Расчет энергетической структуры точечных дефектов в нитриде алюминия методами теории функционала плотности

Александров И.А., Журавлев К.С.

ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

DOI 10.34077/Semicond2019-314

Определение энергетической структуры и оптических свойств точечных дефектов в кристаллах является фундаментальной задачей, решение которой необходимо для улучшения качества материалов, используемых для создания оптических и электронных приборов. Нитриды металлов третьей группы перспективны для создания светодиодов и лазерных диодов ультрафиолетового и видимого диапазона, мощных высокочастотных транзисторов, ультрафиолетовых фотоприемников, источников одиночных фотонов, работающих при комнатной температуре. Для идентификации полос фотолюминесценции и поглощения в нитриде алюминия в данной работе проведены расчеты энергий формирования, уровней термодинамических переходов и формы полос фотолюминесценции и поглощения точечных дефектов в AlN методами теории функционала плотности. Расчеты проводились с использованием гибридного функционала HSE [1] и оптимизированных сохраняющих норму псевдопотенциалов Вандербита [2] в программном пакете Quantum Espresso [3]. Расчетная ширина запрещенной зоны соответствует экспериментальной $E_g=6.1$ эВ [4] при значении параметра α гибридного функционала HSE, отвечающего за долю короткодействующего Хартри-Фоковского обменного функционала, равном 0.33. Расчеты энергетической структуры дефектов проводились с энергией отсечки при разложении на плоские волны $E_{cut}=80$ Ry, с использованием 96-атомной сверхъячейки и смещенной относительно начала координат сетки Монкхорста-Пака $2\times 2\times 2$ для интегрирования по зоне Бриллюэна. При расчете энергетической структуры заряженных дефектов проводилась корректировка, учитывающая взаимодействие зарядов в периодически повторяющейся сверхъячейке [5]. Результат расчета параметров решетки и энтальпии формирования объемного AlN $a=3.11$ Å, $c=4.97$ Å, $\Delta H_f=3.15$ эВ хорошо согласуется с экспериментальными данными $a=3.11$ Å, $c=4.98$ Å, $\Delta H_f=3.28$ эВ [6,7]. Расчет формы полос фотолюминесценции проводился с использованием метода, предложенного в работе [8]. Согласно расчетам, термодинамические уровни переходов между зарядовыми состояниями $(-3/-2)$, $(-2/-1)$, $(-1/0)$ и $(0/+1)$ вакансии алюминия в AlN расположены на 3.16 эВ, 2.91 эВ, 2.49 эВ и 1.34 эВ выше дна зоны проводимости. Термодинамический уровень перехода $(-1/0)$ примеси углерода в подрешетке азота C_N расположен на 1.99 эВ выше дна зоны проводимости. Примесь кислорода в подрешетке азота O_N проявляет свойства DX-центров, для которых присоединение второго электрона к нейтральному дефекту приводит к сильной релаксации решетки с образованием глубокого уровня. В положительно заряженном и нейтральном состоянии O_N наиболее энергетически выгодным является положение кислорода в узле решетки на месте азота. В отрицательно заряженном состоянии наиболее энергетически выгодным является положение кислорода в смещенном относительно гексагональной оси положении, кроме того, локальный минимум энергии наблюдается при смещении атома кислорода вдоль гексагональной оси в тетраэдрическое междоузлие.

Работа поддержана Российским научным фондом (проект 18-72-00136).

- [1] J. Heyd, G. E. Scuseria, and M. Ernzerhof, *J. Chem. Phys.* **124**, 219906 (2006).
- [2] D. R. Hamann, *Phys. Rev. B* **88**, 085117 (2013).
- [3] P. Giannozzi et al., *J. Phys.:Condens. Matter* **29** 465901 (2017).
- [4] M. Feneberg et al., *Phys. Rev. B* **82**, 075208 (2010).
- [5] C. Freysoldt, J. Neugebauer, and C. G. Van de Walle, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 016402 (2009).
- [6] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, *Journal of Applied Physics* **94**, 3675 (2003).
- [7] M. Ranade et al., *J. Mater. Res.*, **16**(10), 2824(2001).
- [8] A. Alkauskas, J. L. Lyons, D. Steiauf, and C. G. Van de Walle. *Phys. Rev. Lett* **109**, 267401 (2012).