

ЧИСЕЛЬНИЙ АНАЛІЗ ШВИДКОСТІ ОЖЕ-РЕКОМБІНАЦІЇ У ПОТРІЙНИХ СПОЛУКАХ InGaN n -ТИПУ

В роботі числовими методами досліджені прямі і непрямі механізми оже-рекомбінації в потрійних сполуках $n\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ з ґраткою типу вюрциту. Матричні елементи електрон-електронної і електрон-фононної взаємодії розраховувались використовуючи зонну структуру і хвильові функції, отримані методом емпіричного псевдопотенціалу. Непрямий оже-процес за участю фононів аналізувався з допомогою методу функцій спектральної густини. Представлені залежності коефіцієнта оже-рекомбінації від ширини забороненої зони $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ сполук, температури і концентрації носіїв заряду.

Ключові слова: InGaN , оже-рекомбінація, зонна структура, електрон-фононна взаємодія.

В работе численно исследованы прямые и непрямые механизмы оже-рекомбинации в тройных соединениях $n\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ с решеткой типа вюрцита. Матричные элементы электрон-электронного и электрон-фононного взаимодействия рассчитывались используя зонную структуру и волновые функции, полученные методом эмпирического псевдопотенциала. Непрямой оже-процесс с участием фононов анализировался с помощью метода функций спектральной плотности. Представлены зависимости коэффициента оже-рекомбинации от ширины запрещенной зоны $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ соединений, температуры и концентрации носителей.

Ключевые слова: InGaN , оже-рекомбинация, зонная структура, электрон-фононное взаимодействие.

Direct and indirect mechanisms of Auger recombination in ternary wurtzite $n\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alloys are numerically investigated. The matrix elements of electron-electron and electron-phonon interaction are calculated using the band structure and wave functions obtained by empirical pseudopotential method. Indirect phonon-assisted Auger process is analyzed by the spectral density function method. The dependences of Auger recombination coefficient on energy bandgap of $n\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alloys, temperature and carrier concentration are presented.

Keywords: InGaN , Auger recombination, band structure, electron-phonon interaction.

Вступ

Безвипромінювальні механізми втрат носіїв заряду в оптоелектронних приладах на основі InGaN потрійних сполук є предметом вивчення багатьох наукових груп. Повне розуміння цих механізмів є ключовим етапом до подолання типової для нітрідних приладів проблеми, нетермічного падіння ефективності [1]. З поміж інших, одним із можливих механізмів втрат, відповідальних за нетермічне падіння ефективності, вважається безвипромінювальна оже-рекомбінація. Згідно із класичною теорією, швидкість прямої оже-рекомбінації зменшується із зростанням ширини забороненої зони матеріалу. Тому слід очікувати, що в широкозонних сполуках $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x < 0,25$),

які використовуються у випромінюючих приладах видимого діапазону ($\lambda = 420 \div 550$ нм), швидкість оже-рекомбінації буде дуже малою. Але, розрахунок проведений в роботі [2] показав, що швидкість рекомбінації в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ з ґраткою типу вюрциту значно зростає, якщо врахувати "резонансний" механізм з переходом оже-електрона в вищу зону провідності. При цьому оже-коефіцієнт досягає значень $\sim 10^{-30} \text{ см}^6 \text{ с}^{-1}$, що є достатнім для пояснення експериментальних даних по нетермічному падінню ефективності. З іншого боку, схожий розрахунок, проведений у роботі [3] вже дає значення оже-коефіцієнтів, що майже на три порядки менші. Окрім резонансних переходів між зонами провідності, швидкість оже-рекомбі-

нації в нітридах може також зростати за рахунок непрямих процесів за участю фононів або дефектів. Чисельний розрахунок швидкості непрямой оже-рекомбінації в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ був представлений в роботах [4,5]. Так само як і у випадку прямого механізму, результати цих робіт також достатньо відрізняються між собою. Як наслідок, процеси оже-рекомбінації в нітридах, на сьогоднішній день, все ще залишаються не до кінця зрозумілими і потребують подальшого дослідження. В даній роботі був проведений чисельний розрахунок швидкості оже-рекомбінації в $n\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, основуючись на електронній зонній структурі, отриманій методом емпіричного псевдопотенціалу, та фононних дисперсійних кривих, отриманих методом валентного силового поля. Результати роботи підтверджують ключовий вплив електронних переходів між двома найнижчими зонами провідності на оже-коефіцієнт в $n\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ сполуках, що використовуються в випромінюючих приладах видимого діапазону.

