

Электронная структура и эффективные массы носителей заряда в кубических системах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x = 0.25, 0.5, 0.75$)

© В.В. Илясов[¶], И.В. Ершов, Т.П. Жданова

Донской государственный технический университет,
344000 Ростов-на-Дону, Россия

(Получена 20 февраля 2014 г. Принята к печати 18 марта 2014 г.)

Зонная структура тройных кубических соединений III-нитридов $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x = 0.25, 0.5, 0.75$) рассчитана в рамках теории функционала плотности с использованием приближения псевдопотенциала. В кубических системах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ впервые обнаружен эффект большего (на 20–30%) переноса заряда от атомов металла к азоту в пересчете на связь In–N, чем на связь Ga–N, природа которого обусловлена различием в их электроотрицательности, а также в структурной релаксации длин связей. Впервые показано, что в системах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ существуют как легкие $[(0.04–0.12)m_0]$, так и тяжелые $[(0.72–0.97)m_0]$ дырки, а эффективные массы электронов лежат в диапазоне $(0.04–0.13)m_0$. Впервые показано, что в системе $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ с большим содержанием индия подвижность носителей заряда возрастает на порядок по сравнению с бинарным кристаллом GaN.

1. Введение

Полупроводниковые тройные соединения III-нитридов $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ являются наиболее перспективными материалами в оптоэлектронике для получения голубых и зеленых светоизлучающих диодов, которые используются для высокоплотной оптической записи информации и устройств высокой мощности, в частности голубых лазеров. Отличительной чертой данных устройств является способность функционировать в широком интервале температур [1]. Варьируя молярное содержание индия в металлической подрешетке GaN в широких пределах, можно обеспечить управление фундаментальной характеристикой материала — шириной запрещенной зоны в интервале от 0.61 эВ (*c*-InN) [2] до 3.2 эВ (*c*-GaN) [3], что открывает возможность их применения для различных областей спектра [4,5]. Наибольший интерес для области видимого и ближнего ультрафиолета представляют прямозонные полупроводниковые материалы на основе тройных соединений $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($0.5 < x < 1$). Системы InN–GaN высокого качества с кубической структурой на буферном слое *c*-GaN могут быть получены методами газовой фазной эпитаксии из металлоорганических соединений (MOCVD) [3,5]. Однако эти тройные системы $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($0.5 < x < 1$) еще недостаточно изучены, по сравнению с другими нитридами III группы, из-за трудностей, связанных с выращиванием этих структур [6].

В последние годы системы $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ привлекают повышенное внимание в связи с идеей использовать спиновые степени свободы для сохранения и передачи информации [7]. В частности, для структур металл–диэлектрик–полупроводник (МДП) имеет место наличие тока утечки на границе диэлектрик/полупроводник [8]. Инжекция поляризованных по спину электронов в диэлектрик осуществляется туннельным механизмом Фаулера–Нордгейма [8]. Величина туннельного инжекционного тока экспоненциально зависит

от величин электронных m_e и дырочных m_h эффективных масс в полупроводниковых материалах [8–11]. Для этих материалов наиболее важными являются их транспортные свойства, характеризующиеся подвижностью и концентрацией носителей. В кубическом кристалле *c*-GaN подвижности электронов и дырок не превышают $5 \cdot 10^3 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ и $350 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ соответственно [12]. Эффективная масса электронов в GaN оценивается величиной $m_e = 0.19m_0$ [12–14]. Подвижности электронов в двумерном случае квантовых ям типа GaN/AlGaN ($\mu_e \approx 10.35 \cdot 10^3 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$) [15,16] и GaAs/AlGaAs ($7.5 \cdot 10^4 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$) [17] оказываются выше, чем в объемных слоях GaN.

В кубических кристаллах *c*-InN электронные m_e и дырочные m_h эффективные массы соответственно равны $m_e = 0.07m_0$ и $m_h = 0.1–1.26m_0$ [18,19]. Экспериментальное значение подвижности электронов в образцах *c*-InN толщиной 310 нм составило $\mu_e \approx 1.1 \cdot 10^3 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ [20]. Однако данные об эффективных массах носителей заряда в тройных кубических соединениях $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ в литературе отсутствуют.

