

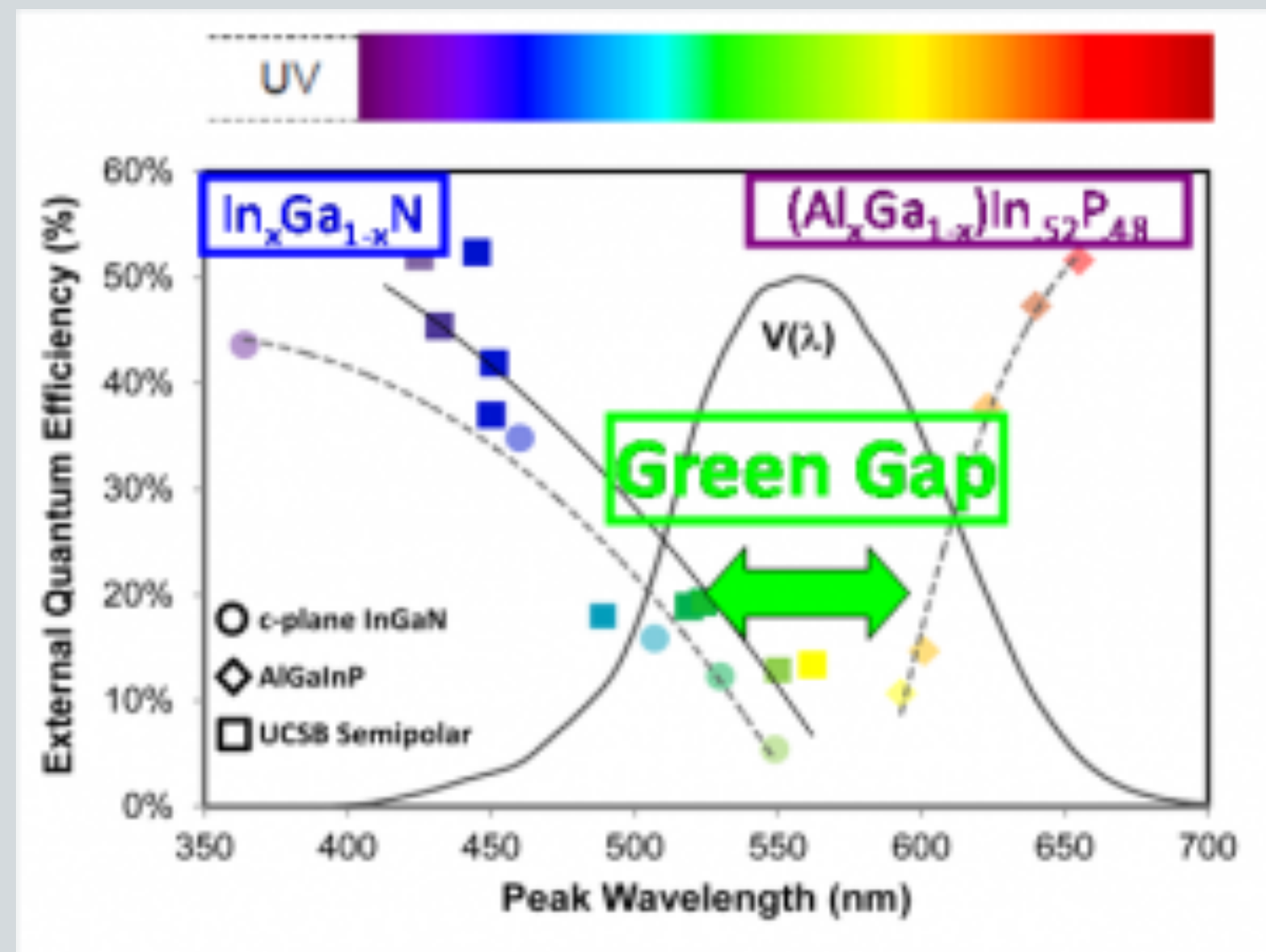


Расчёт концентраций дефектов и установление элементного состава центров фотолюминесценции в видимом диапазоне в сильнолегированных слоях AlGa_{0.5}N:Si

Осинных И.В.^{1,2}, Александров И.А.¹, Журавлёв К.С.^{1,2}
¹ ИФП СО РАН

²Новосибирский государственный университет

Мотивация работы: проблема создания зеленых твердотельных источников света



Низкая эффективность светодиодов зеленого диапазона (иллюстрация the green gap)

Оптические переходы - межзонные

Альтернативный путь – использование оптических переходов через глубокие уровни в запрещенной зоне нитридов БЕЗ индия

