

Моделирование энергетической структуры и оптических свойств точечных дефектов в нитридах металлов третьей группы

Александров И.А.

Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН

Новосибирск, 2019

Перспективы применения

- Светодиоды, лазеры
- СВЧ транзисторы
- Фотодетекторы
- Источники одиночных фотонов

Задачи

- Контроль концентраций точечных дефектов
- Идентификация полос люминесценции
- Контроль шероховатости и профиля состава гетерограниц

Точечные дефекты: энергии формирования и уровни энергии

Энергия формирования дефекта

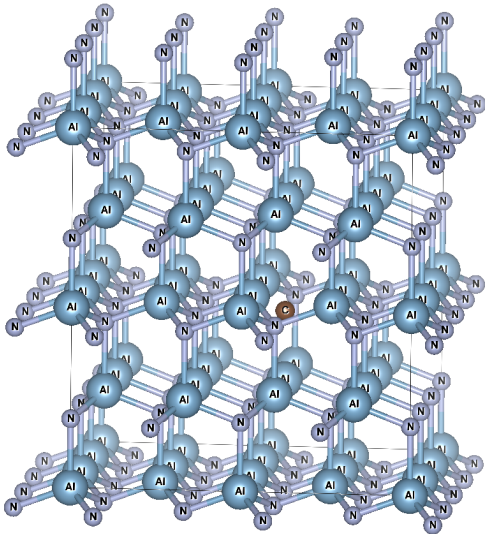
$$E_{form}^{def}(q) = E_{tot}^{def}(q) - E_{tot}^{bulk} - \sum_i n_i \mu_i + q(E_f + E_V) \quad (1)$$

Концентрации дефектов в условиях термодинамического равновесия

$$c_{def} = N_{sites} N_{config} \exp \left(-\frac{E_{form}^{def}}{kT} \right) \quad (2)$$

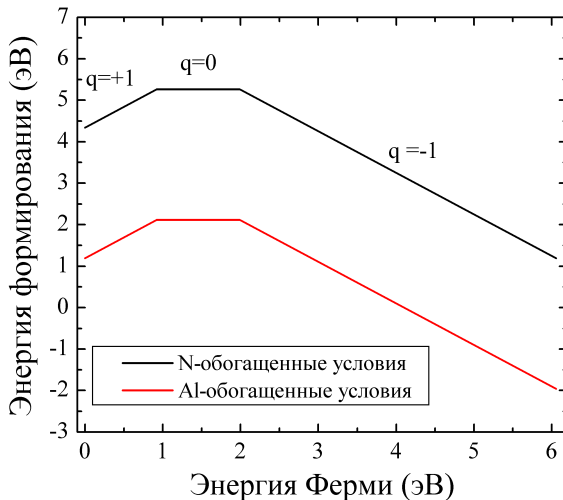
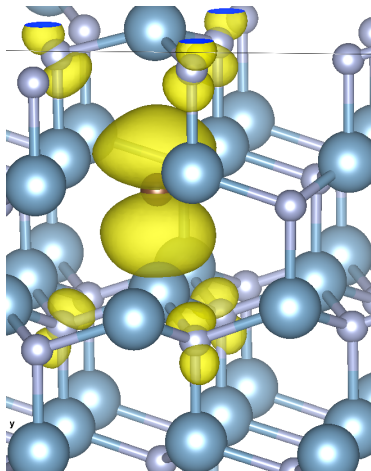
Уровни энергии переходов между зарядовыми состояниями

$$E(q/q+1) = E_{tot}^{def}(q) - E_{tot}^{def}(q+1) - E_V \quad (3)$$

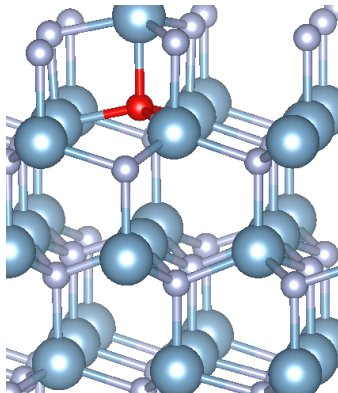


- Расчеты методами теории функционала плотности: Quantum Espresso
- Циклические граничные условия
- Обменно-корреляционные функционалы: PBE, HSE
- 96-атомная сверхъячейка и сетка Монкхорста-Пака $2 \times 2 \times 2$ для интегрирования по зоне Бриллюэна
- Коррекция полной энергии для заряженных дефектов с учетом взаимодействия соседних ячеек

