

ZÁRÓJELENTÉS

Témavezető neve: Gali Ádám

A téma címe: **Besugárzással létrehozott ponthiba és ponthiba-agglomerátumok, valamint ezek optikai tulajdonságokra gyakorolt hatásának elméleti vizsgálata szilíciumkarbidban**

A kutatás időtartama: **4 év (2002 március 1 – 2005 december 31)**

A szilíciumkarbid (SiC) az egyik legígéretesebb alapanyag nagyteljesítményű elektronikai alkalmazásokhoz. Egyelőre a SiC-ban a ponthibák szerepének tisztázása nélkülözhetetlen a technológia optimalásához. Ez különösen igaz a besugárzással létrehozott ponthibákra. Az elmúlt években főleg az ilyen típusú hibák tulajdonságait határoztam meg kvantummechanikai számításokkal. Emellett mint látni fogjuk, számításaink eredményei szerint remény van arra, hogy ez az anyag az opto-elektronikában is alkalmazható legyen egy különleges szuperrács létrehozásával.

A kutatási tervben eredetileg az alábbiakra vállalkoztam:

első év:

„D_{II} centrum”-nak nevezik azt a hibát, amelyet elsősorban szénnel implantált mintákban figyeltek meg a SiC-ban. Ezen szerkezeti hibáról a lokális rezgési módusain kívül szinte semmit sem ismerünk. A centrum azonosításában számításaink jelentős segítséget nyújthatnak, hiszen az általunk javasolt modell lokális rezgési módusai közvetlenül összehasonlíthatóak a kísérleti eredményekkel. Bizonyos kísérletek arra utalnak, hogy „anti-site” párok, annak aggregátumai alakulhatnak ki a SiC-ban. Az „anti-site” párok stabilitását valamint az elektromos tulajdonságait ezért fontos megvizsgálni a számításokkal. Különösen fontos kérdés, hogy az aggregátumok mennyire lehetnek kiterjedtek a rácsban.

második év:

Van egy misztikus, 1700 °C hőkezelés után is stabil (szerkezeti) hiba, amelyet „D_I centrum”-nak hívnak. Csak kevés kísérleti adat áll róla rendelkezésre. Ezen centrum természete és azonosítása nagyon fontos a SiC kutató közösség számára. Ez nagy feladat, mert a szerkezeti hibák nagyszámú kombinációját kell figyelembe venni a modell felállításához. A modell felállítását megkönnyíti az a svéd partnerunktől kapott, eddig le nem közölt információ, hogy a hexagonális SiC-ban a D_I centrum szimmetriája C_{3v}. Ennek alapján az eddig harminc éve (!) ismeretlen eredetű hibára megtalálható a megfelelő mikroszkopikus modell.

harmadik év:

A SiC sugárkárosodása során bizonyosan keletkeznek intersticiális hibák is. Ezeknek tulajdonságairól szinte semmit sem tudunk még. Ennek vizsgálata szintén alapvető fontosságú a félvezetők körében, amelyet el szeretnék végezni.

negyedik év:

A Tanszék felfedezett egy olyan technológiát, amelynek segítségével jól texturált Si-SiC rétegeket lehet egymásra növeszteni. Ez alapja lehet a SiC optikai alkalmazásának, ha Si-mal és más anyagokkal létre lehet hozni szuperrácsokat. Ezen szuperrácsok rács ill. elektronikus szerkezetének karakterisztikáját számításainkkal meghatározhatjuk különös tekintettel a lehetséges optikai alkalmazásokat nézve. Ezen alap kutatási téma nagy lélegzetű, és egy egész év munkáját igényli.

Az elmúlt négy évben ezen témák mindegyikében fontos eredményeket sikerült elérni. A kutatások során kiderült, hogy nemcsak az antisite-aggregátumok, hanem a vakanciaaggregátumok is fontosak lehetnek. A vizsgálatainkat erre is kiterjesztettük. A külföldi partnerekkel való együttműködése során fontossá vált a hidrogén szerepének tisztázása az adalékolás szempontjából, valamint az adalékatomokhoz kapcsolódó kísérleti eredmények értékelése. Ezenkívül a Paderborni Egyetem

(Németország) Elméleti Fizika Tanszék kutatócsoportjával való együttműködés során megvizsgáltuk a SiC/SiO₂ határfelületen kialakuló hibák eredetét, amely lényeges az SiC-MOS technológia optimalása szempontjából. Az alábbiakban szeretném összefoglalni röviden eredményeinket. Azokról az eredményekről szólok részletesebben, amelyek még nem jelentek meg nyomtatásban, a többiben pedig utalok a megjelent cikkekre a jelentés végén található sorszám szerint, ahol a részleteket el lehet olvasni a benne található megfelelő hivatkozásokkal együtt. Számításaimban szupercella-modellt használtam. Tipikusan a sűrűségfüggvény-elméleten belül a lokálissűrűség-közelítést alkalmaztam, de a tiltottsáv-hiba kikerülése miatt BLYP hibridfüggvényűt, valamint egyszerűsített GW módszert is alkalmaztam [11]. Az utóbbi úttörő módszernek számít a hibafizika területén. A számításokat többnyire (nem kizárólagosan) szuperszámítógépeken hajtottam végre. A szuperszámítógépek témaszámaihoz a külföldi kísérleti csoportokkal való együttműködés során sikerült hozzájutni (Pittsburghi Egyetem, Prof. W.J. Choyke; Linköpingi Egyetem, Prof. Erik Janzén). Ezek a Pittsburghi Szuperszámítógépközpontban (PSC) és a Linköpingi (svéd) Nemzeti Szuperszámítógépközpont (NSC) központjait jelentik. A gépidőt évente kellett újrapályázni, amelyet rendszeresen meg is kaptunk eredményeinkre való tekintettel. A Paderborni Egyetemen Prof. Thomas Frauenheim elméleti csoportjával szintén együttműködtem (Eva Rauls és Jan Knaup diplomamunkáját részben felügyelve). Ennek köszönhetően az ottani PC-klasztert is használhattam a számítások végrehajtásához. A kutatómunkát segítette három csereprogram (az utolsó csereprogramban ezen OTKA témavezetője magyar részről a témavezető):

