

05

Упругие свойства нитридов галлия и алюминия

© С.Ю. Давыдов, А.В. Соломонов

С.-Петербургский государственный электротехнический университет

Поступило в Редакцию 12 апреля 1999 г.

На основании модели Китинга рассчитаны упругие постоянные GaN и AlN для структур сфалерита и вюрцита. Для нитрида галлия и алюминия кубической структуры получены соответственно следующие значения упругих постоянных (в GPa): $C_{11} = 325$ и 322 , $C_{12} = 142$ и 156 , $C_{44} = 147$ и 138 .

Вследствие постоянно возрастающего интереса к нитридам галлия и алюминия и одновременно ввиду недостатка экспериментальной информации об их свойствах [1] теоретические оценки физических характеристик этих соединений представляют несомненный интерес. Такие оценки, однако, должны базироваться на теории, хорошо зарекомендовавшей себя при описании других полупроводниковых кристаллов, что дает определенную гарантию их достоверности. При описании упругих свойств кубических полупроводниковых кристаллов наилучших результатов удалось добиться в рамках феноменологической теории Китинга (см., например, [2–4] и ссылки, приведенные там), которую мы здесь и будем использовать.

Мы будем измерять упругие постоянные в единицах $C_0 = e^2/d^4$, где e — заряд электрона, d — расстояние между ближайшими соседями. В соответствии с теорией Китинга безразмерные упругие постоянные кубического кристалла $c_{ij} = C_{ij}/C_0$ имеют вид

$$c_{11} = (\alpha + 3\beta)/4, \quad c_{12} = (\alpha - \beta)/2, \quad c_{44} = \alpha\beta/(\alpha + \beta), \quad (1)$$

где α и β — безразмерные силовые константы центрального взаимодействия соответственно. (Отметим, что безразмерные силовые константы переходят в размерные, введенные Китингом, при домножении первых на $C_0 d/\sqrt{3}$).

Переход от упругих постоянных кристаллов со структурой сфалерита к упругим постоянным вюрцитной модификации описан в работе [5].

Воспользовавшись результатами работы [5] и выражениями (1), получим для безразмерных упругих постоянных гексагональных кристаллов следующие выражения:

$$\begin{aligned}
 c_{11} &= (\alpha + \beta)/4 + \alpha\beta/(\alpha + \beta) - D, \\
 c_{33} &= (3\alpha + \beta)/12 + 4\alpha\beta/3(\alpha + \beta), \\
 C_{44} &= \beta[2\alpha + \beta - (\alpha - \beta)^2/(5\alpha + \beta)]/3(\alpha + \beta), \\
 c_{66} &= \beta(5\alpha + \beta)/6(\alpha + \beta) - D, \\
 c_{12} &= (3\alpha - \beta)/12 - \alpha\beta/3(\alpha + \beta) + D, \\
 C_{13} &= (3\alpha + \beta)/12 - 2\alpha\beta/3(\alpha + \beta), \\
 D &\equiv \beta(\alpha - \beta)^2/6(\alpha + \beta)(2\alpha + \beta).
 \end{aligned} \tag{2}$$

Таким образом, с помощью лишь двух силовых констант можно описать не только три упругие постоянные кубических кристаллов, но и шесть постоянных гексагональных кристаллов.

Полученные выражения можно использовать двояким образом. Если из эксперимента известны упругие постоянные для кубического кристалла, то, определяя константы α и β по формулам (1), можно найти значения C_{ij} гексагонального кристалла. Более того, можно вычислить C_{ij} для любого соотношения вюрцитной и сфалеритной фаз в смешанном кристалле [6]. Если же, наоборот, измерены упругие постоянные гексагонального кристалла, то, определяя по формулам (2) константы α и β , можно рассчитать упругие постоянные кубического кристалла.

