

Т. В. Первалов, А. В. Шапошников, В. А. Гриценко

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ОБЪЁМА И ДЕФЕКТОВ В α - Al_2O_3

(Работа поддержана интеграционным проектом № 97
Сибирского отделения РАН и грантом РФФИ № 16621а)

Существующие в литературе теоретические исследования α - Al_2O_3 ограничиваются изучением бездефектного объёмного кристалла. Собственные дефекты в α - Al_2O_3 остаются малоизученными. Актуальной задачей является изучение α - Al_2O_3 с вакансиями кислорода. Работа посвящена зонным расчетам электронной и фононной структуры одного из перспективных альтернативных диэлектриков α - Al_2O_3 . Расчеты осуществляются с использованием программного пакета ESPRESSO. Проводятся расчёты и анализ зонного и фононного спектров, эффективных масс электронов и дырок, парциальных плотностей состояний α - Al_2O_3 и сравнение их с экспериментальными рентгеновскими эмиссионными спектрами и ультрафиолетовыми спектрами эмиссии и поглощения. Изучается атомная и электронная структура α - Al_2O_3 с кислородными вакансиями. Обнаружено, что вакансии кислорода являются центром локализации и для электронов и для дырок.

Ключевые слова: α - Al_2O_3 , вакансии кислорода, ТФП, ESPRESSO, альтернативные диэлектрики.

T. Perevalov, A. Shaposhnikov, V. Gritsenko

ELECTRONIC STRUCTURE OF BULK AND DEFECT α - Al_2O_3

Theoretical investigations of α - Al_2O_3 do go further than the exploration of ideal bulk crystal. Eigen defects in α - Al_2O_3 are still little-studied. The investigation of α - Al_2O_3 with oxygen vacancy seems to be an urgent problem. This paper is devoted to the simulation of electron and phonon structure of one of the most perspective high- k dielectrics α - Al_2O_3 . Calculations of electronic structure are carried out in Quantum-Espresso package. The calculation and analysis of band and phonon spectra, effective electron and hole masses, partial densities of state of α - Al_2O_3 , and the comparison of results with experimental X-ray emission spectra and ultraviolet spectra of emission and absorption have been done. The atomic and electronic structure of α - Al_2O_3 with oxygen vacancy has been also studied. It was found that oxygen vacancy is the localization center for both electrons and holes.

Key words: α - Al_2O_3 , oxygen vacancy, DFT, ESPRESSO, high- k dielectric.

Заряд в инверсионном канале полевого МДП-транзистора (металл–диэлектрик–полупроводник) пропорционален электрической ёмкости образуемой затвором, подзатворным диэлектриком и кремниевой подложкой:

$$Q = C \cdot V. \quad (1)$$

Чем больше емкость C затвора МДП транзистора, тем при заданном потенциале на затворе больше заряд в инверсионном канале, тем выше его проводимость, выше крутизна вольт-амперной характеристики транзистора, тем выше его быстроедействие. Выражение для ёмкости C имеет вид

$$C = \frac{\varepsilon\varepsilon_0 S}{d}, \quad (2)$$

где ε и ε_0 — относительная диэлектрическая проницаемость и диэлектрическая постоянная соответственно; S — площадь; d — толщина диэлектрика.

Увеличение информационной емкости микросхем осуществляется по правилам масштабирования, согласно которым уменьшение длины канала сопровождается увеличением электрической емкости подзатворного диэлектрика. Первым универсальным диэлектриком в кремниевых микросхемах был термический оксид кремния SiO_2 ($\varepsilon = 3,9$). Толщина оксида кремния в первых кремниевых МДП транзисторах составляла величину ≈ 100 нм. По мере уменьшения длины канала МДП транзистора увеличение емкости осуществляется за счет уменьшения толщины подзатворного диэлектрика. В настоящее время (2008 г.) в передовых фирмах используется проектная норма 65 нм. При этом толщина подзатворного оксида составляет величину 1,0-1,2 нм. Переход на проектную норму 45 нм требует дальнейшего увеличения емкости затвора. Однако дальнейшее уменьшение толщины подзатворного оксида кремния приводит к неприемлемо большому туннельному току утечки. Допустимый ток утечки лежит на уровне 1 А/см². Большие токи утечки приводят к недопустимо большому дополнительному рассеянию мощности и к уменьшению крутизны вольт-амперной характеристики транзистора из-за вытягивания неосновных носителей из инверсионного канала на затвор.