Magyar-Svéd (MTA-IVA) együttműködés (Nr.36): Theoretical and experimental investigations of defects in silicon carbide (partners: MTA-MFA, IMC Stockholm, U. Linköping)
1999-2004 2x2 hét/év kutatócsere

Magyar-Német (MTA-DFG) együttműködés (Nr. 112): Theoretical and experimental investigations of defects in silicon carbide (partner: U. Paderborn)
1999-2004 3 hónap/év kutatócsere

Magyar-Német (MTA-DFG) együttműködés (Nr. 113): Formation and passivation mechanism of charge carrier traps during thermal oxidation of 4H-SiC (partner: U. Paderborn)
2005-2007 3 hónap/év kutatócsere

Az OTKA szerződésben megítélt összeg 4 évre bruttó 4.000.000 Ft volt, amelyből 2004-ben 140.000 Ft-ot, míg 2005-ben 100.000 Ft-ot vontak el költségvetési okokból. A fenti összeg túlnyomó része az alapinfrastruktúrát biztosította a kutatásokhoz (számítógépek ill. azok alkatrészei, fogyó irodai eszközök), valamint az eredmények ismertetéséhez járult hozzá nemzetközi konferenciákon.

Az eredményeket nem a kutatások időbeli lezajlása szerint osztályoztam, hiszen azok gyakran egymás mellett párhuzamosan folytak. Ehelyett öt probléma szerint csoportosítom az eredményeket: adalékolás elméleti vizsgálata, antisite-aggregátumok és vakancia-aggregátumok vizsgálata, intersticiális atomok aggregátumainak vizsgálata, a határfelületi állapotok elméleti vizsgálata, valamint egy különleges szuperrács elméleti vizsgálata. Leírom, hogy ezek hogyan kapcsolódtak a munkatervben megfogalmazott célokhoz. Az antisite- és intersticiális-aggregátumokkal kapcsolatos eredményeim **meghívott előadóként** adtam elő a 2003-as Lyon-i International Conference on SiC and Related Materials konferencián „Antisites as possible origin of irradiation induced photoluminescence centers in SiC: A theoretical study on clusters of antisites and carbon interstitials in 4H-SiC” címmel.

•Az adalékolás során felmerülő problémák vizsgálatát három részre osztom: 1) a sekély akceptor szint létrehozásának problematikája, különösen a bór esetén 2) a hidrogén hatása az n-típusú adalékatomokra 3) az n-típusú foszfor adalékatomhoz tartozó kísérleti eredmények értelmezése. Mint látni fogjuk, az 1) pont elsősorban a munkaterv harmadik évéhez kötődik majd.

○ 1) A SiC-ban két tipikus p-típusú adalékatom van: a bór (B) és az alumínium (Al). A B sekély akceptor ionizációs energiája kb 0,3 eV, míg az Al-é kb. 0,2 eV. Bár a SiC-alapú elektronikai eszközöket tipikusan magas hőmérsékleten szeretnék használni, mégis az Al ionizációs energiája viszonylag magas. Felmerül kérdésként, hogy meg lehetne-e valósítani ennél sekélyebb akceptorállapotot is. Számításaink kimutatták [1,3], hogy az Al_{Si}-N_C-Al_{Si} komplexum akceptor

ionizációs energiája kisebb, mint az Al-é. Ugyanakkor kérdéses, hogy ezt a komplexumot szabályozottan elő lehet-e állítani.