Недавно были измерены значения C_{ij} для гексагонального нитрида галлия [7]. Выбирая для подгонки значения упругих постоянных C_{13} , C_{33} , найдем следующие значения безразмерных упругих констант: $\alpha = 4.61$, $\beta = 1.12$. Экспериментальные и расчетные значения C_{ij} для GaN представлены в таблице. Максимальное отклонение ($\sim 10\%$) наблюдается для C_{12} . Для кубических кристаллов с определенными выше значениями силовых констант получим следующие значения упругих постоянных (в GPa):

$$C_{11} = 325, \quad C_{12} = 142, \quad C_{44} = 147.$$

Используя результаты работы [6], можно показать, что при переходе от структуры с вюрцита к структуре сфалерита упругая постоянная C_{11} возрастает приблизительно на 2%, C_{44} и C_{66} увеличиваются на 5%, C_{12}

Экспериментальные и теоретические значения упругих постоянных (в GPa) для гексагональных кристаллов GaN и AlN

		C_{11}	C_{33}	C_{44}	C_{66}	C_{12}	C_{13}
GaN	Эксп.	390	398	105	123	145	106
	Теор.	373	398	105	123	130	106
AlN	Эксп.	345	395	118	–	125	120
	Теор.	369	395	96	112	145	120

убывает на 5%. В таблице также представлены данные для AlN. Как и в случае GaN, для определения силовых констант использовались упругие модули C_{13} , C_{33} , что дало: $\alpha = 4.36$, $\beta = 0.92$. Отметим, что экспериментальные результаты для нитрида алюминия взяты из работы [8], где исследовались поликристаллические пленки. Неудивительно поэтому, что расхождение экспериментальных и расчетных данных здесь гораздо больше: $\sim 7\%$ для C_{11} , 16% для C_{12} и 19% для C_{44} . Для кубических кристаллов нитрида алюминия (в GPa) имеем: $C_{11} = 322$, $C_{12} = 156$, $C_{44} = 138$.

Интересно отметить, что упругий модуль сжатия кубического кристалла $B = (C_{11} + 2C_{12})/3$ равен 203 GPa для GaN и 211 GPa для AlN. Расчет из первых принципов дает значение 195 GPa для обоих кристаллов [9], что хорошо согласуется с нашими данными. (Отметим, что для гексагональных кристаллов в [9] получено значение B , также равное 195 GPa, тогда как по данным [7] $B = 210$ GPa. Поэтому завышенное значение полученного нами модуля сжатия по сравнению со значением, вычисленным в [9], представляется закономерным).

В заключение отметим следующее. Для оценок упругих характеристик полупроводниковых кристаллов феноменологический подход Китига по-прежнему дает наиболее точные результаты. Расчеты из первых принципов крайне трудоемки, а использование разнообразных методов сильной связи (см., например, [3,4,10–12]), хотя и позволяет лучше понять природу упругости, приводит к довольно большим расхождениям с опытом.

Список литературы

- [1] *Proc. 7th Intern. Conf. on Silicon Carbide, III-Nitrides and Related Materials.* Stockholm, Sweden, 1997 / Ed. by G. Pensl, H. Morkoc, B. Monemar, E. Janzen (Trans Tech Publications Ltd, Switzerland, 1998).
- [2] *Никаноров С.П., Кардашов Б.К.* Упругость и дислокационная неупругость кристаллов. М.: Наука, 1985. 250 с.
- [3] *Давыдов С.Ю., Тихонов С.К.* // ФТП. 1996. Т. 30. В. 5. С. 834–839.
- [4] *Давыдов С.Ю., Тихонов С.К.* // ФТП. 1996. Т. 30. В. 7. С. 1300–1303.
- [5] *Martin R.M.* // Phys. Rev. B. 1972. V. 6. N 12. P. 4546–4553.
- [6] *Давыдов С.Ю., Тихонов С.К.* // ФТТ. 1995. Т. 37. В. 7. С. 2221–2223.
- [7] *Polian A., Grimsditch M., Grzegory I.* // J. Appl. Phys. 1996. V. 79. N 6. P. 3343–3344.
- [8] *Добрынин А.В., Казаков И.П., Найдя Г.А.* // Зарубежн. электрон. техн. 1989. В. 4. С. 44–53.
- [9] *Miwa K., Fukumoto A.* // Phys. Rev. B. 1993. V. 48. N 11. P. 7897–7902.
- [10] *Харрисон У.* Электронная структура и свойства твердых тел. М.: Мир, 1983. Т. 1. 382 с.
- [11] *Kitamura M., Harrison W.A.* // Phys. Rev. B. 1991. V. 44. N 15. P. 7941–7946.
- [12] *Kitamura M., Muramatsu S., Harrison W.A.* // Phys. Rev. B. 1991. V. 46. N 3. P. 1351–1357.