

# Fe kaip nespindulinės rekombinacijos GaN šaltinis

## Fe as a source of efficient non-radiative recombination in GaN

Audrius Alkauskas<sup>1</sup>, Darshana Wickramaratne<sup>2</sup>, Jimmy-Xuan Shen<sup>2</sup>, Cyrus E. Dreyer<sup>2,3</sup>, Manuel Engel<sup>4</sup>, Martijn Marsman<sup>4</sup>, Georg Kresse<sup>4</sup>, Saulius Marcinkevičius<sup>5</sup>, Chris G. Van de Walle<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio 3, Vilnius, Lithuania

<sup>2</sup>Materials Department, University of California, Santa Barbara, California, USA

<sup>3</sup>Department of Physics and Astronomy, Rutgers University, Piscataway, New Jersey, USA

<sup>4</sup>Faculty of Physics, Computational Materials Physics, University of Vienna, Vienna, Austria

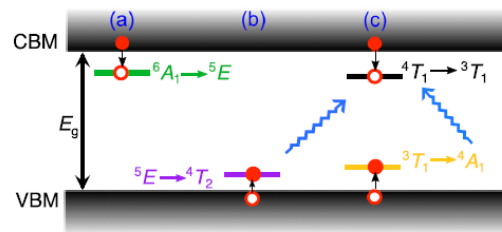
<sup>5</sup>Department of Materials and Nano Physics, KTH Royal Institute of Technology, Kista, Sweden

[audrius.alkauskas@ftmc.lt](mailto:audrius.alkauskas@ftmc.lt)

Puslaidininkiniai šviestukai (šviesos diodai) yra iš principo patys efektyviausi šviesos šaltiniai. GaN pagrindu pagaminti InGaN/GaN ir AlGaIn/GaN diodai yra kol kas vieninteliai, veikiantys mėlynojoje ir ultravioletinėje spektro dalyse. Žinoma, kad prie didelių sužadavimo intensyvumų (srovių) šviestukų efektyvumą riboja Auger rekombinacija ir krūvininkų nuotekis iš aktyviosios srities. Prie mažų sužadimų šviestukų efektyvumą riboja rekombinacija per gilius lygmenis – taip vadinama Shockley-Read-Hall (SRH) rekombinacija.

Bendra SRH rekombinacijos teorija žinoma daug metų ir yra tvirtų įrodymų, jog ji svarbi nitriduose. Tačiau iki šiol neaišku, kokiuose konkrečiuose defektuose tokia rekombinacija yra galima GaN, puslaidininkyje su draustiniu energijos tarpu 3.5 eV. Kadangi optinių fononų energija GaN yra 0.091 eV, viename rekombinacijos procese turi dalyvauti bent 40 fononų – milžiniškas skaičius. Naudodami elektroninės struktūros skaičiavimus, paremtus tankio funkcionalo teorija, neseniai parodėme, kad plačiatarpiuose puslaidininkiuose labai efektyvus nespindulinės rekombinacijos mechanizmas per sužadintas defekto būsenas [1]. Šis mechanizmas pasireiškia, pvz., SRH rekombinacijoje per galio vakansijas ir galio vakansijos kompleksus InGaIn [1].

Dar įdomesnis SRH rekombinacijos mechanizmas atrastas pereinamųjų metalų centruose plačiatarpiuose puslaidininkiuose [2]. Vienas svarbus to pavyzdys – GaN:Fe [2]. Čia rekombinacija vyksta taip, jog ir elektronų, ir skylių pagavoje dalyvauja sužadintos defekto būsenos, o pastoviam režime pagrindinės būsenos praktiškai niekuomet nepasireiškia (1 pav.). Pasiūlytas mechanizmas paaiškina itin efektyvią nespindulinę rekombinaciją per Fe centrus GaN, o suskaičiuotieji elektronų ir skylių pagavos skerspjūviai puikiai dera su eksperimentu [3]. Pasiūlytasis mechanizmas yra bendas, ir turėtų galioti labai daugeliui pereinamųjų metalų centrų.



1 pav. Nespindulinės rekombinacijos GaN:F mechanizmas per sužadintas priemaišos būsenas.

*Reikšminiai žodžiai: puslaidininkiai, šviestukai, našumas, rekombinacija, nitridai.*

### Literatūra

- [1] A. Alkauskas, C. E. Dreyer, J. L. Lyons, and C. G. Van de Walle, Phys. Rev. B **93**, 201304 (2016)
- [2] D. Wickramaratne *et al.*, Appl. Phys. Lett. **109**, 162107 (2016).
- [3] T. K. Uzdavinys, S. Marcinkevičius, J. H. Leach, K. R. Evans, and D. C. Look, J. Appl. Phys. **119**, 215706 (2016).