- A másik probléma a bór adalékolása. A SiC-ban a bór elvileg mind a Si helyére, mind a C-helyére be tud ülni. (Az Al esetén a C-helyettesítés energetikailag kedvezőtlen.) A számítások szerint a B_{Si} a sekély akceptor, amelyet a kísérletek is alátámasztanak [11]. A B_C pedig egy mélyebb akceptor szintet ad, amely energetikailag még kedvezőbb is lehet a B_{Si} -hez képest a SiC sztöchiometriájától függően [11]. A bór implantálással is szokták adalékolni. A cél az, hogy a sekély bór (B_{Si}) aktiválják, amelyet szén és bór koimplantálásával próbálták elérni. A bór és szén ko-implantációs kísérletek tapasztalatai: kizárólag bórral implantált mintákban a mély bór aktiválódott, 1:1 (B:C) implantáció esetén a sekély akceptor, míg 1:10 implantáció esetén egy új, mély nívójú hiba jön létre; a koimplantált mintákban a bór diffúzió retardálását is megfigyelték. Korábbi számításainkban megmutattuk, hogy a B a szén helyén stabilabb, mint a B a szilícium helyén, ezért látnak mély bór aktivációt tiszta B-implantáció esetén. Az 1:1 koimplantáció esetén a szén-vakanciákkal rekombinál a szén-önintersticiális szilíciumvakanciát hátrahagyva a bórnak, aktiválva a sekély B-akceptort. Az 1:10 koimplantáció során a szénatomok vannak többségben. Számításaink kimutatták, hogy a szén önintersticiálisok termikusan stabil aggregátumokat hoznak létre (lásd lejjebb). Ezért felmerült, hogy a többlet szén atomok a bórral is létre tudnak hozni stabil komplexumokat. Megállapítottam, hogy a sekély bór akceptor és két szén-önintersticiális alkot termikusan stabil komplexumot. A bór intersticiális a szén-önintersticiálissal szintén termikusan stabil komplexumot hoz létre. A számítások megmutatták, hogy a fenti hibák mind ún. bistabil, negatív-U hibák. Ez azt jelenti, hogy ezek a hibák a töltésállapottól függően megváltoztatják a geometriájukat, és bizonyos töltésállapotok nem stabilak a Fermi-szint egyetlen helyzeténél sem. A fenti hibák mind mély nívókat hoznak létre a tiltott sávban, azaz az akceptor adalékok aktivitását erősen lecsökkentik. Az 1:10 koimplantáció esetén már nagy valószínűséggel ezek a B+C komplexumok jönnek létre, amelyeknek mély szintjei vannak a tiltottsávban közel a mért szintekhez lerontva a sekély bór aktiválását. Másrészt a bór diffúziójának retardálását is meg tudjuk így magyarázni, hiszen a bór intersticiálissal befogja a szén-önintersticiális. A fenti eredményeket az *Applied Physics Letters* folyóiratban publikáltuk [11]. Ebbe a kutatásba sikerült egy TDK-ázó hallgatót bevonnom (Hornos Tamás, III. helyezés a BMGE-n), aki azóta ebből diplomázott és doktorandusz hallgató lett nálam.
- Az Al-ot szintén szokták implantálni adalékolás céljából. Itt is célszerűnek tűnt megvizsgálni az Al_{Si} és szén-intersticiális komplexumokat. Hasonlóan a bór esetéhez, itt is találtunk mély nívóval rendelkező hibákat [10]. A cikkünk [10] megjelenése után publikálták, hogy Al-implantált mintákban találtak parazita, valószínűleg Al-hoz köthető új, elektromosan aktív hibákat [12]. A korábban általunk vizsgált komplexumok azonban csak részben tudják magyarázni az újonnan felfedezett hibák stabilitását és ionizációs energiáit. Ezért ezen a témán tovább dolgoztunk 2005-ben. Vizsgálatainkba bevontuk az Al vakanciával alkotott komplexumait, valamint az intersticiális Al és szén-intersticiálisok komplexumait. A számítások eredményei arra utalnak, hogy a fenti észlelt parazita hibák eredete ezen hibakomplexumokhoz köthető. Az eredményeket a *Physical Review B*-be küldtük be, amelyet most bírálják el [12].
- 2) A SiC-beli hidrogénhibák korábbi eredményeit egy könyvfejezetben írtuk le [8], amely részben tartalmazott új eredményeket is (hiperfinom-számítás). Ebben meg tudtuk magyarázni, hogy a p-típusú adalékatomokat hogyan passzíválja a hidrogén (azaz új adalék-hidrogén komplexum létrehozásával elektromosan inaktívvá teszi). Itt azt is meg tudtuk magyarázni, hogy a kémiai gőzleválasztással (CVD) előállított bórral adalékolt SiC-ban a bór a hidrogénnel együtt a Si-helyére ül be, amely a hőkezelés után végül a sekély bór akceptort aktiválja. Ugyanakkor a sekély donor nitrogén passzíválását nem sikerült elérni a hidrogénnel való kezelés után. Számításaink megmutatták, hogy a nitrogén bár magához tudja kötni a hidrogént, de annak koncentrációja több nagyságrenddel kisebb, mint a nitrogén donor koncentrációja. Eredményeinket az *Applied Physics Letters*-ben publikáltuk [5]. A foszfor donor CVD-beli adalékolásával több probléma is felmerült: a PH_3 prekuzorral adalékolt mintákban a maximum koncentráció alig érte el a 10^{17} cm^{-3} -t, valamint a koncentrációja a sztöchiometriától se úgy függött, mint ahogy várták [14]. Felmerült, hogy hasonlóan a bórhoz, a hidrogén és foszfor komplexumai adhatnak magyarázatot ezekre a jelenségekre. A CVD növesztés körülményeit szimulálva meghatároztuk a SiC-ban a maximális P-koncentrációt, amely valóban kisebb, mint 10^{17} cm^{-3} . Ennek oka az, hogy a CVD gáztérben a P kémiai potenciálja túlságosan alacsony. Javasoltuk, hogy próbálkozzanak más P-prekuzorral, amelyhez magasabb P kémiai