С 2000 года вместо термического оксида в качестве подзатворного диэлектрика используется оксинитрид кремния SiO_xN_y ($\varepsilon \approx 5$). По прогнозам в логических схемах с небольшим потреблением мощности (портативные приборы) SiO_xN_y будет использоваться до 2018 года. В таких приборах ток утечки при напряжении 1 В не должен превышать значения $1,5 \cdot 10^{-2}$ А/см². В быстродействующих схемах с большой рассеиваемой мощностью, в частности, в микропроцессорах использование оксинитрида кремния не решает проблемы масштабирования. Радикального увеличения емкости можно добиться только путем замены оксида или оксинитрида кремния на диэлектрик с высокой диэлектрической проницаемостью (high-k диэлектрик) [12]. Отметим, что в данной терминологии диэлектрическая проницаемость обозначается символом k , хотя в физике диэлектрическая проницаемость обозначается символом ε .

В качестве подзатворных high-k диэлектриков в настоящее время рассматриваются оксид гафния HfO_2 ($\varepsilon \approx 25$), оксид циркония ZrO_2 ($\varepsilon \approx 25$), силикаты гафния HfSiO_4 ($\varepsilon \approx 15$) и циркония ZrSiO_4 ($\varepsilon \approx 15$), оксинитрид гафния HfO_xN_y ($\varepsilon \approx 15$), оксид алюминия Al_2O_3 ($\varepsilon \approx 10$) [15].

Термический SiO_2 используется также в качестве изолятора в запоминающем конденсаторе статических (СОЗУ) и динамических (ДОЗУ) оперативных запоминающих устройств [15]. Увеличение плотности информации ОЗУ сопровождается увеличением зарядовой емкости запоминающего конденсатора. Увеличение зарядовой емкости осуществляется за счет уменьшения толщины оксида. При малых толщинах оксида возрастает ток утечки запоминающего конденсатора, что приводит к растеканию заряда, накопленного на обкладках конденсатора. Ток утечки диэлектрика в запоминающем конденсаторе ДОЗУ не должен превышать значения 10^{-7} А/см². Использование диэлектрика с большой диэлектрической проницаемостью позволяет уменьшить площадь конденсатора

в ОЗУ, то есть увеличить информационную емкость памяти. Дальнейшее масштабирование ОЗУ связано с использованием high-k диэлектриков. В настоящее время в качестве изолятора в ДОЗУ и СОЗУ рассматриваются Al_2O_3 ($\epsilon = 10$), Ta_2O_5 , ($\epsilon = 22$), HfO_2 ($\epsilon = 25$).

Третье важное применение диэлектриков с высокой диэлектрической проницаемостью связано с использованием их в качестве блокирующего слоя в кремниевых флэш-элементах памяти [10; 16].

Одной из существенных проблем, которые возникают практически со всеми известными high-k диэлектриками, являются недопустимо высокие токи утечки через пленку подзатворного high-k диэлектрика. Общепринятая модель, объясняющая аномально высокие токи утечки через пленки high-k, состоит в том, что проводимость осуществляется по дефектным центрам. Основным типом собственного дефекта в high-k-окислах является вакансия кислорода, так как почти всегда в этих материалах наблюдается избыток металла.

Одним из наиболее перспективных high-k диэлектриков является Al_2O_3 ($\epsilon \approx 10$). Практическое использование Al_2O_3 особенно актуально в качестве блокирующего слоя во флэш-элементах памяти. Нерешённой проблемой такой памяти является недостаточно длительное хранение информации [7], т. е. заряда, накопленного на ловушках запоминающего нитрида кремния. Токи утечки связаны с наличием собственных дефектов в Al_2O_3 [7].

