

Theoretical study of defects in silicon carbide and at the silicon dioxide interface

Szilíciumkarbidbeli és a szilíciumkarbid-szilíciumdioxid határfelületi
hibák elméleti vizsgálata

PH.D. ÉRTEKEZÉS

Hornos Tamás

Témavezető: dr. Gali Ádám

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Atomfizika Tanszék

(2008)

Bevezetés

A szilíciumkarbid (SiC) egy széles tiltott sávval rendelkező félvezető. Az egyik legígéretesebb alapanyag magas hőmérsékleten vagy nagy frekvencián működő illetve a teljesítmény elektronikában használt félvezető eszközök számára. A SiC a szerkezetét alkotó erős szén (C) és szilícium (Si) kötések miatt jóval magasabb letörési feszültséggel és jobb hővezető képességgel rendelkezik, mint a szilícium. Azonban a szén jelenléte sok esetben a szokásos gyártási technológiák megváltoztatását és további anyagtudományi kutatásokat igényel. A SiC-ot hatékonyan növesztés közben vagy implantációval lehet adalékolni. Az előbbi esetben a növesztés adalékatomokat tartalmazó gázok jelenlétében történik. Utóbbi esetben az adalékatomokat a mintába lövik. Az implantáció során számos kristályhiba keletkezik, melyek mély szinteket hozhatnak létre a tiltott sávban és elektron vagy lyuk csapdaként viselkednek, így lecsökkentik a szabad töltéshordozók élettartamát és koncentrációját. Ezen káros kristályhibák eltüntetésére utólagos hőkezelést alkalmaznak. Azonban az eszközök működését károsan befolyásoló kristályhibák általában a hőkezelés után is maradnak. Ezen, gyártás során létrejövő, kristályhibák tulajdonságainak vizsgálata nagyban hozzájárul a technológiai lépések optimalizációjához.

A kísérleti mérések számára rendkívül fontos a kristályhibák tulajdonságainak elektron-szerkezet számításokkal történő vizsgálata. A számítások a kísérletekben vizsgált ismeretlen hibacentrumokhoz konkrét, atomi szintű, hiba modellek hozzárendelését teszik lehetővé. Ph.D. munkám során *ab initio* szupercella számításokkal vizsgáltam meg a SiC-ban a tipikus *n*- és *p*-típusú adalékatomok által létrejövő hibákat. Ezen túl megvizsgáltam a szilícium és szén ön-intersticiálisok által létrehozott legkisebb hibaklasztereket, valamint a SiC/SiO₂ határfelületen létrejövő határfelületi hibák nitrogén általi passzivációját. Utóbbi munkát a Brémia Egyetem Bremen Center for Computational Materials Science nevű intézetében végeztem DAAD rövid kutatói ösztöndíj keretében. Az előbbi vizsgálatokat pedig a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Atomfizika Tanszékén végeztem el. Az elektronszerkezet számításokat több külföldi és magyar szuperszámítógépen végeztem el. Ezen túl a szimulációs kódokban számos kisebb módosítást is tettem valamint több a kiértékeléshez szükséges programot fejlesztettem illetve elkezdtem a csoport számítógépes klaszterének építését.

Célkitűzések

A foszfor (P) a SiC egyik tipikus *n*-típusú adaléka. Elméleti számítások megmutatták, hogy magas hőmérsékletű növesztés esetén a sekély P-donor oldékonysága elérheti a 10²¹ cm⁻³-es határt [1]. Ezzel szemben, fizikai gőzleválasztással növesztett mintákban, a P-donor legnagyobb mért koncentrációja nem haladta meg a 10¹⁷ cm⁻³-es határt [2]. Wang és munkatársai behatóan vizsgálták a SiC foszforadalékolását kémiai gőzleválasztással (CVD) növesztett mintákban [3]. Ők is azt találták, hogy a szabad töltéshordozók koncentrációja nem lépi túl a 10¹⁷ cm⁻³-es határt. Azt találták, hogy a P-donor koncentrációját nem lehetett a rácsversenyzéses

növesztéssel jól befolyásolni. Sőt, magasabb szén/szilícium (C/Si) arány esetén a P-donor koncentrációja kisebb lett, mint alacsony C/Si aránynál. Azt feltételezték, hogy a hidrogén (H), hasonlóan a bór esetéhez, befolyásolja a foszfor beépülését, így magyarázva a rácsversenyés növesztés ellentmondásos eredményét [3]. Annak érdekében, hogy magyarázatot tudjak adni az előbb említett kísérleti megfigyelésekre kiszámítottam a CVD növesztés során releváns foszforral kapcsolatos hibák (P_{Si} , P_C , P_{Si+H} , P_{C+H} és a P pár) elektronszerkezetét és koncentrációját

