

САМОСОГЛАСОВАННОЕ РЕШЕНИЕ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ШРЕДИНГЕРА И ЭЛЕКТРОНЕЙТРАЛЬНОСТИ ПУАССОНА ДЛЯ ГЕТЕРОСТРУКТУР СО МНОЖЕСТВЕННЫМИ КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GAN}$

Е.Р. Бурмистров¹, Л.П. Авакянц²

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
Физический факультет, 119234 Москва, Россия*

¹*E-mail: eugeni.conovaloff@yandex.ru*

²*E-mail: avakyants@physics.msu.ru*

Поступила 02.07.2023

На основании численного самосогласованного решения уравнения Шредингера и электронейтральности Пуассона рассчитаны значения энергетических уровней и распределение плотности основных носителей заряда в одиночной КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. Результаты расчетов позволили связать максимумы в спектрах фото- и электролюминесценции с межзонными оптическими переходами основных носителей заряда в КЯ InGaN . Установлено, что наблюдаемые полосы в спектрах фотолюминесценции соответствуют фундаментальному переходу в КЯ InGaN между невозбужденными дырочными и электронными уровнями валентной зоны и зоны проводимости.

Ключевые слова: гетероструктуры, фотолюминесценция, электролюминесценция, квантовые ямы, электронный газ, излучение.

УДК 538.9159

DOI: 10/31145/2224-8412-2023-23-1-31-46

1. Введение

Полупроводниковые гетероструктуры со множественными квантовыми ямами (МКЯ) $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ широко используются в оптоэлектронике в качестве светодиодов (СД), работающих в синем и зеленом диапазонах оптического спектра [1, 2]. Например, ультрафиолетовые (УФ) СД на основе гетероструктур со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ обладают 40-процентной эффективностью излучения [3].

В серийном производстве готовых светодиодных устройств со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ используется рост вдоль кристаллографического направления (0001) гексагонального GaN. Это приводит к тому, что в квантово-размерных структурах на основе GaN вюрцитной модификации возникают встроенные электрические поля, вызванные спонтанной и пьезоэлектрической поляризациями. Характерной особенностью гетероструктур $\text{InGaN}/\text{AlGaN}/\text{GaN}$ являются малые значения спонтанной поляризации.

Основное влияние на динамику излучательной рекомбинации носителей заряда во МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ оказывают встроенные пьезоэлектрические поля, вызванные рассогласованием постоянных кристаллических решеток между слоями InGaN и GaN [4, 5]. Влияние пьезоэлектрических полей на скорость рекомбинации носителей заряда в КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ исследуют по смещениям максимумов в спектрах фотолюминесценции в зависимости от плотности потока возбуждающего излучения [6, 7].

В работе [8] авторы исследовали влияние буферного слоя AlGaIn на спектры фото- и электролюминесценции гетероструктур $\text{InGaIn}/(\text{Al})\text{GaIn}$. В спектрах фотолюминесценции помимо сдвигов, обусловленных воздействием встроенных пьезоэлектрических полей, наблюдались сдвиги, связанные с влиянием слоя AlGaIn .

Авторы работы [9] исследовали влияние высокотемпературного отжига и имплантации атомами примеси на спектры фотолюминесценции гетероструктур со МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. Было показано, что отжиг не влияет на положение и форму основной полосы, при этом, легирование приводит к уменьшению ее интенсивности.

В работе [10, 11] исследовались светоизлучающие свойства лазеров на основе гетероструктур с различным числом КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ методом спектроскопии фотолюминесценции. Показано, что увеличение числа КЯ в активной области приводит к усилению выходной мощности гетеролазера.

В работах [3-11] авторы связывают максимумы в спектрах фото- и электролюминесценции с излучением от КЯ InGaIn без указания типа перехода, которому соответствуют данные максимумы. В спектрах фото- и электролюминесценции помимо основных пиков могут содержаться линии, связанные с примесными или дефектными уровнями. Чтобы определить тип перехода, которому соответствуют наблюдаемые в спектрах фотолюминесценции длины волн, необходимо заранее знать зонную структуру исследуемого образца.