Следует отметить, что в настоящее время не существует достаточно полного представления о транспортных свойствах в кубических тройных соединениях $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ с большим содержанием индия. Задачей настоящей работы является теоретическое изучение в рамках теории функционала плотности электронной структуры, эффективных зарядов и компонент тензора эффективных масс носителей заряда в прямозонных кубических полупроводниках $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ с большим содержанием индия.

2. Модель и методы расчета

В расчетах принималось, что кристаллическая структура систем $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ имеет кубический сфалеритоподобный тип, ее пространственная группа $F\bar{4}3m$. Координационными полиэдрами (КП) атомов In, Ga и N

[¶] E-mail: viily@mail.ru

Таблица 1. Структурные параметры, эффективный заряд Q_a на атомах и перенос заряда Δq (на связь) в кубических системах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

Фаза	Параметр ячейки, Å		Эффективный заряд Q_a, e			Перенос заряда на связь $\Delta q, e$	
			Ga	In	N	Ga–N	In–N
GaN	4.510	4.49 [21]	0.805	–	–0.785	0.201	–
$\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$	4.595	4.59 [21]	0.774	0.959	–0.797	0.194	0.230
$\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$	4.706	4.72 [21]	0.741	0.926	–0.807	0.183	0.229
$\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$	4.787	4.83 [21]	0.709	0.893	–0.823	0.177	0.226
InN	4.910	4.98 [21]	–	0.859	–0.834	–	0.210

являются тетраэдры $[\text{MeN}_4]$. Межатомные расстояния: $\text{Ga–N} = \text{In–N} = a\sqrt{3}/4$, где a — параметр решетки. Для моделирования системы $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x = 0.25, 0.5, 0.75$) мы использовали кубическую суперъячейку с восемью базисными атомами. В данной работе был проведен самосогласованный расчет равновесной геометрии. Структурные параметры ячеек приведены в табл. 1.

Зонные расчеты электронной структуры систем $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$) выполнены методом псевдопотенциала (программный пакет Quantum-Espresso 4.0 [22]) в рамках теории функционала плотности. В расчете использовались следующие электронные конфигурации: для атомов In — $[\text{Kr}] 4d^{10}5s^25p^1$, для атомов Ga — $[\text{Ar}] 3d^{10}4s^24p^1$, для атомов N — $[\text{He}] 2s^22p^3$. Для атомов In, Ga и N электроны в состояниях $4d^{10}5s^25p^1$, $3d^{10}4s^24p^1$ и $2s^22p^3$ соответственно относились к валентным оболочкам, электроны в полностью заполненных оболочках $[\text{Kr}]$, $[\text{Ar}]$ и $[\text{He}]$ относились к остову. Влияние остовных электронов и ионов учитывалось путем использования ультрамягких псевдопотенциалов с нелинейной корректировкой сердцевин для учета обмена с остовом. Электронная обменно-корреляционная энергия описывалась в рамках обобщенной градиентной аппроксимации с использованием выражения в форме PBE (Perdew–Burke–Ernzerhof) [23] для соответствующего функционала. Для разложения электронных волновых функций по плоским волнам была выбрана энергия обрезания, равная 408 эВ, а для компенсирующих присоединенных зарядов соответственно 2400 эВ. Для процедуры интегрирования в обратном пространстве была сгенерирована сетка специальных k -точек с размерностью $6 \times 6 \times 6$, что соответствовало от 20 до 52 неэквивалентным векторам в неприводимой части кубической зоны Бриллюэна. Итерационный процесс самосогласования продолжался до тех пор, пока разность значений полной энергии ячейки не превышала 10^{-5} Ry.

3. Результаты и обсуждение

Зонная структура рассчитана в равновесной геометрии как для систем $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x = 0.25, 0.5, 0.75$), так и для бинарных кубических кристаллов InN и GaN. Результаты расчета для бинарных кристаллов InN и GaN

находятся в хорошем согласии с данными работы [24]. С увеличением молярного содержания атомов индия в системах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ электронная структура кубического GaN испытывает значительные изменения как в полосе заполненных, так и свободных электронных состояний. Следует отметить, что зонная структура $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x = 0.25, 0.5, 0.75$) демонстрирует наличие запрещенных щелей в спектре парциальных DOS валентных электронов для атомов индия, галлия и азота (рис. 1). Наблюдается также возникновение свободных локальных состояний In5s- и Ga4s-симметрии выше уровня Ферми (см. рис. 1 и 2), которые можно трактовать как формирование донорных уровней. Подобных локализованных свободных электронных состояний в бинарном c -GaN нами не установлено.