1. Методика розрахунку

Оскільки енергія від рекомбінації електрона і дірки, що передається третій частинці (в матеріалах n -типу – електрону) перевищує ширину забороненої зони, то третя частинка опиняється достатньо високо у відповідній зоні. Тому, для адекватного аналізу оже-процесів в широкозонних матеріалах необхідне знання реалістичної зонної структури у всій зоні Бріллюена, а не тільки поблизу екстремумів зони провідності і валентної зони, як це має місце в рамках k - p формалізму. В даній роботі для отримання зонної структури бінарних сполук GaN і InN з ґраткою типу вюрциту, був використаний метод емпіричного псевдопотенціалу. Форм-фактори атомних модельних потенціалів для In, Ga та N вибирались у вигляді, представленому в [6]. З допомогою спеціальної процедури, числові параметри атомних форм-факторів підбирались так, щоб зонна структура при псевдопотенціальному розрахунку як можна менше відрізнялася від структури, отриманої розрахунком із

перших принципів (теорія функціоналу густини з використанням GW -наближення) [7]. Атомні потенціали для розрахунку зонної структури потрібних $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ сполук, були отримані через лінійну інтерполяцію атомних форм-факторів для бінарних GaN та InN сполук.

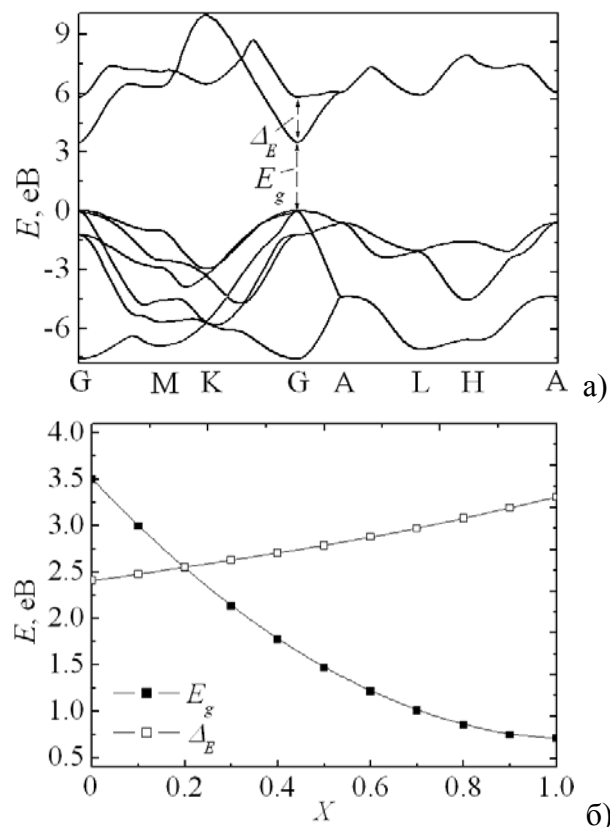


Рис.1. Зонна структура GaN (а). Ширина забороненої зони E_g і енергетичний інтервал між найнижчими зонами провідності Δ_E в залежності від складу $x \text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ сполук (б).