Существует множество методов, широко используемых в настоящее время для расчетов зонной структуры полупроводников. Наиболее успешными являются метод псевдопотенциала, $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{p})$ -метод, метод сильной связи [12, 13, 14]. Все они в качестве начальных условий используют небольшой набор данных, который можно получить из эксперимента. Однако, многие из существующих методов расчета зонной структуры полупроводников не по-

зволяют напрямую определить форму потенциала и профиль распределения концентрации основных носителей заряда в КЯ.

В настоящей работе спектры фото- и электролюминесценции сравниваются с моделью зонной диаграммы КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$, полученной на основании самосогласованного решения одномерного уравнения Шредингера и электронейтральности Пуассона. Результаты расчетов позволили установить тип перехода и связать его с наблюдаемыми длинами волн в спектрах фотолюминесценции.

2. Экспериментальные образцы

Объектом исследования является типичная для светодиодных гетероструктур с квантовыми ямами InGaN/GaN в р-п-переходе GaN слоевая структура. Исследовались промышленные образцы гетероструктур $\text{InGaN}/\text{AlGaIn}/\text{GaN}$, выращенные методом газовой фазной эпитаксии (ГФЭ). Типичная слоевая структура образцов представлена на рис. 1.

(a)		(b)
Al_2O_3 (430 μm)		Al_2O_3 (430 μm)
<i>i</i> -GaN (2 μm)		<i>i</i> -GaN (2 μm)
<i>n</i> -GaN (3 μm)		<i>n</i> -GaN (3 μm)
Barrier GaN (15 nm)	3QW	Barrier GaN (12 nm)
QW InGaN (2.5 nm)		QW InGaN (3 nm)
Barrier GaN (15 nm)	x3	Barrier GaN (12 nm)
<i>p</i> -GaN (100 nm)		<i>p</i> -GaN (100 nm)
		5QW
		x5

Рис. 1. Слоевая структура исследованных образцов (а) с тремя и (б) пятью КЯ (QW) $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ в активной области

Для гетероструктур $\text{InGaN}/\text{AlGaIn}/\text{GaN}$ на сапфировой подложке Al_2O_3 площадью 0.4 мм² и толщиной 430 мкм в направлении [0001] первым наращивался затравочный низкотемпературный слой *i*-GaN толщиной 2 мкм, предназначенный для уменьшения рассогласования постоянных кристаллических решеток между формируемыми слоями. Затем формировался буферный слой *n*-GaN (3 мкм), легированный Si с концентрацией доноров $N_D = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Активная область гетероструктур состоит из трех и пяти квантовых ям/квантовых барьеров (КЯ/КБ) $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ с толщинами 2.5/15 и 3/12 нм. Последним был выращен слой *p*-GaN (100 нм), легированный Mg с концентрацией акцепторов $N_A = 2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. К *n*- и *p*-областям гетероструктуры были вмонтированы Ni-Al контакты. Ширина запрещенной зоны и мольная доля In определялись с помощью методики фототоковой спектроскопии,

как это описывается, например, в работе [15]. Основные параметры исследуемых образцов представлены в таблице 1.

Таблица 1. Параметры образцов гетероструктур $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$

N	КЯ/КБ, нм	d , мм	x_{In}	E_g , эВ
3	2.5/15	0.4	0.24	2.6
5	3/12		0.22	2.6

В таблице 1 приняты обозначения: d — толщина кристалла, N — число КЯ в активной области, концентрация In в слое $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, E_g — ширина запрещенной зоны тройного соединения $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

Спектры электролюминесценции были получены при постоянном токе со значениями в диапазоне от 4 до 12 мА с шагом 2 мА. Фотолюминесценция возбуждалась лазерным диодом на длине волны 405 нм со средней выходной мощностью 50 мВт при комнатной температуре. Частота модуляции световой засветки для фотолюминесценции составила 20 кГц. Измерения проводились в лаборатории оптической спектроскопии материалов опто- и микроэлектроники Физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

3. Основные формулы

Для моделирования волновых функций двумерных носителей в КЯ используется приближение Фанга-Ховарда [16], в котором волновая функция записывается в виде:

$$\psi(z) = z\sqrt{(b^3/2)} \exp(-bz/2), \quad (1)$$

где $b = (33\pi m^* N / 2\epsilon_s)^{1/3} (e/\hbar)^{2/3}$ — нормировочная константа, $z \in [0, L]$, где L — ширина КЯ, m^* , N — эффективная масса и концентрация основных носителей заряда в КЯ, ϵ_s — диэлектрическая проницаемость. Однако приближение Фанга-Ховарда не позволяет учесть влияние встроенных пьезоэлектрических полей на форму волновых функций основных носителей заряда в КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$.

