

УДК 539.2:546.261

**ЭЛЕКТРОННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ ШИРОКОЗОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ GaN, AlN И AlN—GaN**© 2007 **В.В. Илясов\***, Т.П. Жданова, И.Я. Никифоров*Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону**Статья поступила 21 марта 2006 г.*

Электронная энергетическая структура кристаллов GaN, AlN и AlGaN со структурой вюрцита рассчитана методом локального когерентного потенциала с использованием кластерной версии МТ-приближения в рамках теории многократного рассеяния. Рассчитанные плотности электронных состояний сопоставлены с XPS спектрами галлия и алюминия,  $AlL_{II, III}$  XES, а также с  $K$ -спектрами поглощения галлия и  $AlL_{II, III}$  XAFS. Проведено сравнение электронной структуры кристаллов  $Al_xGa_{1-x}N$  и бинарных GaN и AlN, дана интерпретация их особенностей. Изучена концентрационная зависимость ширины верхней подзоны валентной полосы и полосы запрещенной энергии в кристаллах  $Al_xGa_{1-x}N$  ( $x = 0, 0,25, 0,5, 0,75, 1$ ) от содержания алюминия и показан ее нелинейный характер.

**Ключевые слова:** электронная энергетическая структура, нитриды, плотность электронных состояний, рентгеновские спектры.

**ВВЕДЕНИЕ**

Широкозонные полупроводниковые кристаллы GaN, AlN и AlGaN со структурой вюрцита представляют значительный интерес для создания нового поколения ультрафиолетовой опто- и коротковолновой наноэлектроники, что стало возможным благодаря успехам технологий выращивания качественных эпитаксиальных пленок нитридов (AlN, GaN, InN и др.) [1—3] и созданию сверхрешеток типа AlGaN/GaN [4—8]. Любопытно, что атомы Al и Ga при одинаковых тетраэдрических радиусах имеют разные ионные характеристики соединений, обеспечивая минимальное рассогласование (от 2,5 до 3,5 %) кристаллических решеток GaN и AlN в ряду широкозонных полупроводников. Помимо рассогласования решеток [9] может наблюдаться деформация слоев, например, в сверхрешетках, вследствие как спонтанной, так и пьезоэлектрической поляризации [10—15]. Данные эффекты должны оказывать существенное влияние на электронную энергетическую структуру и свойства полупроводниковых устройств. В этой связи поиск наиболее оптимальных составов твердых растворов нитридов группы III как элементов новых сверхрешеток определяет повышенный интерес к изучению их электронной структуры [10—16].

Известны самосогласованные расчеты электронного спектра твердого раствора  $Ga_{0,8}Al_{0,2}N$  и структуры с квантовой ямой GaN/ $Ga_{0,8}Al_{0,2}N$ , выполненные с использованием метода псевдопотенциалов [12—14]. Полученные значения ширины запрещенной полосы в AlN и GaN (в направлении прямого перехода) составили 4,44 и 2,29 эВ [12] соответственно, что на 1,84 и 1,21 эВ меньше их экспериментальных значений. Однако в цитируемых работах не приводятся энергетические спектры электронов.

Рентгеновские фотоэлектронные спектры эмиссии (XPS) галлия и алюминия в гетеропереходе GaN/AlN(0001) со структурой типа вюрцит изучены в работе [17], что позволило оценить

---

\* E-mail: viily@mail.ru

величину разрыва в валентной полосе, ширину рентгеновских фотоэлектронных полос GaN XPS и AlN XPS, а также дать интерпретацию их основных пиков. В частности, показано, что высокоэнергетический пик формируется исключительно заполненными состояниями  $2p$ -электронов азота, а низкоэнергетический пик обусловлен вкладами состояний  $4s$ -электронов галлия (и соответственно  $3s$ -электронов Al для AlN) и  $2p$ -электронов азота.

Следует отметить, что, несмотря на успехи в практическом использовании сверхрешеток типа AlGaN/GaN, нет ясности в интерпретации природы энергетических спектров электронов как в данных твердых растворах, так и при более высоких концентрациях алюминия.

Настоящая статья является продолжением цикла работ, посвященных теоретическому исследованию электронной структуры широкозонных полупроводников в рамках одного приближения, и ее целью служит изучение особенностей зонной структуры в неупорядоченных сплавах  $Al_xGa_{1-x}N$  в сопоставлении с бинарными GaN и AlN в широком диапазоне изменения концентрации алюминия. Нами использован кластер из 251 атома, погруженный в бесконечный кристалл, изучаются особенности энергетического спектра электронов, которые позволили дать интерпретацию природы его тонкой структуры в твердых растворах.