potenciál fog tartozni. A számítások szerint a P_{Si} donor mellett két-három nagyságrendben alacsonyabb koncentrációjú P_C donor jön létre CVD körülmények között. Megállapítottuk, hogy a hidrogén nem passziválja a foszfor donort. A H közvetett módon mégis befolyásolja a P_{Si}/P_C arányt azáltal, hogy a H koncentrációjának változása a gáztérben a PH molekulák révén csökkentheti a P kémiai potenciálját. Evvel meg tudtuk magyarázni a P_{Si} koncentrációjának alakulását a gáztérbe jutott Si és C-prekurzor gázok arányának függvényében. Az evvel kapcsolatos eredményeket az *Applied Physics Letters*-ben publikáltuk [14].

- 3) A foszforhoz kapcsolódó elektron paramágneses rezonancia (EPR) spektrumok értelmezése önellentmondásos volt az irodalomban [15]. A svéd és japán kísérleti csoport CVD növesztés segítségével rendkívül nagy tisztaságú P-ral adalékolt mintákat hozott létre, amely alig tartalmazott nitrogén szennyezőt. Ez fontos volt, mert a nitrogén EPR-jele gyakran elfedte a P-hoz kötődőt. Az EPR mérések interpretációjához az én számításaim járultak hozzá. Megállapítottam, hogy a 4H-SiC-ban a megmért P_{Si} centrum az ú.n. köbös helyen van és a donor elektron állapotfüggvény szimmetriája A_1 a C_{3v} pontcsoportban. Az ú.n. hexagonális helyen a donor elektron állapotfüggvény szimmetriája viszont E, és a gerjesztett A_1 állapot nagyon közel van hozzá. Ez lehet az oka, hogy a P_{Si} donort a hexagonális helyen nem tudják kimérni (spin-relaxációs idő túl kicsi). Ennek alapján sikerült azonosítani a P_{Si} donort a 6H-SiC-ban is. Az eredményeket a *Physical Review B* folyóiratban közzeltük [15]. Az USA-beli kollégák fotolumineszcencia kísérletekben (PL) találtak egy foszforhoz köthető új jelet CVD növesztett SiC mintákban. A PL kísérletekben megbecsült koncentráció arány valamint a sekély donor jelleg alapján először mutattuk ki, hogy a foszfor a szén helyén is előfordul [22].
- Az anti-site és vakancia-aggregátumoknak nagy a jelentősége a SiC-ban. Munkám (együttműködve más kísérleti csoportokkal, valamint a Paderborn Egyetem elméleti csoportjával) jelentősen hozzájárult ennek felismeréséhez. Ezek az eredmények részben a munkaterv első és második pontjához kötődnek.
 - Az izolált szén-antisite (C_{Si}) elektromosan inaktív, a képződési energiája alacsony [9]. Ugyanakkor látni fogjuk, hogy C_{Si} befoghat más hibákat, amelyek elektromosan aktívak. A C_{Si} -t magát közvetlenül szinte lehetetlen észlelni, de megmutattam, hogy p-típusú mintákban a hidrogént be tudja fogni. Érdekes módon így egy elektromosan aktív hiba jön létre: azaz a H aktívvá tett egy korábban elektromosan inaktív hibát, amely nem tipikus [9]. Így mégis lehetne észlelni ezt a hibát a *Physical Review B* cikkünk szerint [9]. Az izolált Si-antisite (Si_C) betöltött hibaszintekkel rendelkezik közel a vegyértéksáv teteje felett [4]. Az anti-site-ok nem mozgékonyak önmagukban. Azonban ha vakancia diffundál a közelükbe, akkor a vakancia-segített diffúzióval a C_{Si} és kisebb mértékben a Si_C is mozogni tud a rácsban [7]. Számításaink szerint a diffúzió során létrejöhet a közeli antisite-pár (Si_C-C_{Si}), valamint ennél nagyobb aggregátumok is, amelyek megmagyarázhatnak néhány korábbi PL jelet. Számításaink szerint az anti-site párok aggregációja egy végtelen (0001) síkon az anti-site párok képződési energiáját jelentősen lecsökkenti az izoláltéhoz képest. Ez a síkhiba felfogható úgy is, mint egy inverziós domén. Számításaink szerint a végtelen síkban az egy anti-site párra jutó energia csak 1.6 eV lesz. Mivel az izolált antisite-pár rekonstrukciójához kb. 5,3 eV szükséges, ezért várhatóan a metastabil inverziós domén visszaalakítása tökéletes kristályra még több energiát igényelne. Ez a fontos eredmény inspirált minket egy új, hipotetikus szuperrács vizsgálatára (ld. utolsó pont). Ezeket az eredményeket *Physical Review B* folyóiratban közzeltük [7]. Itt fontos megjegyezni, hogy létezik egy termikusan rendkívül stabil PL centrum, amelyet D_1 -nek neveztek el. Már több mint 30 éve ismerik, de az eredete sokáig nem volt tisztázott. A számított elektronszerkezet és rezgési módusok alapján arra következtettünk, hogy a Si_C-C_{Si} hiba teljes mértékben meg tudja magyarázni a spektrumot. Ezt a fontos eredményt a *Physical Review B* folyóiratban közzeltük [4].
 - Számításaink azt is megmutatták, hogy a vakancia-aggregátumok képződése magas hőmérsékleten egy kedvező folyamat. Konkrétan a szilíciumvakanciához (V_{Si}) egyre több szénvakancia (V_C) tud kapcsolódni [21]. Minél nagyobb az aggregátum, annál kisebb a rákövetkező vakancia disszociációs gátenergiája [21]. Ez a jelenség egy fontos problémához kapcsolódik a SiC félvezetőiparban: a kommerciális SiC félvezető szeletek gyakran nitrogénnel szennyezettek, amelyek n-típusúvá változtatják a SiC-ot. A teljesítményelektronikai eszköz létrehozásánál azonban rendkívül fontos, hogy ú.n. félszigetelő szeleteket lehessen létrehozni (azaz a Fermi-szint legyen a tiltottsáv közepén), mert így a parazita kapacitások számát csökkenteni lehet. Újabban sikerült ilyen félszigetelő SiC-ot növesztetni, amelyekben ismeretlen eredetű szerkezeti hibák kompenzálták a nitrogén donort. Számításaink arra utalnak, hogy ezek az ismeretlen eredetű szerkezeti hibák a vakancia-aggregátumok.

