

# Исследование комплексов вакансионного типа в GaN и AlN методом аннигиляции позитронов

© Н.Ю. Арутюнов, А.В. Михайлин, В.Ю. Давыдов\*, В.В. Емцев\*<sup>¶</sup>, Г.А. Оганесян\*, Е.Е. Халлер<sup>†</sup>

Институт электроники,  
700143 Ташкент, Узбекистан

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

<sup>†</sup> Department of Materials Science and Engineering, University of California at Berkeley,  
CA 94720, Berkeley, USA

(Получена 28 февраля 2002 г. Принята к печати 1 апреля 2002 г.)

Импульсное распределение электрон-позитронных пар в нитридах GaN и AlN впервые исследовано с помощью метода измерений одномерной угловой корреляции аннигиляционного излучения (1D-УКАИ). Установлено, что величина характеристического параметра электронной плотности  $r'_s$  (радиус сферы, занимаемой электроном), рассчитанная с помощью экспериментальных данных, заметно отличается от численного значения  $r_s$ , оцененного на основе общепринятой модели независимых частиц:  $r'_s(\text{AlN}) \approx 1.28r_s$  и  $r'_s(\text{GaN}) \approx 1.66r_s$ , где  $r_s(\text{AlN}) \approx 1.6091$  а.е. и  $r_s(\text{GaN}) \approx 1.6568$  а.е. Химическая природа атомов в окружении аннигилирующего позитрона в AlN и GaN определялась по величине электрон-позитронного ионного радиуса остовов  $\text{Al}^{3+}$ ,  $\text{Ga}^{3+}$  и  $\text{N}^{5+}$ , который оценивался с помощью характеристик высокоимпульсного компонента кривых 1D-УКАИ. Основой анализа результатов служило сравнение величин электронной плотности и электрон-позитронного ионного радиуса остовов с „эталонными“ значениями, полученными для металлов Al, Ga и „родственных“ нитридам материалов GaP, GaAs, GaSb.

Сделано заключение о доминирующем процессе аннигиляции позитронов в областях вакансионных комплексов, включающих в свой состав вакансии галлия и алюминия,  $V_{\text{Ga}}$  и  $V_{\text{Al}}$ , и дефекты замещения (антисайты)  $N_{\text{Ga}}^+$  и  $N_{\text{Al}}^+$  соответственно в GaN и AlN.

## 1. Введение

Как известно, эмиттированные из радиоизотопного источника в исследуемый образец позитроны локализуются в процессе термализации в областях отрицательного эффективного заряда [1]. Этот заряд определяет величину электронной плотности вокруг позитрона [1,2] и длину электрон-позитронного ионного радиуса, характеризующего химическую природу атомов в ближайшем окружении позитрона при аннигиляции [3,4]. Присутствие в исследуемом материале различных точечных дефектов оказывает влияние на указанные параметры аннигиляции позитрона, который можно рассматривать в качестве частицы-зонда электронной структуры дефекта [5–7].

В настоящей работе предпринята успешная попытка „зондирования“ позитронами точечных дефектов кристаллической решетки в нитридах AlN и GaN. Будучи эмиттированными из области дефекта, пары гамма-квантов электрон-позитронной аннигиляции детектировались с помощью прецизионных измерений угловых корреляций [8]. Такая методика регистрации аннигилирующих пар [9] позволяет оценить величину средней плотности аннигилирующих электронов и сделать определенные заключения относительно того, в какой конфигурации входят остовы атомов Al и Ga в состав позитронно-чувствительных дефектов в AlN и GaN.

## 2. Экспериментальная методика

Прецизионный спектрометр измерений угловых корреляций обладал разрешающей способностью  $\approx 0.9$  мрад [3]. Использовалась схема с длинными коллимационными щелями перед детекторами аннигиляционных гамма-квантов, обеспечивающая получение так называемых одномерных (1D) кривых угловой корреляции аннигиляционного излучения (1D-УКАИ) [8,9]. Статистическая погрешность измерений в области углов детектирования  $\Delta\theta \approx 6\text{--}15$  мрад, необходимая для корректного определения величины электрон-позитронного радиуса, изменялась в указанном интервале в пределах от  $\approx 1.1\%$  до  $\approx 5.3\%$ . Экранирование детекторов и стабильность аппаратуры обеспечивали крайне низкий уровень фона, который составлял менее 0.4% от скорости счета в максимуме кривой 1D-УКАИ [3,5]. Измерения кривых 1D-УКАИ проводились при температуре 18°C.

