

# Simulace deformačního pole v okolí V-pit defektů v tenkých vrstvách InGaN a jeho studium pomocí rentgenové difrakce

Jana Stránská Matějová



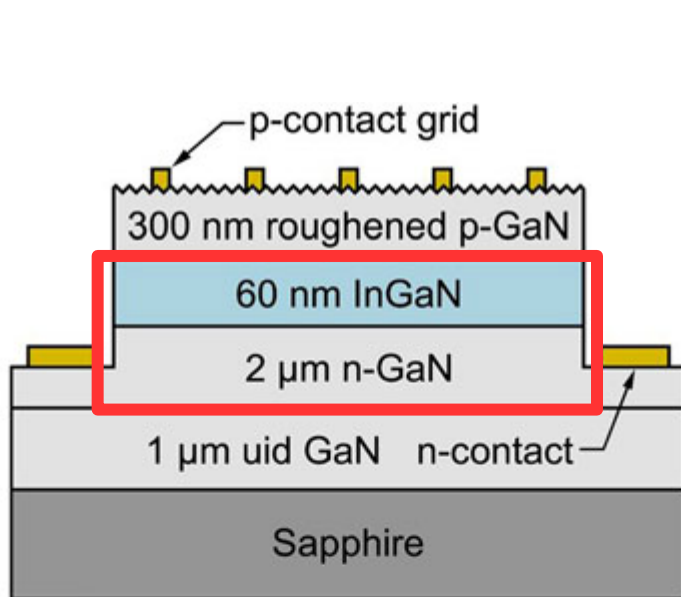
FACULTY  
OF MATHEMATICS  
AND PHYSICS  
Charles University

Bořetice, 24.5.2019

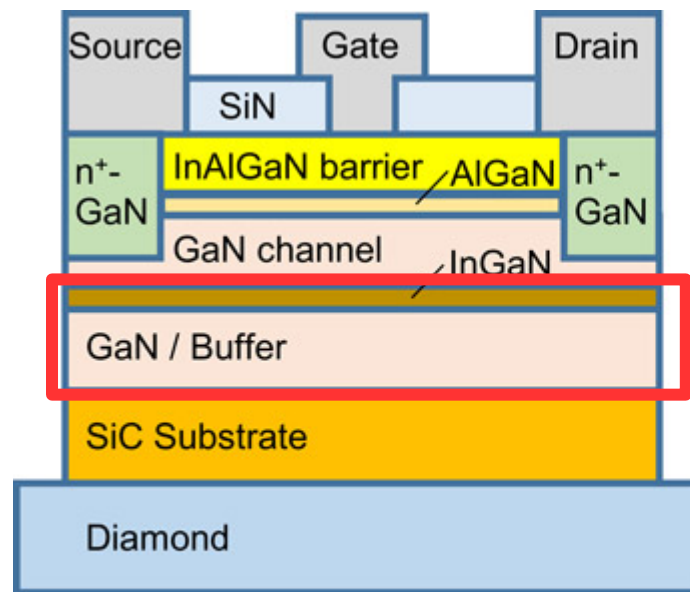
# InGaN/GaN

## Využití:

LED (zelené, modré), laserové diody, solární články, tranzistory HEMT



Solární článek [1]

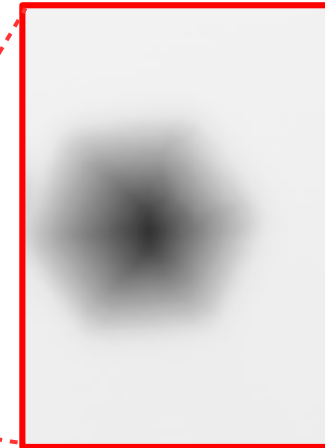
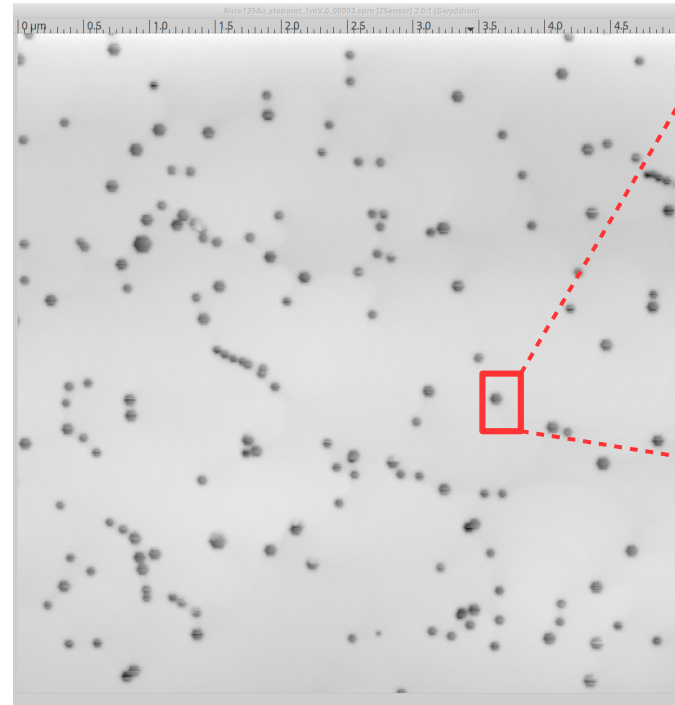
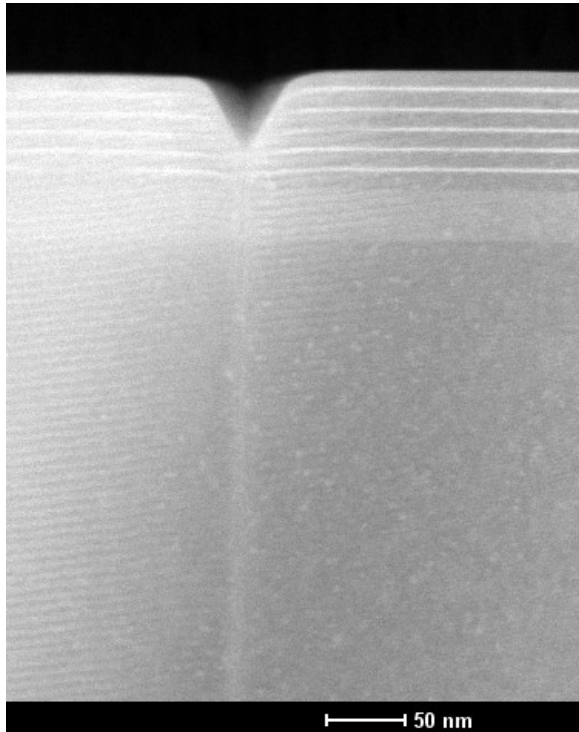


HEMT tranzistor [2]

[1] Farrell, R. M., et al. "Effect of intentional p-GaN surface roughening on the performance of InGaN/GaN solar cells." *Applied Physics Letters* 103.24 (2013): 241104.