Ezt az elméletet pozitron annihilációs kísérletek látszanak alátámasztani [18]. A számítások szerint a divakancia hiba létrejötte rendkívül kedvező, amennyiben a V_{Si} és V_C is képes diffundálni, amely mély szinteket hoz létre a tiltottsávban. (Korábban az izolált V_C azonosításához mi is hozzájárultunk a SiC-ban [2].) Ugyanakkor meglepő, hogy eddig nem sikerült semmilyen jelet a divakanciával egyértelműen azonosítani. Japán és svéd kísérleti kollégákkal együttműködve megállapítottuk, hogy a korábban ismert P6/P7 EPR centrumot tévesen interpretálták, és a P6/P7 centrum a divakancia semleges triplétt alapállapota [16]. A számítások annyira pontosak voltak, hogy még az individuális C_{3v} szimmetriájú P6 centrumokat is sikerült a megfelelő hexagonális-hexagonális, ill. köbös-köbös konfigurációkkal azonosítani. Eredményeinket a *Physical Review Letters* folyóiratban közzétettük [16]. Ez azért is volt fontos eredmény, mert a korábbi téves interpretáció miatt más EPR centrumok értelmezése is megkérdőjeleződik a SiC-ban, és evvel együtt az ott lejátszódó atomi folyamatok értelmezése. A félszigetelő mintákban a domináns EPR centrum az ún. SI5 centrum. Ennek azonosítása fontos, hiszen hozzájárulhat az SiC technológia optimalálásához. Az EPR centrum intenzitásának növelése céljából nem az eredeti félszigetelő mintákat használtuk fel, hanem n-típusú besugárzott mintákat [18]. Így lehetővé vált, hogy pontosabb hiperfinomstruktúrát mérjünk ki. A megfigyelések szerint két konfigurációja van a hibának: alacsony hőmérsékleten két Si-atomra lokalizált spinsűrűség a jellemző C_{1h} szimmetriával, míg 50 K felett egy másik konfigurációba megy át, ahol főleg egy Si-atomon lokalizált a spinsűrűség. Számításainkkal megmutattuk, hogy a negatívan töltött ($C_{Si}-V_C$) hiba axiális konfigurációi pontosan evvel a tulajdonsággal rendelkeznek [18]. Evvel kapcsolatos eredményeinket a *Physical Review Letters* folyóiratba küldtük be, amely most bíráltnak el [18]. Ezen hiba azonosítása túlmutat a SiC területen. A $C_{Si}-V_C$ hiba általánosan az antisite-vakancia (AV) párok családjába tartozik a vegyületfélvezetőkben. Fontos megjegyezni, hogy egy XY vegyületfélvezetőben egy X-típusú vakancia a mozgása során az Y atom helyére ugorhat, miközben Y atom az X-vakancia helyére kerül, azaz egy AV-pár jöhet létre. Ez az AV-pár az izolált vakanciánál akár stabilabb lehet a töltésállapottól függően. Korábban a III-V félvezetőkben (főleg a GaAs-ben) ilyen AV-párok létezését már megjósolták, de tudomásunk szerint nincsen egyelőre kísérleti igazolás az AV-párokra a mi vizsgálatunkat kivéve [18]. Az SI5 centrum azonosítását az is megerősíti, hogy konzisztensen meg tudtuk magyarázni azt a tényt, hogy a foto-EPR vizsgálatok szerint három ionizációs küszöb is tartozik ehhez a hibához. A foto-EPR mérésekben az SI5 EPR jel intenzitása három különböző foto-gerjesztési energiánál nőtt meg, amelyet úgy interpretálhatunk, hogy egyensúlyban a többségben levő nem-paramágneses ($C_{Si}-V_C$)²⁻ hibát ionizáltuk megnövelve a paramágneses ($C_{Si}-V_C$)⁻ koncentrációját. A három különböző ionizációs küszöbenergia magyarázata az, hogy a ($C_{Si}-V_C$)²⁻ hibához szintén két konfiguráció tartozik, mindkettőhöz egy teljesen betöltött és egy üres hibaszint a tiltottsáv felső részében. Az ionizáció lehet direkt a vezetési sávba a betöltött szintről, vagy pedig lehet közvetett az üres hibaszinten keresztül mind a stabil, mind a metastabil konfigurációban [20].

