

Vilniaus universitetas
Fizikos fakultetas
Fotonikos ir nanotechnologijų institutas

Martynas Riauka

**SĄSAJOS TARP KRŪVININKŲ TRANSPORTO IR REKOMBINACIJOS
MODELIAVIMAS MONTE CARLO METODU**

Magistrantūros studijų baigiamasis darbas

Optoelektronikos medžiagų ir technologijų
studijų programa

Studentas

Martynas Riauka

Darbo vadovas

doc. Ramūnas Aleksiejūnas

Instituto atstovas

prof. Vincas Tamošiūnas

Vilnius 2020

TURINYS

TURINYS.....	1
ĮVADAS.....	2
1. Krūvininkų lokalizacija netvarkiose puslaidininkinėse medžiagose.....	4
2. Energijos būsenų tankis puslaidininkiuose.....	6
3. Krūvininkų pernašos mechanizmai puslaidininkiuose.....	8
3.1. Difuzija.....	8
3.2. Dreifas.....	9
3.3. Šuoliavimas per lokalizuotas būsenas.....	11
4. Struktūriniai defektai nitriduose.....	13
4.1. Dislokacijos.....	13
5. Krūvininkų rekombinacijos mechanizmai puslaidininkiuose.....	14
5.1. Shockley-Read-Hall rekombinacija.....	15
5.2. Spindulinė rekombinacija.....	16
5.3. Auger rekombinacija.....	16
6. Puslaidininkinių darinių tyrimai naudojant sužadavimo-zondavimo metodikas.....	17
6.1. Skirtuminio pralaidumo metodika.....	18
6.2. Šviesa indukuotų dinaminų gardelių metodika.....	19
7. Monte Carlo modeliavimo algoritmai.....	22
7.1. Klasikinis Monte Carlo algoritmas.....	22
7.2. Kinetinis Monte Carlo algoritmas.....	24
7.2.1. Kinetinis Monte Carlo algoritmas su atmetimu.....	24
7.2.2. Kinetinis Monte Carlo algoritmas be atmetimo.....	24
8. Modeliavimo rezultatų tikslumo įvertinimas.....	25
9. Netvarkaus 2D puslaidininkio modeliavimas MATLAB terpėje.....	27
Pagrindiniai rezultatai ir išvados.....	44
Santrauka anglų kalba / Summary.....	45
LITERATŪRA.....	47

IVADAS

Krūvininkų pernašos ir rekombinacijos procesų tyrimai netvarkiuose puslaidininkiniuose dariniuose yra aktuali šių dienų problema. Vienas iš tokių puslaidininkių pavyzdžių būtų III grupės elementų nitridiniai junginiai. Kadangi skirtingi nitridiniai puslaidininkiai pasižymi skirtingu draustinių energijų tarpu (nuo 0.7 eV indžio nitridui iki 6.2 eV aliuminio nitridui), tai nitridų inžinerija leidžia gaminti kelianarius nitridinius puslaidininkius, kuriuose varijuojant atitinkamų elementų kiekius galima jų draustinių energijų tarpą keisti plačiame diapazone [1].

Kadangi nitridiniai junginiai yra tiesiatarpiai puslaidininkiai, jie ypač tinkami kietakūnių apšvietimo šaltinių, tokių kaip šviestukai arba lazeriniai diodai, kūrimui. Dėl prieš tai minėtųjų savybių nitridiniai puslaidininkiai taip pat yra puikūs kandidatai panaudojimui saulės elementų sugeriančiuose sluoksniuose, nes varijuojamas draustinių energijų tarpas leidžia optimizuoti sugertį [2].

Didžiausia problema susijusi su nitridinių junginių inžinerija yra tinkamų auginimo padėklų trūkumas [3]. Geras padėklas puslaidininkinio sluoksnio auginimui būtų toks, kuris su puslaidininkiu yra suderintas gardelės konstantos, šiluminio plėtimosi, šiluminio laidumo ir kitais požiūriais. Deja, nitridiniams junginiams tokių padėklų nėra žinoma ir iki šiol yra naudojami padėklai, pasižymintys vienokiu ar kitokiu šių svarbių savybių neatitikimu. Dėl neatitikimo puslaidininkio gardelėje formuojasi įtempiai bei defektai ir nepaisant to, kad labai patobulėjo nitridinių puslaidininkių auginimo technologija, tačiau defektų tankis juose išlieka didelis.

Defektai kristalinėje puslaidininkio gardelėje yra didelė problema norint pagaminti našius šviesos šaltinius, nes defektai sukuria papildomus nespindulinės rekombinacijos kanalus. Šiais kanalais vietoje to, kad rekombinuotų spinduliniu būdu, fotogeneruoti krūvininkai rekombinuoja nespinduliniu būdu, todėl prietaiso našumas turėtų būti mažas. Nepaisant to, literatūroje žinoma atveju, kai buvo pagaminti GaN/InGaN kvantinių lakštų dariniai su vidiniu kvantiniu našumu iki 80%, o jų pagrindu pagaminti prietaisai pasiekė apie 50% išorinį kvantinį našumą [4], taip pat ir AlGaN kvantinių lakštų dariniai, spinduliuojantys sodrią mėlyną šviesą, su vidiniu kvantiniu našumu, artimu 70% [5,6].

Tad kyla klausimas, kaip tokios santykinai nekokybiškos medžiagos gali leisti pasiekti tokius aukštus kvantinius našumus. Manoma, kad taip yra dėl lokalizuotų būsenų, kurios atsiranda dėl erdviškai nehomogeniško puslaidininkio sudedamųjų komponentų pasiskirstymo, kas sukelia lokalias draustinių energijų tarpo variacijas [7]. Varijuojantis draustinių energijų tarpas sukuria spąstus krūvininkams, į kuriuos patekę, jie dėl energinio barjero nebegali taip lengvai judėti. Tokiu

būdu krūvininkai sunkiau pasiekia nespindulinės rekombinacijos centrus, todėl santykinai išauga spindulinės rekombinacijos tikimybė ir minėtųjų prietaisų našumas [8].

Kadangi lokalizuotų būsenų įtaka krūvininkų pernašai ir rekombinacijai dar nėra iki galo išsiaiškinta, yra sugalvota daugybė eksperimentinių ir modeliavimo metodų, kaip tai galima tirti. Vienas iš geriausiai žinomų netvarkių sistemų modeliavimo algoritmų yra Monte Carlo algoritmas, kuris leidžia, varijuojant sistemos parametrus, statistinių metodų pagalba gauti tikslų realių situacijų atkartojamumą [9]. Šiame darbe Monte Carlo metodas yra pritaikomas krūvininkų pernašai ir rekombinacijai tirti netvarkiamame apibendrintame (ne konkrečiame) puslaidininkyje, o darbo tikslas yra išsiaiškinti, kaip lokalizacijos efektai netvarkiamame puslaidininkyje keičia to puslaidininkio parametrus, tokius kaip vidinis kvantinis našumas, krūvininkų gyvavimo trukmė bei difuzijos nuotolis, bei suprasti, kaip pasikeičia defektų (konkrečiai - dislokacijų) įtaka puslaidininkyje, jame esant lokalizacijai, lyginant su atveju, kai lokalizacijos nėra.

1. Krūvininkų lokalizacija netvarkiose puslaidininkinėse medžiagose

Krūvininkų lokalizacija yra reiškinys, atsirandantis netvarkiose puslaidininkinėse sistemose. Vienas iš tokios sistemos pavyzdžių - kelianariai puslaidininkiniai dariniai. Juose lokalizacija pasireiškia dėl erdvinių sudėties nehomogeniškumų. Yra kelios priežastys, kodėl tokie nehomogeniškumai atsiranda.

Vienas iš nehomogeniškumo šaltinių yra atsitiktinio pobūdžio tvarka lydinyje. Pavyzdžiui, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ atveju, yra tikimybė x , kad gardelės mazge atsidurs indžio atomas ir $1-x$ tikimybė, kad jame atsidurs galio atomas (čia x atitinka santykinę indžio molinę dalį atžvilgiu bendros indžio ir galio molinės dalies junginyje). Taigi, vien dėl šios priežasties, lydinyje atsiranda erdvinės sritys, kuriose vienos iš sudedamųjų komponentių, pavyzdžiui indžio, koncentracija bus didesnė, nei kitose, tuo tarpu galio - mažesnė. Šio tipo netolygumai yra lokalaus pobūdžio ir pasireiškia santykinai nedidelėje erdvės srityje, savo dydžiu atitinkančioje vieną gardelės narvelį [10].

Kitas nehomogeniškumo šaltinis yra lydinio sudėties fliktuacijos, pasireiškiančios dėl įtempių gardelėje, atsirandančių lydinio komponentių cheminiams ryšiai esant skirtingo ilgio, kaip tai yra InAlN junginyje. Šio tipo nehomogeniškumas apima didesnę mastelį nei atsitiktinio pobūdžio tvarka [11].

Galiausiai, didžiausio masto tvarka yra lydinio segregacija. Ji aiškiai stebima InGaN , kai indžio koncentracijos yra didesnės nei 25%. Taip yra, nes ties tokiomis didelėmis koncentracijomis lydinys yra nestabilus ir dėl to pasireiškia spinodinė dekompozicija, kurios rezultatas - didelės galiu arba indžio praturtintos sritys gardelėje [12].

Jei lydinio komponentės turi skirtingus draustinės energijos tarpus (kaip, pavyzdžiui, InGaN atveju $E_g(\text{InN})=0.7$ eV, o $E_g(\text{GaN})=3.4$ eV), lydinio draustinės energijos tarpas priklauso nuo komponentių koncentracijų ir gali būti aprašytas Vegard dėsnio [13]:

$$E_g(x) = xE_g(\text{InN}) + (1-x)E_g(\text{GaN}). \quad (1.1)$$

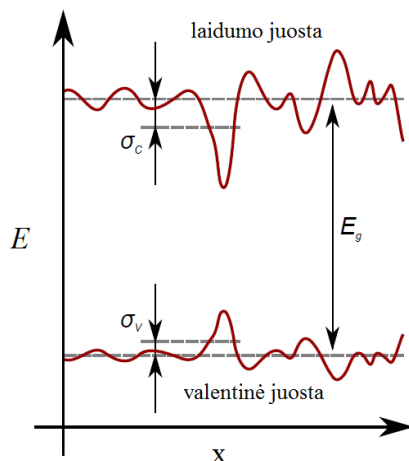
Turint omenyje, kad darinyje komponentės pasiskirsčiusios nehomogeniškai, gauname erdvines draustinių energijų tarpo variacijas (1.1 pav.).

Įprastai laikoma, kad draustinių energijų tarpo fliktuacijos yra pasiskirsčiusios pagal gausinį skirstinį [14]. Tokiu būdu gauname erdvėje pasiskirsčiusius lokalius maksimumus ir minimumus valentinėje bei laidumo juostoje - pastarieji kaip tik ir atitinka lokalizuotas būsenas. Taigi, iš to seka, kad lokalizuotų būsenų tankis yra aprašomas gausiniu skirstiniu (1.2 pav.).

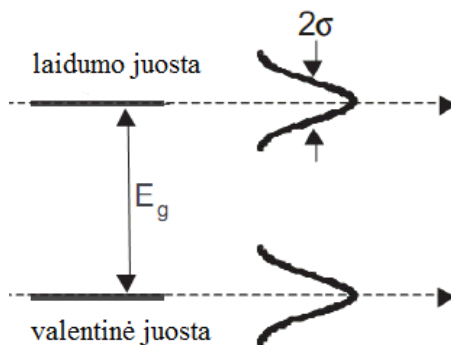
Laikant, kad skirstinio elektronams centras yra ties laidumo juostos apačia, jų lokalizuotų būsenų tankis išreiškiamas tokiu būdu:

$$g_L(E) \propto e^{-\frac{(E-E_g)^2}{2\sigma^2}}. \quad (1.2)$$

Čia σ yra parametras, nusakantis lokalizacijos gylį.



1.1 pav. Erdvinės draustinių energijų tarpo variacijos netvarkiamame puslaidininkyje (paimta iš [8]).



1.2 pav. Gausinis lokalizuotų būsenų tankio pasiskirstymas (paimta iš [15]).

Kaip greitai dalelė lokalizuojasi arba delokalizuojasi, nusako lokalizacijos/delokalizacijos sparta:

$$v = v_{loc/deloc} \exp\left(\frac{-\Delta E}{kT}\right). \quad (1.3)$$

Čia eksponentė reikalinga tik tokiu atveju, jei dalelei norint lokalizuotis reikia įveikti energinį barjerą, t.y. galinės būsenos energija yra didesnė už pradinės. Priešingu atveju vietoje eksponentės turime 1.

Krūvininkui atsidūrus lokalizuotoje būsenoje, jo judėjimas yra apribojamas potencinio barjero, o iš to kyla tam tikri krūvininkų pernašos ir rekombinacijos efektai, apie kuriuos bus kalbama kituose skyriuose.

2. Energijos būsenų tankis puslaidininkiuose

Energijos būsenų tankis puslaidininkiuose apibrėžia leistinų elektronų (arba skylių) būsenų skaičių tūrio vienetė ties tam tikra energija. Puslaidininkiuose laisvai judantys krūvininkai gali judėti laisvai visomis trimis kryptimis, jei puslaidininkis yra tūrinis (3D), bet judėjimas gali būti ir erdviškai apribotas. Jei turime kvantinius lakštus, judėjimas yra apribotas viena kryptimi (2D), kvantinių vielučių atveju judėjimas yra apribotas dviem kryptimis (1D), o kvantinių taškų atveju judėjimas yra apribotas visomis trimis kryptimis (0D). Kiekvienam iš šių atvejų gali būti išvedamas būdingas energijos būsenų tankio skirstinys [16]:

$$3D \quad g(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E_g - E} . \quad (2.1)$$

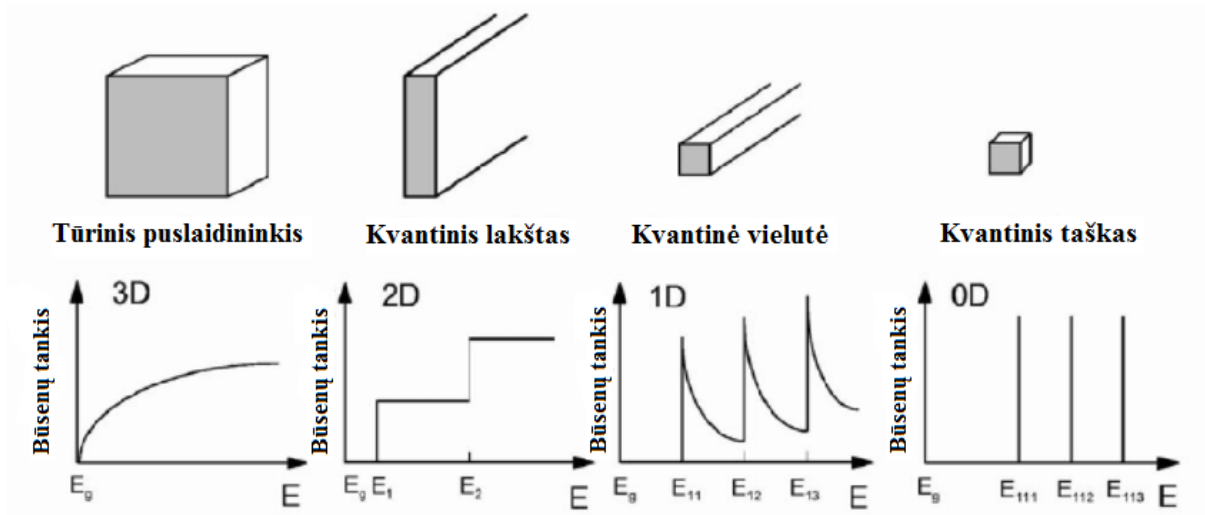
$$2D \quad g(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \sigma(E_g - E) \quad (2.2)$$

$$1D \quad g(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{m^*}{2(E_g - E)}} \quad (2.3)$$

$$0D \quad g(E) = 2\delta(E_g - E) \quad (2.4)$$

Čia m^* yra efektyvioji krūvininko masė puslaidininkyje, \hbar - redukuotoji Planck konstanta, E_g - draustinių energijų tarpas, σ - Heaviside funkcija, δ - Dirac delta funkcija.

Aptartosios puslaidininkinės struktūros ir jas atitinkantys energijos būsenų tankio skirstiniai pavaizduoti 2.1 pav..



2.1 pav. Skirtingo dimensiškumo puslaidinikinės struktūros ir jas atitinkantys energijos būsenų tankio skirstiniai (paimta iš [17]).

Lokaluotų energijos būsenų tankio skirstinys, kaip jau buvo aptarta 1 skyrelyje, yra aprašomas Gauso funkcija. Laikant, kad skirstinio elektronams centras yra ties laidumo juostos apačia, jų lokalizuotų būsenų tankis išreiškiamas tokiu būdu:

$$g_L(E) = A e^{-\frac{(E-E_g)^2}{2\sigma^2}}. \quad (2.5)$$

Čia A - normavimo daugiklis, lygus $\frac{N_{lok}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}$ (N_{lok} - bendras lokalizuotų būsenų skaičius).

Bendras elektronų tankis sistemoje randamas integruojant būsenų tankio ir tikimybės, kad tos būsenos bus užimtos, skirstinių sandaugą. Būsenų užpildos tikimybė yra aprašoma Fermi-Dirac pasiskirstymu:

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right) + 1}. \quad (2.6)$$

Čia μ - cheminis potencialas.

Žinant bendrą elektronų tankį sistemoje, galima nustatyti cheminį potencialą μ ir atvirkščiai.

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{i=1}^N g_i(E) f(E) dE. \quad (2.7)$$

Čia $g_i(E)$ atitinka skirtingus sistemai būdingus būsenų tankio skirstinius.

Jei turime dvimatę sistemą su lokalizacija, integralas (2.7), pasinaudojus (2.2), (2.5) ir (2.6) formulėmis gali būti užrašytas taip:

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right) + 1} \frac{N_{lok}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(E-E_g)^2}{2\sigma^2}} dE + \int_{E_g}^{\infty} \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right) + 1} \frac{m^*}{\pi\hbar^2} dE. \quad (2.8)$$

3. Krūvininkų pernašos mechanizmai puslaidininkiuose

3.1. Difuzija

Krūvininkų difuzija yra dalelių judėjimas dėl šiluminės energijos, kuri verčia krūvininkus judėti atsitiktinėmis kryptimis net kai nėra pridėto elektrinio lauko. Jei krūvininkai erdvėje yra pasiskirstę tolygiai, dalelių ansamblis atstojamojo judėjimo neturi. Taip yra dėl to, kad kiekvienam krūvininkui, pasislinkus iš savo pradinės pozicijos ir palikus joje tuščią vietą, ta vieta vidutiniškai yra užimama kito atsitiktinai pajudėjusio krūvininko [18]. Tačiau jeigu erdvėje yra krūvininkų koncentracijos gradientas, t.y. egzistuoja erdvės sritys, kuriose krūvininkų koncentracija yra skirtinga, tai difuzijos procesas sąlygoja kryptingą dalelių judėjimą, o ta kryptis yra priešinga koncentracijos gradientui, t.y. dalelės ima judėti iš didelės koncentracijos sričių į mažos koncentracijos sritis. Kitaip tariant, difuzijos procesas sukuria atstojamąjį dalelių ansamblio judėjimą tokia kryptimi, kuri sumažintų dalelių erdvinio pasiskirstymo netolygumą.

