

台阶型 InGaN 量子阱蓝光发光二极管设计与数值模拟

李为军¹, 张 波¹, 徐文兰², 陆 卫¹

(1. 中国科学院上海技术物理研究所 红外物理重点实验室, 上海 200083; 2. 华东师范大学信息科学技术学院, 上海 200062)

摘 要:一种特定发光波长(415~425nm)的台阶型 InGaN 构型量子阱被设计并从理论上进行考察,包括量子阱区域载流子浓度分布、自发辐射复合速率、Shockley-Read-Hall(SRH)辐射复合速率以及输出功率和内量子发光效率的分析。与传统的 InGaN 构型量子阱结构相比,使用台阶型 InGaN 构型的量子阱结构,活性区载流子浓度特别是空穴浓度得到明显的改善,输出功率和内量子效率分别提高了 52.5% 和 52.6%。自发发光强度与传统的 InGaN 构型量子阱发光强度相比也有 1.54 倍的增强。分析结果暗示 SRH 非辐射复合速率积分强度的减少被认为是台阶型 InGaN 构型量子阱光学性能提升的主要原因。

关键词:Step-like InGaN 量子阱; InGaN; 发光二极管; 数值模拟

中图分类号:TN312+.8

文献标识码:A

Simulation and Design of Step-like InGaN Quantum Well Structure Blue Light-emitting Diode

LI Wei-jun¹, ZHANG Bo¹, XU Wen-Lan², LU Wei¹

(1. National Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China; 2. Department of Electronic Engineering, East China Normal University, Shanghai 200062, China)

Abstract: The step-like InGaN quantum well (QW) and conventional InGaN QW for emission at a particular wavelength regime 415~425nm are designed and theoretically investigated, including the distribution of carriers' concentration, radiative recombination rate, Shockley-Read-Hall (SRH) recombination rate as well as output performance and internal quantum efficiency. Theoretical research suggests that the step-like QW structure offers significant improvement of carriers' concentration in the QW, especially hole concentration. Output performance and internal quantum well efficiency show 52.5% and 52.6% enhancement for step-like InGaN QW, respectively, in comparison to that of conventional InGaN QW. The improvement in luminescence intensity of step-like InGaN QW was found to be 1.54 times higher than that of the convention one. The reduction in SRH non-radiative recombination rate integral intensity can be the main reason the improvement of optical performance for step-like InGaN QW.

Key words: step-like quantum well; InGaN; light-emitting diode; numerical simulation

1 引言

白色发光二极管因具有体积小、寿命长以及节能环保等特点,因此被视为可以替代白炽灯的新一代的照明光源。产生白光光源的途径有很多,而目前大多数白光发光二极管都是由蓝光发光二极管激发 YAG 荧光粉得到,要想产生高亮度的白光,提高蓝光二极管芯片的出光效率是关键。氮化物材料为 wulzite 结构,本身具有较大的自发极化效应以及因衬底和外延膜晶格不匹配效应导致的压电极化效应,由于此极化

效应会造成能带倾斜,严重影响了发光二极管外量子效率的提高。近年来,很多方法被提出用来提高发光二极管的功效,例如,在活性层下方使用 electron tunneling barrier(ETB)^[1]和用 Si 掺杂的 InGaN 量子阱

基金项目:国家自然科学基金(No. 10474020);中国科学院知识创新工程青年人才领域前沿项目(No. C2-14)资助。

作者简介:李为军(1978-),男,在读博士,研究方向为 InGaN 基多量子阱发光二极管光电性能的研究与设计优化。E-mail: is-land112112@126.com

收稿日期:2008-04-26; **修订日期:**2008-06-11

层作为 current-spreading layer^[2], 除此之外, 多重势垒 (multiple quantum barriers, MQB)^[3] 以及在活性层上方使用不同构型电子阻挡层 (electron blocking layer, EBL) 也被研究^[4]。新近, 为减少量子阱中电子与空穴分离效应以提高 LED 的发光性能, 一些新的构型量子阱也已被提出和研究, 例如在传统 InGaN QW 里使用 δ -AlGaIn 层^[5-6], type-11 InGaIn-GaNAs QW 构型^[7] 以及 InGaIn-AlGaIn 应力补偿 QW 构型^[8]。在这里, 特定发光波长 (415 ~ 425nm) 的台阶型 InGaIn 构型量子阱被设计并从理论上进行考察, 研究结果发现, 采用台阶型 InGaIn 构型量子阱, 活性区载流子浓度特别是空穴浓度得到明显的改善, 输出功率和内量子效率也获得显著地提升。这对当前通过量子阱构型的改造开发大功率发光二极管或激光二极管器件具有一定的指导意义。

