

На правах рукописи

Хосам Елдин Хелми Фатхалла Хегази

**СОБСТВЕННОЕ ОПТИЧЕСКОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ И  
ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ  
ПОЛУПРОВОДНИКОВ  $A^3B^5$**

Специальность: 01.04.10 - Физика полупроводников

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико - математических наук

Санкт-Петербург - 2009

Работа выполнена в Санкт-Петербургском государственном электротехническом университете «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)

Научный руководитель -  
доктор физико-математических наук, профессор Пихтин А. Н.

Официальные оппоненты:  
доктор физико-математических наук, профессор Барыбин А.А.  
кандидат технических наук Александров С.Б.

Ведущая организация – Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе

Защита диссертации состоится "\_\_\_" \_\_\_\_\_ 2009 г. в \_\_\_ часов  
на заседании совета по защите докторских и кандидатских диссертаций  
Д 212.238.04 при Санкт-Петербургском государственном  
электротехническом университете «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина) по  
адресу: 197376, Санкт-Петербург, ул. Проф. Попова, 5.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке университета.

Автореферат разослан "\_\_\_" \_\_\_\_\_ 2009 г.

Ученый секретарь совета

Мошников В.А.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность темы:

После того, как в [1] было продемонстрировано, что твердые растворы в системе (GaAs – AlAs) близки к идеальным и с их помощью можно реализовать все преимущества гетероструктур, интерес к ним резко возрос. Особое значение имеют твердые растворы полупроводниковых соединений  $A^3B^5$  с прямой структурой энергетических зон. Их применение в оптоэлектронике позволило создать инжекционные лазеры, светодиоды, оптические модуляторы и фотоприемники с рекордными характеристиками [2]. Свойства бинарных соединений  $A^3B^5$ , в том числе их спектры фундаментального оптического поглощения, изучены довольно хорошо и представлены в ряде справочников и обзоров. Для твердых растворов экспериментальные данные ограничены узким кругом как материалов, так и составов. Понятно, что экспериментальным путем получить данные по всем составам твердых растворов не представляется возможным. Поэтому особое значение приобретает моделирование их свойств, позволяющее предсказать характеристики твердого раствора  $A_xB_{1-x}$  на основе измеренных параметров составляющих его компонент А и В.

Предложенные ранее модели не давали хорошего совпадения с экспериментальными данными в наиболее важной области спектра – вблизи края фундаментального поглощения. В диссертации предлагается и развивается метод расчета спектров собственного поглощения полупроводниковых твердых растворов  $A_xB_{1-x}$  на основе известных спектров поглощения бинарных соединений А и В, содержащий минимум дополнительных подгоночных параметров, что делает его универсальным и удобным для практического применения. Полученные данные позволяют также рассчитать спектр собственной люминесценции твердых растворов.

Целью работы являлось развитие модельных представлений и разработка удобной для практического применения методики расчетов спектров фундаментального поглощения полупроводниковых твердых растворов с прямой структурой энергетических зон, создание

программного обеспечения и проведение соответствующих расчетов для наиболее востребованных материалов в группе полупроводников  $A^3B^5$ .

Для достижения поставленной цели в работе необходимо было решать **следующие задачи:**

1. Определение наиболее важных факторов, влияющих на форму края фундаментального оптического поглощения твердых растворов полупроводников  $A^3B^5$ .
2. Аналитическое описание и моделирование спектров собственного поглощения в области прямых оптических переходов с введением минимума "подгоночных" параметров.
3. Разработка методики расчетов, проведение соответствующих расчетов и сравнение их с экспериментальными данными для наиболее изученных и важных в прикладном отношении твердых растворов.

В качестве **объектов исследования** были выбраны твердые растворы в группе полупроводниковых соединений  $A^3B^5$ :

- кристаллизующиеся в структуре сфалерита:  $Al_xGa_{1-x}As$ ;  $Ga_xIn_{1-x}As$ ;  $GaAs_{1-x}P_x$ ;  $(Al_xGa_{1-x})_{0.5}In_{0.5}P$  и другие;
- кристаллизующиеся в структуре вюрцита:  $Al_xGa_{1-x}N$ ;  $Ga_xIn_{1-x}N$ ;  $Al_xIn_{1-x}N$ .

**Научная новизна** представленных в работе результатов заключается в следующем:

1. Предложена методика расчетов спектров собственного поглощения, учитывающая непараболичность зоны проводимости полупроводниковых твердых растворов с прямой структурой энергетических зон, кристаллизующихся в структуре сфалерита.
2. Создано программное обеспечение, проведены расчеты и сравнение с опубликованными экспериментальными данными для наиболее изученных твердых растворов полупроводниковых арсенидов и фосфидов.
3. Предложена методика расчетов спектров собственного поглощения твердых растворов полупроводниковых нитридов, кристаллизующихся в структуре вюрцита.
4. Создано программное обеспечение, проведены расчеты и сравнение с опубликованными экспериментальными данными для твердых

растворов полупроводниковых нитридов ( $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ;  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$  и  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$ ).

5. На основе рассчитанных спектров фундаментального поглощения получены данные по спектрам собственной люминесценции твердых растворов с прямой структурой энергетических зон.