#### МЕТОД И ДЕТАЛИ РАСЧЕТА

Электронная структура кристаллов  $Al_xGa_{1-x}N$  ( $x = 0, 0,25, 0,5, 0,75, 1$ ) изучена с использованием кластерной версии приближения локального когерентного потенциала (ПЛКП), изложенного ранее [18—20]. Расчет кристаллического потенциала *muffin-tin* (MT) осуществляли для равновесного состояния с экспериментальными параметрами решеток бинарных кристаллов и рассчитанных по Вегарду для сплавов. Обменный потенциал строился в приближении Слэтера с обменной поправкой  $\alpha = 2/3$ . Элементарную ячейку выбирали в виде гексагональной призмы, аналогично работе [20]. Решение радиального уравнения Шредингера осуществляли для  $l = 0, 1$  в интервале энергий от 0,02 до 3 Ry с постоянным шагом 0,02 Ry. Локальные парциальные плотности состояний (ЛППС) каждого атома сплава вычисляли для кластера, состоящего из 251 атома в 33 координационных сферах:

$$n_l^A(E) = \frac{\sqrt{E}}{\pi} \int_0^{r_{ws}} [R_l^A(r, E)r]^2 dr \frac{\text{Im} Tr T_{LL'}^{A,00}(E)}{\text{Im} t_l^A(E)}, \quad (1)$$

где  $l$  — орбитальное квантовое число;  $R_l^A(r)$  — радиальные волновые функции атома сорта A;  $T_{lm,l'}^{A,00}$  — матричный элемент оператора рассеяния. Полную плотность состояний (ППС) электронов на элементарную ячейку для одной проекции спина определяли как сумму локальных плотностей состояний (ЛПС) аналогично работе [20].

#### РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Рассчитанный электронный энергетический спектр твердых растворов  $Al_xGa_{1-x}N$  ( $x = 0, 0,25, 0,5, 0,75, 1$ ) выявляет тонкую структуру вершины валентной полосы и дна зоны проводимости, обнаруживая его трансформацию в ряду GaN— $Al_{0,25}Ga_{0,75}N$  —  $Al_{0,5}Ga_{0,5}N$  —  $Al_{0,75}Ga_{0,25}N$  — AlN, что иллюстрируют рис. 1—3. Обращает на себя внимание тенденция увеличения ширины подзоны VBI от 5,2 (GaN) до 7,6 эВ (AlN), что сопровождается понижением интенсивности основных пиков на кривых ППС. Подобная закономерность была установлена нами ранее для кристаллов  $V_xGa_{1-x}N$ . Следует отметить, что представленные на рис. 1 полные и локальные парциальные плотности состояний  $s$ ,  $p$ -электронов в бинарном нитриде галлия в сопоставлении с XPS-полосой GaN [17] и  $K$ -спектрами поглощения галлия [23] и азота [24] иллюстрируют присущие им особенности и позволяют дать интерпретацию экспериментальных спектров. Совмещение рассчитанных электронных энергетических спектров галлия, азота и XPS-полосы GaN проводили по наиболее интенсивному пику состояний. Анализ рис. 1 показывает, во-первых, что установленное авторами [17] энергетическое положение пиков  $B_1$  (–3,2) и  $E_1$  (–7,6 эВ) в XPS-полосе GaN на единой энергетической шкале удовлетворительно согласуется с рассчитанными в данной работе значениями (–2,1 и –5,5 эВ). Нулевое положение энергии связи

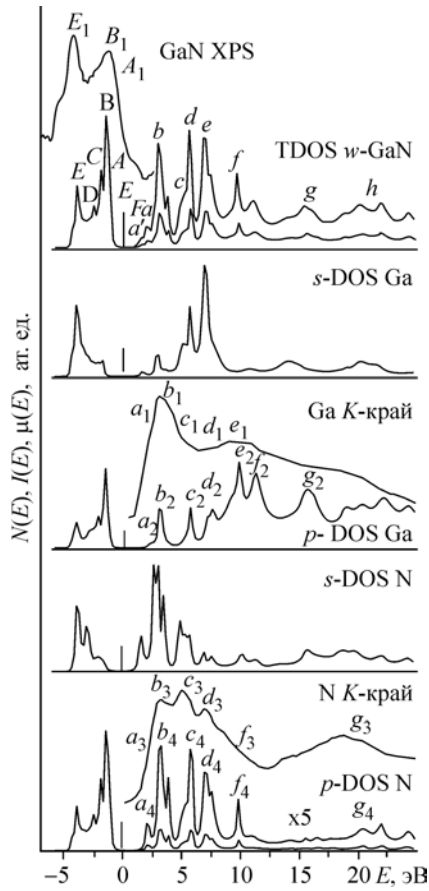


Рис. 1. Полная и локальные парциальные плотности электронных состояний на один атом галлия и азота в w- GaN (в эл. сост./атом Ry), XPS-полоса GaN [ 17 ] и рентгеновские K-спектры поглощения галлия [ 23 ] и азота [ 24 ]

