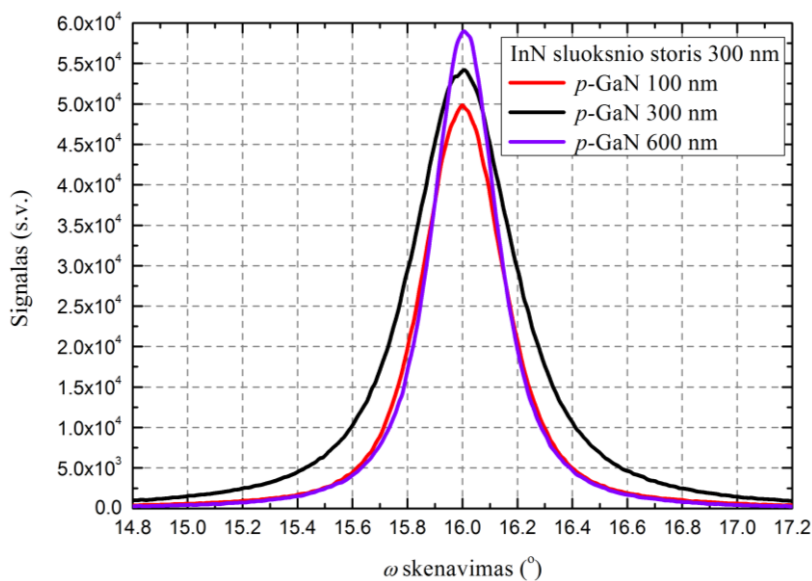
## 7. InN/*p*-GaN sandūros struktūrinė analizė

### 7.1. InN/*p*-GaN struktūrų Rentgeno spindulių difrakcijos matavimai (XRD)

InN sluoksnių struktūrinė analizė buvo atlikta naudojant rentgeno spindulių difrakciją. Išmatuotos rentgenogramos yra pateiktos 7.1 paveiksle. Rentgeno spindulių difrakcijos matavimai ( $2\theta/\omega$  skenavimai ir  $\omega$  skenavimai) atlikti *c* ašies kryptimi [0002].



a)



b)

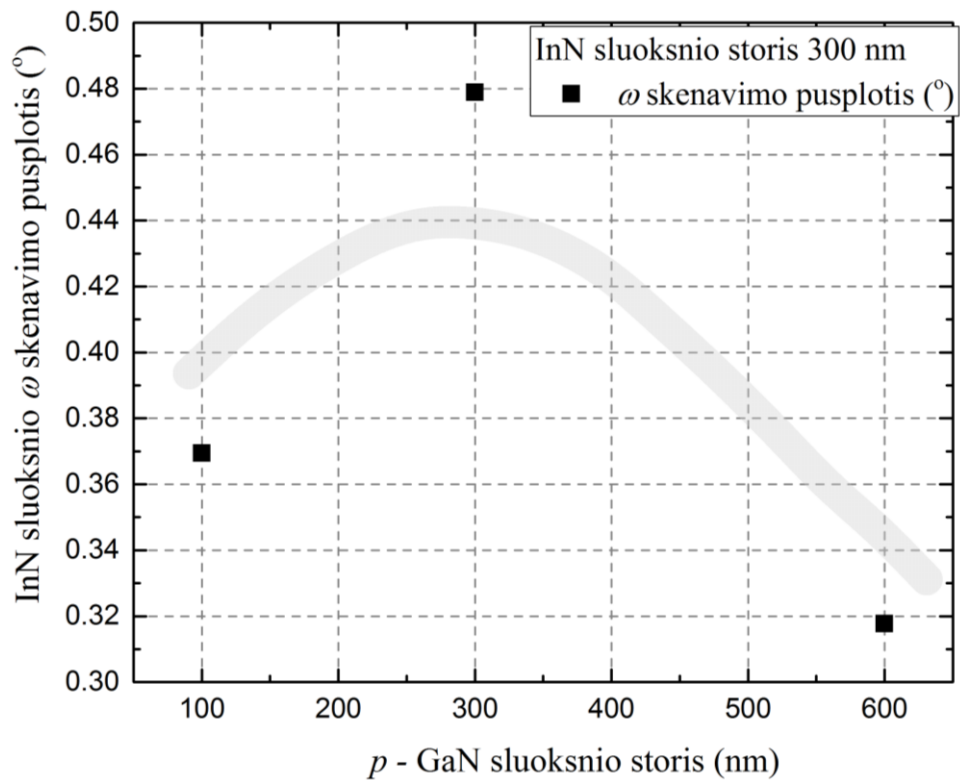
7.1 paveikslas. InN/*p*-GaN struktūrų rentgenogramos: a)  $2\theta/\omega$  skenavimas; b) (0002) plokštumos  $\omega$  skenavimas.

7.1 paveiksle (a) skirtingų bandinių difraktogramų kreivių smailės ties  $34,55^\circ$  atitinka GaN sluoksnio (0002) plokštumą. Pažymėta tiesė padėtis ties  $31,33^\circ$  atitinka galimą atspindį nuo relaksavusio InN (0002) plokštumos [80, 23]. To kampo dydis atitinka  $5,7039 \text{ \AA}$  gardelės parametą *c*. Šiuo atveju visų bandinių difracinių atspindžių smailės yra pasislinkusios į didesnių kampų pusę.

Tai reiškia, kad visų  $p$ - $n$  struktūrų InN sluoksnis yra nežymiai įtemptas  $c$  kryptimi. Pasinaudojant 7.1 (a) paveikslo rezultatais, buvo paskaičiuotas  $c$  gardelės parametras naudojant  $\sim 31,46^\circ$  kampo dydį. Apskaičiuoto gardelės  $c$  parametro vertė yra 5,6827 Å. InN sluoksnio kristalinės gardelės  $a$  parametras yra didesnis nei GaN, jo vertė yra 3,5365 Å [23], o GaN – 3,189 Å [81]. Auginant epitaksiškai InN sluoksnį ant GaN sluoksnio, InN gardelės  $a$  parametras turi sumažėti. Atsiranda gniuždantis įtempis dėl kristalinių gardelių nesutapimo [30]. Antra gniuždinančio įtempio komponentė InN sluoksnyje atsiranda nuo skirtingų terminio plėtimosi koeficientų tarp InN ir GaN/safyro [30] bandinio vėsimo metu. Dėl to InN sluoksnio kristalinės gardelės  $a$  parametras turi būti suspaustas, o  $c$  ištemptas, arba atvirkščiai, tai tokio tipo įtempis vadinamas dviašiu įtempiu. Rezultate InN sluoksnis yra suspaustas ir  $c$ , ir  $a$  kryptimi. Tokio tipo įtempis yra vadinamas hidrostatiiniu sluoksnio įtempiu [28]. Hidrostatinį įtempį gali sukelti homogeniškai pasiskirstę taškiniai defektai užaugintame sluoksnyje. 2017 rudens semestro kursinio darbo „InN SLUOKSNIŲ AUGINIMAS ANT GaN IR SAFYRO MOVPE BŪDU IR CHARAKTERIZAVIMAS.“ metu buvo iširta skirtingo storio InN sluoksnių, užaugintų ant GaN sluoksnio, paviršiaus morfologija. Pastebėta, kad InN sluoksnis ant GaN sluoksnio auga Strasni-Kranstanov režime, tai yra auginimo pradžioje formuojasi mažos salelės, kurios, priklausomai nuo auginimo sąlygų toliau suauga į vientisą sluoksnį arba tęsiamas salelių augimas (3D auginimas). Suauginėjant salelėms į vientisą sluoksnį dėl elastinės sluoksnio deformacijos atsiranda tempimo įtempis [30]. Šio įtempio komponentė dalinai kompensuoja jau minėtą gniuždymo įtempį, todėl kristalinės gardelės parametrai gali pasikeisti. Gali atsirasti dviašio įtempio komponentė. Šiuo atveju ant  $p$ -GaN užauginto InN sluoksnio įtempis galimai susideda iš hidrostatiinio ir dviašio įtempio komponentių superpozicijos.

Papildomi difrakcijos signalai  $(32,5 \div 33)^\circ$  ribose gali būti susiję su metaliniu In, InN sluoksnio (10-11) plokštuma, polikristalinėm InN formom, kubinio InN inkluzais ar net indžio oksido tam tikroms fazėm [82, 83, 84]. Tiksliesniam nustatymui reikalingi papildomi tyrimai.

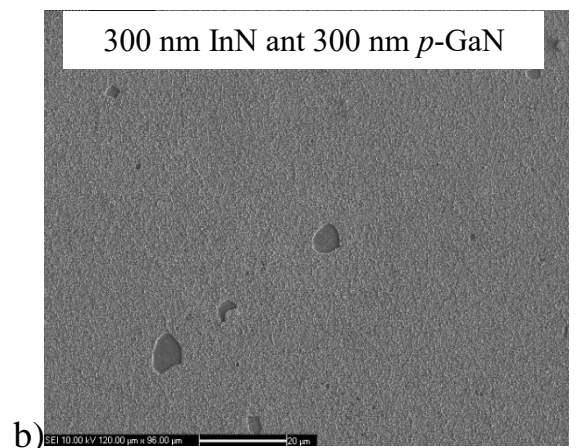
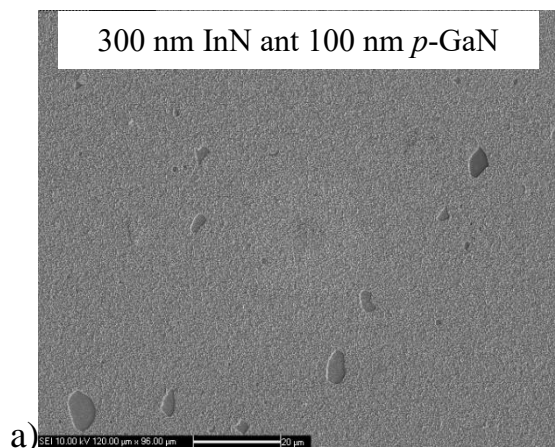
Sluoksnio homogeniškumui ir kokybei įvertinti buvo atlikti omega ( $\omega$ ) skenavimai, kurių kreivės yra pateiktos paveiksle 1 (b).  $\omega$  skenavimų smailių puspločių apibendrinti rezultatai pateikti 7.2-ame paveiksle. Palyginus su literatūroje geriausiais rezultatais šių bandinių  $\omega$  skenavimo smailių puspločių vertės yra didesnės išskyrus vieną. Literatūroje 220 nm InN sluoksniui, kuris buvo auginamas  $575^\circ\text{C}$  temperatūroje,  $\omega$  skenavimo smailės pusplotis yra  $0,36^\circ$  [85]. Šiuo atveju InN 300 nm storio sluoksnio užauginto ant 600 nm  $p$ -tipo GaN  $\omega$  skenavimo smailės pusplotis yra  $\sim 0,32^\circ$ . Šio InN sluoksnio kristalinė kokybė yra geriausia, palyginus su kitais bandiniais.  $\omega$  skenavimo pusplotis gali padidėti dėl atsiradusių skirtingai orientuotų kristalinių, salelių (*mosaicity*) arba padidėjusio dislokacijų tankio [86].

