

Оптические свойства додекаборида алюминия (α -AlB₁₂) в области окна прозрачности

© В.К. Зайцев, М.И. Федоров, О.А. Голикова, **В.М. Орлов**

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: M.Fedorov@shuvpop.ioffe.rssi.ru

(Поступила в Редакцию 20 февраля 2001 г.)

На монокристаллических образцах α -AlB₁₂ в широкой спектральной области (0.6–25 μ m) измерен коэффициент поглощения при $T = 300$ К. В области окна прозрачности (3–6 μ m) коэффициент поглощения измерен в интервале температур 165–650 К. На основе анализа полученных экспериментальных данных сделано заключение об особенностях энергетического спектра локальных состояний в запрещенной зоне α -AlB₁₂. Установлено, что вблизи зоны проводимости находится широкая полоса локальных состояний, а на расстоянии 0.11 ± 0.02 eV от верхнего края валентной зоны располагается ловушечный уровень.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 99-02-18035).

Додекаборид алюминия (α -AlB₁₂) является кристаллохимическим аналогом сложной тетрагональной модификации бора. Как и в других модификациях бора и высших боридов, основным наноструктурным фрагментом его кристаллической структуры является икосаэдр (B₁₂). Ранее нами отмечалось, что в монокристаллах α -AlB₁₂ локальные состояния оказывают определяющее влияние на явления переноса и что отсутствие надежных данных по энергетическому спектру локальных состояний значительно затрудняет анализ специфических особенностей, которые проявляются как в слабых, так и в сильных электрических полях [1,2].

В настоящей работе с целью исследования особенностей энергетического спектра локальных состояний в запрещенной зоне в широкой спектральной области (0.6–25 μ m) измерен коэффициент поглощения α монокристаллических образцов α -AlB₁₂ при $T = 300$ К. В области окна прозрачности (3–6 μ m) коэффициент поглощения измерен в интервале температур (165–650 К).

Монокристаллические образцы α -AlB₁₂ получены методом спонтанной кристаллизации из раствора бора в расплаве алюминия в виде пластинок размером $3 \times 5 \times 0.5$ mm [3]. Для достижения необходимой толщины они подвергались механической шлифовке и полировке на алмазной пасте.

Спектральная зависимость коэффициента отражения, необходимая для вычисления коэффициента поглощения в области 2–25 μ m, была представлена нами ранее [4], а коэффициент отражения в области 0.6–2 μ m был принят независимым от длины волны и равным 0.27.

На рис. 1 приведена зависимость коэффициента поглощения от энергии фотона в области 0.05–2 eV при $T = 300$ К для α -AlB₁₂. Для сравнения на этом же рисунке приведены спектры поглощения двух его структурных аналогов MgAlB₁₄ [5] и BeAlB₂₄. Рис. 1 показывает, что вблизи области решеточного поглощения (0.05–0.2 eV) располагается область с относительно малыми коэффи-

циентами поглощения, которая при повышении энергии фотона переходит в широкую полосу, примыкающую к области фундаментального поглощения. Ширина запрещенной зоны, оцененная по началу резкого подъема коэффициента поглощения в высокочастотной области, составляет 1.9 ± 0.2 eV, что находится в хорошем согласии с результатами более ранних исследований [6].

Область поглощения на колебаниях решетки в α -AlB₁₂ рассмотрена нами ранее с точки зрения специфики кристаллической структуры высших боридов и определяющей роли ближнего порядка а формировании колебательных спектров в этих веществах [6]. Рассмотрим область с малыми коэффициентами поглощения. Изотермы коэффициента поглощения, также приведенные на рис. 1, показывают, что поглощение в области окна прозрачности заметно зависит от температуры. Аналогичный эффект наблюдался ранее при исследовании оптических

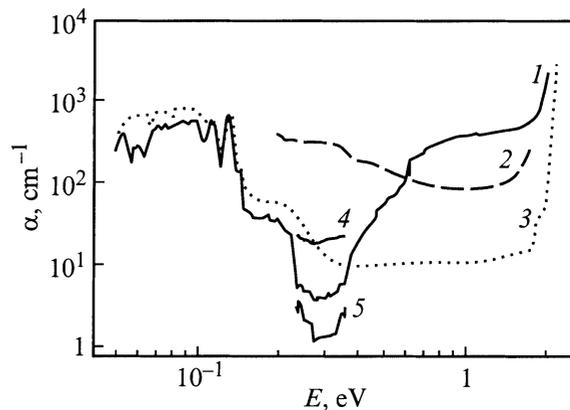


Рис. 1. Зависимость коэффициента поглощения α от энергии фотона E при комнатной температуре для α -AlB₁₂ (1), MgAlB₁₄ (2) и BeAlB₂₄ (3). 4, 5 — коэффициент поглощения α -AlB₁₂ в области 0.2–0.4 eV для температур 580 и 165 К соответственно.