Проблемы создания зеленых InGa_{0.5}N/GaN-диодов

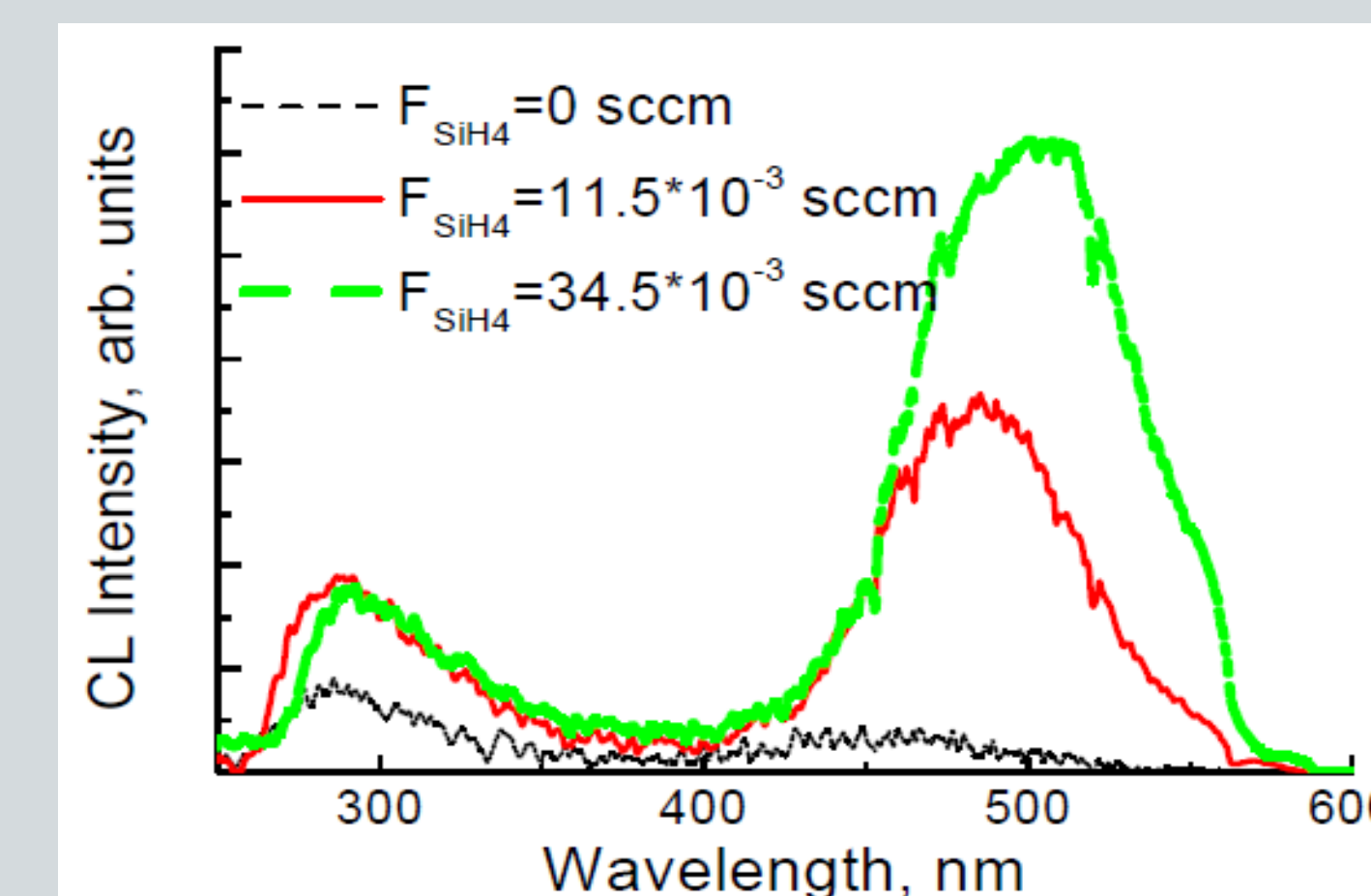
❖ сильные встроенные электрические поля, возникающие из-за пьезоэлектрического эффекта, приводят к уменьшению перекрытия волновых функций электронов и дырок в квантовых ямах, что снижает эффективность излучения.

❖ из-за низкой растворимости In в GaN происходит разделение фаз InGa_{0.5}N, приводящее к деградации приборов