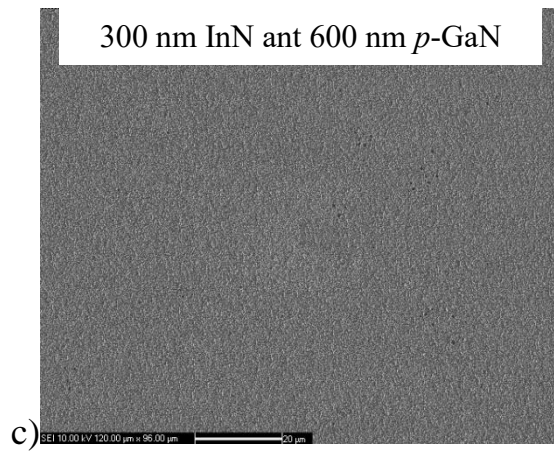


7.2 paveikslas. InN sluoksnio  $\omega$  – skenavimų smailių pusplotių priklausomybė nuo  $p$ -tipo GaN sluoksnių storio. Šviesiai pilka linija – orientyras.

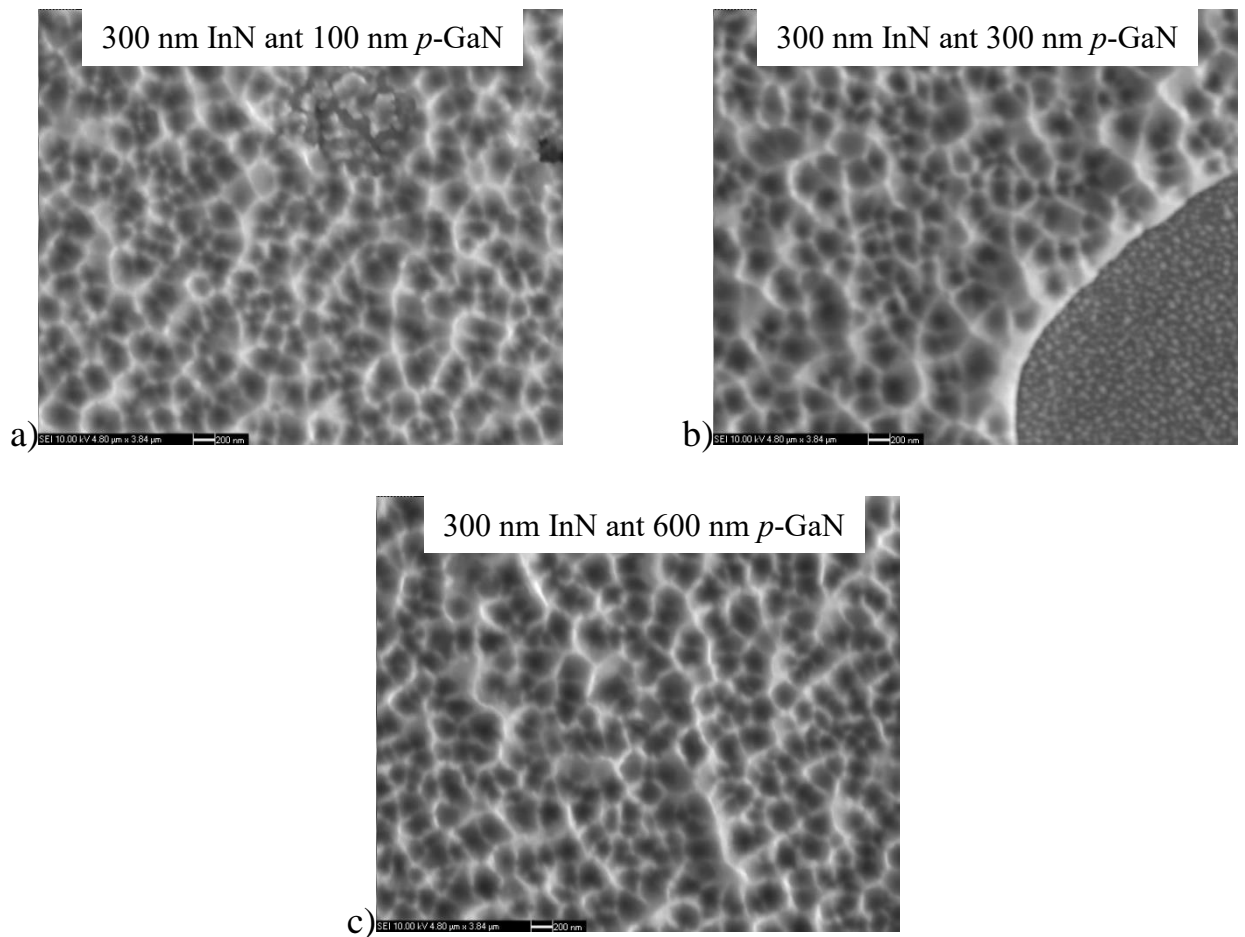
## 7.2. InN sluoksnio paviršiaus morfologija

Skenuojančių elektronų mikroskopu buvo atliktas InN sluoksnių, užaugintų ant skirtingo storio  $p$ -tipo GaN, paviršiaus morfologijos tyrimas. Visuose eksperimentuose greitinanti elektronų įtampa buvo 10 kV. 7.3 paveiksle pateiktos InN sluoksnių paviršiaus SEM nuotraukos. Iš 7.3 paveikslo nuotraukų galima pastebėti, kad InN sluoksnio, užauginto ant 100 nm ir 300 nm storio  $p$ -GaN sluoksnių, paviršiuje yra matomos sritys, kuriose InN sluoksnis yra atsilupęs nuo paviršiaus [87]. 7.4 paveiksle yra pateiktos InN sluoksnio paviršiaus nuotraukos, esant didesniai SEM vaizdo didinimui. Iš šių nuotraukų matyti, kad InN sluoksnio paviršius yra ganėtinai šiurkštus.

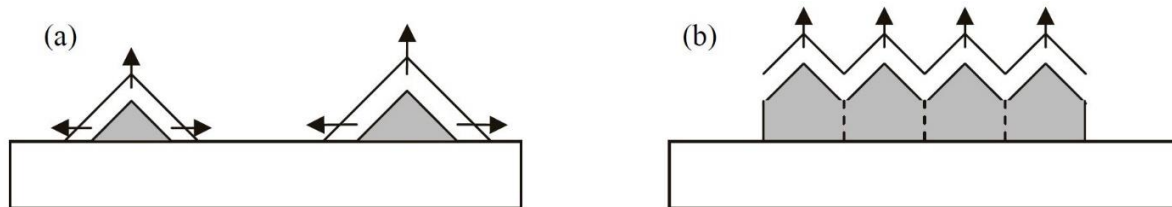




7.3 paveikslas. Ant skirtingo storio *p*-GaN sluoksnių užaugintų InN paviršiaus SEM nuotraukos.  
Skalės orientyras 20  $\mu\text{m}$ .



7.4 paveikslas. Ant skirtingo storio *p*-GaN sluoksnių užaugintų InN paviršių SEM nuotraukos.  
Skalė orientyras 200 nm.



7.5 paveikslas. InN sluoksnio augimo schema auginimo proceso pradžioje (a) ir vėlesniame etape (b) esant *Volmer-Weber* augimo režimui [87].

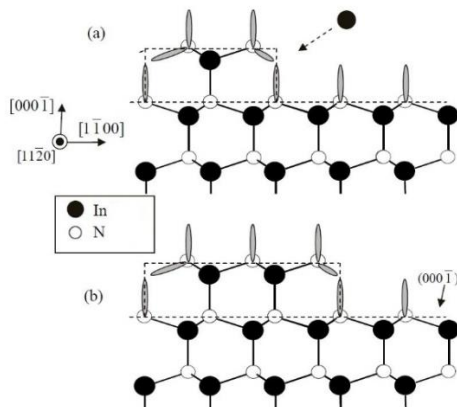
2017 rudens semestro kursiniame darbe „InN SLUOKSNIŲ AUGINIMAS ANT GaN IR SAFYRO MOVPE BŪDU IR CHARAKTERIZAVIMAS“ buvo parodyta, kad InN sluoksniai ant nelegiruoto GaN auga *Stranski-Krastanov* režimu (ant pirminio įtempto plono drėkinamo sluoksnio formuojasi nukleacijos taškai ir toliau relaksavęs sluoksnis auga 3D režimu). Šiuo atveju InN sluoksniai yra auginami ant *p*-GaN, kurio paviršius, lyginant su nelegiruotu ir optimizuotomis sąlygomis augintu GaN yra šiurkštesnis ir defektuotesnis dėl magnio priemaišos ir žemesnės auginimo temperatūros. Dėl to labai tikėtina, kad InN auga *Stranski-Krastanov* ir *Volmer-Weber* režimų riboje. Šiuo atveju InN sluoksnio auginimas prasideda nuo nukleacinių taškų peraugančių į 3D salas be ištisinio paviršių dengiančio drėkinamojo InN sluoksnio. Tai gerai matyti 7.4 (b) paveiksle. Šviesi taškeliai atsilupusioje InN sluoksnio vietoje yra susiformavusios InN salelės. Tęsiant auginimą jos didėja, tai yra auga *c* ir *a* kryptimi. InN salelių augimo schema yra pavaizduota 7.5 paveiksle. Ganėtina vienodos salelės, kurios buvo suformuotos auginimo proceso pradžioje, pasiekusios tam tikrą dydį gali pradėti plėstis greičiau (angl. *island ripening*) paslėpdamos savyje šalia buvusias saleles [88]. Todėl artimoje srityje, kai kurios salelės gali būti aukštesnės ir didesnės. Šie procesai vykstantys sluoksnio augimo metu ir lemia InN paviršiuje stebimą atsitiktinį ir nevienodą tarpusavyje suaugusių salų tinklą (žiūrėti pav. 7.4).

Buvo pastebėta, kad auginant sluoksnius ant žematemperatūrinio GaN sluoksnio pagerėja InN adhezija prie padėklo [89]. Didinant *p*-GaN sluoksnio storį jo paviršius šiurkštėja. Atsiranda daugiau plokštumų prie kurių InN galėtų prisijungti. Auginant InN ant 100 nm storio *p*-GaN sluoksnio InN adhezija yra silpniausia. InN relaksuojant jo paviršiuje dėl tempimo įtempio ir gardelių nesutapimo dalis sluoksnio nusilupa (Pav. 7.1 a)). Kuomet InN yra auginamas ant 300 nm *p*-GaN sluoksnio jo adhezija pagerėja, mažiau yra atsilupusių vietų (Pav. 7.1(b)). Pagerėjus adhezijai InN sluoksnis ilgiau išlieka įtemptas, mažiau sluoksnio atplyšta. Šį efektą patvirtina XRD eksperimento rezultatai – InN sluoksnis ant 300 nm *p*-GaN yra labiausiai įtemptas. Ant 600 nm storio *p*-GaN sluoksnio InN dar stipriau prisijungia prie šiurkštaus *p*-GaN paviršiaus. Kartu ant šiurkštaus paviršiaus InN smulkesnių salelių išsidėstymas yra tankesnis, todėl sumažėja tempimo įtempiai sauginėjant salelėms į sluoksnį. Taip pat sumažėja įtempimai atsirandantys dėl kristalinių gardelių nesutapimų. Dėl aukščiau

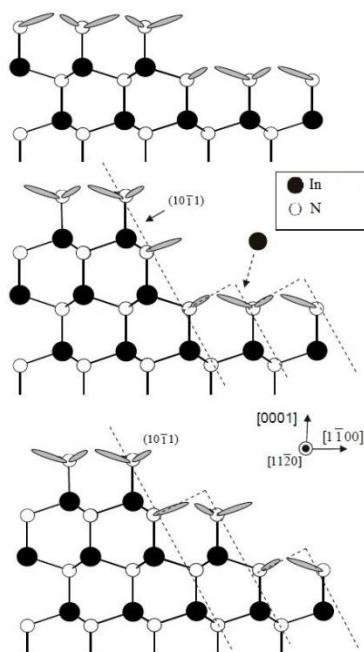


paminėtų priežasčių ant storiausio *p*-GaN sluoksnio užaugintas mažiausiai atplyšimų turintis InN sluoksnis (Pav. 7.1 (c)). Sumažėjusį InN sluoksnio įtempimą patvirtina ir XRD eksperimento rezultatai.

