

МЕХАНИЗМ МЕЖЗОННОЙ ОЖЕ-РЕКОМБИНАЦИИ В InGaN/GaN КВАНТОВЫХ ЯМАХ В ПРИСУТСТВИИ ВСТРОЕННОГО ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Д. М. Самосват ^{a*}, В. В. Гришунوف ^{a**}, Г. Г. Зегря ^{a***}

^a Сектор теоретических основ микроэлектроники, Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе
Российской академии наук
194021, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 10 марта 2025 г.,
после переработки 9 июля 2025 г.
Принята к публикации 14 июля 2025 г.

Анализируется влияние встроенного пьезоэлектрического поля на механизм оже-рекомбинации в квантовых ямах InGaN/GaN . Приводятся аналитические выражения для коэффициентов беспорогового и квазипорогового каналов оже-рекомбинации. Показано, что с ростом пьезоэлектрического поля E_f коэффициенты оже-рекомбинации убывают, что связано с общим уменьшением интегралов перекрытия между состояниями валентной зоны и зоны проводимости.

DOI: 10.31857/S0044451025090019

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время светоизлучающие приборы (светодиоды и лазеры) на основе InGaN/GaN гетероструктур с квантовыми ямами считаются очень перспективными источниками видимого света [1–3]. Одной из проблем таких излучателей является низкая квантовая эффективность при высоких уровнях возбуждения. Суть данной проблемы заключается в уменьшении внутренней квантовой эффективности при увеличении тока инжекции и мольной доли индия. На данный момент отсутствует достоверная модель, описывающая механизм уменьшения квантовой эффективности излучателей при высоких уровнях возбуждения [4, 5].

При высоких уровнях возбуждения (высоких концентрациях) усиливаются процессы безызлучательной оже-рекомбинации зона–зона [6], так как скорость пропорциональна концентрации в третьей степени; следовательно, вклад оже-рекомбинации (ОР) может быть одной из причин подавления квантовой эффективности светоизлучателей при высоких концентрациях носителей заряда. Этот факт де-

лает актуальным данное исследование при рассмотрении вопросов уменьшения квантовой эффективности. Несмотря на то, что ОР в квантовых ямах (КЯ) InGaN или квазиобъемном материале рассматривалась во многих работах [7–11], эти работы частично противоречат друг другу. Например, процессы межзонной и внутризонной ОР [7], ОР с участием фононов [8], а также ОР в КЯ с шероховатостью интерфейса [12] были предложены в качестве возможных причин снижения квантовой эффективности. Более того, существуют некоторые противоречия относительно величины коэффициента ОР. Для структур с мольной долей индия 9–37% коэффициент ОР, полученный из аппроксимации экспериментальных данных, составляет $10^{-31} - 10^{-30} \text{ см}^6 \cdot \text{с}^{-1}$ [10, 11]. Однако теоретические расчеты дают разные значения коэффициента ОР, которые отличаются друг от друга на порядки (от $10^{-36} \text{ см}^6 \cdot \text{с}^{-1}$ до $10^{-28} \text{ см}^6 \cdot \text{с}^{-1}$) [7, 12]. Основная трудность при сравнении теоретических и экспериментальных результатов, вероятно, возникает из-за различия исследуемых структур. В ряде работ использовались готовые светодиоды [13, 14] либо авторы не указывали важные для теоретического анализа параметры активной области: ширину квантовой ямы [15] или направление роста структуры [16]. Теоретические расчеты для скорости ОР, полученные для объемных материалов InGaN/GaN , принципиально не приме-

* E-mail: samosvat@yandex.ru

** E-mail: vlad.grishunowf@gmail.com

*** E-mail: zegrya@theory.ioffe.ru

нимы к квантовым ямам, так как наличие гетероба-
рьеров создает пространственную неоднородность
для носителей заряда вблизи гетерограницы, что
снимает ограничения, накладываемые на процессы
взаимодействия между носителями заряда закона-
ми сохранения импульса [17]. Как впервые показано
в [17,18], вследствие пространственной неоднородно-
сти возникают принципиально новые беспороговые
каналы ОР. Кроме того, в ряде работ сообщается
о наличии «горячих» оже-электронов [19], являю-
щихся наиболее весомым аргументом в пользу ОР
как основной причины уменьшения квантовой эф-
фективности [5,20]. Тем не менее недавно появились
экспериментальные работы [21, 22], которые прямо
говорят о влиянии встроенного пьезоэлектрическо-
го поля на внутреннюю квантовую эффективность
(ВКЭ) приборов. Однако последовательной теории
влияния встроенного пьезоэлектрического поля на
процессы ОР в InGaN/GaN структурах и, следова-
тельно, на квантовую эффективность светоизлуча-
ющих приборов до сих пор нет.

Настоящая работа посвящена исследованию влия-
ния встроенного пьезоэлектрического поля на ме-
ханизмы ОР в InGaN/GaN квантовых ямах. Будет
проанализировано влияние пьезополя на беспорого-
вый и квазипороговый каналы ОР.

Квантовые ямы на основе InGaN/GaN, как
правило, имеют структуру типа вюрцита [23].
Можно отметить, что структура цинковой обманки
InGaN/GaN является нестабильной и легко транс-
формируется в структуру вюрцита [24]. Кристалл
со структурой вюрцита не имеет центра инверсии,
а значит, в квантовой яме на основе InGaN/GaN
может присутствовать встроенное электрическое
поле (E_f). Напряженность встроенного электриче-
ского поля E_f , действующего на электрон (дырку),
удовлетворяет условию $eE_f a_0 \ll E_g$ (где a_0 —
постоянная решетки), поэтому потенциальная
энергия электрона (дырки) зависит от координаты:
 $E_i = E_i(k) + eE_f x$, где i соответствует типу носите-
лей заряда (электрона и дырки). Это означает,
что зоны кристалла, оставаясь практически неиз-
менными по форме, должны наклоняться так, как
это показано на рис. 1. Следовательно, перекрытие
между электронными и дырочными состояниями
(волновыми функциями) уменьшается с ростом
поля; это означает, что электрическое поле влияет
на скорость оже-рекомбинации зона–зона и на
скорость излучательной рекомбинации (рис. 1).