В настоящей работе для точного определения формы волновых функций и значений энергетических уровней в КЯ InGaN производилось самосоглазованное решение одномерного уравнения Пуассона для электростатического потенциала $\varphi(z)$

$$\frac{d}{dz} \left[\epsilon(z) \frac{d\varphi(z)}{dz} \right] = \frac{e}{\epsilon_0} [N_D^+(z) - N_{2DEG}(z) - N_A^-(z)], \quad (2)$$

$$N_i = \frac{m_{\text{GaN}}^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) \right] |\psi_i(z)|^2 \quad (3)$$

и одномерного уравнения Шредингера в приближении эффективной массы в форме БенДаниэла-Дюка [17]

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \psi_i(z) \right] + U(z) \psi_i(z) = E_i \psi_i(z), \quad (4)$$

где $\mathcal{E}(z)$ – зависящая от координаты диэлектрическая проницаемость, N_{2DEG} – концентрация основных носителей заряда, ψ_i – волновая функция двумерных носителей на соответствующем уровне, N_D^+, N_A^- – концентрации ионизированных доноров и акцепторов, $m^*(z)$ – зависящая от координаты эффективная масса основных носителей заряда и E_i – энергия i -ого уровня, m_{GaN}^* – эффективная масса двумерных носителей в КБ GaN, k_B – постоянная Больцмана, T – температура, E_F – энергия Ферми, $U(z) = eFz - e\varphi(z)$ – потенциальная энергия, F – напряженность встроенного электрического поля в КЯ, вызванного пьезоэлектрической P_{pz} и спонтанной P_{sp} поляризациями. В процессе расчета использовались значения F , полученные авторами работы [7].

Величину пьезоэлектрической поляризации в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ можно оценить по формуле

$$P_{pz} = 2\mathcal{E}(e_{31} - e_{33}(C_{11}/C_{33})), \quad (5)$$

где

$$\mathcal{E} = (a^{\text{GaN}} - x_{\text{In}} a^{\text{InN}} - (1 - x_{\text{In}}) a^{\text{GaN}}) / (x_{\text{In}} a^{\text{InN}} + (1 - x_{\text{In}}) a^{\text{GaN}}). \quad (6)$$

В формулы (5) и (6) входят компоненты пьезоэлектрического тензора e_{33}, e_{31} , константы упругости C_{11}, C_{33} , а также постоянные кристаллических решеток GaN и InN [18, 19]. При мольной доли In равной $x_{\text{In}} = 24\%$ подстановка в формулу $e_{33}, e_{31}, C_{11}, C_{33}$ и $a^{\text{GaN}}, a^{\text{InN}}$ приводит к $P_{pz} = 0.092 \cdot 10^{-6}$ Кл/см². В бинарном GaN и тройном $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ соединениях спонтанная поляризация принимает значения $P_{sp} = -0.029 \cdot 10^{-6}$ Кл/см² и $P_{sp} = -0.032 \cdot 10^{-6}$ Кл/см² [18, 19]. Следовательно, основное влияние на динамику излучательной рекомбинации носителей заряда в КЯ оказывает пьезоэлектрическая поляризация. В процессе работы из-за нагрева в кристалле могут также возникать пироэлектрические поля. Учитывая многослойную структуру исследуемых образцов и малые интенсивности возбуждающего излучения, влиянием пироэлектрической поляризации можно пренебречь.