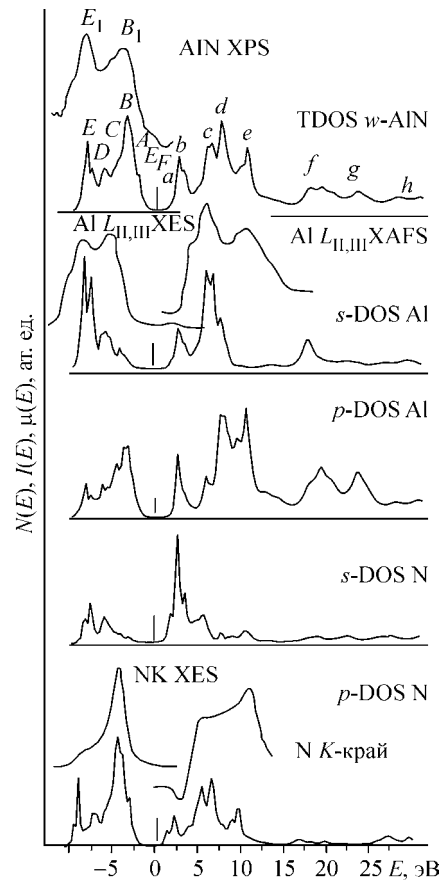


Рис. 2. Полная и локальные парциальные плотности электронных состояний на один атом галлия и азота в w- AlN (в эл. сост./атом Ry) и XPS-полоса AlN [ 17 ], рентгеновские спектры эмиссии AlL<sub>II,III</sub> XES и NK XES, спектры поглощения AlL<sub>II,III</sub> XAFS [ 38 ] и NK-края [ 38 ]

в данной работе совпадает с положением уровня Ферми. Как следует из рис. 1, пик  $B_1$  определяется в основном вкладами  $2p$ -состояний азота и частично вкладами  $4p$ -состояний галлия (в соотношении 10:1), а пик  $E_1$  — в основном вкладами  $2p$ -состояний азота и  $4s$ -состояний электронов атомов галлия (в соотношении 4:1). Энергетическое расстояние между пиками  $B_1$  и  $E_1$  для бинарного GaN находится в хорошем соответствии с настоящим расчетом.

Различие в интенсивности данных пиков в расчете и эксперименте может быть обусловлено рядом причин. С одной стороны, простейший учет рентгеновского фона в спектре XPS-полосы GaN изменяет соотношение интенсивностей пиков  $E_1$  и  $B_1$  на обратное, что будет соответствовать настоящим расчетам и физической природе спектров [ 25 ]. С другой стороны, наблюдаемое несоответствие интенсивности рассматриваемых пиков связано с различием в сечениях фотоионизации валентных электронов Ga и N. Анализ сечений фотоионизации  $\sigma_s$  и  $\sigma_p$  валентных  $s$ - и  $p$ -электронов атомов галлия и азота на основе данных работы [ 26 ] показывает, что отношение сечений фотоионизации валентных  $4s$ -,  $4p$ -электронов атомов галлия составляет величину  $\sigma_{4s} / \sigma_{4p} = 7,4$ . Последнее позволяет полагать, что определяющим в формировании пика  $E_1$  будут заполненные состояния  $4s$ -электронов и частично  $4p$ -электронов галлия. Авторы работы [ 17 ] на основании расчетов плотности электронных состояний утверждают, что помимо  $4s$ -электронов Ga в интенсивность пика  $E_1$  XPS-полосы GaN вносят  $2p$ -электроны N, а интенсивность пика  $B_1$  определяют только  $2p$ -электроны атомов азота. Однако, как показывают наши оценки, отношение сечений фотоионизации валентных  $4s$ -,  $4p$ -электронов Ga и  $2p$ -

