

Półprzewodniki azotkowe (GaN, AlN, InN) oraz ich stopy AlInGaN znane są z zastosowań w elektronice mocy i wysokiej częstotliwości oraz optoelektronice (białe źródła światła LED, niebieskie i zielone lasery półprzewodnikowe). Większość urządzeń budowana jest obecnie w procesie epitaksji cienkich azotkowych struktur kwantowych na podłożach obcych, takich jak szafir, węgiel krzemu (SiC) lub krzem (Si). Znacząco obniża to jakość działania takich urządzeń przez niedopasowanie stałych sieci i współczynników rozszerzalności termicznej. Rosną jednak oczekiwania, by zastępować obce podłoża podłożami objętościowymi GaN, zwłaszcza w elementach elektronicznych wysokiej mocy, wymagających dużych napięć pracy, wysokiej niezawodności oraz laserach o dużej mocy optycznej. Podłoża takie są trudne do uzyskania technologicznie, a ich dostępność na rynku jest ograniczona.

Polska jest jednym z liderów wytwarzania wysokiej jakości kryształów i podłoży GaN. Metoda amonothermalna (AT) i wodorkowa z fazy gazowej (HVPE – ang. *Halide Vapor Phase Epitaxy*) są technologiami rozwijanymi w Instytucie Wysokich Ciśnień PAN. Projekt ukierunkowany będzie na badania kryształów GaN otrzymanych metodą amonothermalną (AT-GaN). Krystalizacja AT odbywa się w roztworze nadkrytycznego amoniaku w temperaturze 450-550°C i ciśnieniu rzędu kilku tysięcy atmosfer w autoklawie wysokociśnieniowym, podzielonym na strefę rozpuszczania i krystalizacji. W tej pierwszej rozpuszczany jest materiał źródłowy GaN, który transportowany jest do drugiej strefy, gdzie następuje przesylenie roztworu i krystalizacja GaN na natywnych zarodkach. Transport odbywa się dzięki procesowi konwekcji w odpowiednio dobranym gradiencie temperatury. Metoda AT pozwala na uzyskanie kryształów o wyjątkowo niskiej gęstości dyslokacji oraz bardzo małym wygięciu płaszczyzn krystalograficznych. Wadami metody AT jest natomiast niska czystość otrzymanych kryształów, czyli stosunkowo wysoka koncentracja defektów punktowych (obce atomy, czyli domieszki i defekty strukturalne). Z drugiej strony, metoda HVPE polega na szybkiej epitaksji grubych kryształów w temperaturach wyższych niż 1000°C. HVPE-GaN charakteryzuje się wysoką czystością, dzięki dużo niższej zawartości donorów i kompensujących defektów. W projekcie kryształy HVPE-GaN będą użyte jako referencyjne w stosunku do AT-GaN w celu stworzenia ogólnego obrazu defektów punktowych w objętościowym GaN.

Główną nieintencjonalną domieszką w rozważanych kryształach AT-GaN jest tlen, który jako donor decyduje o wysokim przewodnictwie typu n (elektronowym). Aby uzyskać przewodnictwo dziurowe (typ p) stosuje się intencjonalne domieszkowanie akceptorami, takimi jak Mg lub Zn, o odpowiednio dużej koncentracji. Można również uzyskać kryształy nieprzewodzące (tzw. półizolujące) w temperaturze pokojowej (oporność wyższa niż $10^6 \Omega\text{cm}$), jeśli donory tlenowe będą idealnie skompensowane akceptorami płytkimi (Mg, Zn) lub głębokimi (Mn). Z kolei kryształy HVPE charakteryzują się bardzo niską (rzędu 10^{16}cm^{-3}) koncentracją tlenu. Wstępne badania wskazują, że głównym defektem punktowym występującym w nieintencjonalnie domieszkowanym materiale AT-GaN są luki galowe, które dodatkowo mogą wiązać maksymalnie cztery atomy wodoru. Wymienione defekty mogą ograniczać otrzymywanie kryształów o pożądanym własnościach elektrycznych, tworzyć pasma absorpcyjne w zakresie widzialnym lub aktywnie uczestniczyć w przejściach optycznych, np. stanowiąc centra rekombinacji niepromienistej.

Główne cele projektu to: 1) identyfikacja defektów punktowych w kryształach objętościowych AT-GaN o różnym typie przewodnictwa, 2) określenie wpływu ich koncentracji na własności elektryczne i optyczne materiału oraz 3) określenie mikroskopowego mechanizmu zmian własności elektrycznych pod wpływem wygrzewania i zmiany dystrybucji defektów w kryształach AT-GaN. Przeprowadzone zostaną kompleksowe badania defektów punktowych (wraz z ich koncentracją) w rozważanych kryształach za pomocą różnych metod eksperymentalnych. Wyniki eksperymentalne zostaną opisane za pomocą obliczeń opartych na rozwiązaniu tzw. równania neutralności w celu uzyskania kompleksowego obrazu defektów punktowych w AT-GaN.

Projekt otwiera możliwość badania fizyki defektów w objętościowym GaN o szerokim spektrum własności elektrycznych (typ n, typ p, kryształy półizolujące i poziomu domieszkowania). Przeprowadzone prace dostarczą cennych informacji na temat sprzyjających warunków formowania się konkretnych defektów, weryfikacji położenia ich poziomów energetycznych (znanych z obliczeń teoretycznych), ich oddziaływania z domieszkami. Wyniki pozwolą również wzbogacić wiedzę o zachowaniu defektów podczas wygrzewania po-procesowego w kryształach GaN o wysokiej koncentracji tlenu i luk galowych (w kompleksach z tlenem i wodorem), tj. roli jaką pełni wodór, tlen i luki galowe (w kompleksach z wodorem), w szczególności w kryształach AT-GaN domieszkowanych akceptorami (Mg, Zn, Mn). Wyjaśnienie mikroskopowego mechanizmu zmian wzajemnych koncentracji defektów pod wpływem wygrzewania będzie wymiernym sukcesem projektu. Wiedza o rodzaju i koncentracji defektów w objętościowych kryształach GaN jest konieczna dla kontroli procesu wzrostu i otrzymania podłoży GaN o pożądanym własnościach.