

Vilniaus universitetas
Fizikos fakultetas
Puslaidininkų fizikos katedra

Agnė Kalpakovaitė Jucevičienė

NEPOLINIO GAN UŽAUGINTO ANT SI PADĖKLŲ AUGIMO KINETIKOS BEI
STRUKTŪRINIŲ SAVYBIŲ TYRIMAS

Magistrantūros studijų baigiamasis darbas

Optoelektronikos medžiagos ir technologijos
studijų programa

Studentas

Agnė Kalpakovaitė Jucevičienė

Darbo vadovas

dr. Tomas Grinys

Recenzentas

dr. Saulius Nargelas

Katedros vedėjas

prof. habil. dr. Gintautas Tamulaitis

Vilnius

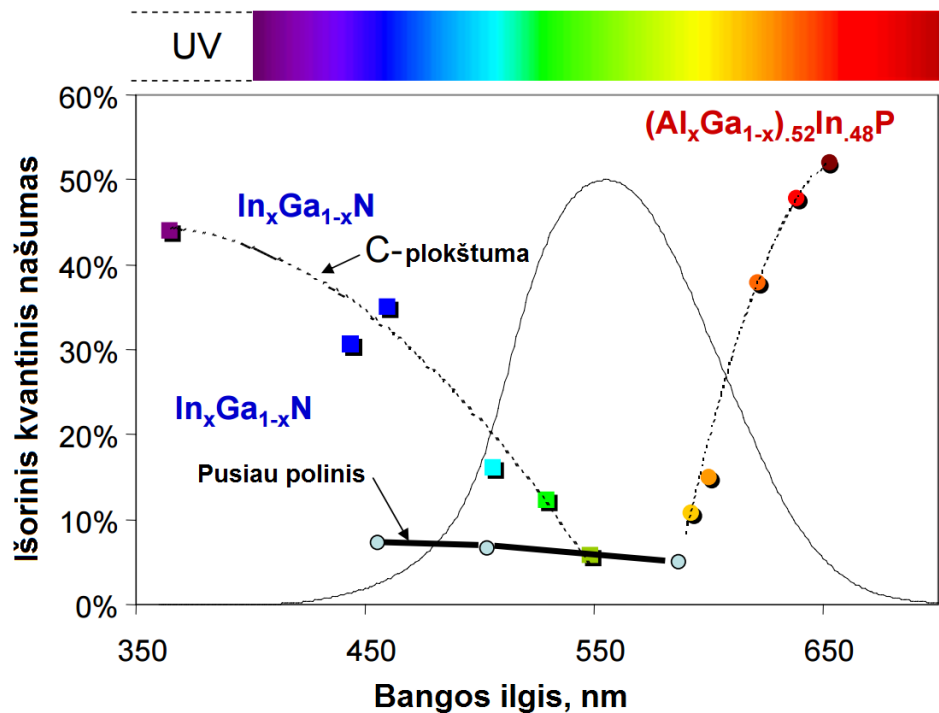
2016

Turinys:

1. Įvadas.....	3
2. Darbo užduotys bei tikslai	5
3. Temos apžvalga	6
3.1. Molekulinio pluoštelio epitaksija	6
3.2. Metalorganikos cheminis nusodinimas iš garų fazės.....	7
3.3. Galio nitridas	8
3.4. Retųjų žemės metalų oksidai	13
4. Matavimų metodikos	15
4.1. Optinių charakteristikų matavimai	15
4.2. Skenuojanti elektroninė mikroskopija	16
4.3. Fotoluminescencijos matavimai.....	17
5. Rezultatai ir jų aptarimas.....	18
5.1. Si padėklų terminio stabilumo tyrimas.....	18
5.2.1. GaN struktūrų augimo tyrimas	23
5.2.2. GaN struktūrų šviesos poliarizacija.....	31
5.2.3. GaN struktūrų fotoluminescencija	32
5.3. Nėpolinio GaN dangos auginimas	33
6. Pagrindiniai rezultatai ir išvados	38
7. Summary.....	39
8. Literatūra	41
9. Priedai.....	46

1. Įvadas

Paskutiniuosius du dešimtmečius GaN epitaksija ant kitų medžiagų padėklų buvo intensyviai tiriama. Pagrindinė to motyvacija – energiją taupančios apšvietimo technologijos, panaudojant didelio šviesumo indžio galio nitrido (InGaN) šviestukus bei lazerinių diodų gamyba. Pagrindiniai iššūkiai InGaN švietukų technologijoje yra šviestuko efektyvumo mažėjimas didinant injekcijos srovę („*efficiency droop*“), bei mažas žalios spalvos šviesukų efektyvumas, dar vadinamas žaliuoju tarpu („*green gap*“) [1] (1 pav.).



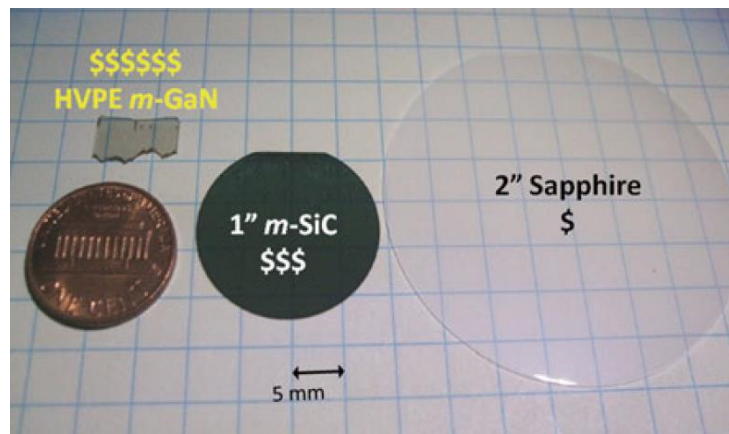
1 pav. InGaN bei AlInGaN šviestukų efektyvumo priklausomybė nuo emisijos smailės padėties (taškai – eksperimentinės vertės), tolydi linija – santykinė žmogaus regos jautrumo funkcija [1].

Kol kas didžioji dalis InGaN šviestukų yra formuojami polinės GaN kristalinės ašies kryptimi, kuria pasireiškia stiprūs vidiniai elektriniai laukai, indukuoti spontaninės bei pjezoelektrinės poliarizacijos Vurtzito (*Wurtzite*) tipo nitriduose. Esant tokiems laukams yra stebimas itin ryškus energinių juostų iškraipymas InGaN kvantinėse duobėse, elektronai bei skylės šiuose dariniuose yra erdviškai išskiriami, dėl ko sumažėja šviestuko vidinis kvantinis rekombinacijos našumas. Didinant indžio kiekį kvantinių duobių dariniuose, jų emisijos bangos ilgis gali pasislinkti iš mėlynos į žalią ar geltoną sritis, tačiau anksčiau minėtasis vidinio kvantinio našumo sumažėjimas tampa dar didesnis, taip prisidedant prie „žaliojo tarpo“ problemos. Energinių juostų pokrypis aktyviajame sluoksnyje taip pat sumažina efektyvų kvantinės duobės plotį, kartu

padidindamas efektinį krūvininkų tankį kvantinėje duobėje, kas didina nepageidaujamos Ože (*Auger*) nespindulinės rekombinacijos tikimybę. Tuo pat metu, dėl energinių juostų pokrypio, efektyvusis energinio barjero aukštis sumažėja, kas gali skatinti krūvininkų nuotėkį pridėjus išorinę įtampą. Ožė rekombinacija kartu su krūvininkų nuotėkiu yra laikomi mechanizmais atsakingais už šviestuko efektyvumo sumažėjimo fenomeną [2-3].

Šių problemų sprendimo ieškoma tyrinėjant III grupės nitridus ir prietaisus suformuotus iš kristalų užaugintų išilgai nepolinės bei pusiau polinės kristalografinės ašies [4-9]. Pateikti daug žadantys nepolinių bei pusiau polinių žalių bei geltonų šviestukų bei lazerinių diodų tyrimų rezultatai, kuomet sluoksnių auginimai atliekami ant tūrinių GaN kristalų [10-15]. Šie pasiekimai patvirtina kristalografinės inžinerijos svarbą bei būtinumą. Šiuose prietaisuose ne tik iš dalies išsprendžiama žaliojo tarpo problema [16], tačiau nepoliniuose bei pusiau poliniuose šviestukuose taip pat stebimas kvantinio efektyvumo kritimo didinant injekcijos srovę efekto sumažėjimas [17-20].

Tačiau, tūriniai nepolinio bei pusiau polinio GaN padėklai šiuo metu yra gaminami tik labai nedidelių matmenų ir yra itin brangūs, kadangi jie pjaustomi tam tikru kampu iš polinio GaN kristalo užauginto hidridinės garų fazės epitaksijos metodu (HVPE) [21]. Kadangi tokie padėklai nėra populiarūs, vienintelė galimybė auginti didelio ploto bei prieinamos kainos GaN epitaksinius sluoksnius išlieka panaudojant kitų medžiagų padėklus, tokių kaip silicis, silicio karbidas ar safyras (2 pav.). Tačiau čia iškyta nemažos GaN epitaksijos problemos - didelis kristalinių defektų tankis, kuris atsakingas už prastą daugiasluoksnių nepolinių bei pusiau polinių šviestukų veiką. Dėl kai kurių padėklų didelės kainos (kainos didėjimas: Si < c-Al₂O₃ < r-Al₂O₃ < m-SiC < m-GaN), patraukliausias variantas išlieka silicis. Jis patrauklus ne tik savo nedidele kaina, tačiau ir GaN integravimo į išvystytą Si technologiją galimybe. Kovoti su esamomis Si ir GaN medžiagų nesuderinamumo problemomis, pasitelkiami buferiniai kitų medžiagų, tokių kaip retųjų žemės metalų oksidai, sluoksniai. Šių medžiagų tarp sluoksnių gali padėti išspręsti problemas kylančias dėl skirtingų GaN ir Si terminio plėtimosi koeficientų, formuoti Brego veidrodžius, elektriškai izoliuoti GaN nuo padėklo bei užkirsti kelią silicio difuzijai į GaN sluoksnį. Realizavus GaN kristalo auginimą ant Si padėklų būtų galima atpiginti pačią GaN technologiją ir padaryti ją suderinamą su šiuo metu plačiai paplitusia Si elektronika.



2 pav. Padėklų skirtų GaN auginimui palyginimas – dešinėje 2 colių safyro padėklas, viduryje – 1 colio m-SiC, viršuj kairėje nepolinio GaN padėklas, paruoštas HVPE būdu [22].

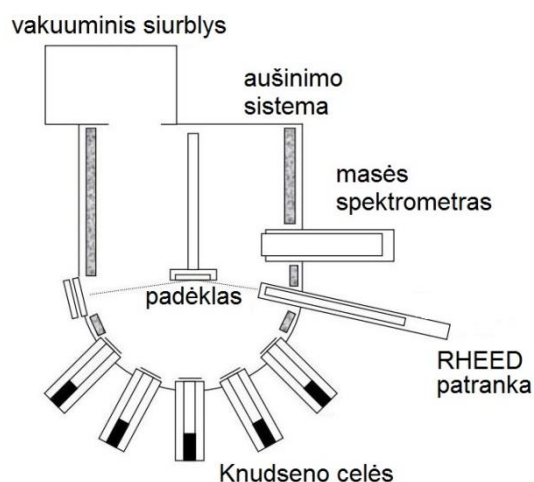
2. Darbo tikslai ir užduotys

- Ištirti Si (100) padėklų su erbio oksido pasluoksniu terminį stabilumą.
- Ištirti ant šių padėklų užaugintų nepolinio bei pusiau polinio GaN salų augimo charakteristikas.
- Atlikti ant šių padėklų MOCVD metodu užauginto nepolinio GaN sluoksnių kaitinimus bei ištirti procesus vykstančius kaitinimo metu.

3. Temos apžvalga

3.1. Molekulinio pluoštelio epitaksija

Molekulinio pluoštelio epitaksija (MBE), tai kristalinių sluoksnių auginimo technika, kuomet vienas ar keli molekuliniai ar atominiai pluošteliai jungdamiesi tarpusavyje, ant įkaitinto kristalinio padėklo formuoja plonus sluoksnius. Šis metodas yra plačiai naudojamas puslaidininkių pramonėje, gaminant įvairius mikroelektronikos prietaisus, tokius kaip plonasluoksniai tranzistoriai.



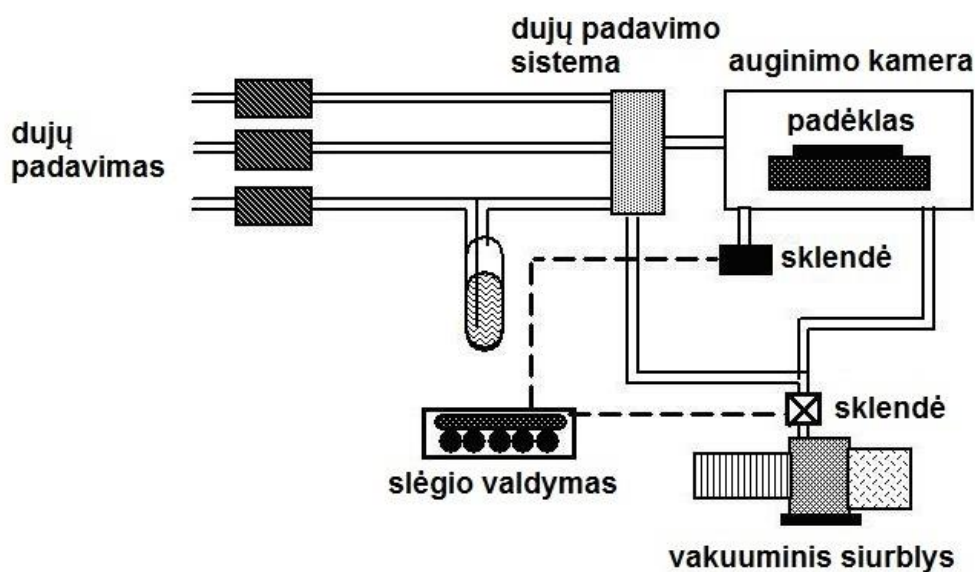
3 pav. MBE reaktoriaus principinė schema [23].

MBE sistemos principinė schema pavaizduota 3 paveikslėlyje. Sluoksnio auginimas vyksta aukštame ar itin aukštame vakuume, kuris gali siekti 10^{-8} Pa. Svarbiausias MBE aspektas – auginimo sparta, kuri tipiška siekia vieno monosluoksnio per sekundę greitį. Tokie augimo greičiai reikalauja proporcingai aukštesnio vakuumo, norint išgauti tokius pačius priemaišų tankius, kaip kiti epitaksiniai metodai. Kadangi nėra nešančiųjų dujų, ultraaukštas vakuumas leidžia užauginti itin aukštos kristalinės kokybės sluoksnius. Itin aukšto grynumo medžiagų šaltiniai yra talpinami į atskiras Knudseno celes, kurios užtikrina pakankamai mažą garinamos medžiagos pluoštelio sklaidą. Celėse medžiagos yra kaitinamos iki temperatūrų, kuriose šaltinio medžiagos pradeda sublimuoti. Išgarinta medžiaga pasiekusi padėklą ant jo kondensuojasi, kur ten pat gali reaguoti su kitų pluoštelio medžiagomis. Padėklas ant kurio vyksta auginimas yra kaitinamas iki norimos temperatūros, ir jei reikia sukamas apie savo ašį, siekiant užtikrinti padengiamo sluoksnio homogeniškumą. Terminas „pluoštelis“ reiškia, kad išgarinti atomai nereaguoja vieni su kitais iki kol jie pasiekia auginimo padėklą.

3.2. Metalorganikos cheminis nusodinimas iš garų fazės

Metalorganikos cheminio nusodinimo iš garų fazės (MOCVD) metodas yra labiausiai paplitęs III-V grupės elementų plonų kristalinių sluoksnių auginimui. Nuo MBE metodo iš esmės skiriasi tuo, jog sluoksniai auginami cheminiu, o ne fizikiniu būdu. Auginimai atliekami ne vakuume, bet dujų atmosferoje (pvz. azoto ar vandenilio) atmosferos slėgyje. MOCVD principas pagrįstas metalorganikos bei hidridų dujų skilimo produktų nusodinimo ant specialiai paruošto padėklo technologija.

Sluoksniai auginami MOCVD kameroje (4 pav.), į kurią injektuojamos išgrynintos ir tiksliai dozuojamos pirmtakų (metalorganikos ir hidridų) dujos. Pavyzdžiui, galio nitrido auginimo procese naudojamos trimetilgalio bei amoniako dujos. Šiam dujų mišiniui pasiekus aktyviają zoną - kaitinamą padėklą - vyksta pirolizės procesas, susidarę atomai jungiasi su padėklo paviršiumi, taip suformuodami kristalinį sluoksnį. Šalutiniai auginimo produktai yra pašalinami iš reaktoriaus zonos. Auginimo proceso optimizavimas dažniausiai atliekamas pasitelkiant išorinių proceso parametrų, tokių kaip: auginimo temperatūra, V/III medžiagų srautų santykis ar kita, analizę.



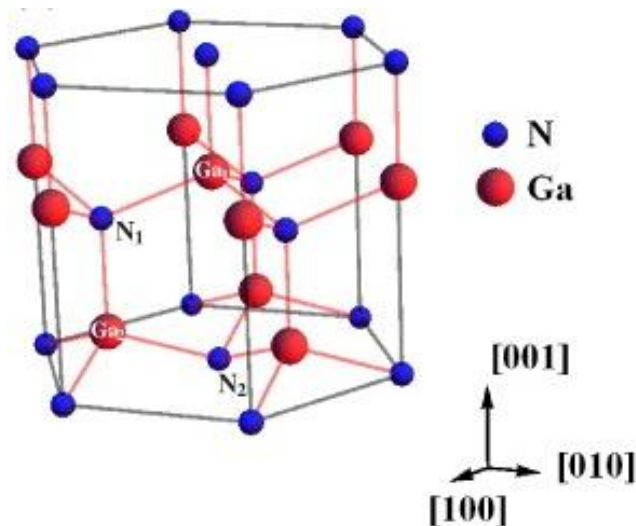
4 pav. MOCVD reaktoriaus principinė schema [24].

Nors tiek MBE, tiek MOCVD metodai leidžia auginti tokius pačius aukštos kokybės kristalinius sluoksnius, tačiau MOCVD leidžia pasiekti daug didesnes sluoksnių augimo spartas, kurios gali siekti kelis mikronus per valandą. Pagrindinis MOCVD trūkumas – dauguma pirmtakų naudojamų auginime yra itin toksiški.

3.3. Galio nitridas

Kompaktiškas kietakūnis apšvietimas, kurio pagrindą sudaro šviestukai yra patraukli technologija pakeisti šiandien plačiausiai paplitusias kaitrines lemputes. Šiuo metu gaminamų didžiausio šviesinio našumo šviestukų emisija yra raudonoje spektro srityje, jų šviesinis našumas jau dabar lenkia fluorescencines lempas. Jei šis našumas būtų suteiktas baltiems šviestukams, tokio šviestuko energijos suvartojimas drastiškai sumažėtų. Tačiau šiai dienai baltų šviestukų efektyvumai yra labai maži, dėl susidarančių elektrinių laukų šviestuko aktyviojoje zonoje.

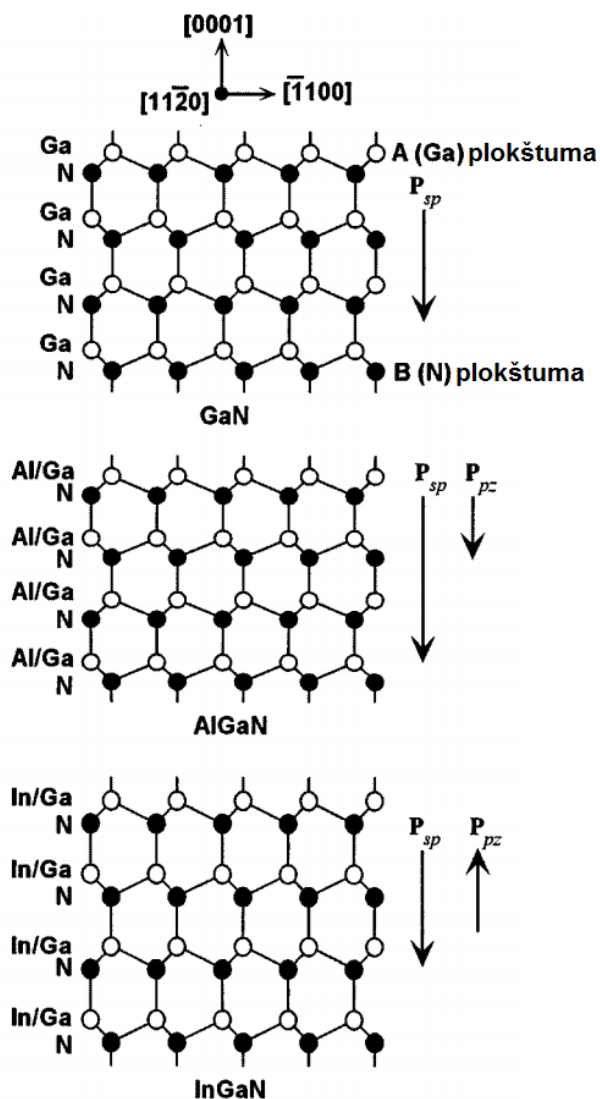
Vurtzito (*wurtzite*) tipo kristalinės gardelės nitridai, pavyzdžiui galio nitridas (5 pav.), bei jų heterostrukūros, auginamos išilgai [0001] ašies pasižymi vidiniais elektriniais laukais, atsirandančiais dėl spontaninės bei pjezoelektrinės poliarizacijos. Deja, ši kristalografinė ašis yra palankiausia nitridų auginimo kryptis, atliekant auginimus ant safyro padėklų, kurie yra plačiausiai prieinami. Dėl susidariusių parazitinių vidinių elektrinių laukų kinta krūvininkų pasiskirstymas, vidiniai elektriniai laukai, o taip kartu ir daugelis optinių bei elektrinių nitridinių prietaisų savybių. Nors tūriniuose kristaluose bei storuose sluoksniuose šie laukai nėra itin opi problema, plonasluoksniuose dariniuose, tokiuose kaip kvantinės duobės ar supergardelės, spontaninė bei pjezoelektrinė poliarizacija, bei su jomis susiję krūvių persiskirstymai gali dramatiškai pakeisti medžiagos ar prietaiso elgseną.