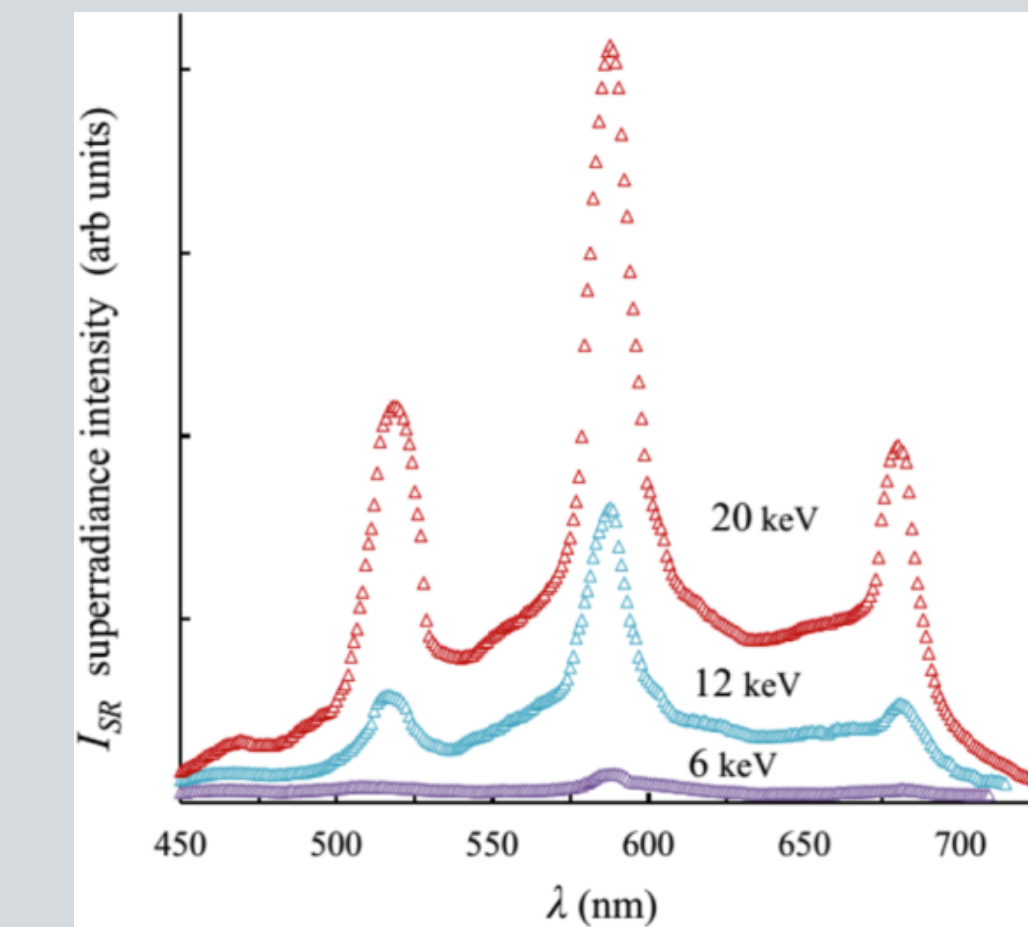
Сверхлюминесценция AlGa_{0.5}N (x>0.5)