2 理论模型

在能带结构求解过程中, 为了简化计算, 忽略导带与价带能级之间的耦合作用, 对导带和价带的能级分别由抛物带模型和 RSP 模型^[9] 求得。由于 III-V 族化合物材料特殊的极化性质, 计算过程中极化电场和载流子不均匀分布对内建极化场的屏蔽的影响也被考虑进去。

计算中所采用的一些二元化合物材料参数值参如表 1 所示, 而不含应力的三元氮化物 InGaIn 能带间隙值是以二元化合物 (GaIn, InN) 线性内插, 再加一个二次修正项来表示。在这里, 我们采用 Vurgaftman 等人^[10] 提出的数值, 即, InGaIn 能带间隙弯曲系数设定为 3eV。除带隙能外, 能隙补偿率, 即定义为导带价带能隙台阶的比值, 也是研究 LED 器件效能的一个重要参数^[11], 在这里, 我们采用大多数学者认同的 0.7:0.3, 即 $\Delta E_c/\Delta E_v = 0.7/0.3$ 作为活性层材料参数。为了把材料界面的内建极化电荷考虑进去, 我们采用 Fiorentini 等人^[12] 发表的理论作为材料界面的极化电荷大小的计算依据。

量子阱内的自发辐射复合速率为^[13]:

$$r_{sp}^{sp}(E) = \sum_{i,j} \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) |H_{ij}|^2 f_j' (1 - f_i') D(E) \rho_{ij}$$

式中, f_j' , f_i' 分别为电子在导带第 j 能级和空穴在价带第 i 个能级内的占有概率; $D(E)$ 为自由空间光学模密度; ρ_{ij} 为联合态密度; 可表示为^[14]:

$$\rho_{ij} = \rho_{ij}^0 \hbar (\hbar\omega - E_{ij}^0)$$

其中, H_{ij} 为哈密顿量; 光学矩阵元为: $|H_{ij}|^2 = \left(\frac{q}{m_0} \right)^2$

$\left(\frac{2\hbar\omega}{4\varepsilon_1\varepsilon_0\omega^2} \right) M_{ij}^2$, 其中 M_{ij}^2 为跃迁矩阵元。

表 1 室温时二元化合物 GaIn 和 InN 的参数值

Parameters	GaIn	InN
Lattice constant/ $\text{\AA}$		
a	3.189	3.545
c	5.185	5.703
Energy parameter		
E_g (eV) at 300K	3.435	0.711
$\Delta 1 (= \Delta_{cr})/\text{eV}$	0.019	0.041
$\Delta 1 = \Delta 2 = \Delta_{cr}/3/\text{eV}$	0.0047	0.00033
Conduction-band effective masses		
$m_{//}^*$	0.20 m_0	0.12 m_0
$m_{\perp}^*$	0.20 m_0	0.12 m_0
Valence-band effective masses parameters		
A_1	-6.56	-8.21
A_2	-0.91	-0.68
A_3	5.65	7.57
A_4	-2.83	-5.23
A_5	-3.13	-5.11
A_6	-4.86	-5.96
Hydrost. d eformation potentials/eV		
a_x	-4.08	-3.5
a_t	-8.16	-3.5
Shear deformation potentials		
D_1/eV	-3.0	-3.0
D_2/eV	3.6	3.6
D_3/eV	8.82	8.82
D_4/eV	-4.41	-4.41
Elastic stiffness constants		
C_{13}/GPa	106	92
C_{33}/GPa	398	224
Spontaneous polarization		
$P_{sp}/\text{C} \cdot \text{m}^{-2}$	-0.034	-0.042

