

窄带隙超晶格中载流子俄歇寿命和碰撞电离率的第一性原理研究*

孙伟峰[†] 李美成 赵连城

(哈尔滨工业大学材料科学与工程学院, 哈尔滨 150001)

(2009 年 11 月 18 日收到; 2009 年 12 月 22 日收到修改稿)

通过第一性原理的完整形式, 基于全势线性化增广平面波方法确定的精确能带结构和波函数, 推算了技术上极为重要的窄带隙半导体超晶格中载流子俄歇复合时间. 少数载流子的俄歇寿命由两种相关的方法来确定: 1) 由 Fermi-金规则直接估算, 2) 联系俄歇复合和其相反过程碰撞电离, 建立细致平衡公式, 在一个统一的结构中进行间接估算. 在 n 掺杂 HgTe/CdTe 和 InAs/In_xGa_{1-x}Sb 超晶格中, 由直接和间接的方法确定的寿命与一些实验结果相当一致. 这说明该计算模式可以作为一种精确的手段用于窄带隙超晶格材料的性能优化.

关键词: 第一性原理, 俄歇复合, 碰撞电离, 半导体超晶格

PACC: 7115A, 7115J, 7115M

近来, 运用全电子屏蔽-交换 (sX)^[1,2] 方法已经可以有效地进行第一性原理精确计算半导体的电子结构, 并且用全势线性化增广平面波 (sX-FLAPW) 方法^[3,4] 要比标准的局域密度近似 (LDA) 方法有明显的改进. 在这些不断进步的计算模拟的引导下, 半导体器件工程的研究已经从把材料性质看作设计限制因素的静态观点转变为将材料性质当作设计和优化参数的动态探查^[5]. 虽然这些计算模拟过程起了极其重要的作用, 但是, 由于人们缺少足够精确的预测能力, 载流子复合过程仍然还不能用于材料 (器件) 的设计和优化上. 对于很多光电器件来说, 少数载流子寿命是限制材料性能的关键参数. 无论在理论上还是从实际上, 俄歇和辐射复合 (AR 和 I-I) 过程都是限制载流子寿命的主要过程. 重掺杂或窄带隙半导体材料 (例如 InSb, 一种磁和红外探测器的基础材料) 中的少数载流子寿命主要由俄歇复合决定. 而在真正实现能带工程的半导体超晶格和多量子阱中, 通过调节多元参数来控制和优化能带结构, 从而抑制俄歇复合过程. 因此, 第一性原理确定俄歇复合时间是本文的中心.

在 n 掺杂的直接带隙半导体超晶格材料当中, 主导的俄歇过程是电子-电子-空穴 (AM-1) 复合过

程^[6]. 如图 1 (a) 所示, 在电子-电子-空穴复合过程中, 价带中的空穴与导带电子通过非辐射的方式复合, 将能量和动量传给第二个电子, 并保持能量和动量的守恒. 在由电子激起的相反过程——碰撞电离过程中, 如图 1 (b) 所示, 较高能量的电子使价带中的电子跃迁到导带, 产生一个自由电子-空穴对. 对于某些超晶格结构来说, 图 2 中 HH2 和 LH1 在 Γ 点的相对位置可能会相反.

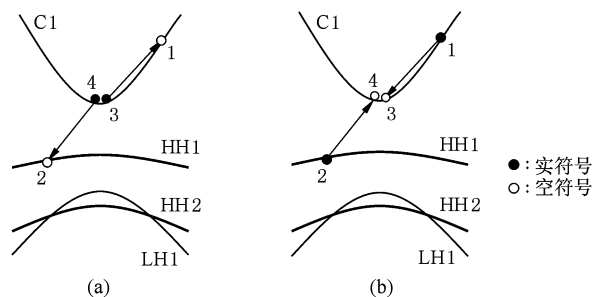


图 1 n 型材料中的两种相反过程示意图 (a) 俄歇复合过程, 使一个空穴消失; (b) 由电子激起的碰撞电离过程, 产生一对电子-空穴

本文把成功估算碰撞电离率的全第一性原理方法^[7] 应用于计算俄歇复合率. 对一些 n 掺杂的三类常规半导体 (normal semiconducting) [001] HgTe/

* 国家自然科学基金 (批准号: 50502014, 50972032), 国家高技术研究发展计划 (批准号: 2009AA03Z407) 资助的课题.