Difuzijos procesas yra aprašomas dviem Fick dėsniais. Pirmasis dėsnis atitinka prieš tai aptartą dalelių savybę judėti iš didelės koncentracijos sričių į mažos koncentracijos sritis. Matematiškai šis dėsnis užrašomas tokiu būdu:

$$\vec{J} = -D\nabla n. \quad (3.1.1)$$

Čia J - medžiagos kiekio srauto tankis ($\text{mol}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$), D - difuzijos koeficientas ($\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$), o n - molinė koncentracija ($\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$).

Antrasis Fick dėsnis yra išvedamas remiantis pirmuoju Fick dėsniumi (3.1.1) ir tolydumo lygtimi (3.1.2), teigiančia, kad medžiagos koncentracijos pokytis bet kurioje sistemos dalyje atsiranda tik dėl į ją įtekančių ir iš jos ištekančių medžiagos srautų, t.y. medžiaga nėra nei sukuriama, nei sunaikinama:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0. \quad (3.1.2)$$

Taigi, įsistačius (3.1.1) į (3.1.2) yra gaunamas antrasis Fick dėsnis, aprašantis dalelių koncentracijos kitimą bėgant laikui:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \nabla^2 n. \quad (3.1.3)$$

Vidutinis dalelės poslinkis dėl difuzijos gali būti užrašytas tokiu būdu [19]:

$$\bar{r} = \sqrt{2NDt}. \quad (3.1.4)$$

Čia N - nagrinėjamos sistemos dimensiškumas.

3.2. Dreifas

Krūvininkui, kurio krūvis q , esant elektriniame lauke E , jį veikianti jėga yra lygi krūvio ir elektrinio lauko stiprio sandaugai qE . Jei krūvininko masė m ir jis yra laisvoje erdvėje, tai po laiko t tokiam elektriniame lauke jis įgis greitį v [20]:

$$\vec{v} = \frac{q\vec{E}}{m}t. \quad (3.2.1)$$

Tokia pačia išraiška gali būti išreikštas ir elektrinio lauko suteiktas greitis krūvininkui, jei krūvininkas yra ne laisvoje erdvėje, o periodiniame potenciale (būtent taip, kaip yra puslaidininkiniame kristale). Vienintelis skirtumas nuo prieš tai aptartos situacijos yra toks, kad vietoje realios krūvininko masės m yra imama efektinė masė m^* , kurios dydis priklauso nuo

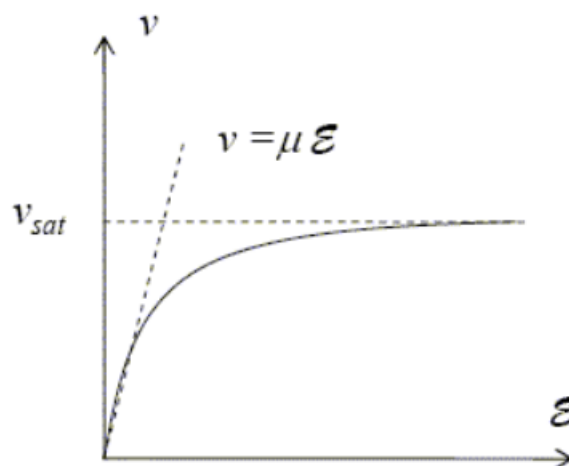
puslaidininkio juostinės struktūros.

Yra žinoma, kad realiuose kristaluose esti netobulumų, tokių kaip priemaišos, šiluminiai bei gardelės virpesiai ir t.t., todėl krūvininkas, judėdamas tokioje sistemoje, neišvengiamai per susidūrimus sąveikauja su šiais netobulumais ir yra sklaidomas. Šie sklaidos vyksmai yra labai greiti - įprastai įvyksta per pikosekundės dalį. Tarp susidūrimų, krūvininkas, kaip ir prieš tai aptartu atveju, yra veikiamas jėgos qE , tačiau sklaida sąlygoja krūvininko judėjimo krypties pokyčius atsitiktinėmis kryptimis, dėl to efektinis judėjimas išilgai elektrinio lauko krypties yra lėtesnis. Tokiu atveju yra įvedamas dydis τ , vadinamas vidutiniu impulso relaksacijos laiku, kuris yra lygus vidutiniam laiko tarpui tarp dviejų vienas po kito einančių sklaidos įvykių. Tuomet gaunama vidutinė krūvininkų greičio išraiška:

$$\vec{v} = \frac{q\tau}{m^*} \vec{E} = \mu \vec{E}. \quad (3.2.2)$$

Dydis μ , esantis šioje išraiškoje, yra vadinamas krūvininkų judriu.

Verta paminėti, kad esant stipriems elektriniams laukams (apie 10^4 V/cm), krūvininkai tarp susidūrimų gali įgyti pakankamai energijos, kad būtų sužadinti optiniai fononai. Šie fononai labai efektyviai sugeria krūvininkų energiją, tad vos tik yra pasiekama pakankama energija optinio fonono išspinduliavimui, šis įvykis ir įvyksta. Tokiu būdu atsiranda ribojimas tolesniam krūvininko energijos didėjimui, t.y. jo greitis įsisotina (3.1 pav.).



3.1 pav. Dreifo greičio įsisotinimas esant stipriems elektriniams laukams (paimta iš [18]).

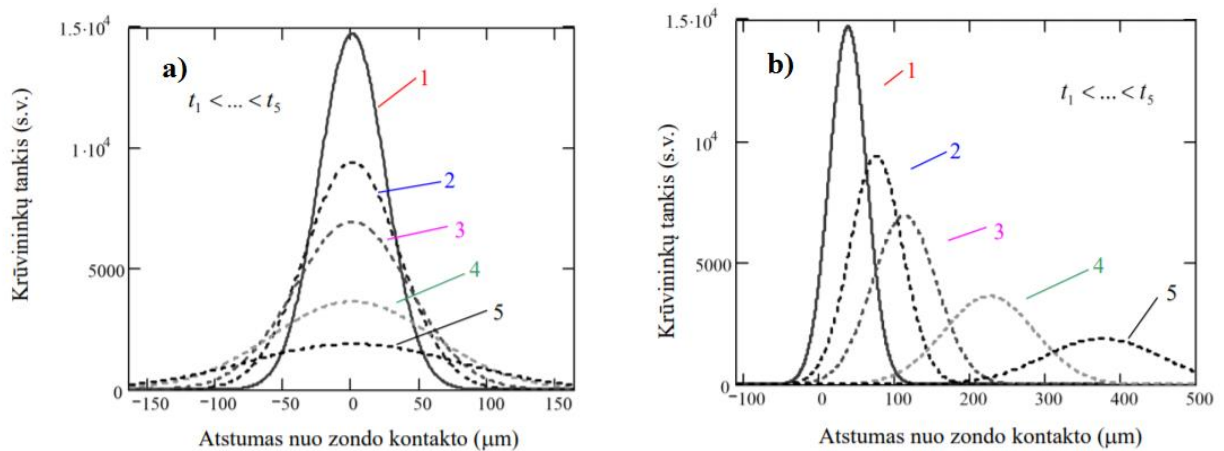
Pusiausvyros sąlygomis dreifo ir difuzijos sąlygojamos srovės savo skaitine verte yra lygios, bet yra priešingų krypčių. Tuomet galima susieti krūvininkų judrį ir difuzijos konstantą per sąryšį,

vadinamą Einstein sąryšiu [21]:

$$D = \frac{\mu k T}{q}. \quad (3.2.3)$$

Čia k - Boltzmann konstanta.

Injektuotų į puslaidininkį krūvininkų profilio plitimas dėl difuzijos yra simetrisinis injekcijos taško atžvilgiu, kai nėra išorinio elektrinio lauko, tačiau jis tampa asimetrisinis pridėjus elektrinį lauką, nes krūvininkai dėl dreifo dar ir slenkasi išilgai elektrinio lauko krypties (3.2 pav. a, b)



3.2 pav. Injektuotų į puslaidininkį krūvininkų profilio plitimas dėl difuzijos be išorinio elektrinio lauko (a) ir su juo (b) (paimta iš [22]).

3.3. Šuoliavimas per lokalizuotas būsenas

Praeituose skyreliuose aptarti krūvininkų pernašos mechanizmai neįskaito lokalizuotų būsenų įtakos. Esminis skirtumas yra toks, kad turint lokalizuotas būsenas, bet kuriuo momentu tam tikra dalelių dalis bus lokalizuota jose. Lokalizacija reiškia, kad krūvininkų judėjimas yra apribojamas potencialo barjerų. Peršasi išvada, kad jeigu visi krūvininkai užimtų lokalizuotas būsenas, iš puslaidininkio medžiaga virstų izoliatoriumi. Tačiau, pasirodo, krūvininkai gali judėti tarp lokalizuotų būsenų šuoliavimo būdu, jei yra laisvų būsenų, į kurias šuoliai galimi (3.3 pav.). Šuoliavimo sparta yra susijusi su medžiagos laidumu ir, kai kuriais atvejais, krūvininkų judriuo rezultatas - dar vienos srovės komponentės atsiradimas [23].

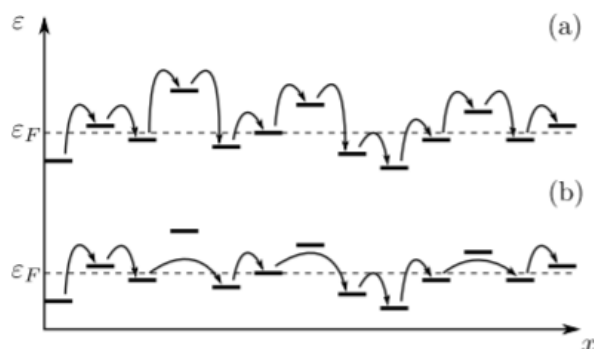
Krūvininkų pernašos per lokalizuotas būsenas sparta literatūroje aprašoma naudojantis

Miller-Abrahams formule (3.3.1) [24]:

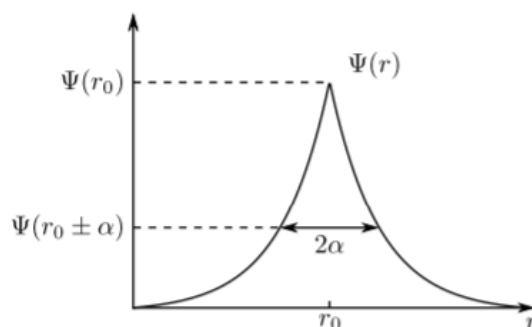
$$v_{ij} = v_0 \exp\left(-\frac{2r_{ij}}{\alpha}\right) \cdot \begin{cases} \exp\left(-\frac{\varepsilon_j - \varepsilon_i}{kT}\right) & \text{jei } \varepsilon_j \geq \varepsilon_i \\ 1 & \text{jei } \varepsilon_j < \varepsilon_i \end{cases} \quad (4.3.1)$$

Pirmoji eksponentē atitinka fononu absorbcijas sāļgojamā tuneliavimā tarp lokalizotu būsenū. Dydis r_{ij} atitinka atstumā tarp lokalizotu būsenū, o parametras α yra vadinamas lokalizācijas ilgiu ir apibūdina, kaip greitai slopsta banginē funkcija tostant nuo pradinio taško (3.4 pav.). Tuo tarpu antroji eksponentē atitinka „netamprius“ perėjimus tarp būsenū. Tokia sāļga yra būtina, turint omenyje, kad skirtingose lokalizuose būsenose dalelē turi skirtingas energijas ir, norint, kad šuolis iš vienos būsenos į kitā įvyktū, dalelē turi sugerti arba atiduoti energijā. Jei šuolis vyksta iš aukštesnēs energijos būsenos į žemesnē, ši eksponentē tampa lygi 1.

Taigi, šie du mechanizmai yra tarpusavyje konkuruojantys, todėl šuoliai iš pradinēs būsenos nebūtinai turi vykti į artimiausias kaimynines būsenas, jeigu tolimesnēs būsenos yra artimesnēs energiniu požiūriu.



3.3 pav. Krūvininkų pernaša tarp lokalizotu būsenū šuoliavimo būdu, šuoliams vykstant tik tarp gretimū kaimynū (a) ir ne tik tarp gretimū kaimynū (b) (paimta iš [24]).



3.4 pav. Banginės funkcijos slopimas tostant nuo pradžios taško (paimta iš [24]).

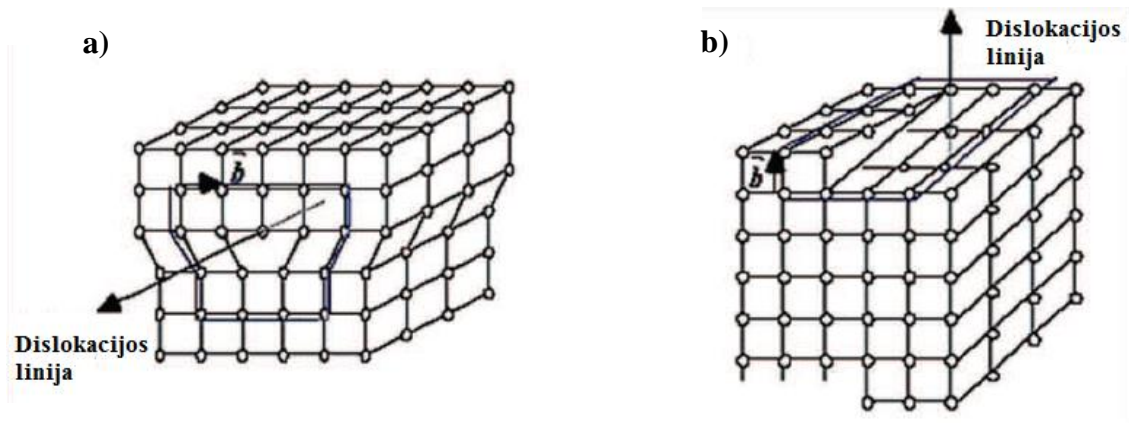
4. Struktūriniai defektai nitridiniuose dariniuose

III-V grupių nitridiniai junginiai yra nuo seno laikomi daug žadančiomis medžiagomis optoelektronikoje, tačiau viena iš didžiausių jų pritaikymo problemų yra ta, kad jie neturi auginimui tinkamo padėklo, todėl turi būti heteroepitaksiškai auginami ant padėklų, pagamintų iš kitų medžiagų, kurios su auginamu junginiu nėra suderintos gardelės konstantos, terminio plėtimosi ir kitais požiūriais. Dėl šios priežasties gardelėje formuojasi dideli dislokacijų tankiai. Pavyzdžiui GaN, užaugintas ant safyro, įprastai gali turėti iki 10^{10} cm⁻² siūlinių dislokacijų [25]. Be dislokacijų, kurios yra laikomos 1D dimensiškumo (linijiniu) defektu, esama ir kitų struktūrinių defektų, tokių kaip vakansijos bei pakaitiniai priemaišų atomai (kurie yra laikomi 0D, arba taškiniais defektais), kristalitų ribos bei pakavimosi netvarka (2D, arba plokštuminiai defektai) bei įtrūkimai, tuštumos ir nanostrypeliai (3D, arba tūriniai defektai).

4.1. Dislokacijos

Šiame darbe dėmesys skiriamas dislokacijoms, todėl šio tipo defektą apžvelgsiu plačiau. Dislokacijos yra apibrėžiamos kaip staigus įprasto atomų išsidėliojimo išilgai tam tikros krypties sutrikdymas kietame kūne. Dislokacijos dažniausiai atsiranda dėl netvarkingo atomų išsidėstymo arba vakansijų išilgai konkrečios krypties. Dislokacijos esti siūlinio pavidalo, todėl dar yra vadinamos siūlinėmis dislokacijomis. Verta paminėti, kad tarpatominiai ryšiai yra smarkiai iškraipomi tik prie pat dislokacijos linijos (kelių nanometrų spinduliu nuo jos). Ši sritis yra vadinama dislokacijos šerdimi. Dislokacijos tai pat sukuria ir elastines gardelės deformacijas, kurios pasireiškia gerokai didesnėje erdvės srityje, nei šerdis, ir yra centruotos ties dislokacijos linija.

Siūlinės dislokacijos gali būti trijų tipų - sraigtinės, kraštinės ir mišrios. Kraštinė dislokacija gali būti apibūdinta kaip papildoma atomų plokštuma įsprausta į kristalinę gardelę (4.1 pav. a). Ta gardelės dalis, kurioje yra daugiau nei įprastai atomų jaus gniuždomąjį įtempį, o likusi dalis - tempiamąjį įtempį. Tuo tarpu sraigtinės dislokacijos atsiranda, kai gardelės plokštumos yra paslenkamos viena kitos atžvilgiu dėl šlyties (4.1 pav. b). Verta paminėti, kad realiuose kristaluose dislokacijos įprastai būna mišraus tipo.



4.1 pav. Kraštinė (a) ir sraigtinė (b) dislokacijos kristalinėje gardelėje (paimta iš [25]).

Siūlinės dislokacijos yra žinomos dėl to, kad jos veikia kaip nespindulinės rekombinacijos ir sklaidos centrai, todėl daro neigiamą įtaką krūvininkų transportui, o tai yra ypač žalinga šviestukų ir lauko diodų veikimui [25]. Dislokacijų ribojamose srityse pasižymi didele nespindulinės rekombinacijos sparta, t.y. elektronai ir skylės rekombinuoja vieni su kitais, o rekombinacijos metu energija vietoje to, kad būtų išspinduliuojama fotonų pavidalu, yra perduodama kristalinei gardelei ir dėl to kristalas kaista, o tai gali sukelti optoelektroninių prietaisų veikos sutrikimus.

