

# 应力补偿型 InGaN - AlGaN 量子阱发光二极管结构优化研究

李为军<sup>1</sup>, 张波<sup>1</sup>, 徐文兰<sup>2</sup>, 陆卫<sup>1</sup>

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

**摘要:** 薄的应力补偿层 AlGaN 的引进对 InGaN 量子阱结构的发光二极管输出功率和内量子效率的影响被详细考察。由理论模拟结果得知, 不管是在低温还是高温, 合适的应力补偿层引进都能极大改善 LED 器件输出功率和内量子效率。应力补偿层 AlGaN 的加入导致器件漏电流的降低被认为是器件效能提高的主要原因。定量优化 AlGaN 应力补偿层的厚度和其中 Al 的含量在这里也被探讨研究。计算结果表明, 当应力补偿型 InGaN - AlGaN 量子阱结构中 AlGaN 厚度为 1nm, Al 含量为 0.25 时, 能够获得最大的发光功效和内量子效率。

**关键词:** 应力补偿型量子阱; InGaN; 发光二极管; 数值模拟

**中图分类号:** TN312+.8 **文献标识码:** A

## Study on Structure Optimization of Strain-compensated InGaN-AlGaN Quantum Well Light-emitting Diode

LI Wei-jun<sup>1</sup>, ZHANG Bo<sup>1</sup>, XU Wen-lan<sup>2</sup>, LU Wei<sup>1</sup>

(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:** Output performance and internal quantum efficiency of an InGaN light emitting diode (LED) using thin AlGaN as strain-compensated layer is theoretically investigated. The result shows that a significant improvement can be obtained when the strain-compensated InGaN-AlGaN quantum well structure is utilized as quantum well active layer at low and high temperature. The enhancement of the LED performance is mainly attributed to the decrease in electronic leakage current. Qualitative optimization of the thickness and Al composition in the AlGaN strain-compensated layer is also studied. The calculation indicates that the strain-compensated InGaN-AlGaN quantum well structure LED can provide better output characteristics and internal quantum efficiency when the AlGaN layer thickness is 1nm and Al composition is 25%.

**Key words:** strain-compensated quantum well; InGaN; light-emitting diode; numerical simulation

### 1 引言

近年来, III - V 族氮化物材料的发光二极管由于其广阔的应用前景受到相当的注目。虽然部分已经商品化, 然而, 发光效率低的问题一直没能很好地解决。由于 III - V 族氮化物发光二极管本身空穴掺杂浓度比较低, 并且有较高的串联电阻和较低的材料增益, 这就需要较大的电流注入, 大的电流注入又会导致电子溢流现象的产生, 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改善电子溢流, 例如, 在活性层下方使用 (electron tunneling barrier, ETB)<sup>[1]</sup> 和用 Si 掺杂的 InGaN 量子

**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, 博士研究生, 主要从事 GaN - 基发光二极管光电性能的研究。E-mail: island112112@126.com

**收稿日期:** 2008-04-26; **修订日期:** 2008-06-06

阱层作为 current-spreading layer<sup>[2]</sup>,除此之外,多重位障(multiple quantum barriers, MQB)<sup>[3]</sup>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<sup>[4]</sup>。新近,为减少量子阱中电子与空穴分离效应提高 LED 的发光性能,一些新的量子阱构型也已被提出和研究,例如在传统 InGaN QW 里使用  $\delta$ -AlGaIn 层<sup>[5-6]</sup>, staggered InGaN QW<sup>[7]</sup>以及 type-11 InGaIn-GaNAs QW<sup>[8]</sup>,最近 InGaIn-AlGaIn 应力补偿 QW 结构在 LD 方面的研究已被报道<sup>[9]</sup>,研究结果表明,在传统 InGaIn 量子阱两边各增加一薄的 AlGaIn 层能有效提升 LD 自发辐射强度和光增益。本研究从理论上详细考察了薄的应力补偿层 AlGaIn 的引进对 InGaIn 量子阱结构的发光二极管输出功率和内量子效率的影响,并且通过变化应力补偿层中 Al 的含量,以及改变应力补偿层的厚度来优化 LED 的发光性能。

## 2 物理模型与器件结构

APSYS(advanced physical models of semiconductor devices)<sup>[10]</sup>模拟程序在这次研究中被使用,此程序整合了泊松方程、电流连续性方程、载流子传导方程、量子机制波方程以及热传导方程等。在处理含应力的 InGaIn 量子阱导带和价带能级时,为了简化能级计算,在能带结构上求解上忽略了导带和价带的能级之间的耦合作用,分别采用抛物带模型<sup>[11]</sup>和有效质量近似模型<sup>[12]</sup>。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。计算不含应力的三元氮化物 InGaIn 能带间隙值是以二元化合物(GaN, InN)去线性内插,再加一个二次修正项来表示。在这里,采用 Vurgaftman 等人<sup>[13]</sup>提出的数值,即:InGaIn 能带间隙弯曲系数设定为 3eV。除了带隙能外,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<sup>[14]</sup>,在这里,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。