5 pav. Vurtzito tipo galio nitrido gardelė.

Kristalo poliškumas yra glaudžiai susijęs su poliarizacija ir jos įtaka nitridiniuose daugiasluoksniuose prietaisuose. GaN kristalo struktūra schematiškai pavaizduota 6 paveikslėlyje. Inversijos simetrijos trūkumas išilgai [0001] ašies lemia dviejų galimų [0001] ašies poliškumų

buvimą. Viršutinis [0001] krypties paviršius paveiksluke pažymėtas A (Ga plokštuma), o apatinis ($000\bar{1}$) paviršius – B (N plokštuma).

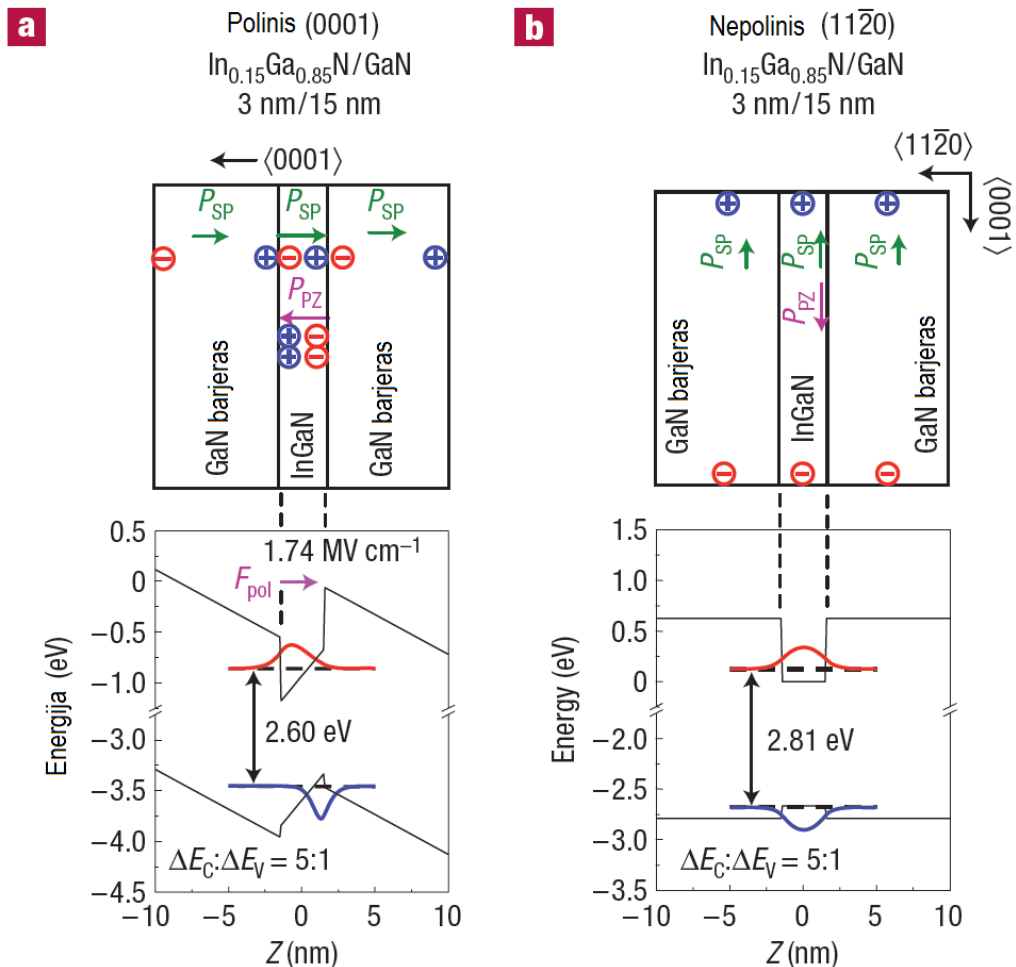


6 pav. GaN, AlGaN, InGaN kristalinės struktūros, su nurodytais spontaninės bei pjezoelektrinės poliarizacijos elektriniais laukais [25].

Empiriškai buvo parodyta, kad kristaliniai nitridiniai sluoksniai užauginti MOCVD metodu yra [0001] krypties, kai tuo tarpu MBE metodu galima užauginti [0001] arba $[000\bar{1}]$ orientacijos sluoksnius. [0001] bei $[000\bar{1}]$ kryptimi užauginti sluoksniai gali būti tarpusavyje atskirti pasinaudojant keliomis technikomis, tokiomis kaip šlapio ėsdinimo ar konverguojančio elektronų spindulio difrakcija (CBED) [26]. Epitaksinių sluoksnių poliškumas yra svarbus kristalo poliarizacijos nustatymui, kadangi spontaninės ir pjezoelektrinės poliarizacijų kryptys turi gerai apibrėžtas orientacijas A bei B plokštumų atžvilgiu. Teorinių [27] skaičiavimų rezultatai parodė, kad GaN, AlN bei InN spontaninės poliarizacijos vektorius yra nukreiptas išilgai $[000\bar{1}]$ krypties, t.y. iš A į B plokštumą, kaip pavaizduota 8 paveikslėlyje. Eksperimentiniai [28-29] bei teoriniai

rezultatai rodo, kad [0001] krypties nitridiniai kristalai, dėl kristalinės gardelės nesutapimų, auga su vidiniais įtempimais, tempiančiais arba gniuždančiais, taigi indukuojama pjezoelektrinė poliarizacija \mathbf{P}_{pz} gali būti atitinkamai išilgai $[000\bar{1}]$ arba $[0001]$ krypties. Pjezoelektrinės poliarizacijos lauko kryptis galio nitride, yra priešinga, negu kituose III-V grupės puslaidinkiu dariniuose, tačiau tokia pati kaip II-VI grupių puslaidininkiuose, dėl didesnio III-V grupės nitridų joniškumo, palyginus su kitais III-V grupės elementų dariniais [27, 29, 30]. Įtemptuose [0001] orientacijos III-V grupių elementų nitriduose, dėl vidinių įtempimų pjezoelektrinės poliarizacija bus nukreipta išilgai $[0001]$ krypties.

Taigi sudarius nitridų heterosandūrą indukuojamos poliarizacijos suformuoja teigiamo bei neigiamo krūvio regionus, kurie sukuria kondensatoriaus efektą, todėl pakinta vidiniai elektriniai laukai išilgai $[0001]$ ašies ir yra iškraipoma energinių juostų struktūra - juostos pasvyra. Dėl juostų išsikreipimo, elektronai bei skylės esantys kvantinėse duobėse tampa erdviškai atskirti, kas lemia šviestukų kvantinio efektyvumo sumažėjimą.



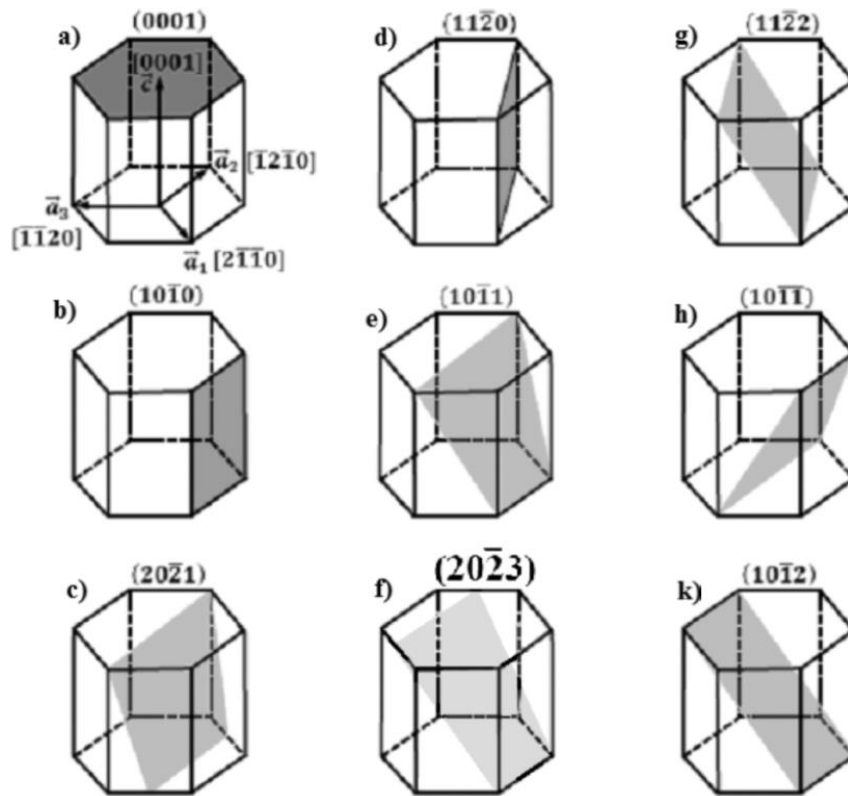
7 pav. InGaN/GaN kvantinių duobių struktūros bei energinių lygmenų schema polinio (a) bei nepolinio (b) kristalo atvejais [31].

7 paveikslėlyje atvaizduotos InGaN/GaN kvantinių duobių struktūros bei energinių lygmenų schemos polinio ir nepolinio kristalo atvejais. Polinio kristalo atveju heterosandūrų sluoksnių paviršiuose bei sandūrose dėl spontaninės poliarizacijos susidaro teigiami bei neigiami poliarizaciniai krūviai. Kadangi polinis kristalas yra įtemptas, atsiranda pjezoelektrinės poliarizacijos krūviai su skirtingais ženklais, negu spontaninės poliarizacijos atveju. Dėl didelio gardelės konstantos skirtumo tarp GaN ir InN (~11%), suminėje poliarizacijoje dominuoja \mathbf{P}_{pz} . Taigi bendras poliarizacinis laukas \mathbf{P} yra nukreiptas nuo prietaiso apatinės plokštumos link viršutinės. Kaip matome pavaizduotoje energijos juostų diagramoje, polinio kristalo atveju juostos yra iškreiptos, o kartu atsiranda ir kvantinio suspraudimo Štarko efektas (*quantum confined Stark effect*).

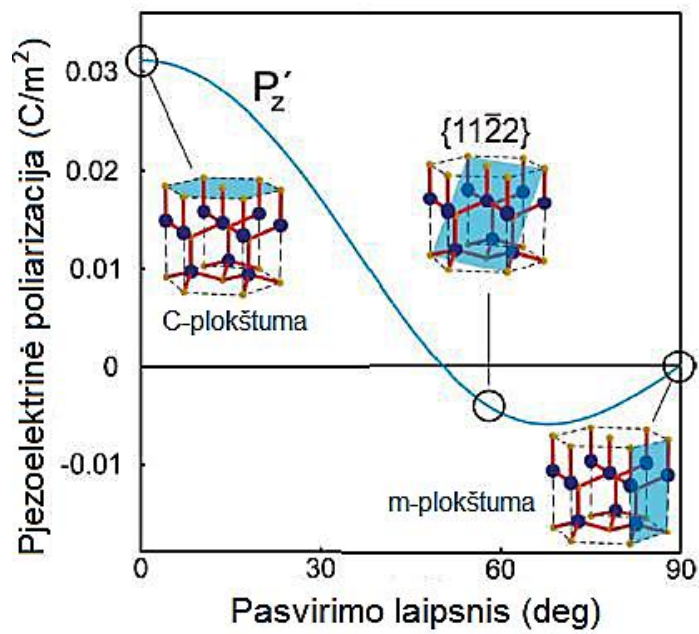
Štarko efektas pasižymi kaip išorinio elektrinio lauko poveikis kvantinių duobių sugerties ar emisijos spektrui. Nesant išorinio elektrinio lauko, elektronai ir skylės esantys kvantinėje duobėje gali užimti tik diskrečių energijų būsenas, taigi gali sugerti ir emituoti tik tam tikrų dažnių šviesą. Esant išoriniam elektriniam laukui, elektronų būsenos pasislenka į mažesnių energijų būsenas, o skylės - didesnių energijų būsenas. Tai sumažina galimus sugerties ar emisijos dažnius. Taip pat išorinis elektrinis laukas paslenka elektronus ir skyles į priešingas duobės puses, sumažindamas krūvininkų banginių funkcijų persiklojimą, taip kartu mažinamas sistemos spindulinės rekombinacijos efektyvumą.

Nepolinio kristalo atveju (7b pav.), bendras poliarizacinis laukas yra nukreiptas lygiagrečiai kvantinių duobių sluoksniams, energiniai lygmenys nėra iškreipiami šio lauko, gaunamas didesnis elektronų bei skylių banginių funkcijų persiklojimas, o kartu ir spindulinės rekombinacijos efektyvumas.

Realizavus GaN auginimą išilgai skirtingų kristalografinių plokštumų galima gauti nepolinį ar pusiau polinį kristalą (8 pav). Pusiau polinio kristalo atveju stebimi sumažėję vidiniai poliarizaciniai laukai (9 pav.), bei silpnesni parazitiniai efektai.



8 pav. GaN kristalinė gardelė su pažymėtomis polinėmis (a), nepolinėmis (b), bei pusiau polinėmis (c-k) plokštumomis [32].



9 pav. InGaN kvantinių duobių vidinių polarizacinių laukų priklausomybė nuo kristalo poliškumo [33].

3.4. Retųjų žemės metalų oksidai

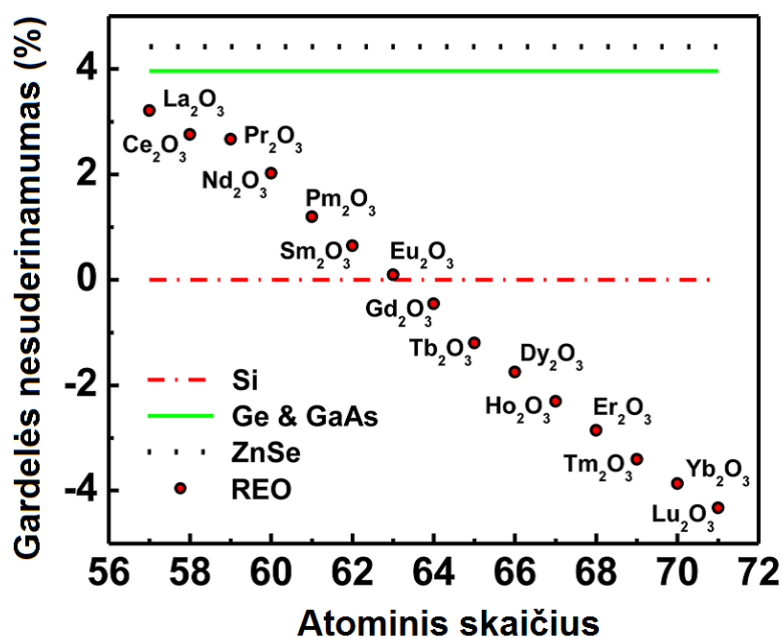
Vis didėja poreikis integruoti funkcionalius III grupės nitridus, į šiuo metu egzistuojančias silicio technologijas, kurios yra mažų gamybos kaštų. Pagrindinė problema čia yra šių medžiagų pritaikymas auginimams ant didelių matmenų Si padėklų, kadangi maža silicio technologinio apdirbimo kaina pasiekama tik kuomet realizuojami auginimai ant 150-200 mm diametro padėklų. Išvysčius auginimo ant Si technologiją, ją būtų galima pritaikyti jau esančioms Si gamybos įmonėms. Visgi, tiesioginis puslaidininkinių sluoksnių, tinkamų tolimesnei elektronikos prietaisų gamybai, auginimas ant silicio daugeliu atveju yra neįmanomas dėl medžiagų kristalinių gardelių nesuderinimo, didelių gardelės bei terminio plėtimosi konstantų neatitikimų, ar paprasčiausiai dėl cheminio medžiagų reakcingumo.

Medžiagų inžinerijos specialistai siekdami išspręsti daugelį nitridų epitaksijos ant Si problemų, dažniausiai pasitelkia papildomų medžiagų sluoksnių įterpimą, panaudojant juos kaip buferinius sluoksnius tarp Si ir auginamos puslaidininkinės medžiagos. Atliekami tyrimai, kur germanio ar galio arsenido auginimui ant Si panaudojami fluoridai ar perovskitai [36-38]. Tiriant galio nitrido auginimus daug dėmesio skiriama AlN ir retųjų žemės metalų oksidams [52 - 55].

Retieji žemės elementai, dar kitaip vadinami lantanoidais dėl savo elektroninės sandaros panašumų su lantanu. Nors vadinami retaisiais žemės elementais, visgi jie yra taip pat plačiai paplitę Žemėje kaip ir pavyzdžiui varis, cinkas ar nikelis. Mažiausiai paplitusių retųjų žemės elementų tulinis bei lutecis Žemės plutoje yra 200 kartų daugiau nei aukso. Visgi retųjų žemės elementų koncentracijos randamos plutoje yra mažos, tad nėra daug prieinamų šių elementų rudos telkinių. Praktiškai visa pasaulio retųjų žemės elementų pasiūla tiekama iš vos keletos šaltinių. Kadangi visi retieji žemės elementai yra chemiškai tarpusavyje panašūs, juos sunku išskirti į grynus elementus [39]. Tarp visų medžiagų, kurios galėtų būti tinkamos buferiniams sluoksniams, auginant GaN ant Si, retųjų žemės elementų tarp sluoksnių pasižymi keliais privalumais: dėl savo tinkamos kristalinės sandaros juos galima panaudoti auginamų sluoksnių įtempimų mažinimui [40-44], jie taip pat pasižymi geromis elektrinėmis, optinėmis bei šiluminėmis savybėmis [45-48], yra chemiškai stabilūs [49]. Šios puikios savybės atveria kelią retųjų žemės metalų medžiagas naudoti ne tik kaip tarp sluoksnius auginimams, tačiau ir išnaudoti kitą jų potencialą – formuoti dielektrinius sluoksnius ar didelio atspindžio heterostrukūras, pritaikyti kaip atskirus optinius elementus optoelektronikoje.

Si yra kubinės gardelės kristalas, kurio gardelės periodas $a = 0,54309$ nm. Retųjų žemės metalų oksidai taip pat turi kubinę kristalinę gardelę, kuri su Si gardele sutampa santykiu 1:2 (10 pav.). Visgi dėl oksidų polimorfizmo, kai kurie iš jų aukštesnėse temperatūrose, reikalingose

epitaksiniam auginimams, gali transformuotis į heksagoninę ar monoklininę gardelę [50, 51]. Taip pat keletas elementų (Ce, Pr, Sm, Eu) gali sudaryti oksidus su skirtingomis oksidacinėmis būsenomis. Pademonstruoti sėkmingi bandymai suvaldyti kubinę struktūrą bei oksidacijos laipsnį praseodimio oksido sluoksniuose, tačiau tai reikalauja papildomų technologinių žingsnių auginimo procesuose, kas komplikuoja bendrą sluoksnių formavimo eigą. Taigi, retųjų žemės metalų oksidas turi būti stabilus. Tinkamiausi šiam tikslui yra Gd_2O_3 bei Er_2O_3 . Dėl geresnio terminio stabilumo tinkamesnis gali pasirodyti esąs erbio oksidas, kurio gardelės periodas lygus 1,0526 nm. Dėl didesnio oksido terminio plėtimosi koeficiento, lyginant su Si [52], gardelės nesuderinamumas aukštose temperatūrose, kuriose atliekama epitaksija, tampa dar mažesnis. Taigi erbio oksido tarp sluoksnių gali būti tinkamas pasirinkimas GaN ant Si epitaksijos įgyvendinimui.



10 Pav. Gardelės konstantų skirtumai tarp silicio, kubinės gardelės retųjų žemės elementų oksidų (REO) bei kitų puslaidininkinių medžiagų [53].