**Практическая значимость работы:**

1. Разработанные методики расчетов спектров фундаментального поглощения твердых растворов удобны для практического применения, поскольку содержат всего один "подгоночный" параметр, определяющий неоднородное уширение и зависящий от технологических факторов;
2. Получены данные по важным в прикладном отношении твердым растворам полупроводников  $\text{A}^3\text{B}^5$ :  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ,  $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$ , изорешеточным с GaAs;  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$  изорешеточным с InP;  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ,  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$  и другие.

**Научные положения, выносимые на защиту:**

1. Для описания, как края собственного оптического поглощения, так и спектров собственной излучательной рекомбинации необходимо учитывать неоднородное уширение, величина которого в реальных случаях существенно превышает предел, определяемый статистическим беспорядком в идеальном твердом растворе.
2. На форму спектров поглощения при  $\hbar\omega \geq E_0$  полупроводников  $\text{A}^3\text{B}^5$ , кристаллизующихся в структуре сфалерита, заметное влияние оказывает непараболичность зоны проводимости. Ее учет совместно с учетом уширения позволяет по предложенному соотношению (3) рассчитать спектр собственного поглощения твердого раствора от "прямой" ширины запрещенной зоны  $E_0$  до начала переходов с участием отщепленной валентной зоны, т.е. до  $\hbar\omega \geq E_0 + \Delta_{so}$ .
3. Предложенное соотношение (4) позволяет без введения каких-либо "подгоночных" параметров учесть оптические переходы с участием валентной зоны отщепленной спин-орбитальным взаимодействием на величину  $\Delta_{so}$ .

4. Для описания края собственного поглощения полупроводниковых нитридов и их твердых растворов, кристаллизующихся в структуре вюрцита, необходимо учитывать сложное строение валентной зоны и переходы в дискретные экситонные состояния.

#### **Апробация результатов работы**

Основные результаты работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях:

- 10-й научной молодёжной школы по твердотельной электронике: «Физика и технология микро- и наноструктур» (Санкт-Петербург, Россия, 2007);
- 9-й Всероссийской молодёжной конференции по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и наноэлектронике (Санкт-Петербург, Россия, 2007);
- Научно-технических конференциях профессорско-преподавательского состава СПбГЭТУ «ЛЭТИ» (2007, 2008, 2009).

#### **Публикации**

Основные теоретические и практические результаты диссертации опубликованы в 5 статьях и докладах, среди которых 1 публикация в ведущих рецензируемых изданиях, рекомендованных в действующем перечне ВАК. Доклады доложены и получили одобрение на 2 всероссийских научно-практических конференциях перечисленных в конце автореферата.

#### **Структура и объем диссертации**

Диссертация состоит из введения, четырех глав с выводами, заключения и списка литературы, включающего 143 наименования. Основная часть работы изложена на 121 страницах машинописного текста. Работа содержит 45 рисунков и 7 таблиц.

## КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обоснована актуальность работы, определены цель и задачи диссертации. Сформулированы научная новизна, практическая значимость полученных результатов и научные положения, выносимые на защиту.

**Первая глава** носит обзорный характер. В ней рассмотрены особенности зонной структуры полупроводников  $A^3B^5$ , энергетические состояния в полупроводниковых твердых растворах, влияние флуктуирующего потенциала и эффектов беспорядка, а также влияние экситонных эффектов на край собственного оптического поглощения полупроводников. Особое внимание уделено анализу существующих моделей, описывающих диэлектрические функции и оптические константы в области собственного поглощения. Отмечается, что предложенные методы моделирования оптических свойств твердых растворов требовали введения от нескольких десятков до 144 (!) численных (подгоночных) значений параметров осцилляторов.

**Вторая глава** посвящена развитию модельных представлений проведению расчётов спектров собственного (фундаментального) поглощения и их сравнению с экспериментальными данными для твердых растворов полупроводников  $A^3B^5$  со структурой сфалерита. Известно, что для прямых разрешенных оптических переходов между валентной зоной и зоной проводимости при условии их параболичности спектр поглощения описывается классической формулой

$$k_w^0 = const. \frac{(2m_r)^{3/2}}{\hbar w} (\hbar w - E_0)^{1/2} \quad (1)$$

Здесь  $m_p$  – приведенная эффективная масса, а  $E_0 = E_g^\Gamma$  – энергия "прямого" энергетического зазора в точке  $\Gamma$ . Учет непараболичности зоны проводимости, основанной на трехзонной модели Кейна [3], приводит к трансформации общепринятой "корневой зависимости" (1) в:

$$k_w^0 = C \left( \frac{2m_r}{E_0} \right)^{3/2} \sqrt{(\hbar w)^2 - E_0^2} \quad (2)$$

Сравнение с экспериментальными данными для целого ряда бинарных соединений  $A^3B^5$  показало, что при удалении от  $E_0$  соотношение (2) лучше описывает спектр собственного поглощения, как это проиллюстрировано на рис.1. Расчеты по восьмизонной модели Кейна, выполненные по соотношениям [4], привели лишь к незначительному отклонению от (2).