[†] E-mail: kingstel@163.com

CdTe 超晶格和二类 [001] InAs/In_xGa_{1-x}Sb 超晶格的计算结果与报道的实验和其他理论值相当一致. 而且, 由 Fermi-金规则计算的俄歇寿命与由计算的碰撞电离率通过细致平衡原理确定的俄歇寿命明显一致. 据我们所知, 这种密度泛函理论 (DFT)^[8,9] 研究第一次用从头计算 (*ab initio*) 的方法确定了半导体超晶格中载流子的俄歇寿命. 对于 HgTe/CdTe 和 InAs/In_xGa_{1-x}Sb 超晶格, 计算结果与实验的一致性说明这种方法能足够精确和可靠的正确推算俄歇系数随各物理参数变化的趋势. 因为这种方法是从头计算的全电子方法, 所以预计此方法可同样成功地用于其他窄带隙超晶格系统. 另外, 发现细致平衡方程能有效地确定俄歇复合率.

在独立粒子 (单电子) 方法中^[10,11], 对于某一状态为 (n_2, \mathbf{k}_2) 的空穴, 俄歇复合率的表达式为

$$r^{\text{AR}}(n_2, \mathbf{k}_2) = \frac{4\pi}{\hbar} \sum_{n_3, n_4} \int d^3 \mathbf{k}_3 \int |P|^2 f(E_{k_3}^{n_3}) f(E_{k_4}^{n_4}) g(E_{k_1}^{n_1}) \times \delta(E_{k_3}^{n_3} + E_{k_4}^{n_4} - E_{k_1}^{n_1} - E_{k_2}^{n_2}) d^3 \mathbf{k}_4, \quad (1)$$

总的俄歇复合率为

$$R^{\text{AR}} = \sum_{n_2} \int r^{\text{AR}}(n_2, \mathbf{k}_2) g(E_{k_2}^{n_2}) d^3 \mathbf{k}_2. \quad (2)$$

其中, n_i 是能带指数 ($i = 1, \dots, 7$), 对应于四个价带和三个导带. $\mathbf{k}_{1,3,4}$ 是全布里渊区 (BZ) 中的 \mathbf{k} 点. 在 BZ 上的多重积分是根据 Sano-Yoshii 方法^[12] 进行的, 在 HgTe/CdTe 和 InAs/In_xGa_{1-x}Sb 超晶格 (D_{2d} 和 C_{2v} 点群) 的 BZ 的不可约型区中分别采用 144 和 120 个 \mathbf{k} 点. 由于超晶格的倒易空间比体材料小得多, 这些数量的取点足够精确. 超晶格中较容易发生跃迁的状态簇集在垂直于界面的平面上, 这些随能带结构和电子分布显著变化^[13,14] 的“簇”的形成是因为超晶格能带结构中生长轴方向上的能量偏移 (energy dispersion) 较小. 对 \mathbf{k}_2 的加和在 BZ 的不可约型区中进行. f 表示费米-狄拉克占据概率, $g = 1 - f$. 矩阵元包括了直接项和交换项 (由终态交换作用的直接贡献得到), 表示为 $|P|^2 = (|P_D|^2 + |P_E|^2 + |P_D - P_E|^2) / 2$. 直接项表示为

$$P_D = \frac{4\pi e^2}{V_u} \sum_{G_0, G_U} \delta(\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 + \mathbf{G}_0) \times \frac{\beta_{n_3, k_3; n_1, k_1}(\mathbf{G}_U) \beta_{n_4, k_4; n_2, k_2}(\mathbf{G}_0 - \mathbf{G}_U)}{\varepsilon(q) (|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3 + \mathbf{G}_U|^2 + \lambda^2)}. \quad (3)$$

其中 e 表示电子电荷, V_u 是单胞的体积. 在能量本征值 (\mathbf{k} 矢量) 中, 能量 (动量) 守恒表现为 δ 函数.