Для системы $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ характерно частичное снятие вырождения p -орбиталей валентной зоны в точке Γ по сравнению с бинарным кристаллом GaN [24]. Данное вырождение полностью снимается при равных содержаниях атомов индия и галлия в системе $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ (см. рис. 1, *b*). Однако вырождение практически не снимается для вершины валентной зоны во всех трех системах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x = 0.25, 0.5, 0.75$), что обеспечивает возможность существования в точке Γ тяжелых и легких дырок. Как показали наши расчеты зонной структуры для бинарного кубического кристалла c -InN, трехкратное вырождение p -орбиталей в точке Γ понижается до двукратного, что приводит к исчезновению легких дырок. Дно зоны проводимости образовано антисвязывающим s -уровнем с практически равными вкладами s -состояний атомов индия, галлия и азота. При переходе от GaN к InN этот уровень вытягивается в направлении вершины валентной полосы, уменьшая ширину запрещенной зоны. Вблизи энергии -14 эВ преобладают две сильно локализованные d -полосы Ga и In, а в интервале энергий $(-12) - (-14)$ эВ определяющими являются s -состояния азота.

Парциальные плотности электронных состояний в системе $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$, приведенные на рис. 2, иллюстрируют возникновение новых особенностей в электронном спектре в сравнении с DOS бинарного c -GaN [25]. Наблюдается значительная перестройка электронной структуры, обусловленная взаимодействием In4d- и Ga3d-орбиталей с $2p$ -орбиталями азота, что приводит к изменению их

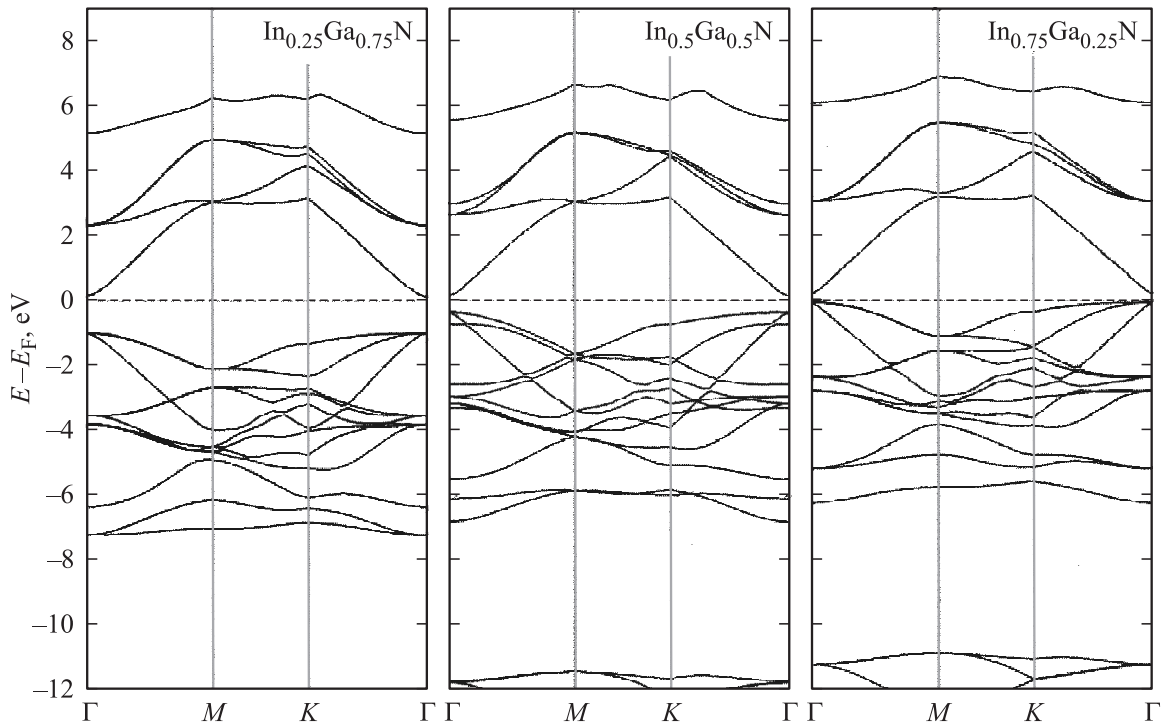


Рис. 1. Зонная структура тройных кубических соединений $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$, $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ и $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$. За начало отсчета энергий выбран уровень Ферми.