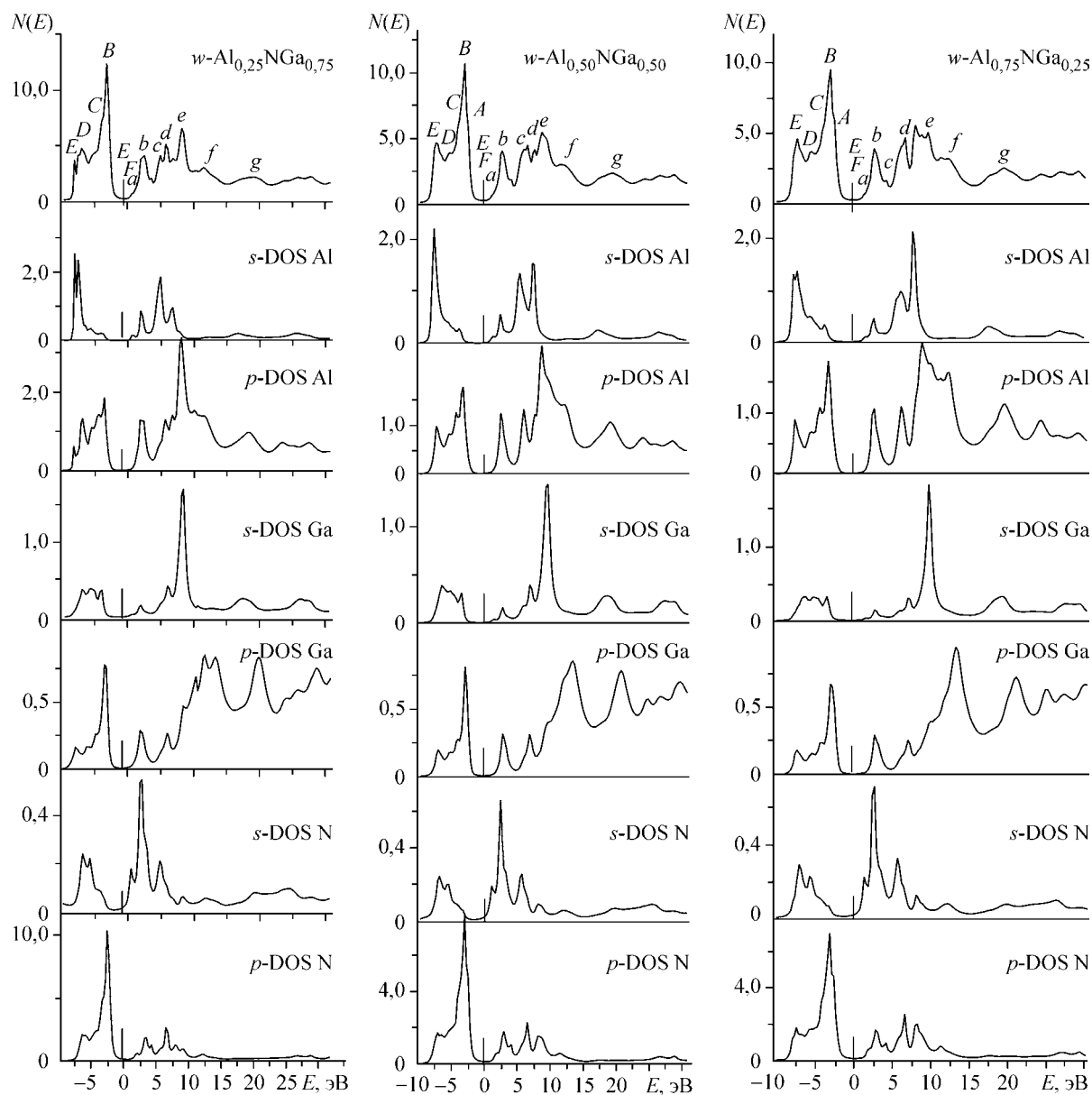


Рис. 3. Полная и локальные парциальные плотности электронных состояний на один атом алюминия, галлия и азота в соединениях: *a* —  $w\text{-Al}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{N}$ , *b* —  $w\text{-Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}$ , *в* —  $w\text{-Al}_{0,75}\text{Ga}_{0,25}\text{N}$

электронов азота составляет величину  $\sigma_{4s}/\sigma_{2p} = 20,3$  и  $\sigma_{4p}/\sigma_{2p} = 2,7$  соответственно. Дополнительный учет соотношения вкладов состояний  $4p$ -электронов галлия и  $2p$ -электронов азота (в соотношении 1:8) в интенсивность расчетного пика  $E$  позволяет предположить, что заполненные состояния  $4p$ -электронов галлия также присутствуют в пике  $B_1$  XPS-полосы GaN. Отмеченное выше позволяет высказать предположение о том, что в XPS-спектре должны отражаться распределения по энергии в основном  $4s$ - и частично  $4p$ -электроны атомов галлия и  $2p$ -электроны атомов азота, формирующих пики  $E_1$  и  $B_1$ .

При переходе от бинарного GaN (см. рис. 1) к раствору  $\text{Al}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{N}$  наблюдается кардинальная перестройка электронного энергетического спектра (см. рис. 3, *a*), в результате которой, в частности, происходит возрастание ширины подзоны VBI, о чем свидетельствует увеличение на 1,4 эВ расстояния между пиками  $B$  и  $E$  на кривой ППС. Следует отметить перестройку спектра в низкоэнергетической области (с энергией связи  $-7,3$  эВ), что проявляется в уменьшении интенсивности пика  $E$  и обусловлено, на наш взгляд, уменьшением статистического веса  $s$ - и  $p$ -состояний галлия и  $p$ -состояний азота и доминированием  $s$ - и  $p$ -состояний алюминия.