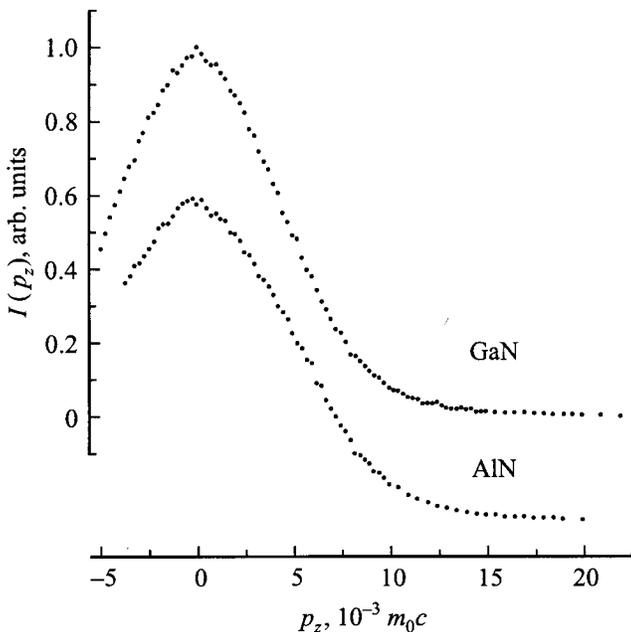
Производная функции 1D-УКАИ по импульсу, необходимая для определения плотности импульсного распределения электрон-позитронных пар, рассчитывалась с помощью стандартной процедуры сглаживания спектральной кривой 1D-УКАИ [8,9]. Образец химически чистого отожженного алюминия использовался для определения длины электрон-позитронного радиуса ионного остова  $\text{Al}^{3+}$ , служившего в качестве эталона для исследования нитрида AlN. Для определения достоверных значений электрон-позитронного ионного радиуса в GaN его длина сопоставлялась с соответствующими данными, полученными для химически чистого Ga и ряда бинарных полупроводников GaP, GaAs и GaSb. В ка-

<sup>¶</sup> E-mail: emtsev@pop.ioffe.rssi.ru

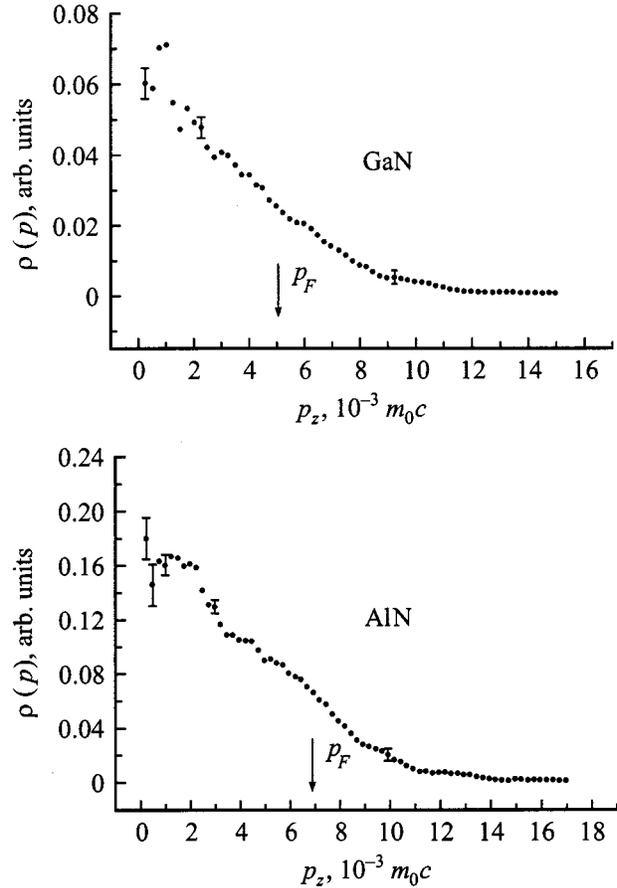
честве образцов Ga(B<sup>5</sup>) служили материалы, изготовленные по методике Чохральского: GaP(S), GaAsP(Te) и GaSbP(S), *n*-типа проводимости, концентрация носителей при  $T = 300$  К составляла  $n \approx (3-7) \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ , плотность дислокаций в указанных материалах не превышала  $\approx 10^4 \text{ см}^{-2}$ . В экспериментах наблюдалась максимальная ширина на половине максимума кривых 1D-УКАИ  $\theta_{1/2}(\text{GaP}) \approx 5.1$  мрад,  $\theta_{1/2}(\text{GaAs}) \approx 4.95$  мрад и  $\theta_{1/2}(\text{GaSb}) \approx 4.5$  мрад, характерная для совершенных кристаллов [4,10].

