

# Рентгеновские спектры и электронная структура алюминия в вюрцитных кристаллах $\text{AlN}$ и $\text{B}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$

© В.В. Илясов, Т.П. Жданова, И.Я. Никифоров

Донской государственный технический университет,  
344010 Ростов-на-Дону, Россия

E-mail: viily@mail.ru

(Поступила в Редакцию 5 апреля 2005 г.)

Изучены электронная энергетическая структура и рентгеновские спектры алюминия в вюрцитных кристаллах  $\text{B}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$  в сопоставлении с бинарным  $\text{AlN}$ . Предложена интерпретация основных и впервые выявленных особенностей на рентгеновских  $L_{\text{II,III}}$ -спектрах эмиссии и поглощения.

PACS: 72.80.Ey, 71.20.Nr, 61.10.Nz

Повышенный интерес к широкозонным полупроводниковым кристаллам  $\text{B}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$  обусловлен их широким использованием в оптических и электронных устройствах, для которых одним из важнейших направлений исследований является миниатюризация. Это возможно при более углубленном (на так называемом „спиновом уровне“) рассмотрении полупроводниковых материалов [1]. Однако в выполненных в последнее время [2,3] расчетах не проводится детального анализа особенностей их электронной энергетической структуры. Обращает на себя внимание отсутствие экспериментальных рентгеновских спектров эмиссии (XES) и поглощения алюминия в кристаллах  $\text{B}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ , за исключением данных ранней работы Фомичева [4], посвященной изучению энергетической структуры алюминия в бинарных  $\text{AlN}$  и  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , а также работы [5], посвященной изучению межфазовой границы пленки  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , синтезированной на кремнии. В недавней работе [6] нами проводилась интерпретация особенностей  $\text{Al}L_{\text{II,III}}$  XES и  $\text{Al}L_{\text{II,III}}$ -края в вюрцитном кристалле  $\text{AlN}$  на основе квантово-механических расчетов их электронной структуры для азимутального квантового числа  $l = 0, 1$  в интервале энергий от 0.02 до 3 Ry с постоянным шагом 0.02 Ry.

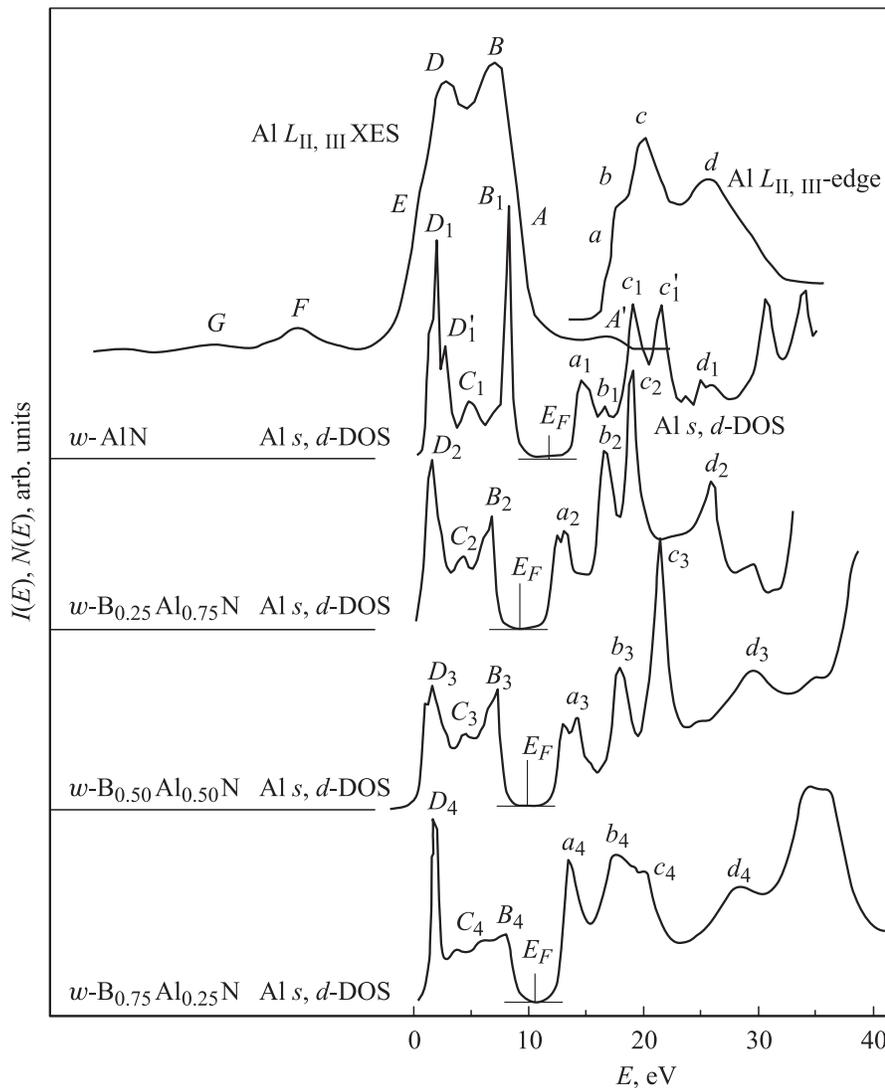
В работе [7] отмечалось возникновение  $3d$ -состояний Al в кубических кристаллах  $\text{Al}_x\text{Si}_{1-x}\text{C}$ , что связывалось с понижением энергии  $d$ -состояний в карбидной системе кремния. Такая возможность для алюминия показана в работе [8] на основе квантово-механического расчета электронной структуры. В связи с этим нами в рамках теории многократного рассеяния выполнены расчеты электронной структуры для азимутального квантового числа  $l = 0, 1, 2$  в кристаллах  $\text{B}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$  ( $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75$ ), что позволит дать новую интерпретацию природы тонкой структуры рентгеновских спектров.