Уравнение Шредингера (4) в приближении эффективной массы для одной долины в операторном виде можно переписать следующим образом

$$\hat{H}\psi_i(\vec{r}) = \left[\sum_{k,l} \hat{p}_k q_{k,l}(\vec{r}) \hat{p}_l + \hat{U}(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) = E_i \psi_i(\vec{r}), \quad (7)$$

где $\hat{p}_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k}$ – оператор импульса в координатном представлении, $q_{k,l}(\vec{r})$ – тензор обратной эффективной массы, зависящей от координаты. Первое слагаемое в уравнении (7) с учетом кратности вырождения спина имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{T}\psi_i(\vec{r}) &= \sum_{k,l} \hat{p}_k q_{k,l}(\vec{r}) \hat{p}_l \psi_i(\vec{r}) = \sum_{k,l} i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} q_{k,l}(\vec{r}) i\hbar \frac{\partial}{\partial x_l} \psi_i(\vec{r}) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{k,l} \frac{\partial}{\partial x_k} q_{k,l}(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x_l} \psi_i(\vec{r}). \end{aligned} \quad (8)$$

где $k, l = 1, 2, 3$. Так как движение основных носителей заряда в КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ ограничено в направлении оси z , то $k = l = 3$.

Рассмотрим действие оператора кинетической энергии \hat{T} на некоторую функцию $f(z)$, зависящую от координаты z . Тогда с учетом (8)

$$\hat{T}(q)f(z) = \frac{\partial}{\partial z} q(z) \frac{\partial}{\partial z} f(z) = D(z). \quad (9)$$

Если проинтегрировать выражение (9) по объему КЯ и затем применить теорему Остроградского-Гаусса, можно получить следующее

$$\iiint_{V_{\text{КЯ}}} \frac{\partial}{\partial z} q(z) \frac{\partial}{\partial z} f(z) dV = \iint_S q(z) \vec{\nabla}_z f(z) d\vec{S} = \iiint_{V_{\text{КЯ}}} D(z) dV, \quad (10)$$

где $S, V_{\text{КЯ}}$ – площадь боковой поверхности и объем КЯ, $\vec{\nabla}_z f(z)$ – поток электрического поля через боковую поверхность КЯ. В настоящей работе рассматривается математическая модель КЯ с конечной высотой потенциального барьера. Поэтому в (10) интегрирование производится по замкнутому объему КЯ.

В одномерном случае поток $\vec{\nabla}_z f(z) = 0$, тогда

$$\begin{aligned} \iint_S q(z) \vec{\nabla}_z f(z) d\vec{S} \approx S \left\{ q(z = z_0 + L) \frac{\partial}{\partial z} f(z = z_0 + L) - \right. \\ \left. - q(z = z_0) \frac{\partial}{\partial z} f(z = z_0) \right\}, \end{aligned} \quad (11)$$

где $\frac{\partial}{\partial z} f(z = z_0 + L)$ и $\frac{\partial}{\partial z} f(z = z_0)$ – производные функции $f(z)$ на левой и правой боковых поверхностях КЯ (рис.3). Так как функции $f(z)$ и $q(z)$ меняются слабо в пределах КЯ, то частные производные в (11) можно представить в виде конечно-разностных аппроксимаций

$$\iint_S q(z) \vec{\nabla}_z f(z) dS \approx S(q(z_{i,i+1}) \frac{f(z_{i+1}) - f(z_i)}{L} - q(z_{i-1,i}) \frac{f(z_i) - f(z_{i-1})}{L}) = D(z_i) \cdot S \cdot L. \quad (12)$$

или применяя символ Кронекера $\delta_{k,l} = \begin{cases} 1, k = l \\ 0, k \neq l \end{cases}$

$$(q(z_{i,i+1})(\delta_{i+1,l} f(z_l) - \delta_{i,l} f(z_l)) - q(z_{i-1,i})(\delta_{i,l} f(z_l) - \delta_{i-1,l} f(z_l))) = D(z_i) \cdot L^2, \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} f(z_{i+1}) &= \delta_{i+1,l} f(z_l), \quad f(z_i) = \delta_{i,l} f(z_l), \\ f(z_{i-1}) &= \delta_{i-1,l} f(z_l). \end{aligned} \quad (14)$$

Тогда выражение (9) с учетом (13) и (14) можно записать следующим образом

$$\begin{aligned} \sum_{i,l} T_{i,l}(q) f(z_l) &= D(z_i), \\ T_{i,l}(q) &= \frac{1}{L^2} (q(z_{i,i+1})(\delta_{i+1,l} - \delta_{i,l}) - q(z_{i-1,i})(\delta_{i,l} - \delta_{i-1,l})). \end{aligned} \quad (15)$$