### 3. 1D-УКАИ и импульсное распределение электронов в AlN и GaN

Кривые 1D-УКАИ для AlN и GaN имеют вид, типичный для кристаллов с ионно-ковалентным типом связи атомов в кристаллической решетке (см. рис. 1). Отсутствие в кривых 1D-УКАИ специфического „узкого“ компонента свидетельствует о крайне малой вероятности образования и аннигиляции позитронов в исследованных нитридах. Оценка величины средней плотности валентных электронов в указанных материалах, сделанная в рамках модели независимых частиц для изотропного ферми-газа электронов [1], дает величину для параметра  $r_s(\text{AlN}) \approx 1.6091$  а.е. и  $r_s(\text{GaN}) \approx 1.6568$  а.е. ( $r_s$  — радиус сферы, приходящейся на один электрон). Полуширина на половине высоты ( $\theta_{1/2}$ ) спектральной



**Рис. 1.** Кривые угловой корреляции аннигиляционного излучения в AlN и GaN (сдвинуты по оси ординат для наглядности):  $I(\theta)$  — значения скорости счета, нормированные к максимальному значению,  $p_z \approx \theta \cdot m_0 c$ ,  $\theta$  — угол детектирования пары аннигиляционных гамма-квантов ( $p_z$  — проекция импульса на выделенное направление, см. текст, а также [8,9]).

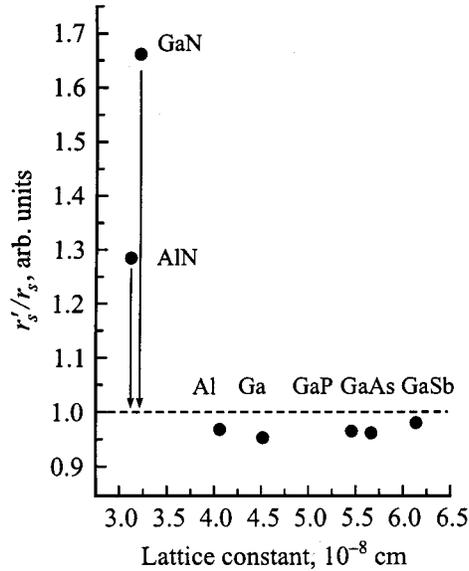


**Рис. 2.** Плотность импульсного распределения электрон-позитронных пар  $\rho(p)$ , восстановленная по результатам измерений 1D-УКАИ в AlN и GaN:  $p_F$  — импульс Ферми (см. текст, а также [9] и ссылки в этой работе).

кривой 1D-УКАИ, рассчитанная по формуле  $\theta_{1/2}$  (мрад)  $\approx 9.923 \cdot r_s^{-1}$  (а.е.) [10], имеет несколько большую величину для AlN по сравнению с GaN, соответственно  $\theta_{1/2}(\text{AlN}) \approx 6.17$  мрад и  $\theta_{1/2}(\text{GaN}) \approx 5.99$  мрад. Величины  $\theta_{1/2}$ , полученные в экспериментах, оказались меньше для обоих материалов,  $\theta_{1/2}(\text{AlN, эксп.}) \approx 5.85$  мрад и  $\theta_{1/2}(\text{GaN, эксп.}) \approx 4.9$  мрад.