В твердых растворах принципиально важную роль играют эффекты "беспорядка", вызванные статистически неупорядоченным распределением атомов составляющих компонентов по узлам соответствующей подрешетке. Вызванный этим беспорядком флуктуирующий потенциал может приводить к кажущемуся нарушению правил отбора по волновому вектору, но для прямых, вертикальных оптических переходов хорошо выполняется приближение виртуального кристалла [5].

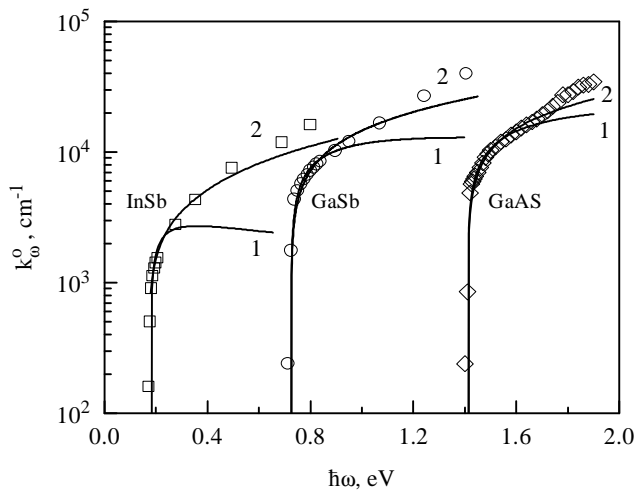


Рис. 1. Теоретическая аппроксимация края фундаментального поглощения InSb, GaSb и GaAs при  $T = 300$  К. Сплошные линии: расчет 1– (1), 2– (2)

Микроскопические флуктуации состава, существующие даже в идеальном твердом растворе, приводят к неоднородному уширению спектров, описываемому функцией Гаусса. Тогда для прямых разрешенных оптических переходов край собственного поглощения в твердых растворах будет определяться сверткой функции (2) с функцией Гаусса, т.е.:

$$k_w = k_w^o * g_G = A' \cdot \left( \frac{2m_r}{E_0} \right)^{3/2} \cdot \frac{1}{\Gamma \sqrt{2p}} \int_0^{E_1} \sqrt{E^2 - E_0^2} \cdot \exp \left[ -\frac{(\hbar\omega - E)^2}{2\Gamma^2} \right] dE$$

$$; \frac{A}{\Gamma \sqrt{2p}} \int_{E_0 - N\Gamma}^{E_1} \sqrt{E^2 - E_0^2} \cdot \exp \left[ -\frac{(\hbar\omega - E)^2}{2\Gamma^2} \right] dE \quad (3)$$

Здесь, в коэффициент  $A$  включены приведенная эффективная масса  $m_r$  и пороговая энергия перехода  $E_0 = E_g^\Gamma$ . Интегрирование проводится от энергии на  $N\Gamma$  ниже пороговой  $E_0$ . Обычно достаточно  $N \approx 5$  поскольку



при этой энергии функция Гаусса спадает практически до нуля. Верхний предел интегрирования выбирается из разумных соображений. В нашем случае он выбран до критической точки  $E_1$ , соответствующей максимуму в спектре  $\varepsilon_1(\hbar\omega)$ .

При  $\hbar\omega \geq E_0 + \Delta_{so}$  к рассмотренным переходам добавляются переходы с участием валентной подзоны  $V_3$ , отщепленной спин-орбитальным взаимодействием на энергию  $\Delta_{so}$ . Матричный элемент для таких переходов в полупроводниках со структурой сфалерита в два раза меньше (2). Тогда спектральная зависимость коэффициента поглощения может быть записана в виде

$$k_w^{so} = \frac{A}{2} \cdot \left( \frac{m_r^{so}}{m_r} \right)^{3/2} \left( \frac{E_0}{E_0 + \Delta_{so}} \right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{2p} \Gamma} \int_{E_0 + \Delta_{so} - 5\Gamma}^{E_1} \sqrt{E^2 - (E_0 + \Delta_{so})^2} \cdot \exp \left[ -\frac{(\hbar\omega - E)^2}{2\Gamma^2} \right] dE \quad (4)$$

Здесь  $(m_r^{so})^{-1} = (m_e^\Gamma)^{-1} + (m_h^{so})^{-1}$ ;  $\Delta_{so}$  – величина спин-орбитального расщепления валентной зоны с эффективной массой  $m_h^{so}$ . Важно, что входящие в (3) и (4) коэффициенты  $A$  и  $\Gamma$  одинаковы и одинаково изменяются с изменением состава твердого раствора.

В работе показано, что матричные элементы для одноптипных переходов можно с хорошим приближением считать линейно изменяющимися с величиной  $E_0$ . Для энергетических зазоров линейное приближение оказывается недостаточным. Часто можно ограничиться квадратичной зависимостью от состава твердого раствора  $x$ :

$$E_0^{A,B,1-x}(x) = xE_0^A + (1-x)E_0^B - cx(1-x) \quad (5)$$

Коэффициент нелинейности  $c$  зависит от рассогласования постоянных решеток  $a_A$  и  $a_B$  и для твердых растворов полупроводниковых соединений III и V групп он определен достаточно точно. Аналогичные данные имеются и для величин  $\Delta_{so}$  и  $c_{so}$ . Их значения приведены в диссертации.