Nespindulinės rekombinacijos sustiprėjimą ties dislokacijomis lemia dėl gardelės deformacijų atsiradę įtempiai ir mažai koordinuoti ryšiai tarp atomų. Dėl įtempių atsiradęs deformacijos potencialas sukuria būsenas, panašias į būdingas kvantinėms vielutėms, o dėl mažai koordinuotų ryšių atsiranda viendimensinės juostos, atsiskyrusios nuo laidumo arba valentinės juostos [26]. Jei Fermi lygmuo pasislenka link valentinės arba laidumo juostos, šios būsenos tampa dalinai užpildytos pagrindiniais krūvininkais ir dislokaciją efektyviai paverčia įkrautu linijiniu defektu, o dėl to aplink jį pasireiškia juostų išlinkimas. Dėl šios priežasties dislokacija link savęs traukia šalutinius krūvininkus, kurie joje rekombinuoja nespinduliniu būdu. Gardelės priemaišos gali dalinai ekranuoti ties dislokacija susidariusią erdvinio krūvio sritį ir dėl to gali sumažėti dislokacijos sukeltos nespindulinės rekombinacijos sparta.

5. Krūvininkų rekombinacijos mechanizmai puslaidininkiuose

Idealaus šviestuko atveju, kiekvienas jame sugeneruotas nepusiausvirasis krūvininkas rekombinuodamas sukuria fotoną, t.y. rekombinuoja spinduliniu būdu, tačiau realiomis sąlygomis esama tiek spindulinės, tiek nespindulinės rekombinacijos kanalų. Šiame skyriuje bus apžvelgiami pagrindiniai mechanizmai, kuriais vyksta krūvininkų rekombinacija puslaidininkiuose.

Elektronų-skylių rekombinacija šviestuke yra aprašoma ABC modeliu, kuriame laikoma, kad jame sugeneruotų krūvininkų (elektronų ir skylių) tankiai yra vienodi [27]. Tokiu atveju rekombinacijos sparta aprašoma tokiu būdu:

$$R = An + Bn^2 + Cn^3. \quad (5.1)$$

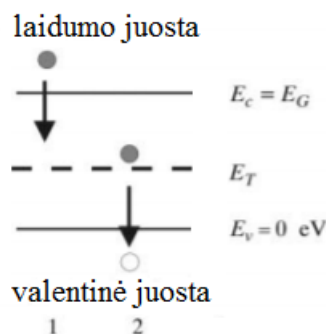
Čia n – krūvininkų koncentracija. Kiekvienas šios polinominės išraiškos narys atitinka vis kitą rekombinacijos mechanizmą. Pirmasis aprašo Shockley-Read-Hall rekombinaciją, kurios sparta yra tiesiškai proporcinga krūvininkų tankiui n , antrasis – spindulinę rekombinaciją, kurios sparta proporcinga n^2 , o trečiasis – Auger rekombinaciją, kurios sparta proporcinga n^3 . Koeficientai A , B ir C atitinkamai vadinami Shockley-Read-Hall, spindulinės rekombinacijos ir Auger koeficientais.

5.1. Shockley-Read-Hall rekombinacija

Shockley-Read-Hall (SRH) rekombinacija yra nespindulinės rekombinacijos mechanizmas vykstantis per tarpines energijos būsenas, kurias atitinka diskretūs energijos lygmenys draustinėje energijų juostoje. Šie energijos lygmenys atsiranda dėl puslaidininkio kristalinėje gardelėje esančių priemaišų arba defektų.

SRH rekombinacijos mechanizmas apima du procesus [28]:

1. Elektronas iš laidumo juostos gali būti pagautas neužpildyto tarpinio energijos lygmens (šوليو metu lygmenų energijos skirtumas perduodamas gardelei – emituojamas fononas).
2. Iš užpildyto tarpinio energijos lygmens elektronas gali peršokti į valentinę juostą (šوليو metu lygmenų energijos skirtumas perduodamas gardelei – emituojamas fononas).



5.1 pav. Shockley-Read-Hall rekombinacija (paimta iš [28]).

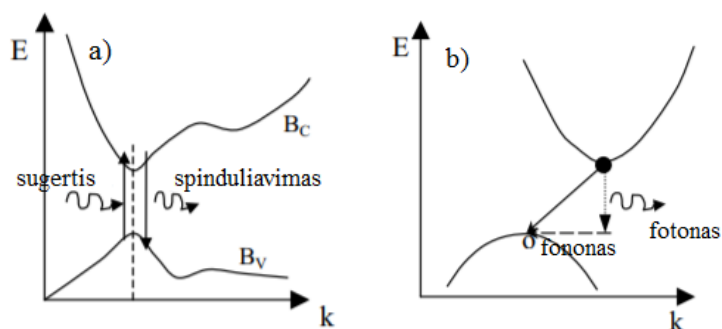
Kadangi defektas yra lokalizuotas gardelėje, tai iš Heisenberg neapibrėžtumo principo išplaukia, kad jį atitinkanti būseną yra išplitusi k -erdvėje. Dėl šios priežasties, rekombinuodamas

per defektinį lygmenį, krūvininkas, bendru atveju, neprivalo išlaikyti pastovaus bangos vektoriaus, todėl šis procesas dominuoja netiesiatarpiuose puslaidininkuose [29,30].

5.2. Spindulinė rekombinacija

Spindulinė rekombinacija vyksta elektrono tiesioginio šuolio iš laidumo į valentinę juostą metu. Peršokęs iš laidumo į valentinę juostą elektronas rekombinuoja su skylė. Tokio šuolio metu yra išspinduliuojamas šviesos kvantas, kurio energija atitinka lygmenų, tarp kurių vyko šuolis, energijų skirtumą. Šių šuolių metu turi būti tenkinami energijos ir judesio kiekio tvermės dėsniai. Kadangi fotono judesio kiekis yra labai nedidelis, spindulinė rekombinacija galima tik tiesioginių tarpjuostinių šuolių metu. Tai būdinga tiesiatarpiams puslaidininkiams. Netiesiatarpiuose puslaidininkuose spindulinė rekombinacija taip pat galima, bet mažai tikėtina, nes jai vykti reikalinga trečia dalelė – fononas, kuri kompensuotų šuoliui reikalingą judesio kiekio pokytį [31]. Šis procesas dominuoja švariose puslaidininkuose, kuriuose priemaišos nesudaro spartesnės rekombinacijos kelių.

Verta paminėti, kad jei atsižvelgsime į lokalizuotų būsenų įtaką, tai spindulinės rekombinacijos iš lokalizuotų būsenų sparta, priešingai nei spindulinės rekombinacijos atveju, aprašytu ABC modelyje, nepriklauso nuo krūvininkų tankio kvadratu, o yra tiesinė [32,33].



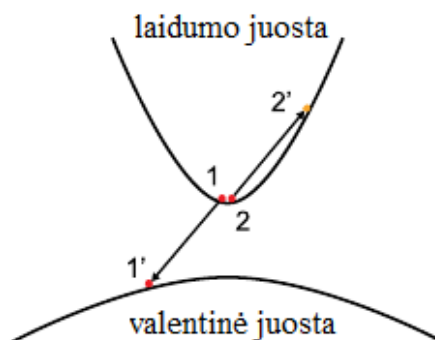
5.2 pav. Spindulinė rekombinacija: a) tiesiatarpiame puslaidininkyje ir b) netiesiatarpiame puslaidininkyje (paimta iš [31]).

5.3. Auger rekombinacija

Auger rekombinacija yra nespindulinis procesas, apimantis trijų krūvininkų sąveiką. Auger rekombinacija vyksta rekombinuojant elektronui ir skylėi, o proceso metu išsiskyrusi energija perduodama trečiajam krūvininkui – elektronui laidumo juostoje arba skylėi valentinėje juostoje. Pirmuoju atveju elektronas pakeliamas į aukštesnį lygmenį laidumo juostoje, o antruoju – skylė nustumiama į aukštesnį energijos lygmenį valentinėje juostoje [27]. Šio proceso metu

spinduliavimas nevyksta, o trečiajam krūvininkui suteikta energija virsta šiluma, jam relaksuojant į žemesnės energijos lygmenį.

Auger rekombinacijos mechanizmas tampa svarbus esant didelėms nepusiausvirujų krūvininkų koncentracijoms. Jis stipriausiai pasireiškia siauratarpiuose puslaidininkiuose ir silpsta didėjant jų draustinių energijų tarpui.



5.3 pav. Diagrama, atvaizduojanti Auger rekombinaciją dviejų elektronų ir skylės sąveikos atveju (paimta iš [34]).

6. Puslaidininkinių darinių tyrimai naudojant sužadinimo-zondavimo metodikas

Puslaidininkiniams dariniams, tiek pasižymintiems struktūrine netvarka, tiek tvarkiems, tirti plačiai naudojamos optinio sužadinimo-zondavimo metodikos. Jos pagrįstos galimybe optiškai modifikuojant puslaidininkio savybes stebėti jų kitimą laike. Tam naudojamas impulsinis sužadinimo režimas, kai žadinimo trukmė palyginama arba trumpesnė už charakteringas nepusiausvirujų krūvininkų relaksacijos trukmes. Plačiatarpiuose tiesaus tarpo puslaidininkiuose šios relaksacijos trukmės yra nanosekundžių eilės, todėl žadinimui reikalingi pikosekundiniai arba femtosekundiniai lazerio impulsai [35]. Taigi, šių metodikų privalumas yra toks, kad juose gali būti stebimi ypač greiti procesai su gera laikine skyra [36], o tai leidžia tirti krūvininkų rekombinacijos kinetikas puslaidininkyje, iš kurių nustatomi svarbūs optoelektronikos prietaisų veikai puslaidininkio parametrai, kaip antai nepusiausvirujų krūvininkų gyvavimo trukmės, difuzijos koeficientai, vidiniai kvantiniai našumai ir t.t. Kadangi darbe modeliuojami krūvininkų pernašos ir rekombinacijos vyksmai bei skaičiuojami prieš tai minėti parametrai, šiame skyrelyje trumpai supažindinsiu su eksperimentinėmis metodikomis, kad būtų aišku, kaip tie parametrai matuojami realiomis sąlygomis. Aptarsiu dvi sužadinimo-zondavimo metodikos modifikacijas – skirtuminio pralaidumo (*differential transmission* – DT) bei šviesa indukuotų dinaminų gardelių (*light-induced transient gratings* – LITG) metodus.

6.1. Skirtuminio pralaidumo metodika

Skirtuminio pralaidumo metodikoje plonas puslaidininkinis sluoksnis apšviečiamas trumpais (pikosekundiniais ar dar trumpesniais) lazerio impulsais. Žadinančios šviesos kvanto energija viršija puslaidininkio draustinių energijų tarpą, todėl jis sužadinas. Zonduojantis lazerio spindulys yra vėlinamas vėlinimo linijoje pirmojo spindulio atžvilgiu ir naudojamas pirmojo spindulio sukeltų puslaidininkio optinių parametrų pokyčiams fiksuoti. Šio spindulio šviesos kvanto energija parenkama taip, kad neviršytų draustinių energijų tarpo, jei norima zonduoti puslaidininkio skaidrumo srityje, arba parenkama didesnė už draustinių energijų tarpą, jei norima zonduoti puslaidininkio sugerties srityje. Pirmuoju atveju patogiau matuoti pralaidumo signalo santykinį pokytį, o antruoju - atspindžio.

Žadinančiu spinduliu sugeneruoti nepusiausvirieji krūvininkai pakeičia puslaidininkio šviesos sugerties koeficientą, o kartu ir šviesos lūžio rodiklį. Dėl šios priežasties puslaidininkio pralaidumo (arba atspindžio) spektras pasislenka nesužadintojo puslaidininkio pralaidumo (arba atspindžio) spektro atžvilgiu. Pralaidumo matavimuose dėl šio poslinkio gaunamas skirtuminio pralaidumo signalas:

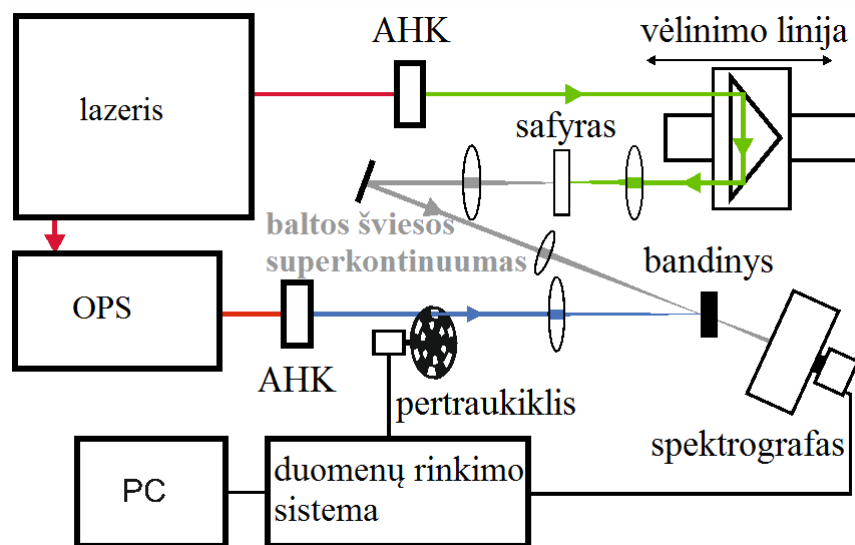
$$T(\lambda, t) = 1000 \times \lg \left(\frac{T_0(\lambda)[\%]}{T_p(\lambda, t)[\%]} \right). \quad (6.1.1)$$

Čia T_0 atitinka nesužadinto puslaidininkinio sluoksnio pralaidumą, o T_p – pralaidumą, jį sužadinus. Panaši išraiška gaunama ir atspindžio matavimuose. Pavyzdinė tokio eksperimento schema pavaizduota 6.1 pav.

Keičiant vėlinimą tarp žadinančio ir zonduojančio spindulių galima fiksuoti, kaip kinta fotomodifikuoti puslaidininkio parametrai laikui bėgant, o iš šio kitimo galima suskaičiuoti fotogeneruotų krūvininkų rekombinacijos kinetikas, iš kurių pagal 5 skyriuje aptartą ABC metodą galima rasti skirtingus rekombinacijos mechanizmus atitinkančius koeficientus, o iš pastarųjų - pagal (6.1.2) formulę apskaičiuoti vidinį kvantinį našumą, kuris yra lygus spinduliniu būdu rekombinuojančiai visų fotogeneruotų krūvininkų daliai:

$$\eta = \frac{Bn}{A + Bn + Cn^2}. \quad (6.1.2)$$

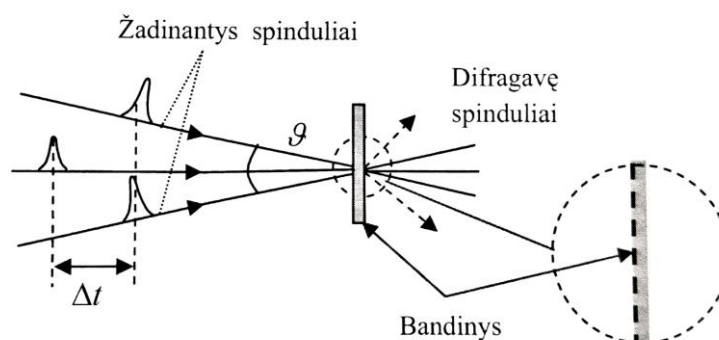
Verta paminėti, kad zondojančio spindulio skersmuo yra žymiai mažesnis už žadinančiojo spindulio skersmenį. Tai reikalinga tam, jog būtų zenduojama tolygiai sužadinta sritis.



6.1 pav. Skirtuminio pralaidumo eksperimento pavyzdinė schema (paimta iš [37]).

6.2. Šviesa indukuotų dinaminų gardelių metodika

Šviesa indukuotų dinaminų gardelių metodika yra analogiška praeitame skyrelyje aprašytai skirtuminio pralaidumo metodikai, tik šiuo atveju puslaidininkio sužadimui naudojami du spinduliai, susikertantys ties žadinamojo puslaidininkio paviršiumi (6.2 pav.).

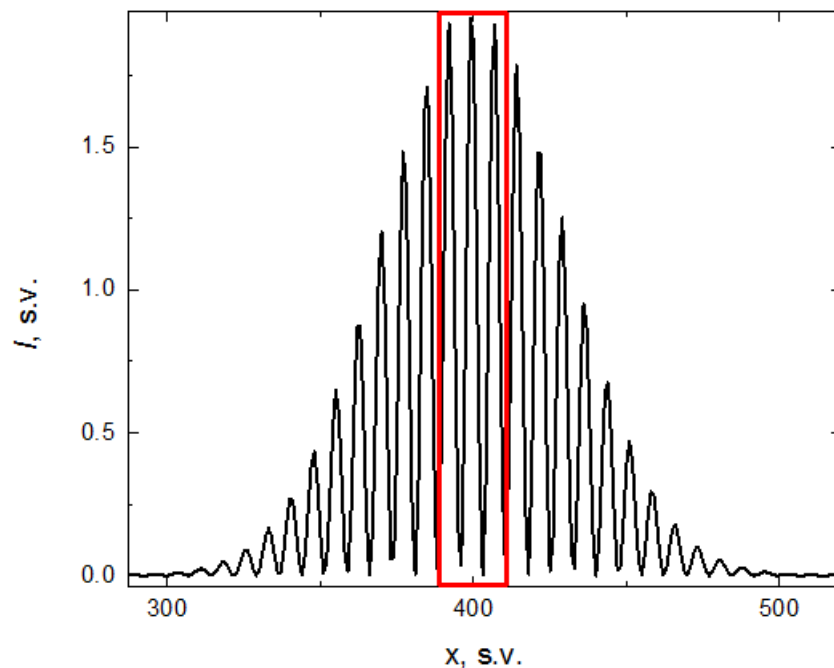


6.2 pav. Šviesa indukuotų dinaminų gardelių eksperimento principinė schema (paimta iš [35]).

Tokiu atveju, bandinio vietoje dėka interferencijos yra sukuriamas šviesos intensyvumo skirstinys. Šviesos intensyvumas kinta periodiškai bandinio plokštumoje. Išilgai vienos iš koordinatinių ašių jo kitimas gali būti aprašytas tokiu būdu:

$$I(x) = I_0 \left(1 + \cos \frac{2\pi x}{\Lambda} \right). \quad (6.2.1)$$

Čia I_0 – krintančios šviesos intensyvumas. Tokiu būdu ant puslaidininkio suformuojama dinaminė difrakcinė gardelė iš periodiškai sugeneruotų nepusiausvirųjų krūvininkų. Kadangi interferuojantys pluoštai yra Gausinio intensyvumo pasiskirstymo, tai jų interferencijos rezultatas bus panašus kaip pavaizduota 6.3 pav.. Zonduojančio spindulio skersmuo turėtų būti daug mažesnis nei žadinančiųjų, tam, kad zondavimo srityje intensyvumo pikai būtų apytiksliai to paties dydžio – ši sritis paveikslėlyje apibrėžta raudonu stačiakampiu.