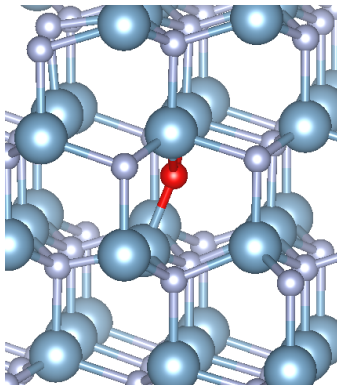
Примесь замещения углерода C_N в AlN



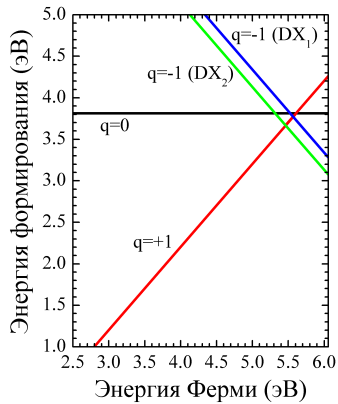
DX-конфигурации примеси замещения кислорода O_N в AlN



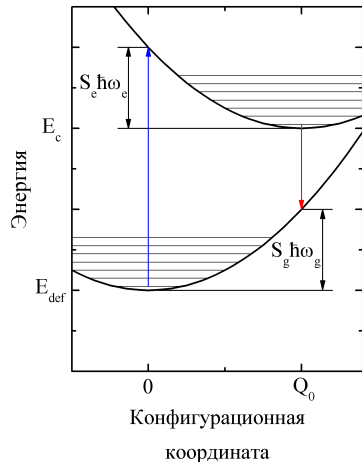
O_N DX₁



O_N DX₂



Оптические свойства глубоких центров: модель конфигурационных координат



Вероятность дипольного перехода в единицу времени:

$$\dot{w}_{fi} = \int \frac{4n\omega^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{d}_{fi}|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega) d\hbar\omega \quad (4)$$

Вероятность излучения в единицу времени при температуре T :

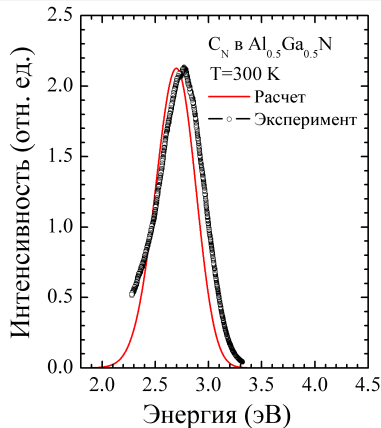
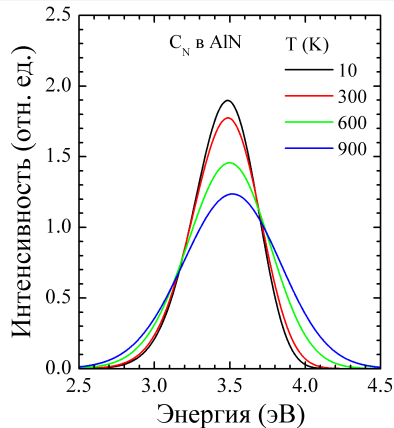
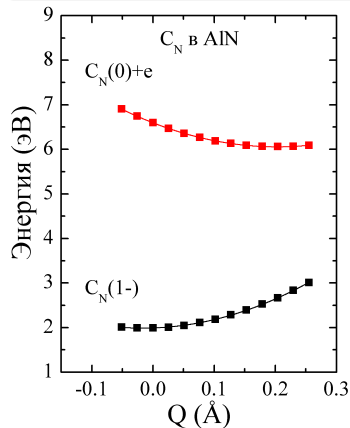
$$\dot{w}_{ge} = \sum_{n,m} \dot{w}_{gm,en} w_n(T) \quad (5)$$