Kad paaiškinti, kodėl iki 300 nm storio augintų InN sluoksnių augimas nepasikeitė iš 3D į 2D, reikia aptarti InN ant skirtingo poliškumo GaN sluoksnių augimo ypatumus [87]. Kuomet InN yra auginamas ant N poliškumo GaN sluoksnio, jo poliškumas taip pat yra N. Analogiškai, auginant InN sluoksnį ant Ga poliškumo GaN, pastarasis auga In poliškumo.



7.6 paveikslas. N poliškumo InN augimo mechanizmo struktūrinė schema [87].



7.7 paveikslas. In poliškumo InN augimo mechanizmo struktūrinė schema [87].

Paveiksluose 7.6 ir 7.7 parodyti skirtingo InN poliškumo auginimo mechanizmai. InN yra auginamas azoto įsotintoje atmosferoje. Todėl yra padaroma prielaida, kad N atomas prisijungia prie

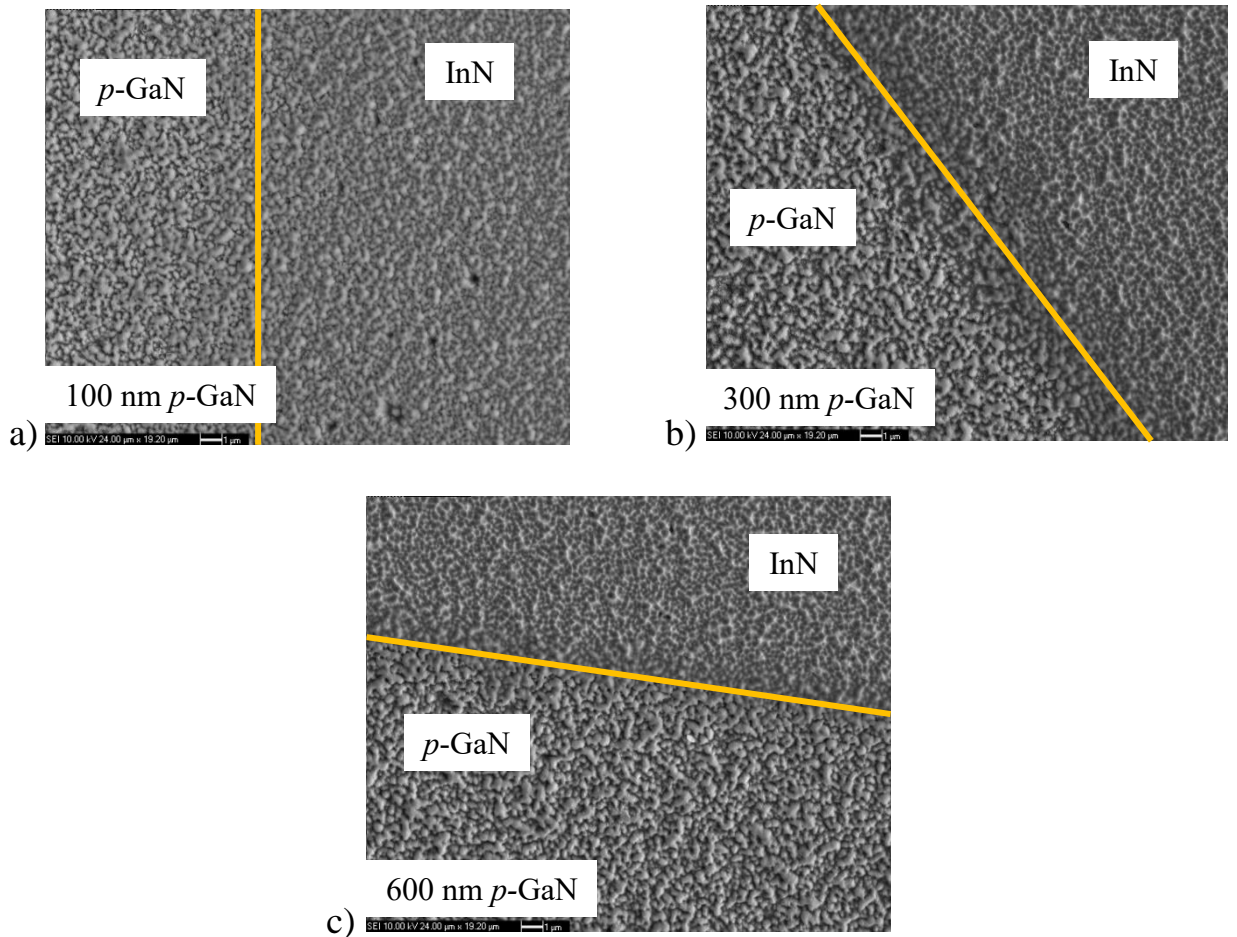
kristalinės gardelės greičiau nei In atomas [87]. Azoto trūkumo viso auginimo metu nėra. Šioje situacijoje auginimo greitį ribojantis faktorius yra TMin srautas. Kuomet InN sluoksnis yra N poliškumo, jo paviršiuje N atomai turi tik po vieną laisvą jungtį, kaip parodyta 7.6-ame paveiksle. In atomų judrumas ant N-poliškumo sluoksnio yra didesnis, nes tikimybė prisijungti In atomui ant paviršiaus yra mažesnė. Laidtelis, kuris susidaro tarp apatinio ir viršutinio sluoksnio, turi dvi laisvas azoto jungtis, kurios veikia kaip potencinė duobė. Todėl šioje vietoje In atomai turi didžiausią tikimybę prisijungti prie kristalinės gardelės. Tokiu būdu yra pagerinamas lateralinis auginimas, o stabilus auginimo paviršius yra (000-1). Šiuo atveju InN sluoksnis pradeda augti nuo salelių, kurios po tam tikro laiko iš 3D augimo režimo pereina į 2D

In poliškumo sluoksniuose N atomai turi po dvi (iš tikrųjų po tris jeigu nagrinėjama 3D sistemoje) laisvas jungtis, kaip yra parodyta 7.7-ame paveiksle. Šiuo atveju In atomas visame paviršiuje turi vienodą tikimybę prisijungti prie kristalinės gardelės. Taip pat matyti, kad (10-11) paviršius yra ekvivalentiškas (000-1) paviršiui, nes N atomai šiame paviršiuje turi tik po vieną laisvą jungtį, todėl In poliškumo InN sluoksniuose (10-11) tampa augimo paviršiumi. Tokio InN sluoksnio paviršiaus morfologija, kai visada vyksta 3D augimas ir yra stebima SEM nuotraukose paveiksle 7.4.

### 7.3. InN/GaN *n-p* struktūros sauso ėsdinimo rezultatai

Kad suformuoti elektrinį kontaktą *p*-GaN srityje, dalyje InN/GaN bandinio buvo visiškai pašalintas InN sluoksnis. Tai buvo atlikta naudojant sauso ėsdinimo (angl. *Reactive Ion Etching (RIE)*) įrangą (*Oxford Instruments Plasma System 100*), kuri yra Vilniaus Universitete, Taikomųjų Mokslų Institute. Šioje sistemoje ėsdiklis yra plazma sudaryta iš teigiamų chloro (Cl) jonų, kurie bombarduoja bandinio paviršius išmušdami iš jo medžiagos atomus. Šis įrenginys leidžia labai kryptingai (vertikaliai) ėsdinti įvairių medžiagų paviršius. Plazma sukuriama prijungiant stiprų 100 W elektromagnetinį lauką (EML), moduluotą 13,56 MHz dažniu [90]. InN ėsdinimui buvo naudojamas 10 sccm (angl. *standard cubic centimeter per minute*) Cl dujų srautas, darbinės kameros slėgis ėsdinimo metu - 4 mbar. Bandinio aušinimui buvo naudojamos He dujos. 300 nm storio InN sluoksnis visiškai pašalinamas per 50 s. 420 μm storio safyro plokštelė buvo naudojama kaip šešėlinė kaukė.

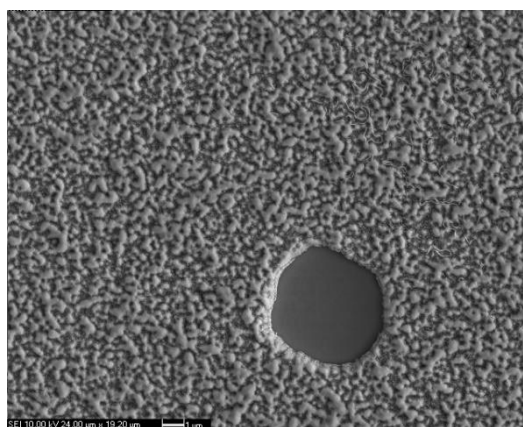
7.8 paveiksle pateiktos InN/GaN *n-p* struktūrų po InN sluoksnio nuėsdinimo paviršiaus SEM nuotraukos. Visuose bandiniuose nuėsdinimo riba nėra staigi dėl to, kad santykinai stora safyro plokštelė - kaukė ėsdinimo proceso metu trikdė laminarų Cl jonų srautą ties ėsdinimo riba.



7.8 paveikslas. InN/GaN  $n$ - $p$  struktūrų paviršiaus SEM nuotraukos po sauso ėsdinimo.

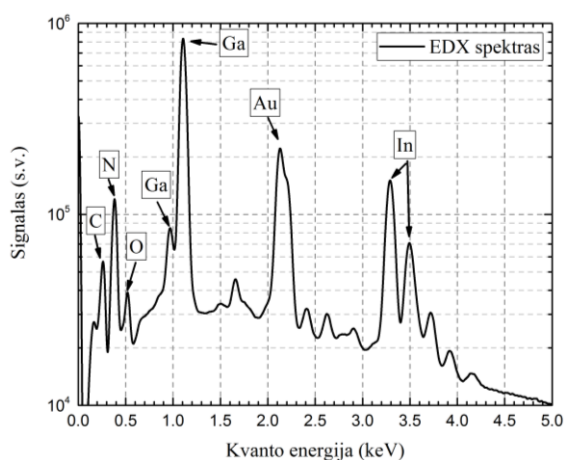
Paveiksle 7.9 pateikta  $p$ -GaN sluoksnio paviršiaus SEM nuotrauka po InN sluoksnio nuėsdinimo.  $p$ -GaN sluoksnio paviršius po ėsdinimo tapo šiurkštus. Šio efekto priežastis - InN sluoksnio nevienodas storis ir nevienodas kristalinių defektų pasiskirstymas sluoksnyje. InN sluoksnis yra plonesnis ir turi daugiau defektų ties salų suaugimu lyginant su salų centrais. Defektuotos plonesnės InN sluoksnio vietos yra greičiau pašalinamos Cl jonais. Tokiu būdu InN sluoksnio storio ir defektų kiekio variacijos, ėsdinimo metu, veikia kaip skirtingo storio ir skirtingo ėsdinimo greičio kaukės. Pilnai pašalinus InN sluoksnį nuėsdintas  $p$ -GaN sluoksnis dalinai atkartoja buvusį nevienalytį InN sluoksnį. Tuo atveju, kai auginimo metu InN sluoksnio dalis atplyšta, po ėsdinimo toje vietoje GaN sluoksnio paviršius išlieka lygus (pav. 7.9).