6.3 pav. Dviejų Gauso pluoštų interferencija.

Dinaminės gardelės periodas Λ siejasi su spinduliuotės bangos ilgiu λ ir kampų tarp į bandinį krintančių žadinančių spindulių ϑ :

$$\Lambda = \frac{\lambda}{2 \sin(\vartheta/2)}. \quad (6.2.2)$$

Akivaizdu, kad gardelės periodą galima keisti keičiant žadinančių spindulių susikirtimo kampą.

Dinaminė gardelė yra nuskaitoma zonduojančiu spinduliu, kuris yra vėlinamas vėlinimo linija. Šis spindulys difraguoja nuo gardelės. Jeigu difrakciją galima aprašyti plonų gardelių metodu, tada difrakcijos efektyvumą nusako formulė [35]:

$$\eta(t) = \frac{I_1}{I_0 T} = J_1^2 \left(\frac{2\pi}{\lambda} \int_0^d \Delta n(z, t) dz \right). \quad (6.2.3)$$

Čia I_0 ir I_1 – zonduojančio kritusio ir difragavusio spindulių intensyvumai, T – puslaidininkinio sluoksnio pralaidumo koeficientas, d – jo storis, Δn – lūžio rodiklio pokytis, z – koordinatė sluoksnio paviršiaus normalės kryptimi, J_1 – pirmosios eilės Beselio funkcija. Mažiems k , ši funkcija gali būti supaprastinta $J_1(k) \approx k/2$.

Sužadinto puslaidininkio šviesos lūžio rodiklio pokytis dėl nepusiausvirųjų krūvininkų pagal Drude-Lorentz teoriją yra tiesiogiai proporcingas nepusiausvirųjų krūvininkų tankiui [38]. Tuomet, Sugeneruotų krūvininkų erdvinis pasiskirstymas puslaidininkyje gali būti aprašytas atsižvelgiant į žadinančios šviesos intensyvumo pasiskirstymą ties puslaidininkio paviršiumi bei sugertį pagal Beer-Lambert-Bouguer dėsnį:

$$N(x, z) = N_0 \left(1 + m \cos \frac{2\pi x}{\Lambda} \right) \exp(-\alpha z). \quad (6.2.4)$$

Čia m – šviesos intensyvumo moduliacijos gylis, α – šviesos sugerties koeficientas.

Atsižvelgiant į formules (6.2.3) ir (6.2.4), galima padaryti išvadą, kad difrakcijos efektyvumas yra proporcingas nepusiausvirųjų krūvininkų tankio kvadratui.

Iš tolydumo lygties seka, kad gardelė suyra ne tik dėl krūvininkų rekombinacijos, bet ir dėl difuzijos, todėl efektinė gardelės gyvavimo trukmė gali būti užrašyta tokia išraiška:

$$\frac{1}{\tau_G} = \frac{1}{\tau_R} + \frac{1}{\tau_D} = \frac{1}{\tau_R} + \frac{4\pi^2 D}{\Lambda^2}. \quad (6.2.5)$$

Čia τ_R – krūvininkų gyvavimo trukmė, o τ_D – difuzinė gardelės irimo trukmė.

Kadangi difrakcijos efektyvumas yra proporcingas nepusiausvirųjų krūvininkų tankio kvadratui, tai efektyvumo laikinė kinetika gęsta su charakteringa laikine konstanta $\tau_G/2$.

Atlikus matavimus su skirtingo periodo Λ dinaminėmis gardelėmis ir atidėjus priklausomybę $\frac{1}{\tau_G} = f\left(\frac{4\pi^2}{\Lambda^2}\right)$ grafiškai, iš tiesės polinkio kampo gaunamas krūvininkų difuzijos koeficientas D , o iš grafiko susikirtimo su ordinačių ašimi taško - krūvininkų gyvavimo trukmė τ_R .

7. Monte Carlo modeliavimo algoritmai

Monte Carlo modeliavimo algoritmai yra plati algoritmų grupė, uždavinių sprendimui pasitelkianti atsitiktinius skaičius. Jie buvo pradėti naudoti penktajame praėjusio amžiaus dešimtmetyje ir nuo to laiko tapo pritaikomi daugelyje sričių pradedant finansais ir baigiant fizika.

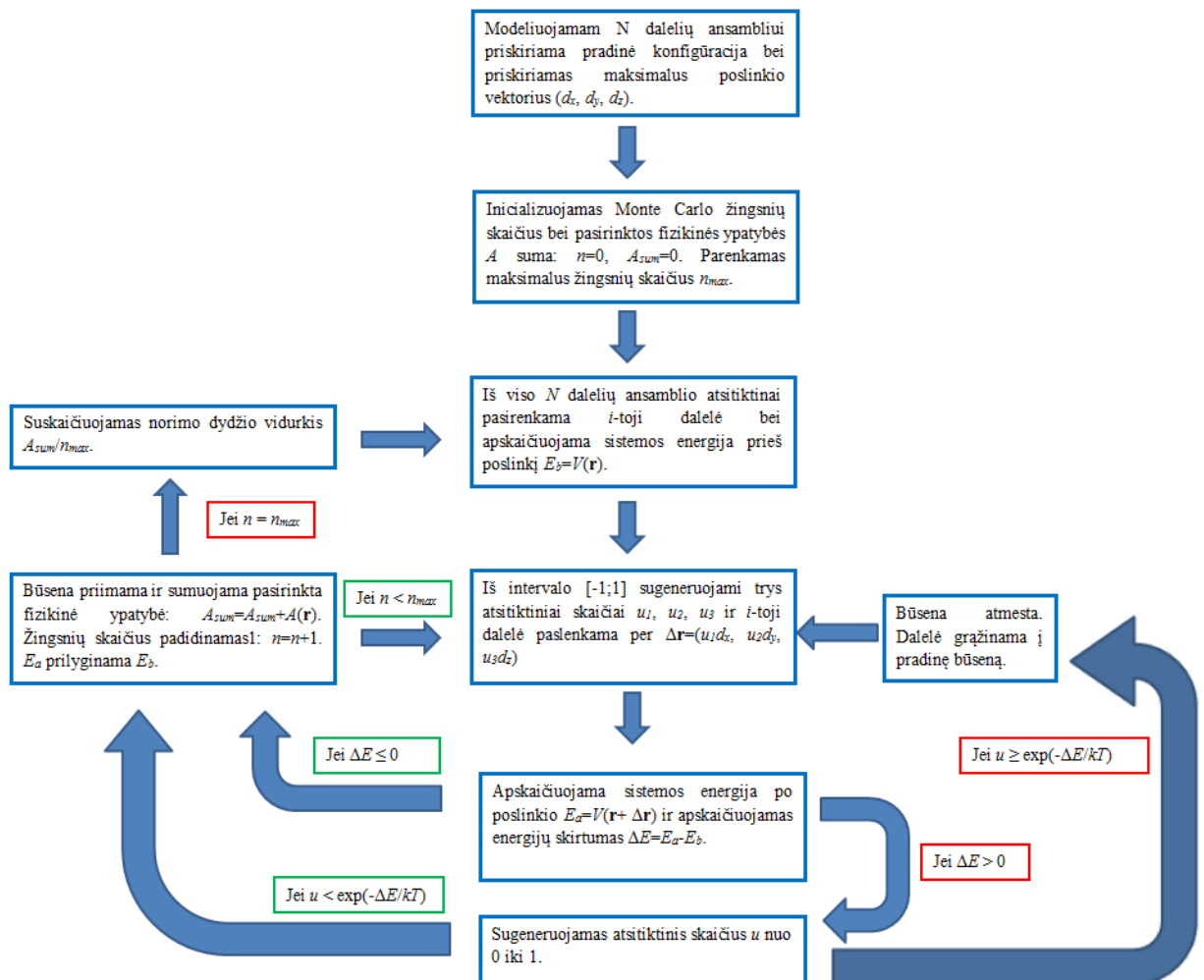
Yra skiriamos dvi Monte Carlo algoritmų rūšys - tai klasikiniai ir kinetiniai Monte Carlo algoritmai [39]. Šiame skyrelyje aptarsiu jų pagrindines ypatybes ir skirtumus.

7.1. Klasikinis Monte Carlo algoritmas

Vienas svarbiausių ir geriausiai žinomų klasikinių Monte Carlo algoritmų yra Metropolisio algoritmas. Jame perėjimo tarp dviejų būsenų tikimybė priklauso nuo energijų skirtumo tarp pradinės ir galinės būsenų. Algoritmas pažingsniui atrodo šitaip [40]:

- 1) Modeliuojamam N dalelių ansambliu priskiriama pradinė konfigūracija.
- 2) Priskiriamas maksimalus poslinkio vektorius (d_x, d_y, d_z) .
- 3) Inicializuojamas Monte Carlo žingsnių skaičius bei pasirinktos fizikinės ypatybės A suma: $n=0$, $A_{sum}=0$.
- 4) Iš viso N dalelių ansamblio atsitiktinai pasirenkama i -toji dalelė.
- 5) Apskaičiuojama sistemos energija prieš poslinkį $E_b=V(\mathbf{r})$.
- 6) Iš intervalo $[-1;1]$ sugeneruojami trys atsitiktiniai skaičiai u_1, u_2, u_3 .
- 7) i -toji dalelė paslenkama per $\Delta\mathbf{r}=(u_1d_x, u_2d_y, u_3d_z)$.
- 8) Apskaičiuojama sistemos energija po poslinkio $E_a=V(\mathbf{r}+\Delta\mathbf{r})$.
- 9) Apskaičiuojamas energijų skirtumas $\Delta E=E_a-E_b$.
 - 9.1) Jei $\Delta E \leq 0$, nauja būsena priimama.
 - 9.2) Jei $\Delta E > 0$:
 - 9.2.1) Sugeneruojamas atsitiktinis skaičius u nuo 0 iki 1.
 - 9.2.2) Būsena priimama tik tokiu atveju, jei $u < \exp(-\Delta E/kT)$.
- 10) Jei būsena buvo atmesta, dalelė grąžinama į pradinę būseną.

- 11) Kiekvienoje būsenoje sumuojama pasirinkta fizikinė ypatybė: $A_{sum}=A_{sum}+A(\mathbf{r})$.
- 12) Ties kiekviena būsena žingsnių skaičius padidinamas 1: $n=n+1$.
- 13) Pasiekus maksimalų pasirinktą žingsnių skaičių n_{max} , grįžtama į 4) punktą.
- 14) Pabaigus modeliavimą suskaičiuojamas norimas vidurkis A_{sum}/n_{max} .



7.1 pav. Klasikinio Monte Carlo metodo blokinė schema.

Iš čia išplaukia pora išvadų:

1. Atomų greičiai ar jėgos tarp atomų modelyje nėra įskaitomi.
2. Nepaisant to, kad yra skaičiuojami Monte Carlo modeliavimo žingsniai n , nėra neaišku, kaip jie susiję su realia laiko skale, tad laikas modelyje taip pat nefigūruoja.

Taigi, tampa akivaizdu, kad norint modeliuoti sistemą su laikine evoliucija, yra reikalingas kitoks algoritmas.

7.2. Kinetinis Monte Carlo algoritmas

Siekiant modeliuoti sistemas su laikine evoliucija, šeštajame praeito amžiaus dešimtmetyje buvo pasiūlytas kinetinis Monte Carlo algoritmas [39]. Yra skiriamos dvi pagrindinės šio algoritmo modifikacijos, kurias šiame skyrelyje ir apžvelgsiu.

7.2.1. Kinetinis Monte Carlo algoritmas su atmetimu

Pats paprasčiausias kinetinis Monte Carlo algoritmas remiasi įvykių atmetimu [41]:

- 1) Inicializuojamas laikas $t=0$ ir pasirenkamas laikinis žingsnis.
- 2) Iš intervalo $[0; N)$ yra išsirenkamas atsitiktinis skaičius r . Čia N atitinka galimų įvykių skaičių.
- 3) Suskaičiuojamas naujas skaičius $n=\text{Int}(r)+1$. Čia operacija Int atitinka sveikosios skaičiaus dalies ėmimą.
- 4) Jei $n-r < k_n/k_{max}$, įvykis pasirenkamas. k_n atitinka n -tojo įvykio spartą arba tikimybę jam įvykti, k_{max} - maksimalią spartos arba tikimybės vertę. Tikimybių atveju, tikimybė k_n priklauso nuo pasirinkto laikinio žingsnio.
- 5) Algoritmas kartojamas tol, kol galiausiai įvykis pasirenkamas.

Kai yra daug įvykių su stipriai išsibarsčiusiomis spartų vertėmis, toks algoritmas veikia lėtai, nes paprastai daug įvykių yra atmetama iki tol, kol kuris nors vienas yra pasirenkamas.

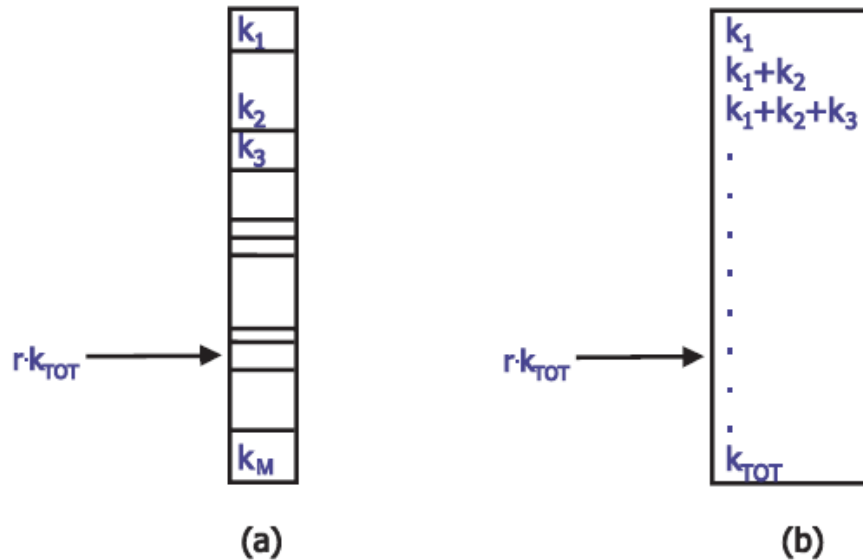
7.2.2. Kinetinis Monte Carlo algoritmas be atmetimo

Alternatyva prieš tai aptartam algoritmui yra kinetinis Monte Carlo algoritmas be atmetimo. Šiame algoritme kiekvieno žingsnio metu vienas iš įvykių būtinai įvyksta:

- 1) Pirmiausia skaičiuojama N galimų įvykių spartų suma $K = \sum_{n=1}^N k_n$, kiekviename sumavimo žingsnyje išsaugant dalines sumas K_n .
- 2) Pasirenkamas atsitiktinis skaičius r iš intervalo $[0; K)$.
- 3) Pagal sąlygą $K_{n-1} \leq r < K_n$ ieškoma, kuri įvykį atitinka pasirinktas atsitiktinis skaičius. Įvykio pasirinkimas pagal šią sąlygą pavaizduotas 7.2 pav.

4) Pasirenkamas įvykis n .

5) Metamas atsitiktinis skaičius p iš intervalo $[0; 1)$ ir laikas evoliucionuoja per žingsnelį $\Delta t = 1/K \cdot \ln(1/p)$ [39].



7.2 pav. Įvykio pasirinkimas, kai dalinės sumos yra atvaizduojamos skirtingo aukščio stačiakampiais (a) ir kaip analogiška situacija atrodo kompiuterio kode (b) (paimta iš [39]).

8. Modeliavimo rezultatų tikslumo įvertinimas

Monte Carlo metodas yra skaičiavimo algoritmas, pagrįstas statistiniu modeliavimu ir gautų rezultatų apdorojimu statistiniais metodais. Šiame metode, stochastinis bandymas yra atliekamas daug kartų ir iš kiekvieno tokio bandymo gaunamas dominančio dydžio x įvertis. Atlikus kelis tokius bandymus, galima apskaičiuoti dominančio dydžio vidurkį (8.1) ir dispersiją (8.2).

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i. \quad (8.1)$$

$$S^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2. \quad (8.2)$$

Čia $\{x_i\}$ yra kiekvieno bandymo metu gaunamas dydžio x įvertis, o N yra atliktų bandymų skaičius.

Norint surasti galutinį dydžio x įvertinimą, atsižvelgiant į statistines paklaidas, yra naudojama centrinės ribos teorema [42].

$$x = \bar{x} \pm \frac{S}{\sqrt{N}}. \quad (8.3)$$

Taigi, akivaizdu, kad iš Monte Carlo modeliavimo gauti rezultatai visuomet pasižymi statistinėmis paklaidomis. Paklaidos dydis labai priklauso nuo to, kiek kartų stochastinis bandymas yra kartojamas, t.y. paklaida gali būti gerokai sumažinta didinant bandymų skaičių. Verta paminėti, kad paklaida yra atvirkščiai proporcinga šakniai iš bandymų skaičiaus, kaip matyti iš formulės (8.3), todėl, norint ją sumažinti per pusę, atliekamų bandymų skaičių reikėtų padidinti keturis kartus. Turint omeny, kad Monte Carlo metodas yra labai intensyvus skaičiavimų požiūriu, norint sumažinti tiriamo dydžio paklaidą iki norimos vertės, gali tekti stipriai padidinti skaičiavimų apimtį, o kartu ir laiką, per kurį modeliavimas bus atliktas. Ir netgi didinant bandymų skaičių, paklaida gali būti tik sumažinta, bet nepanaikinta.

Nepaisant to, kad dydžio x vidurkis, gautas iš Monte Carlo modeliavimo, yra geriausias realios x vertės įvertis, bet iš esmės jis nėra lygus tikrajai vertei dėl paklaidų. Tokiu atveju tampa svarbu surasti intervalą, kuriame su tam tikra tikimybe bus tikroji dydžio x vertė. Šis intervalas literatūroje vadinamas pasikliautiniu intervalu [43]. Remiantis centrinės ribos teorema ir Stjudento t -skirstiniu, galima gauti pasikliautinius tikrosios dydžio x vertės intervalus, kuriuose su pasirinkta tikimybe bus tikroji x vertė.

Tarkime x_1, x_2, \dots, x_N yra N atsitiktiniu bandymu gautų verčių rinkinys iš normaliojo skirstinio su vidurkiu μ ir standartiniu nuokrypiu σ . Tuomet sudaromas atsitiktinis dydis t :

$$t = \frac{\bar{x} - \mu}{S} \sqrt{N}. \quad (8.4)$$

Čia \bar{x} yra imties vidurkis, o S - imties standartinis nuokrypis.