Спектры КЛ слоев Al_{0.65}Ga_{0.35}N с разным уровнем легирования



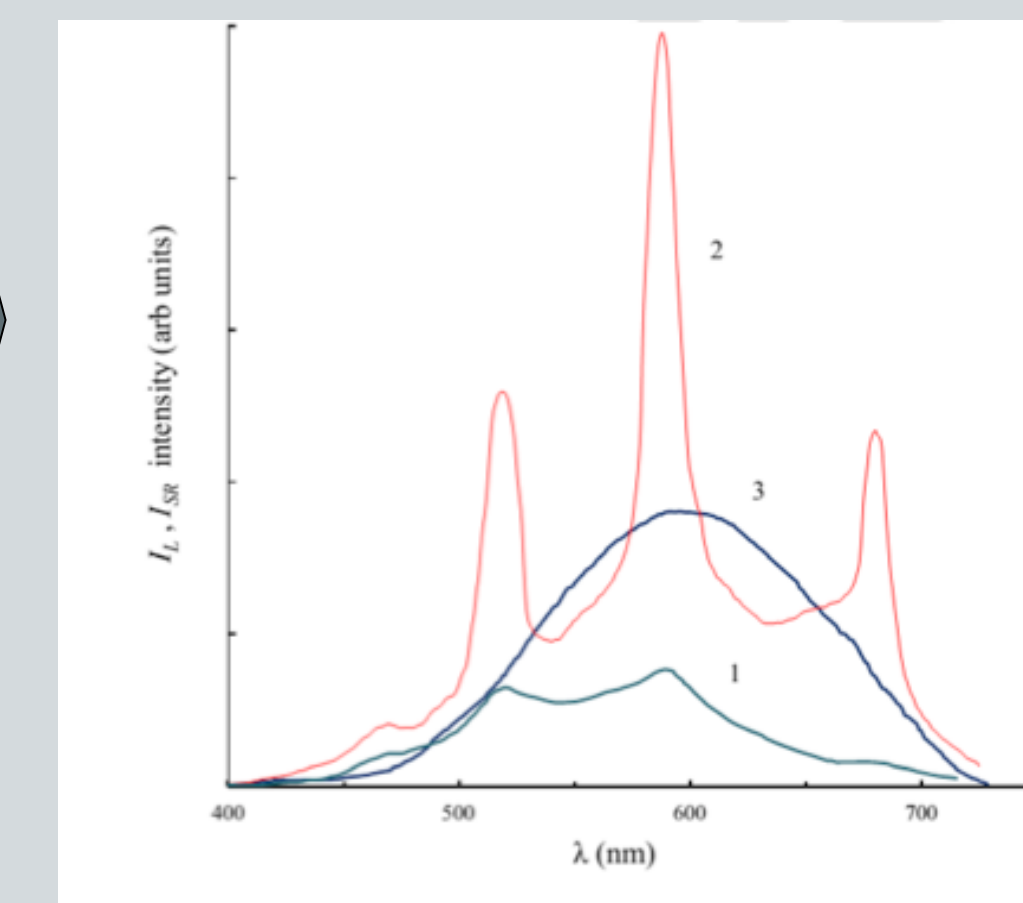
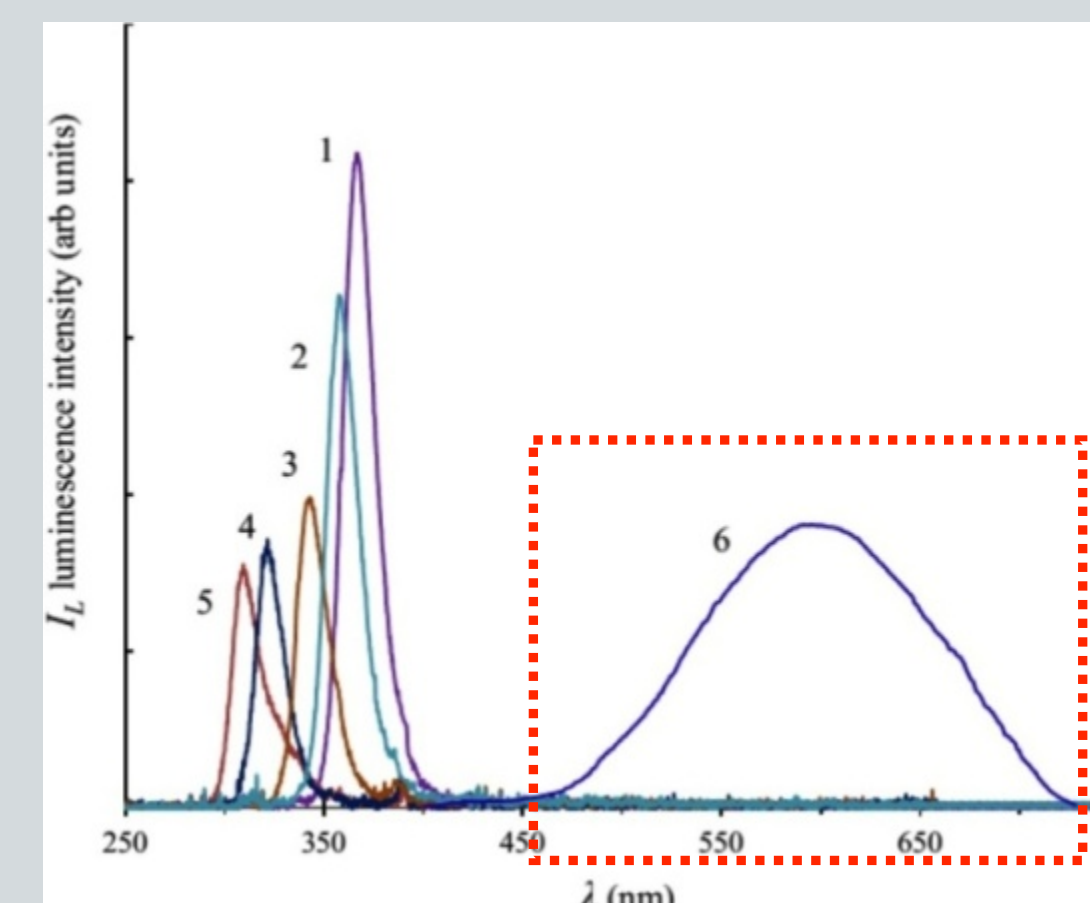
K. S. Zhuravlev et al, Phys. Status Solidi (c), 10, 315 (2013)

Изменения спектра КЛ Al_{0.5}Ga_{0.5}N при изменении энергии электронного пучка.



P.A. Bokhan et al, J. Appl. Phys. 116, 113103 (2014)

Спектры катодолуминесценции слоев AlGa_{0.5}N различного состава: 1—x=0; 2—x=0.1; 3—x=0.2; 4—x=0.28; 5—x=0.36; 6—x=0.5.



Стимулированная эмиссия, усиливающаяся в планарном волноводе при прохождении света под углами, близкими к углу полного внутреннего отражения.