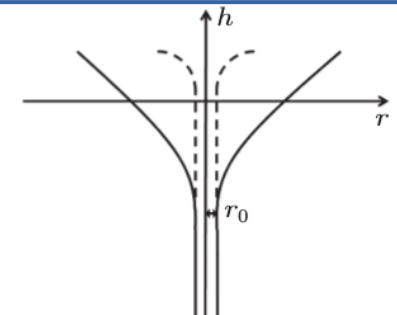
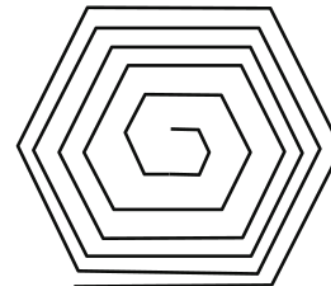
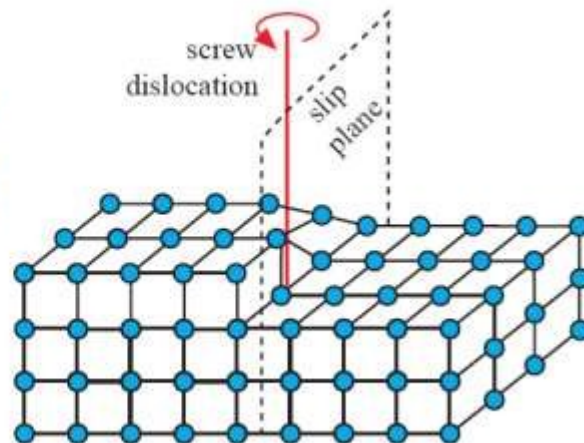
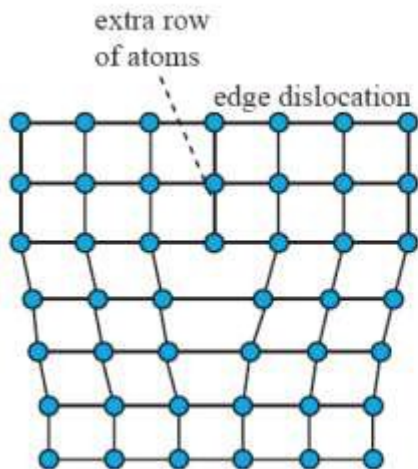
[2] Ohki, Toshihiro, et al. "An Over 20-W/mm S-Band InAlGaN/GaN HEMT With SiC/Diamond-Bonded Heat Spreader." *IEEE Electron Device Letters* 40.2 (2019): 287-290.

# V-pit defekty v InGaN



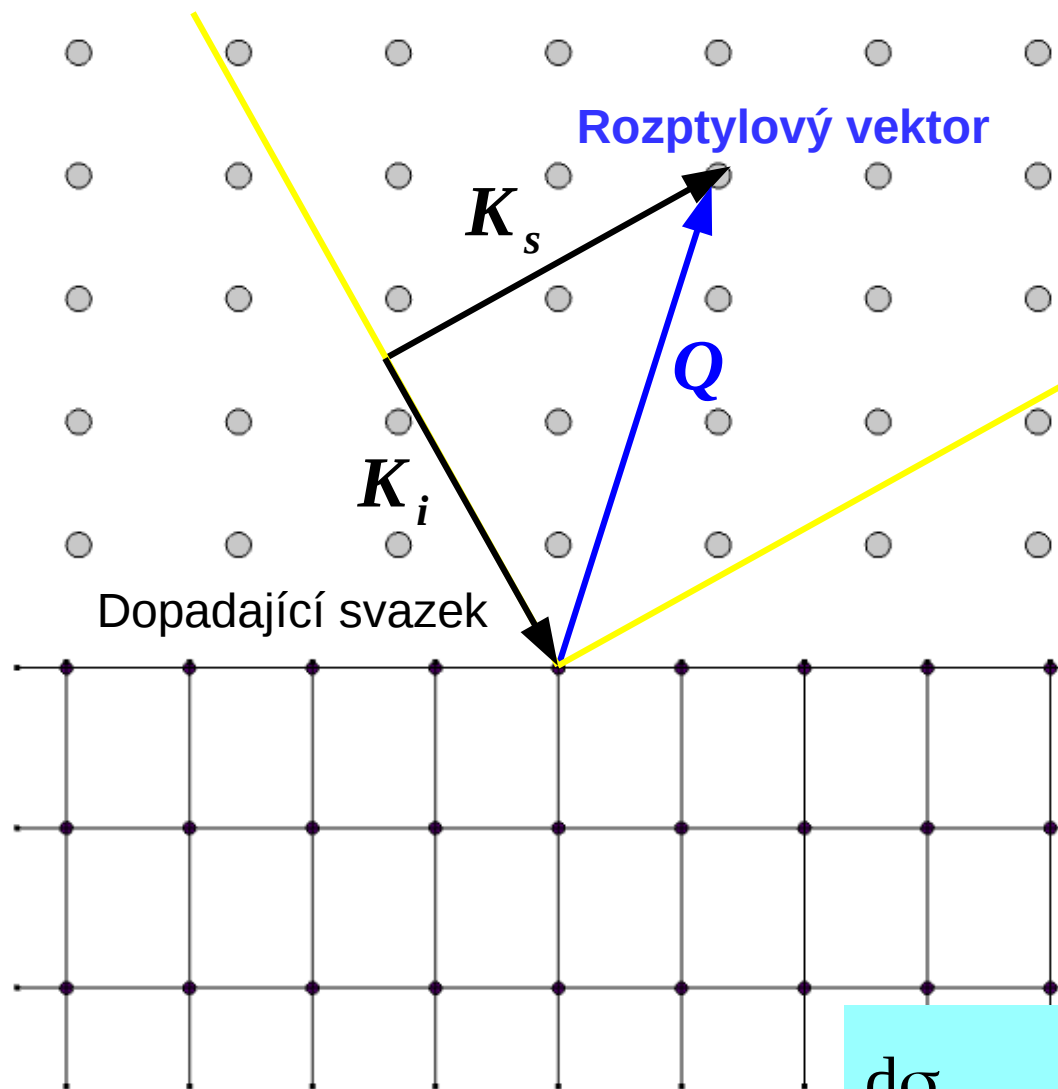
Metoda  
přípravy  
vzorků:  
MOVPE

Obrázky z TEM a AFM.



[3] Gao, Z.-Y. et al.: "Understanding of surface pit formation mechanism of GaN grown in MOCVD based on local thermodynamic equilibrium assumption", Chinese Physics B, 2016, 25.