Aukščiau aprašytas rezultatas gali būti pritaikytas norint suformuoti padidinto paviršiaus GaN sluoksnius. Tai gali būti aktualu šviestukų gamyboje šviesos išstrūkos gerinimui [91] arba naudojant  $p$ -GaN kaip vieną iš padidinto paviršiaus ploto kontaktų fotoelektrochemijos procesuose vandens skaidymui [92].



7.9 paveikslas. *p*-GaN paviršiaus SEM nuotrauka po InN sluoksnio nuėdinimo. Lygaus paviršiaus sritis atitinka auginimo metu atsilupusio InN sluoksnio sritį. *p*-GaN sluoksnio storis 300 nm.

Naudojant EDX sistemą bandinyje su 600 nm storio *p*-GaN sluoksniu buvo atlikta elementinė analizė ties InN ėsdinimo riba. Bendras bandinio EDX spektras pateiktas 7.10-ame paveiksle. EDX spektras yra sudarytas iš dviejų Rentgeno spinduliuotės signalų. Vienas signalas, tai yra foninė Rentgeno spinduliuotė emituojama stabdomų elektronų. Kita dalis turinti ryškias smailes yra charakteringa Rentgeno spinduliuotė, kurią emituoja sužadinti medžiagos atomai. Charakteringos Rentgeno spinduliuotės spektre matomų smailių padėčių vertės apibendrintos 1-oje lentelėje.

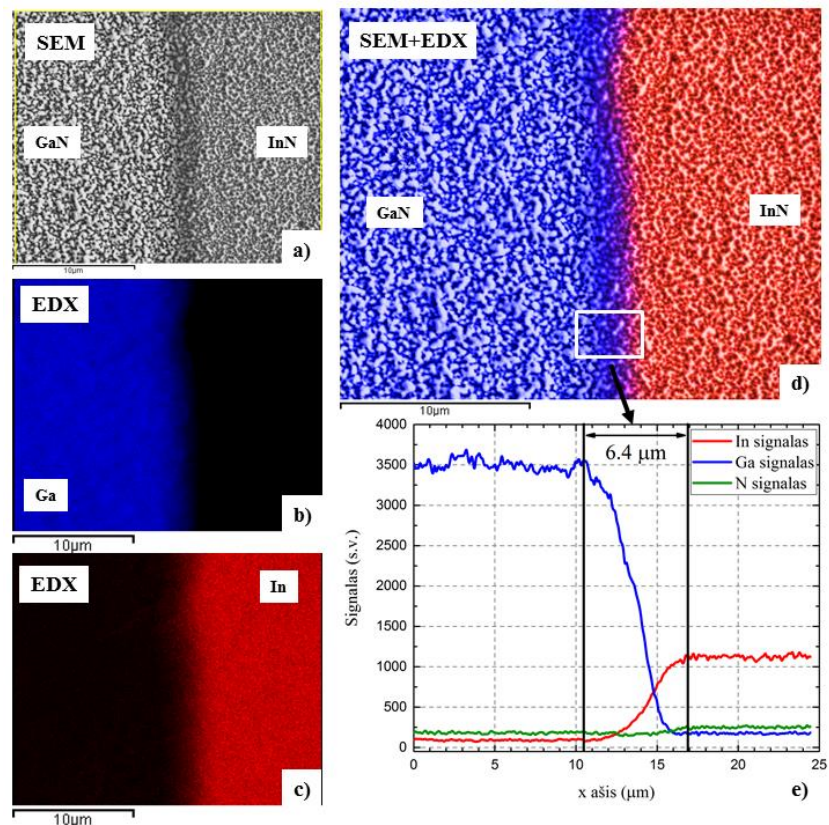


7.10 paveikslas. EDX spektras ir elementinė analizė.

Lentelė 1. Ga, In, N, C ir O atomų charakteringų Rentgeno spindulių energijos verčių lentelė. [93] cituojama literatūra.

Atomas	Kvanto energija (keV)	Linijos pavadinimas	Literatūroje pateikta kvanto energija (keV)
Ga	0,97	La1	1,09
Ga	1,11	Lb1	1,12
In	3,29	La1	3,29
In	3,5	Lb1	3,48
N	0,38	Ka1	0,39
C	0,26	Ka1	0,27
O	0,52	Ka1	0,52

Išmatuotame spektre aiškiai yra matomos Ga, In ir N linijos. SEM matavimams bandiniai buvo padengiami auksu, todėl EDX spektre aiškiai yra matoma Au linija. Spektre stebimos C ir O linijos yra dėl nedidelio paviršiaus užterštumo organiniais junginiais ir dalinės GaN ir InN paviršiaus oksidacijos.



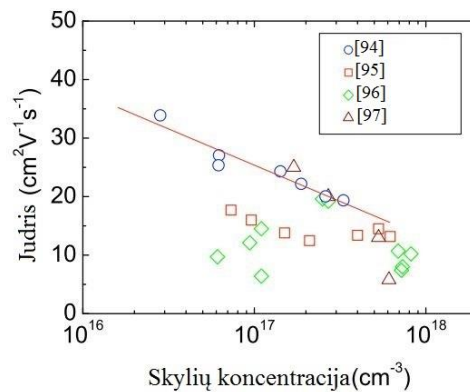
7.11 paveikslas. InN/GaN *n-p* struktūros po sauso ėsdinimo paviršiaus SEM nuotrauka (a); Ga ir In pasiskirstymo žemėlapiai (b) ir (c); paviršiaus SEM nuotrauka sutapatinta su metalų pasiskirstymo žemėlapiais d); Ga ir In pasiskirstymo profilis skersai ėsdinimo zonos e).

Bandinyje su 600 nm storio *p*-GaN buvo atliktas medžiagų erdvinio pasiskirstymo matavimas, kurio rezultatai yra pateikti 7.11-ame paveiksle (b) ir (c). Ga ir In erdvinio pasiskirstymo paviršiuje signalai sutapatinti su SEM nuotrauka (7.11 paveikslas (a)) ir galutinis rezultatas pateikiamas paveiksle 7.11 (d). Sudarytas bandinio paviršiuje Ga ir In atomų pasiskirstymo profilis pateikiamas paveiksle 7.11 (e). Gautieji rezultatai patvirtina, kad ėsdinimo metu safyro kaukės neuždengtoje vietoje InN yra visiškai pašalintas ir pilnai atidengtas *p*-GaN paviršius. In atomų pasiskirstymo profilis patvirtina, kad InN sluoksnio nuėsdinimo riba yra nestati, dalinai nuėsdinto InN sluoksnio plotis yra 6,4 μm.

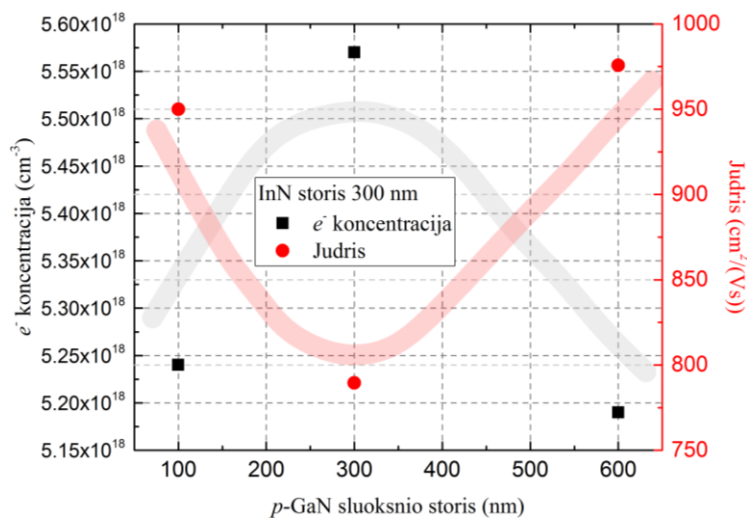


## 8. InN/GaN *n-p* struktūros elektriniai matavimai

InN ir *p*-GaN sluoksnių pusiausvirųjų krūvininkų koncentracijos ir judriai kambario temperatūroje išmatuoti Holo (*Hall*) metodu Van der Pauw konfiguracijoje. *p*-GaN išmatuota skylių koncentracija  $n_p = 2,2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , o judris  $\mu_p = 13 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$ . Kitų mokslininkų grupių *p*-GaN sluoksnių skylių koncentracijos ir judrio vertės yra pateiktos 8.1 paveiksle. Lyginant su kitų grupių užaugintais bandiniais šiame darbe *p*-GaN skylių koncentracijos ir judrio vertės yra panašios. InN sluoksnių Holo matavimo rezultatai yra pateikti 8.2 paveiksle.



8.1 paveikslas. Skylių judrio priklausomybė nuo skylių koncentracijos *p*-GaN [94].



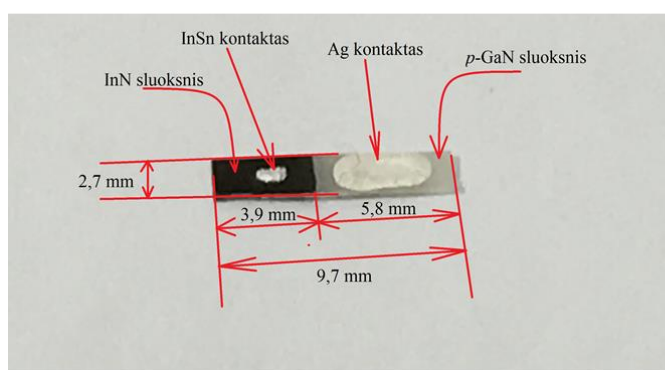
8.2 paveikslas. InN sluoksnių elektronų koncentracijos ir judrio priklausomybės nuo *p*-GaN storio.

Šviesiai raudona ir šviesiai pilka linijos – orientyrai.

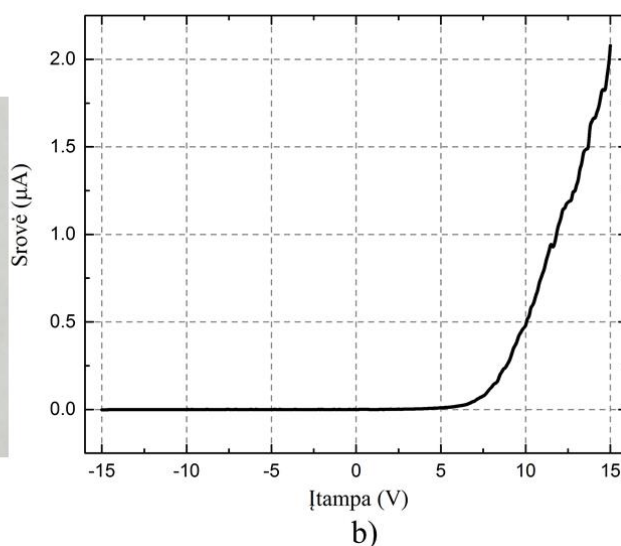
*M. Jamil* ir bendraautoriai augino InN sluoksnius impulsiniu būdu ant nelegiruoto GaN buferio [85]. Jų geriausiame bandinyje išmatuota elektronų koncentracija buvo  $1,5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , o judris –  $681 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$ . Vilniaus universiteto TMI mokslininkai 2015 metais publikuotame darbe pateikia impulsiniu būdu auginto InN sluoksnio elektronų koncentraciją  $(8 \div 9) \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  ir judrį  $644 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$  [50]. Kitų mokslininkų grupių MOVPE būdu užaugintuose InN sluoksniuose išmatuotos

elektronų koncentracijos yra  $(3 \div 5) \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , o elektronų judris nuo  $542 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$  iki  $900 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$  [98, 99]. Šiame darbe InN sluoksnio užauginto ant  $600 \text{ nm}$   $p$ -GaN išmatuota elektronų koncentracija  $n_e = 5,19 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , o judris  $\mu_e = 980 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$  (8.2-as paveikslas). Galima teigti, kad šiame darbe MOVPE būdu užauginto InN tiriamo sluoksnio elektriniai parametrai yra vieni iš geriausių. Kol kas InN sluoksniai turintys rekordinius parametrus yra auginami MBE būdu. Elektronų koncentracija juose yra  $10^{17} \div 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , o elektronų judris yra didesnis nei  $1000 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$  kambario temperatūroje [100].