Як приклад використання описаного підходу, на рис.1 наведені зонна структура GaN, а також ширина забороненої зони (E_g) і енергетичний інтервал між найнижчими зонами провідності (Δ_E) в залежності від складу $x \text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ сполук. Хвильові функції носіїв заряду представлялись у вигляді розкладу по базисному набору із 225 плоских хвиль. Діагоналізація псевдопотенціального гамільтоніана виконувалась з допомогою процедур із стандартного пакету лінійної алгебри LAPACK. Розрахунок швидкості непрямих оже-процесів за участю фононів вимагає також наявності зонної структури фононів. В даній роботі, для розра-

хунку фононних дисперсійних кривих використовувалась феноменологічна модель, в якій короткодючі міжатомні сили враховувались в рамках методу валентного силового поля для кристалів структури вюрциту [8], а дальнодіючі сили – шляхом введення кулонівського потенціалу з ефективним зарядом, в якості підгоночного параметра. Для потрійних $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ сполук, дисперсія фононів отримувалась з допомогою лінійної інтерполяції дисперсій для GaN і InN.

Швидкість прямої оже-рекомбінації розраховується в межах теорії збурень першого порядку. Для домінуючого в матеріалах *n*-типу СНСС процесу, вона може бути представлена у вигляді:

$$R_0 = 2 \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V^3}{(2\pi)^9} \iiint |M_{ee}|^2 f_n(E_1) f_n(E_2) f_p(E_1') \times \\ \times (1 - f_n(E_2')) (1 - \exp[(E_{Fp} - E_{Fn})/k_b T]) \times \\ \times \delta(E_1 + E_2 - E_1' - E_2') \delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_1' - \vec{k}_2') \times \\ \times d\vec{k}_1 d\vec{k}_2 d\vec{k}_1' d\vec{k}_2', \quad (1)$$

де M_{ee} – матричний елемент екранованої електрон-електронної (кулонівської) взаємодії; $f_n(E)$ і $f_p(E)$ – функції Фермі; E_{Fp} і E_{Fn} – квазірівні Фермі; індекси 1, 2, 2' відносяться до електронів в зонах провідності, а 1' – до важкої дірки в валентній зоні; V – об'єм кристалу. Матричний елемент M_{ee} є сумою прямої (M_D) і обмінної (M_{Ex}) складових

$$M_D = \frac{4\pi e^2}{V} \frac{F(\vec{k}_1, \vec{k}_1') F(\vec{k}_2, \vec{k}_2')}{\varepsilon(\vec{k}_1 - \vec{k}_1') \left(|\vec{k}_1 - \vec{k}_1'|^2 + q_0^2 \right)}, \quad (2)$$

де F – інтеграл перекриття періодичної частини хвильових функцій; $\varepsilon(k)$ – статична модельна діелектрична функція [9]; q_0 – обернена довжина екранування Дебая $q_0 = \sqrt{4\pi n e^2 / k_b T}$; n – концентрація носіїв заряду. Обмінна складова M_{Ex} отримується шляхом перестановки в (2) кінцевих станів 1' і 2'.

В більшості відомих робіт, швидкість непрямой рекомбінації за участю фононів, обчислюється в рамках теорії збурень другого порядку. Альтернативним підходом є метод функцій спектральної густини [10],

який є наслідком теорії лінійного відгуку. Якщо вважати, що взаємодія з фононами відбувається лише в зоні важких дірок (взаємодія фононів з електронами вносить лише незначний вклад), повна швидкість СНСС оже-рекомбінації в матеріалах *n*-типу, яка є сумою швидкостей прямої (R_0) і непрямой оже-рекомбінації за участю фононів (R_{ph}), представляється у вигляді:

$$R_0 + R_{ph} = 2 \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V^3}{(2\pi)^9} \iiint |M_{ee}|^2 f_n(E_1) f_n(E_2) \times \\ \times f_p(E_1 + E_2 - E_2') (1 - f_n(E_2')) \times \\ \times (1 - \exp[(E_{Fp} - E_{Fn})/k_b T]) \times \\ \times A(\vec{k}_1', E_1 + E_2 - E_2') \times \\ \times \delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_1' - \vec{k}_2') d\vec{k}_1 d\vec{k}_2 d\vec{k}_1' d\vec{k}_2'. \quad (3)$$