С увеличением содержания алюминия в твердых растворах  $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}$  (см. рис. 3, б) и  $\text{Al}_{0,75}\text{Ga}_{0,25}\text{N}$  (см. рис. 3, в) наблюдается сохранение формы кривой ППС подзоны VBI при одновременном уменьшении общей плотности заполненных состояний электронов, на что указывает снижение интенсивности пиков  $B$  и  $E$ . Их сингулярность обусловлена, на наш взгляд,  $s$ ,  $p$ -взаимодействием электронных конфигураций атомов галлия, азота и алюминия в кристалле. Особенно ярко это проявилось в электронном энергетическом спектре кристалла  $\text{Al}_{0,75}\text{Ga}_{0,25}\text{N}$  (см. рис. 3, в), о чем свидетельствует совпадение по энергии пиков локальных парциальных состояний электронов атомов кристалла с энергией связи  $-3$  эВ, статистический вес которых увеличился по сравнению с кристаллом  $\text{Al}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{N}$ . Доминирующая роль заполненных состояний  $s$ - и  $p$ -электронов Al в энергетическом спектре кристаллов  $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}$  и  $\text{Al}_{0,75}\text{Ga}_{0,25}\text{N}$  проявляется в сохранении расстояния между пиками  $B$  и  $E$  по шкале энергий, которое составляет величину порядка 4,3 эВ, как и в бинарном AlN. Косвенным подтверждением сказанному служит приближение формы кривых ППС рассматриваемых кристаллов к ППС бинарного кристалла AlN (см. рис. 2) при возрастании концентрации алюминия. Следует также отметить формирование на кривой ППС наплыва  $A$  с энергией связи  $-2,3$  эВ (см. рис. 3, б, в), обусловленного вкладом заполненных состояний в основном  $2p$ -электронов азота и частично  $4p$ -электронов атомов галлия.

Электронная низкоэнергетическая структура незаполненных электронных состояний в вюрцитных кристаллах  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , как следует из настоящих расчетов, формируется в основном "замешиванием" свободных состояний  $5s$ -,  $4p$ -электронов атомов галлия,  $2p$ -электронов атомов азота и  $4s$ -,  $3p$ -электронов алюминия (см. рис. 3). Как показали наши оценки, вклад в эту структуру могут вносить свободные состояния  $d$ -электронов атомов алюминия [21] и галлия (в данной работе не приводятся). В кристалле GaN особенности  $a'$  (1,5 эВ) и  $a$  (2,3 эВ) обусловлены (см. рис. 1) вкладом свободных состояний  $4s$ -электронов атомов галлия и  $2p$ -электронов азота соответственно. При введении алюминия в бинарный кристалл GaN его тонкая структура предпороговой области  $K$ -края поглощения исчезает (см. рис. 2), что связано с ее перестройкой и повышением статистического веса состояний электронов с энергией связи 2,8 эВ (пик  $b$ ). Последнее, на наш взгляд, обусловлено интенсивным взаимодействием  $s$ - и  $p$ -состояний всех атомов, составляющих ансамбль кристалла, что проявляется в совпадении на энергетической шкале пиков свободных локальных парциальных состояний электронов (см. рис. 3, в). Также следует отметить стабильность электронной структуры изученных кристаллов  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , что проявляется в сохранении энергетического промежутка (порядка 5,6 эВ) между наиболее интенсивным пиком  $B$  вершины валентной полосы и пиком  $b$  дна зоны проводимости, определяющими оптические свойства данных кристаллов.

Сопоставление локальных парциальных ПС галлия и азота с их  $K$ -краями поглощения в бинарном нитриде галлия (см. рис. 1) и их анализ позволяют интерпретировать природу их особенностей. В частности, на рентгеновском спектре поглощения галлия энергетическое расстояние между основными пиками  $b_1$  и  $e_1$  совпадает с расстоянием между соответствующими пиками  $b_2$  и  $e_2$  кривой  $4p$  ПС галлия в настоящем расчете. Данное обстоятельство позволяет объяснить природу других особенностей на кривой  $K$ -края поглощения галлия, а именно  $b_1$ ,  $c_1$ ,  $d_1$  и  $e_1$ , локализацией состояний  $4p$ -электронов с энергиями 3,7, 7,0, 8,9, 12,5 эВ и, возможно, "замешиванием" свободных состояний  $5s$ -,  $4d$ -электронов атомов галлия. Положение по энергии основных пиков на кривой  $K$ -края поглощения азота согласуется с данным расчетом.