Процесс межзонной ОР в КЯ без учета электри-
ческого поля впервые был детально исследован в
[18]. В присутствии встроенного пьезоэлектрическо-

го поля процесс ОР рассматривался в [25], где пока-
зано, что коэффициент ОР увеличивается с ростом
электрического поля. Это утверждение авторов про-
тиворечит представлению о том, что с ростом элек-
трического поля электроны и дырки должны быть
пространственно разделены и интеграл перекрытия
между ними (и соответственно матричный элемент
и скорость) вследствие этого должен убывать с рос-
том электрического поля (рис. 1, см. Приложение).
По причине пространственного разделения электро-
нов и дырок также будет убывать и скорость излу-
чательной рекомбинации с ростом пьезоэлектриче-
ского поля [26]. В результате ВКЭ убывает с ростом
электрического поля не так резко, как это отмече-
но в [25], в силу того, что скорость ОР не растет, а
убывает с ростом электрического поля.

2. МЕЖЗОННАЯ ОЖЕ-РЕКОМБИНАЦИЯ В InGaN/GaN КВАНТОВЫХ ЯМАХ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Рассмотрим механизм влияния встроенного пье-
зоэлектрического поля на процесс ОР в квантовых
ямах InGaN/GaN (см. рис. 1). Как впервые было по-
казано в [18], в квантовых ямах процесс ОР делит-
ся на два физически различных механизма: беспоро-
говый и квазипороговый. Беспороговый процесс
связан с рассеянием возбужденного электрона (дыр-
ки) на гетерогранице, в то время как квазипорого-
вый связан с пространственным ограничением вол-
новой функции носителей заряда областью кванто-
вой ямы. При этом в случае InGaN/GaN квантовой
ямы электрическое поле искажает потенциальный
барьер, что приводит, во-первых, к уменьшению ин-
тегралов перекрытия между состояниями зоны про-
водимости и валентной зоны, а во-вторых, к изме-
нению эффективного барьера для носителей заряда
на левой и правой границах (рис. 1).

Вероятность ОР в единицу времени вычисляет-
ся в рамках первого порядка теории возмущений по
электрон-электронному взаимодействию:

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i), \quad (1)$$

где матричный элемент кулоновского взаимодей-
ствия равен

$$M_{fi} = \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \Psi_1^*(\mathbf{r}_1) \Psi_2^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \times \\ \times \Psi_4(\mathbf{r}_1) \Psi_3(\mathbf{r}_2). \quad (2)$$

В этом выражении не учитывается обменное взаимо-
действие и антисимметрия волновых функций. При

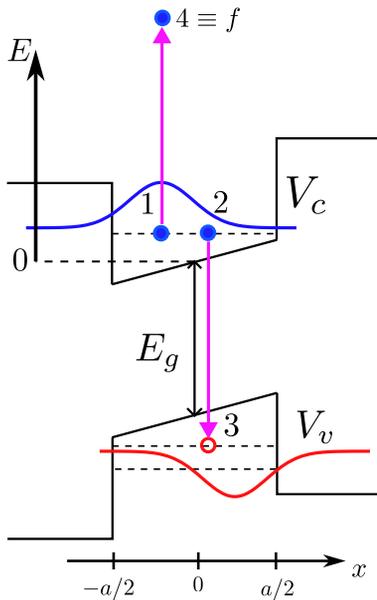


Рис. 1. Зонная диаграмма InGaN/GaN в случае отсутствия встроенного пьезоэлектрического поля. Стрелками показаны переходы носителей заряда при оже-рекомбинации. Также схематически показано пространственное распределение для волновых функций электронов (1 и 2) и дырок (3)

этом волновые функции могут быть представлены в следующем виде: $\Psi_i(\mathbf{r}) = \psi_i(x) \exp(i(q_y y + q_z z))$, где i обозначает тип носителя заряда (1, 2 — локализованные электроны, 3 — дырки, 4 — возбужденный электрон); ось x направлена перпендикулярно гетерогранице (рис. 1).

При вычислении общего вида матричного элемента предполагается, что волновая функция дырок локализована в области квантовой ямы, поскольку $m_h \gg m_c$, где m_c и m_h — эффективные массы электронов и тяжелых дырок. Матричный элемент электрон-электронного кулоновского взаимодействия удобнее всего вычислять, используя фурье-представление [18]:

$$M = \frac{4\pi e^2}{\epsilon} \int \frac{I_{23}(p) I_{14}(-p)}{p^2 + q^2} \frac{dp}{2\pi} \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_3 - \mathbf{q}_4}, \quad (3)$$

где q — компонента импульса, переданного при кулоновском взаимодействии, направленная вдоль продольного движения, p — его компонента вдоль оси квантования. При этом интегралы перекрытия в (3) имеют следующий вид [18]:

$$I_{ij}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x) \psi_j(x) \exp(ipx) dx. \quad (4)$$

В силу закона сохранения квазиимпульса в плоскости КЯ, переданный импульс при кулоновском взаимодействии равен $q = |\mathbf{q}_3 - \mathbf{q}_2| = |\mathbf{q}_4 - \mathbf{q}_1|$. Опуская вычисления, проделанные детально в [18], мы можем получить выражение для матричного элемента в виде

$$M = \frac{4\pi e^2}{\epsilon} \frac{1}{2q} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-a/2}^{a/2} dy (\psi_4^*(x) \psi_1(x)) \times (\psi_3^*(y) \psi_2(y)) \exp(-q|x - y|). \quad (5)$$

Подставляя матричный элемент (5) в выражение для вероятности перехода (1) и суммируя ее по всем состояниям (см. [18]), можно получить скорость оже-процесса:

$$G = \sum_{1,2,3,4} W_{i \rightarrow f} f_1 f_2 (1 - f_3), \quad (6)$$

где f_1 и f_2 — функции распределения электронов в КЯ, $\tilde{f}_3 = (1 - f_3)$ — функция распределения дырок, функция распределения для возбужденного электрона $\tilde{f}_4 = (1 - f_4) = 1$. При этом коэффициент оже-рекомбинации C связан со скоростью следующим соотношением:

$$G = C n_{QW}^2 p_{QW}, \quad (7)$$

где n_{QW} , p_{QW} — двумерные концентрации электронов и дырок в квантовой яме.

В случае КЯ InGaN/GaN основную роль будет играть СНСС-процесс ОР (рекомбинация электрона с тяжелой дыркой и передача этой энергии другому электрону), так как СННС-процесс (рекомбинация электрона и дырки с переходом тяжелой дырки в спин-отщепленную зону) в этих структурах не может происходить из-за малого значения константы спин-орбитального отщепления (невозможно выполнить закон сохранения энергии). Здесь буквы С, Н и S обозначают частицы, участвующие в ОР: С — электроны, Н — тяжелые дырки, S — спин-отщепленные дырки.

3. ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

В полупроводниках A_3B_5 зона проводимости в Γ -точке описывается представлением Γ_6 , а валентная зона — Γ_7 и Γ_8 . Для структур типа цинковой обманки применима модель Кейна [27]. Соединения типа InGaN/GaN обладают структурой вюрцита, а это значит, что для них характерна анизотро-

пия эффективной массы для электрона и для дырки. Как показано в [28], эффективный гамильтониан для структуры вюрцита отличается от модели Кейна несущественно. Более того, как показал наш расчет, учет анизотропии для электронов дает изменение их положения по энергии в КЯ примерно на 2 мэВ. Тем не менее модель Кейна остается применимой и для структур типа вюрцита.

В нашей работе не учитывается спин-орбитальное взаимодействие, поскольку в нитридных структурах GaN константа SO-отщепления мала по сравнению с шириной запрещенной зоны (в качестве примера, для GaN $\Delta_{SO} \ll E_g$, где $E_g = 3.2$ эВ, $\Delta_{SO} = 20$ мэВ). Без учета спина базисных состояний имеет следующий вид:

$$|s\rangle, |x\rangle, |y\rangle, |z\rangle. \quad (8)$$

В этом базисе волновая функция носителей заряда принимает вид

$$\psi = \psi_s |s\rangle + \boldsymbol{\psi} |p\rangle, \quad (9)$$

где $|s\rangle$ — базисные функции s -типа, имеющие угловой момент 0, а $|p\rangle$ — базисные функции p -типа, имеющие угловой момент 1. Без учета спина уравнения Кейна для огибающих могут быть записаны в виде [18]

$$\begin{cases} (U_c(x) - E)\psi_s - i\hbar\gamma\nabla\psi = 0, \\ (U_v(x) - E)\boldsymbol{\psi} - i\hbar\gamma\nabla\psi_s + \frac{\hbar^2}{2m}(\gamma_1 + 4\gamma_2)\nabla(\nabla\boldsymbol{\psi}) - \\ - \frac{\hbar^2}{2m}(\gamma_1 - 2\gamma_2)(\nabla \times (\nabla \times \boldsymbol{\psi})) = 0, \end{cases} \quad (10)$$

где $U_c(x)$ и $U_v(x)$ — потенциальная энергия электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне, γ_1 и γ_2 — модифицированные параметры Латтинжера, γ — кейновский матричный элемент, имеющий размерность скорости, m — масса свободного электрона.

Потенциальная энергия для электронов и для дырок в электрическом поле может быть записана в следующем виде (рис. 1):

$$U_c(x) = \begin{cases} eE_f x, & x \in [-a/2, a/2], \\ -eE_f a/2 + V_c, & x < -a/2, \\ eE_f a/2 + V_c, & x > a/2, \end{cases} \quad (11)$$

и

$$U_v(x) = \begin{cases} -E_g + eE_f x, & x \in [-a/2, a/2], \\ -eE_f a/2 - E_g - V_v, & x < -a/2, \\ eE_f a/2 - E_g - V_v, & x > a/2. \end{cases} \quad (12)$$

При этом энергия E отсчитывается от дна зоны проводимости (рис. 1).

3.1. Состояния для электронов

Перейдем к выводу уравнений для волновых функций электронов в зоне проводимости. Для электронов можно не учитывать подмешивание состояний валентной зоны к состояниям зоны проводимости. Поэтому уравнения Кейна для них могут быть записаны в следующем простом виде:

$$\begin{cases} (U_c(x) - E)\psi_s - i\hbar\gamma\nabla\boldsymbol{\psi} = 0, \\ (U_v(x) - E)\boldsymbol{\psi} - i\hbar\gamma\nabla\psi_s = 0. \end{cases} \quad (13)$$

Подставляя $\boldsymbol{\psi}$ из второго уравнения в первое уравнение (13), можно получить следующее уравнение для огибающей s -компоненты волновой функции электронов:

$$(U_c(x) - E)\psi_s + \frac{\hbar^2\gamma^2}{U_v(x) - E}\Delta\psi_s + \hbar^2\gamma^2 \left(\frac{d}{dx} \left[\frac{1}{U_v(x) - E} \right] \right) \frac{\partial\psi_s}{\partial x} = 0. \quad (14)$$

Представим волновую функцию электронов в виде $\psi_s = \phi_s(x) \exp(iqy)$. Считая, что $eE_f a \ll E_g$ (здесь a — ширина квантовой ямы, см. рис. 1), и оставляя члены только первого порядка по электрическому полю, можно переписать уравнение (14) для ϕ_s в виде

$$(E_g(E_g + E) - eE_f x(E_g + 2E))\phi_s + \hbar^2\gamma^2(\phi_s'' - q^2\phi_s) + \hbar^2\gamma^2 \frac{eE_f}{E_g + E} \phi_s' = 0. \quad (15)$$

Это уравнение допускает точное аналитическое решение, и в области квантовой ямы имеем

$$\phi_{s2} = C_1 \exp\left(-\frac{x}{l_{c1}}\right) \text{Ai}\left(\frac{x}{l_{c0}} - \lambda_c\right) + C_2 \exp\left(-\frac{x}{l_{c1}}\right) \text{Bi}\left(\frac{x}{l_{c0}} - \lambda_c\right), \quad (16)$$

где

$$l_{c1} = \frac{2(E_g + E)}{eE_f}, \quad l_{c0} = \left(\frac{\hbar^2\gamma^2}{eE_f(E_g + 2E)} \right)^{1/3},$$

$$\lambda_c = \left(\frac{E(E_g + E)}{\hbar^2\gamma^2} - \frac{e^2 E_f^2}{4E_g^2} - q^2 \right) l_{c0}^2,$$

$\text{Ai}(z)$ и $\text{Bi}(z)$ — функции Эйри.

Волновые функции под барьером принимают вид

$$\begin{aligned} \phi_{s1} &= A \exp(\kappa_1 x), \\ \phi_{s3} &= B \exp(-\kappa_2 x), \end{aligned} \quad (17)$$

где волновые числа $\kappa_{1,2}$ могут быть записаны как

$$\begin{aligned} \kappa_{1,2} &= \left(q^2 - \frac{1}{\hbar^2 \gamma^2} (E \pm eE_f a/2 - V_c) \times \right. \\ &\quad \left. \times (E \pm eE_f a/2 + E_g + V_v) \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (18)$$

При этом для обозначения областей в ϕ_{si} мы принимаем следующие обозначения: $\phi_{s1}(x)$ относится к области слева от барьера при $x < -a/2$, $\phi_{s2}(x)$ относится к области КЯ при $x \in [-a/2, a/2]$, а $\phi_{s3}(x)$ относится к области справа от барьера при $x > a/2$. Также в (18) индекс «1» соответствует области слева от КЯ, а индекс «2» — области справа от КЯ.