Радиус экранирования позитрона для указанных электронных плотностей слабо зависит от химической природы атомов твердого тела и равен  $\approx 2$  а.е. [11]. Возрастание электронной плотности вокруг позитрона несколько увеличивает скорость аннигиляции. В параметрах 1D-УКАИ этот эффект проявляется значительно слабее, чем в результатах измерения времени жизни позитронов [2], и в дальнейшем рассматриваться не будет.

Термализованный позитрон дает относительно малый вклад в результирующий импульс аннигилирующей пары  $p_{e^+e^-}$ , и основные параметры плотности импульсного распределения пары определяются импульсом электрона  $p_{e^-}$ . Вероятность детектирования пары аннигиляционных квантов, обладающих результирующим импуль-



**Рис. 3.** Отклонение параметра электронной плотности  $r'_s$ , полученного с помощью измерений 1D-УКАИ в нитридах и „родственных“ материалах, от значений  $r_s$ , рассчитанных на основе общепринятой модели независимых частиц [1]. Стрелками показана величина уменьшения электронной плотности в AlN и GaN, обусловленного аннигиляцией позитронов в области дефектов вакансионного типа.

сом  $p \approx p_{e^+e^-} \approx p_{e^-}$ , пропорциональна среднему значению импульса:

$$I(\theta) \cong \int_0^{\infty} p \rho(p) dp, \quad (1)$$

где  $\rho(p)$  — плотность импульсного распределения электронов,  $p \approx p_z \approx \theta \cdot m_0 c$ ,  $\theta$  — угол детектирования пары аннигиляционных гамма-квантов,  $p_z$  — проекция импульса на направление, перпендикулярное оси поворота детектора, задающего угол регистрации аннигиляционного излучения детекторами (подробнее см. [8] и ссылки в этой работе). Восстановленная по результатам измерений 1D-УКАИ функция  $\rho(p)$  в исследованных нитридах AlN и GaN имеет типичный для распределения Ферми вид, обычно наблюдающийся для материалов с большой долей ионного компонента в химических связях (см. рис. 2 и ссылку [6]). Импульс Ферми  $p_F$  соответствует ширине на половине высоты плотности импульсного распределения и приблизительно равен  $(6.7-6.9) \cdot 10^{-3} m_0 c$  в AlN и  $(5.0-5.2) \cdot 10^{-3} m_0 c$  в GaN.

Оцененная с помощью указанных значений  $p_F$  величина  $r'_s$  по формуле  $p_F \approx 13.99/r'_s$  [1] оказалась значительно меньше, чем предсказываемая на основе модели независимых частиц,  $r_s$ :  $r'_s(\text{AlN}) \approx 1.28 r_s$  и  $r'_s(\text{GaN}) \approx 1.66 r_s$  (см. рис. 3). Обращает на себя внимание существенное отличие этих данных от численных значений отношения  $\{r'_s/r_s\}$  для эталонных, „свободных“ от дефектов материалов, где  $\{r'_s/r_s\} \approx 1$ .

Обнаруженное существенное уменьшение электронной плотности вокруг позитрона ( $\approx 28\%$  и  $\approx 66\%$  соответственно для AlN и GaN) свидетельствует о протекании процесса аннигиляции позитрона в дефектах вакансионного типа.