Электронная структура  $\text{B}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$  изучена с помощью кластерной версии приближения локального когерентного потенциала [9,10]. Были проведены расчеты  $s$ -,  $p$ - и  $d$ -состояний электронов атомов алюминия. Согласно правилам дипольных переходов, форма  $\text{Al}L_{\text{II,III}}$ -полос испускания и  $\text{Al}L_{\text{II,III}}$ -края поглощения должна коррелировать с плотностью  $s$ - и  $d$ -состояний алюминия.

На рисунке приведены локальные парциальные плотности состояний (PDOS)  $s$ ,  $d$ -электронов в вюрцитных кристаллах нитрида алюминия и  $\text{B}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ , которые иллюстрируют особенности их энергетического спектра, в сопоставлении с эмиссионной полосой алюминия  $\text{Al}L_{\text{II,III}}$  XES и  $L_{\text{II,III}}$ -спектром квантового выхода алюминия. Совмещение рассчитанных энергетических спектров Al  $s$ ,  $d$ -DOS кристаллов  $\text{B}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$  проводилось по пику  $D$ . Анализ данных рисунка показывает, что статистический вес DOS  $d$ -электронов Al равноценен вкладу  $s$ -состояний в формирование эмиссионной  $L_{\text{II,III}}$ -полосы. В частности, пики максимальной интенсивности  $B$  и  $D$  кристалла  $w\text{-AlN}$  могут трактоваться как основные состояния, относящиеся к так называемой верхней части валентной полосы (VBI). Как показали наши расчеты, пик  $B_1$  с энергией связи 3.4 eV определяется в основном вкладами  $d$ -состояний, а пик  $D_1$  с энергией связи 9.7 eV — вкладами  $s$ -состояний электронов атомов алюминия. Энергетическое расстояние между пиками  $B_1$  и  $D_1$  (6.2 eV для бинарного кристалла по данным настоящей работы) уменьшается почти на 1 eV при снижении содержания алюминия в кристаллах  $\text{B}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$  ( $x = 0.25, 0.5$ ).

Обнаруженные впервые особенности  $C_1$  и  $D'_1$  энергетического спектра не выявились в эксперименте из-за ограниченной разрешающей способности используемой аппаратуры (0.7 eV) [4], они представлены на эмиссионном спектре обобщенным пиком  $D$  и низкоэнергетическим наплывом пика  $B$ . Мы полагаем, что на экспериментальной кривой  $\text{Al}L_{\text{II,III}}$  XES  $s$ -состояния алюминия формируют в основном особенности  $E$ ,  $D$ , а  $d$ -состояния могут определять пик  $B$  в более высокоэнергетической области, что не противоречит физическим представлениям.

При значительном увеличении содержания бора в кристалле  $\text{B}_{0.75}\text{Al}_{0.25}\text{N}$  наблюдается снижение энергии связи состояний (2.6 eV), формирующих пик  $B_4$ , что проявляется в уменьшении почти в 2 раза интенсивности этого пика. Данное обстоятельство, а также возрастание ширины полосы  $E_g$  в ряду  $\text{AlN}-\text{B}_{0.25}\text{Al}_{0.75}\text{N}-\text{B}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{N}-\text{B}_{0.75}\text{Al}_{0.25}\text{N}$  должны приводить к изменению электродинамических свойств данных кристаллов.