Исходя из граничных условий на двух границах $[\phi_s] = 0$ и $[\phi'_s] = 0$, можно получить дисперсионное соотношение для электронов.

3.2. Состояния для дырок

Волновые функции для дырок являются суперпозицией ветвей легкой и тяжелой дырок. При отличном от нуля квазиимпульсе q_h эти ветви смешиваются и уже не могут быть разделены. Как следствие этого, уравнение для огибающей ψ компоненты волновой функции дырок уже не может быть решено аналитически. В работе [29] был рассчитан коэффициент трансформации легкой и тяжелой дырок при отражении от линейного потенциального барьера. В этом случае авторы получили квазиклассические волновые функции, точное решение которых представляется через интегралы от триконфлюэнтной функции Гойна [30]. В нашем же случае квазиклассическое приближение неприменимо и волновые функции могут быть найдены только численно.

Подставляя волновую функцию ψ_s из первого уравнения (10) во второе, получаем уравнение для волновой функции дырок ψ :

$$(U_v(x) - E)\psi + \frac{\hbar^2}{2m_l} \nabla(\nabla\psi) - \frac{\hbar^2}{2m_h} \nabla \times [\nabla \times \psi] = 0. \quad (19)$$

Считая, что $\psi = (\psi_x(x) \exp(iqy), \psi_y(x) \exp(iqy), 0)$ (z -компоненту можно не учитывать, поскольку интеграл перекрытия с электронной волновой функцией для z -компоненты ψ_z равен нулю), можно построить разностную схему для ψ_x и ψ_y и использовать полученные численные волновые функции для расчета матричного элемента.

4. ВЫЧИСЛЕНИЕ МАТРИЧНОГО ЭЛЕМЕНТА БЕСПОРОГОВОГО И КВАЗИПОРОГОВОГО СНСС-ПРОЦЕССОВ ОЖЕ-РЕКОМБИНАЦИИ ТИПА ЗОНА-ЗОНА

Перейдем теперь к вычислению матричного элемента зона-зона [18]:

$$\begin{aligned} M &= \frac{4\pi e^2}{\varepsilon} \frac{1}{2q} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-a/2}^{a/2} dy (\psi_4^*(x) \psi_1(x)) \times \\ &\quad \times (\psi_3^*(y) \psi_2(y)) \exp(-q|x-y|) = M_1 + M_2, \end{aligned} \quad (20)$$

где M_1 и M_2 — матричные элементы для беспорогового и квазипорогового процессов. Введем интеграл

$$J(x) = \int_{-a/2}^{a/2} dy \phi_c^*(y) \phi_h(y) \exp(-q|x-y|), \quad (21)$$

который различен для трех областей: слева от квантовой ямы в барьерной области, J_- , справа от квантовой ямы в барьерной области, J_+ , и внутри квантовой ямы, J_0 :

$$\begin{aligned} J_-(x) &= \int_{-a/2}^{a/2} dy \phi_c^*(y) \phi_h(y) \exp(q(x-y)), \quad x < -a/2, \\ J_+(x) &= \int_{-a/2}^{a/2} dy \phi_c^*(y) \phi_h(y) \exp(-q(x-y)), \quad x > a/2, \\ J_0(x) &= \int_{-a/2}^x dy \phi_c^*(y) \phi_h(y) \exp(-q(x-y)) + \\ &\quad + \int_x^{a/2} dy \phi_c^*(y) \phi_h(y) \exp(q(x-y)), \quad x \in [-a/2, a/2]. \end{aligned} \quad (22)$$

Для вычисления матричных элементов нам потребуются первообразные от функций возбужденного электрона ψ_4 и $\psi_4 \exp(-qx)$. Поскольку барьер плоский, эти первообразные под барьером известны и даны в [18]. Что касается вычислений в области квантовой ямы, то в этой области волновая функция $\psi_4 \sim \text{Zi}(x/l_4 - \lambda_4)$ (Zi — любая из функций Эйри), причем величины l_4 и λ_4 соответственно равны

$$l_4 = \left(\frac{eE_f(2\mathcal{E}_4 + E_g)}{\hbar^2 \gamma^2} \right)^{-1/3} \quad (23)$$

и

$$\lambda_4 = k_4^2 l_4^2, \quad (24)$$

где

$$k_4^2 = \frac{\mathcal{E}_4(\mathcal{E}_4 + E_g)}{\hbar^2 \gamma^2} - q^2. \quad (25)$$

В области барьера, соответственно, волновое число для возбужденного электрона равно

$$\begin{aligned} \tilde{k}_{4(1,2)} = \\ = \sqrt{\frac{(\mathcal{E}_4 \pm eE_f a/2 - V_c)(\mathcal{E}_4 \pm eE_f a/2 + E_g + V_v)}{\hbar^2 \gamma^2}} - q^2, \end{aligned} \quad (26)$$

где индекс «1» и знак «+» относятся к области слева от КЯ, а индекс «2» и знак «-» — к области справа от КЯ.

Путем вычисления интегралов по частям, можно написать приближенное значение для n -х первообразных от функций ψ_4 (F_4^n) и $\psi_4 \exp(-qx)$ (Φ_4^n). Эти первообразные соответственно равны

$$F_4^n \simeq l_4^{2n} \frac{\left(\left(\frac{x}{l_4} - \lambda_4\right) \psi_4(x)\right)^{(n)}}{\left(\frac{x}{l_4} - \lambda_4\right)^{2n}}, \quad (27)$$

$$\Phi_4^n \simeq l_4^{2n} \frac{\left(\left(\frac{x}{l_4} - \lambda_4\right) \exp(qx) \psi_4(x)\right)^{(n)}}{\left(\frac{x}{l_4} - \lambda_4\right)^n \left(\frac{x}{l_4} - \lambda_4 - q^2 l_4^2\right)^n} e^{-2qx}. \quad (28)$$

При этом первообразная от функции $\psi_4 \exp(qx)$ ($\tilde{\Phi}_4^n$) получается заменой в (28) $q \rightarrow -q$.

Теперь вернемся к интегралам (22). Для точного расчета матричных элементов мы используем численное значение волновой функции тяжелых дырок с учетом подмешивания состояний легких дырок. При аналитической оценке матричных элементов мы используем волновую функцию тяжелых дырок без учета их подмешивания. В этом приближении волновую функцию тяжелой дырки можно представить в виде $\phi_h \sim \text{Zi}(-x/l_{h0} - \lambda)$, где $l_{h0} = \left(\frac{4eE_f m_h}{\hbar^2}\right)^{-1/3}$, $\lambda = l_{h0}^2(k_h^2 - q^2)$.