# Rentgenová difrakce (XRD)



Konstruktivní interference nastane ve směru, pro který je rozptylový vektor zároveň vektorem reciproké mřížky.

$$K_s - K_i \equiv Q = g$$

Reciprokou mřížku můžeme zobrazit pomocí rentgenové difrakce – RSM (Reciprocal Space Mapping)

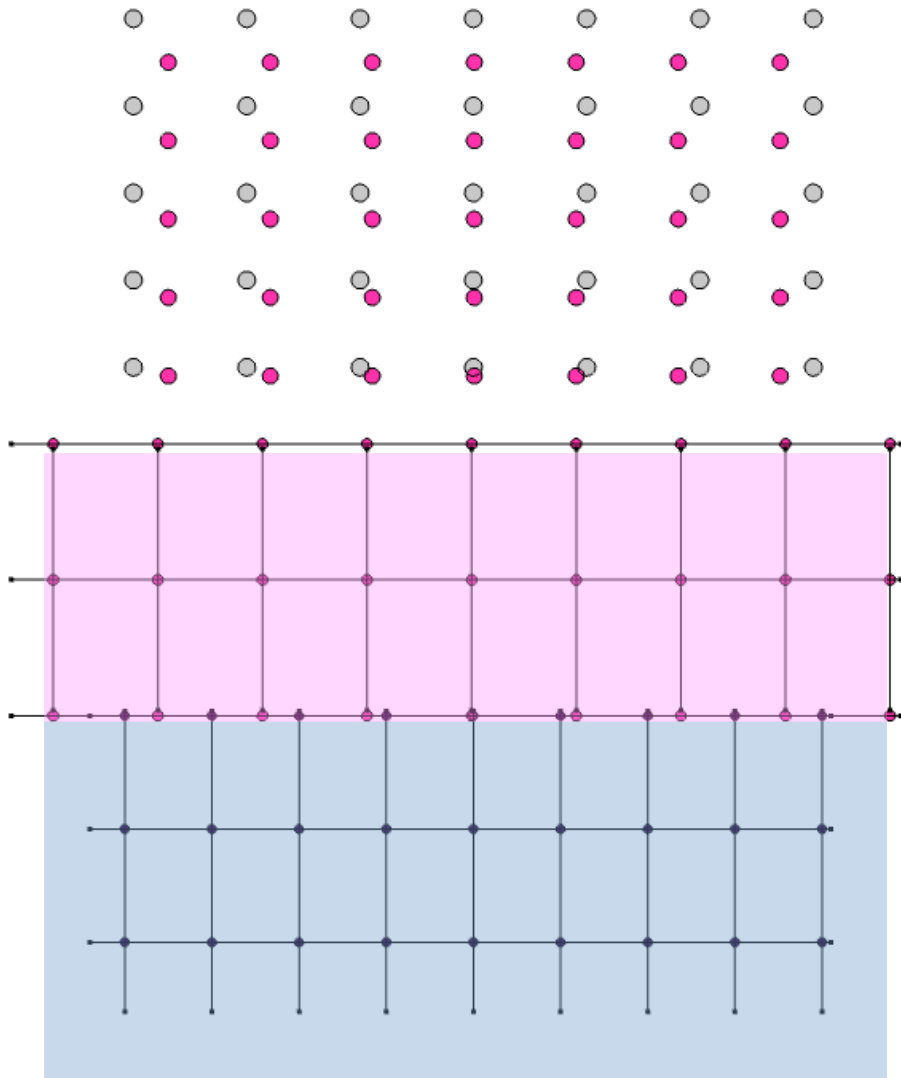
Vliv deformačního pole mřížky

Intenzita:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx \frac{r_{el}^2 C^2}{16\pi^2 V_c^2} |F(\mathbf{h})|^2 \left| \int_{\Omega} d^3\mathbf{r} e^{-i(\mathbf{Q}-\mathbf{h})\cdot\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{h}\cdot\mathbf{u}(\mathbf{r})} \right|^2$$

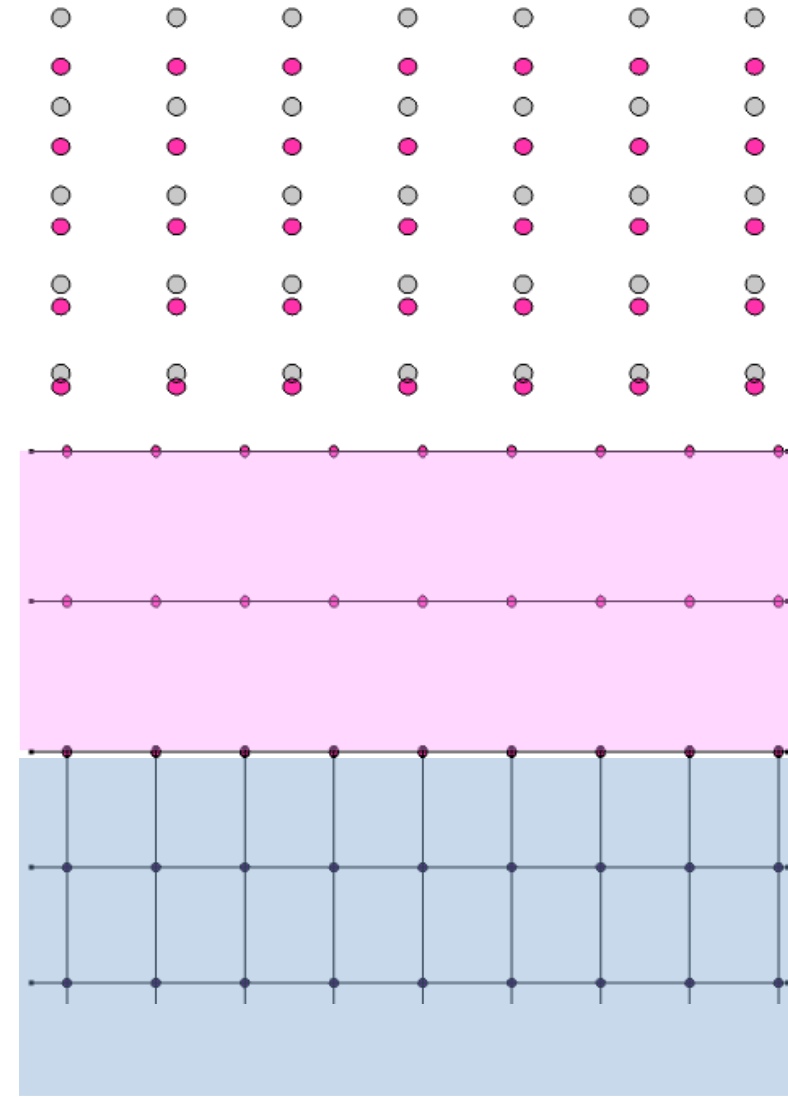
# XRD : Epitaxní vrstva

## Relaxovaná vrstva InGaN



Reciproký  
prostor

**Pseudomorfní vrstva InGaN:**  
akumuluje se elastická energie,  
po dosažení kritické tloušťky se tvoří  
hranové dislokace na rozhraní