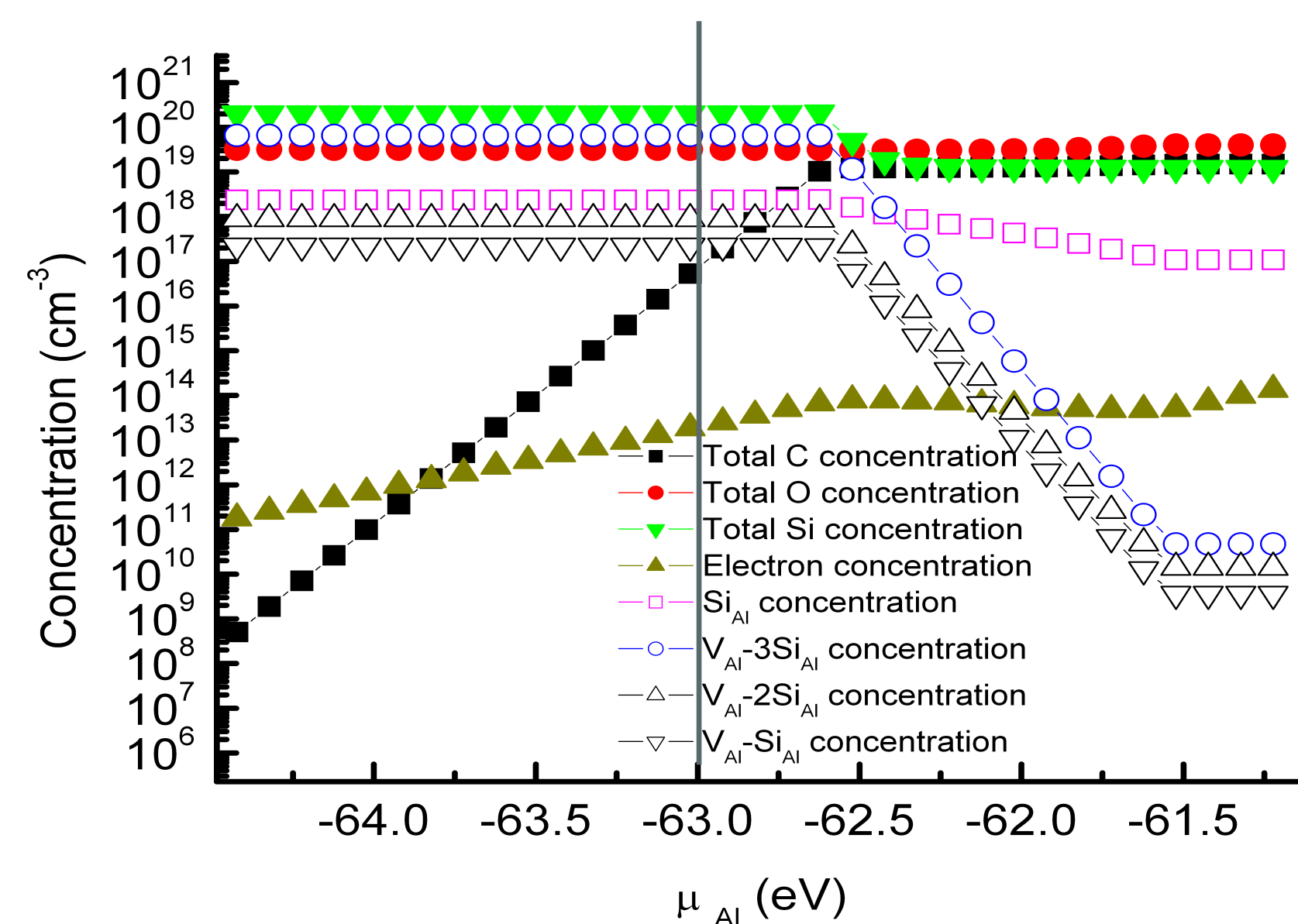
Цель работы установление элементного состава центров люминесценции.

Энергии образования дефектов были рассчитаны с использованием теории функционала плотности (DFT) с гибридным функционалом HSE в программном пакете Quantum ESPRESSO.

I.A. Aleksandrov, and K. S. Zhuravlev, J. Phys.: Condens. Matter, 32, 435501 (2020).

Расчетные концентрации электронов, Si, O, C и V_{Al}-nSi_{Al} комплексов в зависимости от химического потенциала Al.

Уровень легирования Si 1.5×10²⁰ см⁻³



Химический потенциал Al был рассчитан исходя из парциального давления потока Al в процессе роста.

$$\mu_{Al} = E_{Al} + kT \ln \left(\frac{pV_0}{kT} \right)$$

E_{Al} – энергия атома Al из FDT расчетов,
k – постоянная Больцмана,
T – температура роста AlN,
p – парциальное давление Al,
V₀ – квантовый объем

$$V_0 = \left(h^2 / 2\pi m k T \right)^{3/2}$$

Расчетные положения максимума низкотемпературной люминесценции hν₀₁ и ширины полосы W₀₁ для донорно-акцепторных переходов.