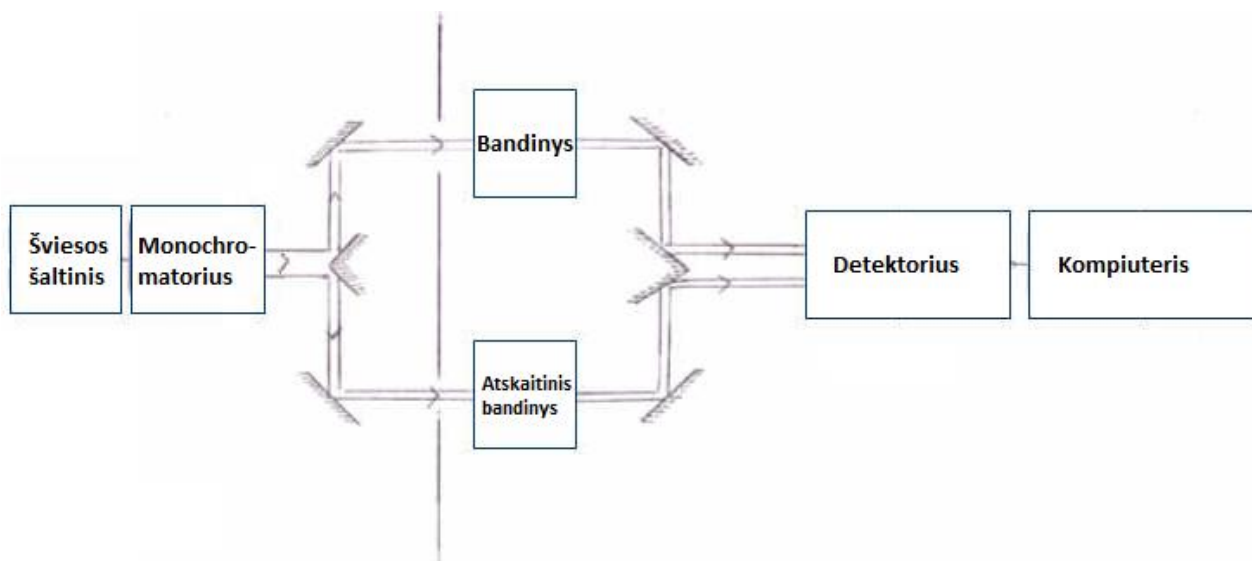
4. Matavimų metodikos

4.1. Optinių charakteristikų matavimai

Spektrofotometras – prietaisas skirtas matuoti įvairių bandinių spektrines charakteristikas (pralaidumą, atspindį, sugertį) plačiame diapazone: nuo 190 nm iki 3200 nm. Spektrofotometre yra matuojamas praėjusios pro bandinį (ar atsispindėjusios nuo jo) šviesos intensyvumas ir lyginamas su atskaitinio spindulio intensyvumu. Šių dviejų spindulių intensyvumų santykis ir yra bandinio pralaidumo koeficientas, atitinkamai sukonfiguravus prietaisą juo galime matuoti atspindžio ar sugerties spektrus.

Principinė prietaiso schema pavaizduota 11 paveikslėlyje. Šviesos šaltinis spektrofotometre, priklausomai nuo reikalingo spektrinio diapazono, gali būti kelios lempos, spinduliuojančios skirtingose spektrinėse srityse, kurios automatiškai persijungia skenuojant bandinį plačiame bangų intervale. Tokios lempos spindulys keliauja į monochromatorių, kuris išskiria šaltinio spektrą į monochromatinės dedamąsias, tad šviesos šaltinio išėjime turime siauro spektro spinduliuotę. Toks spindulys yra padalijamas pusiau ir dalis jo patenka į bandinį, kita dalis laikoma atskaitiniu signalu. Detektorius fiksuoja abu signalus, kompiuteris juos palygina bei pateikia matuojamo dydžio vertę ekrane. Taip, skirtingų lempų bei monochromatoriaus pagalba, yra gaunamas visas norimas optinių charakteristikų spektras.

Darbo metu bandinių atspindžio spektrų matavimams panaudotas spektrofotometras Shimadzu UV-3101PC.

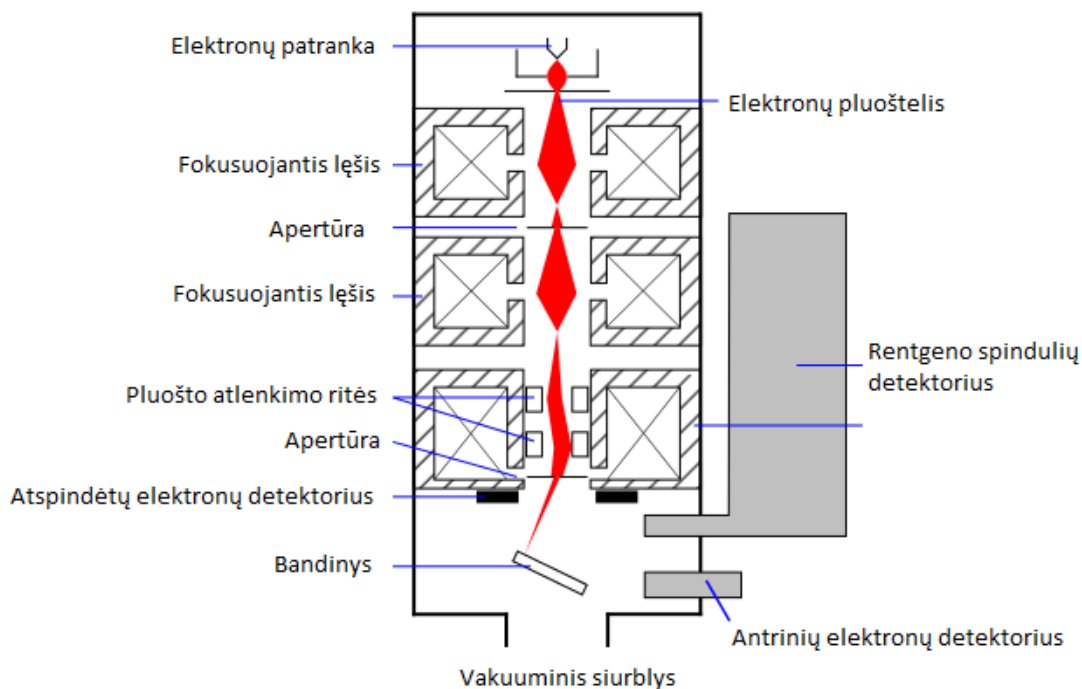


11 pav. Principinė spektrofotometro schema.

4.2. Skenuojanti elektroninė mikroskopija

Skenuojantis elektroninis mikroskopas (SEM) – tai aukštos skyros mikroskopas, kuris vietoj šviesos naudoja sufokusuotą elektronų pluoštą. Skenuojant bandinio paviršių tokiu pluošteliu elektronai sąveikauja su bandiniu, detektoriai fiksuoja atsispindėjusių ar antrinių elektronų signalus, kurie teikia informaciją apie paviršiaus morfologiją, stuktūrą ar sudėtį.

Spincipinė prietaiso schema pavaizduota 12 paveikslėlyje. Elektronų pluoštelis yra gereruojamas patrankos, esančios vakuume. Patrankoje elektronai yra emituojami iš katodo terminiu ar lauko emisijos būdu. Elektriniame lauke įgreitinti elektronai keliauja pro apertūrą link fokusuojančių elektroninių lęšių, kurie sufokusuoja pluoštą iki keletos nm skersmens. Sufokusuotą pluoštelį antrinės ritės nukreipia reikiama x ir y ašių kryptimi, bei statmenai į bandinio paviršių. Detektoriai surenka atspindėtus ar antrinius elektronus iš kiekvieno nuskenuto paviršiaus taško bei iš jų suformuoja signalą vaizdo formavimui.



12 pav. Skenuojančio elektroninio mikroskopo principinė schema [54].

Dažniausiai paviršiaus vaizdinimui naudojamas antrinių elektronų (<50 eV) signalas. Šie elektronai į detektorių patenka iš itin plono bandinio paviršiaus sluoksnio (kelių nm), kuriame dėl netamprios sklaidos su bandinio atomais yra išsklaidomi. Signalo intensyvumas priklauso nuo antrinių elektronų srauto pasiekiančio detektorių. Jei pluoštas sklinda į bandinį statmenai paviršiumi, tuomet apie tą tašką paviršius yra tolygiai sužadinamas ir atitinkamas kiekis elektronų išstrūksta iš bandinio. Pluoštelio kritimo kampui didėjant, elektronų išstrūkimo kampas vienoje pluošto pusėje sumažės ir bus emituojama daugiau antrinių elektronų, taigi aštrūs paviršiai bei kraštai bus

atvaizduojami ryškesni nei plokšti paviršiai. Antrinių elektronų vaizdinimu galima pasiekti mažesnę nei 1 nm rezoliuciją.

Atspindėtų elektronų pluoštelis sudarytas iš didelės energijos elektronų, kurie yra atspindėti ar išsklaidyti atbuline kryptimi dėl elastinės sklaidos bandinyje. Kadangi elementai su didesniu atominiu skaičiumi sklaido elektronus labiau nei lengvi, taigi galutiniame vaizde matomi ryškiau. Šių elektronų signalas yra matuojamas norint gauti vaizdą, kuriame atsispindėtų kontrastas tarp bandinio sričių su skirtinga chemine sudėtimi.

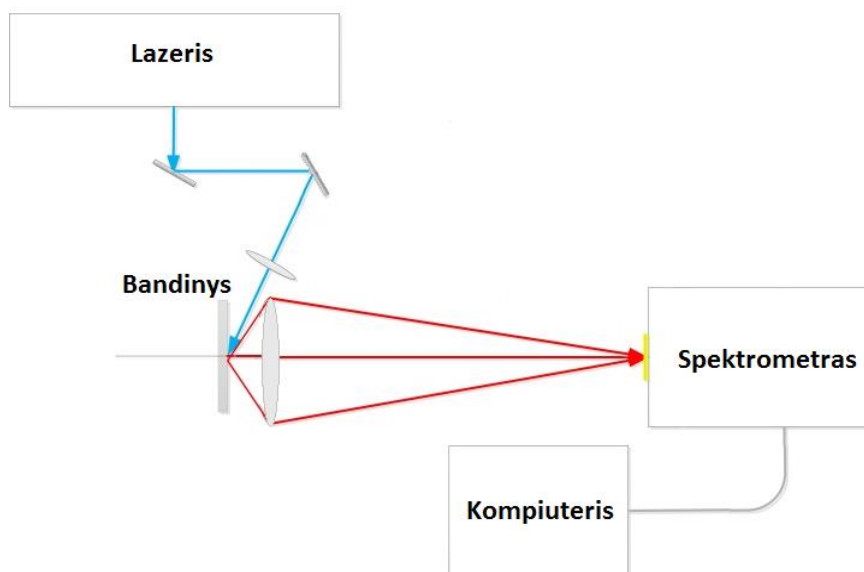
Nors ši mikroskopijos rūšis turi savo minusų (matuojami bandiniai turi būti nedidelio dydžio, elektriškai laidūs, reikalingas aukštas vakuumas), tačiau itin didelė skyra (įmanoma <1 nm) yra nenuginčijamas privalumas prieš kitus paviršių tyrimų metodus.

Darbo metu naudotas Hitachi SU-70 skenuojantis elektroninis mikroskopas.

4.3. Fotoluminescencijos matavimai

Bandinių fotoluminescencijos matavimo schema pavaizduota 13 paveikslėlyje. Bandinio fotoluminescencijos spektrui gauti bandinys sužadinamas lazerio impulsu, tuomet bandinio liuminescencijos spinduliuotė surenkama lęšio pagalba ir nukreipiama į spektrometro plyšį, kuriame įmontuotas monochromatorius. Monochromatorius išskleidžia spinduliuotę pagal bangos ilgus. Toks monochromatinių spindulių pluoštas patenka į CCD kamerą. Kompiuteriui apdorojus duomenis, pateikiamas fotoluminescencijos spektras.

Fotoluminescencijos matavimams panaudotas Nd:YAG (<100 mJ, 25 ps, 355 nm) lazeris Ekspla PG401 bei spektrometras Princeton Instruments Acton SP2300.

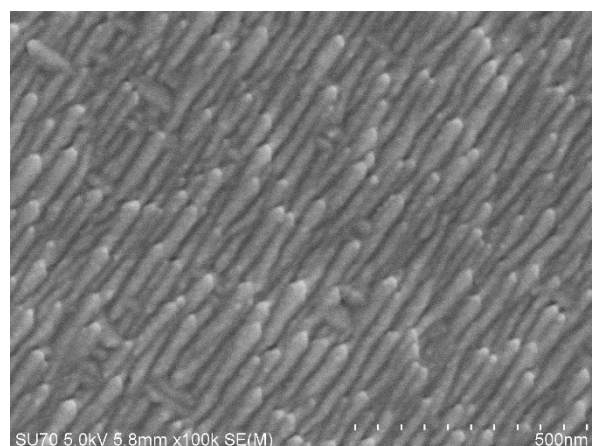
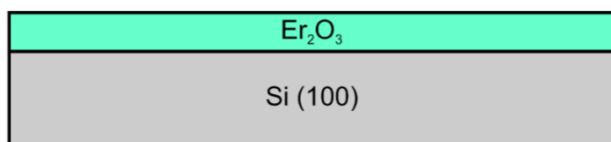


13 pav. Fotoluminescencijos matavimo schema.

5. Rezultatai ir jų aptarimas

5.1. Si padėklų terminio stabilumo tyrimas

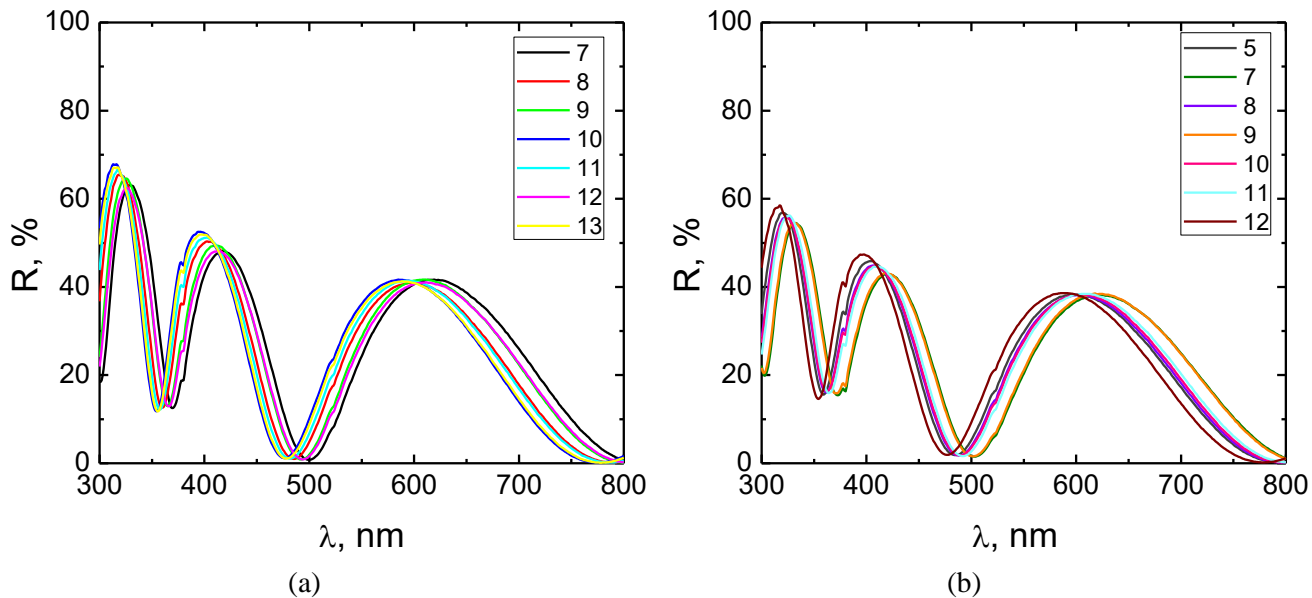
Pirmiausia praktinio darbo metu buvo ištirtas Si (100) padėklų su retųjų žemės metalų oksidų sluoksniu terminis stabilumas. Padėklai skirti GaN auginimui MOCVD metodu, taigi turi būti stabilūs aukštose temperatūrose. Padėklai suformuoti iš 4 colių Si padėklo, išpjauto (100) kryptimi, ant kurio MBE metodu padengtas plonas Er_2O_3 sluoksnis (14 pav.). Bandinius tyrimams suteikė Translucent Inc. kompanija dirbanti epitaksinių sluoksnių auginimų srityje Jungtinėse Amerikos Valstijose. Buvo tiriami gamintojo pateikti dviejų tipų identiškos struktūros padėklai, kurie skyrėsi paviršiaus šiurkštumu – padėklas Nr. VU-001 – mažesnio šiurkštumo bei Nr. VU-031 – didesnio šiurkštumo. Padėklų paviršiuje matomi dvejopų orientacijų erbio oksido kristalitai (14 pav.). Esant didesniai skaičiui nevienodai orientuotų kristalitų gaunamas didesnis paviršiaus šiurkštumas. Padėklai buvo padalinti į kelias dalis, bei iškaitinti skirtingose temperatūrose (700°C - 1060°C) greito terminio iškaitinimo krosnyje, nuolatos leidžiant N_2 srautą.



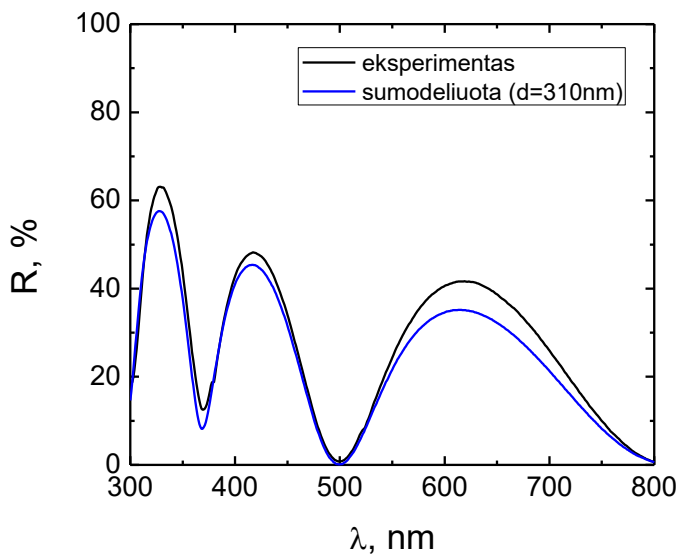
14 pav. Padėklo struktūra (kairėje) ir mažesnio paviršiaus šiurkštumo padėklo SEM vaizdas (dešinėje).

Ištirus bandinių atspindžių spektrus prieš iškaitinimą (15 pav.) pastebėta, jog bandinių iš skirtingų padėklų vietų atspindžių spektrai nežymiai skiriasi. Taip galėjo nutikti dėl to, kad paviršinis Er_2O_3 sluoksnis yra padengtas netolygiai visame Si padėklo paviršiuje. Tuo įsitikinti atliktas atspindžių spektrų modeliavimas MathCad programa, kurioje taikant perdavimo matricių metodą (*transfer matrix*) yra apskaičiuojami plonasluoksnių darinių atspindžių spektrai [56]. Programai pateikus atspindžio spektrą, parenkami tokie medžiagų sluoksnių parametrai, kad programos sugeneruotas spektras su pateiktu spektru sutaptų kuo geriau (16 pav.), taip galime nustatyti struktūrą sudarančių sluoksnių storius, žinant tik struktūrą sudarančias medžiagas. Tokiu

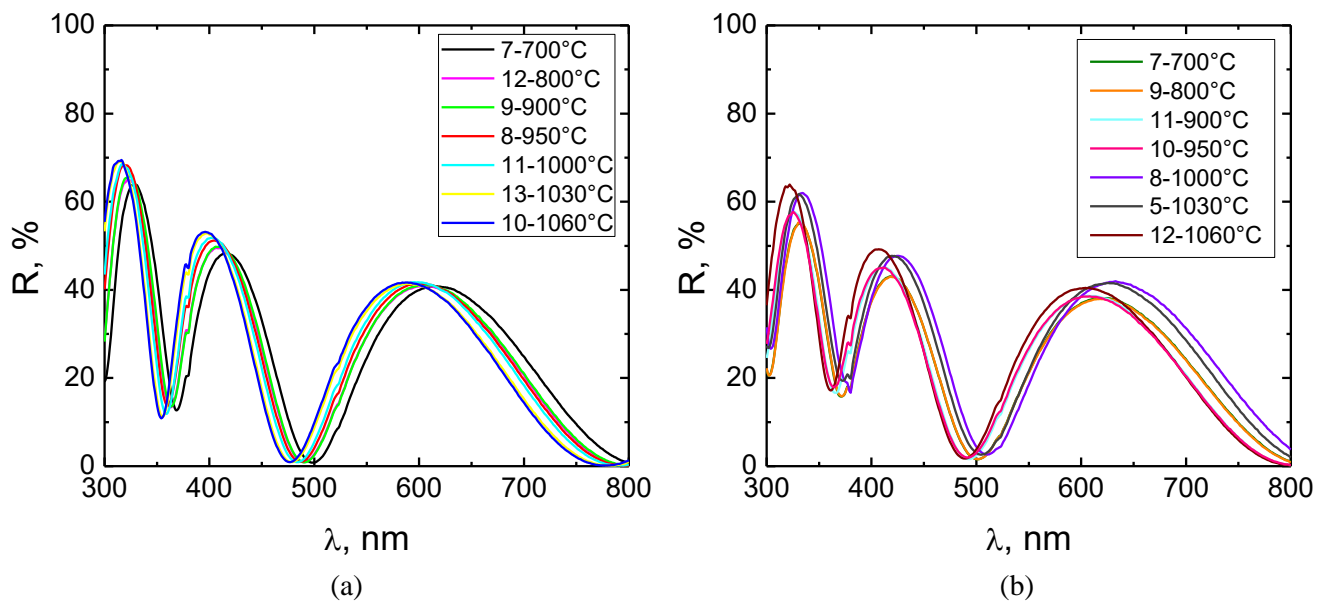
būdu įvertinti Er_2O_3 storiai. Nustatyta, kad skirtinguose bandiniuose oksido sluoksnis svyruoja nuo 295 nm iki 310 nm, kur storiausi erbio oksido sluoksniai yra bandiniuose iš padėklo plokštelės centro.