Спектральная мощность излучения:

$$I(\hbar\omega) = \frac{4n\omega^4}{3c^3} |\mathbf{d}_{ge}|^2 \sum_{n,m} w_n(T) |\langle \chi_{en} | \chi_{gm} \rangle|^2 \times \delta(E_{ZPL} + n\hbar\omega_e - m\hbar\omega_g - \hbar\omega) \quad (6)$$

Формы полос люминесценции

$$G(\hbar\omega) \propto \omega^3 \sum_{n,m} w_n(T) |\langle \chi_{en} | \chi_{gm} \rangle|^2 \times \delta(E_{ZPL} + n\hbar\omega_e - m\hbar\omega_g - \hbar\omega) \quad (7)$$



Расчет коэффициента диффузии

Коэффициент диффузии

$$D = \frac{\langle R^2 \rangle}{6\tau} = \frac{1}{6} f r^2 \frac{N}{\tau} \quad (8)$$

Частота прыжков атомов

$$\frac{N}{\tau} = Z \frac{c_{vac}}{N_{sites}} \Gamma \quad (9)$$

Частота прыжков вакансий

$$\Gamma = \nu \exp \left(-\frac{E_b}{kT} \right) \quad (10)$$

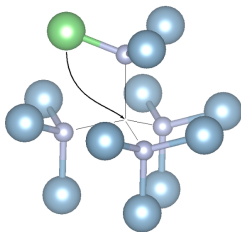
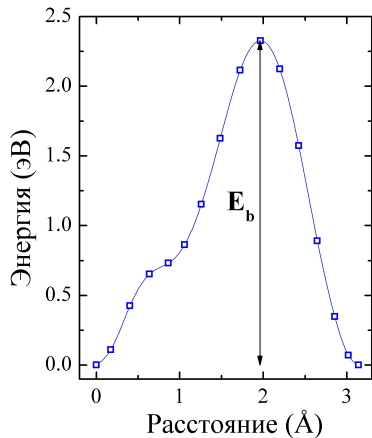
Частота попыток

$$\nu = \frac{\prod_{j=1}^{3N_a-3} \nu_j(A)}{\prod_{j=1}^{3N_a-4} \nu'_j(P)} \quad (11)$$

Коэффициент диффузии

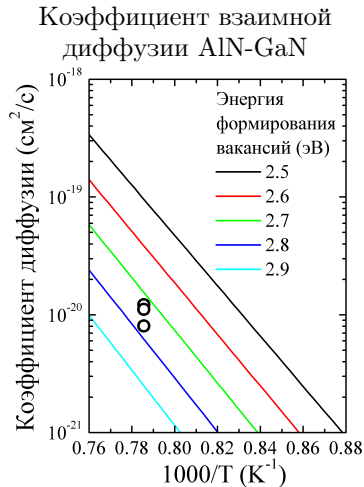
$$D = \frac{1}{6} f r^2 Z \nu \exp \left(-\frac{E_b + E_{form}}{kT} \right) \quad (12)$$

Миграционные барьеры диффузии



Миграционные барьеры

- Al в AlN $E_b = 2.33$ эВ
- Ga в GaN $E_b = 2.01$ эВ
- Al в GaN $E_b = 2.58$ эВ
- Ga в AlN $E_b = 1.74$ эВ



- Рассчитаны формы полос люминесценции и их температурная зависимость для дефектов в AlN и AlGaN
- Проведен расчет энергий миграционных барьеров диффузии атомов галлия и алюминия в AlN и GaN для вакансионного механизма диффузии

Спасибо за внимание!