Для вычисления интегралов в (22) введем следующий вспомогательный интеграл:

$$\begin{aligned} J_q(y) = \int dy \phi_c^*(y) \phi_h(y) \exp(-qy) \simeq \\ \simeq \frac{(\phi_c^*(y) \phi_h(y))' - q(\phi_c^*(y) \phi_h(y))}{\frac{1}{l_{h0}^2} \left(-\frac{y}{l_{h0}} - \lambda_h - q^2 l_{h0}^2\right)} \exp(-qy). \end{aligned} \quad (29)$$

В дальнейших вычислениях используется приближение $\exp(-qa) \ll 1$, так как $qa \gg 1$. Таким образом, можно разделить общее выражение для матричного элемента (20) на два вклада: беспороговый и квазипороговый, так же как это сделано в [18].

Для квазипорогового матричного элемента, ограничиваясь первым слагаемым в разложении по $1/k_4^2$ ($k_4 \gg k_1, k_2, k_3$, где k_1 и k_2 — x -компоненты волновых векторов электронов, k_3 — x -компонента волнового вектора тяжелой дырки, см. рис. 1), можно получить

$$M_2 \simeq \frac{4\pi e^2}{\varepsilon} \int_{-a/2}^{a/2} dx \frac{\psi_1^*(x) \psi_4(x) \phi_c^*(x) \phi_h(x)}{l_{h0}^2 \left(-\frac{x}{l_{h0}} - \lambda_h - q^2 l_{h0}^2\right)}. \quad (30)$$

Отметим, что это выражение отличается от полученного в [18] дополнительным слагаемым в знаменателе, связанным с электрическим полем.

Перейдем теперь к выражению для беспорогового матричного элемента. В матричный элемент входят скачки волновых функций и их производных на гетерогранице. Поскольку квантовая яма не симметрична, то в матричный элемент войдут скачки на левой и правой границах соответственно. Таким образом, беспороговый матричный элемент может быть представлен в виде $M_1 = M_a + M_b$.

Вычислим вклад от левой границы M_a :

$$\begin{aligned} M_a = -\frac{4\pi e^2}{\varepsilon} \frac{1}{2q} \left[J_q(-a/2) \left\{ \psi_1^*(x) \tilde{\Phi}_4(x) - \right. \right. \\ \left. \left. - (\psi_1^*(x))' \tilde{\Phi}_4^1(x) + (\psi_1^*(x))'' \tilde{\Phi}_4^2(x) \right\}_{x=-a/2} + \right. \\ \left. + J_{-q}(-a/2) \left\{ \psi_1^*(x) \Phi_4(x) - (\psi_1^*(x))' \Phi_4^1(x) + \right. \right. \\ \left. \left. + (\psi_1^*(x))'' \Phi_4^2(x) \right\}_{x=-a/2} \right]. \end{aligned} \quad (31)$$

Выражение для вклада от правой границы (M_b) может быть записано аналогично.

Подставляя в (31) конкретный вид волновых функций, можно получить окончательное выражение для беспорогового матричного элемента на левой границе:

$$\begin{aligned} M_a \simeq -\frac{4\pi e^2}{\varepsilon \left(k_h^2 - \frac{a}{2l_h^3} + q^2\right) (k_4^2 + q^2)} \times \\ \times \frac{3V_c + V_v - (5/2)eE_f a}{4E_g} [\psi_1^*(x) \psi_4(x)]_{x=-a/2} \times \\ \times [\phi_c^*(x) \phi_h(x)]'_{x=-a/2}. \end{aligned} \quad (32)$$

Выражение для M_b отличается от выражения для M_a только заменой $E_f \rightarrow -E_f$, при этом волновые функции берутся на правой границе.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В настоящей работе рассмотрен механизм оже-рекомбинации типа зона-зона, который существенно влияет на квантовую эффективность излучателей на основе квантовых ям InGaN/GaN.

Нами получены зависимости коэффициентов ОР от величины встроенного электрического поля (рис. 2 и 3). Показано, что на величину коэффициентов ОР (беспорогового и квазипорогового) влияют несколько основных факторов. Во-первых, с ростом электрического поля уменьшается интеграл перекрытия между состояниями для электронов и для дырок (I_{23}) вследствие их пространственного разделения (рис. 1). При увеличении электрического поля пространственное расстояние между электронами и дырками увеличивается. Это приводит к резкому (почти экспоненциально с ростом электрического поля) уменьшению коэффициентов ОР для СНСС-процесса в зависимости от величины электрического поля. Как было отмечено выше, зависимость коэффициента ОР от электрического поля, полученная в нашей работе, отличается от результатов работы [25] (см. Приложение, рис. 5). Во-вторых, и это очень важно, электрическое поле принципиально меняет зонную структуру материала, что делает ее похожей на зонную структуру для гетеропереходов II типа, где электроны и дырки пространственно разделены (см. рис. 4) [31]. Это означает, что, в соответствии с работой [31], при больших значениях встроенного пьезоэлектрического поля необходимо учитывать эффект квантовой интерференции электронного (E) и дырочного (H) каналов ОР [31] (рис. 4). Все это может привести к тому, что в сильных полях зависимость коэффициентов ОР от величины электрического поля может быть немонотонной.

В работе получены аналитические выражения для коэффициентов ОР беспорогового и квазипорогового процессов в присутствии встроенного пьезоэлектрического поля, которые переходят в пределе нулевого поля в известный результат [18].