электронных и транспортных свойств. Анализ электронной энергетической структуры системы $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ при значительных молярных содержаниях атомов In показывает, что полосы заполненных и свободных состояний электронов сдвигаются в высокоэнергетическую область более чем на 1.0 эВ относительно системы $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$.

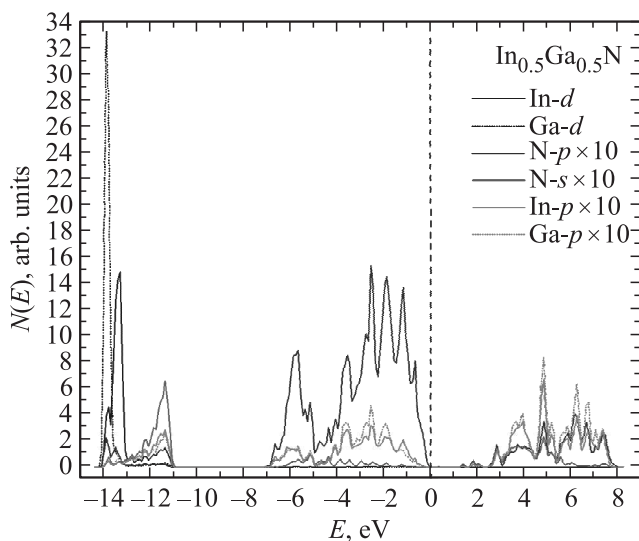


Рис. 2. Парциальные спиновые плотности электронных состояний тройного соединения $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$, $1/\text{эВ} \cdot \text{атом}$. За начало отсчета энергий выбран уровень Ферми.

Таким образом установлено, что для кубических тройных соединений $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x = 0.25, 0.5, 0.75$) характерным является образование валентной зоны за счет дисперсионных кривых $E(k)$, расположенных в интервале энергий $-14.0-0 \text{ eV}$ и расщепленных на четыре полосы А, В, С и D. Полосы А и В в системе $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ образованы в основном состояниями $N2p$ -электронов (с незначительной примесью p -состояний Ga и In) и лежат в интервале значений энергии $-5.0-0 \text{ eV}$ и $(-7.0)-(-5.0) \text{ eV}$ соответственно. Расщепление по энергии между полосами В и С составляет $\Delta \approx 4 \text{ эВ}$. В интервале энергий $(-12.5)-(-11.0) \text{ эВ}$ (зона С) расположены преимущественно электронные $N2s$ - и частично $\text{In}4d$ -орбитали в состоянии sd -гибридизации. В интервале энергий $(-14.2)-(-12.5) \text{ эВ}$ (зона D) расположены преимущественно электронные $\text{Ga}3d$ - и $\text{In}4d$ -орбитали в состоянии pd -гибридизации.

Анализ заселенности по Левдину [26] позволяет определить эффективные заряды Q_a на атомах Ga, In и N для кубических кристаллов GaN и InN и их тройных соединениях $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (см. табл. 1). В таблице также представлены полученные нами данные о переносе заряда от атомов металла азоту в пересчете на связь Ga-N и In-N. Рассчитанный перенос заряда на связь Ga-N и In-N в ряду $\text{GaN} \rightarrow \text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x = 0.25, 0.5, 0.75$) убывает на 9–14% и составляет величину $\Delta q_{\text{Ga-N}} \approx 0.18e$ и $\Delta q_{\text{In-N}} \approx 0.23e$ для системы с большим содержанием ($x = 0.75$) индия. Впервые в кубических системах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x = 0.25, 0.5, 0.75$) обнаружен

эффект большего (на 20–30%) переноса заряда на связь In-N, чем на связь Ga-N, природа подобного изменения плотности заряда вдоль рассматриваемых связей может быть обусловлена различием в их электроотрицательности. В результате должен происходить перенос заряда от связи Ga-N на связь In-N. Анализ данных в табл. 1 позволяет предположить, что в системах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x = 0.25, 0.5, 0.75$) с кубической кристаллографической модификацией будет превалировать механизм переноса заряда со связи Ga-N на связь In-N, что обусловлено различием электроотрицательностей и возможной структурной релаксацией длин связей при стабилизации системы.