- Az intersticiális aggregátumok fontosságára már korábban utaltam az implantációval történő adalékolással kapcsolatban. A munkatervben hármas pontjának előrehozása fontossá vált, miután elektronnal besugárzott SiC-ban új PL centrumokat fedeztek fel, amelynek alsávjaiban szén-szén rezgésre utaló energiákat találtak [6]. A munkaterv első pontjában szereplő, korábban jól ismert D_{II} centrum is ilyen tulajdonságú. Ezért a számításaimban megvizsgáltam két szén-önintersticiális egymással, illetve C_{Si} -tal alkotott komplexumait. Első munkában főleg a kötési energiák valamint a rezgési frekvenciák kiszámítására koncentráltam [6]. Itt megállapítottam, hogy a szén-önintersticiálisok egy része extrém stabil komplexumokat tud létrehozni, míg más részük metastabil. Ez új és fontos eredmény, hiszen bármilyen fajta besugárzás (pl. implantálás) létrehozhatja ezeket a hibákat. Számításaink szerint mindegyik elektromosan aktív hiba. Számításaim alapján a D_{II} és P-T PL centrumokra adtam konzisztens modellt. Néhány hibára kiszámítottam a hiperfinom-állandókat is, hogy könnyebben lehessen azokat azonosítani. Ezt a nagylélegzetű munkát a *Physical Review B* folyóiratban közzétettük [6]. Később újabb szén-klaszter metastabil formákat fedeztem fel [17]. Itt részletesebben megvizsgáltam az ionizációs energiákat. Számos, korábban kimért mélynívó tranziens spektroszkópia centrumra tudtam modellt felállítani, amely megmagyarázta a stabilitásukat és ionizációs energiájukat. Ezek közül az egyik legfontosabb a termikusan rendkívül stabil Z1/Z2 centrum, amelyet korábban tévesen nitrogénhez kötöttek [17]. Eredményeimet a *Physical Review B* folyóiratban közöltem [17].