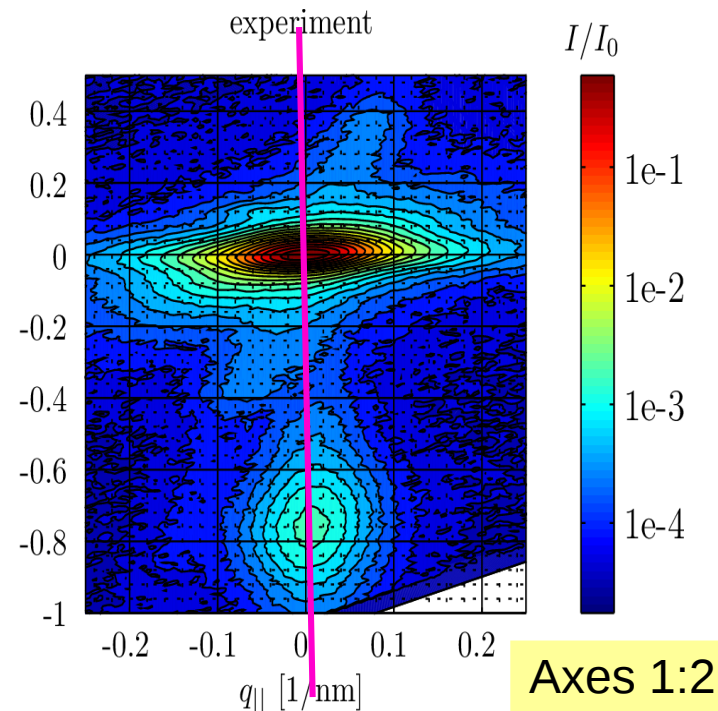
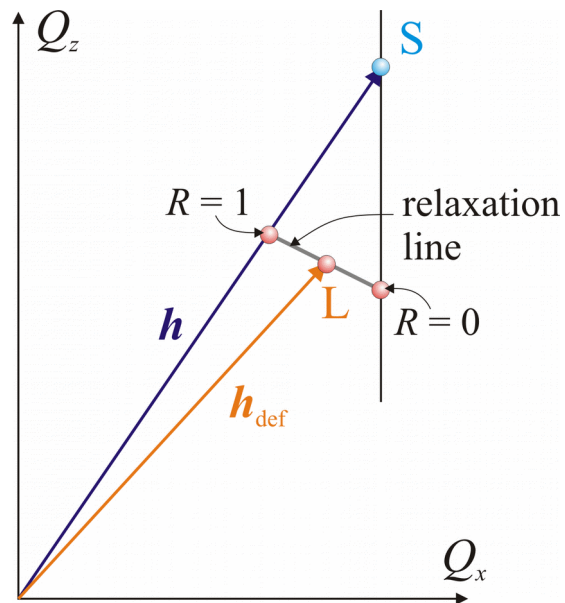


InGaN

GaN

# Problem

InGaN/GaN: almost pseudomorphic behavior observed by XRD RSM, although the layer thickness far exceeds the critical thickness for plastic relaxation by misfit dislocations.



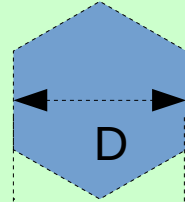
**Can the V-pits be responsible for the strain relief?**

# Strain field: FEM simulation

InGaN layer - Initial strain:

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a_{\text{InGaN}} - a_{\text{GaN}}}{a_{\text{GaN}}}$$

$$\epsilon_{zz} = \frac{c_{\text{InGaN}} - c_{\text{GaN}}}{c_{\text{GaN}}}$$



$$D = \sqrt{3} h / 1.63$$

Free

Layer of  
 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$   
 $p(\text{In})=x$

T

h

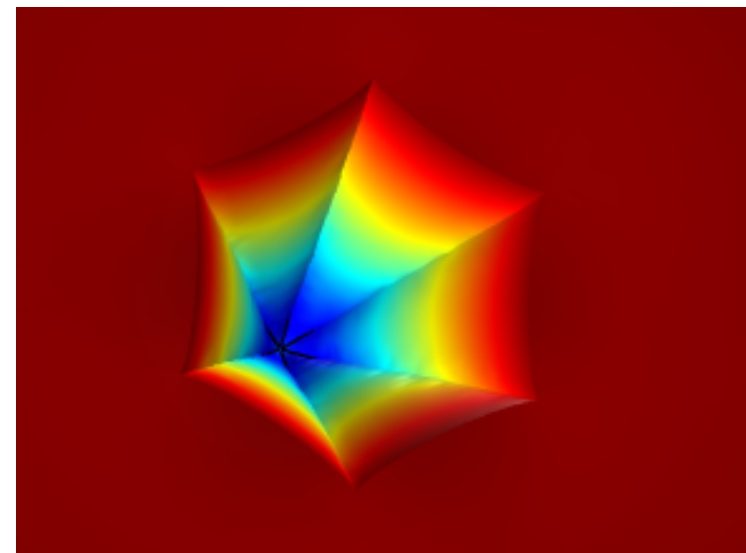
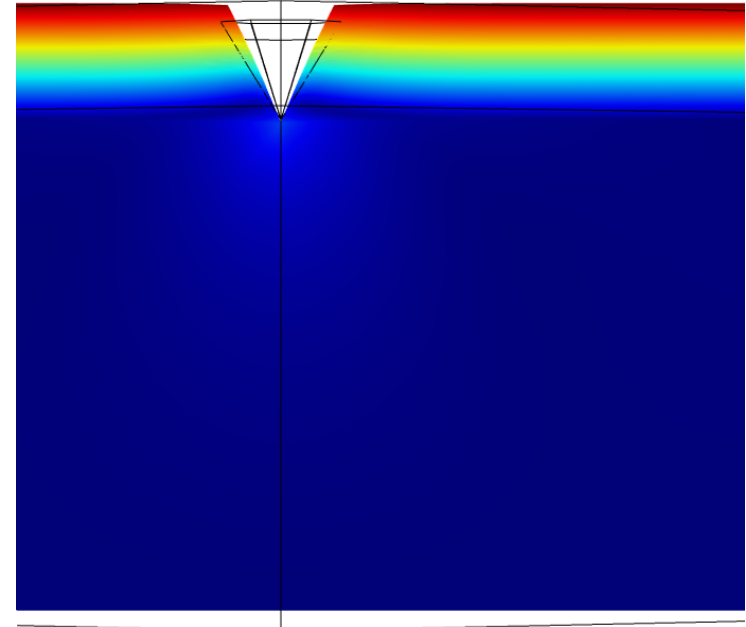
GaN  
substrate

$$u_x = u_y = 0$$

Solver: Comsol Multiphysics  
Method: FEM – weak formulation  
(minimization of total strain energy functional)