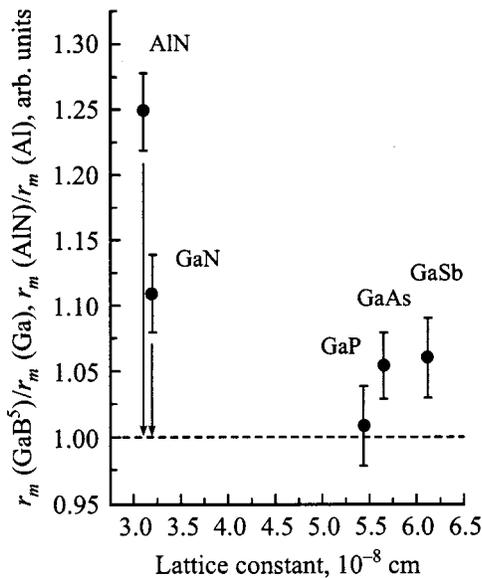
#### 4. Угловая корреляция аннигиляционного излучения, эмиттируемого из области ионных остовов AlN и GaN

Благодаря аннигиляции позитронов с остовными электронами рождаются пары квантов с большим результирующим импульсом, и поэтому плотность импульсного распределения  $\rho(p)$ , восстановленная из данных измерений 1D-УКАИ, не ограничивается величиной импульса Ферми  $p_F$  (см. рис. 1 и 2). Поскольку электроны оболочек остовов в значительной степени сохраняют атомный характер своих волновых функций, область импульсов  $p > p_F$  содержит информацию о химической природе атомов, в остовах которых происходит аннигиляция позитронов. Численные значения  $dI(p)/p dp \approx \rho(p)$ , восстановленные по экспериментальным данным для интервала  $0 \ll p < k_F^{-1}$ , довольно хорошо соответствуют расчетным величинам, полученным с помощью известного выражения [1,4,7,12]:

$$\rho(p) \cong \text{const} \cdot \exp\left(-\left(\frac{\alpha p}{\eta}\right)^2\right), \quad (2)$$

где  $p = \hbar k$ ,  $p_F = \hbar k_F$ ,  $k$  — волновой вектор электрона,  $\alpha$  — наиболее вероятное расстояние от ядра до электрона в момент его двухквантовой аннигиляции с позитроном. Обычно определяют электрон-позитронный ионный радиус  $r_m \approx \alpha$ , являющийся параметром высокоимпульсного компонента кривой 1D-УКАИ [1]. Результаты исследований указанного компонента 1D-УКАИ, выполненных для ионных кристаллов и окислов [1,12], металлов [1,4], алмазоподобных полупроводников [4,7] и высокотемпературных сверхпроводников [6], свидетельствуют о том, что параметр  $r_m$  в исследованных веществах приблизительно равен величине ионного радиуса остова, имеющего наибольшие размеры и наименьший заряд. Для определения химической природы атомов, с электронами остовов которых происходит аннигиляция позитронов в исследованных нитридах, мы сравнили значения  $r_m$  для GaN и AlN с данными, полученными для „эталонных“ Al, Ga и „родственных“ нитридам алмазоподобных полупроводников GaP, GaAs и GaSb.

Было установлено, что в Al и Ga величины параметров  $r_m(\text{Al}^{3+}) \approx 0.519 \pm 0.011 \text{ \AA}$  и  $r_m(\text{Ga}^{3+}) \approx 0.584 \pm 0.015 \text{ \AA}$  хорошо согласуются с общепринятыми значениями ионных радиусов  $r_i(\text{Al}^{3+}) \approx 0.53 \text{ \AA}$  и  $r_i(\text{Ga}^{3+}) \approx 0.62 \text{ \AA}$  [13]. Сходная картина наблюдалась и для ближайших структурных аналогов исследованных нитридов GaN и AlN, — наиболее совершенных кристаллов GaP и GaAs (см. рис. 4). Отношения



**Рис. 4.** Отклонение электрон-позитронного ионного радиуса  $r_m$  от стандартных значений, полученных для остовов  $\text{Al}^{3+}$  и  $\text{Ga}^{3+}$  в соответствующих металлах. Стрелки указывают на увеличение этого радиуса, связанное с аннигиляцией позитронов в области вакансионных комплексов  $[\text{N}_{\text{Ga}}\text{V}_{\text{N}}]$  в GaN и  $[\text{N}_{\text{Al}}\text{V}_{\text{N}}]$  (см. текст).