Среди множества полиморфных форм Al_2O_3 наиболее распространённой и широко используемой является $\alpha-Al_2O_3$ (корунд). Несмотря на то, что $\alpha-Al_2O_3$ интенсивно изучался ранее, собственные дефекты в нём мало изучены. Теоретические исследования $\alpha-Al_2O_3$ ограничиваются, главным образом, изучением бездефектного объёмного кристалла. Изучение атомной и электронной структуры дефектов в $\alpha-Al_2O_3$ и определение их способности локализовать носители заряда, т. е. участвовать в проводимости, являются актуальной задачей. Работа посвящена изучению электронной структуры объёма и вакансии кислорода в $\alpha-Al_2O_3$ методом численного моделирования.

Расчеты электронной структуры $\alpha-Al_2O_3$ проводятся с использованием современных методов расчета электронной структуры молекул и кристаллов, реализованных в программном пакете Quantum-ESPRESSO [14]. В основе программы лежит теория функционала плотности (ТФП) Кона—Шема для обменной энергии и энергии корреляции. Программа решает задачу для самосогласованного потенциала [3]. Блоховские функции электронов в кристалле ищутся в виде разложения по системе базисных функций, в качестве которых используются плоские волны. Приближение псевдопотенциала позволяет значительно уменьшить количество базисных плоских волн в разложении электронных волновых функций.

Структура кристалла описывается через задание элементарной ячейки, а трансляционная симметрия учитывается через периодические граничные условия на границе элементарной ячейки. Для каждого типа расчётов задаются координаты атомов в элементарной ячейке и параметры ячейки. Дополнительно задаются псевдопотенциалы каждого типа атомов.

В расчете используются следующие электронные конфигурации для Al : $[Ne] 3s^2 3p^1$ и O : $[He] 2s^2 2p^4$, где состояния $[Ne]$, $[He]$ относятся к остову. Остовные электроны учитывались через использование ультрамягких (ultrasoft)

псевдопотенциалов. Используется локальный обменно-корреляционный функционал LDA (local density approximation) в параметризации PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof).

Кристаллическая структура $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ описывается примитивной элементарной ячейкой. Ячейка принадлежит тригональной ромбоэдрической сингонии (пространственная группа симметрии R-3cR) и содержит 10 базисных атомов (рис. 1, а). Постоянные решётки: $\mathbf{a} = \mathbf{b} = \mathbf{c} = 5,128 \text{ \AA}$ и $\alpha = \beta = \gamma = 55,27^\circ$. Атомы Al в структуре $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ шестикратно координированы атомами O, причём таким образом, что имеются 3 ближайших атома O на расстоянии $1,85 \text{ \AA}$, и три следующих за ближайшими атомами O на расстоянии $1,98 \text{ \AA}$. Атомы O в структуре $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ четырёхкратно координированы атомами Al.

Рассчитан зонный спектр $E(k)$ $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (рис. 2). Общий вид рассчитанной зонной структуры $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ качественно хорошо согласуется с зонными структурами $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, полученными ранее другими расчётными методами [6; 19]. $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ является прямозонным диэлектриком с вершиной валентной зоны и дном зоны проводимости в центре зоны Бриллюэна (Г-точке обратного пространства). Ширина запрещённой зоны составляет $E_g = 6,0 \text{ эВ}$. Экспериментальные значения E_g для кристаллического Al_2O_3 лежат в интервале энергий $6,5\text{--}8,5 \text{ эВ}$ [1; 8; 13; 20]. Заниженное расчётное значение ширины запрещённой зоны по сравнению с экспериментальным характерно для расчётов, основанных на ТФП. Известно, что ТФП систематически недооценивает ширину запрещённой зоны широкозонных материалов.

Валентная зона $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ состоит из двух подзон, разделённых широкой ионной щелью $9,5 \text{ эВ}$. Ширина верхней подзоны валентной зоны составляет $6,5 \text{ эВ}$; ширина нижней подзоны — $2,6 \text{ эВ}$. В работе [19] значения ширины верхней и нижней подзон валентной зоны на $1,5\text{--}2 \text{ эВ}$ больше.