Таким образом, для конкретного твердого раствора с известной величиной  $E_0(x) = E_g^\Gamma(x)$  достаточно всего одного параметра  $\Gamma$ , чтобы рассчитать спектр собственного поглощения для прямых (вертикальных) оптических переходов в области от  $E_g^\Gamma$  до  $(E_g^\Gamma + \Delta_{so})$  для всего диапазона составов  $0 \leq x \leq 1$ . Параметр  $\Gamma$  определяет неоднородное уширение спектра

и в конечном итоге – степень технологической неоднородности состава твердого раствора.

Дееспособность предложенной методики была опробована на твердых растворах  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ;  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ ;  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$ ;  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_{1-y}$ ;  $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_{0,5}\text{In}_{0,5}\text{P}$ ;  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ . В качестве примера на рис. 2 и 3 результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными для  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  и  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ .

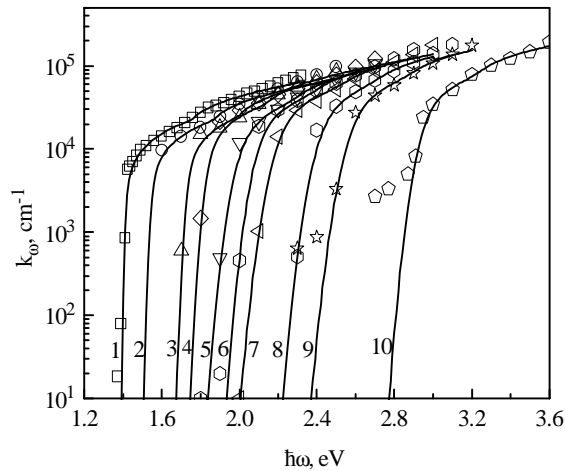


Рис. 2. Край собственного поглощения твердых растворов  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  при  $T = 300 \text{ K}$ ,  $x$ : 1 – 0, 2 – 0.099, 3 – 0.198, 4 – 0.315, 5 – 0.419, 6 – 0.491, 7 – 0.59, 8 – 0.7, 9 – 0.804, 10 – 1. сплошные кривые – расчет.

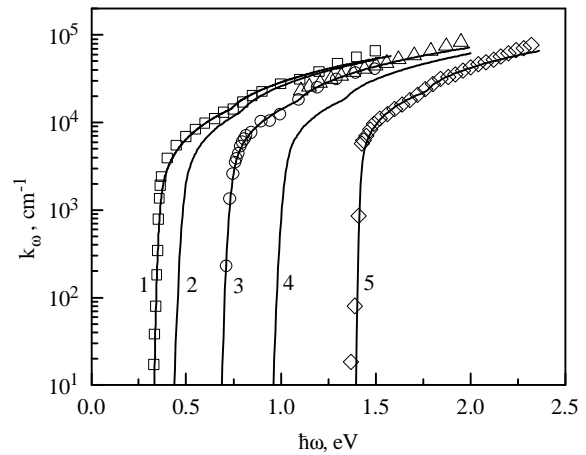


Рис. 3. Край собственного поглощения твердых растворов  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$  при  $T = 300 \text{ K}$ ,  $x$ : 1 – 0, 2 – 0.2, 3 – 0.47, 4 – 0.7, 5 – 1. Сплошные кривые – расчет.

Дисперсия  $\Gamma$  в реальных твердых растворах существенно превышает теоретический предел, определяемый характерным радиусом локализации в идеальном твердом растворе [5]. С учетом уширения  $\Gamma(0)$  в бинарных соединениях зависимость  $\Gamma(x)$  может быть представлена в виде

$$\Gamma(x) = \Gamma(0) + g\sqrt{x(1-x)} \quad (6)$$

Эта зависимость сравнивается на рис. 4, а с экспериментальными данными. Экспериментальные данные для  $A(x)$  отличаются от линейной зависимости, как это продемонстрировано на рис. 4, б.

Анализ данных по бинарным соединениям  $\text{A}^3\text{B}^5$  показал, что для них коэффициент  $A$  связан с прямым энергетическим зазором  $E_0 = E_g^\Gamma$  эмпирическим соотношением

$$A(E_0) = (1.33 + 1.06 E_0) \cdot 10^4 \text{ [эВ}^{-1}\text{см}^{-1}] \quad (7)$$

Эта важная зависимость, проиллюстрированная на рис.5, позволяет определить  $A(x)$  для твердых растворов даже в том случае, если отсутствуют достоверные данные для бинарных соединений.