$\beta_{nf, kf; ni, ki}(\mathbf{G})$ 为波函数重叠矩阵的傅里叶变换, 例如, $\beta_{nf, kf; ni, ki}(\mathbf{r}) = \psi_{nf, kf}^*(\mathbf{r}) \psi_{ni, ki}(\mathbf{r})$. 下标 $i(f)$ 表示始态 (终态); $q = |\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3 + \mathbf{G}_U|$ 是转换动量, \mathbf{G}_0 和 \mathbf{G}_U 是倒易晶格矢量. 导带和价带电子之间的相互作用由静态介电函数屏蔽库伦相互作用来描述^[15]. 导带载流子之间的相互作用通过德拜势进行模拟. 在德拜势中, 屏蔽长度的倒数表示为 $\lambda = (4\pi n^0 e^2 / k_B T)^{1/2}$, 其中, n^0 , T 和 k_B 分别是载流子浓度, 温度 (这里 $T = 77$ K) 和玻尔兹曼常数.

碰撞电离率的理论计算对所假定的能带结构非常敏感^[16]. 因此, 为了可信的再现实验的能带结构, 我们作了屏蔽-交换局域密度近似 (sX-LDA)^[17], 这与高精度的全电子势能线性化增广平面波 (FLAPW) 自洽方法相似^[17-19].

HgTe/CdTe 超晶格中的自旋-轨道耦合作用相对来说比较小, 在这里被忽略, 在其他文献中已有所报道^[20]. 在 $\mathbf{G}_U = 0$ 处的 Umklapp 过程全部被考虑在内; 在高级非常重要的 $\mathbf{G}_U \neq 0$ 项在这里并没有被考虑, 因为俄歇复合是一种阈限过程. 这里也没有包括声子辅助跃迁^[21,22] 和多体作用^[23,24]. 对于 InAs/In_xGa_{1-x}Sb 超晶格, 声子辅助俄歇复合率与直接俄歇复合率相比要小得多^[22]. 在这种近似下, 俄歇复合率总的误差为 20%—30%, 我们将在下面说明 DFT 带-带俄歇复合能够正确的描述随技术参数变化的物理趋势, 并且可以作为材料器件优化的精确手段.

俄歇寿命 τ_p 可以表示为^[25]

$$\frac{1}{\tau_p} = \frac{R^{\text{AR}}}{N_p^0}. \quad (4)$$

其中 N_p^0 是平衡时每个单胞中的少数载流子数量. 在图 2 中, 展现了计算的 τ_p 随载流子密度在对数-对数坐标中基本上成线性变化, 而图 2(b) 中的曲线斜率绝对值在高载流子浓度区域 ($> 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) 有所减小 (< 2), 这些与以前报道的 n 型窄带隙半导体 InGaAs^[26] 和 InAs/In_xGa_{1-x}Sb 超晶格^[11,14] 的情况相似.

俄歇系数 C_n 由下面的关系式来定义:

$$\frac{1}{\tau_p} = C_n (n^0)^2. \quad (5)$$

一般由实验测量几个相互竞争复合过程的总的寿命, 并对测量值的曲线拟合, 就可以确定部分复合寿命. 上面的抛物线关系是确定 C_n 的基础. 但是, Fermi 能级移动和 λ 的改变都会在方程 (1) 和 (2) 中

