

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ**  
**ЖИТОМИРСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ТЕХНОЛОГІЧНИЙ**  
**УНІВЕРСИТЕТ**  
**ЖИТОМИРСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ім.**  
**І.ФРАНКА**  
**НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**  
**УКРАЇНИ «КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ**  
**ІНСТИТУТ»**

Всеукраїнська науково-практична  
on-line конференція  
аспірантів, молодих учених та студентів  
**«Технічні науки на сучасному етапі»**  
*(присвячена Дню науки)*

**13 травня 2015 року**

УДК 546.711.49

**А.В. Зіновчук, к.ф.-м.н.**

*Житомирський державний університет імені Івана  
Франка*

## **РОЗРАХУНОК ШВИДКОСТІ ОЖЕ-РЕКОМБІНАЦІЇ В N-IN<sub>x</sub>GA<sub>1-x</sub>N**

Безвипромінювальні механізми втрат носіїв заряду в оптоелектронних приладах на основі InGaN потрійних сполук є предметом вивчення багатьох наукових груп. Повне розуміння цих механізмів є ключовим етапом до подолання типової для нітридних приладів проблеми, нетермічного падіння ефективності. З поміж інших, одним із можливих механізмів втрат, відповідальних за нетермічне падіння ефективності, вважається безвипромінювальна оже-рекомбінація. Згідно із класичною теорією, швидкість прямої оже-рекомбінації зменшується із зростанням ширини забороненої зони матеріалу. Тому слід очікувати, що в широкозонних сполуках In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N ( $x < 0.25$ ), які використовуються в випромінюючих приладах видимого діапазону ( $\lambda = 420 \div 550$  нм), швидкість оже-рекомбінації буде дуже малою. Але, розрахунки проведені в інших роботах показують, що швидкість прямої рекомбінації в In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N з ґраткою типу вюрциту значно зростає, якщо врахувати “резонансний” механізм з переходом оже-електрона в вищу зону провідності. Однак, значення для коефіцієнтів оже-рекомбінації, отримані в цих роботах, достатньо сильно відрізняються між собою. Це є наслідком використання під

час розрахунків чисельних моделей з різними наближеннями і спрощеннями. Окрім резонансних переходів між зонами провідності, швидкість оже-рекомбінації в нітридах може також зростати за рахунок непрямих процесів за участю фононів. В даній роботі був проведений чисельний розрахунок швидкості прямої і непрямой оже-рекомбінації в  $n\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , основується на електронній зонній структурі, отриманій методом емпіричного псевдопотенціалу, та фононних дисперсійних кривих, отриманих методом валентного силового поля. Результати роботи підтверджують ключовий вплив електронних переходів між двома найнижчими зонами провідності на оже-коефіцієнт в  $n\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  сполуках, що використовуються в випромінюючих приладах видимого діапазону.

Оскільки енергія від рекомбінації електрона і дірки, що передається третій частинці (в матеріалах  $n$ -типу – електрону) перевищує ширину забороненої зони, то третя частинка опиняється достатньо високо у відповідній зоні. Тому, для адекватного аналізу оже-процесів в широкозонних матеріалах необхідне знання реалістичної зонної структури у всій зоні Бріллюена, а не тільки поблизу екстремумів зони провідності і валентної зони, як це має місце в рамках  $k$ - $p$  формалізму. В даній роботі для отримання зонної структури бінарних сполук GaN і InN з ґраткою типу вюрциту, був використаний метод емпіричного псевдопотенціалу. З допомогою спеціальної процедури, числові параметри форм-факторів атомних модельних потенціалів для In, Ga та N підбирались так, щоб зонна структура при псевдопотенціальному розрахунку як можна менше відрізнялася від структури, отриманої розрахунком із перших принципів. Хвильові функції носіїв заряду представлялись у вигляді розкладу по

базисному набору із 225 плоских хвиль. В даній роботі, для розрахунку фононних дисперсійних кривих використовувалась феноменологічна модель, в якій короткодійні міжатомні сили враховувались в рамках методу валентного силового поля для кристалів вюрцитної структури, а дальнодіючі сили – шляхом введення кулонівського потенціалу з ефективним зарядом, в якості підгонючого параметра.

В більшості відомих робіт, швидкість непрямой рекомбінації за участю фононів, обчислюється в рамках теорії збурень другого порядку. Альтернативним підходом є метод функцій спектральної густини, який є наслідком теорії лінійного відгуку. Якщо вважати, що взаємодія з фононами відбувається лише в зоні важких дірок (взаємодія фононів з електронами вносить лише незначний вклад), повна швидкість домінуючого в матеріалах n-типу СНСС процесу, яка є сумою швидкостей прямої ( $R_0$ ) і непрямой оже-рекомбінації за участю фононів ( $R_{ph}$ ), представляється у вигляді:

$$R_0 + R_{ph} = 2 \frac{2\pi}{h} \frac{V^3}{(2\pi)^3} \iiint |M_{ee}|^2 f_n \delta(E_1 - E_n) \delta(E_2 - E_p) \delta(E_1 + E_2 - E_{2'}) \times \\ \times (-f_n \delta(E_2')) \exp \left[ -\frac{E_{Fp} - E_{Fn}}{k_b T} \right] \delta(E_1', E_1 + E_2 - E_{2'}) \times \\ \times \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1' - \mathbf{k}_2') d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 d\mathbf{k}_1' d\mathbf{k}_2' \quad (1)$$

де  $M_{ee}$  – матричний елемент екранованої електрон-електронної (кулонівської) взаємодії;  $f_n(E)$  і  $f_p(E)$  – функції Фермі;  $E_{Fp}$  і  $E_{Fn}$  – квазірівні Фермі; індекси 1, 2, 2' відносяться до електронів в зонах провідності, а 1' – до важкої дірки в валентній зоні;  $V$  – об'єм кристалу.