Расчеты поверхности постоянной энергии в зоне Бриллюэна (ЗБ) позволяют указать дополнительно ряд отличий для тройных соединений $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Поверхность постоянной энергии для электронов в зоне Бриллюэна для системы $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ имеет форму сферы с небольшой приплюснутостью параллельно граням ЗБ, центр которой совпадает с центром зоны Бриллюэна (точка Γ). Дно зоны проводимости образуют антисвязывающие s -состояния Ga и In. Из такой формы поверхности, в частности, следует, что значения эффективных масс электронов во всех направлениях будут одинаковыми. Для дырок существуют сразу три поверхности постоянной энергии: одна для легких и две для тяжелых. Все поверхности образованы состояниями p -типа, вырожденными в точке Γ зоны Бриллюэна. Для легких дырок поверхность постоянной энергии близка к сферической и слегка вытянута в направлениях $[100]$, $[010]$, $[001]$. Две зоны для тяжелых дырок имеют приблизительно одинаковую ширину и в некоторых направлениях полностью вырождены, поэтому поверхности постоянных энергий для них немного схожи и обладают ярко выраженной кубической симметрией.

Количественные оценки компонент тензоров эффективных масс электронов и дырок нами определены, аналогично работе [27], из соотношения

$$\frac{1}{m^*(k)_y} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}, \quad (1)$$

где m^* — эффективная масса носителя, k — волновой вектор, \hbar — постоянная Планка. В табл. 2 приведены значения эффективных масс для электронов и дырок в кубических кристаллах GaN и InN и в тройных соединениях $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Сопоставление их с экспериментом и другими оценками позволяет отметить, что эффективные массы электронов для направлений Γ -X в зоне Бриллюэна в ряду $\text{GaN} \rightarrow \text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x = 0.25, 0.5, 0.75$) $\rightarrow \text{InN}$ лежат в диапазоне $m_e \sim (0.039-0.19)m_0$ и являются типичными для таких полупроводников, как AlN, GaN, InN и GaAs [13,14,28]. Следует отметить, что полученные значения эффективных масс электронов $m_e \approx 0.040 m_0$ в тройном соединении с большим содержанием индия $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ оказываются в 4.7 раза меньше, чем в бинарном кристалле GaN. Компоненты тензора эффек-

Таблица 2. Значения компонент тензора эффективных масс (в единицах массы электронов) в кубических кристаллах Ga, InN и $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

	Эффективные массы			
	электрона	дырки (Γ -M)		
		M_e^*	$m_{lh_1}^*$	$M_{hh_1}^*$
c-GaN	0.19 0.195 [13] 0.2 [14]	0.19	0.83	0.83
$\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$	0.13	0.12	0.72	0.72
$\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$	0.075	0.075	0.79	0.79
$\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$	0.040	0.042	0.97	0.97
c-InN	0.039 0.066 [19] 0.11 [13] 0.1 [7]	— 0.16 [18] 0.100 [19]	0.85 0.83 [18] 1.262 [19]	0.85

тивных масс „легких“ и „тяжелых“ дырок для ряда $\text{GaN} \rightarrow \text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x = 0.25, 0.5, 0.75$) $\rightarrow \text{InN}$ лежат в диапазонах $(0.04-0.19)m_0$ и $(0.72-0.97)m_0$ соответственно. Отметим, что эффективные массы „тяжелых“ дырок одинаковы для каждого состава рассмотренного ряда.