Fixed

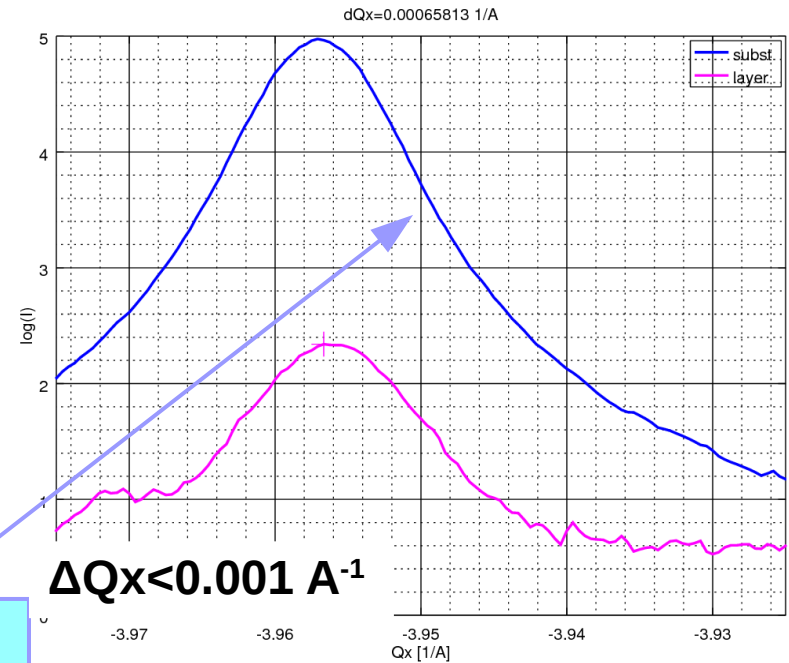
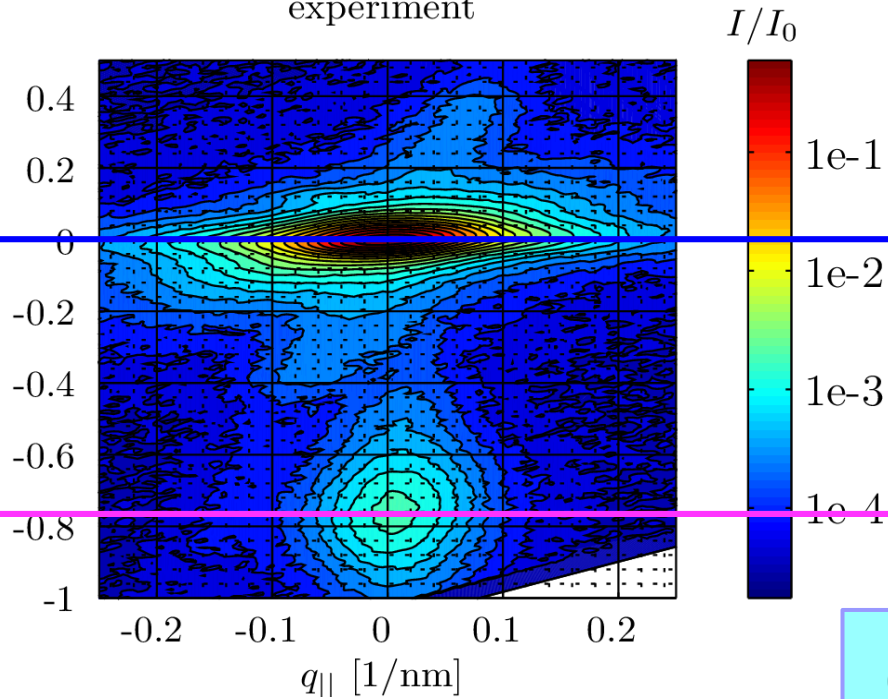
Total displacement [m]





# Sample 4805: diffraction (-1-124)

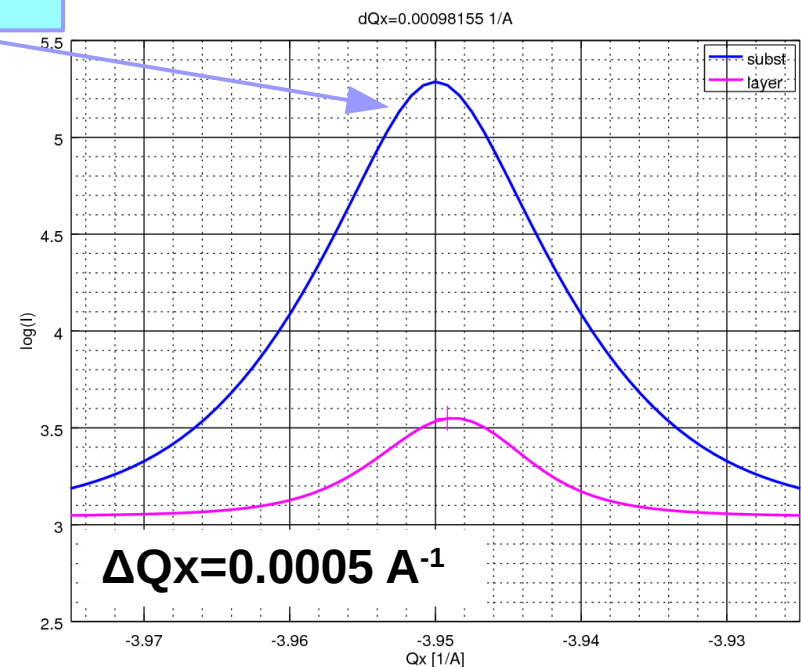
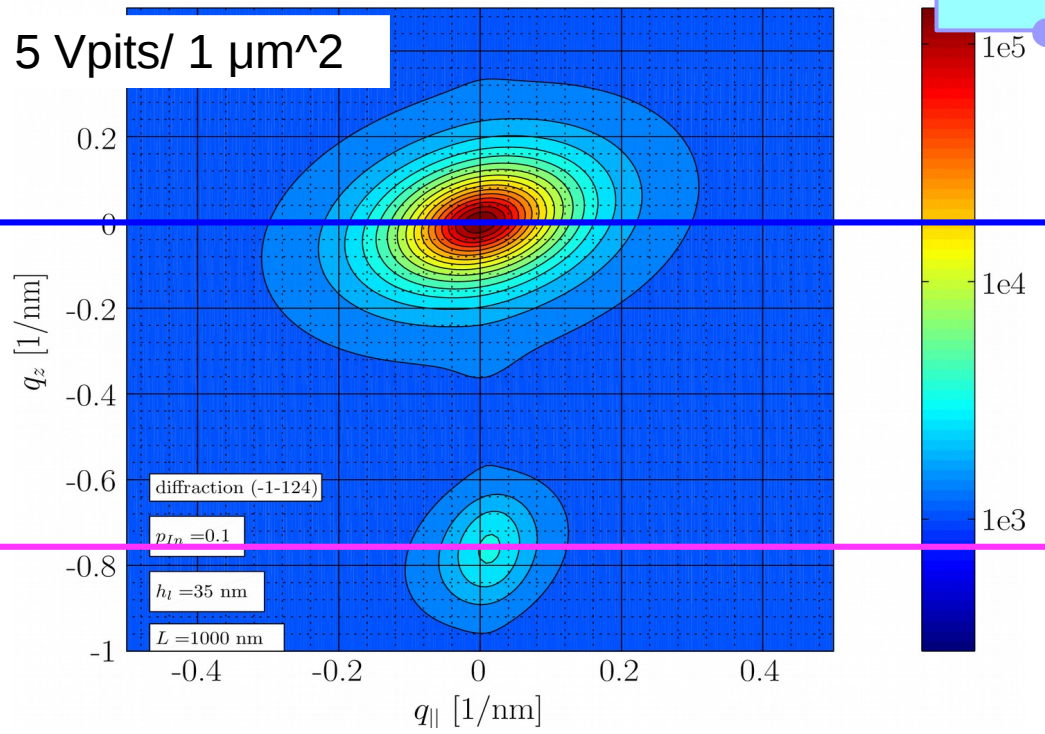
experiment