3 数值计算结果分析与讨论

图 1 分别给出室温为 300K 注入电流为 70mA 时传统 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ 量子阱 (a) 和台阶型 $\text{In}_{0.125}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ (0.75nm)/ $\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ (0.75nm) 量子阱 (b) 能带结构示意图。由图可知, 使用台阶型 InGaIn 型量子阱结构, 活性区载流子浓度特别是空穴浓度得到明显的增强。对于传统的 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ 量子阱, 如图 1(a) 所示, 空穴准费米能级远离价带, 暗示着量子阱里有很少的空穴存在。

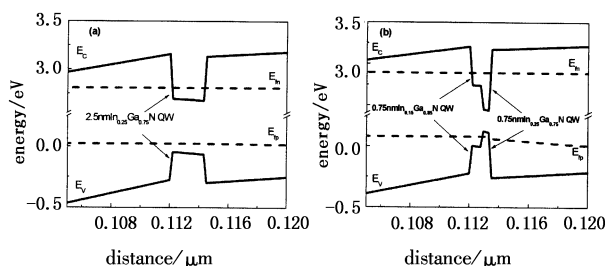


图1 传统构型的 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ 量子阱(a)和台阶型 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}-\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ 量子阱(b)能带结构示意图

为了更清楚地反映传统 InGaN 构型量子阱和台阶型 InGaN 构型量子阱里载流子浓度分布规律,图 2(a)和图 2(b)分别给出室温 300K 注入电流为 70mA 时传统的 InGaN 构型量子阱和台阶型 InGaN 构型量子阱区域载流子浓度分布图。由图得知,台阶型量子阱构型的采用,无论是量子阱中电子的浓度还是空穴的浓度较原始结构要高。表明台阶型 InGaN 构型量子阱有更强的载流子束缚能力。

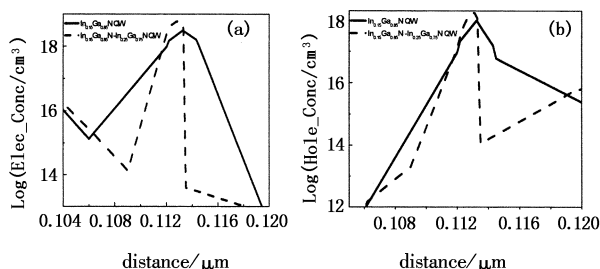


图2 传统的 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ 量子阱和台阶型 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}-\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ 量子阱电子浓度(a)和空穴浓度(b)分布示意图

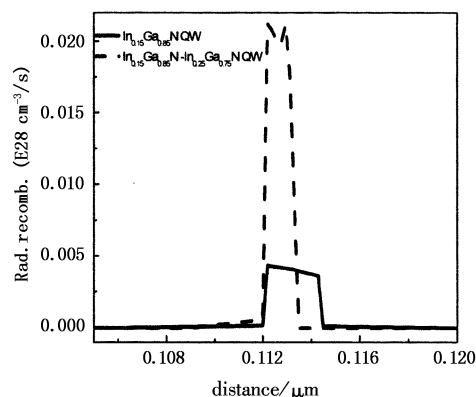


图3 传统的 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ 量子阱和台阶型 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}-\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ 量子阱自发辐射复合速率比较图

下面分析传统 InGaN 量子阱构型和台阶型 InGaN 量子阱构型活性区的自发辐射复合速率以及 Shockley-Read-Hall (SRH) 非辐射复合速率,比较两种量子阱结构对器件效能的影响。图 3 给出传统 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ 构型量子阱和台阶型 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}-\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ 构型量子阱自发辐射复合速率比较图。由图可知,传统的 2.5 nm $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ 量子阱自发辐射复合速率积分强度为 $1.016 \times 10^{19} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$,而台

阶型 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N} (0.75 \text{ nm}) - \text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N} (0.75 \text{ nm})$ 构型的量子阱自发辐射复合速率积分强度为 $2.512 \times 10^{19} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ 大的自发辐射复合速率积分强度暗示着台阶型 InGaN 构型的量子阱区域内单位面积和单位时间内有较多的光子数产生。