Az alumínium (Al) a SiC egyik tipikus *p*-típusú adaléka atomja [4], amelyet implantációval juttatnak a kristályba. Mélynívó spektroszkópia (DLTS) és elektron paramágneses rezonancia (EPR) mérések több alumíniumhoz köthető sekély és mély szintet tártak föl [5–7] magas hőmérsékleten (1700 °C) hőkezelt alumíniummal implantált mintákban [8]. Besugárzott mintákban a könnyen diffundáló szén intersticiálisok is keletkeznek. Elméleti számítások megmutatták, hogy a szén intersticiálisok és a bór stabil komplexumokat hoznak létre [9, 10]. Hasonló komplex képződésre lehet számítani az alumíniummal implantált mintákban is az Al és a C atomok között. Számításokkal megvizsgáltam az alumínium és a szén intersticiálisok valamint a szén vakancia által létrehozott lehetséges hiba komplexumokat annak érdekében, hogy a kísérletekben mért centrumok eredetére magyarázatot adjak.

Implantáció során nemcsak szén, de szilícium intersticiálisok is keletkeznek. Kísérleti mérések és elméleti számítások [11] azt mutatták, hogy a szilícium intersticiálisok fontos szerepet játszanak a besugárzott SiC mintákban létrejövő hibákban. Fotolumineszcencia (PL) mérésekből kiderült, hogy hőkezelés után is maradnak ilyen szilíciummal kapcsolatos hibák. Ezek közül a két leghíresebb centrum az abc vonalak [12, 13] és a D_I centrum [12, 14–19]. Számításokkal megvizsgáltam a szén és szilícium intersticiálisok által létrehozott legkisebb klasztereket annak érdekében, hogy tisztázzam az ismeretlen centrumok eredetét.

A SiC rendelkezik azzal a fontos tulajdonsággal, hogy természetes oxidja a szilíciumdioxid (SiO_2). Ez fontos tulajdonság a SiC-alapú MOS (metal-oxide-semiconductor) eszközök számára. A szilícium technológiában szokásos termikus oxidáció alkalmazása során a keletkező határfelületi hibák koncentrációja (D_{it}) túl magas. Az ezt alkotó mély szinteket a határfelületen jelenlévő szén többletnek, míg a vezetési sávél közelében lévő lassú elektron csapdákat (NIT) a felülethez közeli oxidbeli hibáknak tulajdonítják. A szokásos hidrogén passziváció nem csökkenti a koncentrációjukat [20], azonban jelentős javulás érhető el nitrogén alkalmazásával, akár az oxidáció közben [21–23], akár az utólagos hőkezelés során [22–27]. Elméleti számítások megmutatták, hogy a D_{it} domináns részét nem intrinszik hibák adják. A lassú elektron csapdák kettős kötésű szén dimerek ($C_O = C_O$) az oxidban, míg a mély szintek szén tartalmú hibák ($C_i = C_i$ és $(C_i)_C$) a határfelületen [28, 29]. Számításokkal megvizsgáltam ezen szénalapú hibák nitrogén általi passzivációját a $4H$ -SiC/ SiO_2 határfelületen annak érdekében, hogy az atomi nitrogén és az NO molekula hatását tisztázzam. A számítások alapján meghatároztam a passziváció lehetséges reakcióútvonalait is.

Új tudományos eredmények (Tézispontok)