В уравнении (7) произведение оператора потенциальной энергии $\hat{U}(\vec{r})$ на волновую функцию $\psi_i(\vec{r})$ сводится к матричному умножению

$$\hat{U}(z_k) \psi(z_k) = \sum_l \delta_{k,l} U(z_l) \psi(z_k). \quad (16)$$

Подставляя (15) и (16) в (7) получаем уравнение Шредингера в матричной форме

$$\sum_l (-\frac{\hbar^2}{2} T_{i,l}(q) + \delta_{k,l} U(z_l)) \cdot \psi(z_k) = E_k \psi(z_k). \quad (17)$$

Уравнение Пуассона (2) можно переписать следующим образом

$$\sum_{k,l} \frac{\partial}{\partial x_k} \varepsilon(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x_l} \varphi(\vec{r}) = \frac{e}{\varepsilon_0} [N_D^+(z) - N_{2DEG}(z) - N_A^-(z)]. \quad (18)$$

Сравнивая между собой (18) и (8) легко заметить, что левая часть последнего уравнения представляет собой действие оператора кинетической энергии на функцию $\varphi(\vec{r})$ при замене тензора обратной эффективной массы $q(\vec{r})$ на диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(\vec{r})$

$$\sum_l T_{k,l}(\varepsilon)\varphi(z_l) = \frac{e}{\varepsilon_0} [N_D^+(z) - N_{2DEG}(z) - N_A^-(z)], \quad (19)$$

Новизна данной работы заключается в том, что отыскание волновых функций и энергетических уровней в КЯ осуществлялось путем решения задачи о нахождении собственных векторов и собственных значений матрицы $T_{i,l}(q) + \delta_{k,l}U(z_l)$. Собственные значения данной матрицы соответствуют уровням энергии КЯ E_k , которым отвечают волновые функции $\psi(z_k)$. В процессе решения использовались следующие граничные условия для электростатического потенциала

$$\varphi(0) = \varphi_{\text{int}}, \varphi(L) = 0 \quad (20)$$

и потенциальной энергии

$$U(z) = \begin{cases} e\varphi(z) + eFz, z \in (0, L) \\ e\varphi(z), z \in (L, L + L_b), \\ e\varphi_{\text{int}} + \Delta E_c, z = 0 \end{cases} \quad (21)$$

где L, L_b – ширина КЯ и барьера, $\varphi_{\text{int}} = 1.1$ эВ и $\varphi_{\text{int}} = 1.3$ эВ — встроенный поляризонный потенциал в GaN и InGaN [20, 21].

Система линейных уравнений (17) и (19) с граничными условиями (20), (21) не решается аналитически. Для ее решения применялись итерационные способы вычислений, которые позволили определить потенциальный рельеф КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$, форму волновых функций, а также уровни энергий с учетом влияния встроенных полей. Использовался блочно-итерационный алгоритм, включающий в себя следующие этапы [22]:

1. Выбор начального приближения для $\varphi(z)$
2. Решение уравнения Пуассона
3. Подстановка решения в уравнение Шредингера
4. Нахождение уровней энергии и волновых функций
5. Расчет новой концентрации по формуле [23]

$$N_{2DEG}(z) = \frac{m^*(z)k_B T}{\pi\hbar^2} \sum_i |\psi_i(z)|^2 \ln(1 + e^{\frac{E_F - E_i}{k_B T}}). \quad (22)$$

Исследуемые образцы гетероструктур имеют множественные КЯ, которые разделены барьерами GaN. Связанность КЯ приводит к размытию энергетических уровней и образованию энергетических минизон. При толщине барьеров более 35\AA размытие составляет менее 1.5 мэВ . Встроенные электрические поля с напряженностью F до 3 МВ/см приводят к сильному искривлению потенциального рельефа активной области. Все это позволило в качестве начальных приближений для самосогласованного расчета использовать результаты (энергии и волновые функции), полученные аналитически для одиночной треугольной КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. Вычисления были проведены для концентрации основных носителей заряда $N_{2DEG} = 2.2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ при $T = 300 \text{ К}$. Также учитывалось, что при переходе через гетерограницу значения эффективной массы, диэлектрической проницаемости и электростатического потенциала меняются плавно. Математически резкий переход не представляет физического интереса.