15 pav. Neiškaitintų bandinių atspindžių spektrai: mažesnio šiurkštumo (a) ir didesnio šiurkštumo padėklas (b).

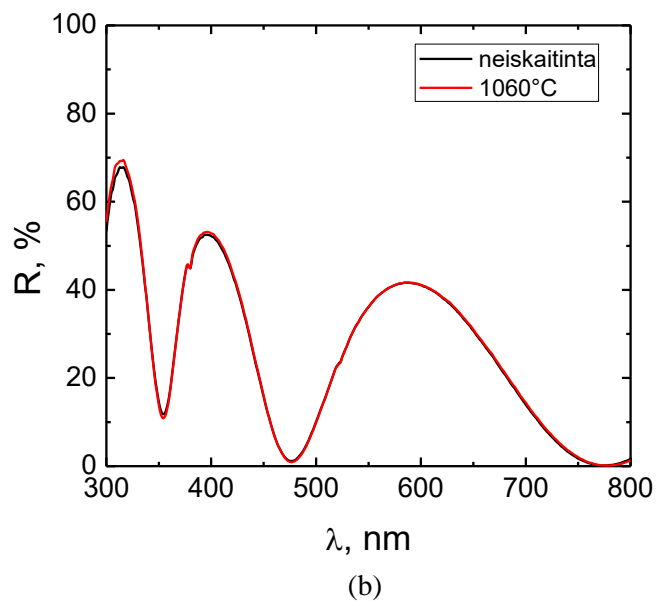
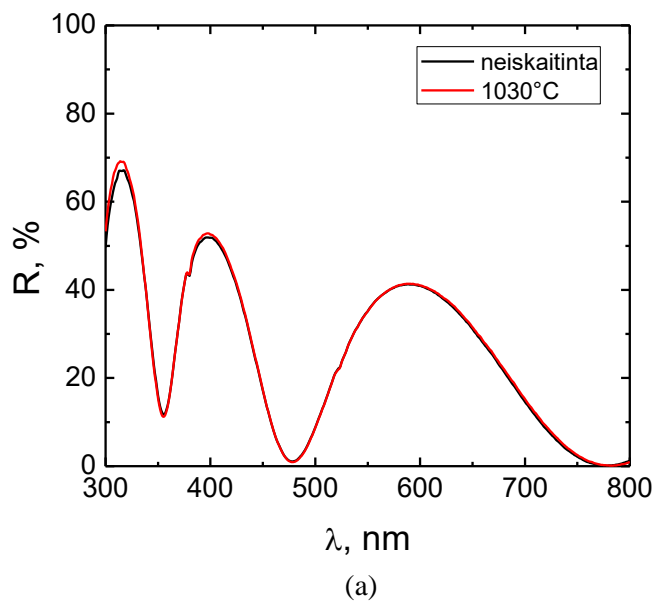


16 pav. Er_2O_3 sluoksnio atspindžio spektro modeliavimo rezultatų pavyzdys.

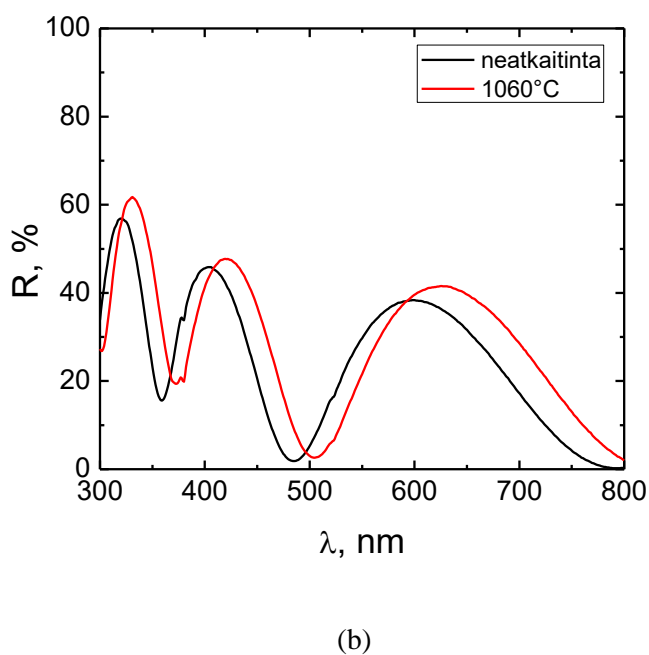
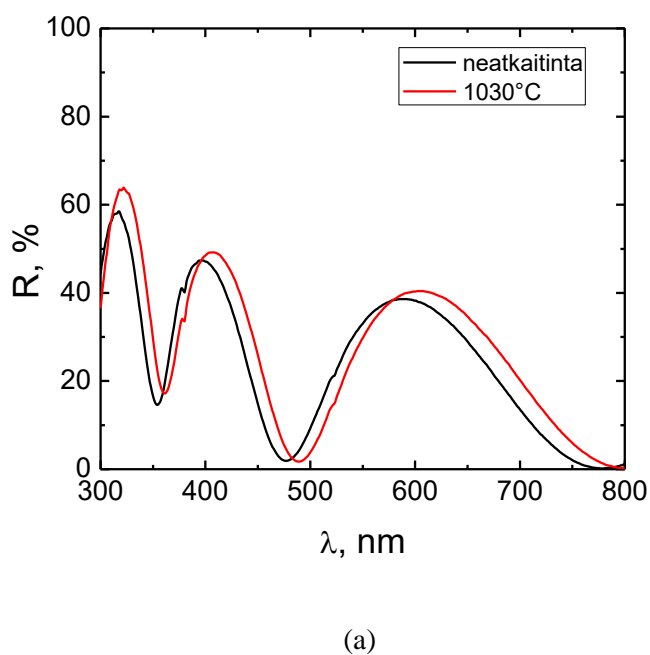


17 pav. Iškaitintų skirtingose temperatūrose (700°C - 1060°C) bandinių atspindžių spektrai: mažo šurkštumo padėklas (a), didelio šurkštumo padėklas (b).

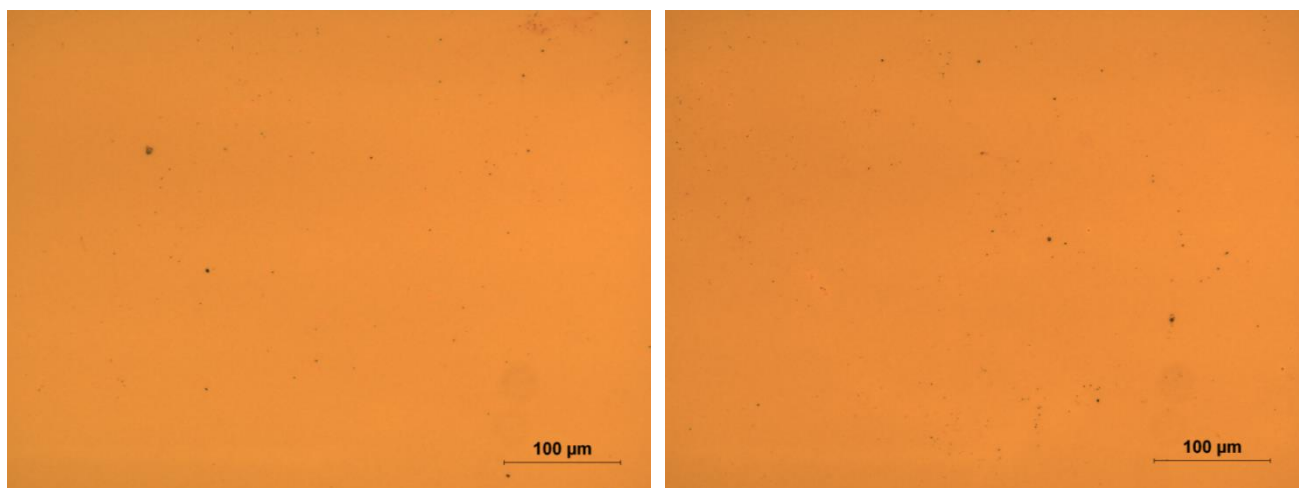
Iškaitintus bandinius, pakartotinai išmatuoti atspindžių spektrai pavaizduoti 17 paveikslėlyje. Sulyginus atspindžių spektrus prieš ir po iškaitinimų pastebėta, kad mažesnio paviršiaus šurkštumo padėklo atspindžiai iškaitinus juos net ir aukštose temperatūrose nepakito (18 pav.), kai tuo tarpu didesnio šurkštumo padėklų atspindžio spektrai po iškaitinimų aukštesnėse temperatūrose (1000°C - 1060°C) pakito (19 pav). Iškaitinimai žemesnėse nei 1000°C temperatūrose šių bandinių atspindžių spektrams įtakos neturėjo. Remiantis modeliavimo rezultatais, pokyčiai atspindžio spektruose gali būti susiję su tiriamo sluoksnio storio arba lūžio rodiklio pokyčiu. Kadangi kaitinimų temperatūros buvo nepakankamai aukštos intensyviam erbio oksido garavimui, mažai tikėtina, kad spektrai pakito dėl sluoksnio storio pokyčių. Spektrų pokytis galėjo atsirasti dėl Si difuzijos į Er_2O_3 ar Er ir Si reakcijos dėl kurios gali susidaryti naujos fazės ir dėl to pakisti lūžio rodiklis. Tikimiausia, kad dėl kristalinės gardelės pokyčio pasikeitė medžiagos optinės savybės - lūžio rodiklis. Tokie pokyčiai galėjo lemti interferencijos minimumo bei maksimumo pokyčius atspindžio spektre. Kitų pakitimų bandinių paviršiuje galėjusių lemti atspindžio spektro pokytį nepastebėta (20 pav.).



18 pav. Mažesnio paviršiaus šiurkštumo padėklo atspindžių spektrai prieš ir po iškaitinimų 1030°C (a) ir 1060°C (b).



19 pav. Didesnio paviršiaus šiurkštumo padėklo atspindžių spektrai prieš ir po iškaitinimų 1030°C (a) ir 1060°C (b).

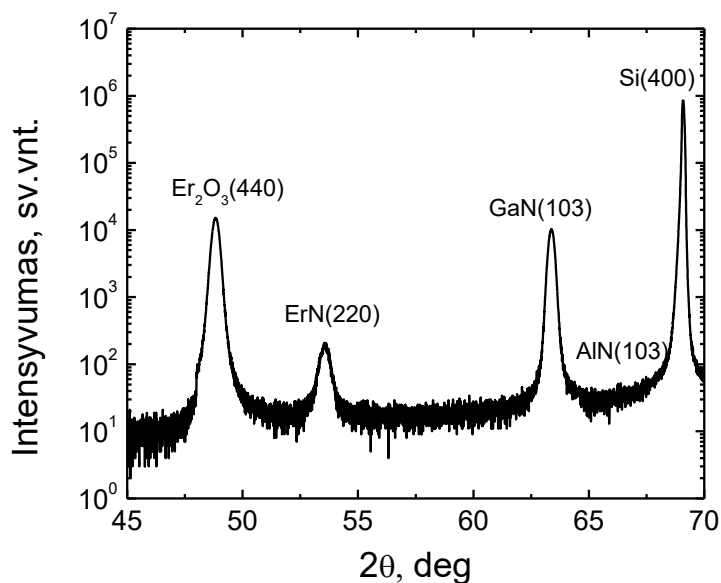


(a)

(b)

20 pav. Didesnio paviršiaus šiurkštumo bandinių iškaitintų 1030°C (a) ir 1060°C (b) temperatūrose paviršių optiniai vaizdai.

Ant duotųjų padėklų, papildomai padengus ploną AlN sluoksnėlį, buvo užaugintos pusiau polinio GaN užuomazgos – salos. Tokių bandinių XRD matavimų difraktograma pavaizduota 21 paveikslėlyje. Identifikuotos Er_2O_3 , ErN, GaN, Si bei itin silpna AlN smailė. ErN smailės būvimas rodo, kad auginimo metu azotas reaguodamas su erbio oksido pasluoksniu suformuoja ErN fazę. Nustatyta, kad užaugintas GaN yra $(10\bar{1}3)$ orientacijos.



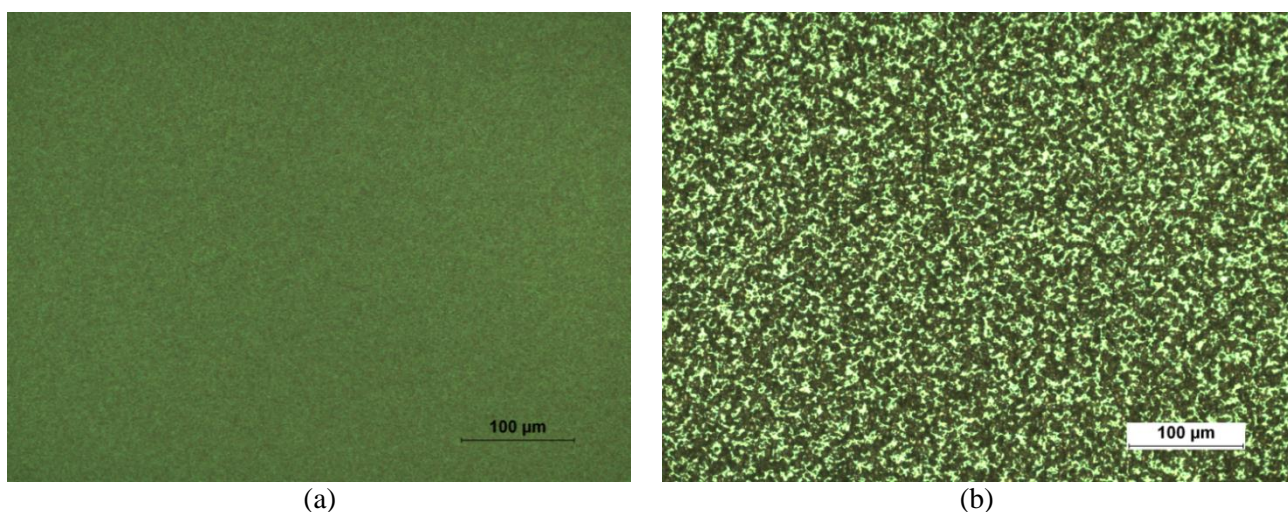
21 pav. Pusiau polinio GaN XRD difraktograma.

5.2.1. GaN struktūrų augimo tyrimas

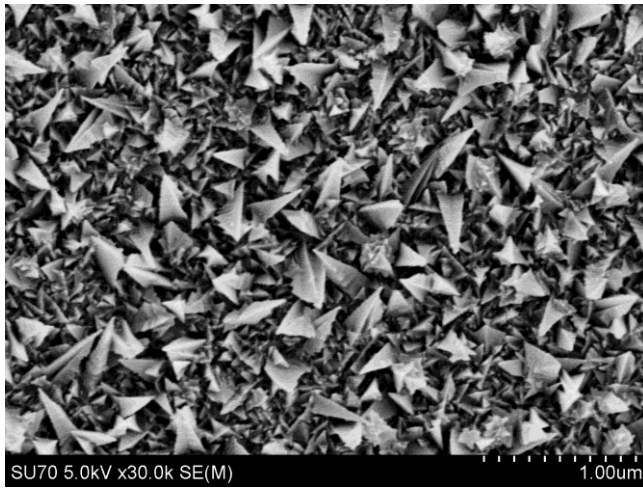
Ištirti bandiniai su MOCVD metodu ant Si padėklų su Er_2O_3 pasluoksniu užaugintomis nepolinio bei pusiau polinio GaN užuomazgomis – salomis. Prieš pusiau polinio GaN auginimą ant padėklo buvo papildomai padengta 10 nm storio AlN danga, veikianti kaip papildomas medžiagų difuzijos barjeras užtikrinantis aukštesnę augančio sluoksnio kokybę.

Optinio mikroskopo vaizduose matoma grublėta paviršiaus struktūra abiejuose bandiniuose (22 pav.). Bandinius ištyrus skenuojančiu elektroniniu mikroskopu (SEM) paviršiuje matomos atskirų GaN salų struktūros (23 pav.). Nepolinio GaN bandinio paviršiuje matomos chaotiškai susiformavusios kelių šimtų nanometrų ilgio bei pločio struktūros, be aiškiai matomų kristalinių plokštumų. Pusiau polinio GaN salos susiformavusios mikrometrinių matmenų, piramidinės formos. Šių salų sienelės, atitinkančios skirtingas kristalo plokštumas gerai išreikštos, matomi heksagoninės formos paviršiai atitinka (0001) kristalo plokštumas. Palyginimui, 24 paveikslėlyje pavaizduotos polinio GaN salos, užaugintos ant safyro, kurių paviršiai taip pat atitinka skirtingas kristalo plokštumas, o matmenys yra panašūs į pusiau polinio GaN salas.

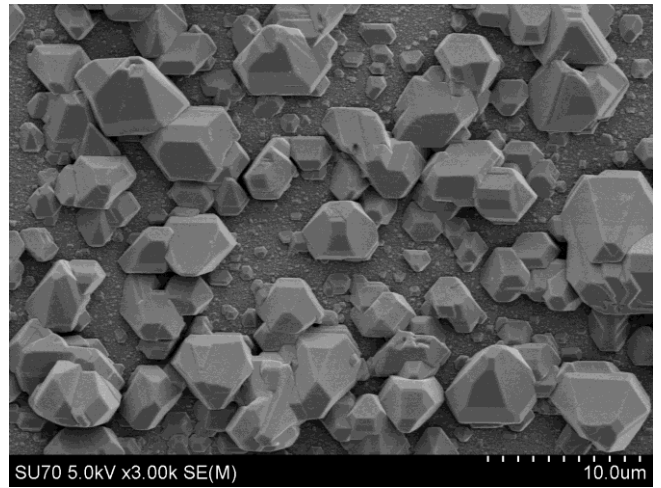
Norint nustatyti optimalias ateityje planuojamų atlikti nepolinio bei pusiau polinio GaN sluoksnių auginimo sąlygas yra pravartu iš anksto žinoti kristalo augimo skirtingomis kryptimis spartas. Augimo spartos susijusios su auginimo metu paduodamų į auginimo kamerą V/III grupės elementų – azoto ir galio pirmtakų koncentracijų santykiu. Žinant kristalo augimo spartas skirtingomis kryptimis, galime nustatyti V/III koncentracijas reikalingas skatinti augimą viena ar kita kryptimi. Pavyzdžiui, auginant polinį GaN ir didinant galio šaltinio - trimetilgalio (III) koncentraciją skatinamas augimas [0001] kryptimi, o didinant azoto šaltinio - amoniako (V) koncentraciją – augimas šoninėmis kryptimis.



22 pav. Bandinių su užaugintomis GaN salomis paviršiai: nepolinis (a) ir pusiau polinis GaN (b). Nuotraukos darytos optiniu mikroskopu.

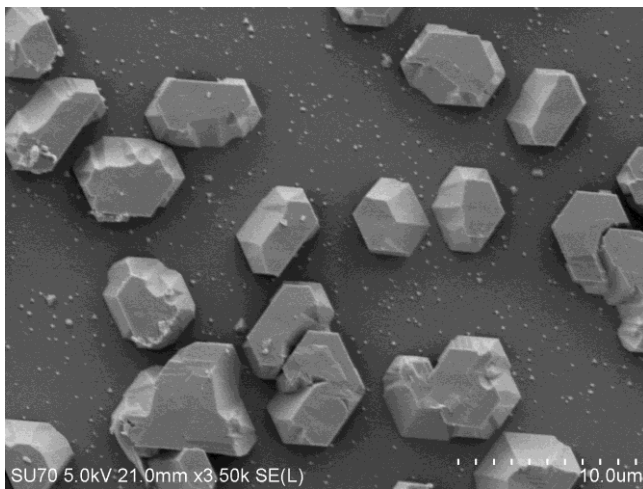


(a)

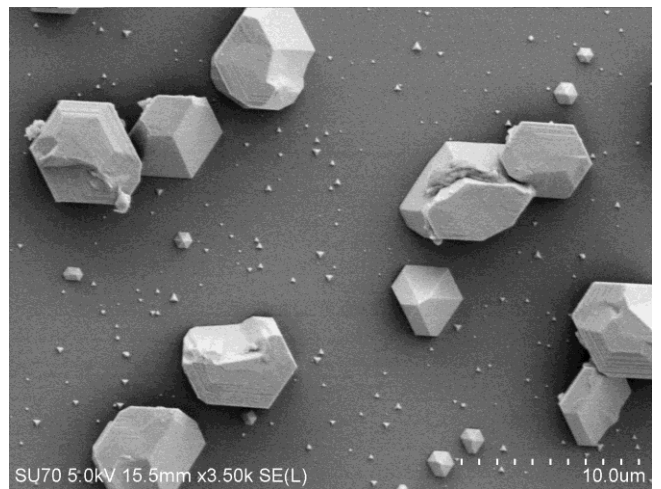


(b)

23 pav. Nepolinio (a) bei polinio (b) GaN salų užaugintų ant Si padėklų SEM vaizdai.