1. Foszfor adalékolás kémiai gőzleválasztással növesztett SiC mintákban

- (a) Megmutattam, hogy a legnagyobb koncentrációban jelenlevő foszfor hiba a sekély P-donor, a P_{Si} , melynek koncentrációja nem lépi túl a 10^{17} cm^{-3} -es határt a tipikus CVD körülmények között. A második legnagyobb koncentrációban jelenlevő hiba a mélyebb P-donor, a P_C , melynek koncentrációja egy nagyságrenddel kisebb. Ezen hibák képződési energiáinak a különbsége nem függ a foszfor kémiai potenciáljától, ezért a koncentrációk különbsége állandó kell legyen bármilyen kvázi-egyensúlyi CVD növesztés során. Megmutattam, hogy a többi foszforral kapcsolatos hiba ($P_{Si} + H$, $P_C + H$ és a P pár) koncentrációja jóval kisebb, 10^{10} cm^{-3} alatti, ezért csak a P_{Si} járul hozzá jelentősen a szabad töltéshordozók koncentrációjához a foszforral adalékolt, növesztett SiC mintákban. [T1, T6]
- (b) Megmutattam, hogy a $P_{Si}+H$ és a P_C+H hibákban a hidrogén atom a foszfor atomok mögött nem kötő pozícióban helyezkedik el. Mindkét hiba elektromosan inaktív nem rendelkezik szintekkel a SiC tiltott sávjában. A hidrogén intersticiális (H_i^-) és a foszfor hibák (P_{Si}^+ és P_C^+) által létrehozott komplexek kötési energiái sorrendben 0.3-0.5 eV és 0.1-0.3 eV, ezért ezek a hibák már viszonylag alacsony hőmérsékleten disszociálnak, így nem várható, hogy a hidrogén passziválja a foszfor donorokat. [T1, T6]
- (c) A rácsversenyzéses adalékolás ellentmondásos eredményeinek megmagyarázására egy modellt javasoltam. A magasabb C/Si arány alkalmazása (több C_3H_8 molekula a gáztérben) ugyan több szilícium vakancia, és így a P_{Si} hiba létrejöttének kedvez, azonban ez az effektus kompenzálódhat a foszfor kémia potenciáljának közvetett változásával, amely megakadályozza a foszfor további beépülését. Végeredményben a P_{Si} koncentráció, és így a szabad töltéshordozók koncentrációja, kevesebb lehet nagyobb C/Si arány mellett, mint kisebb C/Si aránynál. [T1, T6]

2. Alumíniummal kapcsolatos hibák 4H-SiC-ban

- (a) Megmutattam, hogy az alumínium akceptor (Al_{Si}) stabil komplexumot hozhat létre két szén intersticiállissal és stabil komplexumot hoz létre a szénvakanciával. Előbbi kötési energiája 5.8 eV, utóbbié 0.5 eV (a szén vakancia diffúziós energiagátja 4 eV). Továbbá megmutattam, hogy az alumínium intersticiális stabil és metastabil komplexumokat hoz létre a szén intersticiálisokkal. Ezek a hibák mind mély szinteket hoznak létre a 4H-SiC tiltott sávjában. Nagy dózisban implantált mintákban az $Al_{Si}(C_i)_2$ hiba is létrejöhet, amely egy termikusan nagyon stabil, $E_V + 1.3 \text{ eV}$ -nál lévő mély szinttel rendelkező, hiba. Ez a hiba lehet az egyik oka a sekély Al akceptor részleges aktivációjának. [T2, T7]

- (b) Számításaim alapján megállapítottam, hogy az $E_V + 0.37$ eV-nál lévő alumíniummal kapcsolatos szint eredetére a Matsuura által javasolt $Al_{Si}V_C$ modell [30] nem lehet jó, mivel ennek a hibának a betöltési szintjei jóval magasabban $E_V + 1.5-1.6$ eV-nál vannak. Ezek a szintek azonban közel vannak az 1.70 ± 0.1 eV-nál lévő A3-nak nevezett DLTS szinthez [8]. Ehhez a szinthez ezt a hibát, mint lehetséges modellt javaslom. Az A3 centrum kiterjedt jele a (+/0) és (0/-) betöltési szintek feloldatlanságával magyarázható. Ezen túl ez a hiba is felelős lehet a sekély Al akceptor részleges aktivációjáért. [T2, T7]
- (c) Kiszámítottam az alumínium és a szén intersticiális által létrehozott stabil és metastabil hibák kötési energiáit és betöltési szintjeit. A (2+ / +) és a (3+ / 2+) betöltési szintek $E_V + 1.2$ eV körül vannak. Ezt a hibát az A1 és A2 DLTS centrumok ($E_V + 0.82$ eV és $E_V + 1.02$ eV) lehetséges modelljének javaslom. Azonban a kiszámított kötési energia (1.9 eV) nem teljesen magyarázza meg ezen centrumok nagy termikus stabilitását. Az egyértelmű azonosításhoz több információra van szükség az A1 és A2 centrumok természetét illetően [8]. Továbbá megmutattam, hogy ez a hiba egy újabb szén intersticiális foghat be és egy termikusan nagyon stabil hibát, az $Al_i(C_i)_2$ komplexumot hozza létre. [T2, T7]