Электронная структура окрестности XANES  $K$ -края поглощения N и Ga в бинарном GaN может быть проинтерпретирована в рамках общепризнанной трактовки ближней тонкой структуры, определяемой узкой  $\pi$ -зоной (у дна зоны проводимости) и двух широких  $\sigma$ -зон (на 10—20 эВ выше), слабо перекрывающихся с высокоэнергетическим хвостом  $\pi$ -зоны аналогично [27]. Наблюдаемые особенности энергетического спектра можно рассматривать как сильно локализованные возбужденные состояния кристалла, что соответствует представлениям авторов работы [27]. Природа доминирующих полос поглощения  $b$ ,  $c$  и  $d$  рентгеновского спектра поглощения галлия и азота в вюрцитном GaN обусловлена переходом GaK- и NK-электронов в отмеченные возбужденные состояния  $\pi$ - и  $\sigma$ -симметрии кристалла, что наглядно иллюстрирует рис. 1.

С ростом содержания алюминия в кристаллах  $Al_xGa_{1-x}N$  происходит перераспределение свободных состояний  $3s$ -,  $3p$ -электронов алюминия (см. рис. 3), что сопровождается повышением статистического веса состояний с энергией 8,3 эВ. Отмеченные выше особенности наблюдаются при сохранении структуры свободных локальных парциальных состояний галлия и азота. Данная перестройка энергетического спектра электронов, очевидно, должна привести к ощутимому изменению электронных и оптических свойств данных кристаллов.

Представленные на рис. 2 полные и локальные парциальные плотности состояний  $s$ ,  $p$ -электронов в бинарном нитриде алюминия в сопоставлении с XPS-полосой AlN [17], рентгеновскими спектрами эмиссии  $AlL_{II, III}$  XES и NK XES, спектрами поглощения  $AlL_{II, III}$  XAFS [38] и NK-края [38] иллюстрируют присущие им особенности и позволяют дать интерпретацию их природы. Совмещение рассчитанных энергетических спектров алюминия, азота и XPS-полосы GaN проводили по наиболее интенсивному пику плотности электронных состояний. Анализ рис. 2 показывает, во-первых, что установленное авторами [17] энергетическое положение пиков  $B_1$  ( $-4,4 \pm 0,4$  эВ) и  $E_1$  ( $-8,2 \pm 0,2$  эВ) в XPS-полосе AlN на единой энергетической шкале согласуется с рассчитанными в данной работе значениями ( $-3,7$  и  $-7,9$  эВ). Как следует из рис. 2, пик  $B_1$  определяется в основном вкладами  $2p$ -состояний азота и  $3p$ -состояний алюминия (в соотношении 2:1), а пик  $E_1$  обусловлен вкладами  $2p$ -состояний азота и  $3s$ -состояний электронов атомов алюминия (в соотношении 3:2). Энергетическое расстояние между пиками  $B_1$  и  $E_1$  для бинарного AlN, так же как и их положение, находится в хорошем соответствии с настоящим расчетом.

Следует также отметить хорошее совпадение по энергии особенностей рентгеновских спектров эмиссии  $AlL_{II, III}$  XES и NK XES и спектров поглощения  $AlL_{II, III}$  XAFS и NK-края с максимумами плотности локальных парциальных состояний электронов атомов алюминия и

Сопоставление теоретических и экспериментальных (\*) значений ширины валентной VBI и запрещенной зон, модуля всестороннего сжатия кристаллов AlN, GaN и  $Al_xGa_{1-x}N$

Фаза	Источник	VBI, эВ	$E_g$ , эВ, расчет	$D$ , Å	$B_0$ , ГПа
w-AlN	[9]		6,28		
	[36]		3,8>5*		
	[37]		6,2		
	[38]		<6,6*		
	Наст. работа [40]	7,6	3,8	1,9044	210 208±60*
w- $Al_{0,75}Ga_{0,25}N$	Наст. работа	6,7	4,2	1,9161	205
w- $Al_{0,60}Ga_{0,40}N$	[34]	–	4,5*		
w- $Al_{0,50}Ga_{0,50}N$	Наст. работа	6,4	4,0	1,9283	200
w- $Al_{0,30}Ga_{0,70}N$	[34]	–	3,75*		
	[10]	–	4,37–4,26		
w- $Al_{0,25}Ga_{0,75}N$	Наст. работа	6,2	3,7	1,9406	196
w- $Al_{0,15}Ga_{0,85}N$	[35]	–	3,8*		
w- $Al_{0,10}Ga_{0,90}N$	[33]	–	3,5*		
w- $Al_{0,07}Ga_{0,93}N$	[32]	–	3,61		
w-GaN	[27]	7,26	2,71		
	[28]	6,79	3,50		
	[29]	–	3,60		
	[30]	–	3,50*		
	[31]	–	3,39*		
	Наст. работа [39]	5,2	3,4	1,9528	192 196 188–245*