(a)



(b)

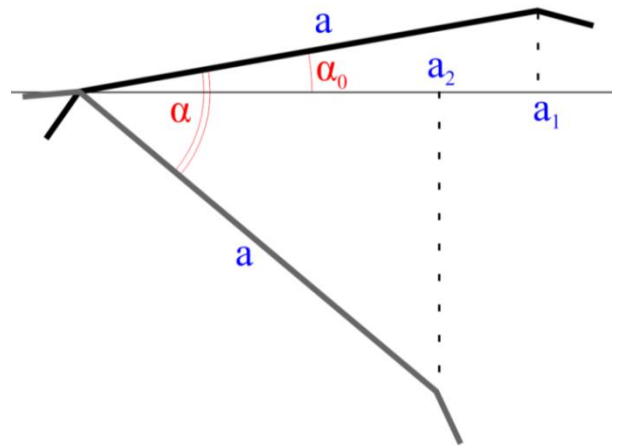
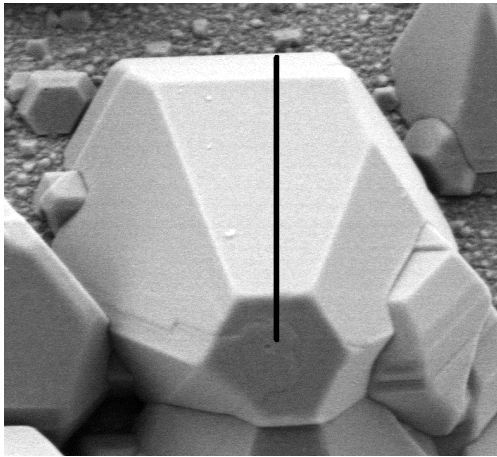
24 pav. Polinio GaN salų užaugintų ant safyro padėklų SEM vaizdai.

Siekiant įvertinti GaN augimo spartas skirtingomis kryptimis, pirmiausiai buvo nustatytos SEM vaizduose matomos salų kristalografinės plokštumos. Atlikti SEM matavimai, kurių metu bandiniai buvo paverčiami skirtingais kampais, taip gaunant skirtingus tos pačios salos vaizdus. Nepolinio GaN bandinys pasirodė netinkamas tokiai analizei, kadangi susiformavusios dalelės yra netvarkių formų ir atskirų struktūrų nėra įmanoma iširti. Tokiu būdu iširtos pusiau polinio bei polinio GaN salos.

Tarkime, kad ekrane matome GaN salelės plokštumą (25 pav.), kurios išilginio pjūvio (juoda linija) ilgis yra a , o jo projekcija ekrane, kurią mes stebime yra a_1 ,

$$a_1 = a \cdot \cos(\alpha_0) \quad (1)$$

kampas α_0 , kurį sudaro ši plokštuma su pagrindu yra ieškomasis dydis.



25 pav. Kairėje pavaizduotas salos plokštumos išilginis pjūvis, dešinėje – skaičiavimų schema.

Pakeitus bandinio padėti, t.y. pavertus bandinį žinomu kampu α , plokštumos projekcija matoma ekrane pasikeis į a_2

$$a_2 = a \cdot \cos(\alpha - \alpha_0). \quad (2)$$

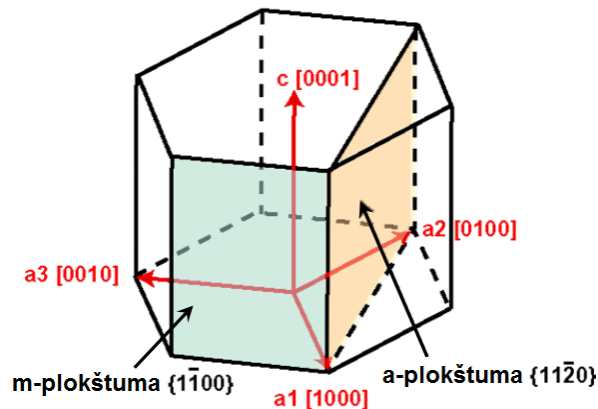
Sulyginę abi lygtis galime gauti tapatybę, pagal kurią ieškosime α_0 kampo:

$$\cos(\alpha_0) = \frac{a_1}{a_2} \cdot \cos(\alpha - \alpha_0) \quad (3)$$

Ši lygtis yra transcendentinė, todėl α_0 radimui buvo taikomas iteracinis metodas. Patogesniai skaitmeniniai skaičiavimai skaičiavimui (3) lygtis gali būti perrašyta taip:

$$\cos(\alpha_0) - \frac{a_1}{a_2} \cos(\alpha - \alpha_0) = 0 \quad (4)$$

Heksagoninės GaN gardelės plokštumos gali būti aprašytos keturiais Milerio indeksais ($hkil$) arba supaprastinus tik trimis (hkl), kadangi trečiasis indeksas i atitinka ašį a_3 , kuri yra sudėtinė, t.y. a_1 ir a_2 suma (26 pav.).

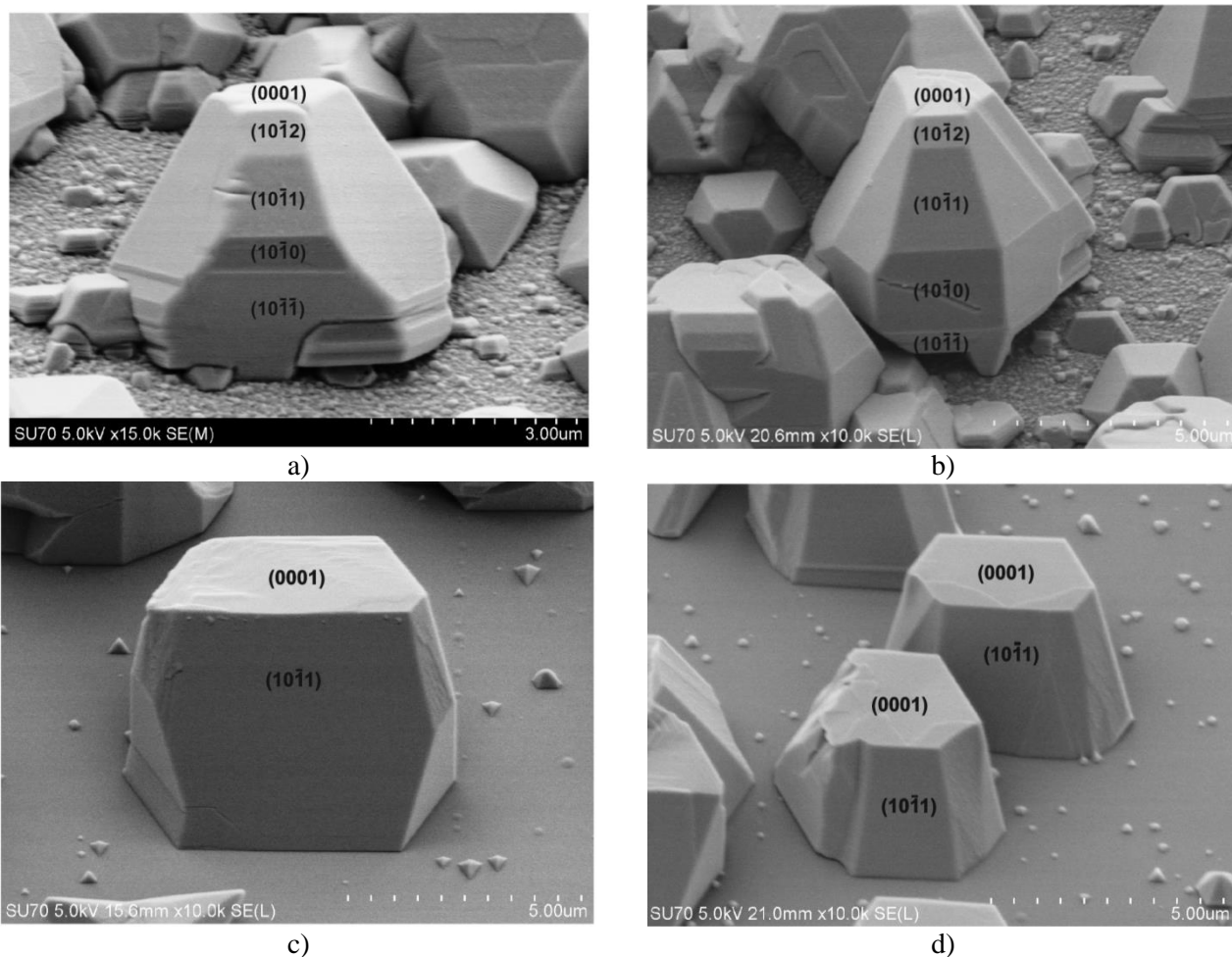


26 pav. GaN kristalinės gardelės plokštumos bei ašys.

Pasirinkus dvi dominančias heksagoninės kristalinės gardelės plokštumas, kampą tarp jų galima rasti pagal formulę [57]:

$$\cos \theta = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + i_1 i_2 + \lambda^2 l_1 l_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + i_1^2 + l_1^2)} \sqrt{(h_2^2 + k_2^2 + i_2^2 + \lambda^2 l_2^2)}} \quad (5)$$

čia $(h_1 k_1 i_1 l_1)$ ir $(h_2 k_2 i_2 l_2)$ yra pasirinktų plokštumų Milerio indeksų rinkinys, $\lambda^2 = \frac{3}{2} \left(\frac{a}{c}\right)^2$, kur a ir c yra GaN kristalinės gardelės parametrai. Pasirenkant skirtingas GaN kristalo plokštumas (pvz. iš 8 pav.), galime rasti kampų tarp šių plokštumų ir pagrindo vertes, kurias palyginus su anksčiau nustatytais iš SEM matavimų galime įvertinti kurias plokštumas matome vaizduose. Priedo 3 ir 4 lentelėse pateikiami pusiau polinio bei polinio GaN salų SEM vaizdai, pagal kuriuos atlikti skaičiavimai. Iš viso aukščiau minėtais metodais iširtos 6 polinio bei 4 pusiau polinio GaN salos. Pusiau polinio GaN salose išskirtos (0001) , $(10\bar{1}2)$, $(10\bar{1}1)$, $(10\bar{1}0)$ ir $(10\bar{1}\bar{1})$ plokštumos, o polinio – (0001) ir $(10\bar{1}1)$ (27 pav.).



27 pav. Pusiau polinio (a-b) ir polinio (c-d) GaN salų pavyzdžiai su pažymėtomis identifikuotomis kristalinėmis plokštumomis.

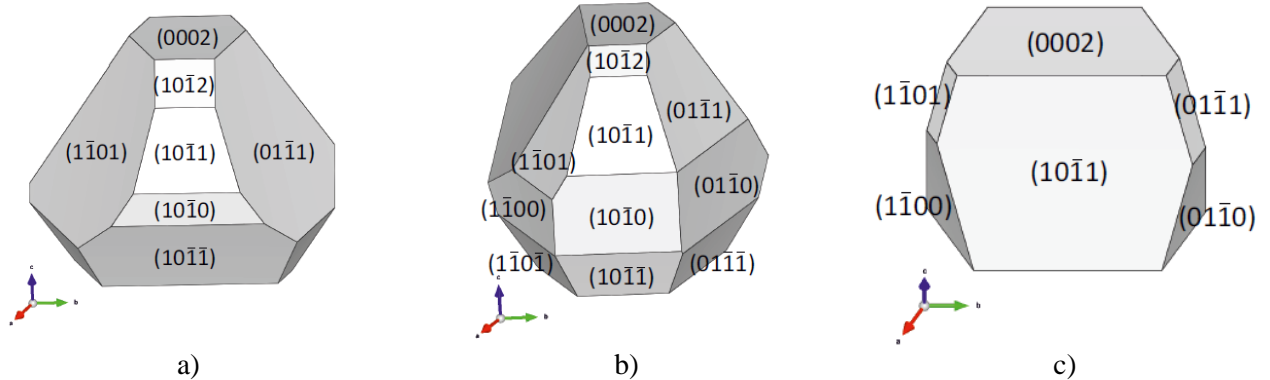
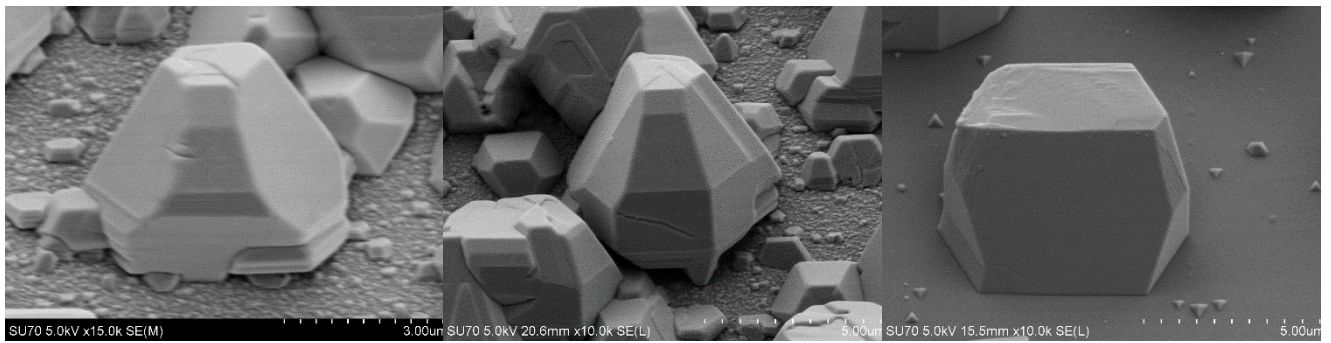
Atlikti pusiau polinio GaN rentgeno difrakcijos (XRD) matavimai, iš kurių nustatyti kampai tarp Si (100) pagrindo ir GaN plokštumų. Rezultatai pateikti 1 lentelėje. Iš XRD matavimų, nustatyta, kad GaN ($10\bar{1}3$) plokštuma su Si pagrindo normalės kryptimi sudaro $\sim 1^\circ$, tačiau ši plokštuma SEM vaizduose nėra matoma, kadangi ji nepasiekia kristalo išorės, t.y. šios orientacijos plokštumos kristalo viduje egzistuoja, tačiau nesudaro atskiro paviršiaus. XRD matavimais nustatytos tik dvi plokštumos dėl riboto kampo tarp rentgeno spindulio ir tiriamo paviršiaus galimo matavimams.

Lentelėje kartu pateikti teoriniai skaičiavimų rezultatai, kuriuose įvertinti kampai tarp GaN ($10\bar{1}3$) ir kitų plokštumų bei kampų vertės, gautos iš SEM matavimų. Nuo teoriškai apskaičiuotų šios kampų vertės skiriasi $1,2^\circ$ - 4° intervale. Įvertinus tai, kad kampas tarp Si (100) ir GaN ($10\bar{1}3$) yra apytiksliai lygus 1° , iš lentelėje esančių duomenų galime pastebėti, kad visais trimis atvejais gauti rezultatai tarpusavyje skirsis vos $1,5^\circ$ - $2,7^\circ$. Polinio GaN salose, kampas tarp identifikuotos GaN (0001) plokštumos bei safyro pagrindo nustatytas 5° , nors teoriškai turėtų būti 0° , o kampo, tarp GaN ($10\bar{1}1$) ir safyro pagrindo, vertė paklaidų ribose sutampa. Šios kampų paklaidos galėjo susidaryti dėl nelygiagrečios pagrindui bandinio padėties SEM matavimų metu, ar dėl iš salų SEM vaizdų netiksliai nustatytų plokštumų projekcijų ilgių.

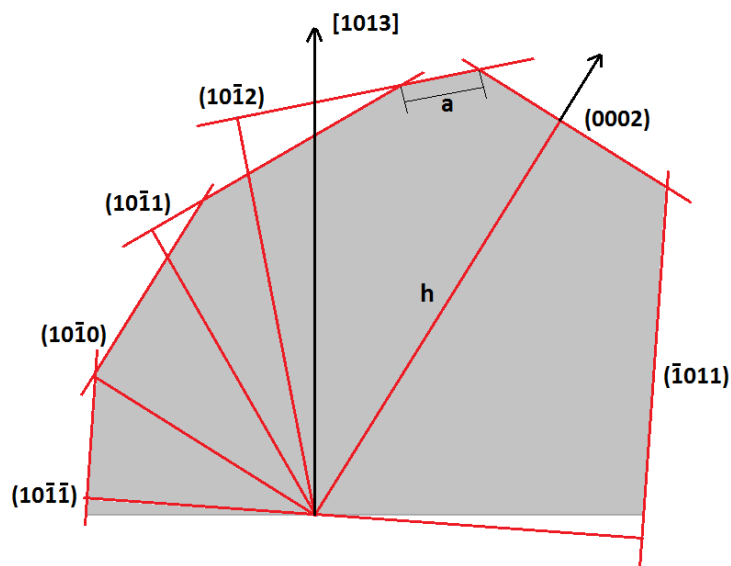
1 lentelė. Kampų tarp plokštumų rezultatų lentelė

Duota plokštuma	XRD matavimai (tarp duotos plokštumos ir Si(100))	Teorinės vertės, pagal (5) formulę (tarp duotos plokštumos ir GaN($10\bar{1}3$))	Eksperimentinės vertės, iš SEM matavimų (tarp duotos plokštumos ir Si (100))	Teorinės vertės, pagal (5) formulę (tarp duotos plokštumos ir GaN(0001))	Eksperimentinės vertės, iš SEM matavimų (tarp duotos plokštumos ir safyro(0001))
(0001)	$33,1^\circ$	$32,0^\circ$	34°	0°	5°
($10\bar{1}2$)	$9,5^\circ$	$11,2^\circ$	10°	-	-
($10\bar{1}1$)	-	$29,9^\circ$	27°	62°	62°
($10\bar{1}0$)	-	58°	56°	-	-
($10\bar{1}\bar{1}$)	-	86°	82°	-	-

Pasinaudojant kristalų vizualizacijos programine įranga VESTA 3.3.2 [58] bei anksčiau gautais rezultatais, sudaryti salų 3D maketai (28 pav.) bei AutoCad programa 2D brėžiniai (29 pav.), iš kurių nustatyti plokštumų atstumai nuo salos augimo centro. Augimo centras nustatytas laikant, kad ekvivalenčių plokštumų ($10\bar{1}1$) ir ($\bar{1}011$) augimo greičiai yra vienodi. Kadangi polinio GaN salų atveju iš SEM matavimų nebuvo nustatyta ekvivalenčių plokštumų, toliau jos nebuvo nagrinėjamos.



28 pav. Pusiau polinio (a-b) ir polinio (c) GaN salų 3D maketų pavyzdžiai esant 30° pavertimo kampui.



29 pav. Pusiau polinio GaN salos 2D maketas.

Tarkime, kad plokštumos atstumas h nuo augimo centro yra proporcingas kristalo augimo spartai ta kryptimi, tuomet apskaičiavus skirtingų plokštumų atstumų santykius galima įvertinti santykinės paviršių augimo spartas. Santykinės plokštumų augimo spartos v_1/v_2 buvo ivertintos $[10\bar{1}2]$ krypties atzvilgiu (čia v_2 augimo sparta $[10\bar{1}2]$ kryptimi) (2 lentelė). Didžiausiu atstumu nuo centro yra (0002) plokštuma, taigi augimo sparta ta kryptimi yra didžiausia, tačiau dėl skirtingo tarpatominio atstumo įvairiomis kristalo kryptimis, monosluoksniu augimo greitis

nesutampa su augimo sparta. Papildomai įvedus augimo konstantą kaip $K=v/d$, kurią galima apibrėžti, kaip užaugusių monosluoksnių skaičių per laiko vienetą (čia d – atitinkamos heksagoninio kristalo plokštumos tarplokštuminis atstumas). Santykinės augimo konstantos vertės $[10\bar{1}2]$ krypties atžvilgiu pateiktos 2 lentelėje. Duotomis MOCVD auginimo sąlygomis (1030°C, V/III santykis lygus 1423) sparčiausias monosluoksnių augimas vyksta poline $[0002]$ bei pusiaupoline $[10\bar{1}2]$ kryptimi. Nepoline $[10\bar{1}0]$ kryptimi augimas yra lėtas ir energetiškai nepalankus.