Закон дисперсии $E(k)$ вблизи потолка валентной зоны и дна зоны проводимости позволяет оценить эффективные массы дырок и электронов соответственно из формулы:

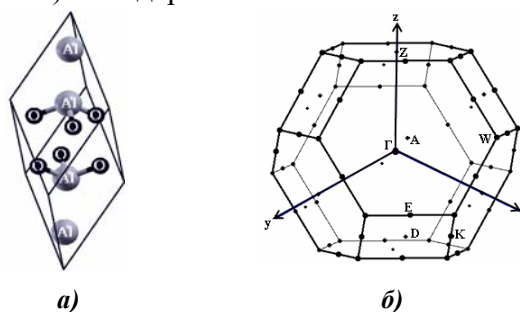


Рис. 1. Кристаллическая структура $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ — тригональная ячейка с четырьмя атомами Al и шестью атомами O (а); зона Бриллюэна тригональной ячейки $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ с выделенными точками симметрии (б)

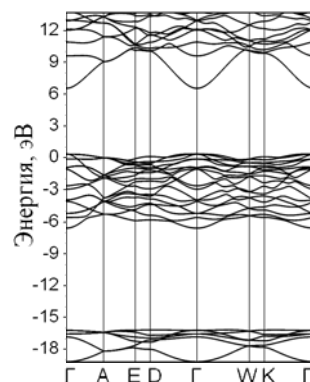


Рис. 1. Кристаллическая структура $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ — тригональная ячейка с четырьмя атомами Al и шестью атомами O (а); зона Бриллюэна тригональной ячейки $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ с выделенными точками симметрии (б)

$$m_{\alpha\beta}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}. \quad (3)$$

Эффективная масса — это симметричный тензор второго ранга, т. е. может отличаться в различных направлениях для анизотропных кристаллов. Наибольший интерес представляют наименьшее и наибольшее значения эффективных масс и соответственно направления, вдоль которых массы принимают экстремальные значения. Наиболее медленному изменению $E(k)$ соответствует максимальная эффективная масса, наиболее быстрому изменению $E(k)$ —

	направление	m^*/m_0
m_e^*	Г-А	0.41
	\perp Г-А	0.39
m_h^*	Г-А	0.35
	\perp Г-А	7.3

минимальная эффективная масса. В таблице приведены расчетные значения максимальных и минимальных эффективных масс электронов m_e^* и дырок m_h^* в кристалле $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ с указанием соответствующих направлений в обратном пространстве. Массы приведены в атомной системе единиц (в единицах m_0).

Эффективная масса электронов в кристалле $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ практически изотропна $m_e^* \approx 0,4m_0$. Это значение следует сравнить с экспериментальными величинами туннельной эффективной массы для электронов в Al_2O_3 , $m_e^* = 0,3m_0$ [18] и $m_e^* = (0,22 - 0,42)m_0$ [11]. Следует отметить, что в расчётной работе [19] обнаружена анизотропия эффективных масс электронов $m_e^* = (0,16 - 0,45)m_0$, что не подтверждается в настоящих расчётах.

Наблюдается сильная анизотропия эффективной массы дырок в кристалле $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. Экспериментальные значения эффективных масс дырок в Al_2O_3 в литературе не приводятся. На вершине валентной зоны в Г-точке расчет дает две близкие по энергии зоны ($\Delta E \approx 0,01$ эВ), имеющие существенно разный закон дисперсии. Расположенная выше зона соответствует легким дыркам, расположенная ниже — тяжелым дыркам.

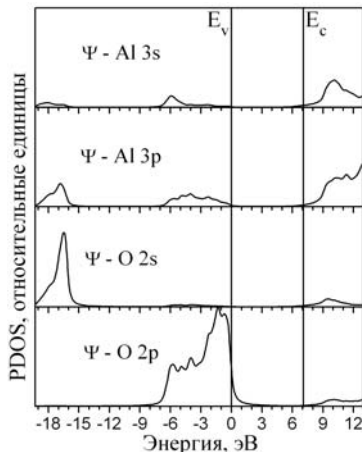


Рис. 3. Расчетные парциальные плотности состояний для 3s, 3p орбиталей Al и 2s, 2p орбиталей O для $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. Нулевая энергия соответствует положению верха валентной зоны. Спектры уширены кривой Лоренца с полушириной $\sigma = 0,2$