3. Kis szilícium klaszterek 4H-SiC-ban

- (a) Első alkalommal én vizsgáltam meg *ab initio* számításokkal az izolált szilícium intersticiális (Si_i) 4H-SiC-ban. Megmutattam, hogy *p*-típusú 4H-SiC-ban az Si_i hiba 4+ töltésállapotban van a rács üres részén szén atomokkal körbevett pozícióban, hasonlóan a 3C-SiC-beli esethez. Két közel azonosan stabil struktúrát (kübös, hexagonális) találtam *n*-típusú 4H-SiC-ban ahol az Si_i semleges. A köbös konfigurációban az Si_i *split-interstitial* pozícióban van ahol C_{1h} szimmetriával rendelkezik. A hexagonális helyen az Si_i a rács üres részén van szénatomokkal körülvéve. Mindkét konfiguráció mély szintekkel rendelkezik melyek a szilícium intersticiálisra vannak lokalizálva. A hexagonális struktúra negatív-U tulajdonsággal rendelkezik az ehhez tartozó (2+ / 0) betöltési szint $E_V + 2.3$ eV-nál van. [T4, T9]
- (b) Megvizsgáltam a szilícium intersticiálisok által létrehozott legkisebb hiba komplexumokat is. Két közel azonosan stabil (kübös és hexagonális) és négy metastabil változatot találtam. A köbös és a hexagonális struktúra is elektromosan aktív, négy betöltött szinttel rendelkezik a 4H-SiC tiltott sávjában, amelyek az Si_i atomokra vannak lokalizálva. A kiszámított kötési energiák alapján a hibák megbecsült disszociációs hőmérséklete 1000 °C és 1300 °C közé adódott. Ezzel bizonyítani tudtam, hogy a szilícium intersticiálisok valóban emittálódnak ilyen klaszterekből és részt vehetnek a D_I PL centrum létrehozásában 1000 °C-nál nagyobb hőmérsékleten végzett hőkezelések során. [T4, T9]

- (c) A kísérleti azonosítás megkönnyítése érdekében kiszámoltam a lokális rezgési módusokat. Több új fonon módus jelent meg a fonon tiltott sávban az $\text{Si}_i\text{-Si}_i$ kötés miatt. Csoportelméleti megfontolások alapján meghatároztam azokat a módusokat amelyek PL folyamathoz köthetők. Ezek a fonon tiltott sávban illetve a fonon sáv feletti módusok PL mérésekkel kimérhetők. Később Prof. Steeds valóban mért olyan centrumokat, amelyeket a vizsgált hibákkal lehet összefüggésbe hozni. [T4, T9]
- (d) Megvizsgáltam a szén és szilícium intersticiális által alkotott legegyszerűbb komplexumokat is. Egy stabil és hat metastabil változatot találtam. A legstabilabb struktúra hexagonális helyen tartalmazza az Si_i -t és a C_i -t. Ennek a hibának a kiszámított kötési energiája 4.3 eV, ami nagy termikus stabilitást jelent. Ez a hiba is elektromosan aktív mély szintekkel rendelkezik a $4H$ -SiC tiltott sávjában, amelyek a C_i és az Si_i atomok környékére vannak lokalizálva. Ez a hiba negatív-U tulajdonsággal rendelkezik a $E_V + 2.0$ eV-nál lévő $(2+/0)$ betöltési szinttel. Besugárzott mintákban az előbbi hibákkal együtt ez a hiba is létrejöhet. A kísérleti azonosítás megkönnyítése érdekében kiszámítottam a betöltési szinteket és a lokális rezgési módusokat ^{13}C izotóp helyettesítés esetén is. [T4, T9]