В цій формулі, всі ефекти електрон-фононної взаємодії враховуються з допомогою функції спектральної густини:

$$A(\vec{k}_1', E) = -\frac{1}{\pi} \frac{\text{Im} \Sigma(\vec{k}_1', E)}{(E - E_1')^2 + (\text{Im} \Sigma(\vec{k}_1', E))^2}, \quad (4)$$

де $E = E_1 + E_2 - E_2'$, а $\text{Im} \Sigma(\vec{k}_1', E)$ – уявна частина масового оператора:

$$\text{Im} \Sigma(\vec{k}_1', E) = -\frac{\pi}{(2\pi)^3} \sum_{j=1}^3 \int |M_{j,(e-ph)}(\vec{k}_1', \vec{k})|^2 \times \\ \times [(P(\omega_j) + 1/2 \pm 1/2) \mp f(E \mp \hbar \omega_j)] \times \\ \times \delta(E \mp \hbar \omega_j - E_{\vec{k}}) d\vec{k}, \quad (5)$$

де інтегрування ведеться по зоні важких дірок; $M_{(e-ph)}$ – матричний елемент електрон-фононної взаємодії; $\hbar \omega$ – енергія фонуна; $P(\omega)$ – функція Бозе-Ейнштейна. Сумування в (5) проводиться по трьом типам електрон-фононної взаємодії. Взаємодія дірок з оптичними полярними фононами описувалася гамільтоніаном Фреліха, а взаємодія з неполярними оптичними та акустичними фононами описувалася за допомогою деформаційних потенціалів, значення яких для нітридів наведені в [11].

Одним з найважливіших питань при розрахунку швидкості оже-рекомбінації є вибір дискретної сітки *k*-точок у зоні Бріллюена, а точніше вибір необхідної густини сітки, для забезпечення збіжності процесу чисельного інтегрування. Генерація *k*-точок

проводилася по методу Монкхорста-Пака [12]. Для дослідження процесу збіжності, чисельне інтегрування проводилися на сітках густиною від $(11 \times 11 \times 11)$ до $(63 \times 63 \times 63)$. Встановлено, що швидкість оже-рекомбінації для сітки густиною $(57 \times 57 \times 57)$ збігається до значення, яке не більше ніж на 5% відрізняється від значень, отриманих на сітках більшої густини. Тому, всі подальші розрахунки виконувались саме на цій сітці. За такого вибору сітки, повне число k -точок у зоні Бріллюена становить 185193. Для кожної із цих k -точок необхідно виконати процедуру діагоналізації псевдопотенціального гамільтоніана (зонна структура і хвильові функції носіїв заряду), а також динамічної матриці (дисперсія фононів), що призводить до значних часових затрат. Однак, час розрахунку можна істотно скоротити, використовуючи симетрію зони Бріллюена (у нашому випадку, симетрію вюрцитних кристалів). Процедура діагоналізації проводилася тільки для k -точок, що лежать в незвідній частині зони Бріллюена. Значення енергії і хвильові функції в інших k -точках отримувались шляхом застосування операцій симетрії до кожної точки в незвідній частині.

Іншим важливим питанням є вибір апроксимації для енергетичної дельта-функції, яка присутня в (1) і (5). Найбільш частіше, в подібних розрахунках енергетична дельта-функція апроксимувалася Гаусовою, Лоренцовою, або прямокутною функцією. Як показано в [13], проста прямокутна апроксимація забезпечує швидшу збіжність при чисельному інтегруванні в (1) і (3). Тому, в дані роботі використовувалась прямокутна апроксимація: $\delta(E-E_0)=0$, при $E-E_0 > \Delta$ і $\delta(E-E_0)=1/\Delta$, при $E-E_0 < \Delta$, де параметр апроксимації Δ , повинен приймати достатньо мале значення.