Atsitiktinis dydis t yra pasiskirstęs pagal Stjudento skirstinį su $N-1$ laisvės laipsnių ir priklauso tik nuo imties tūrio N , bet nepriklauso nei nuo vidurkio μ , nei nuo standartinio nuokrypio σ . Šis skirstinys yra simetrinis nulinio atžvilgiu ir didinant laisvės laipsnių skaičių N artėja prie normaliojo skirstinio.

Imties vidurkis \bar{x} yra geriausias tikrosios vertės μ įvertis, tačiau dėl statistinės paklaidos jis gali būti nelygus μ . Iš t -skirstinio galima gauti pasikliautinąjį intervalą, kuriame su tam tikra tikimybe c galima tikėtis rasti tikrąją vertę μ . Kadangi dydis t yra pasiskirstęs pagal Stjudento skirstinį, tai tikimybė, kad vertė t bus tarp šio skirstinio $0.5(1-c)$ procentilio ir $0.5(1+c)$ procentilio

yra lygi [44]:

$$P\left(t_{N-1,0.5(1-c)} \leq \frac{\bar{x} - \mu}{S} \sqrt{N} \leq t_{N-1,0.5(1+c)}\right) = c. \quad (8.5)$$

Kadangi Stjudento skirstinys yra simetriškas nulio atžvilgiu, tai $t_{N-1,0.5(1-c)} = -t_{N-1,0.5(1+c)}$.

Tuomet gauname:

$$\bar{x} - \frac{S}{\sqrt{N}} t_{N-1,0.5(1+c)} \leq \mu \leq \bar{x} + \frac{S}{\sqrt{N}} t_{N-1,0.5(1+c)}. \quad (8.6)$$

Ši lygtis apibrėžia $100c$ procentų pasikliautinąjį intervalą, t.y. tikimybė, kad tikroji vertė μ bus šiame intervale yra lygi $100c$ procentų. Pavyzdžiui, norėdami nustatyti 90% pasikliautinąjį intervalą, tikimybę c prilyginame 0.9. Tuomet $t_{N-1,0.5(1+c)}$ atitinka t vertę, ties kuria suminė Stjudento skirstinio su $N-1$ laisvės laipsnių vertė yra lygi $0.5(1+0.9)$, t.y. 0.95. Žinodami šią vertę pagal (8.6) galime nustatyti 90% pasikliautinąjį intervalą.

9. Netvarkaus 2D puslaidininkio modeliavimas MATLAB terpėje

Modeliuojant homogeninius, nuostovios būsenos reiškinius, tokius kaip difuzija, puslaidininkiuose, pasirodo, užtenka modeliuoti sistemą, sudarytą iš vienintelio krūvininko, tuo tarpu visos, daugelio krūvininkų sistemos elgesys gaunamas tą patį eksperimentą pakartojus daug kartų [9].

Siekiant suprasti, kaip vyksta difuzijos ir rekombinacijos procesai netvarkiuose puslaidininkiniuose dariniuose ir kokią įtaką šiems procesams turi lokalizacija bei gardelės defektai, tokie, kaip dislokacijos, buvo sukurtas Monte Carlo algoritmu pagrįstas modelis. Jame modeliuojamas vienos dalelės judėjimas gardelėje nuo jos sukūrimo iki išnykimo dėl rekombinacijos.

Prieš modeliuojant yra apibrėžiami modeliavimo erdvės matmenys, taip pat sistemai priskiriami tokie parametrai, kaip puslaidininkio draustinių energijų tarpas, nepusiausvirųjų krūvininkų tankis, spindulinės bei nespindulinės rekombinacijos, lokalizacijos/delokalizacijos bei šokavimo „bandymų“ spartos, santykinis lokalizuotų būsenų tankis ir t.t.. Šiame modeliavime naudoti parametrai yra apibendrinti 1 lentelėje.

Kiekviename erdvės narvelyje esti po vieną būseną, kuri gali būti laisva arba lokalizuota.

Kiek turėsime lokalizuotų būsenų, nusako sistemos lokalizuotų būsenų tankis, kurį galima pasirinkti laisvai prieš modeliavimą. Apibrėžus santykinį lokalizuotų būsenų tankį (tikimybę, kad pasirinktame erdvės taške turėsime lokalizuotą būseną), metant atsitiktinį skaičių randama, ar nagrinėjama būseną bus lokalizuota. Veiksmą pakartojus visiems modeliuojamos erdvės taškams, gaunamas erdvinis lokalizuotų ir laisvų būsenų pasiskirstymas modeliuojamoje sistemoje.

Sugeneravus lokalizuotų būsenų erdvinį pasiskirstymą, kiekvienai lokalizuotai būsenai randamos kitos lokalizuotos būsenos penkių lokalizacijos ilgių α atstumu - tai būsenos, į kurias leisime šuolius pagal Miller-Abrahams modelį, aptartą 3.3. skyrelyje. Pagal šį modelį suskaičiuojamos visos šuolių spartos.

Jei modeliuojama situacija su dislokacijomis, tai modeliuojamoje erdvėje apibrėžiama sritis, kurioje yra dislokacija ir yra pakeičiami joje esančius narvelius atitinkančioms būsenoms būdingi krūvininkų rekombinacijos parametrai.

Galiausiai modeliavimo erdvei yra pritaikomos periodinės kraštinės sąlygos, kad joje judėdama dalelė neišlėktų už erdvės ribų. Kartu periodinės kraštinės sąlygos leidžia turėti sistemą su daug dislokacijų, o atstumas tarp jų gali būti keičiamas tiesiog keičiant pradinės modeliavimo erdvės matmenis.

Modeliavimas prasideda atsitiktinėje modeliuojamos erdvės vietoje sugeneravus dalelę. Šiai dalelei iš Fermi-Dirac pasiskirstymo yra atsitiktiniu būdu suteikiama pradinė energija ir ji paleidžiama judėti. Laikoma, kad kol dalelė yra laisva, ji juda iš anksto užduotu laisvos dalelės judėjimo greičiu ir gali rekombinuoti nespinduliniu būdu arba bimolekuliniu spinduliniu būdu (kaip aprašyta ABC modelyje), o pasiekusi lokalizuotą būseną gali joje lokalizuotis. Jei dalelė lokalizavosi, būdama lokalizuotoje būsenoje ji gali rekombinuoti tiesinės spindulinės rekombinacijos būdu, šuoliuoti į kitas šalimais esančias lokalizuotas būsenas arba delokalizuotis.

Taigi, apibendrinant, šiuo Monte Carlo algoritmu pagrįstu modeliu gali būti modeliuojamas vienos dalelės judėjimas nuo dalelės sukūrimo iki jos išnykimo spindulinės arba nespindulinės rekombinacijos būdu, o modeliavimą kartojant daug kartų gaunamas visos daugiadalelės sistemos elgesys. Tokiu būdu, sumodeliavus sistemą su pasirinktais parametrais, siekiama suskaičiuoti krūvininkų gyvavimo trukmes, difuzijos nuotolius bei vidinius kvantinius našumus - dydžius, kuriuos siekiama nustatyti ir realiuose eksperimentuose, tokiuose, kaip aprašytieji 6-ajame skyrelyje.

Siekiant įsitikinti, ar modelis veikia ir yra patikimas, buvo nuspręsta jo veikimą išbandyti klasikinėse situacijose. Tam tikslui buvo modeliuojamos krūvininkų rekombinacijos kinetikos, krūvininkų difuzijos iš baigtinio šaltinio profiliai bei krūvininkų difuzijos nuotolio priklausomybė nuo jų gyvavimo trukmės sistemoje be lokalizacijos ir dislokacijų.

Nagrinėjant modeliu gautas krūvininkų rekombinacijos kinetikas buvo nustatyta, kad

krūvininkų gyvavimo trukmė, gauta tinkinant kinetikas eksponentine funkcija, yra artima teorinei, suskaičiuotai iš to, kokios spindulinės/nespindulinės rekombinacijos trukmės buvo pateiktos modelyje (9.1 pav. a). Bendra krūvininkų gyvavimo trukmė, esant keliems rekombinacijos mechanizmams (šiuo atvejui spinduliniam ir nespinduliniam), skaičiuojama taip:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_R} + \frac{1}{\tau_{NR}}. \quad (9.1)$$

Čia τ_R yra spindulinės rekombinacijos trukmė, o τ_{NR} - nespindulinės.

Pirmuoju atveju (juoda priklausomybė) buvo paimta, kad spindulinės rekombinacijos trukmė yra 0.5 nanosekundės, o nespindulinės - 1 nanosekundė, tuo tarpu, antruoju atveju (raudona priklausomybė) - tiek spindulinės, tiek nespindulinės rekombinacijos trukmės buvo parinktos po 0.5 nanosekundės. Matyti, kad iš modelių gautų kinetikų nustatytos krūvininkų gyvavimo trukmės gerai atitinka apskaičiuotas teoriškai.

Toliau buvo nagrinėjami krūvininkų difuzijos iš baigtinio šaltinio profiliai. Yra žinoma, kad krūvininkų tankis, esant difuzijai iš baigtinio šaltinio, yra aprašomas Gauso funkcija kintamųjų laiko ir koordinatės atžvilgiu [45]:

$$N(x, t) = \frac{Q}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(\frac{-x^2}{4Dt}\right). \quad (9.2)$$

Čia Q - normavimo daugiklis, atitinkantis dalelių skaičių į ploto vienetą iš karto po injekcijos, o D - difuzijos koeficientas.

Buvo palyginti du difuzijos profiliai, gauti iš to paties modeliavimo. Pirmasis profilis fiksuotas praėjus 200 santykinių laiko vienetų po injekcijos, o antrasis - 400 santykinių laiko vienetų. Abu profiliai buvo tinkinti Gauso funkcija ir buvo pastebėta, kad abu yra gana gerai ja aprašomi (9.1 pav. b). Kadangi abu profiliai gauti iš to paties modeliavimo, galima laikyti, kad difuzijos koeficientas D yra tas pats. Tada profilių amplitudžių santykis turėtų būti atvirkščias šakniai iš laiko tarpų nuo injekcijos santykio. Kitaip, sakant, antrojo profilio amplitudė turėtų būti $\sqrt{2} \approx 1.41$ karto mažesnė nei pirmojo. Tinkinus profilius Gauso funkcija gautas geras atitikimas su teorija (santykis tarp amplitudžių gautas apie 1.42). Tuo tarpu eksponentės vardiklių santykis turėtų būti lygus laikų santykiui. Vėl gi, iš tinkinimo gautas santykis ir teorinis santykis buvo gauti labai artimi (atitinkamai - 2.02 ir 2).

Galiausiai buvo patikrinta klasikinė formulė, siejanti krūvininkų difuzijos nuotolį ir jų

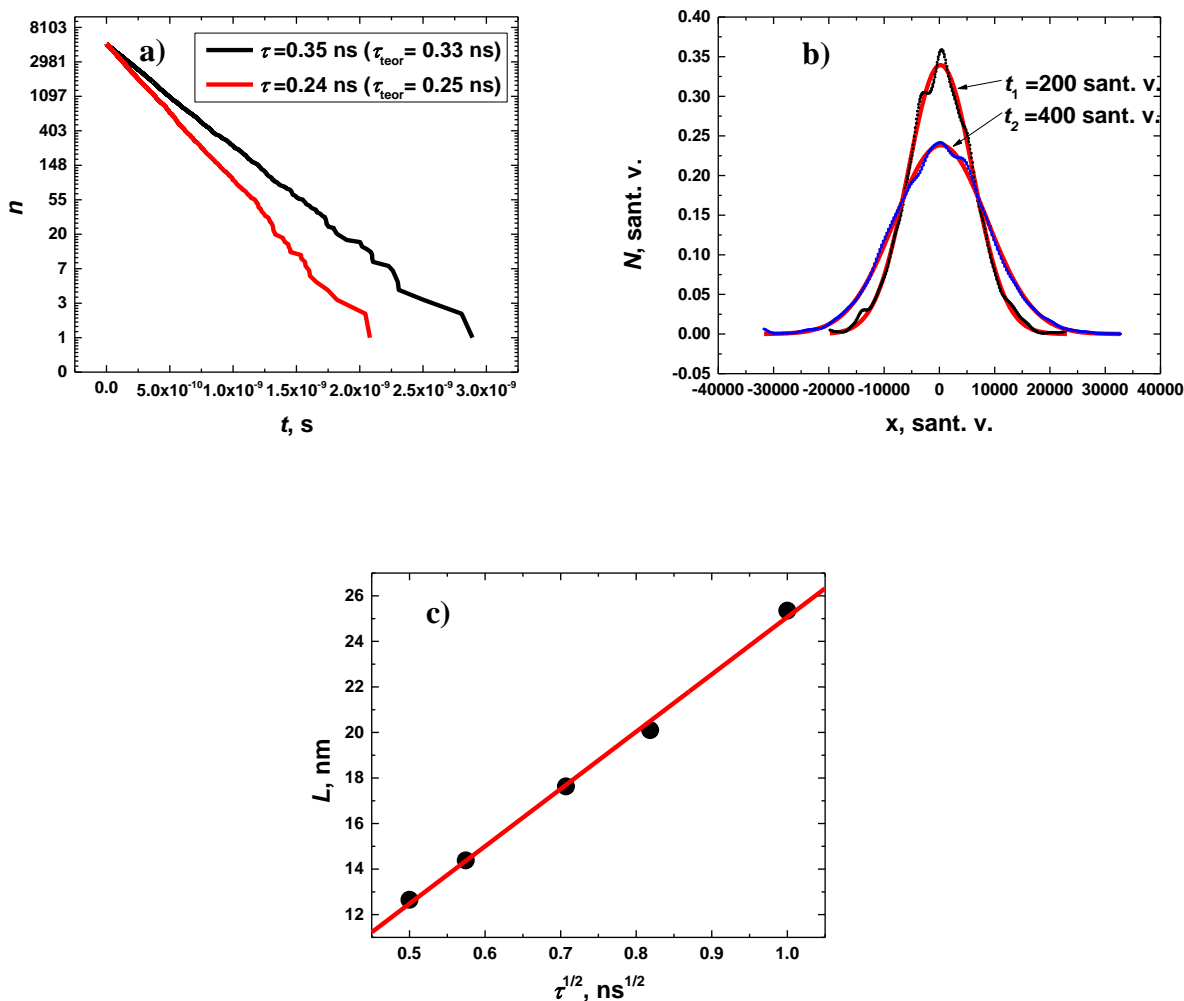
gyvavimo trukmę [46]:

$$L = \sqrt{D\tau} . \quad (9.3)$$

Čia D - krūvininkų difuzijos koeficientas, o τ - krūvininkų gyvavimo trukmė.

Formulei patikrinti buvo atlikti keli modeliavimai, kai modelyje krūvininkams priskiriamos skirtingos gyvavimo trukmės, o visos kitos sąlygos išlieka tos pačios. Natūralu tikėtis, kad difuzijos koeficientas visai atvejais bus vienodas, tad atidėjus krūvininkų difuzijos nuotolį, kaip funkciją nuo šaknies iš gyvavimo trukmės, turėtume gauti tiesinę priklausomybę. Kadangi priklausomybė išties gauta tiesinė (9.1 pav. c), tai galima teigti, kad modelis ir šioje situacijoje veikia tinkamai.

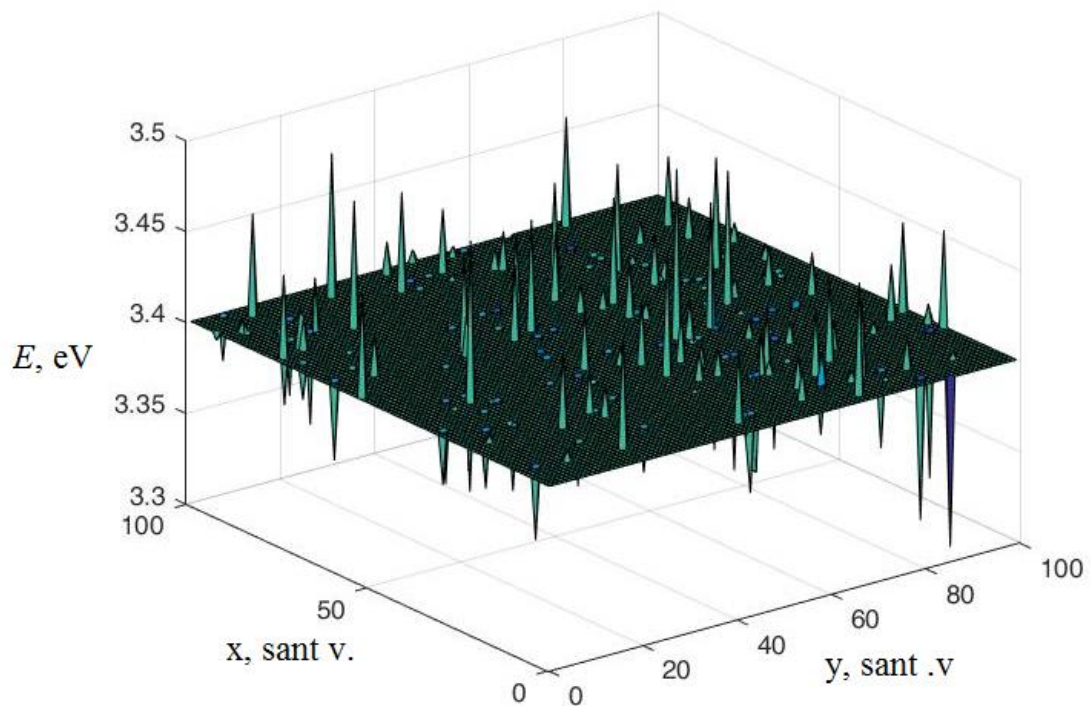
Taigi, patikrinus modelį šiose trijose klasikinėse situacijose gauti rezultatai gerai atitinka teorinius ir galima teigti, kad modelis yra patikimas.