$r_m(\text{GaP})/r_m(\text{Ga}^{3+})$  и  $r_m(\text{GaAs})/r_m(\text{Ga}^{3+})$  здесь близки к единице и соответственно равны 1.0086 и 1.054. Если величину  $r_m(\text{Ga}^{3+}) \approx 0.584 \pm 0.015 \text{ \AA}$  в металлическом галлии принять за эталон, то отклонения от него составляют менее 1% для GaP и около 5% для GaAs. Несколько большее отклонение от эталонного значения ( $\approx 7\%$ ) получено для GaSb, вероятно, из-за присутствия в образце позитронно-чувствительных дефектов вакансионного типа (обсуждение этого вопроса будет проведено в отдельной статье).

Таким образом, в исследованных полупроводниках GaP, GaAs, GaSb величина электрон-позитронного „ионного радиуса“  $r_m$  определяется химической природой внешней  $3d$  электронной оболочки  $\text{Ga}^{3+}$ , а не остовов  $\text{P}^{5+}$ ,  $\text{As}^{5+}$  или  $\text{Sb}^{5+}$ . Аннигиляция позитронов в остовах  $\text{Ga}^{3+}$  надежно детектируется в измерениях 1D-УКАИ, поскольку позитрон в течение своего времени жизни находится в области эффективного отрицательного заряда химических связей атомов P, As или Sb и имеет четыре атома Ga в первой координационной сфере; аналогичное заключение верно и для остовов  $\text{In}^{3+}$  в „совершенных“ монокристаллах InP, InAs и InSb [4].

Для исследованных образцов AlN и GaN тем не менее наблюдается иная картина (см. рис. 4). Здесь обнаружены заметные отличия электрон-позитронного „ионного радиуса“  $r_m$  от эталонного значения: отношение  $r_m(\text{AlN})/r_m(\text{Al}^{3+})$  равно приблизительно 1.249, и несколько меньшая величина 1.108 получена для  $r_m(\text{GaN})/r_m(\text{Ga}^{3+})$ . Другими словами, наблюдалось существенное, на  $\approx 25\%$  в AlN и на  $\approx 11\%$

в GaN, увеличение электрон-позитронного радиуса ионного остова  $\text{Al}^{3+}$  и  $\text{Ga}^{3+}$ . Важно отметить, что для GaN также был получен сходный результат, когда в качестве эталонов служили „родственные“ соединения  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ :  $\{r_m(\text{GaN})/r_m(\text{GaP})\} = 1.0986$  и  $\{r_m(\text{GaN})/r_m(\text{GaAs})\} = 1.0986$ . Эти два обстоятельства — возрастание электрон-позитронного „ионного радиуса“  $r_m$  по сравнению с выбранным эталонным значением и отмечавшееся выше уменьшение электронной плотности в межатомном пространстве вокруг позитрона — указывают на протекание процесса аннигиляции позитронов с электронами остовов  $\text{Al}^{3+}$  и  $\text{Ga}^{3+}$  в области дефектов вакансионного типа соответственно в AlN и GaN.

Здесь нужно особо подчеркнуть, что, несмотря на существенное увеличение длины  $r_m$ , ее величина характеризует аннигиляцию позитрона с электронами внешних электронных оболочек именно остовов  $\text{Ga}^{3+}$  или  $\text{Al}^{3+}$ . Это заключение следует из сопоставления значений  $r_m$  и ионного радиуса  $r_i$ , которое приводит к весьма близкой к единице величине отношений  $\{r_m(\text{GaN})/r_i(\text{Ga}^{3+})\} \approx 1.044$  и  $\{r_m(\text{AlN})/r_i(\text{Al}^{3+})\} \approx 1.2147$ . Из-за гораздо более сильного кулоновского отталкивания позитрон практически не аннигилирует на электронах остова  $\text{N}^{5+}$ .