Tolesniems elektriniams matavimams buvo pasirinkta  $p$ - $n$  struktūra su storiausiu ( $600 \text{ nm}$ )  $p$ -GaN sluoksniu ir InN turinčiu geriausius elektrinius ir struktūrinius parametrus. Ant InN sluoksnio buvo uždėtas indžio ir alavo eutektikos (InSn) kontaktas, o ant  $p$ -GaN sluoksnio – sidabro (Ag) pastos kontaktas (paveikslas 8.3 (a)). InSn eutektika ant InN kristalo suformuoja ominią kontaktą su kelių  $\text{k}\Omega$  varža. Ag pasta ant  $p$ -GaN buvo iškaitinta atvira liepsna tam, kad išgaruotų organinės medžiagos. Išmatuota sidabro kontakto varža ant  $p$ -GaN yra  $\sim 500 \text{ k}\Omega$ . Tiriamo bandinio fiziniai matmenys pateikti 8.3 paveiksle (a).



a)

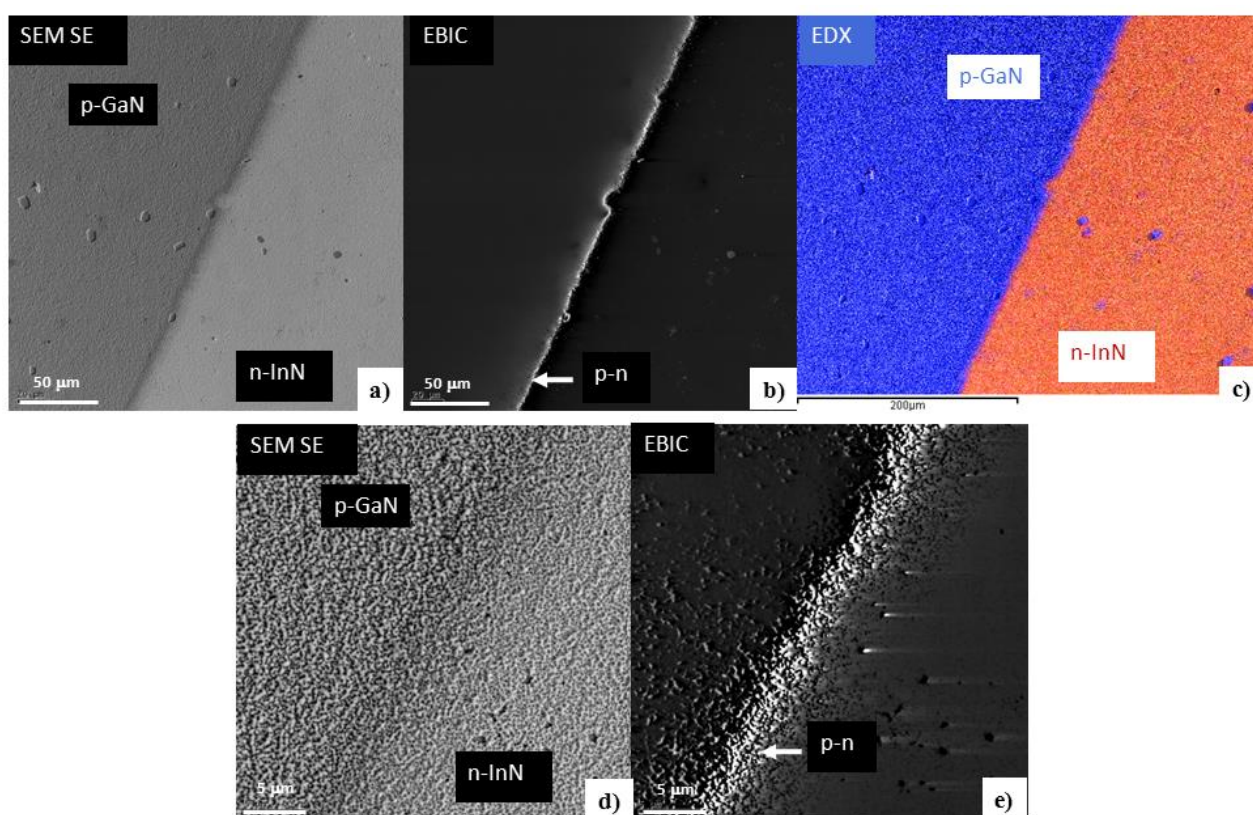


b)

8.3 paveikslas. a)  $300 \text{ nm}$  InN užauginto ant  $600 \text{ nm}$   $p$ -GaN bandinio matmenys. b) to bandinio pamatuota voltamperinė charakteristika.

$p$ - $n$  sandūros voltamperinės charakteristikos (VACH) automatizuotas matavimas atliktas naudojant specializuotą programą, valdančią universalų srovės šaltinį – multimetą Keithley. Išmatuota VACH kreivė nuo  $-15 \text{ V}$  iki  $+15 \text{ V}$  intervale pateikta paveiksle 8.3 (b). Matavimas atliktas tamsoje tam, kad kuo labiau sumažinti fotonais sugeneruoto krūvio įtaką. Išmatuota kreivė atitinka įprastos  $p$ - $n$  struktūros Vach charakteristiką: tiesiogine kryptimi matuojama srovė pasiekus atsidarymo įtampą ima intensyviai tekėti, tuo tarpu įtampą prijungus atbuline kryptimi teka labai silpna srovė visame matavimo intervale iki  $-15 \text{ V}$ .

Paruoštoje *p-n* struktūroje EBIC srovių žemėlapiu matavimai buvo atlikti neprijungiant jokios išorinės įtampos. Krūvininkų poras žadino elektronai, kurie buvo įgreitinami 10 kV įtampa. Naudojant formulę  $x(\mu m) = \frac{0,1E_0^{1,5}}{\rho}$  [101] paskaičiuotas galimas elektronų įsiskverbimo gylis į InN yra 460 nm, į GaN 514 nm, kur formulėje  $E_0$  yra elektronų greitinančioji įtampa (10 keV),  $\rho$  – medžiagos tankis (InN  $\rho = 6,81 \text{ g/cm}^3$  [81]) ir GaN  $\rho = 6,15 \text{ g/cm}^3$  [81]). Žeminant greitinančiąją įtampą, žadinančių elektronų įsiskverbimo gylis sumažėja, dėl to sumažėja krūvininkų porų generacijos sritis. Sumažėjus krūvininkų porų generacijos sričiai gaunamas tikslesnis *p-n* sandūros EBIC srovių žemėlapis ir tiksliau nustatomas *p-n* sandūros plotis arba šalutinių krūvininkų difuzijos ilgiai [102].

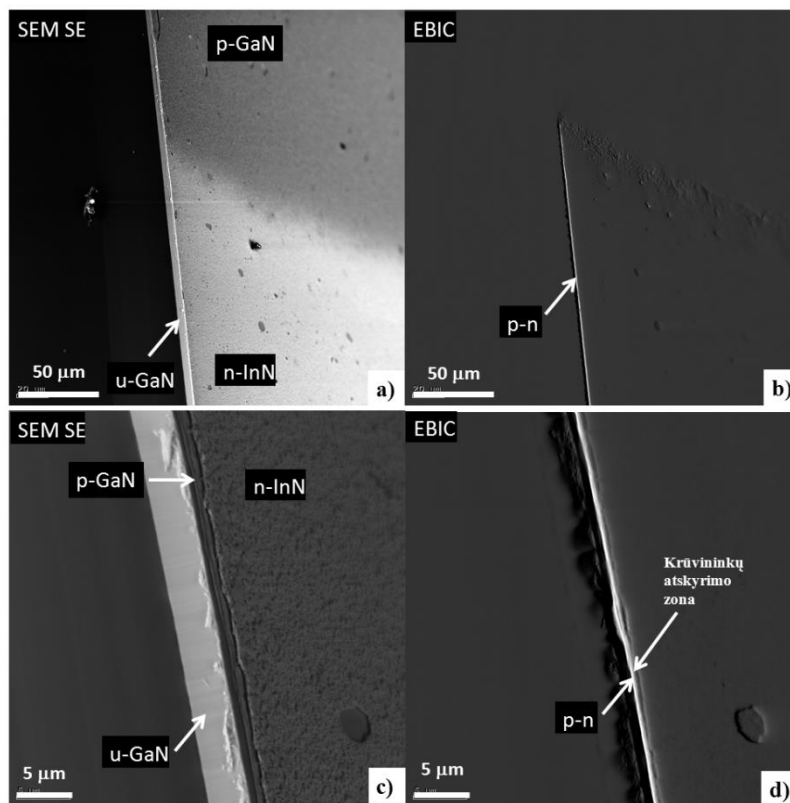


8.4 paveikslas. 300 nm InN ir 600 nm GaN *n-p* sandūros ties InN sluoksnio ėsdinimo riba tyrimo rezultatai: a) ir d) SEM nuotraukos, b) ir e) EBIC srovės pasiskirstymo žemėlapiai, c) EDX elementų pasiskirstymo žemėlapis.

EBIC eksperimento rezultatai kartu su SEM nuotraukomis ir EDX elementų pasiskirstymo žemėlapių ties InN sluoksnio ėsdinimo riba yra pateikti paveiksle 8.4. Ties InN sluoksnio ėsdinimo riba, kurią galima identifikuoti SEM nuotraukose (pav. 8.4 (a)) ir EDX elementų pasiskirstymo žemėlapyje (pav. 8.4 (c)), EBIC srovių pasiskirstymo žemėlapyje gerai matoma šviesi riba žymi sritį ties *p-n* sandūra, kurioje vyksta sužadintos elektrono ir skylės poros atskyrimas (pav. 8.4 (b) ir (e)).



8.5 paveiksle yra pateiktos bandinio, pasukto 45° kampu elektronų pluoštelio atžvilgiu, SEM nuotraukos (pav. 8.5 (a) ir (c)) ir EBIC srovių pasiskirstymo žemėlapiai (pav. 8.5 (b) ir (d)) ties nulaužta bandinio kraštine. EBIC srovių žemėlapyje matoma netrūki, per visą ilgį, panašaus pločio šviesi zona rodo gerą  $p$ - $n$  metalurginę sandūrą, kurioje nėra stipriai defektuotų zonų, galinčių trikdyti diodo veikimą.