2. Результати та їх обговорення

На рис.2, показана залежність коефіцієнта прямої оже-рекомбінації (C_n) від ширини забороненої зони n - $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ сполуки. Коефіцієнт визначався як $C_n=R/n^3$ (вважалося, що надлишкова концентрація носіїв

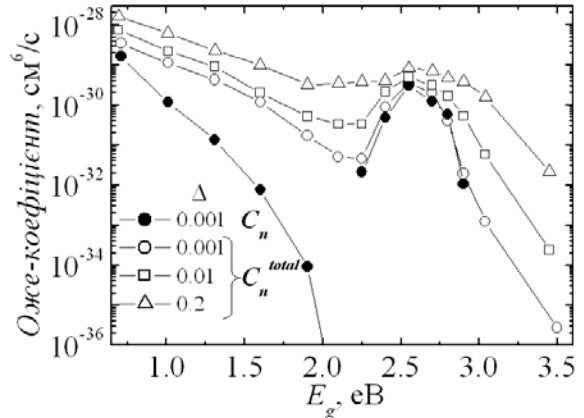


Рис.2. Залежність оже-коефіцієнта від ширини забороненої зони в n - $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ сполуках при $T=300$ К, $n=10^{19}$ cm^{-3} і значеннях Δ (0,001; 0,01; 0,2 еВ). C_n – коефіцієнт прямої оже-рекомбінації; $C_n^{total} = C_n + C_n^{phon}$ – сумарний оже-коефіцієнт.

набагато більша за рівноважну концентрацію, $n \gg n_0$). Розрахунок проводився при $T=300$ К, $n=10^{19}$ cm^{-3} і $\Delta=0,001$ еВ. Чисельне інтегрування проводилось тільки по тих частинах зони Бріллюена, де статистичний фактор (добуток функцій Фермі в (1) і (3)) не є достатньо малим. Для початкових станів електронів ($k_1, E_1(k_1)$), ($k_2, E_2(k_2)$) і кінцевого стану дірки ($k_1', E_1'(k_1')$), інтегрування проводилось по тим k -точкам, для яких значення енергії лежать не вище (не нижче) ніж $E_{cut}=0,4$ еВ від мінімуму зони провідності (максимуму валентної зони). У випадку непрямой рекомбінації, значення E_{cut} для важких дірок збільшувалося на $\approx 0,1$ еВ (приблизно рівне максимальній енергії фононів в GaN) для того щоб врахувати можливі проміжні стани, в які переходить важка дірка при взаємодії з фононами.

Як і слід було очікувати, при збільшенні ширини забороненої зони сполуки, C_n різко спадає [14]. Це є наслідком зменшення числа можливих переходів носіїв заряду між зоною провідності і валентною зоною, які відбуваються при збереженні повної енергії та квазіімпульсу носіїв, що вимагається присутністю двох дельта-функцій в (1). Різкий максимум залежності $C_n(E_g)$ в інтервалі $E_g=2,25 \div 2,9$ еВ, пояснюється резонансом між E_g і енергетичним інтервалом Δ_E , що розділяє дві найнижчі зони провідності в

центрі зони Бріллюена (див. рис.1). Внаслідок такого резонансу, значно зростає число дозволених переходів носіїв заряду при яких, оже-електрон із початкового стану в нижчій зоні провідності ($k_2, E_2(k_2)$) переходить в кінцевий стан ($k_2, E_2(k_2)$), що знаходиться у вищій зоні провідності. Хід залежності $C_n(E_g)$ знаходиться в хорошому погодженні з результатами розрахунку представленими в [2]. Більше того, резонансне значення $C_n=3,1 \cdot 10^{-30}$ см⁶/с при $E_g=2,55$ еВ, також погоджується з роботою [2].

Також на рис.2 представлений сумарний оже-коефіцієнт ($C_n^{total} = C_n + C_n^{phon}$), який був отриманий шляхом чисельного інтегрування в (3). Цей коефіцієнт враховує як прямий так і непрямий механізм рекомбінації. Із порівняння залежностей $C_n^{total}(E_g)$ і $C_n(E_g)$ видно, що для $E_g < 2$ еВ $C_n^{total} > C_n$. Тому, можна стверджувати, що для вузькозонних In_xGa_{1-x}N сполук швидкість непрямой рекомбінації за участю фононів переважає швидкість прямого процесу. Але, в області міжзонних резонансних переходів сумарний оже-коефіцієнт майже рівний коефіцієнту прямої рекомбінації, що вказує на визначальну роль прямого механізму в цій області. Відзначимо, що саме такі резонансні міжзонні переходи визначають швидкість оже-рекомбінації в In_xGa_{1-x}N сполуках, які випромінюють у видимому спектральному діапазоні.