4. A $4H$ -SiC/SiO₂ határfelület hibáinak nitrogén passzivációja

- (a) Megmutattam, hogy az nitrogén-monoxid (NO) molekula disszociációja két egymással versengő reakcióban történhet. A domináns reakcióban határfelületi nitrogén keletkezik (N_{if}) és intersticiális oxigén (O_i) jut az oxidba. A kevésbé domináns reakcióban a határfelület nitrogén adalékolása történik N_C hiba formájában és CO molekula jut az oxidba. A vizsgált Fermi energia tartományban ezen reakciók energianyeresége sorrendben 3.0-3.9 eV és 2.6-2.9 eV közé esik. [T5, T10]
- (b) Megmutattam, hogy az NO molekulák két egymással versengő reakcióban hatnak kölcsön a határfelületi szén dimerekkel. A domináns reakcióban a nitrogén, nitrogén-szén dimer ($\text{N}_i = \text{C}_i$) formájában épül be és CO molekula jut az oxidba. A kevésbé domináns reakcióban határfelületi oxigén és szén intersticiális keletkezik és CN molekula jut az oxidba. A vizsgált Fermi energia tartományban ezen reakciók energianyeresége sorrendben 3.7-4.0 eV és 2.5-3.1 eV. Mindkét reakció meggátolja, hogy a szén dimerek kialakuljanak a határfelületen és az oxidba növe NIT-ként viselkedjenek. Megmutattam továbbá, hogy az NO molekulából disszociált nitrogén atom nitrogén beépüléssel vagy szén intersticiális létrehozásával alakítja át a szén dimereket. Ezen reakciók energianyeresége sorrendben 1.6-1.9 eV és 1.4-1.7 eV. Ez megmagyarázza, hogy miért hatásos a nitrogén plazma vagy az oxidáció előtti nitrogén implantáció is. [T5, T10]
- (c) Megmutattam, hogy az oxigén molekulából disszociált határfelületi oxigén (O_{if}) reakcióba lép az NO molekulával illetve az N_i hibával és a határfelület sztöchiomet-

rikus oxidációját végzi el miközben CN molekula jut az oxidba. A reakció energianyeresége 3.5 eV körül van. Az eredmények alapján meg tudtam magyarázni a nitridáció lényegét: a nitrogén az oxigén molekulával együtt elvégzi a határfelület sztöchiometrikus oxidációját eltávolítva a határfelületen lévő szén többletet még mielőtt ebből a káros szén dimerek kialakulnának. [T5, T10]

A tézispontokhoz tartozó referált cikkek

[T1] **Doping of phosphorus in chemical-vapor-deposited silicon carbide layers: A theoretical study**

T. Hornos, A. Gali, R. P. Devaty, and W.J. Choyke

Appl. Phys. Lett. **87** 212114 (2005)

[T2] **Ab initio supercell calculations on aluminum-related defects in SiC**

A. Gali, T. Hornos, N. T. Son, E. Janzén, and W. J. Choyke

Phys. Rev. B **75** 045211 (2007)

[T3] **Activation of shallow boron acceptor in C/B co-implanted silicon carbide: A theoretical study**

A. Gali, T. Hornos, R. P. Devaty, N.T. Son, E. Janzén, and W.J. Choyke

Appl. Phys. Lett. **86** 102108 (2005)

[T4] **Theoretical Study on Silicon-clusters in SiC**

T. Hornos, N. T. Son, E. Janzén, and A. Gali

Phys. Rev. B **76** 165209 (2007)

[T5] **The mechanism of defect creation and passivation at the SiC/SiO₂ interface**

Péter Deák, Jan M. Knaup, Tamás Hornos, Christoph Thill, Adam Gali and Thomas Frauenheim

J. Phys. D **40** 6242-6253 (2007)

A tézispontokhoz tartozó referált konferenciák

[T6] **A Theoretical Study on Doping of Phosphorus in Chemical Vapor Deposited SiC Layers**

T. Hornos, A. Gali, R. P. Devaty, and W.J. Choyke

Mater. Sci. Forum **527-529** 605-608 (2006)

[T7] **A Theoretical Study on Aluminum-Related Defects in SiC**

T. Hornos, A. Gali, N. T. Son, E. Janzén

Mater. Sci. Forum **556-557** 445-448 (2007)

[T8] **Point Defects and Their Aggregation in Silicon Carbide**

A. Gali, T. Hornos, M. Bockstedte, T. Frauenheim

Mater. Sci. Forum **556-557** 439-444 (2007)

[T9] **New Type of Defects Explored by Theory: Silicon Interstitial Clusters in SiC**

A. Gali, T. Hornos, N. T. Son, and E. Janzén

Mater. Sci. Forum **600-603** 413-416 (2009)

[T10] **The Mechanism of Interface State Passivation by NO**

P. Deák, C. Thill, J. Knaup, T. Frauenheim, T. Hornos, A. Gali

Mater. Sci. Forum **556-557** 541-544 (2007)