Данные результаты (см. табл. 2) позволяют предположить, что подвижность электронов в сплаве с большим содержанием индия $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ будет выше, чем подвижность дырок. Приближенная оценка компонент тензора подвижности носителей μ может быть выполнена, аналогично работе [29], из соотношения

$$\mu \approx e\tau/m^*, \quad (2)$$

где τ — время релаксации в системе. Расчет времени релаксации производился на основе экспериментальных параметров для бинарных кристаллов GaN ($m_e \approx 0.195m_0$ [11]; $\mu_e \approx 500 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ (при 100 К) [15]) и InN ($m_e \approx 0.11m_0$ [13]; $\mu_e \approx 5100 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ (при 150 К) [30]). Для тройных соединений $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x = 0.25, 0.5, 0.75$) в величину времени релаксации τ вносилась поправка, обусловленная существующим градиентом значений $\nabla\tau \approx 0.219 \cdot 10^{-15} \text{ с}$ между системами GaN и InN.

Расчеты показали, что в тройном соединении $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ подвижность электронов и „легких“ дырок составила величину $\mu_e \approx 11\,130 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ и $\mu_{lh} \approx 10\,600 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ соответственно, что более чем в 20 раз превышает подвижность данных носителей в бинарном GaN. Отметим, что подвижность электронов в системе $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ близка к экспериментальным значениям подвижности двумерных электронов $\mu_e \approx 10\,350 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ (при $T = 4 \text{ К}$) в квантовой яме GaN/AlGaIn [16]. Подвижность „тяжелых“ дырок

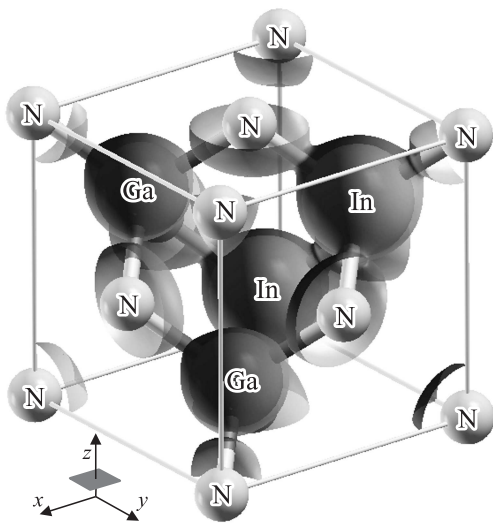


Рис. 3. Изоэлектронные ($\rho = 0.1e/A^3$) поверхности для тройного соединения $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$, рассчитанные на основе теории функционала электронной плотности с использованием приближения псевдопотенциала.

$\mu_{hh} \approx 460 \text{ cm}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ в системе $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ оказалась близкой к экспериментальным значениям подвижности дырок в кристалле GaN $\mu_h \approx 350 \text{ cm}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ [12]. Отсюда можно сделать вывод о том, что при увеличении содержания индия в тройных соединениях $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ подвижность всех носителей возрастает.

На рис. 3 представлена поверхность постоянной плотности заряда $\rho = 0.1e/A^3$ для системы $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$, из вида которой можно сделать некоторые обобщения о характере межатомных взаимодействий. Следует отметить характер распределения плотности заряда между атомами Ga-N и In-N. В частности, плотность заряда в пространстве между атомами In и N выше, чем между атомами Ga и N, что может качественно характеризовать связь In и N как более ковалентную, что сопровождается переносом заряда со связи Ga-N на связь In-N. Данное утверждение согласуется с выполненными нами ранее оценками переноса в системах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Можно видеть, что вдоль линий Ga-N и In-N преобладает ковалентный тип связи, в частности, локализация электронной плотности на In-N связи выражена в большей степени, что указывает на образование гибридных орбиталей $\text{In}4d\text{-N}2p$ и $\text{Ga}3d\text{-N}2p$. Связи между атомами металлической подрешетки имеют металлический тип, тогда как связи между атомами Ga и In имеют направленный характер, формируемый с участием $\text{In}2p\text{-Ga}2p$ -состояний в энергетическом интервале $-7.0\text{--}0$ эВ. Анализ электронных энергетических спектров, имеющих резонансный характер, показывает, что также возможно образование локализованных гибридных орбиталей с участием $\text{In}5s\text{-N}2p$ - и $\text{Ga}4s\text{-N}2p$ -состояний электронов в энергетических интервалах $-14.2\text{--}11.0$ и $-7.0\text{--}0$ эВ.