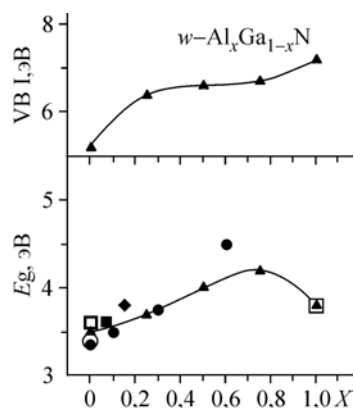


Рис. 4. Зависимость ширины валентной VBI и запрещенной полос в кристаллах  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  от содержания алюминия ( $\blacktriangle$  — наст. расчет;  $\blacksquare$  — [ 32 ];  $\bullet$  — [ 34 ];  $\blacklozenge$  — [ 35 ];  $\blacksquare$  — [ 29 ];  $\square$  — [ 36 ];  $\circ$  — [ 31 ])

азота. Интерпретация природы основных особенностей была дана нами в работе [ 21 ].

При возрастании концентрации алюминия в вюрцитных кристаллах  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  происходит увеличение ширины полосы запрещенных энергий  $E_g$  на величину от 0,3 до 0,8 эВ. Сопоставление расчетных значений ширины полосы запрещенных энергий кристаллов  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  данной работы с опубликованными экспериментальными и расчетными данными, представленными в таблице, показывает удовлетворительное согласие. Вид концентрационной зависимости ширины щели между вершиной валентной полосы и дном зоны проводимости от содержания алюминия в кристаллах  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ( $x = 0, 0,25, 0,5, 0,75, 1$ ) иллюстрирует рис. 4; она оказывается нелинейной. При малых значениях параметра  $x$  (до  $x = 0,3$ ) рассчитанные значения  $E_g$  совпадают с экспериментальной зависимостью  $E_g(E)$  [ 5 ], и величина оптического прогиба кривой  $E_g(E)$ , рассчитанного аналогично [ 41 ], составляет 1,1 эВ при  $x = 0,25$ , возрастая до максимальной величины оптического прогиба при  $x = 0,75$ , равной 2,6 эВ. Последняя оценка совпадает по порядку величины с аналогичным отклонением  $E_g$  для вюрцитных кристаллов  $\text{B}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$  [ 22 ].

#### ВЫВОДЫ

1. На основании теоретических и экспериментальных данных изучена динамика перестройки электронной энергетической структуры в твердых растворах  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ( $x = 0, 0,25, 0,5, 0,75, 1$ ), обусловленная взаимодействием электронной подсистемы алюминия с электронными конфигурациями галлия и азота.

2. Причиной кардинальной перестройки электронного энергетического спектра в системе  $\text{Al—Ga—N}$ , на наш взгляд, является усиление взаимодействия  $p$ -состояний галлия с  $p$ -состояниями алюминия, что приводит к формированию широкой гибридной полосы, связанной с замешиванием этих состояний друг с другом.

3. Установлены величины оптического прогиба кривой  $E_g(E)$  в широком диапазоне изменения содержания алюминия в кристаллах  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . Величина среднего по всем концентрациям оптического отклонения зависимости  $E_g(E)$  составила 1,4 эВ.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. D'Acapito F., Boscherini F., Mobilio S. et al. // Phys. Rev. B. – 2002. – **66**. – P. 205411-1 – 205411-7.
2. Wenzel C., Volm D., Meyer B.K. et al. // Appl. Phys. Lett. – 1994. – **65**, N 8. – P. 1033 – 1035.
3. Водаков Ю.А., Мохов Е.Н. // Физика тверд. тела. – 1999. – **41**, № 5. – С. 822 – 825.
4. Yu G., Wang G., Ishikawa H. et al. // Appl. Phys. Lett. – 1997. – **70**, N 24. – P. 3209 – 3211.
5. Huang T., James S., Harris Jr. // Ibid. – 1998. – **72**, N 10. – P. 1158 – 1160.
6. Nakamura S., Senoh M., Nagahama S. et al. // Ibid. – P. 211 – 215.
7. Tripathy S., Chua S.J., Chen P., Miao Z.L. // J. Appl. Phys. – 2002. – **92**. – P. 3503 – 3506.
8. Ng N.G., Doppalapudi D., Iliopoulos E., Moustakas T.D. // Appl. Phys. Lett. – 1999. – **72**, N 7. – P. 1036 – 1038.
9. Teles L.K., Scolfaro L.M.R., Leite J.R. et al. // Ibid. – 2002. – **80**, N 7. – P. 1177 – 1179.
10. Гриняев С.Н., Разжувалов А.Н. // Физика тверд. тела. – 2001. – **43**, № 3. – С. 529 – 535.
11. Кюнт П.Н., Щеглов М.П., Давыдов В.Ю., Усиков А.С. // Там же. – 2004. – **46**, № 2. – С. 353 – 359.
12. Nordelli M.B., Rapcewicz K., Bernholc J. // Phys. Rev. B. – 1997. – **55**, N 12. – P. R7323 – R7326.
13. Bernardini F., Fiorentini V. // Ibid. – 1998. – **57**, N 16. – P. R9427 – R9430.
14. Fiorentini V., Bernardini F., Sala F.D. et al. // Ibid. – 1999. – **60**, N 12. – P. 8849 – 8858.
15. Jin Seo Im, Kolliner H., Off J. et al. // Ibid. – 1998. – **57**, N 16. – P. R9435 – R9438.
16. Lefebvre P., Allegre J., Gil B. et al. // Ibid. – P. R9447.
17. Martin G., Strite S., Botchkarev A. et al. // Appl. Phys. Lett. – 1994. – **65**, N 5. – P. 610 – 612.
18. Nikiforov I.Ya., Ilyasov V.V., Safontzeva N.Yu. // J. Phys. C. – 1995. – N 7. – P. 6035 – 6040.