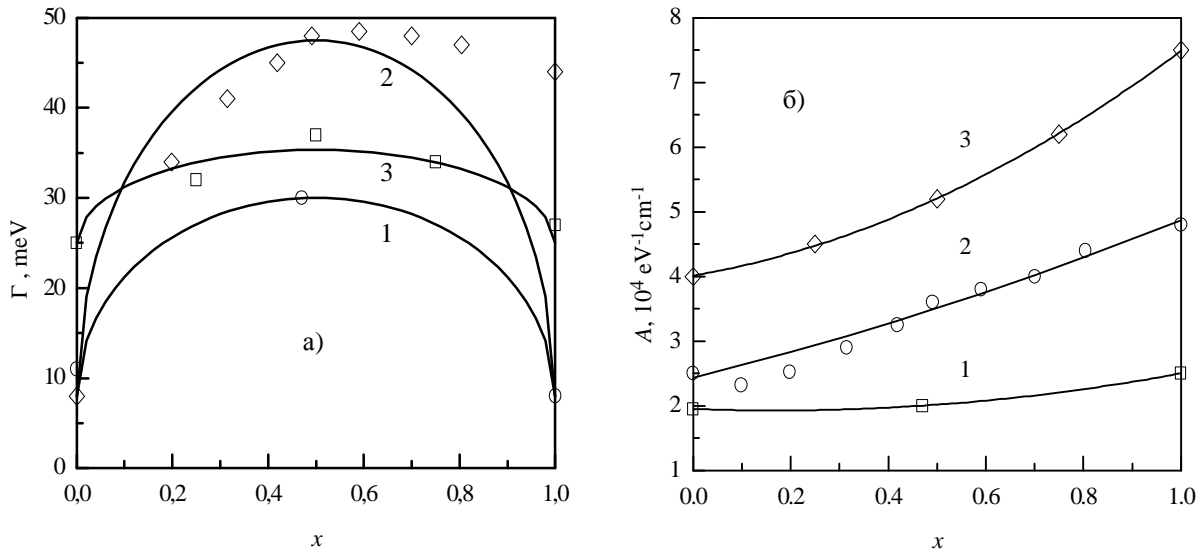


Рис.4 Зависимость параметров  $\Gamma$  и  $A$  от состава твердых растворов: 1– Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>As, 2 – Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, 3 – (Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>)<sub>0.5</sub>In<sub>0.5</sub>P. Сплошные линии – расчет, точки – эксперимент.

На рис. 6 приведены результаты расчетов для востребованных в оптоэлектронике твердых растворов (Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>)<sub>0.5</sub>In<sub>0.5</sub>P, изорешеточных с GaAs, доказывающие возможность применения метода не только к трехкомпонентным, но и к четырехкомпонентным твердым растворам.

**Третья глава** посвящена расчетам спектров фундаментального поглощения полупроводниковых нитридов (A<sup>3</sup>N) и их твердых растворов, кристаллизующихся в гексагональной структуре вюрцита.

Модельные представления, развитые во второй главе, были модифицированы с учетом особенностей зонной структуры этих соединений и с возросшей ролью экситонных эффектов.

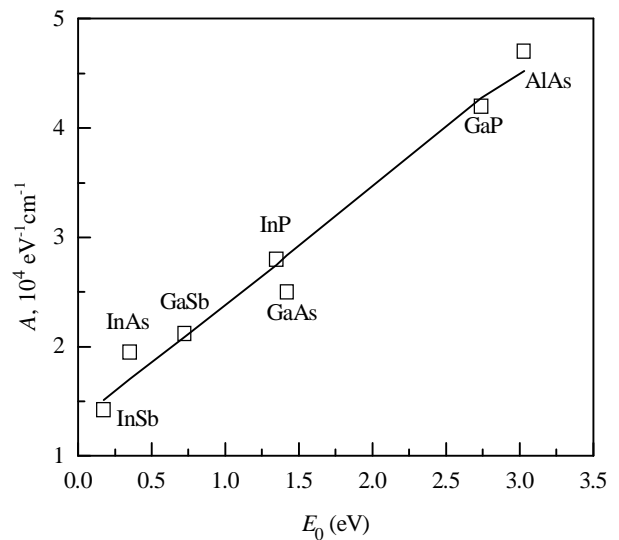
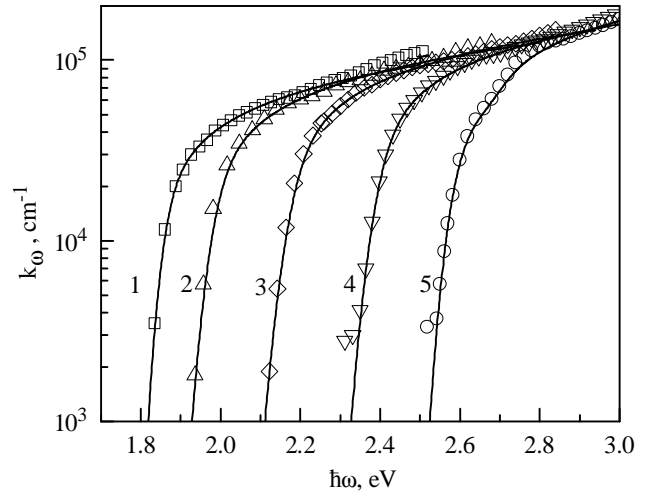


Рис. 5. Зависимость параметра  $A$  от величины прямого энергетического зазора  $E_0 = E_g^\Gamma$  в бинарных соединениях A<sup>3</sup>B<sup>5</sup>.