- A Paderborni Egyetemmel együttműködésben megvizsgáltuk a SiC/SiO₂ határfelületen létrejövő hibákat. Az ottani diplomázó (Jan Knaup) munkáját részben én felügyeltem. Szemben a szilíciummal, a SiC-ban a SiC/SiO₂-ben létrejövő hibák koncentrációja nem elhanyagolható. Az azonosítás lényegesen hozzájárulhat a technológia optimalásához. A határfelületre alkottunk egy olyan modellt, amelyben ideálisan illeszkedik a SiC és SiO₂. Itt megvizsgáltuk, hogy egy bediffundáló O₂ molekula milyen hibákat hozhat létre a különböző reakciók energiáit kiszámítva. Azt találtuk, hogy főleg a (VO) hiba jön létre az oxidáció során [13]. Ez bizonyos határfelületi hibaszintek kialakításáért felelős a számítások szerint. Eredményeinket a *Physical Review B* folyóiratban közzeltük [13].
- A fenti témák mellett folyt a kvantumgödör-jelenségek kutatása a szilíciumkarbidban, amely a munkaterv negyedik pontja. Ebbe a munkába Buruzs Ádám diplomázó hallgató kapcsolódott be, aki azóta sikeresen diplomázott és azóta TU Wien doktorandusz hallgatója. A kezdeti eredményeket diplomázó hallgatóm TDK előadáson mutatta be, és II. helyezést ért el vele a Fizika szekcióban a BMGE-n. Egy különleges struktúrával foglalkoztunk: az ú.n. polaritásváltásos hibával, amikor egy C-C ill. Si-Si síkhibát iktatunk be a c-tengely mentén a 4H-SiC-ba. Abban az esetben, ha teljesen egymás mellé rakjuk a két hibát, akkor kapjuk az antisite-pár síkhibát, amelyről fentebb szoltunk. A szupercella-periodicitás miatt a két hiba hatását egyszerre tudtuk vizsgálni. Megállapítottuk, hogyha ezt a két hibát megfelelően közel rakjuk egymáshoz (de nem közvetlenül egymás mellé), akkor a C-C környékén kétdimenziós lyuk-elektrongáz állapotok alakulnak ki (ú.n. I. típusú kvantumvölgy struktúra), míg a Si-Si kétdimenziós lyukgáz hoz létre, viszont a vezetési elektronok számára gátat jelent (ú.n. II. típusú kvantumvölgy struktúra). A számítások szerint elvileg lehetséges ultravékony (2-4 Å) kétdimenziós elektron(lyuk)gáz létrehozása ezekkel a struktúrákkal, amelyek mind az alaputatásban, mind az alkalmazott kutatásban fontosak lehetnek. Minél távolabb rakjuk egymástól a két hibát, a C-C annál inkább sekélyebb állapotokat hoz létre, míg a Si-Si annál mélyebbeket: ez azt jelenti, hogy az effektív tiltottsáv szélessége a két hiba távolságától függ. Ennek oka az, hogy a Si-Si és C-C hibákban résztvevő Si és C atomokon más lesz töltésátadás, mint a perfekt SiC-ban. Ez létrehoz egy állandó elektromos teret a két hiba között, amely egy lineáris potenciállejtőt indukál a két hiba között. Ezt az elektromos teret (valamint a potenciállejtő meredekségét) csökkenti a 4H-SiC-ban levő intrinszik dipólusból származó elektromos tér. A számítások szerint a töltésátadás nagysága független a hibák távolságától, állandónak tekinthető. Ebből következően minél messzebb vannak egymástól a hibák, annál nagyobb a potenciálkülönbség a hibahelyek között. Végülis cikk-cakkos átlagos potenciálisenergia-menet alakul ki ebben a struktúrában. Emiatt elneveztük polarizációs szuperrácsnak a fenti struktúrát. Ez esélyt ad arra, hogy ezen struktúrákban az optikai aktivitás megnőhet a 4H-SiC kristályhoz képest. Kiszámítottuk a képzetes dielektromos állandót mind a tökéletes SiC-ra, mind a polarizációs szuperrácsra, illetve a Kamers-König-reláció segítségével a valós dielektromos állandót is meghatároztuk. A számítások szerint az abszorpciós él felfutása az effektív tiltottsávnak megfelelő energián kezdődik, mint ahogy várható. Bár a polarizációs szuperrács sávszerkezete indirekt, de a legfelső betöltött és a legalsó üres sáv a c-tengely mentén (z-irányban) erősen lokalizált, ennek megfelelően az abszorpciós együttható 25-ször nagyobb a felfutó élnél, mint a perfekt SiC-ban, amely reményt ad arra, hogy opto-elektronikában is lehet használni a SiC-ot. 5,0-5,5 eV energia környékén anomálishan nagygyá válik az abszorpció, amely nem-lineáris optikai alkalmazást tenne lehetővé. A fenti struktúrát atomi rétegleválasztással (ALE) elvileg le lehet választani. Az ALE során atomi rétegenként lehet szén- illetve szilíciumrétegeket leválasztani. A C-C hibát pl. úgy lehetne létrehozni, hogy Si-C-Si-C-Si-C-Si-C szekvencia helyett Si-C-Si-C-C-Si-C-Si szekvenciával növesztünk a [0001] irányban. A számítások szerint a polarizációs szuperrács egy metastabil formáció: a képződési energia kb. 1,65 eV, de a korábbi antisite-pár vizsgálataink szerint a hiba megszűnéséhez vezető diffúziós energiáját jóval nagyobb, több mint 5 eV. Még a vakancia segített diffúzió esetén is közel 3 eV. Tehát ha sikerült növesztéssel létrehozni a szuperrácsot, akkor az stabil maradna. A kérdés az, hogy a növesztés során a felületen a C-C vagy Si-Si kötések megmaradnak-e, és nem fognak-e átalakulni, amint a következő réteget próbáljuk ránöveszteni. Ezzel kapcsolatban a 4H-SiC felületén több számítást végeztünk. A Si-Si kettős kötések a felület (3x3) rekonstrukciója során jönnek létre a SiC növesztése során 950 °C alatt. Számításaink szerint, ha egy C-atom közelíti meg ezt a struktúrát, akkor a Si-Si kettősrétegbe nem hatol be, és a Si-Si kettősréteg fölé jutó C-atom a legstabilabb. Várhatóan a többi C-atom is így tesz, és a perfekt SiC-nak megfelelő szekvencia szerint fog alkotni egy új réteget. Számításaink szerint a C-felületen kialakítható C-C kettősréteg etén híddal, amely (2x1) vagy (2x2) rekonstrukciójú felületet alkot. Számításaink szerint az erre érkező Si-atom az etén hídak fölé köt (három szénatommal hozva létre kötést) függetlenül attól, hogy hova helyeztük azt kezdetben. Ez megint azt valószínűsíti, hogy a

C-C kötések megmaradnak, és afelett alakulna ki a Si-réteg. Bár a számítások csak a 0 K-en végeztük el, miközben a növesztési hőmérséklet ennél jóval magasabb, mégis a fenti eredmények alapján van remény, hogy mind a Si-Si, mind a C-C kötés stabil marad a megfelelő növesztési körülmények között. Ezeket az eredményeket a *Physical Review Letters* folyóiratba küldtük be [19].

A munkám elsősorban a SiC szakterületét vonzotta eddig elsősorban, ezért a hivatkozások száma viszonylag korlátozott. Eddig 19 független hivatkozást kaptak a felsorolt cikkek, amelynek többsége 2005-ben vagy 2006-ban jelent meg, vagy fog megjelenni.

Budapest, 2006. február 15.