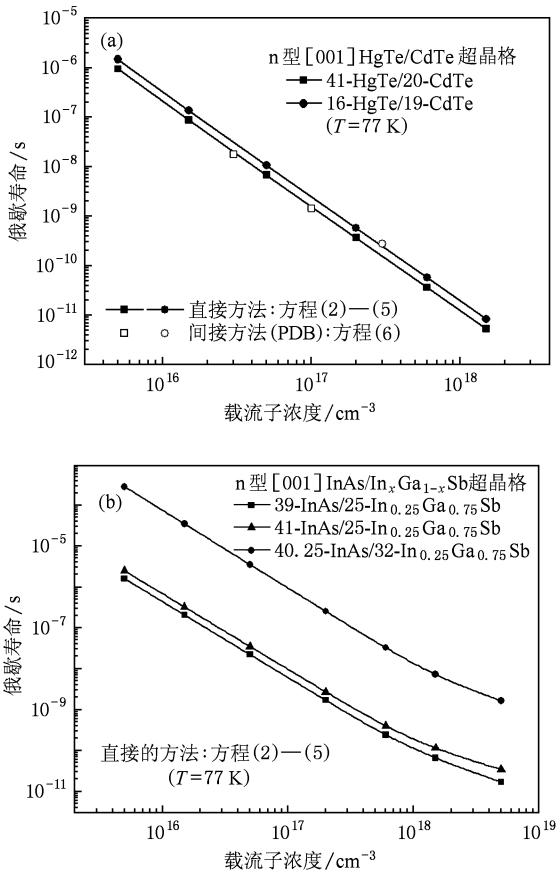


图2 计算得到的空穴俄歇寿命随载流子浓度的变化 (a) n型 [001] 41 Å-HgTe/20 Å-CdTe 和 16 Å-HgTe/19 Å-CdTe 超晶格 (带隙宽度分别为 0.150 和 0.365 eV); (b) n型 [001] 39 Å-InAs/25 Å-In_{0.25}Ga_{0.75}Sb, 41 Å-InAs/25 Å-In_{0.25}Ga_{0.75}Sb 和 40.25 Å-InAs/32 Å-In_{0.25}Ga_{0.75}Sb 超晶格 (带隙宽度分别为 0.140, 0.114 和 0.114 eV). (a) 中包括由直接 [实符号-方程 (2)–(5)] 和间接 [空符号-方程 (6)] 两种方法计算的结果

引入 C_n 随载流子密度的变化, 以至于 C_n 本身将会随着 n^0 而改变. 根据计算, 确实如此. 在 [001] HgTe/CdTe 超晶格中, 计算的 C_n 从 $n^0 \sim 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 的 $4.2(2.7) \times 10^{-26} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$ 增大到 $n^0 \sim 1.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 的 $9.3(5.9) \times 10^{-26} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$. 在表 1 中将这些计算结果与以前的理论和实验结果^[27–30] 进行比较. 对于 [001] InAs/In_xGa_{1-x}Sb 超晶格, C_n 随 n^0 有明显的变化, 从 $n^0 \sim 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 的 $25(16, 0.14) \times 10^{-27} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$ 减小到 $n^0 \sim 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 的 $2.4(1.7, 0.057) \times 10^{-27} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$. 同样, 在表 2 中将这此计算结果与以前的理论和实验结果^[11, 14, 31, 32] 进行比较. 通过对带隙宽度相似的 HgTe/CdTe 和 InAs/In_xGa_{1-x}Sb 超晶格的计算值进行比较, 发现 InAs/In_xGa_{1-x}Sb 超晶格中, 特别是对于一些优化了的超

晶格结构, C_n 有明显的减小, 说明在二类 InAs/In_xGa_{1-x}Sb 超晶格中, 俄歇复合受到更有效的抑制. 尽管已报道的 C_n 在很大的范围内变化, 但我们的 C_n 计算结果与大多数以前的实验值以及各种非简化模拟计算结果相当一致, 明确地证实了 DFT 能有力的在定性和定量上正确预测载流子俄歇复合随掺杂浓度, 组分, 超晶格结构参数等变化的物理趋势. 总之, 可以断定我们的计算结果证实了这里描述的计算方法的可靠性: 1) 精确的计算实验难以测量的俄歇复合寿命; 2) 反映了随材料物理参数的变化趋势, 可以用来指导材料和器件的设计; 3) 可以精确的描述其他窄带隙超晶格材料中的俄歇复合过程.

俄歇复合和碰撞电离是两个相反的微观过程, 由细致平衡原理相互联系, 类似于光的发射与吸收. 实际上在辐射 (非辐射) 过程中, 电子-空穴对的产生过程就是吸收 (碰撞电离), 初始物质是光子 (高能碰撞电子); 而与其相反的复合过程则是发射 (俄歇复合), 最终产生光子 (俄歇电子).