4. Результаты и их обсуждение

На рис. 2(а) показана энергетическая диаграмма одиночной КЯ шириной 2.5 нм , полученная на основании численного решения системы уравнений (17) и (19). Видно, что в КЯ заселены только два энергетических уровня, которые расположены друг относительно друга на расстоянии 0.7 эВ . На рис. 2(б), (с) показаны формы волновых функций носителей заряда на основном и возбужденном энергетических уровнях. Так как максимум плотности вероятности обнаружения носителей на возбужденном уровне локализован ближе к гетерогранице, его волновая функция проникает в барьер GaN на большую глубину. Частичное проникновение хвоста волновой функции в область барьера может приводить к изменению эффективной массы основных носителей заряда в КЯ. Данный вопрос требует дополнительных исследований.

Численное решение уравнения Шредингера показало, что в КЯ шириной 2.5 и 3 нм заселены два энергетических уровня с энергиями $E_0 = 2.7 \text{ эВ}$ и $E_1 = 3.4 \text{ эВ}$ (рис. 3.(а)), а также $E_0 = 2.4 \text{ эВ}$ и $E_1 = 3.1 \text{ эВ}$ (рис. 3.(б)). Энергия отсчитывалась от потолка валентной зоны.

В исследованных гетероструктурах $\text{InGaN}/\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$ уровень Ферми поверхностного состояния отличается от объемного уровня Ферми. Следовательно, вблизи поверхности граница запрещенной зоны искривляется. В области искривления формируются встроенные электрические поля, которые приводят к перераспределению электронной плотности в глубь полупроводника. Ширина запрещенной зоны в области КЯ InGaIn равна 2.6 эВ . Фотолюминесценция возбуждалась лазерным диодом с длиной волны излучения равной 405 нм . Поэтому используемый квант света имеет энергию 3.1 эВ . Следовательно, в результате однофотонного поглощения в КЯ

InGaN возникают пространственно разделенные электроны и «дырки». Под действием встроенного электрического поля электрон-дырочная пара становится поляризованной. Это ведет к генерации дипольного момента в системе с напряженностью электрического поля \vec{E}_{dip} (рис.3). Полярность генерируемого диполя противоположна полярности встроенного электрического поля с напряженностью \vec{E}_{int} (рис.3). Частичное экранирование встроенного поля наведенным в процессе фотовозбуждения диполем приводит к тому, что результирующее электрическое поле в КЯ $|\vec{E}_{int}|$ отлично от нуля. Данный процесс можно рассматривать как «обратный» пьезоэлектрический эффект, в результате которого уменьшение напряженности встроенного электрического поля сопровождается изменением деформации кристаллической решетки. Стоит отметить, что мощность возбуждающего лазерного излучения недостаточна для полного экранирования встроенного поля, то есть для реализации состояния плоских зон.

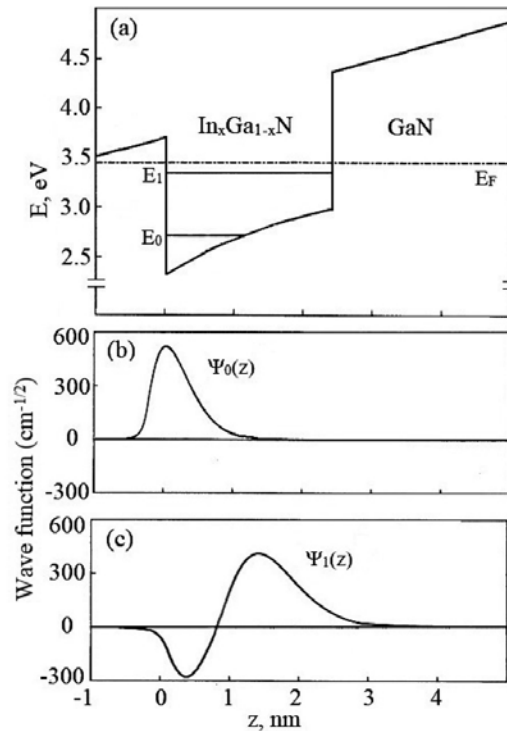


Рис. 2. (a) Зонная диаграмма одиночной КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ шириной 2.5 нм, полученная на основании решения уравнений Шредингера и Пуассона. Показаны положения основного E_0 и возбужденного E_1 энергетических уровней, а также уровня Ферми E_F . (b),(c) Формы волновых функций на уровнях E_0 и E_1 .