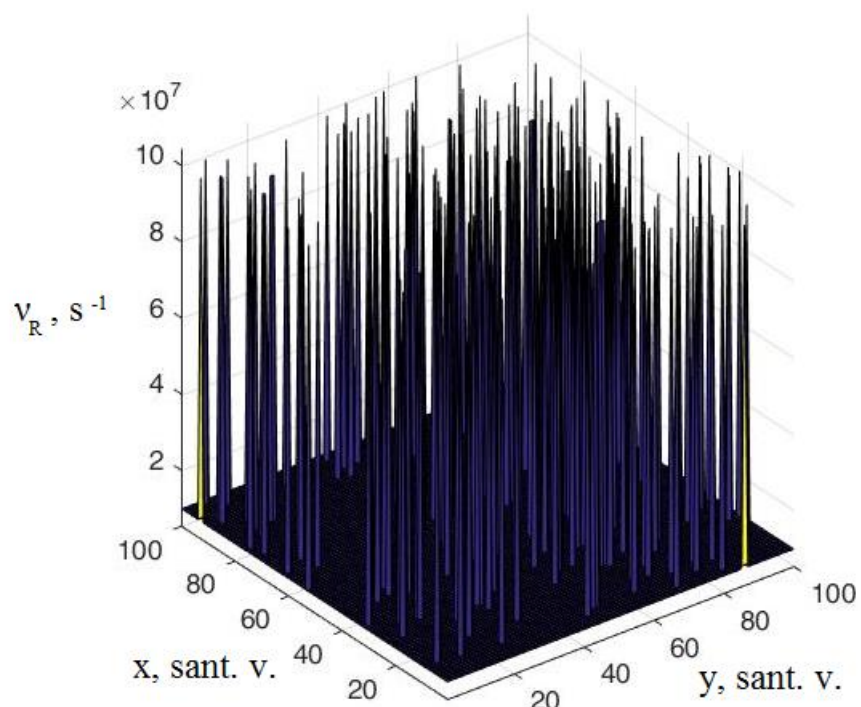
9.1 pav. Modelio veikimo patikrinimas klasikiais atvejais.

Darbe buvo modeliuojamos kelios situacijos - sistema be lokalizuotų būsenų ir dislokacijų, sistema su lokalizuotomis būsenomis bet be dislokacijų, bei tie patys atvejai, tik jau su dislokacijomis. Modeliuojant buvo keičiami atstumai tarp dislokacijų, lokalizacijos gylis bei dalelės judėjimo greitis. Reikia paminėti, kad dalelės greičio keitimas šiuo atveju yra tolygus jos judrio varijavimui.

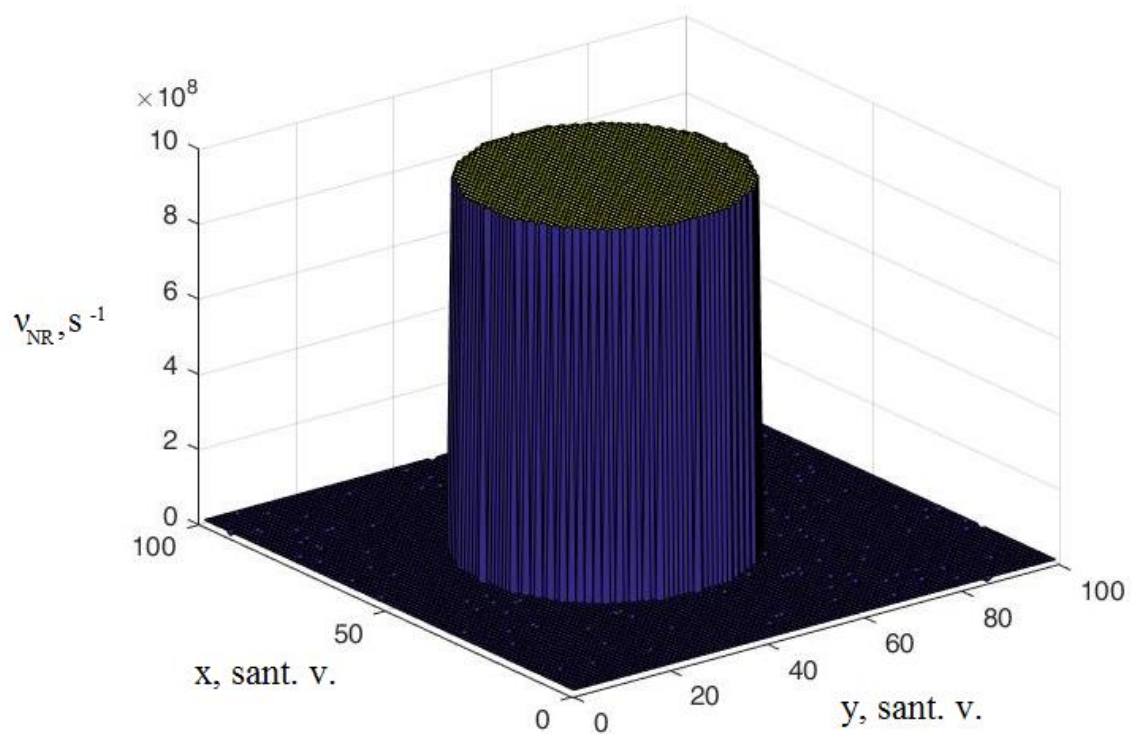
Norint iliustruoti, kokią įtaką lokalizuotos būsenos ir dislokacijos turi modeliuojamai sistemai, yra pateikti trys pavyzdiniai paveikslėliai: 9.2 pav. pavaizduota, kaip lokalizuotų būsenų energijos yra pasiskirsčiusios draustinių energijų tarpo energijos atžvilgiu. Į tokią būseną lokalizavusis dalelė, laikoma, kad iš karto termalizuoja ir jos energija tampa lygi tos būsenos energijai. 9.3 paveikslėlyje parodyta, kaip pasiskirsčiusi spindulinės rekombinacijos sparta skirtingose energijos vietose. Lokalizuotose būsenose spindulinės rekombinacijos sparta pasirinkta gerokai didesnė [7], todėl smailės paveiksluke atitinka lokalizuotas būsenas. Galiausiai, 9.4 pav. parodyta, kaip pasiskirsčiusi nespindulinės rekombinacijos sparta skirtingose erdvės vietose. Erdvės centre matyti daug didesnės nespindulinės rekombinacijos sritis, kuri atitinka skritulio formos dislokaciją.



9.2 pav. Lokalizuotų būsenų energijos erdvinis pasiskirstymas draustinių energijų tarpo energijos atžvilgiu.



9.3 pav. Spindulinės rekombinacijos spartos erdvinis pasiskirstymas.



9.4 pav. Nespindulinės rekombinacijos spartos erdvinis pasiskirstymas.

1 lentelė. Modeliuojamos sistemos parametrai

Parametras	Vertė
P_{loc}	~0,02
N	10^{18} cm^{-3}
E_g	3,4 eV
α	5 nm
v_0	10^{12} s^{-1}
kT	0.025 eV
A	10^7 s^{-1}
B	$10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$
τ_{RL}	10 ns
Δt	1 ps
t_{loc}	1 ps
r_{disl}	100 nm

Čia P_{loc} atitinka tikimybę, kad taškas erdvėje atitiks lokalizuotą būseną, N - krūvininkų tankį, E_g - draustinių energijų tarpą, α - lokalizacijos ilgį, v_0 - šokavimo „bandymų“ spartą, kT - šiluminę energiją kambario temperatūroje, A, B - spindulinės/nespindulinės rekombinacijos koeficientus iš vadinamojo ABC modelio, τ_{RL} - tiesinės spindulinės rekombinacijos iš lokalizuotų būsenų trukmę, Δt - laiko žingsnį, t_{loc} - lokalizacijos trukmę, kuri yra atvirkštinis dydis 1-ajame skyriuje apibrėžtai spartai v_{loc} . Modelyje laikoma, kad t_{loc} ir t_{deloc} yra vienodi, nors bendru atveju jie gali būti skirtingi. r_{disl} yra efektyvusis dislokacijos spindulys, kurio dydis parinktas 100 nm [47].

Modelis yra kinetinio Monte Carlo metodo su atmetimu ir kinetinio Monte Carlo metodo be atmetimo mišinys. Atmetimas reikalingas todėl, kad lokalizacija yra labai greitas procesas lyginant su rekombinacija, todėl jis apsprendžia laikinio žingsnio dydį, o kadangi šis laikas yra labai trumpas, yra nemaža tikimybė, kad per jį neįvyks nei vienas įvykis - nei lokalizacija, nei rekombinacija.

Toliau pažingsniui pateikiamas programos algoritmas:

1. Sukuriama dvimatė erdvė, kurios kiekvienas narvelis atitinka atskirą būseną (9.5 pav. a, b)).
2. Sistemai priskiriami 1 lentelėje pateikti parametrai.
3. Erdvėje sugeneruojamos būsenos, kurių dalis yra lokalizuotos, o dalis - laisvos (9.5 pav. c).
4. Į sistemą įvedama dislokacija (9.5 pav. d).

5. Modeliavimo erdvei pritaikomos periodinės kraštinės sąlygos (9.5 pav. e)

6. Kiekvienai lokalizuotai būsenai surandamos kaimyninės lokalizuotos būsenos, į kurias gali vykti šuoliai pagal Miller-Abrahams modelį (9.5 pav. f). Kaip matyti, kaimyninės lokalizuotos būsenos ieškomos pradinėje modeliavimo erdvėje, atsižvelgiant į periodines kraštines sąlygas.

7. Inicializuojamas pradinis momentas laike $t=0$ ir pradedamas Monte Carlo ciklas (vienas pilnas ciklas atitinka dalelės judėjimo simuliaciją nuo jos sukūrimo iki išnykimo).

8. Atsitiktiniame erdvės taške yra sugeneruojama dalelė su atsitiktine energija E_0 iš Fermi-Dirac pasiskirstymo.

9. Tikrinama ar dalelė yra virš lokalizuotos būsenos.

9.1. **Kinetinis Monte Carlo metodas su atmetimu:** jei dalelė yra virš lokalizuotos būsenos, ji turi tikimybę lokalizuotis arba rekombinuoti spinduliniu arba nespinduliniu būdu (9.5 pav. g). Tikimybė, kad įvyks bent vienas iš šių įvykių per laiko žingsnį Δt gali būti išreikšta tokiu būdu:

$$P = 1 - \exp(-v_{sum} \Delta t). \quad (6.1)$$

Čia v_{sum} atitinka visų galimų įvykių spartų sumą.

Ar įvykis įvyko nusprendžia išmestas atsitiktinis skaičius r iš intervalo $[0;1)$. Jei $r < P$, tai laikoma, kad vienas iš įvykių įvyko.

Tuo tarpu, jei dalelė nėra virš lokalizuotos būsenos, pereinama prie 9.2. punkto.

9.1.1. Jei joks įvykis neįvyko, dalelė lieka laisva ir gali pasislinkti į bet kokią vietą erdvėje, apribotoje apskritimo, kurio spindulys $r = \Delta t \cdot v$. Čia v atitinka laisvos dalelės greitį. Atnaujinama dalelės pozicija, o laikas pasislenka per žingsnelį Δt : $t = t + \Delta t$. Programa tęsiama nuo 9 punkto.

9.1.2. **Kinetinis Monte Carlo metodas be atmetimo:** jei vienas iš įvykių įvyko, metant atsitiktinį skaičių ieškoma, kuris įvykis įvyko.

9.1.2.1. Jei nustatyta, kad dalelė rekombinavo nespinduliniu būdu, išsaugoma jos pozicija ir laikas t , o jei rekombinavo spinduliniu būdu dar išsaugoma ir išspinduliuoto fotono energija, kuri yra lygi iki tol dalelės turėtai energijai. Ciklas baigiamas - pradedama iš naujo nuo 7 punkto.

9.1.2.2. **Kinetinis Monte Carlo metodas be atmetimo:** jei nustatyta, kad dalelė lokalizavosi, tai laikoma, kad lokalizuotoje būsenoje ji akimirksniu termalizuojasi ir jos energija tampa lygi tos būsenos energijai E_{lok} . Lokalizuotoje būsenoje ji gali rekombinuoti spinduliniu būdu, šokti į vieną iš kaimyninių lokalizuotų būsenų arba delokalizuootis (9.5 pav. h).

9.1.2.2.1. Jei nustatyta, kad dalelė rekombinavo spinduliniu būdu, išsaugoma jos pozicija, laikas t ir išspinduliuoto fotono energija, kuri yra lygi lokalizuotos būsenos energijai. Ciklas baigiamas - pradedama iš naujo nuo 7 punkto.

9.1.2.2.2. Jei nustatyta, kad dalelė šoko į kitą lokalizuotą būseną, atnaujinama jos pozicija, o

laikas pasislenka per žingsnelį $\Delta t = 1/v_{sum} \ln(1/p)$. Programa tęsiama nuo 9 punkto.

9.1.2.2.3. Jei nustatyta, kad dalelė delokalizavosi, laikas pasislenka per žingsnelį $\Delta t = 1/v_{sum} \ln(1/p)$. Programa tęsiama nuo 9 punkto.

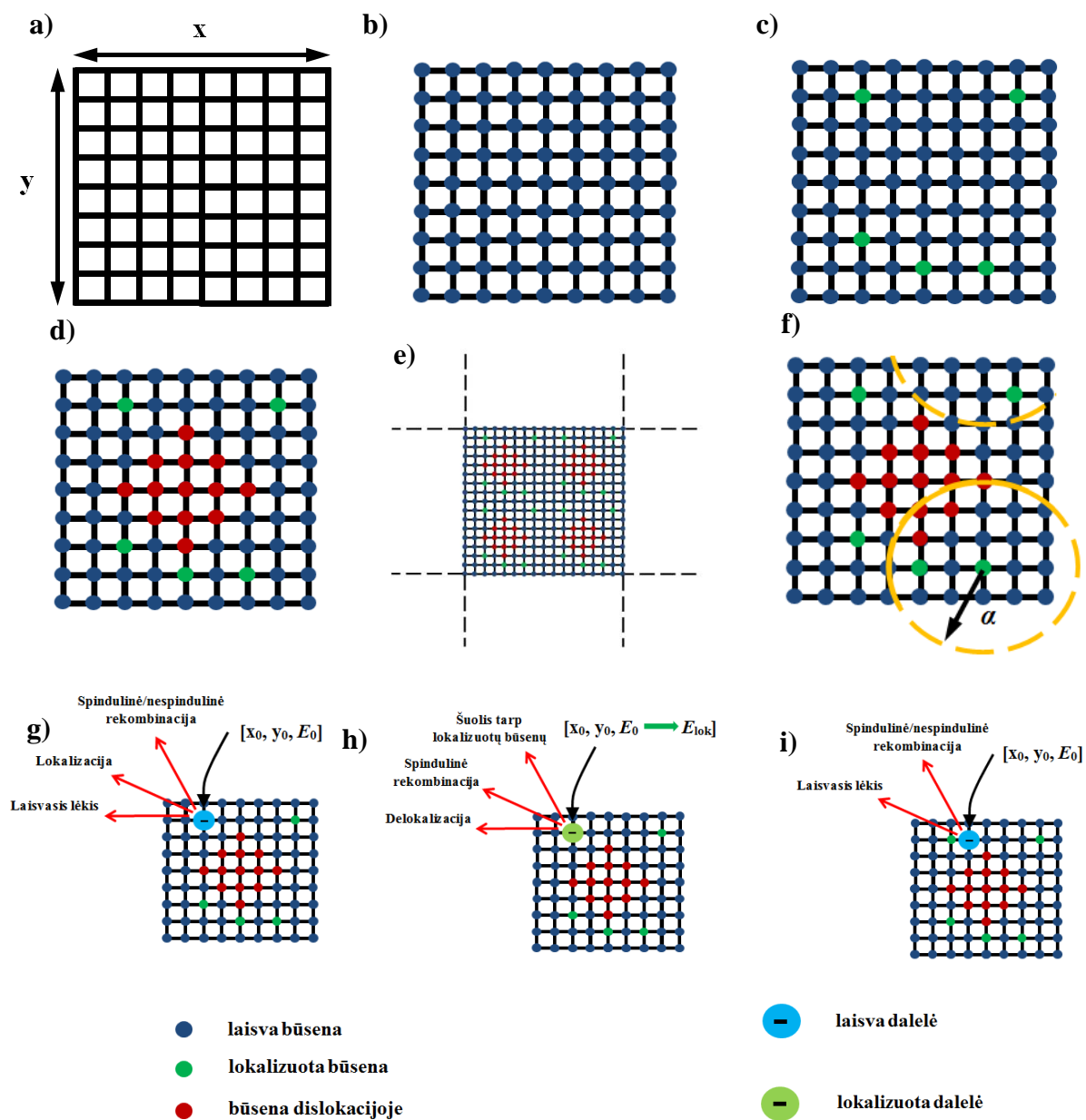
9.2. Jei dalelė nėra virš lokalizuotos būsenos, ji turi tikimybę rekombinuoti spinduliniu arba nespinduliniu būdu (9.5 pav. i). Tikimybė, kad įvyks bent vienas iš šių įvykių aprašoma 6.1 formule.

9.2.1. Jei joks įvykis neįvyko, dalelė lieka laisva ir gali pasislinkti į bet kokią vietą erdvėje, apribotoje apskritimo, kurio spindulys $r = \Delta t \cdot v$. Atnaujinama dalelės pozicija, o laikas pasislenka per žingsnelį Δt : $t = t + \Delta t$. Programa tęsiama nuo 9 punkto.

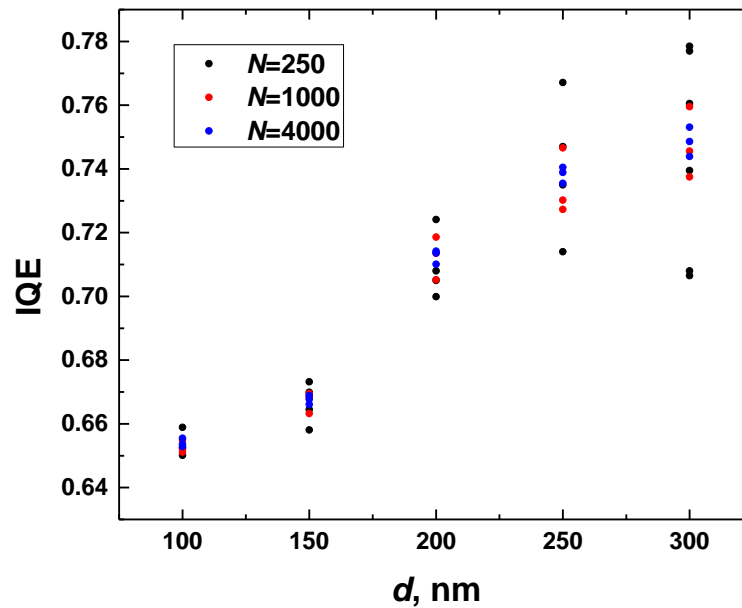
9.2.2. Jei nustatyta, kad dalelė rekombinavo nespinduliniu būdu, išsaugoma jos pozicija ir laikas t , o jei rekombinavo spinduliniu būdu dar išsaugoma ir išspinduliuoto fotono energija, kuri yra lygi iki tol dalelės turėtai energijai. Ciklas baigiamas - pradedama iš naujo nuo 7 punkto.