$\Delta Q_x < 0.001$  A<sup>-1</sup>

$dQ_x \sim 0$

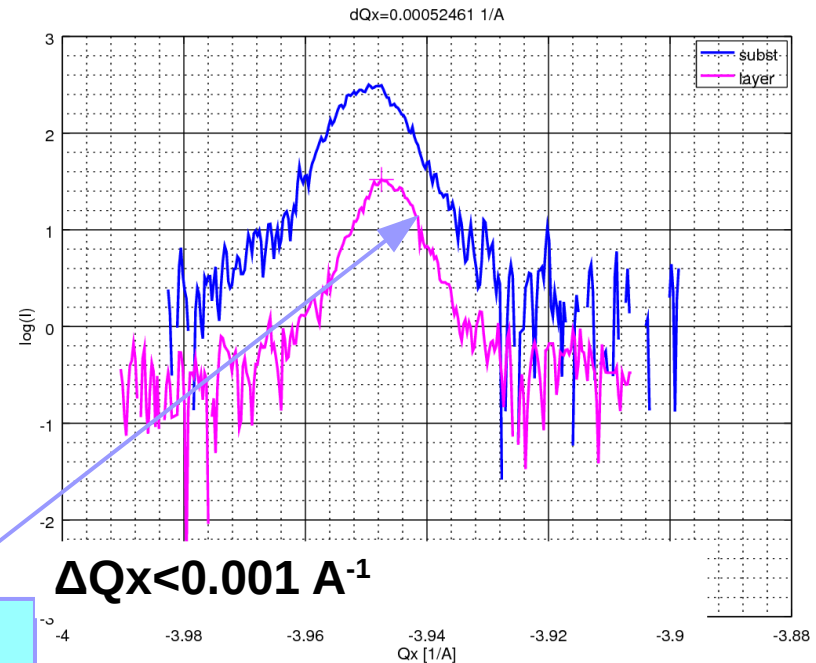
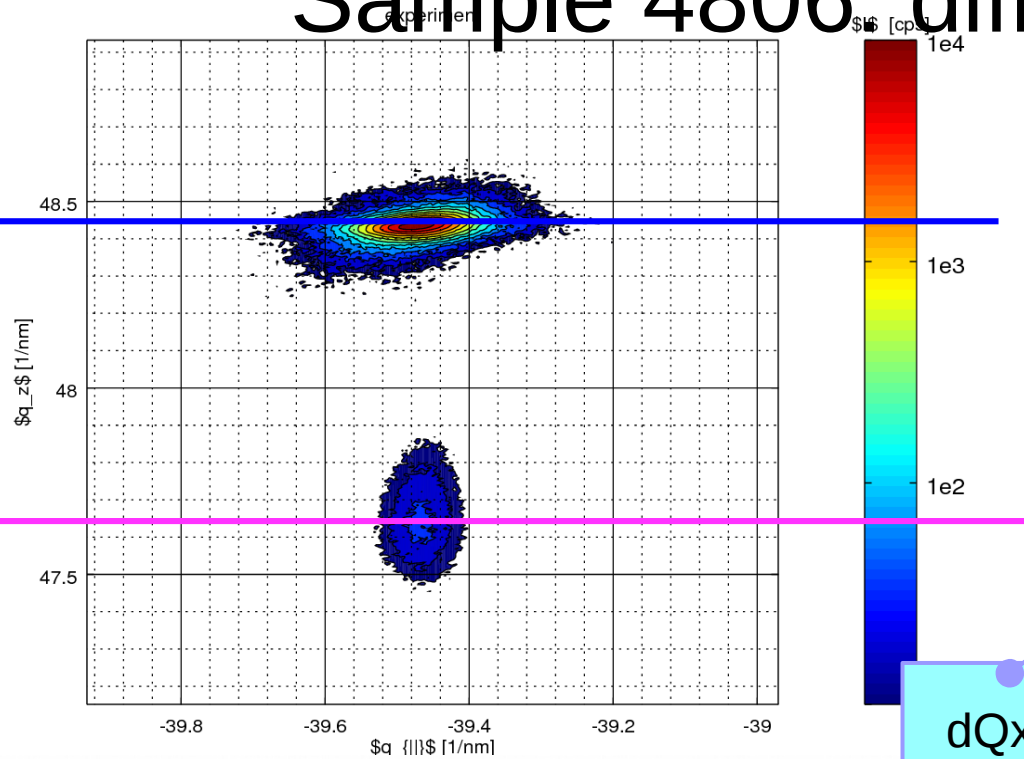
5 Vpits/ 1  $\mu\text{m}^2$