Рассчитаны парциальные плотности состояний (PDOS — partial density of states) для $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (рис. 3). Вблизи дна зоны проводимости — очень низкая плотность электронных состояний, что хорошо согласуется с предыдущими расчётами. Зона проводимости формируется в основном из 3s и 3p орбиталей Al. В состояния вблизи дна зоны проводимости дают вклад O 2s орбитали. Верхняя подзона валентной зоны формируется 2p электронными состояниями O с незначительной примесью состояний Al 3s и Al 3p. Нижняя подзона валентной зоны (при энергии ≈ 20 эВ) сформирована в основном 2s состояниями O с примесью 3s, 3p орбиталей Al.

Совмещенные в единой энергетической шкале результаты рентгеновской эмиссионной спектроскопии α - Al_2O_3 (взяты из работы [2]) и соответствующие расчётные парциальные плотности состояний представлены на рис. 4. Качественное согласие расчётной парциальной плотности состояний с рентгеновскими спектрами эмиссии и поглощения наблюдается только для O 2p орбиталей и O K спектров (O K спектр соответствует переходам с O 2p на O 1s уровни). Расчётная относительная интенсивность пиков, соответствующих парциальной плотности $Al\ 3p$ состояний в нижней валентной подзоне существенно превышает интенсивности пиков в верхней валентной зоне. Подобное расхождение пиков наблюдается в SiO_2 и Si_3N_4 [4; 9].

Расчётная парциальная плотность для $Al\ 3s$ не позволяет адекватно описать особенности структуры экспериментального $Al\ L_{II, III}$ спектра ($Al\ L_{II, III}$ спектр соответствует переходам из валентной зоны на $Al\ 2p$ уровни). В частности, в $Al\ 3s$ расчётном спектре отсутствует верхний пик при энергии ≈ 3 эВ. В SiO_2 и Si_3N_4 , где наблюдается аналогичное расхождение, происхождение верхнего пика в валентной зоне связано с $3d$ орбиталями Si и нелокальными (двухцентровыми) переходами [4]. Расчёт электронной структуры α - Al_2O_3 с корректным учетом вклада $Al\ 3d$ орбиталей для описания рентгеновских спектров эмиссии не входил в задачи настоящей работы. Стоит отметить, что, согласно расчетам авторов [4], включение $3d$ орбиталей для Si не приводит к существенному изменению эффективных масс дырок и электронов в SiO_2 и Si_3N_4 . Согласие с рентгеновским спектром эмиссии $Al\ K$ отсутствует ($Al\ K$ спектр соответствует переходам из валентной зоны на $Al\ 1s$ уровни).

На рис. 5. представлены экспериментальные ультрафиолетовый фотоэлектронный спектр (UPS — ultraviolet photoelectron spectra) и рентгеновский фотоэлектронный спектры Al_2O_3 (XPS — X-ray photoelectron spectra). Пунктирными линиями представлены расчетные UPS и XPS спектры, полученные суммированием парциальных плотностей

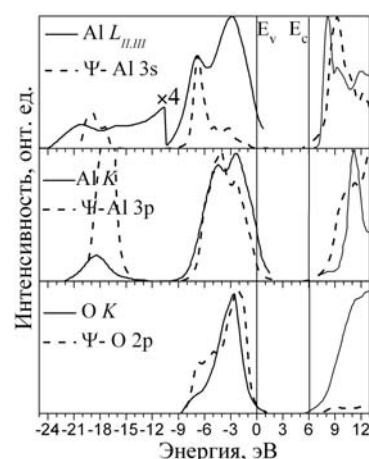


Рис. 4. Сравнение экспериментальных рентгеновских спектров эмиссии и поглощения Al_2O_3 (сплошные линии) с соответствующими расчётными парциальными плотностями состояний (пунктирные линии). За нулевую энергию принято положение верха валентной зоны. Расчётные кривые уширены кривой Лоренца с полушириной $\sigma = 0,4$