Рис. 6. Край собственного поглощения твердых растворов  $(Al_xGa_{1-x})_{0.5}In_{0.5}P$  при  $T = 300$  К,  $x$ : 1 – 0, 2 – 0.25, 3 – 0.5, 4 – 0.75, 5 – 1. Сплошные кривые – расчет.



В широкозонных полупроводниках, таких как GaN и AlN, энергии связи экситонов  $E_b = E_{ex}$  более чем в десять раз выше, чем в материалах типа InAs и GaAs. Поэтому для описания спектров собственного поглощения даже при комнатных температурах необходимо учитывать не только оптические переходы в непрерывные экситонные зоны (что неявным образом учитывалось в соотношениях (2) и (3)), но и переходы в дискретные состояния. Валентная зона в полупроводниках со структурой вюрцита расщеплена кристаллическим и спин-орбитальным взаимодействием на три близко расположенных подзоны. Вблизи края собственного поглощения доминируют три экситонных линии обозначаемые как А, В, С с резонансными энергиями  $E_A$ ,  $E_B$  и  $E_C$ , определяемыми переходами в основное ( $n=1$ ) экситонное состояние. Матричные элементы и силы осцилляторов для этих переходов зависят от поляризации света относительно оптической оси кристалла  $c$ . Для полупроводниковых нитридов их значения были недавно рассчитаны в [6].

Учет переходов в дискретный и непрерывный экситонный спектр может проводиться аддитивно. Тогда с учетом фактора Заммерфельда и неоднородного уширения  $\Gamma$  спектральная зависимость коэффициента поглощения может быть записана в виде

$$k_w = \frac{A}{\Gamma\sqrt{2p}} \cdot \sum_{A,B,C} \left[ f_{A,B,C} \int_{E_A - \Gamma}^{E_1} \sqrt{\frac{E^2 - E_{A,B,C}^2}{E_b^2}} \cdot \frac{2p / \sqrt{(E - E_{A,B,C})/E_b}}{1 - \exp(-2p / \sqrt{(E - E_{A,B,C})/E_b})} \cdot \exp\left[-\frac{(\hbar\omega - E)^2}{2\Gamma^2}\right] dE \right] + k_{ex} \quad (8)$$

Слагаемое  $k_{ex}$  учитывает вклад дискретных экситонных состояний в коэффициент поглощения:

$$k_{ex} = \sum_{A,B,C} \sum_n^3 \frac{1}{\sqrt{2p}\Gamma} \frac{A_{ex} \cdot f_{A,B,C}}{n^3} \exp \left[ \frac{-\left(\hbar\omega - E_{A,B,C} + \frac{E_b}{n^2}\right)^2}{2\Gamma^2} \right] \quad (9)$$

Здесь суммирование проводится по экситонным состояниям с энергиями  $E_A$ ,  $E_B$ , и  $E_C$  и относительными силами осцилляторов  $f_A$ ,  $f_B$  и  $f_C$ . Интегрирование, как и в (3), проводится от энергии на  $N\Gamma$  ниже пороговой  $E_A$ . При суммировании по квантовому числу  $n$  в (9) как правило достаточно ограничиться  $n=3$ .

Дееспособность предложенной методики расчета была опробована на твердых растворах  $Al_xGa_{1-x}N$  (рис.7) и  $In_{1-x}Ga_xN$  (рис. 8), обладающих прямой структурой энергетических зон во всем диапазоне составов  $0 \leq x \leq 1$ .

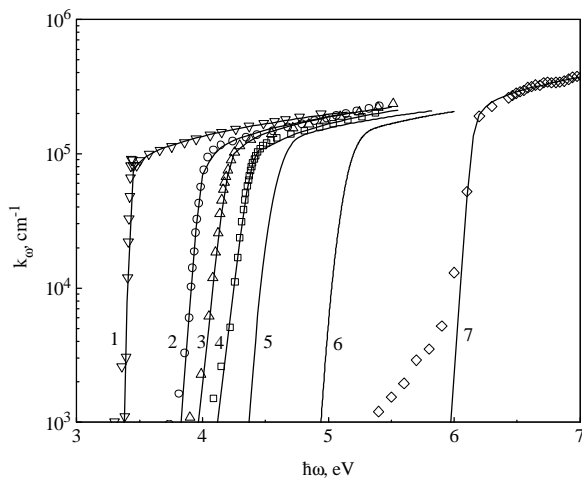


Рис. 7. Край собственного поглощения твердых растворов  $Al_xGa_{1-x}N$  при  $T = 300$  К,  $x$ : 1 — 0, 2 — 0.27, 3 — 0.34, 4 — 0.38, 5 — 0.5, 6 — 0.7, 7 — 1. сплошные кривые – расчет.