Переходы	hν ₀₁ at T=10K	W ₀₁ at T=10K
Si _{Al} (0)+V _{Al} (2-) → Si _{Al} (1+)+V _{Al} (3-)	1.84	0.97
Si _{Al} (0)+V _{Al} Si _{Al} (1-) → Si _{Al} (1+)+V _{Al} Si _{Al} (2-)	1.66	0.91
Si _{Al} (0)+V _{Al} 2Si _{Al} (0) → Si _{Al} (1+)+V _{Al} 2Si _{Al} (1-)	1.95	0.77
Si _{Al} (0)+V _{Al} 3Si _{Al} (1+) → Si _{Al} (1+)+V _{Al} 3Si _{Al} (0)	2.26	0.71
Si _{Al} DX-at(1-)+V _{Al} (2-) → Si _{Al} DX-at(0)+V _{Al} (3-)	1.42	0.90
Si _{Al} DX-at(1-)+V _{Al} Si _{Al} (a)(1-) → Si _{Al} DX-at(0)+V _{Al} Si _{Al} (a)(2-)	1.16	0.77
Si _{Al} DX-at(1-)+V _{Al} 2Si _{Al} (0) → Si _{Al} DX-at(0)+V _{Al} 2Si _{Al} (1-)	1.34	0.73
Si _{Al} DX-at(1-)+V _{Al} 3Si _{Al} (1+) → Si _{Al} DX-at(0)+V _{Al} 3Si _{Al} (0)	1.62	0.78

Расчетные положения максимума низкотемпературной люминесценции hν₀₁ и ширины полосы W₀₁ для зона-акцепторных переходов.

Transition	hν ₀₁ at T=10K	W ₀₁ at T=10K
V _{Al} (2-)+e(1-) → V _{Al} (3-)	2.57	0.40
V _{Al} Si _{Al} (a)(1-)+e(1-) → V _{Al} Si _{Al} (a)(2-)	2.52	0.45
V _{Al} Si _{Al} (c1)(1-)+e(1-) → V _{Al} Si _{Al} (c1)(2-)	2.95	0.39
V _{Al} Si _{Al} (c2)(1-)+e(1-) → V _{Al} Si _{Al} (c2)(2-)	3.00	0.38
V _{Al} 2Si _{Al} (c2a2)(0)+e(1-) → V _{Al} 2Si _{Al} (c2a2)(1-)	3.02	0.45
V _{Al} 3Si _{Al} (c2aa2)(1+)+e(1-) → V _{Al} 3Si _{Al} (c2aa2)(0)	3.56	0.42

Модель конфигурационных координат (потенциальных кривых)

M. A. Reshchikov and H. Morkoç J. Appl. Phys. 97, 061301 (2005)

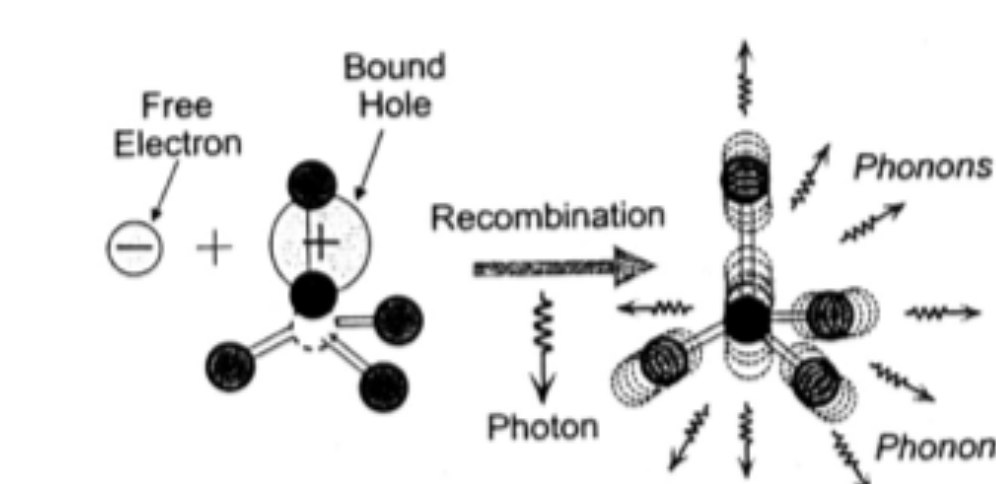


FIG. 10. Schematic representation of a recombination of the localized hole with a free electron, resulting in emission of a photon and several phonons.