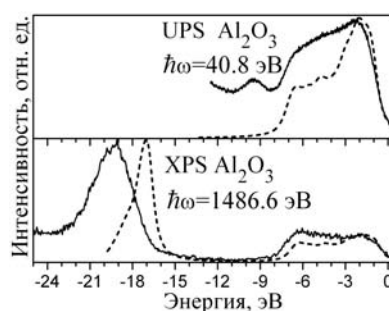


Рис. 5. Сравнение экспериментальных UPS и XPS спектров Al_2O_3 (сплошные линии) с соответствующими расчётными спектрами (пунктирные линии). За нулевую энергию принято положение верха валентной зоны. Расчётные кривые уширены кривой Лоренца с полушириной $\sigma = 0,4$

состояний валентных орбиталей $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ с весовыми множителями, равными соответствующим сечениям фотоионизации, взятых из работы [17].

Видно, что относительные интенсивности основных пиков для расчётной UPS кривой (энергии $\approx 2,5$ эВ и ≈ 5 эВ) хорошо согласуются с относительными интенсивностями экспериментального UPS спектра (энергии $\approx 2,5$ эВ и ≈ 10 эВ). Аналогичное согласие наблюдается и для XPS спектров. Относительные интенсивности основных пиков расчётного XPS спектра (энергии $\approx 2,5$ эВ, $\approx 7,3$ эВ и $\approx 17,5$ эВ) согласуются с относительными интенсивностями экспериментальных XPS спектров (энергии $\approx 2,5$ эВ, $\approx 7,5$ эВ и ≈ 20 эВ). Несоответствие положений основных пиков, по всей видимости, вызвано заниженным расчетным значением ширины обеих подзон валентной зоны. Таким образом, можно заключить, что расчётные UPS и XPS спектры показывают удовлетворительное качественное соответствие с экспериментальными UPS- и XPS-спектрами Al_2O_3 .

Рассчитан дискретный спектр собственных фононных частот ν_i в Γ точке k -пространства (рис. 6). Гладкая кривая фононной плотности состояний $\rho(\nu)$ получена с помощью сглаживания по формуле Лоренца:

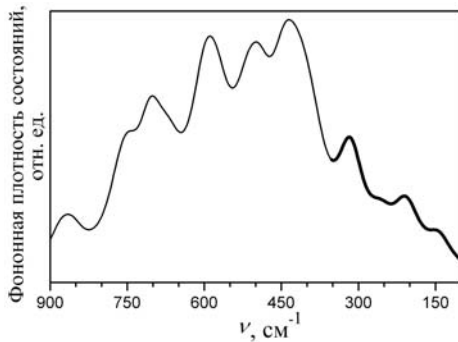


Рис. 6. Расчётная фононная плотность состояний $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$

$$\rho(\nu) = \frac{1}{\pi} \sum_i \frac{\sigma}{(\nu - \nu_i)^2 + \sigma^2}. \quad (4)$$

Из графика фононной плотности состояний видно, что у $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ имеются собственные колебания решётки с частотами в диапазоне ниже 400 см^{-1} , отсутствующие в спектре собственных колебаний SiO_2 [5]. Именно наличие этих мод приводит к тому, что $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ обладает относительно высокой статической диэлектрической проницаемостью $\epsilon_0 \approx 10$ (по сравнению с SiO_2),

поскольку решёточная поляризуемость кристалла обратно пропорциональна значению собственной частоты (3):

$$k = n^2 + \frac{Ne^2 Z_T^2}{m\omega_{\text{TO}}^2}, \quad (5)$$

где n — показатель преломления (n^2 — высокочастотное значение диэлектрической проницаемости); N — число ионов в единице объема; Z_T — «поперечный» эффективный заряд; ω_{TO} — частота поперечных оптических фононов. Аналогичные расчеты фононной плотности состояний кристалла $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ в литературе отсутствуют.