Pusiau polinio GaN salos buvo užaugintos aukštoje temperatūroje (1030°C), kurioje pradeda dominuoti garavimo procesas t.y. augimo greitis mažėja didinant temperatūrą [59]. Augimo konstantą galima užrašyti kaip [60]

$$K = A \exp\left(\frac{E}{kT}\right) \quad (6)$$

čia A – konstanta vienoda visoms augimo kryptims, E – aktyvacijos energija. Aktyvacijos energijų skirtumas gali būti užrašytas:

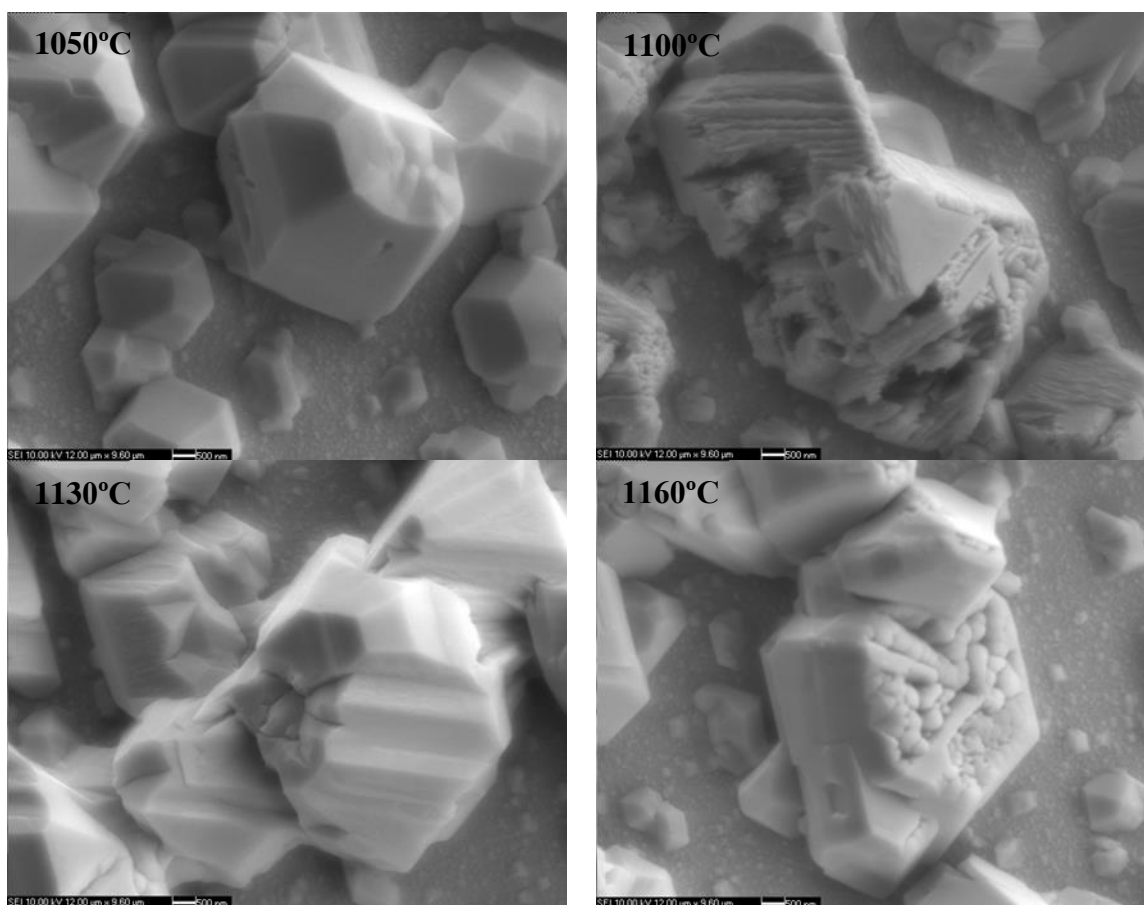
$$\Delta E = -kT \ln\left(\frac{K_1}{K_2}\right) \quad (7)$$

kur K_2 – augimo sparta $[10\bar{1}2]$ kryptimi, o K_1 – kitomis kryptimis. Aktyvacijos energijų rezultatai pateikti 2 lentelėje. Didelis aktyvacijos energijų skirtumas ΔE lemia nepalankų augimą duotosios plokštumos kryptimi, pvz. $[10\bar{1}0]$ ar $[10\bar{1}\bar{1}]$ kryptimis. Panašūs rezultatai pastebimi ir literatūroje skaičiuojant teorines GaN plokštumų paviršiaus energijas [61]. Esant itin didelėms auginimo temperatūroms ir pastoviam ΔE , santykis K_1/K_2 artėtų į 1, t.y. K visomis augimo kryptimis būtų vienodas ir kristalantai augtų apvalesnės piramidės formos.

2 lentelė. Rezultatų lentelė.

plokštuma	a , μm	h , μm	v_1/v_2	d , \AA	K_1/K_2	ΔE , meV
(0002)	2,17	4,56	1,15	2,59	0,84	19,97
$(10\bar{1}2)$	0,77	3,97	1	1,89	1	0
$(10\bar{1}\bar{1})$	2,25	3,23	0,81	2,44	0,63	51,81
$(10\bar{1}0)$	1,98	2,57	0,64	2,76	0,44	91,40
$(10\bar{1}\bar{1})$	1,41	2,24	0,56	2,44	0,43	92,71
$(\bar{1}011)$	3,22	3,22	0,81	2,44	0,63	52,01

Atlikti pusiau-polinio GaN struktūrų kaitinimai skirtingose temperatūrose. Bandinių SEM vaizdai po iškaitinimo (30 pav.) parodė, kad net ir aukštoje 1160°C temperatūroje GaN medžiagos garavimas yra itin silpnas, kadangi užaugintų struktūrų kristalinė kokybė yra aukšta.

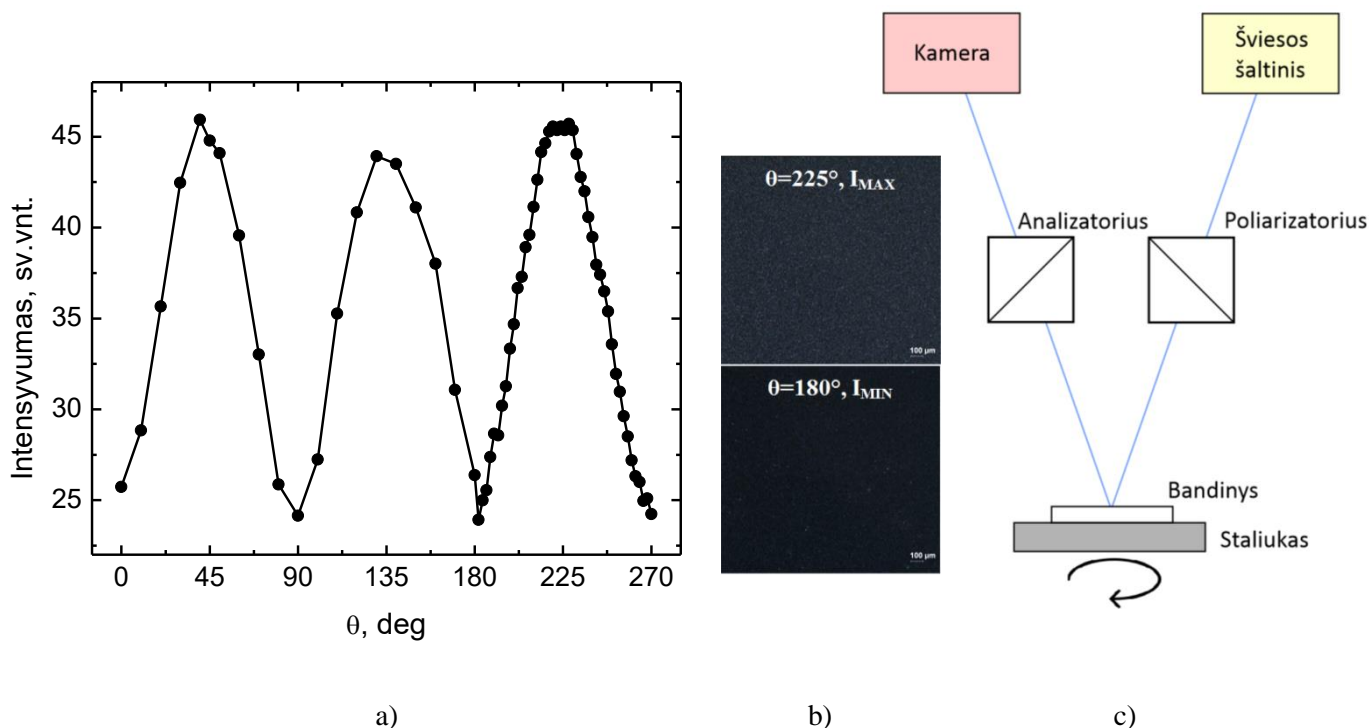


30 pav. Iškaitintų pusiau polinio GaN struktūrų SEM vaizdai.

5.2.2. GaN struktūrų šviesos poliarizacija

Nepolinis bei pusiau polinis GaN patrauklus taikymams optoelektronikoje ir dėl savo anizotropinių optinių savybių – galimybės gauti poliarizuotą (arba dalinai poliarizuotą) spinduliuotą lazeriuose ar šviestukuose [62-63]. Polinio GaN prietaisuose, c kryptis yra statmena paviršiui, taigi šviesa sklindanti iš aktyviosios srities dvejojpo lūžio nepatiria.

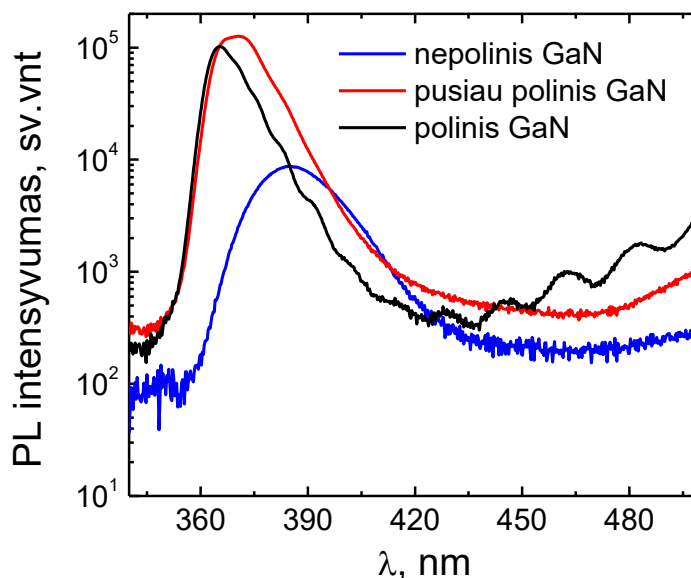
Pusiau polinio GaN salų šviesos poliarizacinės savybės išmatuotos optiniu mikroskopu panaudojant papildomą poliarizatorių ir analizatorių (31 pav). Pro poliarizatorių praėjusi šviesa yra tiesiškai poliarizuota. Šios tiesiškai poliarizuotos šviesos kelyje pastatomas bandinys, kuris pritvirtinamas ant sukamojo staliuko, o už jo analizatorius (31 pav.). Analizatorius bei poliarizatorius yra sukryžiuoti, kad šviesa pro tokią sistemą nepraeitų. Šviesos kelyje bandinys padedamas taip, kad atspindys nuo jo patektų į analizatorių. Kuomet pro poliarizatorių praėjusi tiesiškai polairizuota šviesa krinta į bandinį lygiagrečiai jo optinei ašiai, poliarizacijos plokštuma nėra pasukama ir pro analizatorių šviesa nepraeina. Tačiau, poliarizatorius bei analizatorius nėra idealiai poliarizuojantys šviesą ir juos sukryžiavus dalis šviesos vistiek pereina sistemą, taigi fiksuojamas minimalus intensyvumas nėra lygus 0. Pasukus bandinį su pusiau poliniu GaN kampu, dėl kristale vykstančio dvigubo šviesos spindulių lūžio, gaunama eliptiškai poliarizuota šviesa, taigi dalis jos praeina pro analizatorių ir ekrane stebimas šviesus vaizdas. Esant 45° kampui ekrane matomas šviesiausias vaizdas. Poliarizacijos plokštumos sukimo savybės pusiau poliniame GaN stebimos dėl kristalo optinės anizotropijos bei dichrozmo [64].



31 pav. Pusiau polinio GaN šviesos poliarizacijos sūkimo tyrimas: a) matavimo rezultatai, b) mikroskope matomas bandinio paviršius, c) matavimo chema.

5.2.3. GaN struktūrų fotoluminescencija

Išmatavus įvairių poliškumų GaN bandinių fotoluminescencijos (PL) spektrus kambario temperatūroje (32 pav.) pastebėta, kad pusiau polinio GaN salų fotoluminescencijos spektro smailė beveik sutampa su polinio GaN smaile. Šios polinio bei pusiau polinio GaN fotoluminescencijos spektro smailės atitinka tarpjuostinius šuolius galio nitride. Pusiau polinio GaN salose galima tikėtis mažesnio defektų tankio, nes kristalitai auga mažiau įtempti, o kartu dėl nelygaus paviršiaus padidėja šviesos išstrūka, taigi stebima stipresnė šio bandinio liuminescencija, nei tolygiame polinio GaN sluoksnyje (storis $d \approx 2 \mu\text{m}$). Polinio GaN PL spektre, ilgesniųjų bangų srityje stebimos silpnos osciliacijos dėl šviesos interferencijos plonuose sluoksniuose (safyras-GaN). Nepolinio GaN salų PL spektras stebimas silpnesnis, išplitęs ir pasislinkęs į ilgesnių bangų pusę galimai dėl didelio defektų kiekio ar susidariusių įtempių bandinyje.

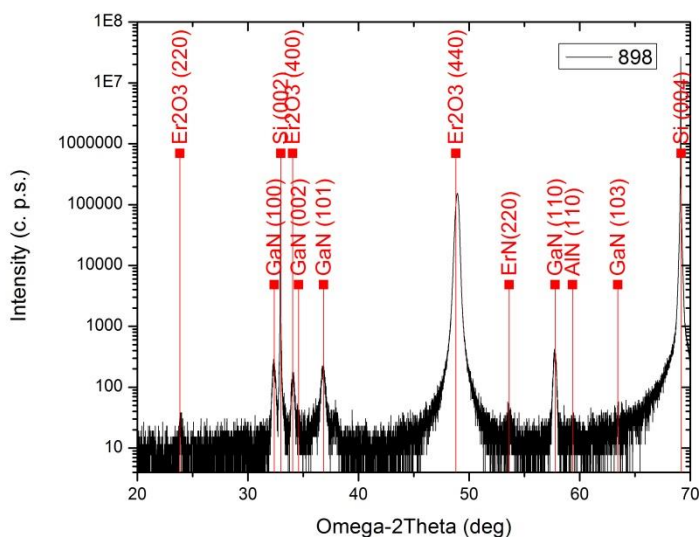
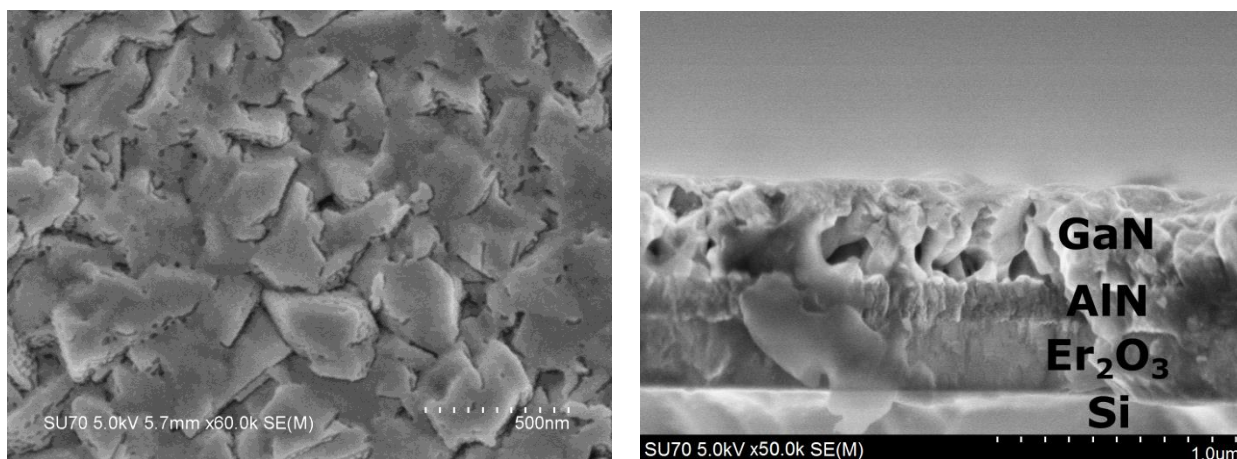


32 pav. Bandinių PL spektrai.

Taigi iš pateiktų rezultatų matome, kad Si (100) padėklai su Er_2O_3 pasluoksniu yra tinkami nepolinio bei pusiau polinio GaN auginimui aukštose temperatūrose, o užaugintos pusiau polinio GaN salos pasižymi panašiomis optinėmis savybėmis kaip ir polinio GaN sluoksniai. Šių tyrimų rezultatai bus panaudoti planuojant tolimesnius tolygių nepolinio bei pusiau polinio GaN kristalinių sluoksnių auginimo eksperimentus, bei tiriant jų optines bei elektrines savybes.

5.3. Nepolinio GaN dangos auginimas

Vilniaus Universiteto Taikomųjų mokslų institute atlikti nepolinio GaN ištisinių sluoksnių auginimai MOCVD reaktoriumi Aixtron. Nustatyta, kad atliekant auginimus ant Si padėklo su Er_2O_3 bei AlN tarp sluoksniais azoto atmosferoje ($V/III=178$) formuojasi porėta multikristalinė danga, kurioje dominuoja kelios kristalinės orientacijos. 33 paveikslėlyje matomos dvi nepolines orientacijos [10-10] bei didesnio intensyvumo - dominuojanti [11-20] orientacija.

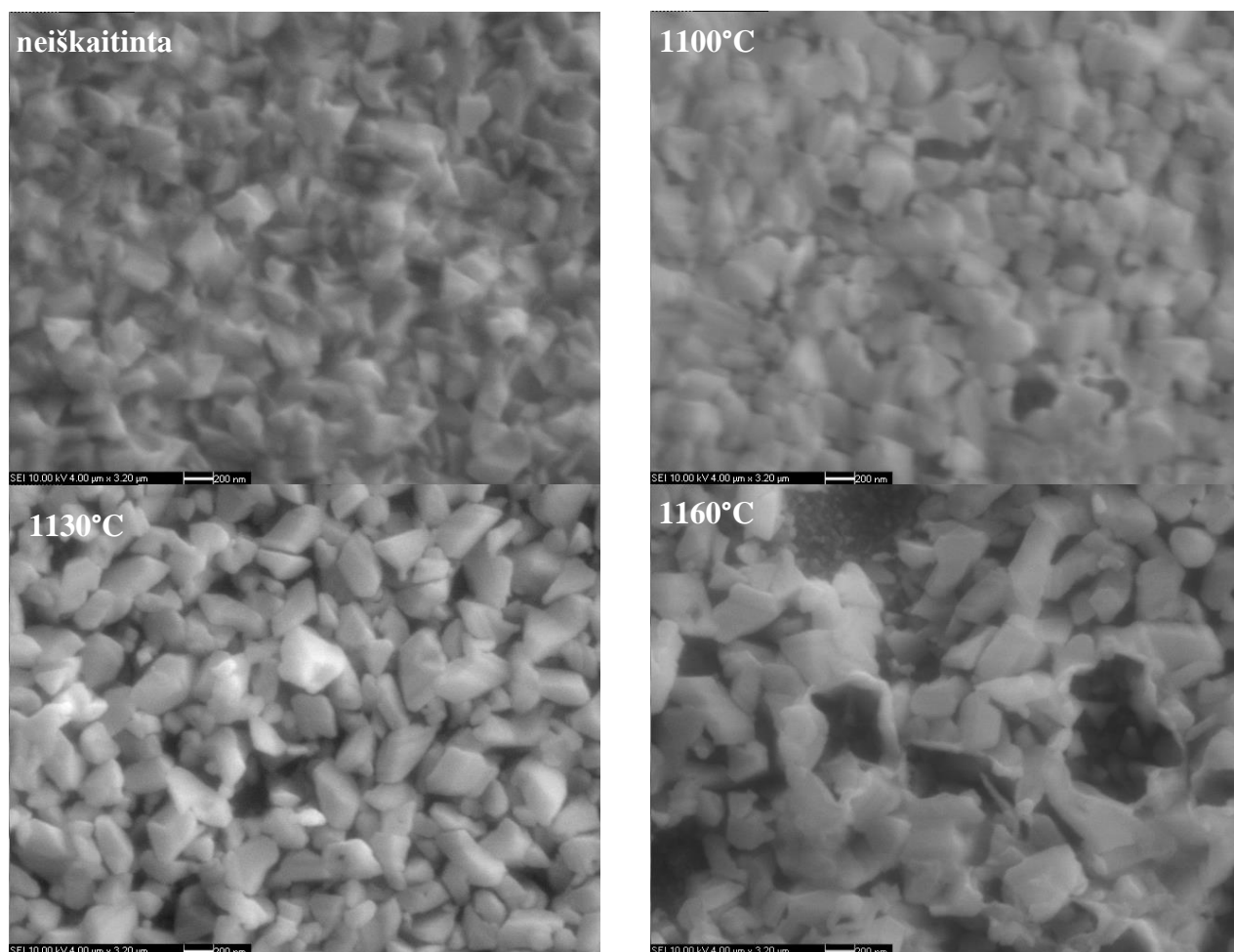


33 pav. Pusiau polinio GaN dangos SEM vaizdai ir XRD matavimų rezultatai.