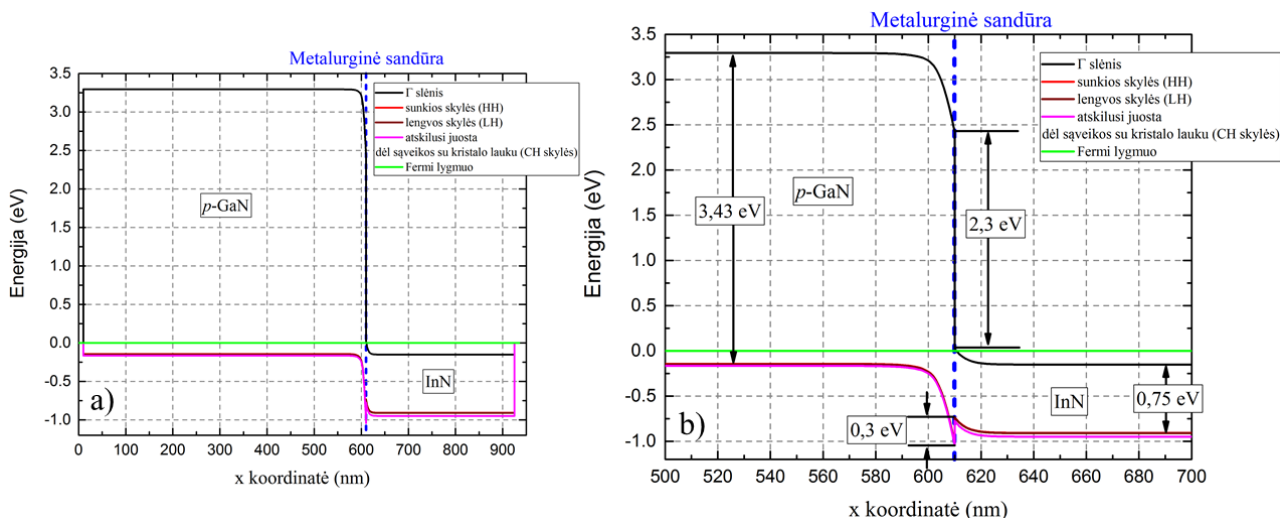


8.5 paveikslas. 45° kampu pasukto bandinio SEM nuotraukos (a, c) ir EBIC (b, d) srovių žemėlapis.

Priklausomai nuo krūvininkų judrio ir gyvavimo laiko krūvininkus atskiriančios srities plotis gali nesutapti su nuskurdintos  $p$ - $n$  sandūros srities pločiu. Ilgai gyvenantys, judrūs krūvininkai krūvininkų atskyrimo zoną gali išplėsti už  $p$ - $n$  sandūros nuskurdintos srities ribų ir atvirkščiai, sparti krūvininkų rekombinacija ir mažas jų judris krūvininkų atskyrimo sritį gali lokalizuoti ties  $p$ - $n$  sandūros metalurgine riba. Dėl per mažos EBIC matavimo raiškos naudojant 10 kV įtampos įgreitintus elektronus šiame darbe nepavyko iš eksperimento duomenų tiksliai įvertinti krūvininkų atskyrimo srities pločio ar realias nuskurdintos srities ribas ties  $p$ - $n$  sandūra.

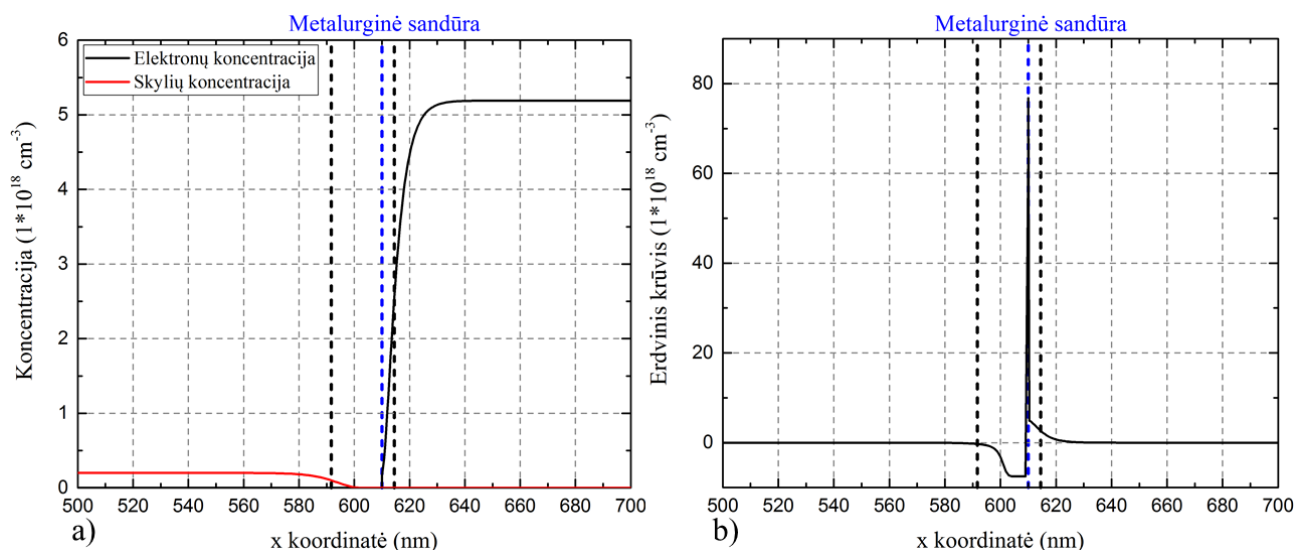
Kad įvertinti galimas nuskurdintos srities ribas tiriamoje  $p$ - $n$  sandūroje buvo atliktas modeliavimas. Naudojant NextNano programinę įrangą buvo sumodeliuota 600 nm  $p$ -Ga<sub>0.9</sub>In<sub>0.1</sub>N ir 300 nm In<sub>0.1</sub>N  $p$ - $n$  sandūros energetinių lygmenų diagrama. Modeliavime naudoti aukščiau aprašyto bandinio realūs parametrai, legirantų koncentracijos buvo paskaičiuotos remiantis pusiausvirųjų krūvininkų

koncentracijos Holo matavimų rezultatais.  $p$ - $n$  sandūros energetinės diagramos modeliavimo rezultatai yra pateikti 8.6 paveiksle.



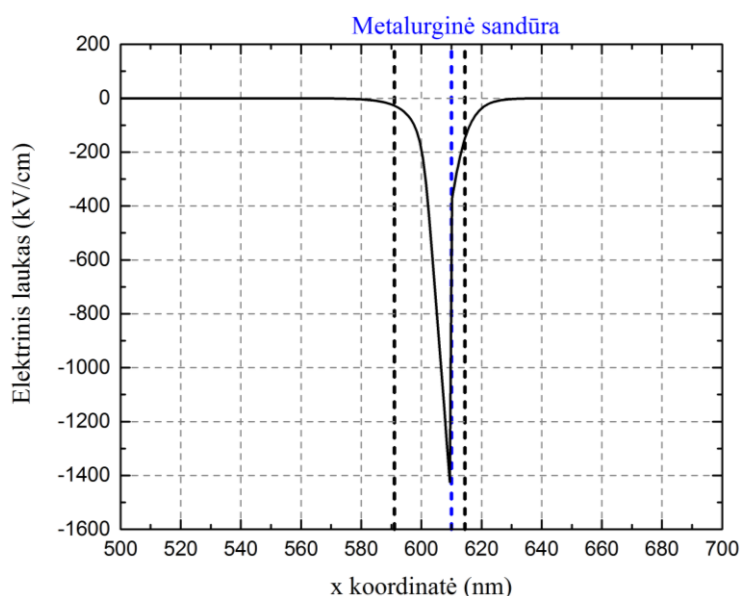
8.6 paveikslas. Visos struktūros energetinė diagrama (a) ir priartintas jos vaizdas (b).

Esant dideliems skirtumams tarp draustinių energijų tarpų GaN/InN  $p$ - $n$  sandūroje susidaro energetinių lygmenų trūkiai. Valentinės juostos trūkis yra 0,3 eV, o laidumo juostos – 2,3 eV. Literatūroje yra pateikiamos panašios vertės (valentinės juostos trūkis 0,5 eV, o laidumo juostos – 2,12 eV [103]). Tokio tipo  $p$ - $n$  heterosandūra yra klasifikuojama kaip I-konfigūracijos sandūra [104]. Pagrindinių krūvininkų pasiskirstymo sandūroje ir erdvinio krūvio srities arti metalurginės sandūros skaičiavimo rezultatai yra pateikti 8.7 paveiksle. Visame InN sluoksnyje visi donorai yra jonizuoti.  $p$ -GaN sluoksnyje tik dalis akceptoriumų (apie 20%) yra jonizuota, nes Mg sukuria galias akceptorines būsenas, kurios yra 0,2 eV virš valentinės juostos [73]. Akceptoriniai, esantys arti metalurginės sandūros, nuskurdintoje srityje tampa visiškai jonizuoti.



8.7 paveikslas. Pagrindinių krūvininkų koncentracijos profilis (a) ir erdvinio krūvio sritis (b).

Buvo įvertintas sumodeliuotos  $p$ - $n$  struktūros nuskurdintos srities plotis [105]. 8.7 (a) paveiksle juodomis, brūkšninėmis linijomis yra atskirtos sritys, kur pagrindinių krūvininkų koncentracija yra sumažėjusi per pusę ir pamatuotas atstumas tarp tų linijų.  $p$ - $n$  sandūros nuskurdintos srities plotis yra 22,82 nm. Didesnė nuskurdintos srities dalis yra įsiskverbusi į  $p$ -GaN sluoksnį. Taip yra dėl labai didelio pagrindinių krūvininkų koncentracijų skirtumo. Nuskurdintos srities storis  $p$ -GaN sluoksnyje yra 18,31 nm, o InN sluoksnyje – 4,51 nm. 8.7 (b) paveiksle ties metalurgine sandūra yra matoma erdvinio krūvio smailė. Nitridiniai puslaidininkiai yra piroelektrikai [106]. Ši erdvinio krūvio smailė atsiranda dėl spontaninės poliarizacijos gradiento pereinant iš vienos medžiagos į kitą kristalinės gardelės  $c$  kryptimi. Todėl šiuo atveju  $p$ - $n$  sandūroje yra indukuojamas labai stiprus elektrinis laukas ne tik dėl jonizuotų priemaišų, bet ir dėl spontaninės poliarizacijos gradiento. Šio indukuoto elektrinio lauko paskaičiuotas profilis pateiktas 8.8 paveiksle. Esant tokiam dideliam elektrinio lauko stipriui sugeneruotos krūvininkų poros nuskurdintoje srityje arba arti jos turėtų būti efektyviai atskiriamos.



8.8 paveikslas. Indukuoto elektrinio lauko stiprio profilis  $p$ - $n$  sandūroje.

Eksperimentų ir modeliavimo rezultatai rodo, kad GaN/InN  $p$ - $n$  sandūros yra potencialiai tinkamos įvairios paskirties diodų gaminiui.

## Išvados ir pagrindiniai rezultatai

1. Nustatyta, kad ant storesnio ir šiurkštesnio  $p$ -GaN auginamo InN sluoksnio kristalinė kokybė yra geresnė, krūvininkų judris yra didesnis, o pusiausvirųjų krūvininkų koncentracija mažesnė nei, kad InN auginant ant lygesnio paviršiaus GaN.
2. EBIC matavimo rezultatai parodė, kad per visą  $n$ -tipo InN ir  $p$ -GaN metalurginę sandūrą yra ištisinė krūvio atskyrimo zona, įrodanti  $n$ - $p$  sandūros su nuskurdinta sritimi susidarymą.
3. Modeliavimo rezultatai rodo, kad  $c$  kryptimi užaugintos  $p$ -GaN/InN  $p$ - $n$  struktūros nuskurdintoje zonoje susiformavęs elektrinis laukas yra sustiprinamas spontaninės poliarizacijos, dėl ko gali padidėti krūvio atskyrimas.
4. Ant GaN ruošinio iš atskirų salų užaugintas InN sluoksnis gali būti naudojamas kaip kaukė tekstūruoto GaN paviršiaus formavimui naudojant sausą ėsdinimą.