Решение уравнения Пуассона позволило установить отклонение электростатического потенциала КЯ от прямоугольной формы в результате воздействия встроенных электрических полей (рис. 3). Искривление потенциал-

ного рельефа приводит к неравномерному сдвигу энергетических уровней вдоль все активной области гетероструктуры $\text{InGaN}/\text{AlGaIn}/\text{GaN}$ (эффект Штарка).

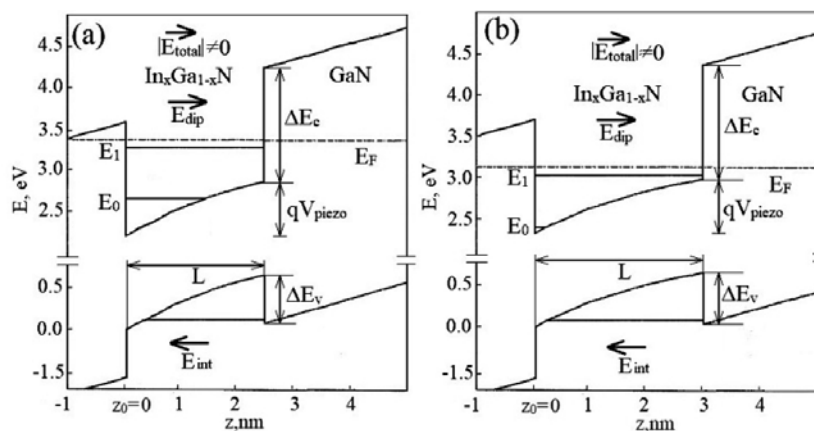


Рис.3. Зонные диаграммы одиночной КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ шириной (a) 2.5 нм и (b) 3 нм, полученные на основании решения уравнений Шредингера и Пуассона: \vec{E}_{int} – напряженность встроенного электрического поля, \vec{E}_{dip} – напряженность поля диполя, наведенного в системе в процессе фотовозбуждения, \vec{E}_{total} – результирующее электрическое поле в КЯ шириной L , $\Delta E_c, \Delta E_v$ – разрыв зоны проводимости и валентной зоны. Кружочками показан положительный и отрицательный избыточный пьезоэлектрический заряд на гетерогранице, вызванный рассогласованием постоянных кристаллических решеток GaN и InGaN.

В серийном производстве готовых СД устройств на основе МКЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ используется рост вдоль полярного направления $[0001]$ гексагонального GaN. В результате пьезоэлектрической и спонтанной поляризации в активной области гетероструктур $\text{InGaN}/\text{AlGaIn}/\text{GaN}$ формируются электрические поля. Встроенные электрические поля обуславливают изгиб энергетических зон, что, в свою очередь, приводит к пространственному разделению основных носителей заряда. Следовательно, интеграл перекрытия волновых функций электронов и «дырок» снижается и уменьшается доля излучательной рекомбинации, что приводит к уменьшению интегральной светимости приборов. Последнее обусловлено тем, что вероятность межзонного оптического перехода прямо пропорциональна квадрату интеграла перекрытия электронной и дырочной волновых функций. Уменьшение пространственного перекрытия электронной и дырочной волновых функций приводит к меньшей вероятности и энергии перехода с испусканием кванта света.

5. Заключение

Таким образом, в настоящей работе на основании численного самосогласованного решения одномерного уравнения Шредингера и электронейтральности Пуассона рассчитаны уровни энергии в КЯ InGaN, а также установлено распределение плотности носителей заряда на данных уровнях. Результаты расчетов согласуются с наблюдаемыми в спектрах фото- и электролюминесценции длинами волн. Это говорит о хорошем согласии используемой математической модели и эксперимента.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Финансирование

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда развития теоретической физики и математики «Базис».