Polinio GaN auginimo ant safyro metu geriausi rezultatai pasiekiami atliekant dvipakopį auginimą, kuomet pirminio auginimo žemoje temperatūroje (iki 600°C) metu ant padėklo yra užauginamas polikristalinis GaN sluoksnis, užaugintas žemoje temperatūroje, tuomet atliekamas dangos iškaitinimas aukštoje temperatūroje (virš 1000°C) reaktoriuje, kurio metu prastos kristalinės kokybės sritys nugaruoja, atidengdamos aukštos kristalinės kokybės monokristalines GaN salas. Tęsiant auginimą, parenkami auginimo parametrai skatintys šoninį kristalo auginimą, tuomet aplink

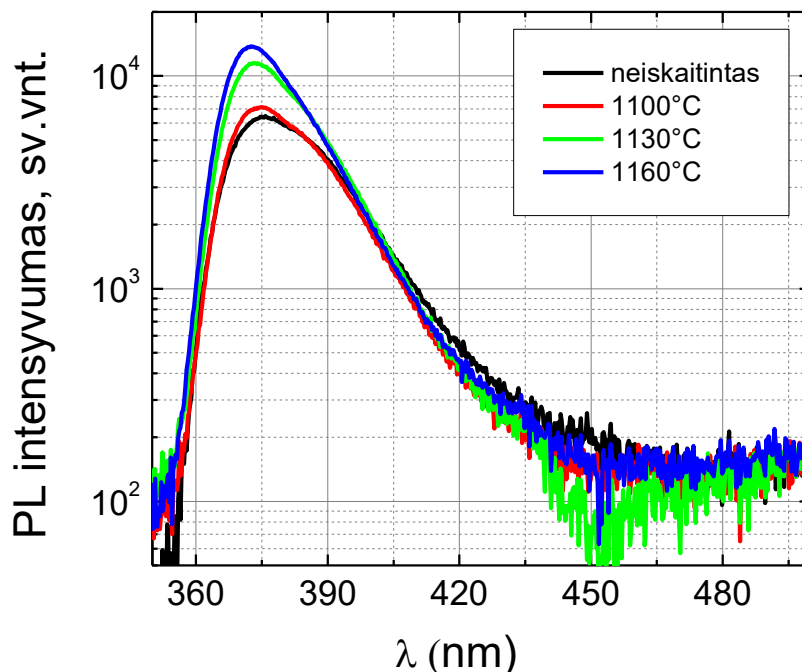
salas pradeda augti aukštos kokybės GaN suformuodamas tolygią dangą, kurioje gaunamas sumažėjęs sraigtinių dislokacijų tankis [65-66].

Defektų pašalinimuidangoje atlikti kaitinimai siekiant atkartoti dvipakopio GaN auginimo proceso eigą. Atliekant kaitinimus, į reaktoriaus zoną buvo tiekiamas amoniakas, taip skatinant garuojančios medžiagos reorganizaciją. Keliant temperatūrą pirmiausiai iš gardelės išgaruoja N atomai, likę laisvi Ga atomai esant pakankamai dideliame N garavimui, gali sukristi į metalo lašelius kristalo paviršiuje. Jei garavimas lėtas ir į auginimo reaktorių yra tiekiamas N pirmtakas, Ga atomai dėl sparčios difuzijos, gali judėti kristalo paviršiuje, jungtis su naujais N atomais bei iš naujo formuoti dangą. Kaitinimai atlikti 1100-1160°C temperatūrose 20 minučių. Dangos morfologiniai pokyčiai įvertinti skenuojančia elektronine mikroskopija (34 pav.). Iš gautų vaizdų nustatyta, jog iškaitinant bandinius vyksta rekristalizacija bei silpnas garavimas dėl aukštos dangą sudarančių mikrokristalų kristalinės kokybės. Išgaruoja tik defektuotos sritys kurių aktyvacijos energija yra mažesnė.



34 pav. GaN dangos užaugintos ant Si padėklo paviršiaus pokyčiai prieš ir po iškaitinimų skirtingose temperatūrose.

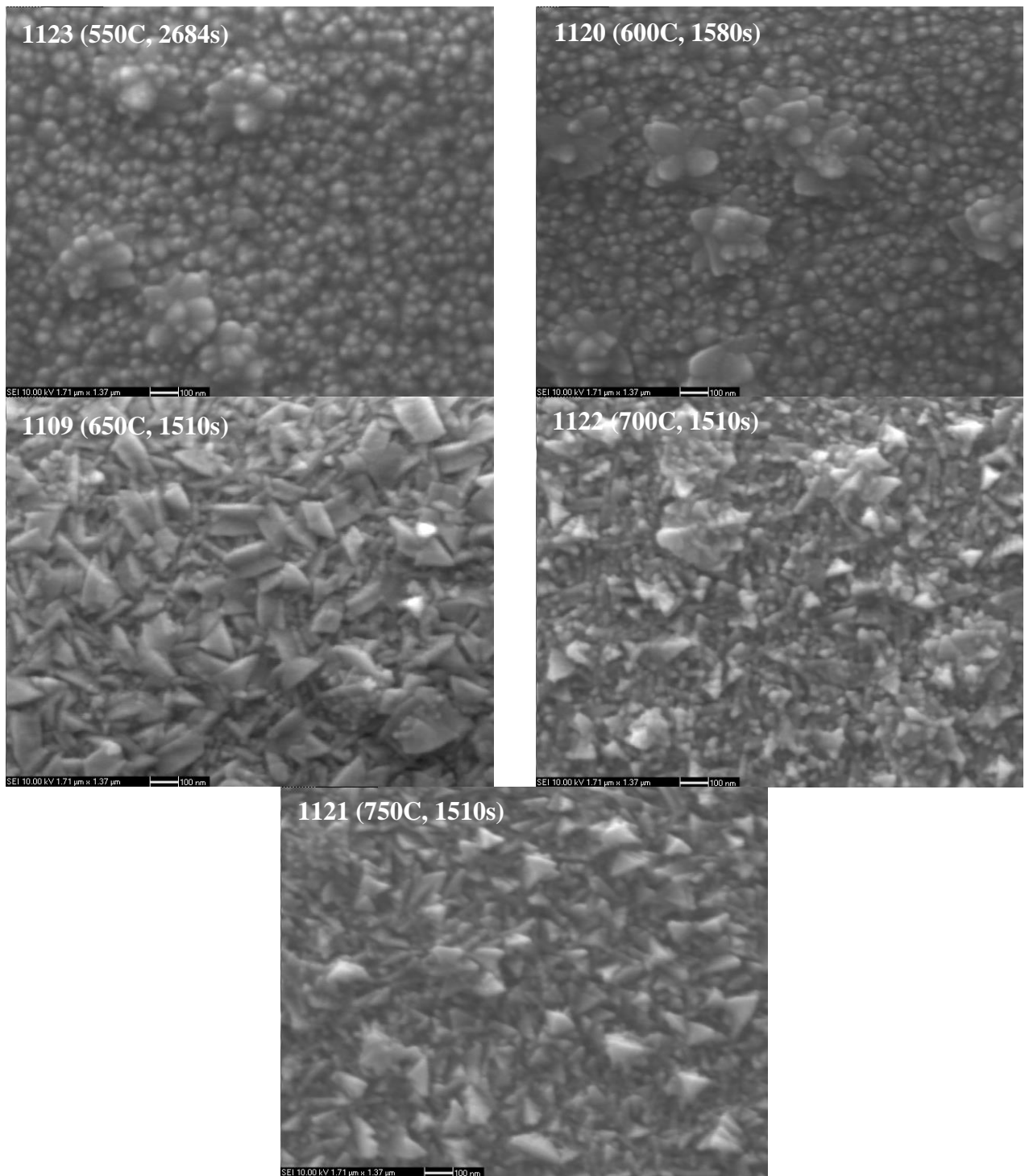
Atlikti iškaitintų bandinių PL spektrų matavimai kambario temperatūroje (35 pav.), iš kurių matyti, jog neatkaitinto bandinio spektrui būdingas nedidelis petys ties 385 nm. Iškaitinant bandinius vis aukštesnėse temperatūrose šis petys po truputį išnyksta, o galiausiai iškaitinus 1160°C temperatūroje smailė petys dingsta. Šios smailės peties prigimtis – dangos struktūrinių defektų PL signalas. Iškaitinant dangą aukštesnėse temperatūrose dėl garavimo, šios sritys yra pašalinamos, sumažėja tūrinių defektų, dėl ko dingsta ir smailės petys.



35 pav. Skirtingose temperatūrose iškaitintų nepolinio GaN sluoksnių PL spektrai.

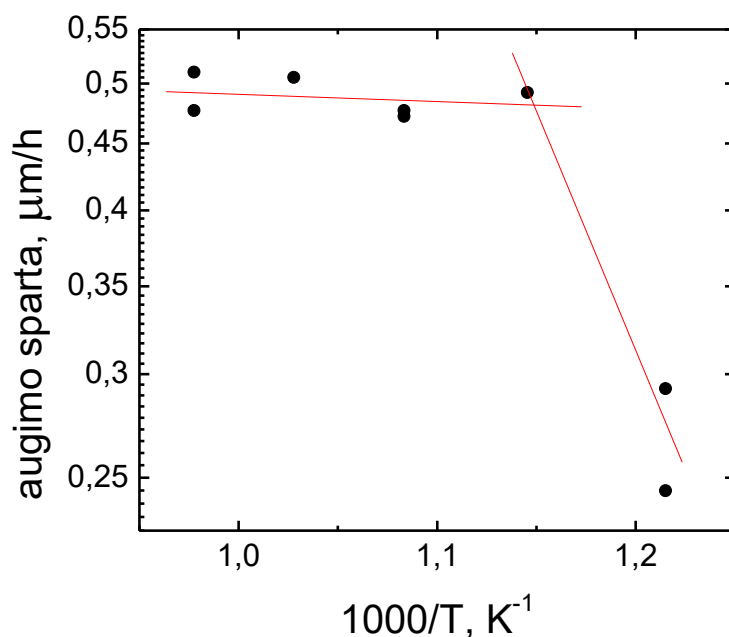
Atlikta serija nepolinio GaN auginimų, keičiant auginimo temperatūrą bei auginimo trukmę. Bandinių SEM matavimų rezultatai pavaizduoti 36 pav. Didinant auginimo temperatūrą, paviršiuje formuojasi stambesni GaN dariniai sudarydami ištisinę dangą.

Išmatavus bandinių atspindžių spektrus atlikti spektrų modeliavimai, nustatytas padengtos dangos storis bei sluoksnio augimo sparta (37 pav.). Esant žemoms auginimo temperatūroms (500-600°C), sluoksnio augimo sparta yra maža, vyksta amorfinis augimas, formuojasi apvalesnių formų struktūros. Didinant temperatūrą didėja pirmtakų skilimo sparta, sluoksnio augimo sparta tai pat didėja. Pasiėkus 650°C augimo spartą pradeda riboti medžiagų pernašos greitis reaktoriuje sąlygotas pačio reaktoriaus konfigūracijos bei parametrų, tokių kaip reaktoriaus slėgis tiekiamų dujų srautas ir t.t. [67]. Šioje temperatūros srityje augimo sparta beveik nepriklauso nuo temperatūros. Tiesės polinkis gali būti susijęs su kristalizacijos procesais kuriems yra reikalinga papildoma išorinė energija.



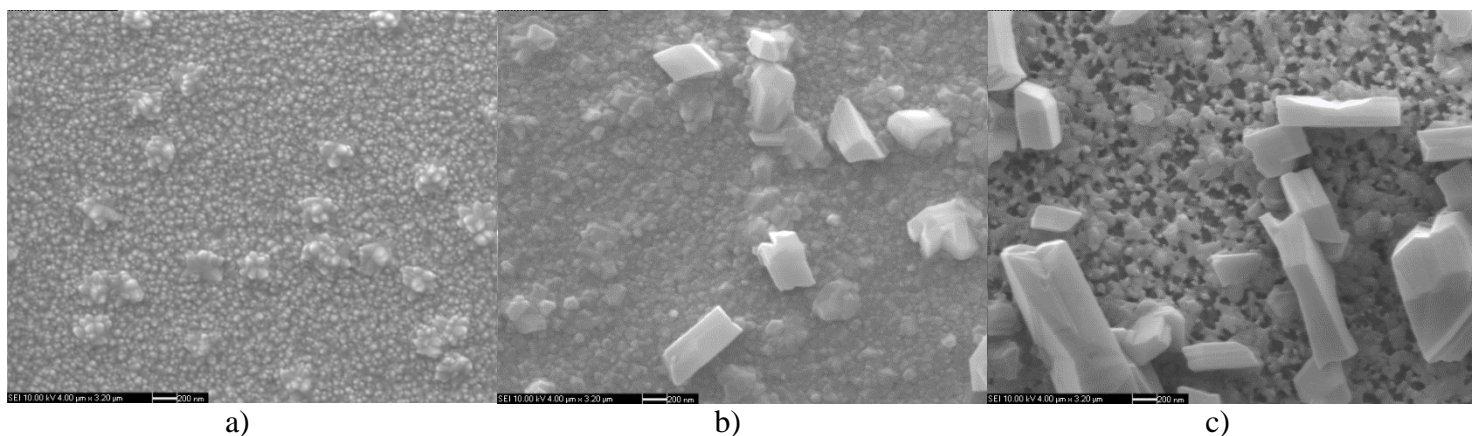
36 pav. Skirtingose temperatūrose užaugintų nepolinio GaN bandinių SEM vaizdai.

Abi temperatūrų sritis aproksimavus tiesėmis, pagal Arrenijaus lygtį $v=A_1e^{-E_a/RT}$, (čia v -augimo sparta, A_1 - augimo konstanta, E_a -aktyvacijos energija, R -dujų konstanta) galime rasti aktyvacijos energijas abiem augimo procesams – lėtam ir sparčiam: $E_a=-R \cdot \text{tg}\theta$ (θ – aproksimuotos tiesės polinkio kampas). Žemų temperatūrų srityje gaunama 0,13 kcal/mol, aukštų – 7,57 kcal/mol vertės.



37 pav. Nepolinio GaN sluoksnio augimo spartos esant skirtingoms auginimų temperatūroms.

Atlikti užaugintų dangų kaitinimai reaktoriuje, papildomai leidžiant amoniaką. Kaitinimo eksperimento SEM rezultatai pateikti 38 paveikslėlyje, kuriame pavaizduota 600°C temperatūroje užaugintos dangos paviršiaus morfologijos pokyčiai po 10 minučių trukmės iškaitinimų skirtingose temperatūrose. Pastebėta, kad iškaitinant dangas bandinio paviršiuje atsiveria Er_2O_3 sluoksnis, GaN danga dalinai išgaruoja, atkaitinus aukštesnėje temperatūroje GaN reorganizuojasi, sudarydamas stambesnius kristalitus, kurių matmenys didesni nei pirminės užaugintos dangos storis (38 pav.).



38 pav. 600°C temperatūroje užauginto GaN dangos pokyčiai po iškaitinimų skirtingose temperatūrose: a) neiškaitinta danga, b) iškaitinta 1100°C, c) iškaitinta 1160°C.

6. Pagrindiniai rezultatai ir išvados

- Er_2O_3 pasluoksnio terminis stabilumas priklauso nuo erbio oksido kristalitų išsidėstymo krypties nevienalytiškumo, kuris lemia šiurkštesnį paviršių. Šiurkštesnio paviršiaus bandinį iškaitinant aukštesnėse nei 1000°C temperatūrose pakinta erbio oksido sluoksnio lūžio rodiklis, o kartu ir padėklo atspindžio spektras. Dėl azoto reakcijos su erbio oksidu GaN auginimo metu susidaro ErN fazė.
- Tirtos nepolinio GaN salos susiformavusios chaotiškai, jų matmenys siekia kelis šimtus nanometrų. Pusiau polinio GaN salos susiformavusios mikrometrinių matmenų, piramidinės formos su aiškiai išreikštomis kristalografinėmis plokštumomis piramidžių paviršiuje. Identifikuotos (0001) , $(10\bar{1}2)$, $(10\bar{1}1)$, $(10\bar{1}0)$ ir $(10\bar{1}\bar{1})$ pusiau polinio GaN plokštumos. Taip pat ištirtos ir polinio GaN salos užaugintos ant safyro padėklų, bei identifikuotos (0001) ir $(10\bar{1}3)$ GaN plokštumos.
- Esamoms pusiau polinio GaN auginimo sąlygoms (1030°C , V/III santykis lygus 1423) sparčiausias kristalo augimas vyksta pusiaupoline $[10\bar{1}2]$ bei poline $[0002]$, kryptimi. Nepoline kryptimi $[10\bar{1}0]$ augimas yra energetiškai nepalankus.
- Atsispindėjusi nuo pusiau polinio GaN bandinio paviršiaus tiesiškai poliarizuota šviesa tampa dalinai elipsiškai poliarizuota dėl optinės anizotropijos bei dichrozmo pusiau polinio GaN kristale.
- Pusiau polinio GaN salų fotoluminescencija yra stipresnė nei tolygaus polinio GaN sluoksnio, galimai dėl mažesnio defektų tankio kristalituose bei geresnės šviesos ištrūkos, o nepolinio GaN salų PL spektro smailė yra mažesnio intensyvumo bei pasislinkusi į ilgesnių bangų sritį dėl didesnio defektų kiekio bei įtempimų dangoje.
- Atliekant auginimus azoto atmosferoje, formuojasi polikristalinės dangos su keliomis išreikštomis kristalinėmis orientacijomis. Šių dangų kaitinimo eksperimentas parodė, kad dangą sudarantys kristalitai yra aukštos kristalinės kokybės, kadangi kaitinimo metu stebimas silpnas dangos garavimas.
- Kaitinant bandinius 1160°C temperatūroje kokybiškai keičiasi fotoluminescencijos spektras artimoje tarpjuostiniams šuoliams srityje. Mažėja liuminescencijos intensyvumas ilgesnių bangos ilgių intervale, kuriame stebimas liuminescencijos signalas priklausantis dangos kristaliniams defektams.

7. Summary

Growth Kinetics and Structural Properties of Non-polar GaN Grown on Si Substrates

In the past two decades, the heteroepitaxy of GaN on foreign substrates has been extensively investigated, motivated by the prospects of high-brightness displays and, more recently, energy-efficient illumination using InGaN-based light-emitting diodes (LEDs). The two major challenges in the field of InGaN-based LEDs are the “efficiency droop” under a high injection current density and the “green gap” in the plot of efficiency versus emission wavelength [1].

So far most of InGaN-based LEDs are built along polar GaN (0001) orientation, which is susceptible to the strong internal electric field induced by the spontaneous and the piezoelectric polarization in Wurtzite III-nitrides. A strong internal electric field in a polar GaN leads to band bending. The consequences of this effect include decreased efficiency and spectral instability of InGaN LEDs [2-3].

Lately, there has been found an increasing interest in non-polar and semi-polar GaN in order to resolve these fundamental problems and improve the performance of the devices [4-9]. Due to the limited choice of substrates for growth of nonpolar and semipolar GaN, foreign substrates, for instance Si, remains the best option for cost-effective large scale epitaxy. Several problems such as a large difference in thermal expansion, a mismatch in lattice and chemical reactivity between Si and GaN must be solved in order to obtain high quality non-polar and semi-polar GaN films suitable for applications in optoelectronics

In this work, thermal stability of Si substrates with pre-deposited Er_2O_3 layer for GaN growth by metalorganic chemical vapour deposition (MOCVD) method is investigated. The rare-earth oxide layer improves thermal stability of Si substrate and have a lattice constant similar to both Si and GaN. The X-ray diffraction studies showed that semi-polar GaN ($10\bar{1}3$) tends to grow on Si (100) with Er_2O_3 interlayer by introducing an additional AlN buffer layer. Self-organized semi-polar GaN islands grown on such substrates are analysed for obtaining information of growth rates of GaN in different crystal planes directions. For given MOCVD growth parameters ($T=1030^\circ\text{C}$, $V/\text{III}=1423$) growth rate is greater in semipolar $[10\bar{1}2]$ direction due to lowest required activation energy. Such semi-polar GaN samples exhibit an optical rotation effect due to birefringence and optical dichroism of the crystal. Investigated semi-polar structures showed a strong photoluminescence (PL). The near band edge PL peak position of semi-polar GaN shows a good agreement with a polar GaN, whereas the non-polar maximum is shifted to a longer wavelength.

During MOCVD growth process in nitrogen atmosphere, multicrystalline semi-polar GaN layers were grown. XRD measurements showed that these layers consist of several distinct crystal orientations, some of which is semi/non-polar. Annealing at high temperatures does not have any strong impact on these layers and evaporation of material is weak as crystal quality of layer is high.

The presented findings are important for the further regrowth process to obtain high quality non-polar and semi-polar GaN layers by MOCVD.