Рассчитан тензор электронной составляющей диэлектрической проницаемости ϵ_{ij}^e $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (в декартовой системе координат):

$$\varepsilon_{ij}^e = \begin{pmatrix} 3,2 & 0,0 & 0,0 \\ 0,0 & 3,2 & 0,0 \\ 0,0 & 0,0 & 3,2 \end{pmatrix}$$

Значение $\varepsilon^e = 3,2$ согласуется с экспериментальным значением для показателя преломления $n = 1,8$ для $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$: $\varepsilon^e = n^2 = (1,8)^2 = 3,24$. В работе [19] рассчитанное значение $\varepsilon_{ij}^e = 3,86$.

Изучена атомная и электронная структура $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ с периодическим собственным дефектом — вакансией кислорода. Наличие кислородной вакансии приводит к появлению в энергетическом спектре кристалла набора уровней энергии. В частности, появляется дополнительный уровень в запрещённой зоне, который заполнен электронами (рис. 7). Незаполненные уровни, связанные с наличием дефекта, появляются выше дна зоны проводимости.

Анализ полных энергий дефектных и бездефектных ячеек $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ показывает, что захват электрона на кислородную вакансию в кристалле $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ энергетически выгоден. Положение дефектного уровня ниже дна зоны проводимости на 0,5 эВ, из чего следует, что вакансия кислорода является центром локализации для электронов и для дырок.

Захват дырки на кислородную вакансию в кристалле $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ также является энергетически выгодным, и дефектный уровень — выше потолка валентной зоны на 2,9 эВ. Вакансия кислорода в $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ является центром локализации для дырок.

Результаты по локализации электрона и дырки на вакансии кислорода подтверждаются пространственным распределением отрицательного и положительного зарядов в ячейке $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ с вакансией кислорода. Из рис. 8 видно, что в области вакансии и её первой координационной сферы имеется высокая концентрация заряда.

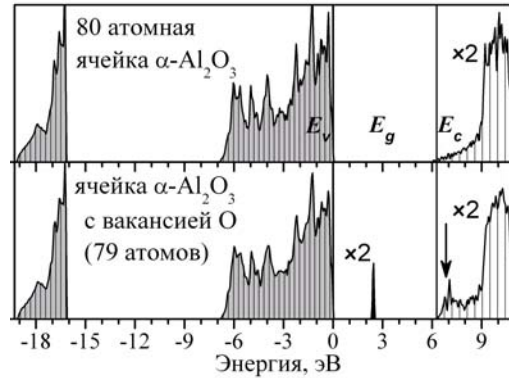


Рис. 7. Полная плотность электронных состояний $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ без кислородной вакансии и с вакансией кислорода. Закрашенная область — состояния, заполненные электронами

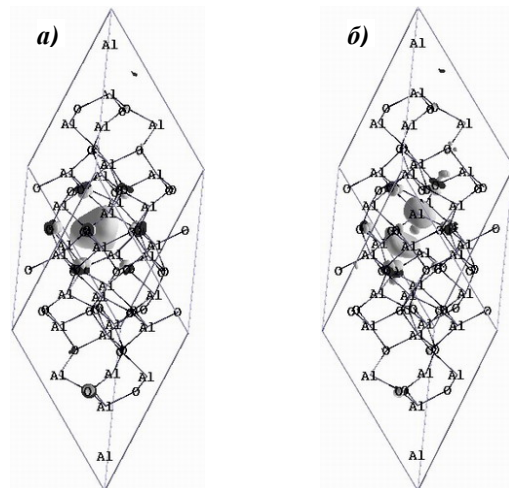


Рис. 8. Пространственное распределение: *a* — отрицательного заряда электрона и *б* — положительного заряда дырки в 79 атомной ячейке $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ с вакансией кислорода.