## Literatūra

- [1] Ananta R. Acharya. Indium Nitride Surface Structure, Desorption Kinetics and Thermal Stability. Georgia State University. 2013
- [2] Ingrid Wilke *et al.* Optically- and Electrically-Stimulated Terahertz Radiation Emission from Indium Nitride. *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*. Vol. 33, Issue 6, pp 559-592; (2012)
- [3] Lung-Hsing Hsu *et al.* InN-based heterojunction photodetector with extended infrared response. *Optic Express* 31150, Vol 23, No. 24, (2015)
- [4] J. Wu, W. Walukiewicz, K. M. Yu, J. W. Ager, E. E. Haller, H. Lu, W. J. Schaff, Y. Saito, and Y. Nanishi, Unusual properties of the fundamental band gap of InN, *Applied Physics Letters*, vol. **80**, no. 21, p. 3967, (2002).
- [5] M. Jayasakthi, R. Ramesh, K. Prabakaran, R. Loganathan, B. Kuppulingam, M. Balaji, P. Arivazhagan, S. Sankaranarayanan, Shubra Singh, and K. Baskar. Effect of Al-mole fraction in Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N grown by MOCVD. *AIP Conference Proceedings* 1591, 1458 (2014).
- [6] K.M. Yu *et al.* On the crystalline structure, stoichiometry and band gap of InN thin films. *Applied Physics Letters* 86, 071910 (2005)
- [7] A. G. Bhuiyan *et al.* Indium nitride (InN): A review on growth, characterization, and properties. *Journal of Applied Physics* 94, 2779 (2003).
- [8] V. Kachkanov, K. P. O'Donnell, S. Pereira, and R. W. Martin. Localization of excitation in InGaN epilayers. *Philosophical Magazine*. 87 (2007).
- [9] Taewoong Kim. Indium nitride growth by metal-organic vapor phase epitaxy. University of Florida (2006).
- [10] R. E. Jones *et al.* Evidence for p-Type Doping of InN. *Physical Review Letters*, **96**, 125505 (2006).
- [11] E. Kuokštis, G. Tamulaitis. *Plačiatarpių pislaidininkių technologija ir prietaisai*. Vilnius 2008
- [12] Vijay Rawat, Dmitri Zakharov, E A. Stach, Timothy D. Sands. Pseudomorphic stabilization of rocksalt GaN in TiN/GaN multilayers and superlattices. *Physical Review B* 80. pp. 024114–. 2009
- [13] Andrzej Paweł Grzegorzcyk. GaN grown on sapphire by MOCVD: Material for HEMT structures. Dissertation. 2006
- [14] Ian M. Watson. Metal organic vapour phase epitaxy of AlN, GaN, InN and their alloys: A key chemical technology for advanced device applications. *Coordination Chemistry Reviews* 257 2120– 2141 (2013)
- [15] L. Pauling. *The nature of the chemical bond and the structure of molecules and crystals: An introduction to modern structural chemistry*. 3rd ed. Cornell University Press 1960.
- [16] S. Keller, S. P. Den Baars. Metalorganic chemical vapor deposition of group III nitrides—a discussion of critical issues. *Journal of Crystal Growth* 248 479–486 (2003).
- [17] H. Morkoc. *Handbook of Nitride Semiconductors and Devices*. Vol. 1: Materials Properties, Physics and Growth. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim. 2008

- [18] A. Ougazzaden, S. Gautier, C. Sartel, N. Maloufi, J. Martin, F. Jomard. BGaN materials on GaN/sapphire substrate by MOVPE using N<sub>2</sub> carrier gas. *Journal of crystal growth*. 298. 316-319. 2007
- [19] V. Siklitsky. "Boron Nitride.". Available: <http://www.ioffe.rssi.ru/SVA/NSM/Semicond/BN/index.html>. 2009
- [20] G. Tamulaitis, G. Juška. Energiją taupančios puslaidininkinės technologijos. *Progretus*. 2008.
- [21] Y. P. Varshni. Band-to-Band Radiative Recombination in Groups IV, V1, and III-V Semiconductors (I, II). *Physica status solidi*, 19 (2) 459-514 (1967)
- [22] K. B. Nam, *et al.* Optical properties of AlN and GaN in elevated temperatures. *Applied Physics Letters* 85, 3489 (2004); doi: 10.1063/1.1806545
- [23] V.Yu. Davydov, *et al.* Absorption and Emission of Hexagonal InN. Evidence of Narrow Fundamental Band Gap. *Physica Status Solidi (B)*. 229, 3 (2002)
- [24] R. Atalay. Optical and Structural Properties of Indium Nitride Epilayers Grown by High-Pressure Chemical Vapor Deposition and Vibrational Studies of ZGP Single Crystal. Dissertation. Georgia State University. (2012)
- [25] A. Yamamoto, *et al.* 5th International Conference on Nitride Semiconductors (ICNS-5), Nara, Japan, May 25-30, (2003).
- [26] K.S.A. Butcher, *et al.* Nitrogen-rich indium nitride. *Journal of Applied Physics*. 95, 11 (2004)
- [27] E. Dimakis, *et al.* Correlation between nucleation, morphology and residual strain of InN grown on Ga-face GaN (0001). *Journal of Crystal Growth*. 278, 1 – 4 (2005)
- [28] P. Specht, *et al.* The influence of structural properties on conductivity and luminescence of MBE grown InN. *Journal of Crystal Growth*. 269, 1 (2004)
- [29] S Yamaguchi, *et al.* Structural properties of InN on GaN grown by metalorganic vapor-phase epitaxy. *Journal of Applied Physics*. 85, 11 (1999)
- [30] E. Dimakis, *et al.* Biaxial strain and lattice constants of InN (0001) films grown by plasma-assisted molecular beam epitaxy. *Applied Physics Letters* 88, 191918 (2006)
- [31] V. W. L. Chin, *et al.* Electron mobilities in gallium, indium, and aluminum nitrides. *Journal of Applied Physics*. 75, 11 (1994)
- [32] C. Stampfl, *et al.* Native defects and impurities in InN: First-principles studies using the local-density approximation and self-interaction and relaxation-corrected pseudopotentials. *Physical Review B*. 61, 12 (2000)
- [33] S. Limpijumnong, *et al.* Passivation and Doping due to Hydrogen in III-Nitrides. *Physica Status Solidi (B)*. 228, 1, 303-307 (2001)
- [34] T. L. Tansley, *et al.* Point-defect energies in the nitrides of aluminum, gallium, and indium. *Physical Review B*. 45, 10942 (1992)
- [35] I. Mahboob, *et al.* Intrinsic Electron Accumulation at Clean InN Surfaces. *Physical Review Letters*. 92, 036804 (2004)

- [36] C. S. Gallinat, *et al.* In-polar InN grown by plasma-assisted molecular beam epitaxy. *Applied Physics Letters*. 89, 3 (2006)
- [37] K. S. A. Butcher, *et al.* InN, latest development and a review of the band-gap controversy. *Superlattices and Microstructures* 38, 1–37 (2005)
- [38] T. Matsuoka, *et al.* Growth of wurtzite InN using MOVPE and its optical characteristics. *Physica Status Solidi (C)*. 0, 7, 2806-2809 (2003)
- [39] A. Yamamoto, *et al.* Nitridation effects of substrate surface on the metalorganic chemical vapor deposition growth of InN on Si and  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> substrates. *Journal of Crystal Growth*. 137, 3-4 (1994)
- [40] T. Kim. Indium Nitride Growth By Metal-Organic Vapor Phase Epitaxy. Dissertation. University of Florida (2006)
- [41] Q. X. Guo, *et al.* Structural properties of InN films grown on sapphire substrates by microwave-excited metalorganic vapor-phase epitaxy. *Journal of Applied Physics*. 75, 10 (1994)
- [42] O. Ambacher, *et al.* Thermal stability and desorption of Group III nitrides prepared by metal organic chemical vapor deposition. *Journal of Vacuum Science & Technology B* 14, 3532 (1996)
- [43]. T. Matsuoka, in *GaN and Related Materials*, edited by S. J. Pearton (Gordon and Breach, New York, 1997), pp. 53–59
- [44] A. Koukitu, *et al.* Thermodynamic study on the role of hydrogen during the MOVPE growth of group III nitrides. *Journal of Crystal Growth* 197, 99 (1999)
- [45] M. Adachi, Y. Murakami, A. Hashimoto, and A. Yamamoto, *Proceedings of the International Workshop on Nitride Semiconductors (IWN' 2000)*, Nagoya, Japan, September 24–27, 2000, IPAP conference series 1, p.339
- [46] S. Keller, *et al.* *Proceedings of the International Workshop on Nitride Semiconductors (IWN' 2000)*, Nagoya, Japan, September 24–27, 2000, IPAP conference series 1, p. 233.
- [47] A. Yamamoto, *et al.* Growth Temperature Dependences of MOVPE InN on Sapphire Substrates. *Physica Status Solidi (B)*. 228, 1, 5 – 8 pp. (2001)
- [48] O Tuna, *et al.* Dependence of InN properties on MOCVD growth parameters. *Physica Status Solidi C* 8, No. 7–8, 2044–2046 (2011)
- [49] A. Kadir, *et al.* Growth and characterization of InN layers by metal-organic vapour phase epitaxy in a close-coupled showerhead reactor. *Journal of Crystal Growth* 298, 403–408 (2007)
- [50] A Kadys, *et al.* Growth of InN and In rich InGaN layers on GaN templates by pulsed MOCVD. *Journal of Electronic Materials*. 44, 1, 188-193 pp. (2015)
- [51] M. C. Johnson, *et al.* Nucleation and growth of InN thin films using conventional and pulsed MOVPE. *Journal of Crystal Growth* 272, 400–406 (2004)
- [52] Č. Pavasaris. *Puslaidininkiniai įtaisai: veikimo ir taikymo pagrindai*. p. 258. Vilnius. 2013
- [53] V. Kažukauskas. *Šiuolaikiniai puslaidininkių mikroelektronikos prietaisai: fizika ir technologija*. p. 179. Vilnius. 2008

- [54] S. Štaras. Puslaidininkinės ir funkcinės elektronikos įtaisai. p. 467. Vilnius. 2005
- [55] S. M. Sze. Semiconductor Devices: Physics and Technology. 2nd ed. p. 574. 1985, 2002
- [56] G. Wu, *et al.* Near infrared electroluminescence from n-InN/p-GaN light-emitting diodes. Applied Physics Letters 100, 103504 (2012)
- [57] Anthony C Jones, Michael L Hitchman. Chemical Vapour Deposition: Precursors, Processes and Applications. (Royal Society of Chemistry) (2009)
- [58] Manijeh Razeghi. Fundamentals of solid state engineering. Kluwer Academic Publishers New York, Boston, Dordrecht, London, Moscow. p. 640. (2002)
- [59] Dr.Hermann Schlichting. Boundary-layer Theory 7th edition. p 419. (1979)
- [60] Anatoli Korkin, Evgeni Gusev, Jan K. Labanowski, Serge Luryi. Nanotechnology for Electronic Materials and Devices. p 367. (2007)
- [61] Talal Mohammed Ahmad Al tahtamouni. Dissertation. MOCVD Growth and Characterization of Aluminum-rich Aluminum Nitride/aluminum Gallium Nitride Epilayers and Quantum Wells. (2007)
- [62] Nicoleta Elena Kaluza geb. Nastase. Dissertation. MOVPE Growth and Characterization of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  Heterostructures for HEMT Application. (2003)
- [63] R. Tomašiūnas. Šiuolaikinės mikroskopijos metodai medžiagotyrai. Vilnius. 2008
- [64] <http://pveducation.org/pvcdrom/characterisation/sem-and-ebic>
- [65] <http://eesemi.com/ebic.htm>
- [66] Energy Dispersive Spectroscopy. Microscopy and Analysis. 2nd. ed. John Wiley & Sons (2015)
- [67] B.Hafner. Energy Dispersive Spectroscopy on the SEM: A Primer ([http://www.charfac.umn.edu/instruments/eds\\_on\\_sem\\_primer.pdf](http://www.charfac.umn.edu/instruments/eds_on_sem_primer.pdf))
- [68] <https://utd.edu/~mtinker/EE3110/ElectronicDevicesLaboratory/LabManuals/3.%20Conductivity%20in%20Semiconductors.pdf>
- [69] [http://astro1.panet.utoledo.edu/~relling2/teach/archives/4580.6280.2012/20121030\\_lecture8\\_Hall\\_effect\\_phys4580.6280.pdf](http://astro1.panet.utoledo.edu/~relling2/teach/archives/4580.6280.2012/20121030_lecture8_Hall_effect_phys4580.6280.pdf)
- [70] S. Briner. Modeling of semiconductor nanostructures and semiconductor–electrolyte interfaces. 2011
- [71] F.G. McIntosh, *et al.* Epitaxial deposition of GaInN and InN using the rotating susceptor ALE system, Applied Surface Science, Nr. 112, p. 98–101, (1997)
- [72]. <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/GaN/bandstr.html#Donors>
- [73] S. Brochen, *et al.* Dependence of the Mg-related acceptor ionization energy with the acceptor concentration in p-type GaN layers grown by molecular beam epitaxy. Applied Physics Letters. 103, 032102 (2013); doi: 10.1063/1.4813598