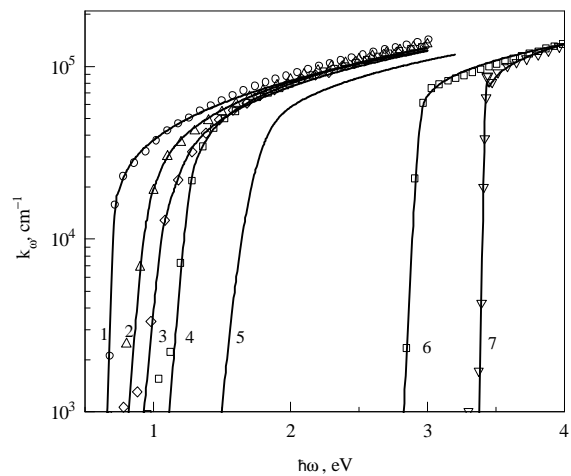


Рис. 8. Край собственного поглощения твердых растворов  $In_{1-x}Ga_xN$  при  $T = 300$  К,  $x$ : 1 — 0, 2 — 0.13, 3 — 0.23, 4 — 0.31, 5 — 0.5, 6 — 0.86, 7 — 1. сплошные кривые – расчет.

Переходы в дискретные экситонные состояния при комнатной температуре не разрешаются в явном виде вследствие большой величины неоднородного уширения  $\Gamma$ . Большая величина уширения в твердых растворах на основе нитридов по сравнению с арсенидами, фосфидами и антимонидами связана с двумя причинами. Во-первых, радиус

локализации  $R$ , определяемы Боровским радиусом экситона, в нитридах существенно меньше. Во-вторых, технология их получения значительно сложнее, что приводит к возможным макроскопическим флуктуациям состава.

Зависимости  $\Gamma(x)$  и  $A(x)$  и их сравнение с экспериментальными данными приведены на рис.9.

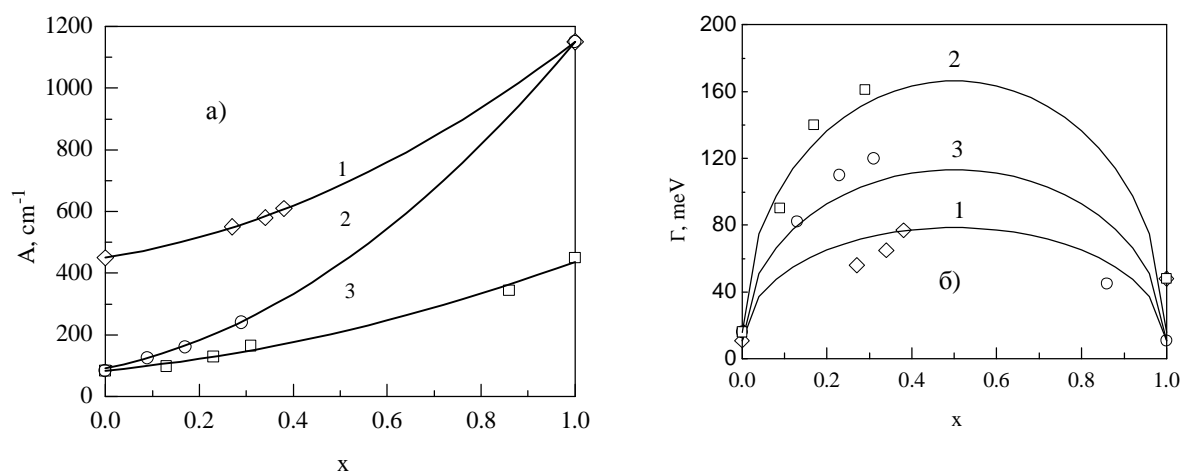


Рис.9 Зависимость параметров  $A$  и  $\Gamma$  для поляризации  $E \perp c$  от состава твердых растворов: 1 –  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , 2 –  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$ , 3 –  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ .

**Четвертая глава** посвящена расчету спектров собственной люминесценции на основе результатов, полученных во второй и третьих главах по спектрам собственного поглощения твердых растворов. Спектральная зависимость скорости излучательной рекомбинации  $\Phi(\hbar\omega)$  связана со спектральной зависимостью коэффициента поглощения  $k_w$  хорошо известным соотношением Ван-Русбрека-Шокли. При отсутствии вырождения и  $\hbar\omega \gg kT$  его можно записать в удобном для практических применений виде:

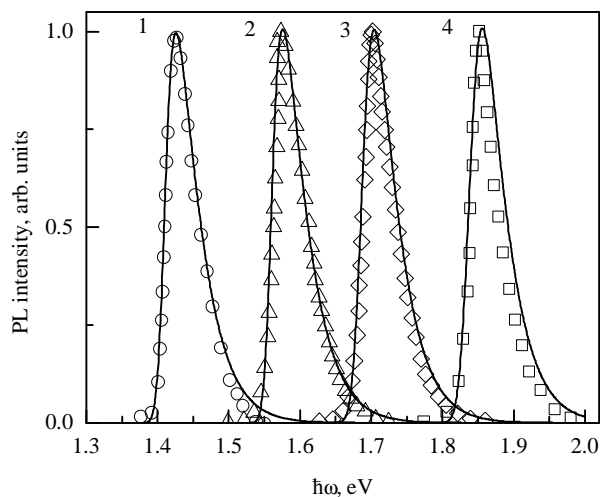


Рис. 10. Спектры фотолюминесценции при  $T = 300$  К твердых растворов  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ,  $x$ : 1 – 0, 2 – 0.1022, 3 – 0.1953, 4 – 0.3057. Сплошные кривые – расчет.