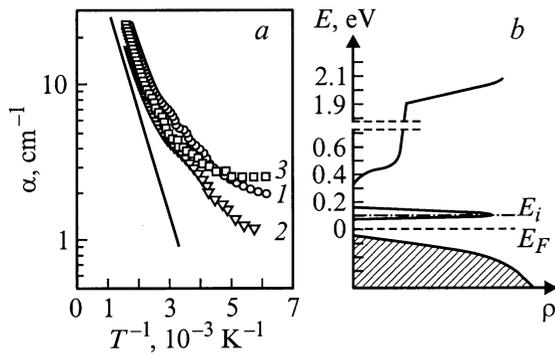


Рис. 2. *a* — зависимость коэффициента поглощения α от обратной температуры для длин волн, равных 5 (1), 4 (2) и 3.5 μm (3); *b* — предполагаемая зависимость плотности состояний ρ от энергии E для $\alpha\text{-AlB}_{12}$.

свойств β -ромбоэдрического бора и объяснялся наличием ловушечного уровня в запрещенной зоне [7]. В этом случае процесс взаимодействия валентного электрона со светом состоит из двух стадий. Сначала электрон из валентной зоны термически возбуждается на ловушечный уровень, а затем квант света забрасывает его в вышележащую зону. При этом коэффициент поглощения $\alpha \sim n_t \sim \exp(-\frac{E_t}{kT})$, где n_t и E_t — концентрация термически возбужденных носителей и энергия ловушечного уровня соответственно. Действительно, рис. 2, *a*, на котором приведены зависимости коэффициента поглощения $\alpha\text{-AlB}_{12}$ от обратной температуры для нескольких длин волн, показывает, что при повышении температуры α асимптотически стремится к прямой линии. Энергия ловушечного уровня, вычисленная по наклону асимптоты, составила 0.11 ± 0.02 eV.

Широкая полоса поглощения, расположенная между областью с малыми коэффициентами поглощения и краем фундаментального поглощения в интервале 0.4–1.9 eV, вероятнее всего, свидетельствует о наличии широкой полосы локальных состояний в запрещенной зоне α -додекаборида алюминия. Необходимо отметить, что энергия ~ 0.4 eV, соответствующая энергии активации носителей из валентной зоны в полосу локализованных состояний, наблюдалась ранее также при исследовании зависимости электропроводности от температуры в примесной области [8].

Вероятный вариант расположения локализованных состояний в запрещенной зоне α -додекаборида алюминия показан на энергетической диаграмме (рис. 2, *b*).

Отдельный интерес представляет природа широкой полосы локализованных состояний вблизи зоны проводимости. В настоящее время трудно что-либо сказать о природе такой широкой полосы локальных состояний. Можно лишь отметить, что эта полоса не связана с наличием посторонних примесей [3], а, скорее всего, обусловлена статистическим характером распределения атомов алюминия по большому числу возможных позиций [9].

Следует отметить, что подобная полоса поглощения не наблюдается в β -ромбоэдрическом боре [7] и в BeAlB_{24} (рис. 1), кристаллическая структура которых более упорядочена [9]. Коэффициент поглощения MgAlB_{14} имеет более высокие значения в рассматриваемой области, по-видимому из-за значительного вклада поглощения на свободных носителях.

Список литературы

- [1] В.К. Зайцев, О.А. Голикова, М.М. Казанин, В.М. Орлов, Э.Н. Ткаленко. ФТП **9**, 11, 2101 (1975).
- [2] О.А. Голикова. УФН **158**, 4, 581 (1989).
- [3] О.А. Голикова, В.К. Зайцев, А.В. Петров, Л.С. Стельбанс, Э.Н. Ткаленко. ФТП **6**, 9, 1724 (1972).
- [4] A.A. Berezin, O.A. Golikova, V.K. Zaitsev, M.M. Kazanin, V.M. Orlov, E.N. Tkalenko. Proc. 12th Int. Conf. of the Phys. of Semiconductors. Stuttgart (1974). P. 291.
- [5] H. Werheit, G. Krach, U. Kuhlmann, I. Higashi, T. Lundström, Y. Yu. Proc. 11th Int. Symp. Boron, Borides and Related Compounds. Tsukuba (1993). JAP Ser. 10, 98; 106 (1994).
- [6] О.А. Голикова, В.К. Зайцев, В.М. Орлов, И.А. Драбкин, И.В. Нельсон, Э.Н. Ткаленко. Бор: получение, структура и свойства. Мецниереба, Тбилиси (1974). С. 44.
- [7] J. Jaumann, H. Werheit. Boron. V. 3 / Ed. T. Niemyski. PWN, Warszawa (1970). P. 227.
- [8] O.A. Golikova, A.A. Berezin, V.K. Zaitsev, M.M. Kazanin, V.M. Orlov, L.S. Stilbans, E.N. Tkalenko. J. Less-Comm. Met. **47**, 129 (1976).
- [9] V.I. Matkovich, J. Economy. Boron and refractory borides / Ed. V.I. Matkovich. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-N.Y. (1977). P. 78; 106.