- [74] M. Dmukauskas. InGaN sluoksnių ir kvantinių duobių auginimas MOCVD būdu ir tyrimai. Bakalauro studijų baigiamasis darbas. Vilnius 2013
- [75] B. Paszkiewicz, *et al.* Study of the activation process of Mg dopant in GaN:Mg layers. *Physica Status Solidi C*. Vol. 3; Issue 3; p. 579-584 (2006)
- [76] D. Youn, *et al.* Investigation on the P-Type Activation Mechanism in Mg-doped GaN Films Grown by Metalorganic Chemical Vapor Deposition. *Japanese Journal of Applied Physics*. Vol. 38. pp. 631–634 (1999)
- [77] G. Miceli, *et al.* Self-compensation due to point defects in Mg-doped GaN. *Physical Review B*. 93, 165207 (2016)
- [78] Ch. G. Van de Walle. Defects and doping in GaN. *Brazilian Journal of Physics*, vol. 27/A, no. 4 (1997)
- [79] S. J. Pearton, *et al.* Reactivation of acceptors and trapping of hydrogen in GaN/InGaN double heterostructures. *Applied Physics Letters*. 69, 13 (1996)
- [80] V. Cimalla, *et al.* Correlation between strain, optical and electrical properties of InN grown by MBE. *Physica Status Solidi (C)*. Vol. 0. Issue 7, (2003)
- [81] <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/GaN/basic.html>
- [82] Lung-Hsing Hsu *et al.* InN-based heterojunction photodetector with extended infrared response. *Optic Express* 31150, Vol 23, No. 24, (2015)
- [83] A. Kadir, *et al.* Non-intrinsic superconductivity in InN epilayers: Role of Indium Oxide. *Solid State Communications*. 146, 361-364 (2008)
- [84] B. K. Barick, *et al.* Structural and electronic properties of InN epitaxial layer grown on c-plane sapphire by chemical vapor deposition technique. *Journal of Vacuum Science & Technology (A)* 34, 051503 (2016)
- [85] M. Jamil, *et al.* MOVPE and photoluminescence of narrow band gap (0.77 eV) InN on GaN/sapphire by pulsed growth mode. *Physica Status Solidi (A)*. 205, 12, 2886-2891 (2008)
- [86] K. Wang, *et al.* Structural and transport properties of InN grown on GaN by MBE. *Physica Status Solidi C*. 5, No. 6, 1811-1814 (2008)
- [87] A. Jain. MOCVD Growth and Study of Thin Films of Indium Nitride. Doctoral Thesis (2006)
- [88] I. Daruka, *et al.* Dislocation-Free Island Formation in Heteroepitaxial Growth: A Study at Equilibrium. *Physical Review Letters*. 79, 3708 (1997)
- [89] M. Higashiwaki, *et al.* High-Quality InN Film Grown on a Low-Temperature-Grown GaN Intermediate Layer by Plasma-Assisted Molecular-Beam Epitaxy. *Japanese Journal of Applied Physics*. 41, L540 -L542 (2002)
- [90]. <http://www.plasmaetch.com/reactive-ion-etching-systems-rie.php>
- [91] Y.Ch. Lee *et al.* Improving the Light-Emitting Efficiency of GaN LEDs Using Nanoimprint Lithography in Recent Advances in Nanofabrication Techniques and Applications, ed. Bo Cui, InTech, 2011
- [92] J. Juodkazytė, *et al.* In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N performance as a band-gap-tunable photo-electrode in acidic and basic solutions, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, Vol. 130, p. 36–41 (2014)

- [93] <http://www.med.harvard.edu/jpnm/physics/refs/xrayemis.html>
- [94] Y. Arakawa, *et al.* High hole mobility p-type GaN with low residual hydrogen concentration prepared by pulsed sputtering. *APL Materials* 4, 086103 (2016)
- [95] M. G. Cheong, *et al.* Strong acceptor density and temperature dependences of thermal activation energy of acceptors in a Mg-doped GaN epilayer grown by metalorganic chemical-vapor deposition. *Applied Physics Letters*. 80, 6 (2001)
- [96] P. Kozodoy, *et al.* MOVPE growth and characterization of Mg-doped GaN. *Journal of Crystal Growth*. 195, 1-4 (1998)
- [97] P. Kozodoy, *et al.* Depletion region effects in Mg-doped GaN. *Journal of Applied Physics*. 87, 2 (2000)
- [98] A. Yamamoto, *et al.* Proceedings of the International Workshop on Nitride Semiconductors (IWN' 2004), Pittsburgh, USA, July 19-23, p113 (2004)
- [99] H. Lu, *et al.* Strong band edge luminescence from InN films grown on Si substrates by electron cyclotron resonance-assisted molecular beam epitaxy. *Applied Physics Letters*. 80, 6 (2001)
- [100] H. Lu, *et al.* Growth of Thick InN by Molecular Beam Epitaxy. *Materials Research Society symposia proceedings*. Published online 2011. 743 (2002)
- [101] <http://nau.edu/cefns/labs/electron-microprobe/glg-510-class-notes/signals/>
- [102] Ch. H. Hontgas. Investigation Of Pn Junction Delineation Resolution Using Electron Beam Induced Current. Doctoral thesis University of Central Florida 2007
- [103] G. Wu, *et al.* Near infrared electroluminescence from n-InN/p-GaN light-emitting diodes. *Applied Physics Letters* 100, 103504 (2012)
- [104] R. Willardson and H.S. Nalwa. *Processing and Properties of Compound Semiconductors*. Vol 73. 2001
- [105] [http://www.nextnano.com/nextnano3/tutorial/1Dtutorial\\_pn\\_junction.htm](http://www.nextnano.com/nextnano3/tutorial/1Dtutorial_pn_junction.htm)
- [106] O. Ambacher, *et al.* Pyroelectric properties of Al(In)GaN/GaN hetero- and quantum well structures. *Journal Of Physics: Condensed Matter*. 14, 3399–3434 (2002)

# Summary

Marek Kolenda

## GROWTH OF InN/GaN N-P STRUCTURES BY MOVPE and RESEARCH

The unique physical properties of indium nitride (InN) such as low effective mass, high electron mobility, saturation velocity and direct band gap make it a potential material for optoelectronic and microelectronic devices such as infrared light emitters / detectors, high electron mobility transistor (HEMT). By changing the composition of In in gallium nitride (GaN), the band gap of  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$  can be tuned from 0.7 eV to 3.4 eV covering a range of spectrum from near infrared to ultraviolet regions. However, the growth of high quality InN is a big challenge mainly due to low dissociation temperatures, high equilibrium vapor pressure of nitrogen and lack of lattice matched substrates.

The main objective of this work was to grow InN/GaN *n-p* structures with optimized InN growth parameters on the *p*-type GaN layer with different thicknesses and investigate structural and electrical properties.

InN/*p*-GaN structures were grown on the 5  $\mu\text{m}$  thick undoped GaN buffer layer and sapphire substrate by MOVPE (AIXTRON 3x2 FR reactor). Trimethylgallium (TMGa), trimethylindium (TMIn) and ammonia ( $\text{NH}_3$ ) have been used as precursors for gallium (Ga) indium (In) and nitrogen (N) respectively. Bis(cyclopentadienyl)magnesium ( $\text{Cp}_2\text{Mg}$ ) was used as precursor for magnesium Mg for a *p*-type dopant. The GaN templates on sapphire were grown using standard low temperature GaN buffer layer followed by annealing and high temperature GaN film. Then *p*-GaN layers with different thickness were grown on the undoped GaN buffer layer followed by annealing for 20 minutes at 850°C temperature in nitrogen ( $\text{N}_2$ ) ambient to activate acceptors states in the *p*-GaN. At last, 300 nm thick InN layers were grown on the *p*-GaN using metal precursor multiple flow interruptions.

X-ray diffraction (XRD) results showed, that increasing the *p*-GaN thickness from 100 nm to 600 nm InN layer crystalline quality was improved. The mostly strained InN layer was on the 300 nm *p*-GaN layer. Scanning electron microscope (SEM) revealed, that all InN layers had high surface roughness. The least delaminated InN layer was on the thickest *p*-GaN. Part of the InN layer was etched by RIE technique in order to form electrical contact on *p*-GaN. *I-V* characteristics proved that the InN/*p*-GaN structure shows a rectification characteristic. EBIC measurements showed, that *p-n* junction between InN and *p*-GaN had no defective regions, which could act as short-circuited spots. According to theoretical calculations depletion region of such structure is very narrow, its thickness is 22,82 nm for 300 nm InN and 600 nm *p*-GaN heterojunction.

## **Padėka**

Dėkoju:

- Darbą finansavusiam projektui: LMT, LAT-05/2016
- Dr. Tadiui Malinauskui už atliktus XRD matavimus.
- Dr. Ignui Reklaičiui už atliktus sauso išdžiovinimo technologinius eksperimentus.
- Dr. Arūnui Kadžiui už viso darbo koordinavimą

## Moksliniai pasiekimai

Išspausdintos publikacijos:

1. A. Kadys, J. Mickevičius, T. Malinauskas, J. Jurkevičius, **M. Kolenda**, S. Stanionytė, D. Dobrovolskas and G. Tamulaitis. Optical and structural properties of BGaN layers grown on different substrates. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 48, 465307 (2015)
2. J. Jurkevičius, J. Mickevičius, A. Kadys, **M. Kolenda**, G. Tamulaitis. Photoluminescence efficiency of BGaN epitaxial layers with high boron content. *Physica B: Condensed Matter*. 492, 23–26 (2016)

Konferencijos:

- 2015, 2016, 2017 metais moksliniai pasiekimai publikuoti konferencijose „Open Readings“.
- 2015 metais pasiekimai pristatyti konferencijoje „Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija“.
- 2016 pavasario semestro kursinio darbo „Metalų prekursorių srauto pertrūkių įtaka žalių InGaN kvantinių duobių optiniams ir struktūriniais parametrams“ rezultatai bus pristatyti birželio 19 – 21d. Grenoblyje „The 17th European Workshop on Metal-Organic Vapour Phase Epitaxy“ konferencijoje. Pristato dr. A. Kadys