Irodalomjegyzék

- [1] M. Bockstedte, M. Mattausch, and O. Pankratov, *Mater. Sci. Forum* **433-466**, 471 (2003).
- [2] K. Semmelroth, F. Schmid, D. Karg, G. Pensl, M. Maier, Greulich-Weber, and J.-M. Spaeth, *Mater. Sci. Forum* **433**, 63 (2003).
- [3] R. Wang, I. B. Bath, and T. P. Chow, *J. Appl. Phys.* **92**, 7587 (2002).
- [4] G. Pensl and W. J. Choyke, *Physica B* **185**, 264 (1993).
- [5] C. Raynaud, K. Ghaffour, S. Ortolland, M.-L. Locatelli, K. Souifi, G. Guillot, and J.-P. Chante, *J. Appl. Phys.* **84**, 3073 (1998).
- [6] M. Gong, S. Fung, C. D. Beling, and Z. You, *J. Appl. Phys.* **85**, 7120 (1999).
- [7] S. A. Reshanov, O. Klettke, and G. Pensl, private communication.
- [8] Y. Negoro, T. Kimoto, and H. Matsunami, *J. Appl. Phys.* **85**, 043709 (2005).
- [9] A. Gali, P. Deák, P. Ordejón, N. T. Son, E. Janzén, and W. J. Choyke, *Phys. Rev. B* **68**, 125201 (2003).
- [10] A. Mattausch, M. Bockstedte, and O. Pankratov, *Mater. Sci. Forum* **457-460**, 449 (2004).
- [11] T. A. G. Eberlein, C. J. Fall, R. Jones, P. R. Briddon, and S. Öberg, *Phys. Rev. B* **65**, 184108 (2002).
- [12] L. Patrick and W. J. Choyke, *Phys. Rev. B* **5**, 3254 (1972).
- [13] T. Egilsson, J. P. Bergman, I. G. Ivanov, A. Henry, and E. Janzén, *Phys. Rev. B* **59**, 1956 (1999).
- [14] W. J. Choyke, *Inst. Phys. Conf. Ser.* **31**, 58 (1977).
- [15] A. Fissel, W. Richter, J. Furthmüller, and F. Bechstedt, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 2512 (2001).
- [16] A. Gali, P. Deák, E. Rauls, N. T. Son, I. G. Ivanov, F. H. C. Carlsson, E. Janzén, and W. J. Choyke, *Physica B* **340**, 175 (2003).
- [17] M. V. B. Pinheiro, E. Rauls, U. Gerstmann, S. Greulich-Weber, H. Overhof, and J.-M. Spaeth, *Phys. Rev. B* **70**, 245204 (2004).
- [18] M. Posselt, F. Gao, and W. J. Weber, *Phys. Rev. B* **73**, 125206 (2006).
- [19] T. A. G. Eberlein, R. Jones, S. Öberg, and P. R. Briddon, *Phys. Rev. B* **74**, 144106 (2006).
- [20] W. J. Cho, R. Kosugi, K. Fukada, K. Arai, and S. Suzuki, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 1215 (2000).

- [21] V. V. Afanas'ev, A. Stesmans, F. Ciobanu, G. Pensl, K. Y. Cheong, and S. Dimitrijević, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 568 (2003).
- [22] P. T. Lai, S. Chakraborty, C. L. Chan, and Y. C. Cheng, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 3744 (2001).
- [23] G. I. Gudjonsson, H. O. Ólafsson, and E. O. Sveinbjörnsson, *Mater. Sci. Forum* **457-460**, 1425 (2004).
- [24] H. F. Li, S. Dimitrijević, H. B. Harrison, and D. Sweatman, *Appl. Phys. Lett.* **70**, 2028 (1997).
- [25] G. Y. Chung, C. C. Tin, J. R. Williams, K. McDonalds, M. DiVentra, S. T. Pantelides, L. C. Feldman, and R. A. Weller, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 1713 (2000).
- [26] P. Jamet, S. Dimitrijević, and P. Tanner, *Appl. Phys. Lett.* **90**, 5058 (2001).
- [27] P. Jamet, S. Dimitrijević, and P. Tanner, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 323 (2001).
- [28] J. Knaup, P. Deák, T. Frauenheim, A. Gali, Z. Hajnal, and W. J. Choyke, *Phys. Rev. B* **71**, 235321 (2005).
- [29] J. Knaup, P. Deák, T. Frauenheim, A. Gali, Z. Hajnal, and W. J. Choyke, *Phys. Rev. B* **72**, 115323 (2005).
- [30] H. Matsuura, S. Kagamihara, Y. Itoh, T. Ohshima, and H. Itoh, Poster at International Conference on Materials for Advanced Technologies (ICMAT2005), 3-8 July 2005, Singapore, 2005.