根据 Landsberg 的理论^[6], 俄歇复合时间 τ_p 的表达式为

$$\frac{1}{\tau_p} \sim \frac{1}{N_p^0} \sum_{n_1} \int \theta(n_1, \mathbf{k}_1) R^{l-1}(n_1, \mathbf{k}_1) f(n_1, \mathbf{k}_1) d^3 \mathbf{k}_1, \quad (6)$$

其中 $\theta(n_1, \mathbf{k}_1)$ 是考虑了由除状态 (n_1, \mathbf{k}_1) 意外发生过程的因子 (≤ 1), $R^{l-1}(n_1, \mathbf{k}_1)$ 为碰撞电离率. 这个最后的表达式表示的是非辐射的 Van-Roosbroeck-Shockley 关系^[33]. 在由复介电函数确定辐射复合寿命中, Van-Roosbroeck-Shockley 关系已经得到广泛的运用. 然而, 在介电函数的实验数据非常丰富和可靠的同时, 碰撞电离率的实验数据还不足以能够用方程 (6) 估算俄歇寿命 τ_p . 当前理论模式的用途在于它可以单从第一性原理, 或由 PDB 变元来计算俄歇复合和碰撞电离率. 在我们的理论模式当中, 关注的是两个互为相反的过程-俄歇复合和碰撞电离. 因此, PDB 保持 $\theta(n_1, \mathbf{k}_1) = 1$ (相当于 (n_1, \mathbf{k}_1) 态高能电子激发碰撞电离). 在图 2 中, 将方程 (6) 应用于计算的碰撞电离率^[7] 就推导出了俄歇寿命. 图 2 中的开符号表示与用直接方法 (参见方程 (1)) 的计算值极为相近的计算结果. 直接和间接计算之间获得了极好的一致性, 为两种方法的等同性和其中具体的数值程序提供了可信度.

表 1 n 型常规(normal) [001] HgTe/CdTe 超晶格的俄歇系数 (E_g 为带隙宽度)

E_g/meV	$L_1/\text{\AA}$	$L_2/\text{\AA}$	俄歇系数/(cm^6/s)	实验或理论方法
180	63	31	1.05×10^{-25} (200 K)	光电导衰减技术, GaAs 激光器, 3 ns 脉冲, CdZnTe 衬底 ^[27]
150	41	20	5.54×10^{-24} (300 K)	
363—366	16.15	19.34	6.80×10^{-26}	光电导衰减测试, GaAs/GaAlAs 激光器, GaAs 衬底, CdTe 缓冲层, 3 × 3 探测器阵列; ($T = 77$ K) ^[28]
64.8	52	51	1.33×10^{-26}	包络函数近似的 14 带 $\mathbf{K} \cdot \mathbf{p}$ 非抛物线能带结构, $\mathbf{K} \cdot \mathbf{p}$ 微扰屏蔽库伦作用矩阵元, 标准 Roosbroeck-Shockley 表达式, 包括 Umklapp 过程; ($T = 77$ K) ^[29]
64.8	52	51	4.0×10^{-25}	光电导衰减测试; ($T = 77$ K) ^[29]
165			2.78×10^{-25}	光电导衰减测试, AlGaAs 量子阱激光器, 数字示波器信号处理; ($T = 77$ K) ^[30]
150	41	20	$(4.2—9.3) \times 10^{-26}$	sX-LDA FLAPW; (n 型, $T = 77$ K)
365	16	19	$(2.7—5.9) \times 10^{-26}$	