InGaIn 单量子阱结构的蓝色发光二极管将被模拟,其中器件大小为  $350\mu\text{m} \times 350\mu\text{m}$ ,具体器件结构从下到上依次为蓝宝石基板,30nm GaN 缓冲层,4 $\mu\text{m}$  N-GaN(Si),活性层,最后为 0.25 $\mu\text{m}$  的 P-GaN(Mg)。对于传统结构量子阱和应力补偿型量子阱来说,活性层分别选用  $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}(2.4\text{nm})/\text{GaIn}((12-d)\text{nm})$ 。

$\text{GaIn}((12-d)\text{nm})/\text{GaIn}((12-d)\text{nm})$ 。N 型和 P 型导电层掺杂浓度分别设定为  $3 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$  和  $5 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$ 。

## 3 模拟结果与分析

图 1(a)和(b)分别给出在室温 300K 注入电流为 105mA 时传统 InGaIn-GaN 量子阱和应力补偿型 InGaIn-AlGaIn 量子阱结构能带结构示意图。由图可知,应力补偿 InGaIn-AlGaIn 型量子阱结构的使用明显增强了活性区载流子的浓度。为了深入揭示应力补偿型量子阱结构 LED 发光效能提高的物理本源和进一步优化应力补偿型 InGaIn-AlGaIn 型量子阱结构,接下来将通过改变应力补偿层 AlGaIn 中 Al 的含量和厚度进行分析,来找出一个合适的 Al 含量和应力补偿层的厚度使得 LED 的发光效能得到最优改善。

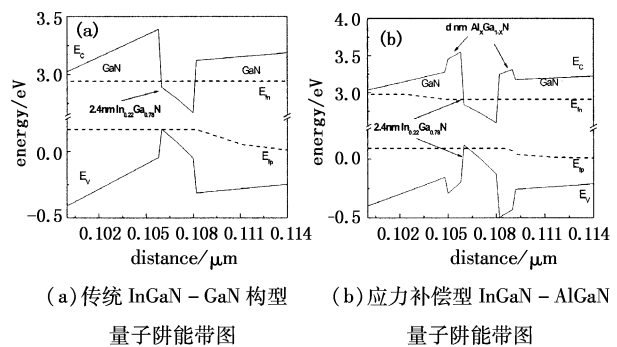
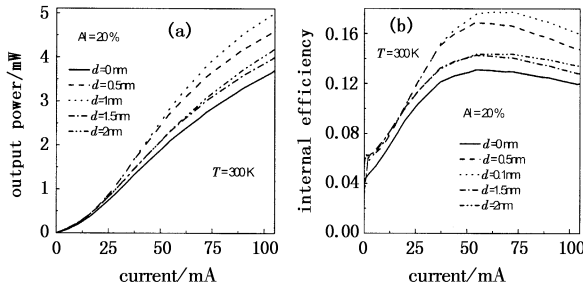


图 1 量子阱结构能带示意图

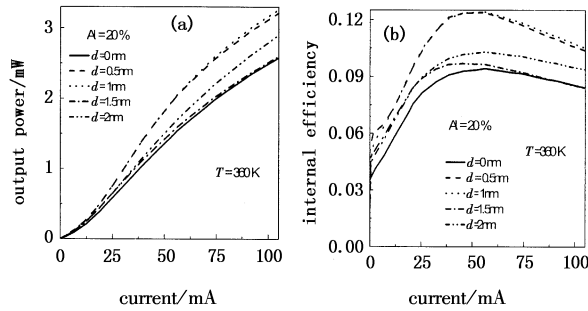
为了找到一个合适的应力补偿层的厚度,首先假定应力补偿层 AlGaIn 中 Al 的含量固定为 20%。图 2(a)和(b)分别展示了温度为 300K, Al = 20% 时,应力补偿型 InGaIn-AlGaIn 量子阱中不同 AlGaIn 的厚度所对应的输出功率和内量子效率随注入电流的变化关系。由图 2 可知,对于传统 InGaIn-GaN 构型的量子阱,即应力补偿层厚度  $d = 0\text{nm}$  时,输出功率和内量子效率在 105mA 外加电流注入下分别为 3.7mW 和 0.12,当引入应力补偿层并且应力补偿层厚度为 1nm 时,能够获得 5mW 的输出功率和 0.16 的内量子效率,与传统型量子阱相比,输出功率和内量子效率分别提高了 1.35 和 1.33 倍。相同的趋势在图 3 中也可以看出,图 3(a)和(b)分别给出了温度在 360K,应力补偿型 InGaIn-AlGaIn 量子阱不同 AlGaIn 的厚度所对应的输出功率(a)和内量子效率(b)随注入电流的变化关系。如图 3 所示,相对于传统构型量子阱而言,在温度为 360K, 105mA 外加注入电流下,当应力补偿层厚度为 1nm