Alkauskas, McCluskey, and Van de Walle, J. Appl. Phys. 119, 181101 (2016)

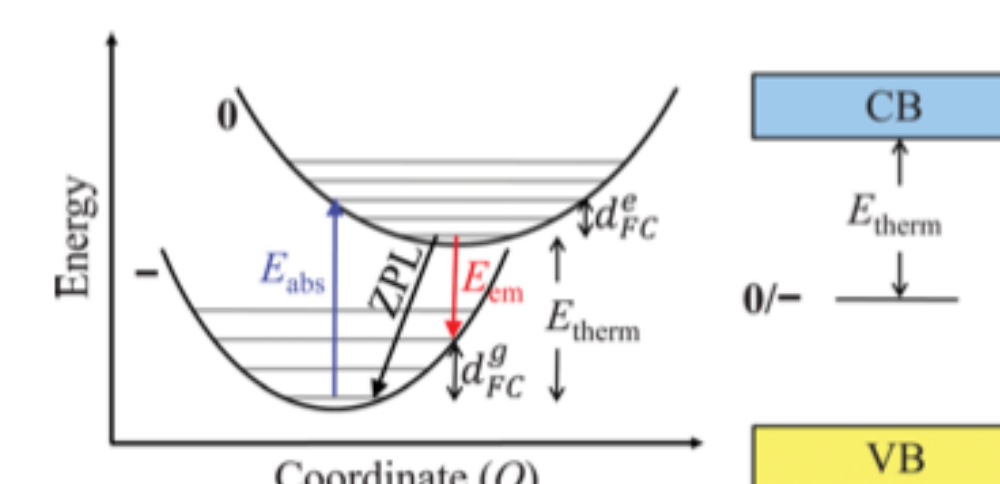


FIG. 1. Configuration coordinate diagram, showing important energies and optical transitions. For this example, E_{fc} is given the acceptor level relative to the CBM.

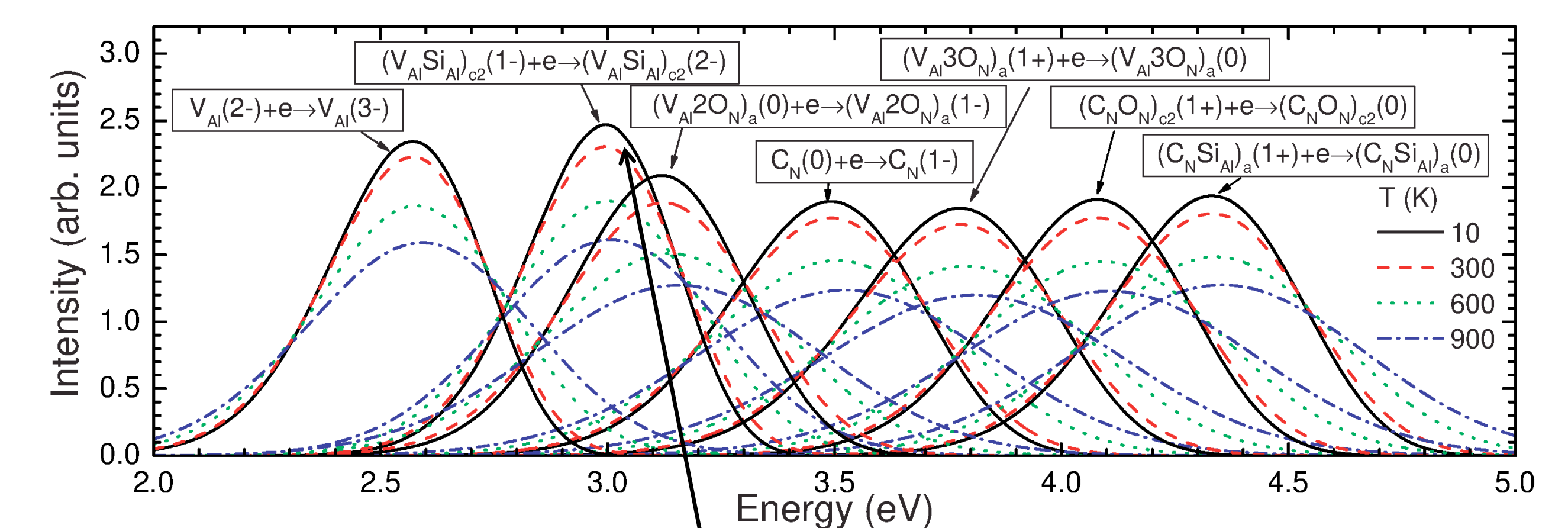
Q – локальная обобщенная координата в 1d модели
E_{ab} – энергия перехода при поглощении
E_{em} – энергия излучательного перехода
hν_g и hν_e – энергия локальных фононов при релаксации центра в состоянии с электроном (ground) и без него (excited) – соответственно при поглощении и испускании фотона
S_{ab} и S_{em} – параметры Хуанг-Риса при поглощении и испускании фотона соответственно
d_{FC}^g и d_{FC}^e – сдвиг Франка-Кордона при поглощении и испускании фотона