图 4 为传统 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ 构型量子阱和台阶型 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}-\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ 构型量子阱 SRH 复合速率图,SRH 复合速率表示为电子与空穴虽然有结合,但是结合后产生的能量不是转化成光子形式,而是以声子的形式释放出来,声子在发光二极管中会产生非辐射的贡献,因此 SRH 辐射复合速率越高,即表示无法贡献出光子的电子与空穴结合数目越多。所以,这个值越小对我们器件性能的提高越有帮助。传统的 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ 构型量子阱 SRH 复合速率积分强度为 $1.41 \times 10^{19} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$,新设计的台阶型 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}-\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ 量子阱 SRH 复合速率积分强度为 $1.247 \times 10^{19} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$,后者明显低于前者。电子溢流的减少可能是台阶型 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}-\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ 构型量子阱 SRH 复合速率积分强度的减少的主要原因。从图 4 中也可清楚地看出,传统 InGaN 构型量子阱在靠近 P-GaN 量子阱垒层的部分也存在着较明显载流子 SRH 非辐射复合的现象,这暗示着电子溢流现象比较严重,而台阶型 InGaN 构型量子阱能有效降低电子的溢流。这说明台阶型量子阱结构有较强地电子束缚能力。

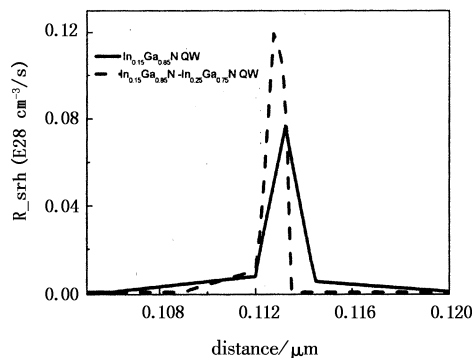


图4 传统的 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ 量子阱和台阶型 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}-\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ 量子阱 SRH 复合速率比较图

图 5 分别给出温度为 300K,传统的 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ 量子阱和台阶型 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}-\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ 量子阱输出功率图 5(a)和内量子效率图 5(b)随注入电流的变化关系。从图得知,台阶型量子阱有助于提升 LED 输出功率和内量子效率。对于传统的 InGaN 构型量子阱,在温度 300K,70mA 外加电流注入下,输出功率和内量子效率分别为 5.9mW 和 0.283,当采用台阶型 InGaN 量子阱时,9mW 的输出功率和 0.432 的内量子效率能够获得,相对于传统构型的 InGaN 量子阱来说,输出功率和内量子效率分别提高了 52.5% 和 52.6%。

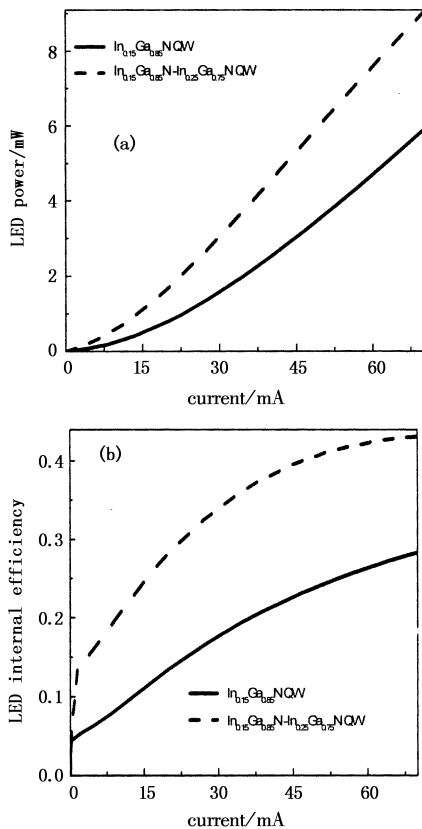


图5 温度为300K,传统的 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ 构型量子阱和台阶型 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N-In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ 构型量子阱输出功率(a)和内量子效率(b)随注入电流的变化关系

计算的传统 InGaN 构型量子阱和台阶型 InGaN 构型量子阱自发发光谱显示如图6所示。从图6中可以清楚地看出,新设计的台阶型 InGaN 构型量子阱自发发光强度明显比传统 InGaN 构型量子阱自发发光强度要高。在70mA外加电流注入下,台阶型 InGaN 构型量子阱的发光强度($4.77 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{eV}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)是传统 InGaN 构型量子阱发光强度($3.1 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{eV}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)的1.54倍。