4. Заключение

Для кубических тройных соединений нитридов III группы $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x = 0.25, 0.5, 0.75$) выполнены самосогласованные расчеты полной энергии на основе теории функционала электронной плотности с использованием приближения псевдопотенциала (код Quantum-Espresso). В рамках обобщенной градиентной аппроксимации для обменно-корреляционной энергии использованы функционалы в форме PBE. Для системы $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ проведен анализ транспортных свойств, полученных в рамках теории функционала плотности для всего диапазона изменения молярного содержания индия.

В кубических системах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ впервые обнаружен эффект значительно большего переноса заряда (на 20–30%) от атомов металла к азоту в пересчете на связь In-N, чем на связь Ga-N. Природа данного эффекта обусловлена как различием в их электроотрицательности, так и структурной релаксацией длин связей.

На основе расчета и анализа топологии поверхности постоянной энергии в зоне Бриллюэна для $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ установлено, что значения компонент тензора эффективных масс электронов во всех направлениях будут одинаковыми. Эффективная масса „легких“ дырок также практически одинакова для всех направлений в зоне Бриллюэна, кроме направлений [100], [010], [001], и оказывается в 1.3 раза выше, чем для электронов. Две зоны для „тяжелых“ дырок имеют приблизительно одинаковую ширину и в некоторых направлениях полностью вырождены, поэтому поверхности постоянных энергий для них схожи и обладают ярко выраженной кубической симметрией. Установлено, что в тройных соединениях с большим содержанием индия $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ подвижности электронов, „легких“ и „тяжелых“ дырок составили величины $\mu_e \approx 11\,130 \text{ cm}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$, $\mu_{lh} \approx 10\,600 \text{ cm}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ и $\mu_{hh} \approx 460 \text{ cm}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ соответственно. Таким образом, обогащение бинарного кристалла GaN индием приводит к возрастанию более чем в 20 раз (для $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$) подвижности электронов и „легких“ дырок, в то время как подвижность „тяжелых“ дырок возрастает незначительно и близка к экспериментальному значению $\mu_h \approx 350 \text{ cm}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ [12].

Список литературы

- [1] D.J. As. *Microelectronics*, **40**, 204 (2009).
- [2] J. Schörmann, D.J. As, K. Lischka, P. Schley, R. Goldhahn, S.F. Li, W. Löffler, M. Hetterich, H. Kalt. *Appl. Phys. Lett.* **89**, 261 903 (2006).
- [3] J.B. Li, Hui Yang, L.X. Zheng, D.P. Xu, Y.T. Wang. *MRS Internet J. Nitride Semicond. Res.*, **4S1**, G3.25 (1999).
- [4] В.В. Криволапчук, В.В. Лундин, М.М. Мездрогина. *ФТТ*, **47** (7), 1338 (2005).
- [5] И.П. Сошников, В.В. Лундин, А.С. Усиков, И.П. Калмыков, Н.Н. Леденцов, A. Rosenauer, B. Neubauer, D. Geethsen. *ФТП*, **34** (6), 647 (2000).