表 2 [001] InAs/In_xGa_{1-x}Sb 超晶格的俄歇系数 (L_1 和 L_2 为 InAs 和 In_xGa_{1-x}Sb 的层厚)

x	$L_1/\text{\AA}$	$L_2/\text{\AA}$	俄歇系数/(cm^6/s)	实验或理论方法
0.25	41	25	$0.1 \sim 5.0 \times 10^{-26}$ (AM-1) $1.1 \sim 6.7 \times 10^{-28}$ (AM-7)	包络函数近似的 $\mathbf{K} \cdot \mathbf{p}$ 非抛物线能带结构和波函数, 一阶屏蔽库伦势矩阵元; (n 型或 p 型, $T = 77$ K) ^[14]
0.25	39	25	8.0×10^{-25} (AM-1 + AM-7)	20 带 $\mathbf{K} \cdot \mathbf{p}$ 能带结构, 屏蔽库伦势矩阵元, 费米函数积分; ($n = p$, $T = 300$ K) ^[31]
0.25	39	25	1.3×10^{-27} (AM-1 + AM-7)	光电导测量, 4.63 μm 横向双频激发 CO ₂ 激光, 150 ns 脉冲; ($n = p$, $T = 77$ K) ^[31]
0.25	39	25	$(7.5—10.7) \times 10^{-27}$ (77 K)	$\mathbf{K} \cdot \mathbf{p}$ 非抛物线能带结构, $\mathbf{K} \cdot \mathbf{p}$ 微扰屏蔽库伦作用矩阵元, \mathbf{G} 积分, 包括 Umklapp; 光电导测量; 时间分辨泵浦-探测测量 ^[11]
			带隙宽度 = 0.31 eV 2.9×10^{-27} (300 K)	
0.25	40.25	32	1.3×10^{-28} (100 K) (优化) 6.3×10^{-29} (77 K) (优化)	$\mathbf{K} \cdot \mathbf{p}$ 非抛物线能带结构, $\mathbf{K} \cdot \mathbf{p}$ 微扰屏蔽库伦作用矩阵元, \mathbf{G} 积分中忽略 Umklapp, 浅陷阱能级辅助俄歇复合; (n 型) ^[32]
0.25	39	25	$(2.4—25) \times 10^{-27}$	
0.25	41	25	$(1.7—16) \times 10^{-27}$	sX-LDA FLAPW; AM-1 (n 型, $T = 77$ K); 带隙宽度分别为 0.140, 0.114, 0.114 eV
0.25	40.25	32	$(5.7—14) \times 10^{-29}$ (优化)	

总之, 我们给出了完整第一性原理的理论模式, 用自洽屏蔽-交换 FLAPW 准粒子波函数和能带结构计算了窄带隙超晶格的俄歇复合时间. 将 PDB 应用到两个模拟过程(俄歇复合和碰撞电离)中, 从而对数值结果的精确程度进行检验. 由两种等同的

“直接”和“间接”方法确定的俄歇寿命非常一致. 对 HgTe/CdTe 和 InAs/In_xGa_{1-x}Sb 超晶格的计算结果与大多数精确的实验和理论数据符合得相当好, 说明该计算方法具有良好的可信度并为将来应用于其他半导体超晶格系统提供了有力的依据.

[1] Seidl A, Görling A, Vogl P, Majewski J A, Levy M 1996 *Phys. Rev. B* **53** 3764

[2] Sher A, Schilfgaarde M V, Berding M A, Krishnamurthy S, Chen A B 1999 *MRS Internet J. Nitride Semicond. Res.* **4S1** G5.1

[3] Wimmer E, Krakauer H, Weinert M, Freeman A J 1981 *Phys. Rev. B* **24** 864

[4] Jansen H J F, Freeman A J 1984 *Phys. Rev. B* **30** 561

[5] Franceschetti A, Zunger A 1999 *Nature (London)* **402** 60

[6] Landsberg P T 1991 *Recombination in Semiconductors*

(Cambridge: Cambridge University Press)