Спектры  $AlL_{II,III}$  XES и  $AlL_{II,III}$ -края в  $w$ -AlN [4], локальные парциальные плотности  $s, d$ -состояний алюминия (на один атом) в вюрцитных кристаллах  $B_xAl_{1-x}N$  (результаты нашего расчета).

Энергетическая структура  $L_{II,III}$ -края алюминия в вюрцитных кристаллах  $B_xAl_{1-x}N$  ( $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75$ ), как следует из наших расчетов, формируется свободными  $3d$ - и  $4s$ -состояниями электронов атомов алюминия, представляющими собой узкую  $\pi$ -зону (пик  $a_1$ ) и широкие  $\sigma$ -зоны (пики  $c_1$  и  $d_1$ ) свободных состояний (аналогично представлениям авторов работы [11]). Энергетические расстояния между основными пиками  $c$  и  $d$   $L_{II,III}$ -края и пиками  $c_1$  и  $d_1$  расчетной кривой  $s, d$ -DOS электронов алюминия в бинарном AlN совпадают, что дает основание для интерпретации других особенностей. Как мы полагаем, пики  $a_1$  и  $b_1$  не разрешаются на кривой  $AlL_{II,III}$ -края и представлены обобщенным наплывом  $a, b$ . При возрастании концентрации бора в кристаллах  $B_xAl_{1-x}N$  плотность свободных  $3d$ -состояний электронов, формирующих пик  $a_4$ , возрастает почти в 2 раза, что, на наш взгляд, должно приводить к изменению электронных и оптических свойств кристаллов.

Таким образом, в настоящей работе показана динамика перестройки электронной энергетической структуры алюминия, обусловленная взаимодействием электронной подсистемы алюминия с электронными конфигурациями бора и азота в кристаллах  $B_xAl_{1-x}N$  ( $x = 0-0.75$ ). Предложена интерпретация основных и впервые выявленных особенностей на рентгеновских спектрах. На основе выполненных расчетов можно утверждать, что пики  $B$  и  $D$  на  $AlL_{II,III}$  XES формируются в основном  $s$ - и  $d$ -состояниями алюминия соответственно. Установлено, что по мере уменьшения содержания алюминия в кристаллах  $B_xAl_{1-x}N$  относительная интенсивность пика  $B_4$ , обусловленная  $d$ -состояниями Al, уменьшается, а пика  $a_4$  возрастает, что должно приводить к изменению электронных и оптических свойств кристаллов. Предложенная интерпретация основных и впервые выявленных особенностей на  $AlL_{II,III}$  XES и  $AlL_{II,III}$ -края в вюрцитном кристалле AlN не противоречит экспериментальным данным и объясняет приро-

ду их формирования, что представляется нам важным для прогнозирования свойств новых полупроводниковых кристаллов на его основе.

## Список литературы

- [1] M. Oestreich. *Nature* **402**, 735 (1999).
- [2] Jin-Cheng Zheng, Hui-Qiong Wang, C.H.A. Huan, A.T.S. Wee. *J. Phys.: Cond. Matter* **13**, 5295 (2001).
- [3] V.C. Lee. *J. Korean Phys. Soc.* **35**, 6, 516 (1999).
- [4] В.А. Фомичев. *ФТТ* **10**, 3, 763 (1968).
- [5] А.С. Шулаков, А.П. Брайко, С.В. Букин, В.Е. Дрозд. *ФТТ* **46**, 6, 1111 (2004).
- [6] В.В. Илясов, Т.П. Жданова, И.Я. Никифоров. *ФТТ*, в печати.
- [7] В.В. Илясов, Т.П. Жданова, И.Я. Никифоров, А.В. Илясов. *ЖСХ* **42**, 1, 120 (2001).
- [8] В.В. Немешкаленко, В.Г. Алёшин. *Электронная спектроскопия кристаллов*. Наук. думка, Киев (1983). 335 с.
- [9] I.Ya. Nikiforov, V.V. Pyasov, N.Yu. Safontzeva. *J. Phys. C* **7**, 6035 (1995).
- [10] Т.П. Жданова, В.В. Илясов, И.Я. Никифоров. *ФТТ* **43**, 8, 1388 (2001).
- [11] А.С. Виноградов, С.В. Некипелов, А.А. Павлычев. *ФТТ* **33**, 3, 896 (1991).