При отсутствии вырождения и  $\hbar\omega \gg kT$  его можно записать в удобном для практических применений виде:

$$\Phi(\hbar\omega) = B(\hbar\omega)^2 k_w \exp\left(-\frac{\hbar\omega - E_0}{kT}\right) \quad (10)$$

Коэффициент  $A(x)$  входит в константу  $B$ , с помощью которой по известной методике [2] могут быть определены излучательные времена жизни для межзонных переходов.

В качестве примера рассчитанные по (3), (10) спектры люминесценции сравниваются на рис. 10 с экспериментальными данными [7] для твердого раствора  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Отметим хорошее совпадение спектров в длинноволновой области, что невозможно наблюдать без учета уширения.

**В заключении** сформулированы основные результаты работы и выводы.

### ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. Показано, что в реальных твердых растворах полупроводников  $\text{A}^3\text{B}^5$  основным фактором, определяющим форму края собственного поглощения при прямых межзонных переходах, является неоднородное уширение спектра, вызванное микроскопическими и макроскопическими флуктуациями состава.
2. Предложена методика и создано программное обеспечение для расчетов спектров собственного поглощения с учетом непараболичности зоны проводимости полупроводниковых твердых растворов с прямой структурой энергетических зон, кристаллизующихся в структуре сфалерита.
3. Предложена методика и создано программное обеспечение для расчетов спектров собственного поглощения твердых растворов полупроводниковых нитридов, кристаллизующихся в структуре вюрцита.
4. Сравнение результатов расчетов с опубликованными экспериментальными данными показало дееспособность и возможность практического применения предложенных методик.

5. На основе рассчитанных спектров фундаментального поглощения получены данные по спектрам собственной люминесценции твердых растворов с прямой структурой энергетических зон.

**Основные результаты опубликованы в следующих работах:**

***Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК России:***

1. Хегази, Х.Х., Пихтин А.Н. Край собственного поглощения полупроводниковых твердых растворов с прямой структурой энергетических зон [текст] / Х.Х. Хегази, А.Н. Пихтин // Физика и техника полупроводников – 2009. – С. 1328.

***Другие статьи и материалы конференций:***

2. Хегази, Х.Х., Пихтин А.Н., Тарасов С.А. Моделирование спектров фундаментального оптического поглощения твердых растворов полупроводников  $A^{III}B^V$  [текст] / Х.Х. Хегази, А.Н. Пихтин, С.А.Тарасов // Изв. СПбГЭТУ “ЛЭТИ” (Известия государственного электротехнического университета). Сер. Физика твёрдого тела и электроника. –2007. - № 1. – С. 7-13.
3. Хегази, Х.Х., Пихтин А.Н., Тарасов С.А. Моделирование фундаментального оптического поглощения твердых растворов полупроводников  $A^{III}B^V$  [текст] / Х.Х. Хегази, А.Н. Пихтин, С.А.Тарасов // 10-я научная молодежная школа по твердотельной электронике “Физика и технология микро-и наносистем”. – Санкт-Петербург, 2007. – С.68-69.
4. Хегази, Х.Х., Пихтин А.Н. Расчет спектров фундаментального оптического поглощения твердых растворов III-V нитридов [текст] / Х.Х. Хегази, А.Н. Пихтин // 9-я Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и наноэлектронике. – Санкт-Петербург, 2007.- С. 4.
5. Хегази, Х.Х., Тарасов С.А. Расчет коэффициента преломления света в нитридах галлия, индия и алюминия с гексогональной кристаллической структурой [текст] / Х.Х. Хегази, С.А.Тарасов // Изв. СПбГЭТУ “ЛЭТИ” (Известия государственного электротехнического университета). Сер. Физика твёрдого тела и электроника. –2009. - № .1.– С. 9–13.



**Цитируемая литература:**

1. Ж. И. Алферов, В. М. Андреев В. И. Корольков Е.Л. Портной Д. Н. Третьяков. ФТП, 2, 1016; 1545 (1968).
2. А. Н. Пихтин, Оптическая и квантовая электроника. М., изд. Высшая школа. 2001 г - 573с; 2е изд-2009 г.
3. P. K. Chakraborty, L. J. Singh, and K. P. Ghatak. J. Appl. Phys., 95, 5311 (2004).
4. Y. Chang, C. H. Grein, and S. Sivananthan, M. E. Flatte, V. Nathan, and S. Guha. Appl. Phys. Lett., 89, 62109 (2006).
5. А. Н. Пихтин. ФТП, 11, 425 (1977).
6. S. Shokhovets, O. Ambacher, B. K. Meyer, G. Gobsch. Phys. Rev. B, 78, 35207 (2008).
7. L. H. Robins, J. T. Armstrong, R. B. Marinenko, A. J. Paul, and J. G. Pellegrino. J. Appl. Phys., 93, 3747 (2003).

Лицензия ЛР      №      от

---

Подписано в печать      Объем. печ. л. 1,0

Тираж 100 экз. Заказ №

Издательско-полиграфический центр СПбГЭТУ (ЛЭТИ)

---

197376, Санкт-Петербург, ул. Проф. Попова, 5.