Литература:

1. *Nakamura S.* // Rev. Mod. Phys. 2015. V. 87. pp. 1139 — 1151.
2. *Narukawa Y., Narita J., Sakamoto T., et al.* // Phys. Status Solidi A. 2007. V. 204. pp. 2087–2093.
3. *Hensley J.M., Montoya J., Xu J., et al.* // Optics express. 2009. V. 22. pp. 20476-20482.
4. *Prudaev I., Sarkisov S., Tolbanov O., et al.* // Physical Status Solidi B. 2015. V. 252. pp. 946-951.
5. *Van Capel P.J.S., Turchinovich D., Porte H.P., et al.* // Physical Review B. 2011. V. 84. pp. 1-8.
6. *Криволапчук В.В., Кожанова Ю.В., Лундин В.В. и др.* // ФТТ. 2005. Т. 47. С. 1203-1207.
7. *Асланян А.Э., Авакянц Л.П., Червяков А.В. и др.* // ФТП. 2020. Т. 54. С. 420 — 425.
8. *Любовский Р. Б., Песоцкий С. И., Шилов Г. В. и др.* // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 98. С. 204 — 207.
9. *Sousa M.A., Esteves T.C., Sedrine N.B., et al.* // Scientific Reports. 2015. V. 5. pp. 1-6.
10. *Байдусь Н.В., Алешкин В.Я., Дубинов А.А. и др.* // ФТП. 2017. Т. 51. С. 1579-1587.
11. *Бадгутдинов М.Л., Юнович А.Э.* // ФТП. 2008. Т. 42. С. 438-446.
12. *Горкавенко Т.В., Зубкова С.М., Русина Л.Н.* // ФТП. 2007. Т. 41. С. 661-669.
13. *Luttinger J.M., Kohn W.* // Physical Review. 1955. V. 97. P. 869-883.
14. *Герт А.В., Нестоклон М.О., Прокофьев А.А. и др.* // ФТП. 2017. Т. 51. С. 1325-1340.

15. *Franssen G., Perlin P., Suski T.* // *Physical Review B*. 2004. V. 69. pp. 1-6.
16. *Davies J.H.* *The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction* (Cambridge University Press, 1998).
17. *BenDaniel D.J., Duke C.B.* // *Phys. Rev.* 1966. V. 152. pp. 683-692.
18. *Bernardini F., Fiorentini V., Vanderbilt D.* // *Phys. Rev. B*. 1997. V. 56. pp. 450-457.
19. *Kehagias Th., Dimitrakopoulos G.P., Becker P., et al.* // *Nanotechnology*. 2013. V. 24. 435702.
20. *Hacke P., Detchprohm T., Hiramatsu K., et al.* // *Appl. Phys. Lett.* 1993. V. 63, pp. 2676–2678.
21. *Suzue K. et al.*, // *J. Appl. Phys.* 1996. V. 80, pp. 4467–4478.
22. *Indlekofer K. M., Dona E., Malindretos J., et al.* // *Phys. Status Solidi B*. 2002. V. 234. pp. 769-772.
23. *Brounkov P.N., Benyattou T., Guillot G.* // *J. Appl. Phys.*, 1996. V. 80, pp. 864-871.

PHOTO- AND ELECTROLUMINESCENCE SPECTRA OF HETEROSTRUCTURES WITH $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ MULTIPLE QUANTUM WELLS

E.R. Burmistrov¹, L.P. Avakyants²

Moscow State University, Faculty of Physics, 119234 Moscow, Russia

¹*E-mail: eugeni.conovaloff@yandex.ru*

²*E-mail: avakyants@physics.msu.ru*

Received 02.07.2023

Photo- and electroluminescence spectra of LED heterostructures with three and five $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ quantum wells in the active region were obtained. Photoluminescence was excited by a laser with a wavelength of 405 nm at room temperature. Electroluminescence spectra were obtained at direct current in the range from 4 to 12 mA in 2 mA increments. Based on the numerical self-consistent solution of the Schrodinger equation and the Poisson electroneutrality, the values of energy levels and the density distribution of the main charge carriers in a single $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ quantum well are calculated. The results of the calculations made it possible to associate the maxima in the photo- and electroluminescence spectra with the interband optical transitions of the main charge carriers in the InGa_xN quantum well. It is established that the observed bands in the photoluminescence spectra correspond to the fundamental transition in the InGa_xN quantum well between the unexcited hole and electron levels of the valence band and conduction band.

Keywords: heterostructure, photoluminescence, quantum well, spectra, radiation