19. Илясов В.В., Жданова Т.П., Никифоров И.Я. // Физика тверд. тела. – 2003. – **45**, № 5. – С. 777 – 784.
20. Жданова Т.П., Илясов В.В., Никифоров И.Я. // Там же. – 2001. – **43**, № 8. – С. 1388 – 1391.
21. Илясов В.В., Жданова Т.П., Никифоров И.Я. // Там же. – 2006. – **48**, № 2. – С. 199 – 201.
22. Илясов В.В., Жданова Т.П., Никифоров И.Я. // Там же. – 2005. – **47**, № 49. – С. 1559 – 1566.
23. Tourtin F., Armand P., Ibanes A. et al. // J. Phys. IV France. – 1997. – **7**. – P. C2-975 – C2-977.
24. Katsikini M., Paloura E.C., Cheng T.S., Foxon C.T. // Ibid. – P. C2-1129 – C2-1130.
25. Немошкаленко В.В., Алешин В.Г. Электронная спектроскопия. – Киев: Наукова думка, 1983.
26. Scofield J.H. // J. Electron Spectr. Relat. Phenomena. – 1976. – **8**. – P. 129 – 132.
27. Виноградов А.С., Некупелов С.В., Павлычев А.А. // Физика тверд. тела. – 1991. – **33**, № 3. – С. 896.
28. Xu Y.-N., Ching W.Y. // Phys. Rev. B. – 1993. – **48**, № 7. – P. 4335 – 4339.
29. Huang M.-Z., Ching W.Y. // J. Phys. Chem. Solids. – 1985. – **46**, N 8. – P. 977 – 980.
30. Bloom S., Harbeke G., Meier E., Ortenburg I.B. // Phys. Stat. Solid. B. – 1974. – **66**. – P. 161 – 168.
31. Monemar B. // Phys. Rev. B. – 1974. – **10**. – P. 676 – 680.
32. Maruska H.P., Tietjen J.J. // Appl. Phys. Lett. – 1969. – **15**. – P. 327 – 334.
33. Lefebvre P., Allegre J., Gil B. et al. // Phys. Rev. B. – 1974. – **57**, N 16. – P. R9447 – R9450.
34. Tzu-fang Huang, James Jr. // Appl. Phys. Lett. – 1998. – **72**, N 10. – P. 1158 – 1160.
35. Lee B.C. // J. Korean Phys. Soc. – 1999. – **35**, N 6. – P. 516 – 519.
36. Самсонов Г.В. и др. Неорганические материалы. Т. 2. – М.: Изд-во АН СССР, 1966.
37. Yim W.M., Stofko E.J., Zanzucchi P.J. et al. // J. Appl. Phys. – 1973. – **44**. – P. 292 – 299.
38. Фомичев В.А. // Физика тверд. тела. – 1968. – **10**, № 3. – С. 763 – 768.
39. Serrano J., Rubio A., Hernandez E. et al. // Phys. Rev. B. – 2000. – **62**, N 24. – P. 16612 – 16615.
40. Ueno M., Onodera A., Shimomura O., Takemura K. // Ibid. – 1992. – **45**. – P. 10123 – 10130.
41. Bernard J.E., Zunger A. // Ibid. – 1987. – **36**, N 6. – P. 3199 – 3228.