Всі обговорені вище результати були отримані, використовуючи прямокутну апроксимацію для енергетичної дельта-функції з параметром $\Delta=0,001$ еВ. Вибір параметра Δ не є цілком однозначним. Відомі із інших робіт значення лежать в межах від 0,03 до 0,2 еВ [13,15]. Як показує наш розрахунок (рис. 2), при зростанні Δ до 0,2 еВ, залежність C_n^{total} від E_g стає більш слабкою, а максимум в області міжзонних переходів майже зникає. Однак, такі великі значення Δ видаються не зовсім правильними, так як при них, енергетична дельта-функція втрачає зміст енергозберігаючої функції. З цієї

точки зору, більш адекватним є вибір достатньо малого значення для параметра Δ .

Традиційно вважається, що оже-коефіцієнт для конкретного матеріалу (сполуки) залежить від температури і не залежить від концентрації носіїв заряду. На рис.3 наведені залежності сумарного оже-коефіцієнта C_n^{total} від концентрації носіїв заряду, розраховані за різних температур. При $n < 10^{17}$ см⁻³, оже-коефіцієнт не залежить від концентрації, як і передбачається в класичній теорії для не-вироджених матеріалів. Але, при $n > 10^{18}$ см⁻³ для всіх температур спостерігається достатньо сильне спадання оже-коефіцієнта. Як правило, таке спадання пояснюється переходом матеріалу до виродженого стану. В нашому випадку, ще однією причиною, що зумовлює зменшення оже-коефіцієнта є зростання оберненої довжини екранування q_0 при зростанні концентрації. Більше того, як показує розрахунок, саме зростання q_0 є основною причиною такого значного спадання оже-коефіцієнта. Важливість цього результату полягає в тому, що при великих концентраціях носіїв заряду, роль оже-рекомбінації сильно зменшується в порівнянні з іншими механізмами втрат носіїв заряду. Це, в свою чергу, виключає механізм оже-рекомбінації як одну із можливих причин, що відповідає за ефект нетермічного падіння ефективності в оптоелектронних приладах на основі нітридів.

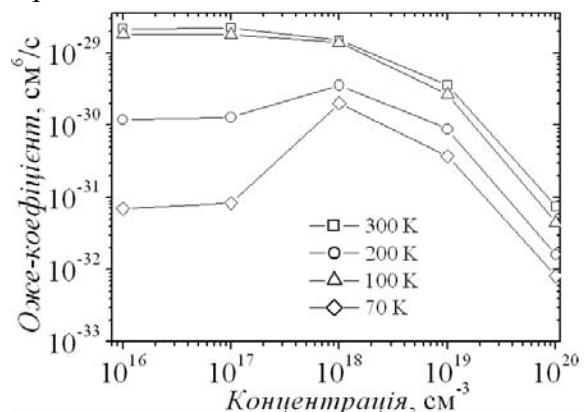


Рис.3. Залежність C_n^{total} від концентрації носіїв заряду за різних температур $T=70-300$ К. Розрахунок проведений для "резонансної" InGaN сполуки з шириною забороненої зони $E_g=2,55$ еВ.