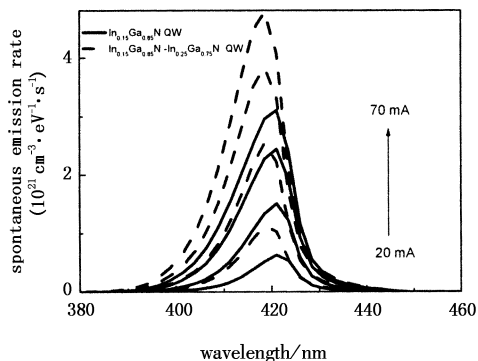


图6 传统 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ 构型量子阱和台阶型 $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N-In}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ 构型量子阱发光光谱

4 结 论

新的台阶型 InGaN 构型量子阱被设计并从理论上进行考察,包括量子阱区域载流子浓度分布、自发辐射复合速率、SHR 辐射复合速率以及输出功率和内量子发光效率的分析。研究结果表明,相对于

传统 InGaN 构型量子阱来说,使用台阶型 InGaN 构型量子阱结构,活性区载流子浓度特别是空穴浓度得到明显的增强,输出功率和内量子效率与传统 InGaN 构型量子阱相比分别提高了52.5%和52.6%。自发发光强度也有1.54倍的提升。这对目前通过量子阱结构的改造开发大功率发光二极管或激光二极管器件具有一定的指导意义。

参考文献:

- [1] K C Kim, Y C Choi, D H Kim, et al. Influence of electron tunneling barriers on the performance of InGaN-GaN ultraviolet light-emitting diodes [J]. Phys. Stat. Sol. A, 2004, 201:2663-2667.
- [2] N Otsuji, K Fujiwara, J K Sheu. Electroluminescence efficiency of blue InGaN/GaN quantum-well diodes with and without an n-InGaN electron reservoir layer [J]. J. Appl. Phys., 2006, 100:1131051.
- [3] Tzer-En Nee, Jen-Cheng Wang, Hui-Tang Shen, et al. Effect of multi-quantum barriers on performance of InGaN/GaN multiple-quantum-well light-emitting diodes [J]. J. Appl. Phys., 2007, 102:033101.
- [4] S Grzanka, G Franssen, G Targowski, et al. Role of the electron blocking layer in the low-temperature collapse of electroluminescence in nitride light-emitting diodes [J]. Appl. Phys. Lett., 2007, 90:103507.
- [5] Jongwoon Park, Yoichi Kawakami. Photoluminescence property of InGaN single quantum well with embedded Al-GaN layer [J]. Appl. Phys. Lett., 2006, 88:202107.
- [6] Seoung-Hwan Park, Jongwoon Park, Euijoon Yoon. Optical gain in InGaN/GaN quantum well structures with embedded AlGaIn layer [J]. Appl. Phys. Lett., 2007, 90:023508.
- [7] Ronald A Arif, Hongping Zhao, Nelson Tansu. Type-II InGaN-GaNAs quantum wells for lasers applications [J]. Appl. Phys. Lett., 2008, 92:011104.
- [8] Hongping Zhao, Ronald A Arif, Yik Khooon Ee, et al. Optical gain and spontaneous emission of strain-compensated InGaIn-AlGaIn quantum wells including carrier screening effect [J]. Proc. SPIE, 2008, 6889:688903.
- [9] S L Chang, C H Chang, K-P method for strained wurtzite semiconductors [J]. Phys. Rev. B, 1996, 54:2491-2504.
- [10] I Vurgaftman, J R Meyer, L R Ram-Mohan. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys [J]. J. Appl. Phys., 2001, 89:5815-5875.
- [11] J Piprek, S Nakamura. Physics of high-power InGaIn-GaN lasers [J]. IEEE Proc.-Optoelectron., 2002, 149:145-151.
- [12] V Fiorentini, F Bernardini, O Ambacher. Evidence for nonlinear macroscopic polarization in III-V nitride alloy heterostructures [J]. Appl. Phys. Lett., 2002, 80:1204-1206.
- [13] R H Yan, S W Corzine, L A Coldren, et al. Corrections to the expression for gain in GaAs [J]. IEEE J. Quantum Electron., 1990, 26:213-216.
- [14] F Wooten. Optical properties of solids [M]. New York, London: Academic Press, 1972.