时,应力补偿型量子阱输出功率和内量子效率可分别提高 1.26 和 1.25 倍。



(a) 输出功率随注入电流的变化关系 (b) 内量子效率随注入电流的变化关系

图 2 在温度 300K, Al = 20% 时, 应力补偿型 InGaN - AlGaN 量子阱输出功率



(a) 输出功率随注入电流的变化关系 (b) 内量子效率随注入电流的变化关系

图 3 在温度 360K, Al = 20% 时, 应力补偿型 InGaN - AlGaN 量子阱输出功率和内量子效率随注入电流的变化关系

电子溢流的减少被认为是器件效能提高的主要原因,电子溢流定义为恰好越过电子阻挡层的电子流大小除以进入活性区第一个量子阱垒层的电子流大小。图 4 给出在温度为 300K 和 360K, 注入电流为 105mA 时漏电流百分比随应力补偿层厚度变化的关系曲线。由图可知,合适厚度应力补偿层 AlGaN 的引入能有效降低电子溢流。特别是当应力补偿层厚度为 1nm 时,能够取得最小的漏电流。

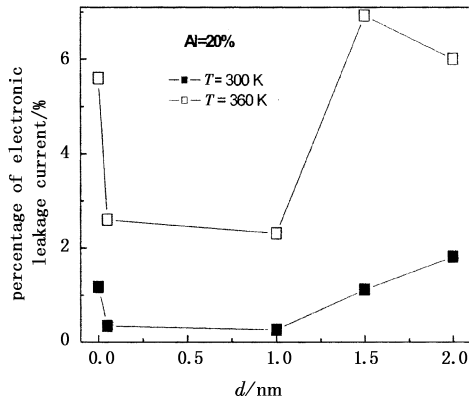
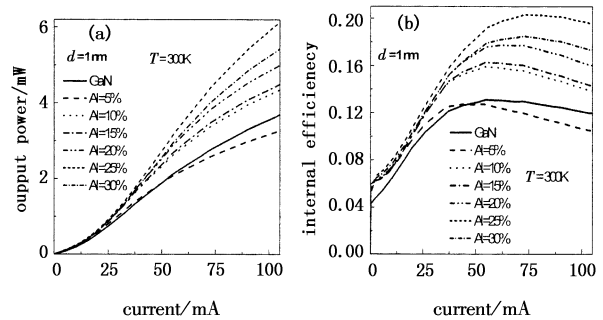


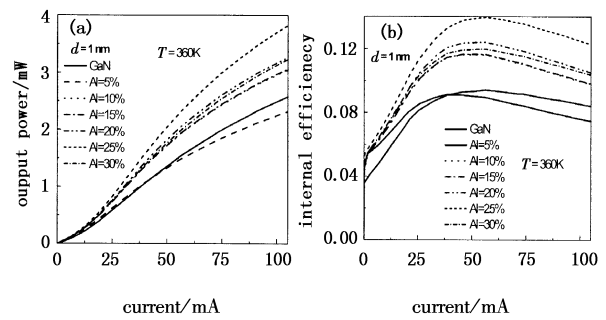
图 4 在 Al = 20%, 温度为 300K 和 360K 时, 漏电流百分比随应力补偿层厚度变化关系曲线

由于已经找到一个合适的应力补偿层的厚度, 接下来改变之前所假定的应力补偿层 AlGaN 中 Al 的含量。图 5 (a) 和图 5 (b) 分别展示了温度在 300K 时不同 Al 含量的 InGaN - AlGaN 应力补偿型量子阱结构的输出功率和内量子效率图。图中 Al 的含量的改变从 Al = 0 到 Al = 0.30, 我们发现, 随着补偿层中 Al 含量的不同, 改善效果也不同, Al = 25% 时改善的效果最佳, 器件对应有较大的输出功率 (6.13mW) 和内量子效率 (0.195)。类似的趋势在温度为 360K 也同样可以观察到 (如图 6 (a) 和图 6 (b) 所示), 温度在 360K 时, 依然是当 Al = 25% 时器件对应有较大的输出功率 (3.82mW) 和内量子效率 (0.123)。