Pastaba: Modelyje taip pat fiksuojama, kiek dalelių rekombinavo spinduliniu būdu, o kiek - nespinduliniu.

Prieš atliekant pagrindinius modeliavimus buvo nutarta patikrinti, kaip modeliuojamų rezultatų tikslumas priklauso nuo kiekvienam modeliavime atliekamų bandymų skaičiaus. Modeliuojama sistema buvo be lokalizacijos su nedidelėmis, 10 nm spindulio dislokacijomis. Modeliavimai buvo atlikti su skirtingais imties dydžiais: $N=250, 1000, 4000$ ir kartojami po kelis kartus. Iš modeliavimų buvo gautos sistemos vidinio kvantinio našumo priklausomybės nuo atstumo tarp dislokacijų (9.6 pav.). Matyti, kad esant mažam imties dydžiui, vertės yra smarkiai išsibarsčiusios, bet didinant imtį išsibarstymas vis mažėja.



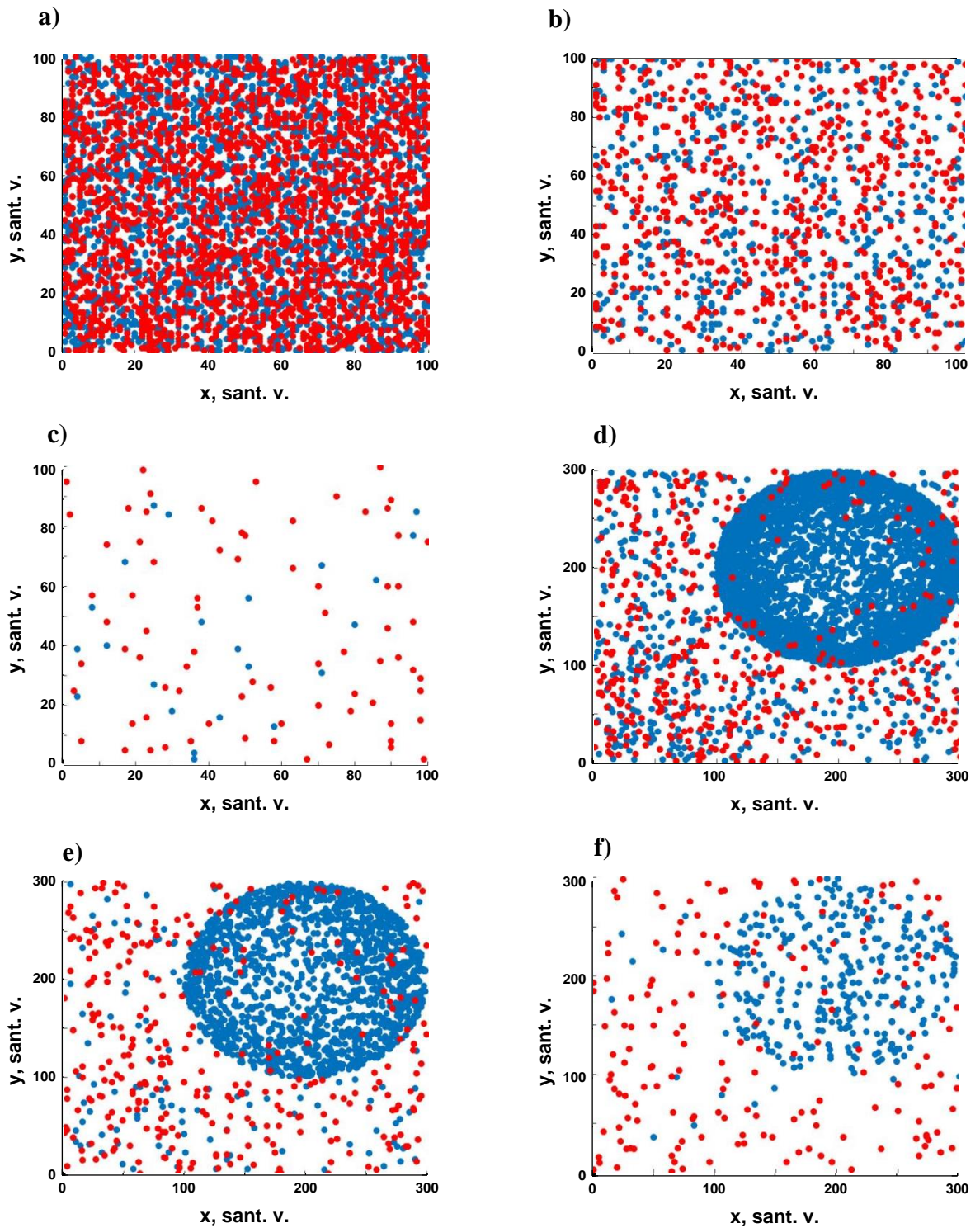
9.5 pav. Programas veikimo ilustrācija.



9.6 pav. Sistemos vidinio kvantinio našumo priklausomybė nuo atstumo tarp dislokacijų ties skirtingais imties dydžiais.

Atsižvelgus į gautus rezultatus ir įvertinus, kad jau ties $N=4000$ gaunami mažai išsibarstę rezultatai, pagrindiniams modeliavimams buvo pasirinkta naudoti imtį $N=5000$. Reikia paminėti, kad modeliuojant sistemą su lokalizacija, imties dydis buvo pasirinktas mažesnis, nes į modelį pridėjus lokalizaciją žymiai išauga modeliavimo trukmė, todėl, natūralu, rezultatai gauti modeliuojant sistemas su lokalizacija yra šiek tiek mažiau patikimi. Galiausiai, siekiant atsižvelgti į statistines paklaidas, pagal 8 skyrelyje aprašytą Stjudento metodiką buvo nuspręsta, kad sumodeliavus norimus rezultatus jiems dar bus apskaičiuoti 95% pasikliautinieji verčių intervalai.

Atlikus modeliavimą gauti spindulinės ir nespindulinės rekombinacijos įvykių erdviniai pasiskirstymai situacijose, atitinkančiose sistemą su ir be dislokacijų ir su skirtingo stiprumo lokalizacija (9.7 pav.).



9.7 pav. Erdvinis rekombinacijos vyksmų skirstinys situacijoje be dislokacijos: be lokalizacijos (a) bei su vidutine ($\sigma=40$ meV) (b) ir stipria ($\sigma=120$ meV) (c) lokalizacija bei su dislokacijomis: be lokalizacijos (d) bei su vidutine ($\sigma=40$ meV) (e) ir stipria ($\sigma=120$ meV) (f) lokalizacija. Mėlyni taškai atitinka nespindulinės rekombinacijos vyksmus, o raudoni - spindulinės.

Iš 9.7 pav. matyti, kad, nesant dislokacijų ir lokalizacijos, spindulinės ir nespindulinės rekombinacijos vyksmai yra pasiskirstę erdvėje homogeniškai, bet pridėdant lokalizaciją ir ją stiprinant, vis daugiau rekombinacijos vyksmų vyksta konkrečiose erdvės vietose, t.y. lokalizuotose būsenose. Analogiška situacija yra ir esant dislokacijai. Jei nesant lokalizacijos dislokacijoje rekombinavo didelė dalis dalelių, o aplink dislokaciją vyksmų pasiskirstymas buvo homogeniškas, tai didinant lokalizaciją vis mažiau dalelių rekombinavo dislokacijoje ir vis daugiau - lokalizuotose būsenose.

Iš modeliavimų buvo gautos krūvininkų rekombinacijos kinetikos įvairiems nagrinėtiems atvejams (9.8 pav.), o tinkinant kinetikas eksponentine funkcija buvo gautos krūvininkų gyvavimo trukmės kiekvienoje situacijoje.

Matyti, kad nesant lokalizacijos krūvininkų gyvavimo trukmės ilgėja didėjant atstumui tarp dislokacijų (arba, kitaip sakant, mažėjant dislokacijų tankiui). Taip yra, nes didinant atstumą tarp dislokacijų vis mažiau dalelių pasiekia jas, be to, mažėja santykinis dislokacijų plotas gardelėje, tad mažiau dalelių įkrenta į jų ribojamą sritį pačioje modeliavimo pradžioje (9.8 pav. a).

Jei nėra dislokacijų, krūvininkų gyvavimo trukmės mažėja stiprėjant lokalizacijai (9.8 pav. b). Taip yra dėl to, kad kuo stipresnė lokalizacija, tuo ilgesnį laiką krūvininkai praleidžia lokalizuoti, o kadangi lokalizuotose būsenose krūvininkų spindulinės rekombinacijos sparta didesnė, tai natūralu, kad lokalizuotose būsenose jie gyvuoja trumpiau. Be to, verta atkreipti dėmesį, kad nuo tam tikros ribos, net stiprinant lokalizaciją, krūvininkų gyvavimo trukmės nebesikeičia. Taip yra todėl, kad tais atvejais barjerai lokalizuotose būsenose yra pakankamai aukšti ir dauguma krūvininkų rekombinuoja neištrūkę iš lokalizuotų būsenų, todėl tolimesnis barjero didinimas pastebimo efekto nebeduotų.

Galiausiai matyti, kad atstumas tarp dislokacijų vaidina svarbų vaidmenį krūvininkų rekombinacijos trukmei tik tol, kol lokalizacija silpna (9.8 pav. c), tačiau lokalizacijai stiprėjant, krūvininkų rekombinacijos kinetikos tampa vis labiau ir labiau panašios (9.8 pav. d,e). Taigi, galima sakyti, kad kuo stipresnė lokalizacija, tuo mažesnis ribinis atstumas tarp dislokacijų yra reikalingas, kad dalelės jų nebejaustų, t.y. turint stiprią lokalizaciją galima turėti didesnę dislokacijų tankį ir nejausti jo sukiamų efektų (9.8 pav. f).

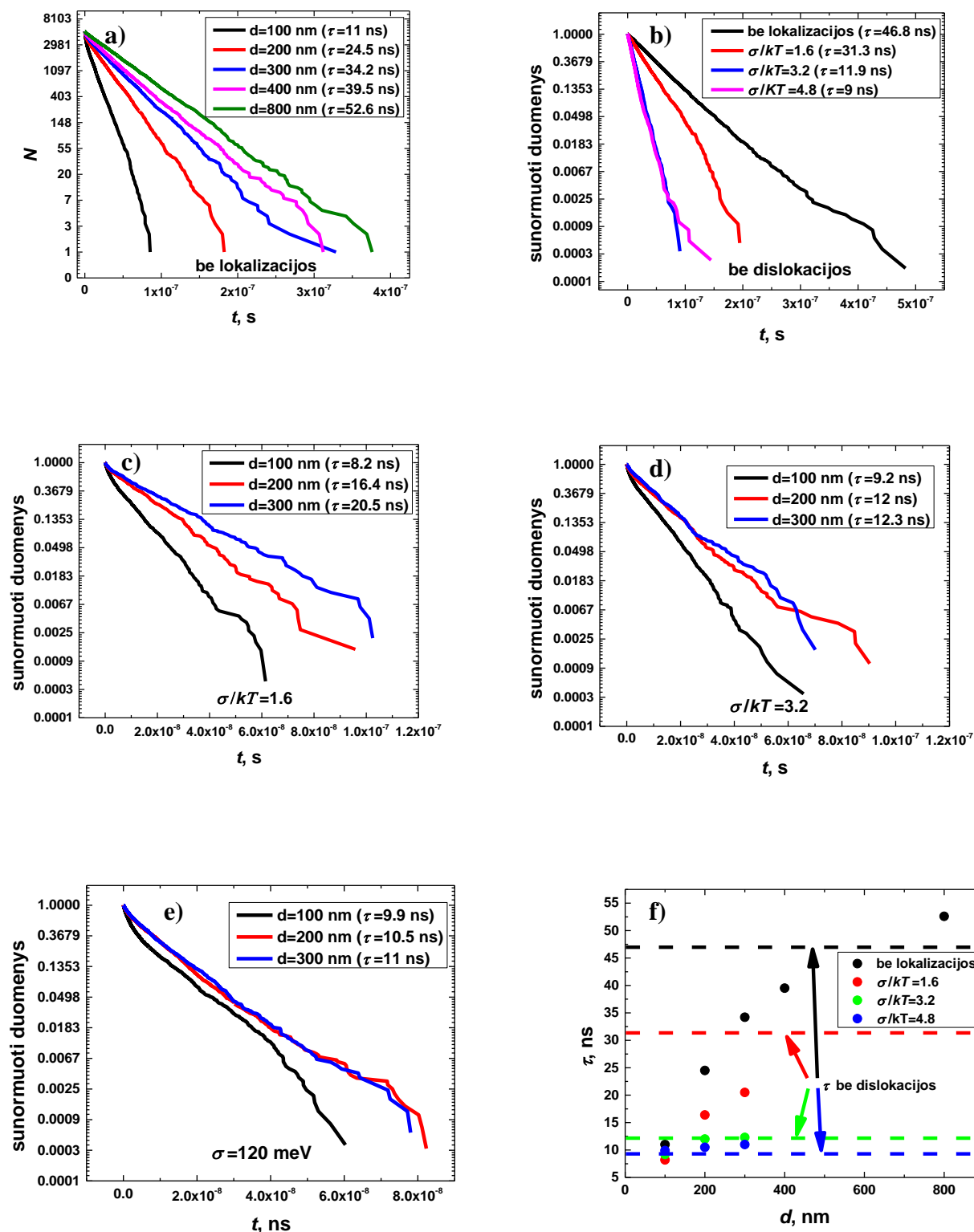
Krūvininkų gyvavimo trukmės apibendrinimui pateiktos 2 lentelėje.

2 lentelė. Krūvininkų gyvavimo trukmės įvairiais atvejais.

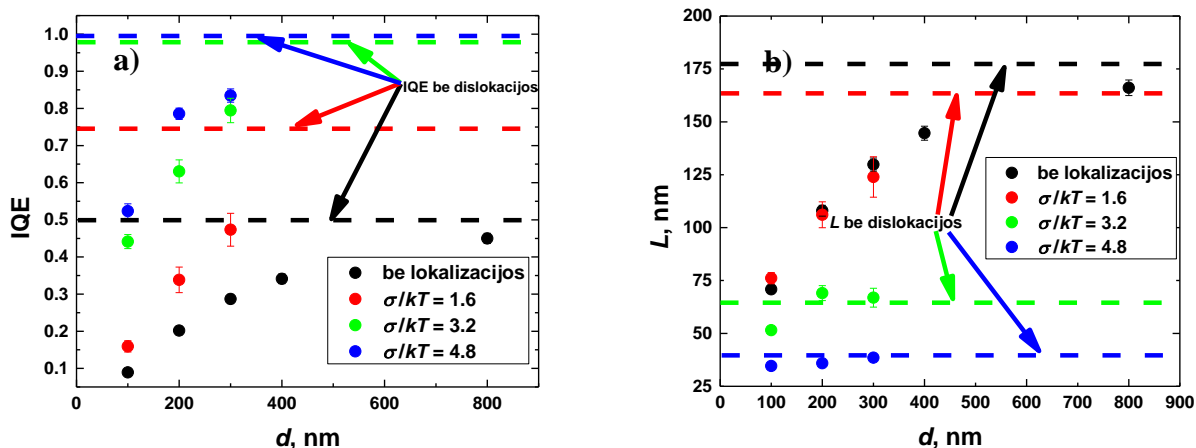
d , nm	$\sigma/kT=0$		$\sigma/kT=1.6$		$\sigma/kT=3.2$		$\sigma/kT=4.8$	
	be disl.	su disl.	be disl.	su disl.	be disl.	su disl.	be disl.	su disl.
	τ , ns							
100	46,8	11	31,3	8,2	11,9	9,2	9	9,9
200		24,5		16,4		12		10,5
300		34,2		20,5		12,3		11
400		39,5						
800		52,6						

Prieš tai aptartose situacijose apskaičiavus sistemos vidinius kvantinius našumus (IQE) matyti, kad nesant dislokacijų yra pasiekiami didžiausi sistemos vidiniai kvantiniai našumai (9.9 pav. a), kurie didėja stiprinant lokalizaciją. Taip yra todėl, kad stiprėjant lokalizacijai vis daugiau krūvininkų rekombinuoja spinduliniu būdu lokalizuotose būsenose. Kai gardelėje yra dislokacijos, jos ženkliai sumažina IQE, bet didėjant atstumui tarp jų (t.y. mažėjant jų tankiui gardelėje) IQE vertės artėja link soties verčių, atitinkančių situaciją, kai dislokacijų nėra. Vėl gi, galima pastebėti, kad IQE žymiai greičiau įsisotina, ties stipria lokalizacija, vadinasi, kuo stipresnė lokalizacija, tuo didesnis dislokacijų tankis gali būti gardelėje nesukeldamas žybaus IQE mažėjimo.

Panagrinėjus krūvininkų difuzijos nuotolius sistemoje, matyti, kad nesant lokalizacijos difuzijos nuotoliai yra didžiausi (9.9 pav. b). Taip yra dėl to, kad dalelės nėra lokalizuojamos ir gali laisviau judėti gardelėje. Nesant lokalizacijos pagrindinis difuzijos nuotolį ribojantis faktorius yra dislokacijų tankis, nes kuo arčiau viena kitos yra dislokacijos, tuo mažesni krūvininkų difuzijos nuotoliai pasiekiami. Analogiškai ir esant lokalizacijai, dislokacijos riboja difuzijos nuotolį, bet kaip ir IQE bei gyvavimo trukmės atveju, difuzijos nuotolis yra tuo mažiau jautrus dislokacijų tankiui, kuo stipresnė yra lokalizacija.

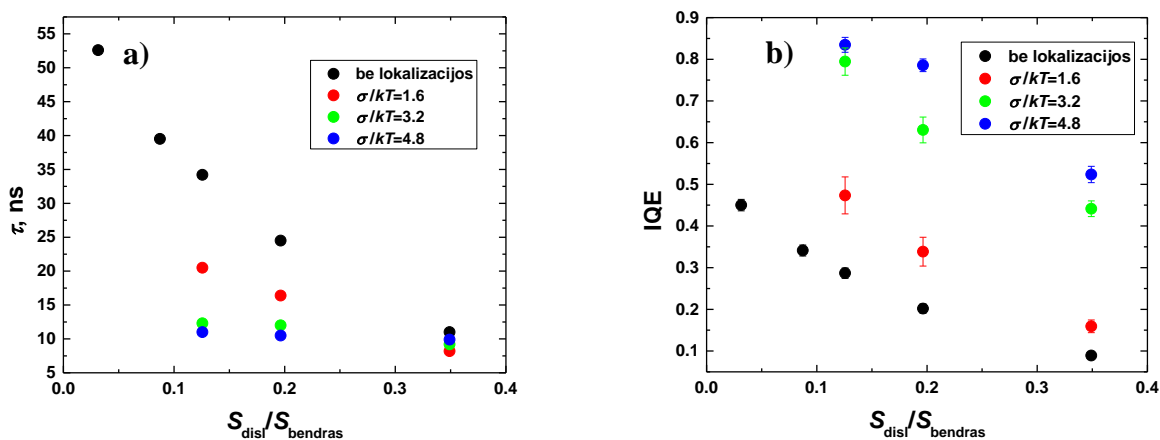


9.8 pav. Krūvininkų rekombinacijos kinetikos ir iš jų suskaičiuotos krūvininkų gyvavimo trukmės įvairiais atvejais.