В работе [26] проведено исследование механизмов ОР и влияния внешнего электрического поля на квантовую эффективность светодиодов на InGaN/GaN. Там показано, что ОР через глубокие центры влияет на максимальное значение квантовой эффективности, при этом коэффициент ОР через глубокие центры растет с ростом электрического поля. В работе [26] показано, что коэффициент излучательной рекомбинации также убывает с ростом электрического поля. Коэффициент излуча-

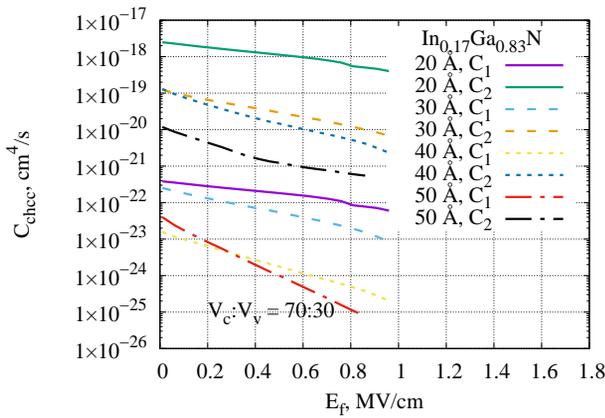


Рис. 2. Зависимость величины коэффициента оже-рекомбинации для СНСС-процесса от величины встроенного пьезоэлектрического поля для ширин КЯ в диапазоне от 20 Å до 50 Å. C_1 — коэффициент беспорогового оже-процесса, C_2 — коэффициент для квазипорогового оже-процесса. Соотношение высот гетеробарьеров принято 70:30

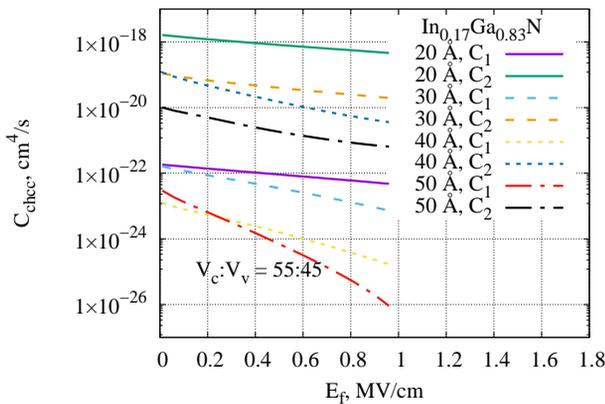


Рис. 3. Зависимость величины коэффициента оже-рекомбинации для СНСС-процесса от величины встроенного пьезоэлектрического поля для ширин КЯ в диапазоне от 20 Å до 50 Å. C_1 — коэффициент беспорогового оже-процесса, C_2 — коэффициент для квазипорогового оже-процесса. Соотношение высот гетеробарьеров принято 55:45

На основе полученных матричных элементов (30) и (31) можно рассчитать коэффициенты ОР для различных соотношений высот гетеробарьеров $V_c : V_v$ для электронов и дырок соответственно и ширин квантовых ям в зависимости от электрического поля.

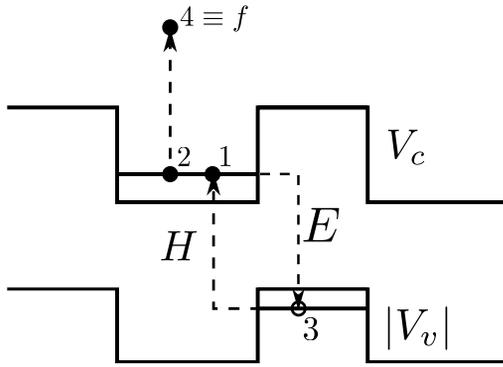


Рис. 4. Зонная диаграмма для структуры II типа. Стрелками показаны электронные (E) и дырочные (H) переходы носителей заряда при оже-рекомбинации. Канал E соответствует туннелированию электрона под барьером и рекомбинации с дыркой. Канал H соответствует туннелированию дырки под барьером и рекомбинации с электроном [31]

тельной рекомбинации пропорционален интегралу перекрытия между состояниями электронов и дырок $R \propto |I_{cv}|^2$. Интегралы перекрытия I_{cv} и I_{23} экспоненциально затухают с ростом электрического поля из-за пространственного разделения электронов и дырок, а интеграл перекрытия I_{14} растет с ростом поля, однако произведение $I_{14}^* I_{23}$ остается убывающей функцией пьезоэлектрического поля. При этом влияние электрического поля на убывание скорости излучательной рекомбинации с ростом поля оказывается сильнее, чем на скорость ОР. Таким образом, в настоящей работе показано, что скорость процесса ОР убывает с ростом электрического поля.

В работе [18] рассмотрен процесс ОР с участием фононов. Показано, что для прямозонных полупроводников такой канал ОР вносит незначительный вклад в суммарную скорость ОР в силу того, что процесс с участием фононов должен рассматриваться уже в рамках второго порядка теории возмущений.

ПРИЛОЖЕНИЕ. ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ИНТЕГРАЛЫ ПЕРЕКРЫТИЯ

Для получения аналитического выражения для интеграла перекрытия I_{23} в зависимости от электрического поля разложим его в ряд Тейлора по E_f в окрестности нулевого поля. Для этого удобно воспользоваться асимптотическими разложениями функций Эйри $Ai(x)$ и $Bi(x)$ при больших отрицательных значениях аргумента. При вычислении интеграла перекрытия I_{14} оказывается удобно его

вычислять численно, поскольку этот интеграл имеет сложную полюсную структуру.

Интеграл перекрытия I_{23}

Согласно (4) для интеграла перекрытия имеем

$$I_{23}(p) = \int \phi_c^*(x)\phi_h(x) \exp(ipx) dx. \quad (33)$$

Мы рассматриваем приближенную оценку для интеграла перекрытия I_{23} при малых значениях электрического поля. Для соединений типа III-V всегда $m_c \ll m_h$. Это означает, что $l_{c0} \gg l_{h0}$ (здесь l_{c0} (см. разд. 3) и l_{h0} (см. разд. 4) — характерные длины для электронов и для дырок, связанные с электрическим полем). Таким образом, электрическое поле сильнее искажает волновые функции тяжелых дырок по сравнению с электронной волновой функцией, поэтому мы можем для простоты считать волновую функцию электронов такой же, как и в случае без поля. Тогда волновые функции электронов и дырок могут быть приняты в виде

$$\begin{aligned} \phi_c &\sim A_c \cos(k_c x), \\ \phi_h &\sim Zi\left(-\frac{x}{l_{h0}} - \lambda_h\right), \end{aligned} \quad (34)$$

где $\lambda_h = l_{h0}^2(k_h^2 - q^2) = l_{h0}^2 \tilde{k}_h^2$ и под Zi понимается любая функция Эйри: $Zi(x) = C_1 Ai(x) + C_2 Bi(x)$. В выражении (34) мы считаем, что электрон находится в основном состоянии, а волновая функция тяжелых дырок имеет вид функций Эйри. Также в (34) вводится характерная длина, связанная с электрическим полем:

$$l_{h0} = \left(\frac{4eE_f m_h}{\hbar^2}\right)^{-1/3} = \left(\frac{\alpha}{E_f}\right)^{1/3}. \quad (35)$$