Висновок

Проведено числовий аналіз швидкості прямої і непрямой оже-рекомбінації в n - $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ сполуках. Підтверджується ключовий вплив електронних переходів між двома найнижчими зонами провідності на швидкість оже-рекомбінації в сполуках, які випромінюють в видимому спектральному діапазоні. Показано, що для таких сполук, оже-коефіцієнт лежить в межах від $2 \cdot 10^{-32}$ см⁶/с до $3 \cdot 10^{-30}$ см⁶/с. Виявлено значне спадання оже-коефіцієнта при зростанні концентрації носіїв заряду $n > 10^{18}$ см⁻³. Головною причиною такого спадання є збільшення оберненої довжини екранування Дебая при зростанні концентрації носіїв заряду. Питання про вплив довжини екранування на матричний елемент електрон-електронної взаємодії все ще залишається не до кінця зрозумілим (в багатьох роботах довжина екранування взагалі не включалася в розрахунок). Тому, представлені в даній роботі залежності оже-коефіцієнта від концентрації, а також вивок про виключення оже-рекомбінації із списку можливих причин нетермічного падіння ефективності в приладах на основі нітридів, можуть бути представлені під сумнів.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Verzellesi G., Saguatti D., Meneghini M., Bertazzi F., Goano M.* Efficiency droop in InGaN/GaN blue light-emitting diodes: Physical mechanisms and remedies // *J. Appl. Phys.* – 2013. – **114**. – P.071101.
2. *Denaley K.T., Rinke P., Van de Walle C.G.* Auger recombination rates in nitrides from first principles // *Appl. Phys. Lett.* – 2009. – **94**. – P.191109.
3. *Bertazzi F., Goano M., Bellotti E.* A numerical study of Auger recombination in bulk InGaN // *Appl. Phys. Lett.* – 2010. – **97**. – P.231118.
4. *Kioupakis E., Rinke P., Denaley K.T., Van de Walle C.G.* Indirect Auger recombination as a cause of efficiency droop in nitride light-emitting diodes // *Appl. Phys. Lett.* – 2011. – **98**. – P.161107.
5. *Bertazzi F., Goano M., Bellotti E.* Numerical analysis of indirect Auger transitions in InGaN // *Appl. Phys. Lett.* – 2012. – **101**. – P.011111.
6. *Goano M., Bellotti E., Ghillino E., Ghione G., Brennan K.* Band structure nonlocal pseudopotential calculation of the III-nitride wurtzite phase materials system. Part I. Binary compounds GaN, AlN, and InN // *J. Appl. Phys.* – 2000. – **88** (11). – P.6467.
7. *Svane A., Christensen N.E., Gorczyca I., van Schilfsgaarde M., Chantis A.N., Kotani T.* Quasiparticle self-consistent GW theory of III-V nitride semiconductors: Bands, gap bowing, and effective masses // *Phys. Rev. B.* – 2010. – **82**. – P.115102.
8. *Siegle H., Kaczmarczyk G., Filippidis L., Litvinchuk A.P., Hoffmann A., Thomsen C.* Zone-boundary phonons in hexagonal and cubic GaN // *Phys. Rev. B.* – 1997. – **55** (11). – P.7000.
9. *Cappellini G., Del Sole R., Reining L., Bechstedt F.* Model dielectric function for semiconductors // *Phys. Rev. B.* – 1993. – **47** (15). – P.9892.
10. *Bardyszewski W., Yevick D.* Compositional dependence of the Auger coefficient for InGaAsP lattice matched to InP // *J. Appl. Phys.* – 1985. – **58** (7). – P.2713.
11. *Piprek J.* Nitride semiconductor devices: principles and simulation. – Berlin: Wiley-VCH, 2007. P. 72.
12. *Monkhorst H.J., Pack J.D.* Special points for Brillouin-zone integrations // *Phys. Rev. B.* – 1976. – **13** (12). – P.5188.
13. *Govoni M., Marri I., Ossicini S.* Auger recombination in Si and GaAs semiconductors: *Ab initio* results // *Phys. Rev. B.* – 2011. – **84**. – P.075215.
14. *Haug A.* Auger recombination in direct-gap semiconductors: band-structure effects // *J. Phys. C.* – 1983. – **16**. – P.4159.
15. *Sano N., Yoshii A.* Impact-ionization theory consistent with a realistic band structure of silicon // *Phys. Rev. B.* – 1992. – **45** (8). – P.4171.