В цій формулі, всі ефекти електрон-фононної взаємодії враховуються з допомогою функції спектральної густини:

$$A(\mathbf{k}', E) = -\frac{1}{\pi} \frac{\text{Im} \Sigma(\mathbf{k}', E)}{E - E_1' + i \text{Im} \Sigma(\mathbf{k}', E)} \quad (2)$$

де  $\text{Im} \Sigma(\mathbf{k}', E)$  – уявна частина масового оператора:

$$\text{Im} \Sigma(\mathbf{k}', E) = -\frac{\pi}{\pi} \sum_{j=1}^3 \int M_{j, (e-ph)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) [P(\mathbf{k})]^{1/2 \pm 1/2} \mp f_p(\mathbf{k} \mp \hbar \omega_j) \delta(\mathbf{k} \mp \hbar \omega_j - E_{\mathbf{k}}) d\mathbf{k} \quad (3)$$

інтегрування ведеться по зоні важких дірок;  $M_{(e-ph)}$  – матричний елемент електрон-фононної взаємодії;  $\hbar \omega$  – енергія фонона;  $P(\mathbf{k})$  – функція Бозе-Ейнштейна.

Чисельне інтегрування проводилось по дискретній сітці k-точок у зоні Бріллюена, створеній по методу Монкхорста-Пака. Для дослідження процесу збіжності, чисельне інтегрування проводилися на сітках густиною від  $(11 \times 11 \times 11)$  до  $(63 \times 63 \times 63)$ . Було встановлено, що швидкість оже-рекомбінації для сітки густиною  $(57 \times 57 \times 57)$  збігається до значення, яке не більше ніж на 5 % відрізняється від значень, отриманих на сітках більшої густини, тому всі подальші розрахунки проводились саме при такій густині k-точок.

На рис. 1, показана розрахована залежність коефіцієнтів прямої ( $C_D$ ) і непрямої рекомбінації за участю фононів ( $C_{tot}$ ) від ширини забороненої зони  $n\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  сполуки. Коефіцієнти визначалися як  $C = R_0/n^3$ . Розрахунок проводився при температурі  $T=300$  К, концентрації носіїв заряду  $n=10^{19} \text{ см}^{-3}$ . Як і слід було очікувати, при збільшенні ширини забороненої зони сполуки,  $C_D$  різко спадає. Це є наслідком зменшення числа можливих переходів носіїв заряду між зоною провідності і валентною зоною, які відбуваються при збереженні повної енергії та квазіімпульсу носіїв. Різкий максимум залежності  $C_n(E_g)$  в

інтервалі  $E_g=2.25\div 2.9$  eV, пояснюється резонансом між  $E_g$  і енергетичним інтервалом, що розділяє дві найнижчі зони провідності в центрі зони Бріллюена. Сумарний оже-коефіцієнт  $C_{tot}$ , враховує як прямий так і непрямий механізм рекомбінації. Його залежність від ширини забороненої зони є набагато слабшою. Оскільки для всіх сполук  $C_{tot}>C_D$ , то можна стверджувати, що непрямі процеси за участю фононів вносять визначальний вклад в швидкість оже-рекомбінації в нітридах з ґраткою типу В'єрні.

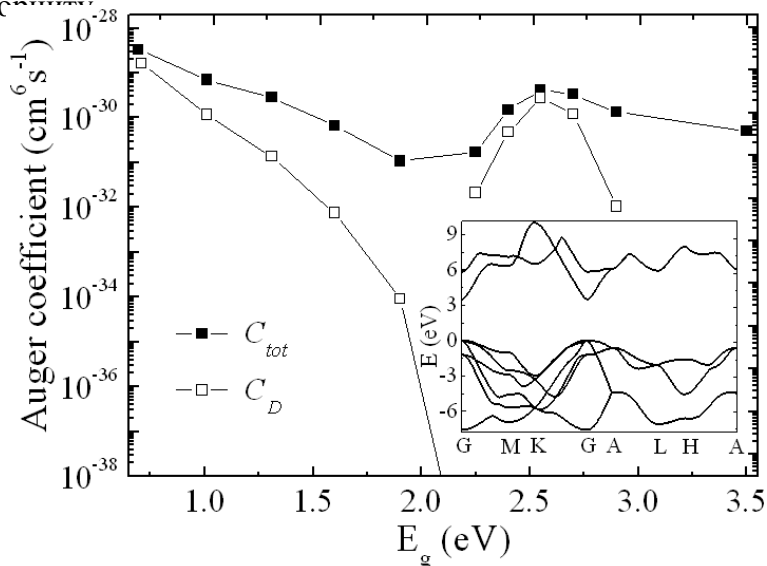


Рис. 1. Залежність оже-коефіцієнту від ширини забороненої зони ( $E_g$ )  $n\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  сполук при  $T=300$  K і  $n=10^{19} \text{ cm}^{-3}$ : 1) відкриті точки – коефіцієнт прямої рекомбінації ( $C_D$ ); 2) заповнені точки – сумарний коефіцієнт рекомбінації ( $C_{tot}$ ). На вставці, електронна зонна структура GaN, отримана методом псевдопотенціалу