Поскольку при $E_f \rightarrow 0$ характерная длина $l_{h0} \rightarrow \infty$, это означает, что в слабых полях можно воспользоваться асимптотикой функций Эйри при больших отрицательных значениях аргумента. Имеем

$$\begin{aligned} Ai(-x) &\sim \frac{\sin(\frac{2}{3}x^{3/2} + \frac{\pi}{4})}{\sqrt{\pi}x^{1/4}}, \\ Bi(-x) &\sim \frac{\cos(\frac{2}{3}x^{3/2} + \frac{\pi}{4})}{\sqrt{\pi}x^{1/4}}. \end{aligned} \quad (36)$$

Мы считаем, что функция тяжелых дырок сильно локализована в области квантовой ямы. Тогда граничные условия для волновой функции тяжелой дырки могут быть представлены в следующем виде:

$$Zi\left(-\frac{x}{l_{h0}} - \lambda_h\right)\Bigg|_{x=\pm\frac{a}{2}} = 0. \quad (37)$$

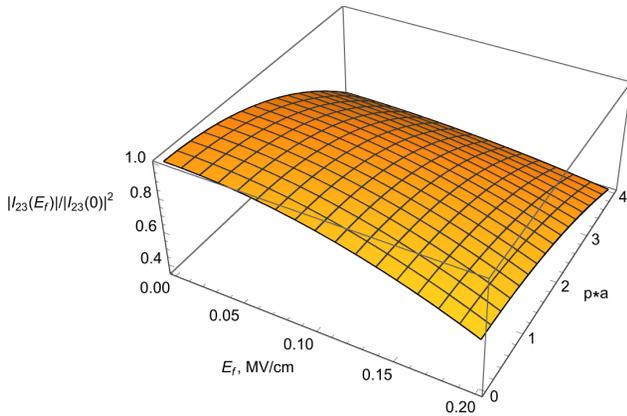


Рис. 5. Отношение интегралов перекрытия (44) в зависимости от электрического поля E_f и переданного импульса p

Используя граничные условия (37), можно получить дисперсионное соотношение для тяжелых дырок:

$$\sin \left\{ \frac{2}{3} \left[\left(\lambda_h - \frac{a}{2l_{h0}} \right)^{3/2} - \left(\lambda_h + \frac{a}{2l_{h0}} \right)^{3/2} \right] \right\} = 0. \quad (38)$$

Разлагая дисперсионное соотношение в окрестности $E_f = 0$, можно получить соотношение, определяющее \tilde{k}_h с точностью до членов E_f^2 :

$$\tilde{k}_h a - \frac{1}{96} \frac{a^3 E_f^2}{\tilde{k}_h^3 \alpha^2} = \pi n, \quad (39)$$

где n — номер уровня для состояний тяжелых дырок. В дальнейшем для оценки интеграла перекрытия (33) примем $n = 1$. Подставим в граничные условия асимптотические представления для волновых функций тяжелых дырок:

$$C_1 \frac{\sin \left(\frac{2}{3} \left(\frac{x}{l_{h0}} + \lambda_h \right)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right)}{\sqrt{\pi} \left(\frac{x}{l_{h0}} + \lambda_h \right)^{1/4}} + C_2 \frac{\cos \left(\frac{2}{3} \left(\frac{x}{l_{h0}} + \lambda_h \right)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right)}{\sqrt{\pi} \left(\frac{x}{l_{h0}} + \lambda_h \right)^{1/4}} \Bigg|_{x=\pm \frac{a}{2}} = 0. \quad (40)$$

Отсюда можно получить с точностью до E_f^2 выражение для связи констант нормировки C_1 и C_2 :

$$C_2 \cong C_1 \operatorname{ctg} \left(\frac{\pi}{4} + \frac{a^3 E_f}{12\pi\alpha} + \frac{2\pi^3\alpha}{3a^3 E_f} \right). \quad (41)$$

Для того чтобы найти константы C_1 и C_2 , воспользуемся условием нормировки $\int_{-a/2}^{a/2} |\phi_h(x)|^2 = 1$ с

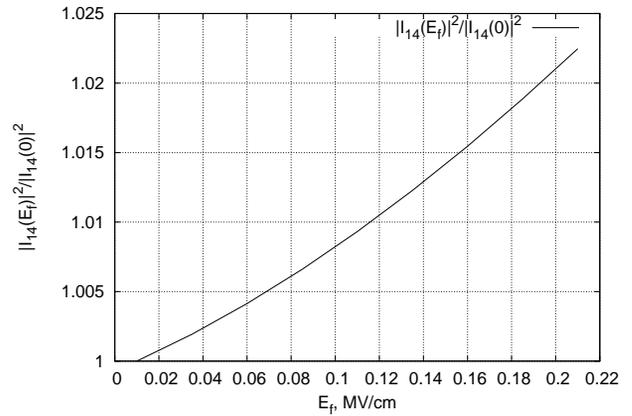


Рис. 6. Отношение интеграла перекрытия (45) в зависимости от электрического поля E_f

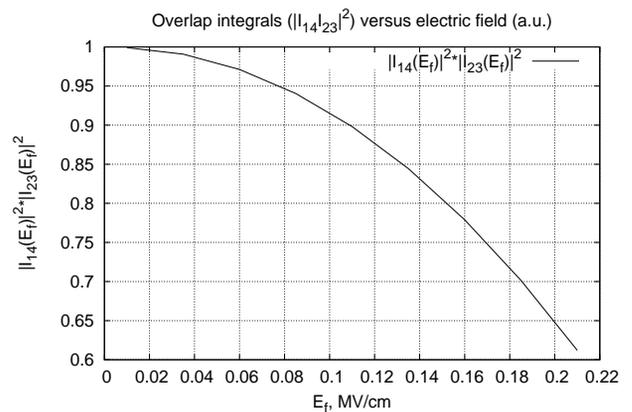


Рис. 7. Произведение квадратов модулей интегралов перекрытия (45) и (44) в зависимости от электрического поля E_f

точностью до E_f^2 . При этом константа C может быть определена из соотношения

$$\frac{a^2 C^2 E_f^{1/3} \alpha^{-4/3} \left(8\pi^3 \alpha - \frac{a^6 E_f^2}{8\pi\alpha} \right)}{16\pi^4} = 1, \quad (42)$$

а константы нормировки C_1 и C_2 могут быть выражены через константу C , полученную из (42), следующим образом:

$$C_1 = C \sin \left(\frac{\pi}{4} + \frac{a^3 E_f}{12\pi\alpha} + \frac{2\pi^3\alpha}{3a^3 E_f} \right), \quad (43)$$

$$C_2 = C \cos \left(\frac{\pi}{4} + \frac{a^3 E_f}{12\pi\alpha} + \frac{2\pi^3\alpha}{3a^3 E_f} \right).$$

Используя константы нормировки (43) и подставляя их в асимптотическую волновую функцию, можем получить оценку для интеграла перекрытия (33).