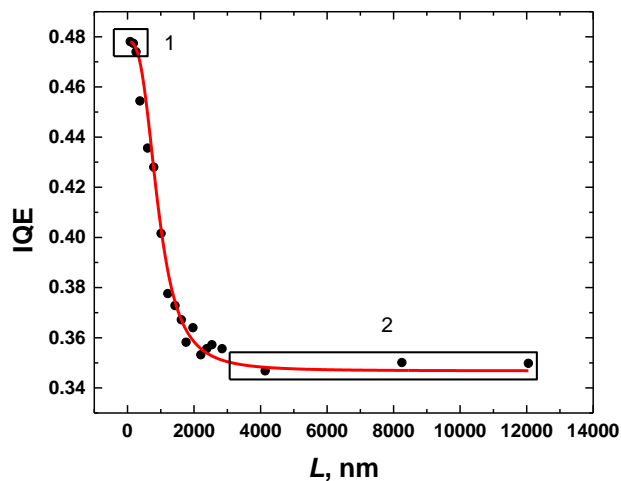
9.9 pav. Sistemos vidiniai kvantiniai našumai ir krūvininkų difuzijos nuotoliai joje įvairiais atvejais.

Taip pat įsitikinta, kad ne tik atstumai tarp dislokacijų, bet ir dislokacijų santykinis plotas gardelėje yra svarbus faktorius tiek sistemos vidiniam kvantiniam našumui, tiek krūvininkų gyvavimo trukmėms joje. Matyti, kad didėjant santykiniam dislokacijų plotui, tiek vidinis kvantinis našumas, tiek gyvavimo trukmės mažėja (9.10 pav. a, b). Tiesa, kaip ir anksčiau aptartose priklausomybėse, kitimas yra mažiau pastebimas prie stipresnės lokalizacijos. Šis mažėjimas gali iš vienos pusės būti aiškinamas ir atstumo tarp dislokacijų mažėjimu, tačiau ne ką mažiau svarbus faktorius yra tas, kad didėjant santykiniam dislokacijų plotui gardelėje, didėja ir tikimybė, kad naujai sugeneruota dalelė iškart atsiras dislokacijos ribojamoje erdvės dalyje.



9.10 pav. Sistemos vidinio kvantinio našumo ir krūvininkų gyvavimo trukmės priklausomybės nuo santykinio dislokacijų ploto.

Galiausiai buvo nutarta patikrinti, kaip priklauso sistemos vidinis kvantinis našumas nuo krūvininkų difuzijos nuotolio joje, kai atstumas tarp dislokacijų yra fiksuotas. Atstumas tarp gretimų dislokacijų buvo pasirinktas 1600 nm ir keičiant krūvininkų judėjimo greitį (kas iš esmės tolygu jų judrio variavimui) buvo keičiamas krūvininkų difuzijos nuotolis nuo verčių daug mažesnių už atstumą tarp dislokacijų, iki verčių, daug didesnių už šį atstumą. Pastebėta, kad priklausomybė gauta sigmoidinė (S formos) (9.11 pav.). Matyti, kad kai difuzijos nuotoliai yra mažesni nei 15% atstumo tarp dislokacijų, dalelės dislokacijų dar nejaučia ir vidinis kvantinis našumas yra maksimalus (1 sritis), vėliau, didėjant difuzijos nuotoliams jis ima kristi ir galiausiai, kai difuzijos nuotoliai tampa maždaug dvigubai didesni už atstumą tarp dislokacijų, vidinis kvantinis našumas pasiekia minimumą ir nusistovi (2 sritis).



9.11 pav. Sistemos vidinio kvantinio našumo priklausomybė nuo krūvininkų difuzijos nuotolio, kai atstumas tarp dislokacijų $d=1600$ nm.

Pagrindiniai rezultatai ir išvados

1. Monte Carlo algoritmu pagrįstas netvarkaus puslaidininkio modelis yra patikimas, nes juo sumodeliuotos klasikinės fizikinės situacijos (krūvininkų rekombinacija bei difuzija nesant lokalizacijos ir dislokacijų) gerai atitinka teoriją.
2. Tiek esant dislokacijoms, tiek jų nesant, vidiniai kvantiniai našumai sistemoje su lokalizacija gaunami didesni nei be lokalizacijos. Be to, vidiniai kvantiniai našumai didėja stiprėjant lokalizacijai, tačiau ties $\sigma/kT \approx 3$ didėjimas pradeda sotintis, nes lokalizacija jau yra pakankamai stipri, kad tolesnis jos stiprinimas akivaizdus pokyčio nebeduotų.
3. Stiprėjant lokalizacijai, krūvininkų gyvavimo trukmės bei difuzijos nuotoliai trumpėja, nes dalelės nebegali laisvai judėti gardelėje, o joms patekus į lokalizuotą būseną išauga jų spindulinės rekombinacijos sparta.
4. Lokalizacijos efektai sumažina sistemos jautrumą dislokacijoms, t.y. kuo stipresnė lokalizacija, tuo didesni turi būti dislokacijų tankiai, kad sistemos parametrai, tokie kaip vidinis kvantinis našumas, krūvininkų gyvavimo trukmės bei difuzijos koeficientai jaustų jų įtaką.
5. Sistemos vidinio kvantinio našumo priklausomybė nuo krūvininkų difuzijos nuotolio, sistemoje esant fiksuotam dislokacijų tankiui, elgiasi kaip sigmoidinė (S formos) funkcija. Kai krūvininkų difuzijos nuotoliai yra žymiai mažesni už atstumą tarp dislokacijų (mažesni nei 15% to atstumo), tai krūvininkai dislokacijų dar nejaučia ir vidinis kvantinis našumas yra maksimalus. Kai difuzijos nuotolis didėja, vidinis kvantinis našumas pradeda mažėti ir galiausiai nusistovi ties minimalia verte, kai difuzijos nuotolis yra maždaug dvigubai didesnis už atstumą tarp dislokacijų.
6. Žinant tam tikrus puslaidininkio parametrus, tokius kaip krūvininkų lokalizacijos gylis, gyvavimo trukmės ir difuzijos nuotoliai bei sąryšius tarp jų, galima prognozuoti, koks dislokacijų tankis gali būti leistinas norint išvengti didelių nespindulinių nuostolių (vidinio kvantinio našumo mažėjimo).

Santrauka anglų kalba / Summary

Martynas Riauka

Modelling of Possible Impact of Charge Carrier Transport to Recombination Properties by Monte Carlo Method

Carrier transport and recombination processes play a key role in optoelectronic device operation and thus must be well understood. More and more attention is directed toward understanding how these phenomena work in disordered semiconductor systems.

One example of such disordered semiconductor system would be ternary and quaternary group III nitride compounds. They are widely used in solid state lighting and solar cell technologies. However their lack of well matched substrates makes growing quality layers a great challenge. Up to this day, the quality of III nitride semiconductors in terms of crystalline defects remains poor. It is known that, generally, the higher defect density there is in the semiconductor, the worse efficiency a device, based on such semiconductor, has. Nevertheless, there are many cases reported in literature of III nitride compound quantum wells having internal quantum efficiency of more than 80% and external quantum efficiency of up to 50%. This is attributed to carrier localization effects that manifest in such semiconductors.

Carrier localization happens due to the spatial bandgap fluctuations in III semiconductor compounds as different components constituting the semiconductor usually distribute non-homogeneously inside the crystal. Localized states therefore work like traps creating barriers for carriers preventing them from reaching non-radiative recombination sites, which increases the efficiency of such devices by a big margin.

There are many experimental techniques to investigate the semiconductors, but to understand what really happens in disordered systems we need a whole new tool that is based on computer modelling. An attractive technique to model disordered systems is the kinetic Monte Carlo algorithm. The working principle of this method is largely based on statistical treatment of such largely random systems as disordered semiconductors.

In this work the Monte Carlo method is used to investigate carrier transport in a generalized disordered semiconductor with predefined physical properties. The aim of this work was to determine, how localization effects in a disordered semiconductor alter the parameters such as internal quantum efficiency, carrier lifetime and carrier diffusion length, as well as to understand in what way the influence of defects (precisely - dislocations) is different in a disordered system with

dislocation in comparison to the situation when localization is absent.

The parameters varied in this model were localization depth, dislocation density and carrier mobility. For all cases, the quantum efficiencies, carrier lifetimes and diffusion coefficients were calculated, providing detailed information about the investigated system.

Firstly, by modelling classical situations, namely carrier recombination and diffusion it was determined, that the model is reliable.

After comparing how IQE behaves in systems with and without localization it was determined that the stronger localization is, the higher values of IQE are reached. It applies to both cases - when there are dislocations and when there aren't any. That is due to stronger localization which leads to more carriers recombining radiatively. Nevertheless, the increase in IQE due to stronger localization saturates at certain values of localization depth. That is because up to certain point the increase in potential barrier of a localized state makes it harder for a carrier to leave the state, but later on, the barrier is so high that increasing it even more does not make any difference since a carrier can no longer escape anyway.

Also, carrier localization effects decrease the sensitivity of the modelled system to the lattice dislocations, that is the stronger the localization, the higher defect densities can be reached without any effect on the parameters, such as carrier lifetimes, diffusion lengths and IQEs.

It was also determined that carrier lifetimes and diffusion lengths decrease, because carriers can no longer move freely in a lattice and after being localized they tend to rapidly recombine radiatively.

All in all, knowing certain parameters of the semiconductor in interest, namely carrier localization depth, lifetimes and diffusion lengths it is possible to predict what dislocation densities can be allowed without experiencing any detrimental effects on carrier transport and recombination.

LITERATŪRA

- [1] H. Morkoç, Handbook of Nitride Semiconductors and Devices, Wiley-VCH (2009).
- [2] M. Meyyappan, M.K. Sunkara, Inorganic Nanowires, CRC Press, 225 p., (2009)
- [3] S. Nakamura, S. Chichibu, Introduction to Nitride Semiconductor Blue Lasers and Light Emitting Diodes, CRC Press (2000).
- [4] M. Krames et al., Status and Future of High-Power Light-Emitting Diodes for Solid-State Lighting, J. Disp. Technol. (2007).
- [5] A. Bhattacharyya, T.D. Moustakas, L. Zhou, D.J. Smith, W. Hug, A. Bhattacharyya, T.D. Moustakas, L. Zhou, D.J. Smith, W. Hug, Deep ultraviolet emitting AlGa_N quantum wells with high internal quantum efficiency Deep ultraviolet emitting AlGa_N quantum wells with high internal, 181907, 1–4 p., (2014).
- [6] W. Zhang, A.Y. Nikiforov, C. Thomidis, J. Woodward, H. Sun, C. Kao, D. Bhattarai, A. Moldawer, D.J. Smith, T.D. Moustakas, W. Zhang, A.Y. Nikiforov, C. Thomidis, J. Woodward, H. Sun, C. Kao, D. Bhattarai, Molecular beam epitaxy growth of AlGa_N quantum wells on 6H-SiC substrates with high internal quantum efficiency Molecular beam epitaxy growth of AlGa_N quantum wells on 6H-SiC substrates with high internal quantum efficiency, 119, 2–7 p., (2012).
- [7] H. Morkoç, Nitride Semiconductors and Devices, (1999).
- [8] V. Liuolia, Localization effects in ternary nitride semiconductors, Doctoral Thesis (2012).
- [9] C. Jacoboni, P. Lugli, The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation (1989).
- [10] E.F. Schubert, E.O. Gobel, Y. Horikoshi, K. Ploog, H.J. Quiesser, Alloy broadening in photoluminescence spectra of Al_xGa_{1-x}As, Phys. Rev. B. 30 (1984).
- [11] G. Perillat-merceroz, G. Cosendey, J. Carlin, R. Butté, N. Grandjean, Intrinsic degradation mechanism of nearly lattice-matched InAlN layers grown on GaN substrates Intrinsic degradation mechanism of nearly lattice-matched InAlN layers grown on GaN substrates, 63506 (2013).
- [12] D. Doppalapudi, S.N. Basu, K.F. Ludwig, T.D. Moustakas, I. Introduction, Phase separation and ordering in InGa_N alloys grown by molecular beam epitaxy, 84, 1389–1395, (1998).
- [13] F.K. Yam, Z. Hassan, InGa_N: An overview of the growth kinetics, physical properties and emission mechanisms, Superlattices Microstruct. 43, 1–23 p., (2008).
- [14] P.G. Eliseev, P. Perlin, J. Lee, M. Osiński, “ Blue ” temperature-induced shift and band-tail emission in InGa_N-based light sources, 569 p., (1997).

- [15] R. Kalbitz, *Stability of Polarization in Organic Ferroelectric Structures*, (2011).
- [16] Density of States. <http://electrons.wikidot.com/density-of-states> (accessed May 24, 2020).
- [17] P.L.H. Martinez, *Optical properties of nanoparticles and nanowires : Exciton-plasmon interaction and photo-thermal effects*, (2015).
- [18] B. Van Zeghbroeck, *Principles of Semiconductor Devices* (2002).
- [19] D.A. Weitz, E.M. Terentjev, *The Oxford Handbook of Soft Condensed Matter* (2017).
- [20] J. Frey, *Ballistic Transport in Semiconductor Devices*, IEEE., 613–617 p., (1980).
- [21] S.E. Guidoni, C.M. Aldao, *On diffusion , drift and the Einstein relation*, 23, 395–402 p., (2002).
- [22] *Laboratorinis darbas: Nepusiausvirujų krūvininkų difuzijos nuotolio matavimas*, Vilniaus Universitetas (2018).
- [23] B.N. Tessler, Y. Preezant, N. Rappaport, Y. Roichman, *Charge Transport in Disordered Organic Materials and Its Relevance to Thin-Film Devices : A Tutorial Review*, 2741–2761 p., (2009).
- [24] M. Jakobsson, *Monte Carlo Studies of Charge Transport Below the Mobility Edge*, (2012).
- [25] F.K. Yam, L.L. Low, S.A. Oh, Z. Hassan, *Gallium Nitride : An Overview of Structural Defects*, (2009).
- [26] M. Albrecht, J.L. Weyher, B. Lucznik, I. Grzegory, S. Porowski, M. Albrecht, J.L. Weyher, B. Lucznik, I. Grzegory, S. Porowski, *Nonradiative recombination at threading dislocations in n -type GaN : Studied by cathodoluminescence and defect selective etching Nonradiative recombination at threading dislocations in n -type GaN : Studied by cathodoluminescence and defect selective etching*, 231909 (2014).
- [27] D.S. Meyaard, G.B. Lin, J. Cho, E.F. Schubert, *Efficiency droop in gallium indium nitride (GaInN)/gallium nitride (GaN) LEDs*, Woodhead Publishing Limited, (2013).
- [28] J. Divkovic Puksec, *Recombination Processes and Holes and Electrons Lifetimes*, *Automatika*. 43, 47–53 p., (2002).
- [29] T. Goudon, V. Miljanovi, *On the Shockley-Read-Hall Model : Generation-Recombination in Semiconductors*, 1–23 p., (2007).
- [30] A. Schenk, *Advanced Physical Models for Silicon Device Simulation*, 70 p., (1998).
- [31] A. Moliton, *Applied electromagnetism and materials*, 135-138 p., (2007).
- [32] D. Rosales, B. Gil, T. Bretagnon, B. Guizal, F. Zhang, S. Okur, M. Monavarian, N. Izyumskaya, V. Avrutin, H. Morkoç, J.H. Leach, D. Rosales, B. Gil, T. Bretagnon, B. Guizal, F. Zhang, S. Okur, M. Monavarian, *Excitonic recombination dynamics in non-polar GaN / AlGaIn quantum wells*, 73510 (2014).
- [33] L.C. Andreani, *Confined Electrons and Photons* (edited by E. Burstein and C. Weisbuch),

- (1995).
- [34] C.-K. Tan, W. Sun, J.J. Wierer, N. Tansu, Effect of interface roughness on Auger recombination in semiconductor quantum wells, *AIP Adv.* 7, 35212, (2017).
- [35] E. Kuokštis, G. Tamulaitis, Plačiatarpių puslaidininkių technologija ir prietaisai, 109-122 p., (2008).
- [36] A. Othonos, Probing ultrafast carrier and phonon dynamics in semiconductors, *J. Appl. Phys.* 83, 1789–1830 p., (1998).
- [37] M. Riauka, Nepusiausvirųjų krūvininkų rekombinacijos tyrimas nitridiniuose dariniuose naudojant interferencijos spektro dinamiką (2018).
- [38] B.R. Bennett, R.A. Soref, J.A. Del Alamo, Carrier-Induced Change in Refractive Index of InP, GaAs, and InGaAsP, *IEEE J. Quantum Electron.* 26, 113–122 p., (1990).
- [39] A.F. Voter, Chapter 1 INTRODUCTION TO THE KINETIC MONTE CARLO METHOD, 1–23 p., (2007).
- [40] K. Nordlund, 9. MC simulation of “thermodynamic” ensembles, 1–76 p., (2006).
- [41] T.P. Schulze, Efficient Kinetic Monte Carlo Simulation, (2007).
- [42] A.K. Mallick, B. Atomic, P.D. Krishnani, B. Atomic, Student's t-distribution and confidence interval estimation for Monte Carlo estimation for Monte Carlo results Amod Kishore Mallick and P D Krishnani, (2015).
- [43] E. Vakrina, MATEMATINĖS STATISTIKOS PRADMENYS. STATISTINIŲ DUOMENŲ ANALIZĖ NAUDOJANT MS EXCEL (2007).
- [44] C. Mack, Essentials of Statistics for Scientists and Technologists (1967).
- [45] N. Cheung, Notes on Dopant Diffusion, 1–9 p.
- [46] T. Buonassisi, Toward a 1D Device Model Part 2 : Material Fundamentals, (2011).
- [47] W. Liu, J. Carlin, N. Grandjean, B. Deveaud, G. Jacopin, cathodoluminescence Exciton dynamics at a single dislocation in GaN probed by picosecond time-resolved cathodoluminescence, 42101 (2016).