- [7] Picozzi S S, Asahi R, Geller C B, Continenza A, Freeman A J 2002 *Phys. Rev. B* **65** 113206
- [8] Zhao M W, Xia Y Y, Ma Y C, Ying M J, Liu X D, Liu P J, Mei L G 2002 *Chem. Phys. Lett.* **360** 436
- [9] Arbuznikov A V, Kaupp M 2003 *Chem. Phys. Lett.* **381** 495
- [10] Smith C, Abram R A, Burt M G 1985 *Superlattice. Microst.* **1** 119
- [11] Flatté M E, Grein C H, hasenberg T C, Anson S A, Jang D J, Olesberg J T 1999 *Phys. Rev. B* **59** 5745
- [12] Sano N, Yoshii A 1992 *Phys. Rev. B* **45** 4171
- [13] Williams C J, Corbin E, Jaros M, Herbert D C 1998 *Physica B* **254** 240
- [14] Grein C H, Young P M, Ehrenreich H 1992 *Appl. Phys. Lett.* **61** 2905
- [15] Cappellini G, Sole R D, Reining L, Bechstedt F 1993 *Phys. Rev. B* **47** 9892
- [16] Harrison D, Abram R A, Brand S 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 8178; 8186
- [17] Asahi R, Mannstadt W, Freeman A J 1999 *Phys. Rev. B* **59** 7486
- [18] Asahi R, Mannstadt W, Freeman A J 2000 *Phys. Rev. B* **62** 2552
- [19] Geller C B, Wolf W, Picozzi S, Continenza A, Asahi R, Mannstadt W, Freeman A J, Wimmer E 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 368
- [20] Harrison D, Abram R A, Brand S 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 8186
- [21] Polkovnikov A S, Zegrya G G 1998 *Phys. Rev. B* **58** 4039
- [22] Grein C H, Ehrenreich H 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 1075
- [23] Haug A 1988 *J. Phys. Chem. Solids* **49** 599
- [24] Hahn Y 1997 *Phys. Lett. A* **231** 82
- [25] Krishnamurthy S, Sher A, Chen A B 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 5540
- [26] Metzger W K, Wanlass M W, Ellingson R J, Ahrenkiel R K, Carapella J J 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 3272
- [27] Shin S H, Arias J M, Zandian M, Pasko J G, Bajaj J, DeWames R E 1992 *Appl. Phys. Lett.* **61** 1196
- [28] Qiu Y M, He L, Li J, Yuan S X 1993 *Appl. Phys. Lett.* **62** 1134
- [29] Grein C H, Jung H, Singh R, Flatté M E 2005 *J. Electron. Mater.* **34** 905
- [30] Reisinger A R, Harris K A, Myers T H, Yanka R W, Mohnkern L M, Hoffman C A 1992 *Appl. Phys. Lett.* **61** 699
- [31] Youngdale E R, Meyer J R, Hoffman C A, Bartoll F J, Grein C H, Young P M, Ehrenreich H, Miles R H, Chow D H 1994 *Appl. Phys. Lett.* **64** 3160
- [32] Grein C H, Young P M, Flatté M E, Ehrenreich H 1995 *J. Appl. Phys.* **78** 7143
- [33] Roosbroeck W V, Shockley W 1954 *Phys. Rev.* **94** 1558

First-principles investigation of carrier Auger lifetime and impact ionization rate in narrow-gap superlattices^{*}

Sun Wei-Feng[†] Li Mei-Cheng Zhao Lian-Cheng

(*Department of Information Material Science and Technology, School of Material Science and Engineering,
Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, PR China*)

(Received 18 November 2009; revised manuscript received 22 December 2009)

Abstract

We investigate theoretically the technologically essential Auger recombination lifetime in narrow-gap semiconductor superlattices by means of a completely first-principles formalism, based on accurate energy bands and wave functions provided by the full-potential linearized augmented plane wave scheme. The minority carrier Auger lifetimes are determined by two correlated approaches: (1) direct evaluation in Fermi's golden rule, and (2) indirect evaluation, based on a detailed balance formulation relating Auger recombination and its inverse process, impact ionization, in a unified framework. Lifetimes determined by the direct and indirect methods for n-doped HgTe/CdTe and InAs/In_xGa_{1-x}Sb superlattices exhibit excellent consistency with experimentally measured values. This justifies the computational formalism as a new sensitive tool in performance optimization of the synthetic narrow-gap semiconductor superlattice systems.

Keywords: first-principles, Auger recombination, impact ionization, semiconductor superlattice

PACC: 7115A, 7115J, 7115M

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 50502014, 50972032), the National High Technology Research and Development Program of China (Grant No. 2009AA03Z407).

[†] E-mail: kingstel@163.com