$\Delta Q_x = 0.0005$  A<sup>-1</sup>

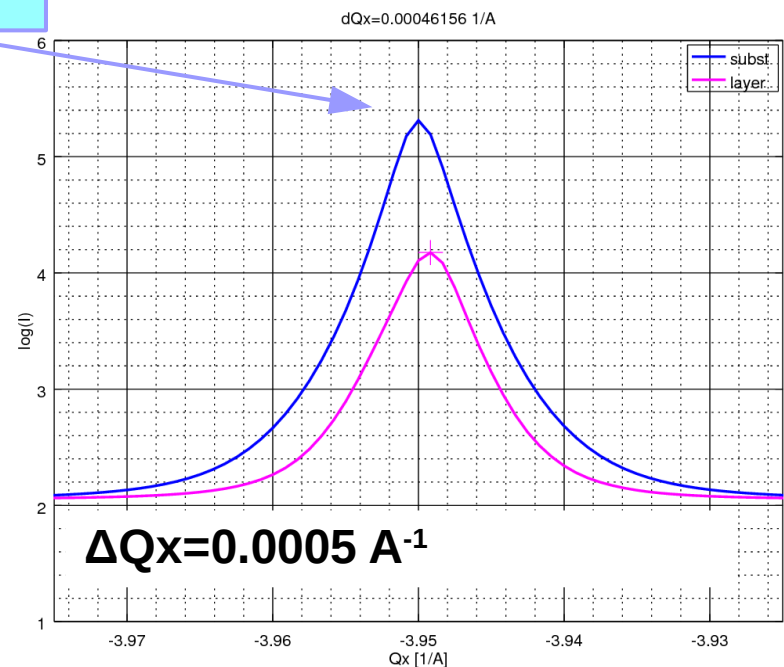
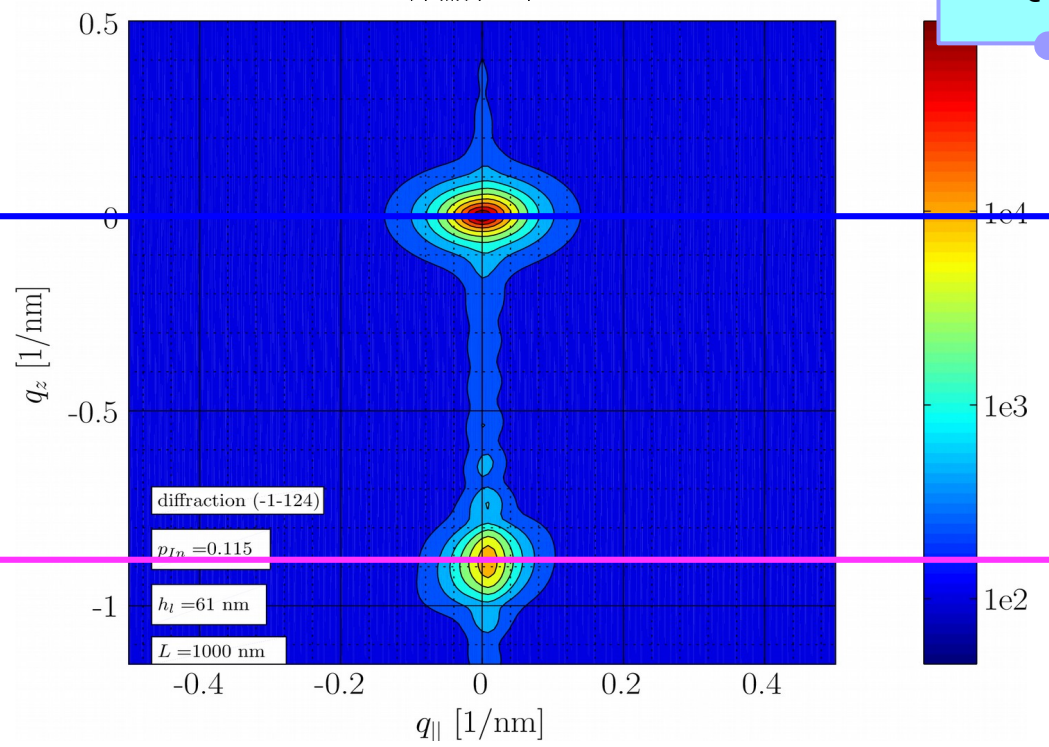