Важно отметить, что к полученным значениям  $r_m$  не может приводить аннигиляция позитронов в изолированных вакансиях кристаллической решетки исследованных нитридов. Действительно, *изолированные* вакансии галлия или алюминия не содержат в ближайшем окружении остовы  $\text{Ga}^{3+}$  или  $\text{Al}^{3+}$ , а *изолированная* вакансия азота, имея эффективный положительный заряд, вероятнее всего, не захватывает позитрон.<sup>1</sup>

Поэтому для непротиворечивой интерпретации совокупности экспериментальных данных требуется выдвинуть предположение об аннигиляции позитрона в области вакансионного примесного комплекса.<sup>2</sup>

Допустим, что комплекс в исследованных нитридах состоит из анионной вакансии и катиона и последний занимает положение антисайта. В такой конфигурации комплекса позитрон находится в свободном объеме, созданном тремя остовами азота и одним остовом катиона. Здесь, очевидно, доминирует процесс аннигиляции позитрона в области заряда, связанного с атомами азота, и вклад в угловую корреляцию аннигиляционного излучения от катионов должен быть в несколько раз меньше

<sup>1</sup> Как показывают расчеты, волновая функция позитрона, захваченного анионной вакансией в бинарных соединениях, имеет тенденцию к распространению в межузельную область; в изолированных вакансиях N, C и O соединений GaN, SiC и MgO позитрон вообще не имеет связанных состояний [2].

<sup>2</sup> Теоретически [2], анионно-катионная дивакансия создает объем для эффективной локализации позитрона; в GaN и AlN, как и в большинстве бинарных соединений с большой долей ионной составляющей в химических связях, образование изолированных дивакансий, по-видимому, маловероятно, хотя для интерпретации результатов экспериментов с радиационными дефектами в полупроводниковых соединениях иногда привлекают различные модели многовакансионных комплексов (подробнее см. [14]).

наблюдаемого, величина которого находится в диапазоне 21–28% как для исследованных нитридов, так и для материалов эталонов [4].

Таким образом, указанная конфигурация позитронно-чувствительных дефектов, вероятно, малоприспособлена для интерпретации экспериментальных данных.

В этой связи представляет интерес вакансионно-примесный комплекс, состоящий из катионной вакансии, захватившей ближайший атом азота с образованием антисайта, и вакансии азота,  $[N_{Ga}V_N]$  в GaN и  $[N_{Al}V_N]$  в AlN. Есть основания полагать, что в комплексе „антисайт атома азота + азотная вакансия“ эффективные заряды катионных и анионных вакансий взаимно компенсируются; здесь свободный объем для захваченного позитрона создается тремя ионными остовами катионов ( $Ga^{3+}$  в GaN и  $Al^{3+}$  в AlN) и одним атомом азота. Такое атомное окружение обеспечивает позитрону условия для наблюдавшегося процесса аннигиляции в пространстве между катионными ионными остовами, где характеристическая длина  $r_m$  увеличена, а электронная плотность понижена. Отметим здесь, что подобные комплексы в нитриде галлия теоретически обсуждались ранее в [15].

## 5. Заключение

В настоящей работе впервые проведены измерения кривых 1D-УКАИ в нитридах AlN и GaN. Оценки электронной плотности, выполненные с помощью данных измерений импульсного распределения электрон-позитронных пар, дают существенно более низкие значения по сравнению с предсказываемыми величинами  $r_s$ , рассчитанными на основе модели независимых частиц для идеального ферми-газа:  $r'_s(\text{AlN}) \approx 1.28r_s$  и  $r'_s(\text{GaN}) \approx 1.66r_s$ . Полученные результаты убедительно свидетельствуют о протекании процессов аннигиляции позитронов в областях дефектов вакансионного типа.

Привлечение данных систематических исследований 1D-УКАИ в металлах Al, Ga и алмазоподобных полупроводниках GaP, GaAs и GaSb для анализа полученных результатов приводит к заключению о доминирующем процессе аннигиляции позитронов с электронами внешних электронных оболочек  $Ga^{3+}$  в GaN и  $Al^{3+}$  в AlN. Выдвинуто предположение об аннигиляции позитронов в областях вакансионных комплексов, имеющих конфигурацию „антисайт атома азота + азотная вакансия“  $[N_{Ga}V_N]$  в GaN и  $[N_{Al}V_N]$  в AlN.

Настоящая работа была выполнена при финансовой поддержке CRDF (грант RP1-2258).