Sor-sz.	Szerző(k) neve	Cikk címe	Kiadvány, folyóirat címe, megjelenés ideje, első-utolsó oldalszám
1	P. Deák, B. Aradi, A. Gali, and U. Gerstmann	Some like it shallower – <i>p</i> -type doping in SiC	Physica Status Solidi, b 235 139-145 (2003).
2	A. Gali, P. Deák, J.-L. Monge, J. von der Bardeleben, N. T. Son, and E. Janzén	Calculation of hyperfine constants of defects in SiC	Mater. Sci. Forum, 433-436 511-514 (2003).
3	P. Deák, B. Aradi, A. Gali, U. Gerstmann, and W. J. Choyke	A shallow acceptor complex in 4H-SiC: Al _{Si} -N _C -Al _{Si} complex	Mater. Sci. Forum, 433-436 523-526 (2003).
4	A. Gali, P. Deák, I.G. Ivanov, F.H.C. Carlsson, N.T. Son, E. Janzén, and W. J. Choyke	Correlation between the anti-site pair and the D ₁ center in SiC	Physical Review B, 67 155203 (2003).
5	A. Gali, P. Deák, N. T. Son, and E. Janzén	Hydrogen passivation of nitrogen in SiC	Appl. Phys. Lett. 83 1385-1387 (2003).
6	A. Gali, P. Deák, P. Ordejón, N. T. Son, E. Janzén, and W. J. Choyke	Aggregation of carbon interstitials in silicon carbide: A theoretical study	Phys. Rev. B 68 125201 (2003).
7	E. Rauls, Th. Frauenheim, A. Gali, and P. Deák	Theoretical study of vacancy diffusion and vacancy-assisted clustering of antisites in SiC	Phys. Rev. B 68 155208 (2003).
8	P. Deák, A. Gali, and B. Aradi	Hydrogen in SiC (3rd Chapter)	Recent Major Advances in SiC edited by W. J. Choyke, H. Matsunami, and G. Pensl (Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2004), 57-88 o.
9	A. Gali, P. Deák, N.T. Son, and E. Janzén	Possibility for the electrical activation of the carbon antisite by hydrogen in SiC	Physical Review B, 71 035213 (2005),
10	A. Gali, T. Hornos, P. Deák, N. T. Son, E. Janzén, and W. J. Choyke	Theoretical investigation of complexes of <i>p</i> -type dopants and carbon interstitials in SiC: bistable, negative-U defects	Mater. Sci Forum, 483-485 , pp. 519-522 (2005)
11	A. Gali, T. Hornos, P. Deák, N. T. Son, E. Janzén, and W. J. Choyke	Activation of shallow boron acceptor in C/B co-implanted silicon carbide – a theoretical study	Appl. Phys. Lett., 86 , 102108 (2005)
12	A. Gali, T. Hornos, P. Deák, N. T. Son, E. Janzén, and W. J. Choyke	Bistable, negative-U complexes of the aluminum acceptor with carbon self-interstitials in SiC	Physical Review B, submitted (2006)
13	J. M. Knaup, P. Deák, Th. Frauenheim, A. Gali, Z. Hajnal, and W. J. Choyke	Theoretical study of the mechanism of dry oxidation of 4H-SiC	Physical Review B, 71 235321 (2005)
14	T. Hornos, A. Gali, R. P. Devaty, and W. J. Choyke	Doping of phosphorus in chemical-vapor-deposited silicon carbide layers: A theoretical study	Appl. Phys. Lett., 87 212114 (2005)
15	N. T. Son, A. Henry, J. Isoya, M. Katagiri, T. Umeda, A. Gali, and E. Janzén	Electron paramagnetic resonance and theoretical studies of shallow phosphorous centers in 3C-, 4H- and 6H-SiC	Physical Review B, 73 075201 (2006)
16	N.T. Son, P. Carlsson, J. ul Hassan, E. Janzén, T. Umeda, J. Isoya, A. Gali, M. Bockstedte, N. Morishita, T. Ohshima, and H. Itoh	Divacancy in 4H-SiC	Physical Review Letters, 95 055501 (2006)

17	A. Gali, N. T. Son, and E. Janzén	Electrical characterization of metastable carbon clusters in SiC – a theoretical study	Physical Review B, 73 033204 (2006)
18	T. Umeda, N. T. Son, J. Isoya, E. Janzén, T. Ohshima, N. Morishita, H. Itoh, A. Gali, and M. Bockstedte	The carbon antisite-vacancy pair: a major carrier compensating center in 4H-SiC	Physical Review Letters, submitted (2005)
19	P. Deák, A. Gali, A. Buruzs, and Th. Frauenheim	Possibility for a new type of superlattice in silicon carbide	Physical Review Letters, submitted (2005)
20	M. Bockstedte, A. Gali, T. Umeda, N.T. Son, J. Isoya, and E. Janzén	Signature of the negative Carbon Vacancy-Antisite complex	Mater. Sci Forum, in print (2006)
21	A. Gali, M. Bockstedte, N. T. Son, T. Umeda, J. Isoya, and E. Janzén	Divacancy and its identification: theory	Mater. Sci Forum, in print (2006)
22	F. Yan, R. P. Devaty, W. J. Choyke, A. Gali, I. B. Bhat and D. J. Larkin	Evidence for Phosphorus on Carbon and Silicon Sites in 6H and 4H SiC	Mater. Sci Forum, in print (2006)