8. Literatūra

- [1] M. R. Krames, O. B. Shchekin, R. Mueller-Mach, Status and Future of High-Power Light-Emitting diodes for Solid-State Lighting, *Journal of Display Technology* **3** (2) (2007);
- [2] Y.C. Shen, G. O. Mueller, S. Watanabe, Auger recombination in InGaN measured by photoluminescence, *Applied Physics Letters* **91**, 141101 (2007);
- [3] M.H. Kim, M.F. Schubert, Q. Dai, Origin of efficiency droop in GaN-based light-emitting diodes, *Applied Physics Letters* **91**, 183507 (2007);
- [4] P. Waltereit, O. Brandt, A. Trumppert, Nitride semiconductors free of electrostatic fields for light-emitting diodes, *Nature* **406**, 865-868 (2000);
- [5] T. Takeuchi, H. Amano, I. Akasaki, Theoretical Study of Orientation Dependence of Piezoelectric Effects in Wurtzite Strained GaInN/GaN Heterostructures and Quantum Wells, *Japanese Journal of Applied Physics* **39**, 413–416 (2000);
- [6] S. Park, Crystal orientation effects on electronic properties of wurtzite InGaN/GaN quantum wells, *Journal of Applied Physics* **91**, 9904 (2002);
- [7] A. E. Romanov, T. J. Baker, S. Nakamura, Strain-induced polarization in wurtzite III-nitride semipolar layers, *Journal of Applied Physics* **100**, 023522 (2006);
- [8] S. Park, D. Ahn, Depolarization effects in (112⁻2)-oriented InGaN/GaN quantum well structures, *Applied Physics Letters* **90**, 013505 (2007);
- [9] H. Shen, M. Wraback, H. Zhong, Unambiguous evidence of the existence of polarization field crossover in a semipolar InGaN/GaN single quantum well, *Applied Physics Letters* **95**, 033503 (2009);
- [10] M.C. Schmidt, K.C. Kim, H. Sato, High Power and High External Efficiency m-Plane InGaN Light Emitting Diodes, *Japanese Journal of Applied Physics* **46** (7), L126–L128 (2007);
- [11] H. Sato, R.B. Chung, H. Hirasawa, Optical properties of yellow light-emitting diodes grown on semipolar (112⁻2) bulk GaN substrates, *Applied Physics Letters* **92**, 221110 (2008);
- [12] N. Fellows, H. Sato, H. Masui, Increased Polarization Ratio on Semipolar (1122) InGaN/GaN Light-Emitting Diodes with Increasing Indium Composition, *Japanese Journal of Applied Physics* **47** (10), 7854–7856 (2008);
- [13] K. Okamoto, J. Kashiwagi, T. Tanaka, Nonpolar m-plane InGaN multiple quantum well laser diodes with a lasing wavelength of 499.8 nm, *Applied Physics Letters* **94**, 071105 (2009);
- [14] Y. Enya, Y. Yoshizumi, T. Kyono, 531 nm Green Lasing of InGaN Based Laser Diodes on Semi-Polar {20-21} Free-Standing GaN Substrates, *Applied Physics Express* **2**, 082101 (2009);

- [15] Y. Yoshizumi, M. Adachi, Y. Enya, Continuous-Wave Operation of 520 nm Green InGaN-Based Laser Diodes on Semi-Polar {2021} GaN Substrates, *Applied Physics Express* **2**, 092101 (2009);
- [16] J. S. Speck and S. F. Chichibu, Nonpolar and semipolar group III nitride-based materials, *MRS Bulletin* **34**(05), 304–312 (2009);
- [17] X. Li, X. Ni, J. Lee, Efficiency retention at high current injection levels in m-plane InGaN light emitting diodes, *Applied Physics Letters* **95**, 121107 (2009);
- [18] J. Lee, X. Li, X. Ni, On carrier spillover in c- and m-plane InGaN light emitting diodes, *Applied Physics Letters* **95**, 201113 (2009);
- [19] S.-P. Chang, T.-C. Lu, L. Zhuo, Low Droop Nonpolar GaN/InGaN Light Emitting Diode Grown on m-Plane GaN Substrate, *Journal of The Electrochemical Society* **157**, H501–H503 (2010);
- [20] S. Ling, T. Lu, S. Chang, Low efficiency droop in blue-green m-plane InGaN/GaN light emitting diodes, *Applied Physics Letters* **96**, 231101 (2010);
- [21] K. Fujito, S. Kubo, I. Fujimura, Development of Bulk GaN Crystals and Nonpolar/Semipolar Substrates by HVPE, *MRS Bulletin* **34**, 313 (2009);
- [22] Q. Sun, J. Han, Nonpolar and semipolar GaN heteroepitaxy on sapphire for LED application, *SPIE* **7617**, 761717 (2010);
- [23] F. Rinaldi, Basics of Molecular Beam Epitaxy (MBE), Annual Report 2002, Optoelectronics Department, University of Ulm (2002);
- [24] Metalorganic vapour phase epitaxy, ilustracija iš Wikipedia, The Free Encyclopedia, atkurta 09:45, 2015 12 21, iš http://en.wikipedia.org/wiki/Metalorganic_vapour_phase_epitaxy;
- [25] E. T. Yu, X. Z. Dang, P. M. Asbeck, Spontaneous and piezoelectric polarization effects in III–V nitride heterostructures, *Journal of Vacuum Science & Technology B* **17** (4), (1999);
- [26] E. S. Hellman, The polarity of GaN: a critical review, *MRS Internet Journal of Nitride Semiconductor Research* **3**, 11 (1998);
- [27] F. Bernardini, V. Fiorentini, D. Vanderbilt, Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides, *Physical Review B* **56**, R10024 (1997);
- [28] P. M. Asbeck, E. T. Yu, S. S. Lau, Piezoelectric charge densities in AlGaIn/GaN HFETs, *Electronics letters* **33**, 1230 (1997);
- [29] E. T. Yu, G. J. Sullivan, P. M. Asbeck, Optical properties of Si-doped GaN, *Applied physics letters* **71**, 2794 (1997);
- [30] R. M. Martin, Piezoelectricity, *Physical Review B* **5**, 1607 (1972);

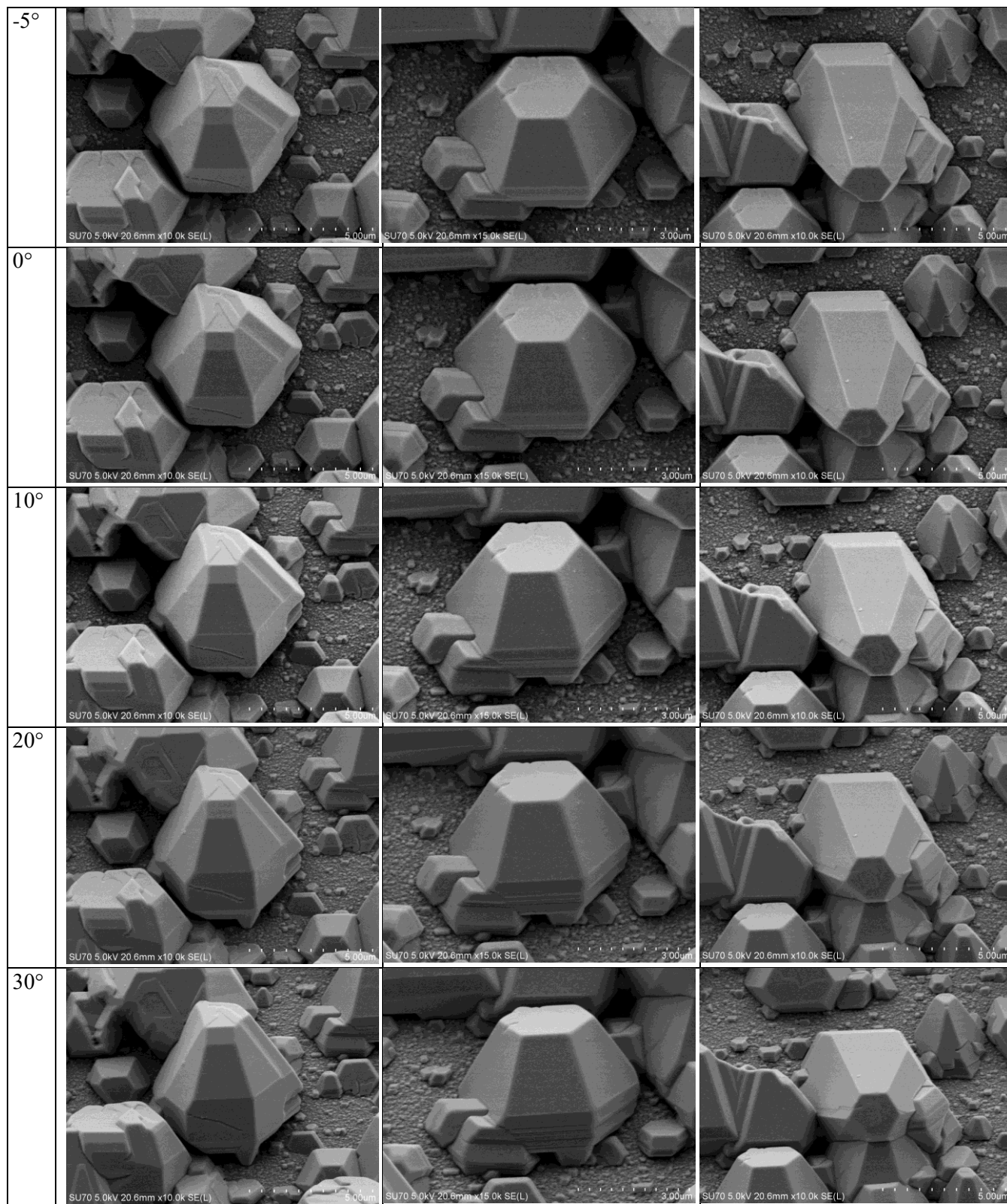
- [31] S. F. Chichibu, A. Uedono, T. Onuma, Origin of defect-insensitive emission probability in In-containing (Al,In,Ga)N alloy semiconductors, *Nature Materials* **5**, 810 - 816 (2006);
- [32] V.N. Bessolov, E.V. Konenka, S.A.Kukushkin, Semipolar Gallium Nitride on silicon:technology and properties, *Reviews on advanced materials science* **38**, 75-93 (2014);
- [33] U. T. Schwarz, M. Kneissl, Nitride emitters go nonpolar, *Physica Status Solidi Rapid Research Letters* **1**, 44-46 (2007);
- [34] H. Ko, K. Takei, R. Kapadia, Ultrathin compound semiconductor on insulator layers for high-performance nanoscale transistors, *Nature* **468**, 286–289 (2010);
- [35] T. Akatsu, C. Deguet, L. Sanchez, Germanium-on-insulator substrates: A novel engineered substrate for future high performance devices, *Materials Science in Semiconductor Processing* **9**, 444 (2006);
- [36] R. W. Fathauer, N. Lewis, E. L. Hall, Heteroepitaxy of semiconductor-on-insulator structures: Si and Ge on CaF₂/Si(111), *Journal of Applied Physics* **60**, 3886 (1986);
- [37] J. W. Seo, Ch. Dieker, A. Tapponnier, Epitaxial germanium-on-insulator grown on (001) Si, *Microelectronic Engineering* **84**, 2328 (2007);
- [38] K. Eisenbeiser, R. Emrick, R. Droopad, GaAs MESFETs Fabricated on Si Substrates Using a SrTiO₃ Buffer Layer, *IEEE Electron Device Letters* **23**, 300 (2002);
- [39] Iš interneto: http://en.wikipedia.org/wiki/Abundance_of_the_chemical_elements;
- [40] L. Tarnawska, P. Zaumseil, M. A. Schubert, Structural and optical quality of GaN grown on Sc₂O₃/Y₂O₃/Si(111), *Journal of Applied Physics* **111**, 073509 (2012);
- [41] T. Watkins, L. Jiang, D. J. Smith, Designer hydride routes to 'Si-Ge'/(Gd,Er)₂O₃/Si(1 1 1) semiconductor-on-insulator heterostructures, *Semiconductor Science and Technology* **26**, 125005 (2011);
- [42] D. Kazazis, A. Zaslavsky, E. Tutuc, Negative differential resistance in ultrathin Ge-on-insulator FETs, *Semiconductor Science and Technology* **22** (1), S1 (2007);
- [43] P. Zaumseil, X-ray measurement of the tetragonal distortion of the oxide buffer layer in Ge/Pr₂O₃/Si(111) heteroepitaxial structures, *Journal of Physics D: Applied Physics* **41**, 135308 (2008);
- [44] G. Saint-Girons, P. Regreny, L. Largeau, Monolithic integration of InP based heterostructures on silicon using crystalline Gd₂O₃ buffers, *Applied Physics Letters* **91**, 241912 (2007);
- [45] V. V. Afanas'ev, M. Badylevich, A. Stesmans, Band offsets between Si and epitaxial rare earth sesquioxides (RE₂O₃, RE=La, Nd, Gd, Lu): Effect of 4f-shell occupancy , *Applied Physics Letters* **93**,192105 (2008);

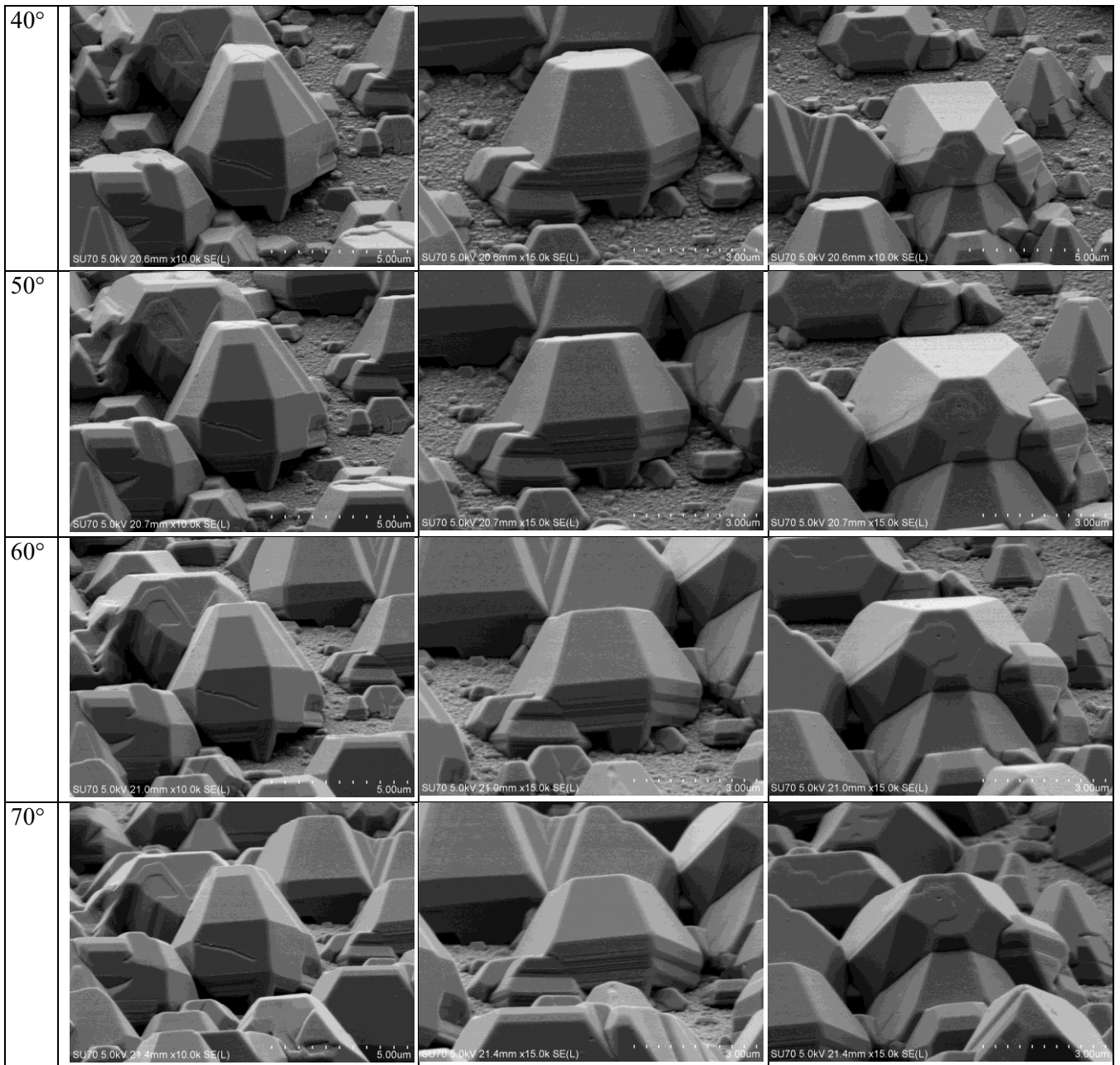
- [46] M. Badylevich, S. Shamuilia, V. V. Afanas'ev, Investigation of the electronic structure at interfaces of crystalline and amorphous Gd_2O_3 thin layers with silicon substrates of different orientations, *Applied Physics Letters* **90**, 252101 (2007);
- [47] J. Kwo, M. Hong, A. R. Kortan, High ϵ gate dielectrics Gd_2O_3 and Y_2O_3 for silicon, *Applied Physics Letters* **77**, 130 (2000);
- [48] H. J. Osten, A. Laha, M. Czernohorsky, Introducing crystalline rare-earth oxides into Si technologies, *Physica Status Solidi A* **205**, 695 (2008);
- [49] W. C. Lee, Y. J. Lee, J. Kwo, GaN on Si with nm-thick single-crystal Sc_2O_3 as a template using molecular beam epitaxy, *Journal of Crystal Growth* **311**, 2006 (2009);
- [50] N. Hirosaki, S. Ogata, C. Kocer, Ab initio calculation of the crystal structure of the lanthanide Ln_2O_3 sesquioxides, *Journal of alloys and compounds* **351** (1), 31 (2003);
- [51] M. Zinkevich, Thermodynamics of rare earth sesquioxides, *Progress in Materials Science* **52**, 597 (2007);
- [52] R. Dargis, D. Williams, R. Smith, Structural and Thermal Properties of Single Crystalline Epitaxial Gd_2O_3 and Er_2O_3 Grown on Si (111), *ECS Journal of Solid State Science and Technology* **1**, N24-28 (2012).
- [53] R. Dargis, A. Clark, F. E. Arkun, T. Grinys, R. Tomašiusas, Monolithic integration of rare-earth oxides and semiconductors for on-silicon technology, *Journal of Vacuum Science & Technology A* **32**, 041506 (2014);
- [54] Scanning electron microscope, iliustracija iš Wikipedia, The Free Encyclopedia, atkurta 09:55, 12 21, 2015, iš https://en.wikipedia.org/wiki/Scanning_electron_microscope
- [55] A. L. Louran, S. Vezian, F. Semond, AlN buffer layer growth for GaN epitaxy on (111) Si: Al or N first?, *Journal of Crystal Growth* **311** (12), 3278-3284 (2009);
- [56] Internete: Oblique Incidence Multilayers: s and p polarizations, Dr Francis Placido, Physics Department, University of Paisley, Scotland;
- [57] G.C. Wang, T.M. Lu, Rheed Transmission Mode and Pole Figures – Thin Film and Nanostructure Texture analysis, p.p.14-20 p., Springer (2014);
- [58] K. Momma, F. Izumi, VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data, *Journal of Applied Crystallography* **44**, 1272-1276 (2011);
- [59] N. Klauza, R. Steins, MOVPE GaN growth: determination of activation energy using in-situ reflectometry, *Journal of Crystal Growth* **272**, 100-105 (2004);
- [60] J. B. Hudson, *Surface Science: An Introduction*, (John Wiley & Sons, 1998) pp. 175-186.
- [61] H. Li, L. Geelhaar, Computing Equilibrium Shapes of Wurtzite Crystals: The Example of GaN, *Physical Review Letters* **115**, 085503 (2015);

- [62] E. Matioli, S. Brinkley, High-brightness polarized light-emitting diodes, *Light: Science & Applications* **1** (2012);
- [63] M. C. Schmidt, K.C. Kim, Demonstration of Nonpolar-Plane InGaN/GaN Laser Diodes, *Japanese Journal of Applied Physics* **46** (9), 190-191 (2007);
- [64] P. Misra, Optical polarization anisotropy in nonpolar GaN thin films due to crystal symmetry and anisotropic strain, *doktoro disertacija, Humboldt-Universität*, 62-90 (2005).
- [65] S. Nakamura, *Japanese Journal of Applied Physics* 30, L1750 (1991);
- [66] T. Hashimoto, M. Yuri, M. Ishida, *Japanese Journal of Applied Physics* 38, p.6605 (1999);
- [67] N. Kaluza, R. Steins, H. Hardtdegen, MOVPE GaN growth:determination of activation energy using in-situ reflectometry, *Journal of Crystal Growth* 272, 100-105 (2004);

9. Priedai

Lentelė 3. Pusiaus polinio GaN salų SEM vaizdai esant skirtingiems bandinio pavertimo kampams.





Lentelė 4. Polinio GaN salų SEM vaizdai esant skirtingiems bandinio pavertimo kampams.