## Список литературы

- [1] R.A. Ferrell. Rev. Mod. Phys., **28**, 3, 308 (1956).
- [2] M.J. Puska, S. Mäkinen, M. Manninen, R.M. Nieminen. Phys. Rev. B, **39**, 11, 7666 (1989).
- [3] Н.Ю. Арутюнов, А.С. Балтенков, В.Б. Гилерсон, В.Ю. Трашакон. ФТП, **20**, 10, 1753 (1986).

- [4] N.Yu. Arutyunov. In: Proc. of International Positron Workshop ed. by P. Sperr, G. Kogel (Univ. Bundeswehr, 1989).
- [5] Н.Ю. Арутюнов, В.В. Емцев, В.Ю. Трашакон, Э.Э. Рубинова. ФТП, **20**, 532 (1986).
- [6] V.F. Masterov, V.A. Kharchenko, N.Yu. Arutyunov. Superconductivity: Physics, Chemistry, Technique, **5**, 1211 (1992).
- [7] N.Yu. Arutyunov. Sol. St. Phenomena, **57**, **58**, 4894 (1997).
- [8] В.И. Гольданский. Физическая химия позитрона и позитрония (М., Наука, 1968).
- [9] A.T. Stewart. Canadian J. Phys., **35**, 168 (1957).
- [10] N.Yu. Arutyunov. Mater. Sci. Forum, **105**, **110**, 583 (1992).
- [11] А.Д. Сахаров. ЖЭТФ, **18**, 631 (1948).
- [12] N.Yu. Arutyunov. In: Positron and Positronium Chemistry, ed. by Y.C. Jean (World Scientific Pub., Singapore, 1990).
- [13] Ж.П. Сюше. Физическая химия полупроводников (М., Металлургия, 1969).
- [14] В.В. Емцев, Т.В. Машовец. Примеси и точечные дефекты в полупроводниках (М., Радио и связь, 1981).
- [15] D.J. Chadi. Appl. Phys. Lett., **71**, 2970 (1997).

Редактор Л.В. Беляков

## Investigation of vacancy-type complexes in GaN and AlN compounds with the positron annihilation technique

N.Yu. Arutyunov, A.V. Mikhailin, V.Yu. Davydov\*, V.V. Emtsev\*, G.A. Oganesyanyan\*, E.E. Haller†

Institute for Electronics,  
700143 Tashkent, Uzbekistan  
\* Ioffe Physicotechnical Institute,  
Russian Academy of Sciences,  
194021 S.-Petersburg, Russia

† Department of Materials Science and Engineering,  
University of California at Berkeley,  
CA 94720, Berkeley USA

**Abstract** The momentum distributions of electron-positron pairs in GaN and AlN have been for the first time investigated with the help of a technique of measurements of the one-dimensional angular correlation of the annihilation radiation (1D-ACAR). It has been established that the value of a characteristic parameter of the electron density  $r'_s$  (the radius of the sphere occupied by an electron), when estimated on the basis of experimental data, differs noticeably from  $r_s$  calculated in the framework of a model of non-interacting particles:  $r'_s(\text{AlN}) \approx 1.28r_s$  and  $r'_s(\text{GaN}) \approx 1.66r_s$  where  $r_s(\text{AlN}) \approx 1.6091$  a.u. and  $r_s(\text{GaN}) \approx 1.6568$  a.u. The chemical nature of the nearest surrounding of annihilating positrons in AlN and GaN was identified by means of the electron-positron radius of ions of  $Al^{3+}$ ,  $Ga^{3+}$  and  $N^{5+}$  determined by the high momentum component of 1D-ACAR curves. The analysis was based on a comparison of the electron-positron ionic radius with those known as standard ones for metals Al and Ga as well as in related compounds like GaP, GaAs, and GaSb. The data obtained allowed us to conclude that the positron annihilation occurs mostly in the regions of vacancy-type complexes „nitrogen antisite–nitrogen vacancy“  $[N_{Ga}V_N]$  and  $[N_{Al}V_N]$  in GaN and AlN, respectively.