Диффузия на гетерогранице GaN/AlN: исследование методом EXAFS и расчет методом теории функционала плотности

Александров И.А.¹, Малин Т.В.¹, Вдовин В.И.¹, Журавлев К.С.¹, Pecz B.², Эренбург С.Б.³, Трубина С.В.³, Лебедев Е.В.⁴

¹ Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия

² Institute for Technical Physics and Materials Science, Budapest, Hungary

³ Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия

⁴ ГНПО "Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника", Минск, Беларусь

DOI 10.34077/Semicond2019-153

Множественные квантовые ямы (МКЯ) GaN/AlN перспективны для применения в качестве базовых материалов для светоизлучающих устройств, работающих в ультрафиолетовой спектральной области, высокоскоростных инфракрасных оптических модуляторов и инфракрасных фотоприемников на внутризонных переходах. В данной работе экспериментально и теоретически исследована взаимная диффузия между GaN и AlN в МКЯ GaN/AlN. Проведены расчеты миграционных барьеров и энергий формирования для вакансий алюминия в AlN и вакансий галлия в GaN. Расчеты энергий формирования и миграционных барьеров проводились с использованием теории функционала плотности в пакете программ Quantum Espresso [1]. Расчеты миграционных барьеров проводились методом упругой ленты с забирающимся изображением [2] в приближении обобщенного градиента с функционалом Пердью-Бурке-Эрнзерхофа (PBE) [3]. Энергии формирования вакансий рассчитывались с использованием гибридного функционала HSE [4]. Расчеты проводились в 96-атомной сверхъячейке, интегрирование по зоне Бриллюэна осуществлялось с помощью разбиения $2 \times 2 \times 2$ согласно схеме Монкхорста-Пака. Энергии миграционных барьеров, согласно расчетам, составляют 2.05 эВ для вакансии Ga(3-) в GaN, и 2.33 эВ для вакансии Al(3-) в AlN. Миграционные барьеры для диффузии атомов Ga в AlN и Al в GaN при вакансионном механизме диффузии составляют 1.74 эВ и 2.47 эВ, соответственно. Проведена теоретическая оценка абсолютных значений и температурной зависимости коэффициента взаимной диффузии между GaN и AlN. Атомная структура гетерограниц GaN/AlN и влияние условий роста на степень перемешивания материалов на гетерограницах в квантовых ямах GaN/AlN исследованы экспериментально методами протяженной тонкой структуры рентгеновского поглощения (EXAFS), просвечивающей электронной микроскопии и фотолюминесценции. Структуры с МКЯ GaN/AlN были выращены методом молекулярно-лучевой эпитаксии на (0001) сапфировых подложках с буферным слоем AlN толщиной около 200 нм. Структуры содержат по 30 слоев GaN, покрытых слоями AlN. Толщины слоев GaN и AlN составляли около 3 монослоев. По данным EXAFS увеличение температуры роста от 795 до 895°C приводит к уменьшению координационного числа Ga-Ga во второй координационной сфере атома Ga от 8.9 до 8.0 и, соответственно, увеличению координационного числа Ga-Al от 3.1 до 4.0. Для исследования перемешивания гетерограниц серия образцов с различной температурой роста была подвергнута высокотемпературному отжигу в течение 1 часа при 1000°C, после чего на отожженных образцах снова были измерены спектры EXAFS. После отжига при 1000°C координационное число Ga-Ga уменьшается от 8.9 до 8.3 для температуры роста 795°C и от 8.0 до 7.7 для температуры роста 895°C. Коэффициент взаимной диффузии между GaN и AlN составляет $1 \cdot 10^{-20}$ см²/с при 1000°C, что соответствует теоретическим оценкам при вакансионном механизме диффузии.

Работа поддержана РФФИ (проекты 18-52-00008, 17-52-04023).

[1] P. Giannozzi et al., *J. Phys.:Condens. Matter* **29** 465901 (2017).

[2] G. Henkelman et al. *J.Chem.Phys.* **113**,9901(2000).

[3] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).

[4] J. Heyd, G. E. Scuseria, and M. Ernzerhof, *J. Chem. Phys.* **124**, 219906 (2006).