$$d_{FC}^g = S_{ab} h\nu_g$$

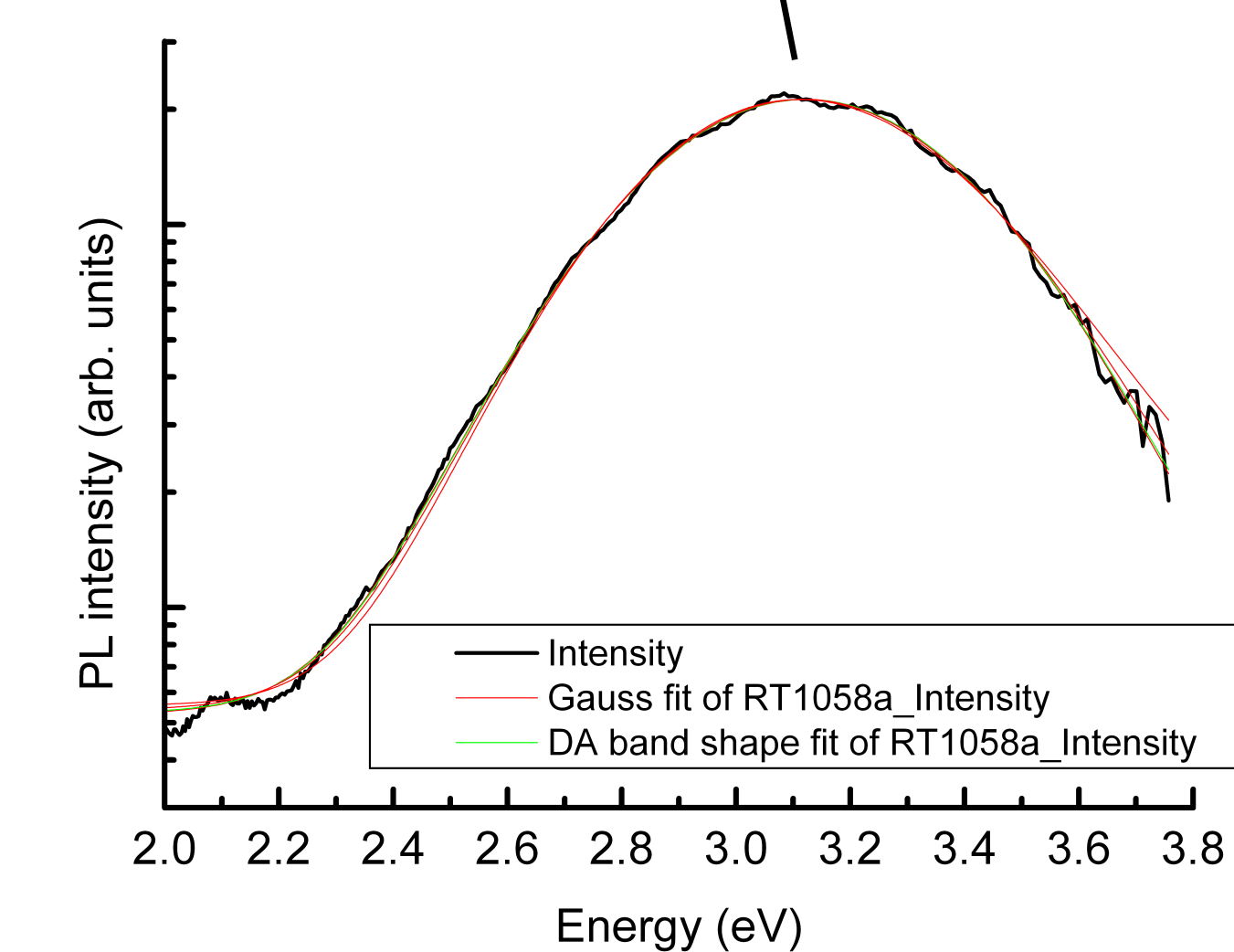
$$d_{FC}^e = S_{em} h\nu_e$$

S – параметр, показывающий силу электрон-фононного взаимодействия
Когда S>>1, то он показывает среднее число испускаемых фононов при релаксации глубокого центра

Теоретические спектры дефектной фотолюминесценции AlN



Экспериментальный спектр фотолюминесценции сильнолегированного AlN



Донор-акцептор

$$E_{em} = E_{gAlGaIn} - E_D - E_A - S_{em} h\nu_e$$
$$E_{ab} - E_{em} = E_D + 2S_{em} h\nu_e$$

Зона проводимости-акцептор

$$E_{em} = E_{gAlGaIn} - E_A - S_{em} h\nu_0$$
$$E_{ab} - E_{em} = 2S_{em} h\nu_0$$

x _{Al}	E _{em} , eV	E _g , eV	E _{ab} , eV	E _d , eV	E _A , eV	d _{FC} ^e , eV
1	3.08	6.0	4.94	0.25	1.87	0.8

Заключение

- Концентрации дефектов в AlN с уровнем легирования Si 1.0×10²⁰ см⁻³ были рассчитаны в модели термодинамического равновесия.
- Большинство атомов Si образует комплексы V_{Al}-3Si_{Al}, однако расчетное положение максимума люминесценции примерно 3,56 эВ, что выше наблюдаемого положения максимума ФЛ 3,0 эВ.
- V_{Al}-2Si_{Al} является наиболее вероятным кандидатом на роль акцептора, поскольку их концентрация высока и расчетное положение максимума люминесценции.