(a) 输出功率 (b) 内量子效率

图 5 温度在 300K 时, 传统 InGaN - GaN 量子阱和不同 Al 含量应力补偿型 InGaN - AlGaN 量子阱输出功率和内量子效率示意图



(a) 输出功率 (b) 内量子效率

图 6 温度在 360K 时, 传统 InGaN - GaN 量子阱和不同 Al 含量应力补偿型 InGaN - AlGaN 量子阱输出功率和内量子效率示意图

应力补偿层 AlGaN 的引入导致导带能隙补偿差 ( $\Delta E_c$ ) 增加被认为是器件效能提升的主要因素。图 7 给出了温度为 300K 和 360K 不同 Al 含量对应的漏电流百分比以及与导带能隙补偿差 ( $\Delta E_c$ ) 之间的关系图。由图可知, 随着应力补偿层中 Al 含量的增加,  $\Delta E_c$  也相应增加。这就致使大部分载流子被局限在量子阱中进行辐射复合发光, 减少了非辐射复合效应, 从而增强了器件输出功率和内量子效率。然而, 并不是 Al 含量越高器件性能就越好, 例如当

Al = 30% , 虽然有较高的  $\Delta E_C$  , 器件性能反而降低 (如图5和图6所示), 这是由于高的 Al 含量导致应力补偿层与量子阱之间大的晶格失配度, 致使器件效能下降。综合以上因素, 我们发现, 当 AlGaIn 层厚度为 1nm, Al 含量为 25% 时, 器件的性能能够得到最优的改善。

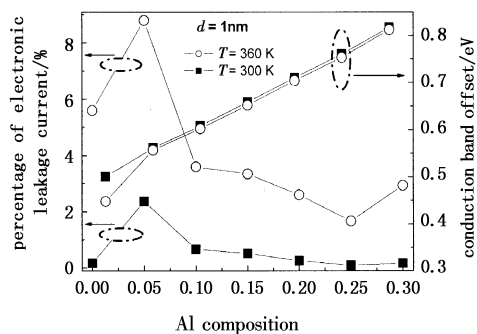


图7 在温度为 300K 和 360K 下, 漏电流百分比和导带能隙补偿差随应力补偿层中 Al 组分的演化关系

#### 4 结论

本文探讨了薄的应力补偿层 AlGaIn 的引入对 InGaIn 量子阱结构的发光二极管效能的影响, 包括不同温度的输出功率和内量子效率。由理论模拟结果得知, 不管是在低温还是高温, 合适的应力补偿层地引进都能极大改善 LED 器件输出功率和内量子效率。对本器件而言, 当应力补偿型 InGaIn - AlGaIn 量子阱中 AlGaIn 厚度为 1nm, Al 的质量分数为 25% 时, 能够获得最大的发光功效和内量子效率。这对改善发光二极管或激光二极管的效能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 InGaIn - GaIn 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 InGaIn/GaIn quantum-well diodes with and without an n-InGaIn electron reservoir layer [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 InGaIn/GaIn multiple-quantum-well light-emitting diodes [J]. Ap-

pl. 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 InGaIn single quantum well with embedded Al-GaIn layer [J]. Appl. Phys. Lett., 2006, 88:202107.
- [6] Seung-Hwan Park, Jongwoon Park, Euijoon Yoon. Optical gain in InGaIn/GaIn quantum well structures with embedded AlGaIn layer [J]. Appl. Phys. Lett., 2007, 90:023508.
- [7] Ronald A Arif, Yik-Khoon Ee, Nelson Tansu. Polarization engineering via staggered InGaIn quantum wells for radiative efficiency enhancement of light emitting diodes [J]. Appl. Phys. Lett., 2007, 91:091110.
- [8] Ronald A Arif, Hongping Zhao, Nelson Tansu. Type-II In-GaIn - GaInAs quantum wells for lasers applications [J]. Appl. Phys. Lett., 2008, 92:011104.
- [9] Hongping Zhao, Ronald A Arif, Yik Khoon 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.
- [10] Apsys Version 2006. 07 by Crosslight Software Inc., Burnaby, Canada. (<http://www.crosslight.com>).
- [11] S L Chuang, C S Chang, et al. Band structure model of strained quantum-well wurtzite semiconductors [J]. Semicond. Sci. and Technol., 1997, 12:252 - 263.
- [12] S L Chuang, C S Chang, et al. k · p method for strained wurtzite semiconductors [J]. Phys. Rev. B., 1996, 54:2491 - 2504.
- [13] I Vurgaftman, J R Meyer, et al. Band parameters for nitrogen-containing semiconductors [J]. Appl. Phys., 2003, 94:3675 - 3696.
- [14] J Piprek, S Nakamura, et al. Physics of high-power In-GaIn-GaIn lasers [J]. IEEE Proc. Optoelectron, 2002, 149:145 - 151.
- [15] V Fiorentini, F Bernardini, O Ambacher, et al. Evidence for nonlinear macroscopic polarization in III - V nitride alloy heterostructures [J]. Appl. Phys. Lett., 2002, 80:1204 - 1206.