При его оценке мы считаем электрическое поле E_f малым ($eE_f a \ll E_g$). В этом случае для интеграла перекрытия получаем

$$\frac{|I_{23}(E_f, p)|^2}{|I_{23}(E_f = 0, p = 0)|^2} \simeq 1 - 0.03267a^2 p^2 + \frac{a^6 E_f^2 (1.88605 \cdot 10^{-5} a^2 p^2 - 4.52741 \cdot 10^{-4})}{\alpha^2}. \quad (44)$$

Теперь проанализируем получившееся выражение. На рис. 5 представлен трехмерный график зависимости отношения (44) от p и E_f . На рисунке видно, что отношение (44) убывает как с ростом поля, так и с ростом pa .

Интеграл перекрытия I_{14}

Теперь перейдем к анализу зависимости интеграла перекрытия I_{14} от пьезоэлектрического поля:

$$I_{14}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \phi_4(x) \exp(ipx) dx. \quad (45)$$

Интеграл перекрытия I_{14} зависит как от переданного импульса при кулоновском взаимодействии в плоскости квантовой ямы (q), так и от продольного переданного импульса p (вдоль оси квантования). Как правило, наиболее вероятное значение продольного импульса $q \approx q_T$ [18], где $q_T = \sqrt{2m_h T}/\hbar$ — тепловой импульс носителей заряда. Также при слабых электрических полях наиболее существенный вклад в матричный элемент кулоновского взаимодействия вносят малые переданные импульсы p ($p \ll q_T$). Поэтому для оценки интеграла перекрытия I_{14} в зависимости от электрического поля мы примем $q = q_T$ и $p = 0$. На рис. 6 представлено отношение интегралов перекрытия $|I_{14}(E_f)|^2/|I_{14}(0)|^2$ как функции электрического поля. Видно, что $|I_{14}|^2$ монотонно растет с ростом электрического поля. Для наглядности на рис. 7 представлено произведение интегралов перекрытия $|I_{14}I_{23}|^2$ в зависимости от пьезоэлектрического поля. В результате получено, что произведение интегралов перекрытия убывает с ростом напряженности электрического поля. Следовательно, как уже было сказано выше, коэффициент ОР убывает с ростом электрического поля (см. рис. 2 и 3).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Bhardwaj, J. M. Cesaratto, I. H. Wildeson et al., Phys. Status Solidi A **214**, 1600826 (1999).

2. P. M. Pattison, M. Hansen, and J. Y. Tsao, C. R. Phys. **19**, 134 (2018).

3. Y. Zhao, H. Fu, G. T. Wang, and S. Nakamura, Adv. Opt. Photon. **10**, 246 (2018).

4. G. Verzellesi, D. Saguatti, M. Meneghini et al., J. Appl. Phys. **114**, 071101 (2013).

5. L. Wang, J. Jin, Ch. Mi et al., Materials **10**, 1233 (2017), DOI: 10.3390/ma10111233.

6. S. Karpov, Opt. Quant. Electron. **47**, 1293 (2015).

7. F. Bertazzi, M. Goano, and E. Bellotti, Appl. Phys. Lett. **97**, 231118 (2010).

8. E. Kioupakis, P. Rinke, K. T. Delaney, and C. G. Van de Walle, Appl. Phys. Lett. **98**, 161107 (2011).

9. A. V. Zinovchuk and A. M. Gryshuk, Opt. Quant. Electron. **50**, 455 (2018).

10. M. Brendel, A. Kruse, H. Jönen et al., Appl. Phys. Lett. **99**, 031106 (2011).

11. H. Y. Ryu, K. S. Jeon, M. G. Kang et al., Sci. Rep. **7**, 44814 (2017).

12. C.-K. Tan, W. Sun, J. J. Wierer, and N. Tansu, AIP Adv. **7**, 035212 (2017).

13. I. Reklaitis, L. Krencius, T. Malinauskas et al., Semicond. Sci. Technol. **34**, 015007 (2018).

14. H.-Y. Ryu, H.-S. Kim, and J.-I. Shim, Appl. Phys. Lett. **95**, 081114 (2009).

15. W. G. Scheibenzuber, U. T. Schwarz, L. Sulmoni et al., J. Appl. Phys. **109**, 093106 (2011).

16. M. Zhang, P. Bhattacharya, J. Singh, and J. Hinckley, Appl. Phys. Lett. **95**, 201108 (2009).

17. G. G. Zegrya and V. A. Kharchenko, Sov. Phys. JETP **74**, 173 (1992).

18. A. S. Polkovnikov and G. G. Zegrya, Phys. Rev. B **58**, 4039 (1998).

19. J. Iveland, L. Martinelli, J. Peretti et al., Phys. Rev. Lett. **110**, 177406 (2013).

20. F. Bertazzi, M. Goano, Xiangyu Zhou et al., Appl. Phys. Lett. **106**, 061112 (2015).

21. N. Anchal, A. Pansari, and B. K. Sahoo, AIP Conf. Proc. **2220**, 050008 (2020).

22. X. Li, E. DeJong, R. Armitage et al., Appl. Phys. Lett. **123**, 112109 (2023).

23. D. Jenkins, in *Band Structure of InN, GaInN and AlInN*, ed. by E. D. Series, Publisher, Address (1994), Vol. 11.

24. N. E. Christensen and I. Gorczyca, *Phys. Rev. B* **50**, 4397 (1994).
25. R. Vaxenburg, A. Rodina, E. Lifshitz, and A. L. Efros, *Appl. Phys. Lett.* **103**, 221111 (2013).
26. D. Samosvat, A. Karpova, and G. Zegrya, *Appl. Phys. A* **131**, 99 (2025).
27. E. O. Kane, *J. Phys. Chem. Sol.* **1**, 249 (1957).
28. I.-J. Chen, S. Thorberg, and Y. Chen, in *Calculation on the Band Structure of GaAs Using $k \cdot p$ -theory FFF 042*, Publisher, Address (2014).
29. A. Polkovnikov and R. A. Suris, *Phys. Rev. B* **62**, 16566 (2000).
30. H. Bateman and B. M. Project, *Higher Transcendental Functions*, Vol. I–III, McGraw-Hill Book Comp., Address (2023).
31. G. G. Zegrya and A. D. Andreev, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 2681 (1995).