# Sample 4806: diffraction (-1-124)



$\Delta Q_x < 0.001 \text{ \AA}^{-1}$

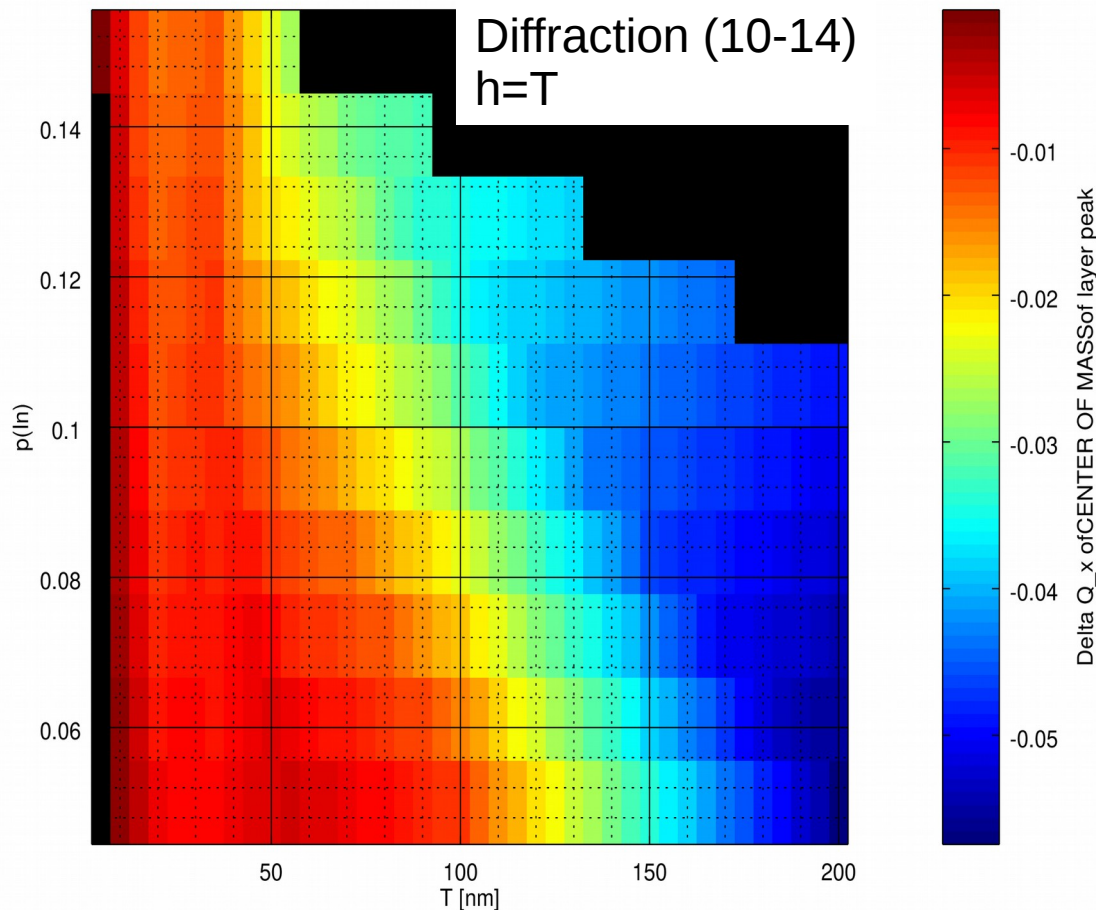
$dQ_x \sim 0$



$\Delta Q_x = 0.0005 \text{ \AA}^{-1}$

# Parametrická studie v COMSOLu

- Výpočet opakován pro různé kombinace  $T$ ,  $h$ ,  $p(\text{In})$



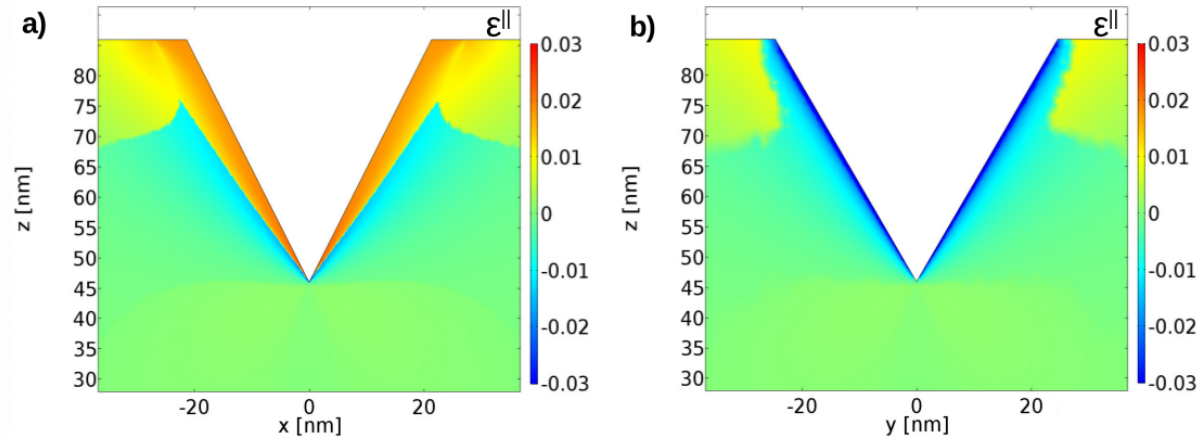
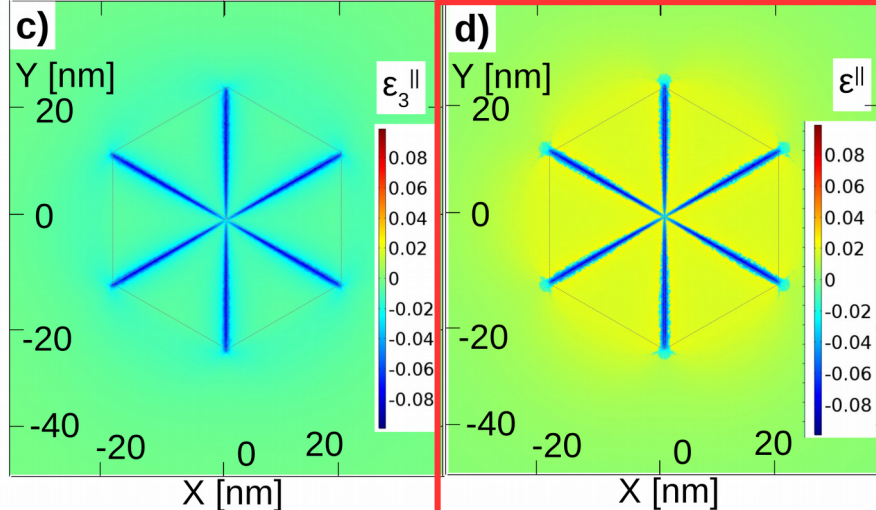
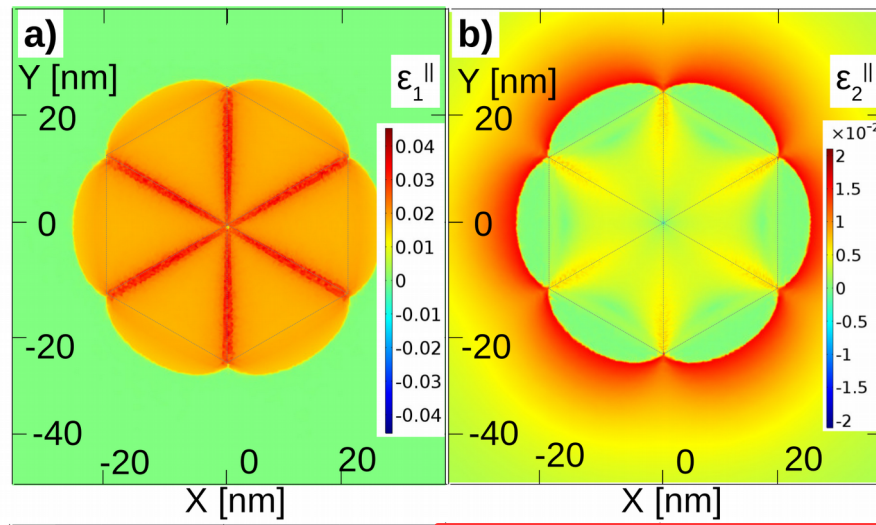
Výsledný laterální posuv těžiště InGaN-peaku není pro  $T \sim < 150 \text{ nm}$  není měřitelný, laterální posuv maxima InGaN peaku je ještě daleko menší.

- Je deformace způsobená V-pítem tak malá?
- Proč má zvětšování V-pítu a zvětšování koncentrace In tak malý vliv?

# Vysvětlení

Laterální složky 1., 2. a 3. hlavní deformace (principal strains)

Převládající laterální složka hlavní deformace:



- Okolí V-pit defektu obsahuje nejen oblast s převažující kladnou deformací, ale zároveň i oblast s převažující zápornou deformací.
- Objem těchto oblastí je přibližně stejný → příspěvky k posunu InGaN peaku se vyruší.
- Uvolněná elastická energie od obou oblastí se sečte → V-pit defekty mohou uvolňovat elastickou energii.
- V mezích platnosti linearity modelu se při změnách velikosti defektu/ změnách p(In) výsledek pouze škáluje konstantou.

# Děkuji za pozornost!

Děkuji za spolupráci účastníkům projektu WISEGaN (Visegrad Group – Japan Research Program, project No. 8F15002)



FACULTY  
OF MATHEMATICS  
AND PHYSICS  
Charles University

Prof. Václav Holý  
Dr. Lukáš Horák  
Dr. Peter Minárik



Institute of High  
Pressure Physics  
Polish Academy  
of Sciences

Prof. Michal Leszczyński  
Dr. Ewa Grzanka