Серые области соответствуют поверхностям одинакового отрицательного/положительного заряда

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Абрамов В. Н., Карин М. Г., Кузнецов А. И.* и др. Электронная энергетическая структура и оптические свойства Al_2O_3 // ФТТ. 1979. Т. 21. № 1.
2. *Брытов И. А., Ромащенко Ю. Н.* Рентгеноспектральное исследование электронного строения окислов кремния и алюминия // ФТТ. 1978. Т. 20. С. 664.
3. *Грицан Н. П.* Квантовая химия. Ч. 1. Основы теории: Учебное пособие. — НГУ, 2001. С. 143.
4. *Гриценко В. А., Новиков Ю. Н., Шапошников В. А., Мороков Ю. Н.* Численное моделирование собственных дефектов в SiO_2 и Si_3N_4 // ФТП. 2001. Т. 35, № 9.
5. *Гриценко В. А.* Структура и электронная структура аморфных диэлектриков в кремниевых МДП структурах // ВО «Наука». 1993. С. 277.
6. *Barta P.* IBM Research Labolatory, Electronic structure of $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ // J. Phys.C: Solid State Phys. 1982. P. 15.
7. *Chang-Hyun Lee, Sung-Hoi Hur, You-Cheol Shin, Jeong-Hyuk Choi, Dong-GunPark, and Kiman Kim.* Charge-trapping device structure of $\text{SiO}_2/\text{SiN}/\text{high-k dielectric Al}_2\text{O}_3$ for high-density flash memory // Appl. Phys. Lett. 2005. Vol. 86. P. 152908.
8. *Gignac W. J., Williams R. S., Kowalczyk S. P.* Valence- and conduction-band structure of sapphire (1102) surface // Phys. Rev. B. 1985. Vol. 32. № 2.
9. *Gritsenko V. A., Ivanov R. M., Morokov Yu. N.* Electronic structure of amorphous SiO_2 : Experiment and numerical simulation // JETP. 1995. Vol. 81. № 6.
10. *Gritsenko V. A., Nasyrov K. A., Novikov Yu. N., Aseev A. L., Yoon S. Y., Lee J.-W., Lee E.-H., Kim C. W.* A new low voltage fast SONOS memory with high-k dielectric // Solid-State Electronics. 2003. Vol. 47. P. 1651–1656.
11. *Kerber A., Cartier E., Degrave R., et al.* Charge Trapping and Dielectric Reliability of $\text{SiO}_2 / \text{Al}_2\text{O}_3$ Gate Stacks with TiN Electrodes // IEEE Transaction on Electron Devices. 2003. Vol. 50. № 6. P. 1261–1269.
12. *Kington A. I., Maria J.-P., Streiffer S. K.* Alternative dielectrics to silicon dioxide for memory and logic devices // Nature. 2000. Vol. 406. P. 1032–1038.
13. *Lauser J. L., Shotet J. L., Cismaru C., Hansen R. W., Foo M. Y., Henn T. J.* Photoemission and conduction currents in vacuum ultraviolet irradiated aluminum oxide // J. Appl. Phys. 2002. Vol. 91. № 3.
14. Quantum ESPRESSO home page <http://www.quantum-espresso.org/>
15. *Robertson J.* High dielectric constant oxides // Eur. Phys. J. Appl. Phys. 2004. Vol. 28. P. 265–291.
16. *Roizin Y., Gritsenko V.* ONO Structures in Modern Microelectronics. Material Science, Characterization and Application. Chapter in book «Dielectric Films for Advanced Microelectronics», Eds. by M. R. Baklanov, M. Green, K. Maex, Wiley&Sons. 2007. P. 251–295.
17. *Yeh J. J.* Atomic Calculation of Photoionization Cross-Section and Asymmetry Parameters // Gordon and Breach Science Publisher. — Amsterdam, 1993.
18. *Yeo Y.-C., King T.-J., Hu C.* MOSFET gate leakage modeling and selection guide for alternative gate dielectrics based on leakage considerations // IEEE Transaction on Electron Devices. 2003. Vol. 50. № 4. P. 1027.
19. *Yong-Nian Xu, Ching W. Y.* Self-consistent band structures, charge distributions, and optical-absorption spectra in MgO , $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, and MgAl_2O_4 // Phys. Rev. B. 1991. Vol. 43. № 5.
20. *Yu H. Y., Li M. F., Cho B. J., Kwong D. L., Pan J. S.* et al. Energy gap and band alignment for $(\text{HfO}_2)_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{1-x}$ on (100) Si // Appl. Phys. Lett. 2002. Vol. 81. № 2.