- [6] V.Yu. Davydov, A.A. Klochikhin, R.P. Seisyan, V.V. Emtsev, S.V. Ivanov, F. Bechstedt, J. Furthmuller, H. Narima, A.V. Mudryi, J. Aderhold, O. Semchinova, J. Graul. *Phys. Status Solidi B*, **229** (3), R1-R3 (2002).
- [7] А.И. Дмитриев, Р.Б. Моргунов, С.В. Зайцев. *ЖЭТФ*, **139**, 367 (2011).
- [8] А.В. Шапошников, Д.В. Гриценко, И.П. Петренко, О.П. Пчеляков, В.А. Гриценко, С.Б. Эренбург, Н.В. Бауск, А.М. Бадалян, Ю.В. Шубин, Т.П. Смирнова, Х. Вонг, Ч.В. Ким. *ЖЭТФ*, **129**, 914 (2006).
- [9] С.Н. Гриняев, А.Н. Разжувалов. *ФТТ*, **43**, 529 (2001).
- [10] В.С. Lee. *J. Korean Phys. Soc.*, **35**, 516 (1999).
- [11] В.М. Михеев. *ФТТ*, **43**, 414 (2001).
- [12] D. Gaskill, L. Rowland, K. Doverspike. *Electrical transport properties of AlN, GaN and Al-GaN*. In: *Properties of group III nitrides*, ed. by J. Edgar (1995). EMIS Datareviews series; No 11.
- [13] M. Farahmand, C. Garetto, E. Bellotti. *IEEE Tran. Electron. Dev.*, **48**, 535 (2001).
- [14] S.K. O'Leary, B.R. Foutz, M.S. Shur, L.F. Eastman. *J. Appl. Phys.*, **85**, 7727 (1999).
- [15] Z. Dziuba, J. Antoszewski, J. Dell, L. Faraone, P. Kozodoy, S. Keller, B. Keller, S. DenBaars, U. Mishra. *J. Appl. Phys.*, **82**, 2996 (1997).
- [16] R. Gaska, J. Yang, A. Osinsky, Q. Chen, K.M. Asif, A. Orlov, G. Snider, M. Shur. *J. Appl. Phys.*, **77**, 770 (1998).
- [17] А.В. Антонов, В.И. Гавриленко, Е.В. Демидов, С.В. Морозов, А.А. Дубинов, J. Lusakowski, W. Кнар, N. Дьяконова, E. Kaminska, A. Piotrowska, K. Golaszewska, M.S. Shur. *ФТТ*, **46**, 146 (2004).
- [18] I. Vurgaftman, J.R. Meyer. *J. Appl. Phys.*, **94**, 3675 (2003).
- [19] D. Fritsch, H. Schmidt, M. Grundmann. *Phys. Rev. B*, **69**, 165 204 (2004).
- [20] P.D.C. King, T.D. Veal, P.H. Jefferson, C.F. McConville, T. Wang, P.J. Parbrook, Hai Lu, W.J. Schaff. *Appl. Phys. Lett.*, **90**, 132 105 (2007).
- [21] A.J. Freeman, R. Asahi, A. Continenza, R. Wu. *Solid-state photoemission and related methods*, ed. by W. Shattke (Wiley-VCH, 2003).
- [22] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G.L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A.D. Corso, S. de Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, C. Gougoussis, A. Kokalj, M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, F. Mauri, R. Mazzarello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Sclauzero, A.P. Seitsonen, A. Smogunov, P. Umari, R.M. Wentzcovitch. *J. Phys.: Condens. Matter*, **21**, 395 502 (2009).
- [23] J.P. Perdew, S. Burke, M. Ernzerhof. *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 3865 (1996).
- [24] B. Daoudi, M. Sehil, A. Boukraa, H. Abid. *Int. J. Nanoelectron. Mater.*, **1**, 65 (2008).
- [25] В.В. Илясов, Т.П. Жданова, И.Я. Никифоров. *ФТТ*, **48** (4), 614 (2006).
- [26] P. Löwdin. *Adv. Quant. Chem.*, **5**, 185 (1970).
- [27] И.Р. Шейн, R. Wilks, A. Моewes, Э.З. Курмаев, Д.А. Зацепин, А.И. Кухаренко, С.О. Чолах. *ФТТ*, **50**, 594 (2006).
- [28] Landolt-Börnstein. *Numerical Data and Functional Relationship in Science and Technology*, ed. by O. Madelung (Springer Verlag, Berlin, 1987) New Series III, **22a**, 451.
- [29] С.И. Борисенко. *ФТП*, **37**, 588 (2003).
- [30] T.B. Fehlbeg. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **45**, L1090 (2006).

Редактор Т.А. Полянская

Electronic structure and effective masses of charge carriers in cubic $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x = 0.25, 0.5, 0.75$) systems

V.V. Ilyasov, I.V. Ershov, T.P. Zhdanova

Don state technical university,
344000 Rostov-on-Don, Russia

Abstract The electronic band structure of the system $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x = 0.25, 0.5, 0.75$) is calculated using density functional pseudopotential method. In cubic systems $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x = 0.25, 0.5, 0.75$) for the first time was observed the effect of higher (by 20–30%) charge transfer for In-N bond from metal atoms to the nitrogen in comparison with GaN bond that is due to the difference in electronegativity and the structural relaxation of bond length. In the system $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, the existence of light ($0.042\text{--}0.12m_0$) and heavy ($0.72\text{--}0.97m_0$) holes is shown for the first time. The effective masses of electrons in the system were found to be in the range ($0.040\text{--}0.13m_0$). It is shown that the mobility of charge carriers in the system $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ with high percentage of indium is by an order of magnitude greater than in the binary crystal GaN.