

GaN 基 LED 外延片结构设计 with 生长

专业名称： 材料物理与化学 申请者姓名： 卢太平 导师姓名： 李述体

摘 要

GaN 基半导体作为一种新型光电功能材料，以其宽的禁带宽度（且属于直接带隙），高稳定性、高热导率、高硬度等优良性质，可广泛应用于显示指示、固态照明、太阳能电池、固体激光器、紫外探测器以及各种微电子器件等领域。然而随着正向电流的逐渐增大，LED 的量子效率大幅下降，即通常所指的 efficiency drop 现象，量子效率下降严重阻碍了 LED 在大功率器件方面的进一步发展。长期以来，很多学者和研究组对此现象进行了大量研究，然而，目前并没有很有效的方法解决此问题。由于 GaN 薄膜通常是沿着其极性轴 c 轴方向生长，GaN 及其合金在〈0001〉方向具有很强的自发极化和压电极化。这种极化效应在氮化物外延层中产生较高强度的内建电场，引起能带弯曲、倾斜，使电子和空穴在空间上分离，减少了电子波函数与空穴波函数的重叠，降低辐射复合效率，使材料的发光效率大大降低，故极化效应是主要的影响机制之一，另一方面由于电子具有较小的有效质量和较高的迁移率，电子可以轻易的越过电子阻挡层所形成的势垒，到达 p 区和空穴发生复合，减小了空穴浓度和注入效率。而空穴具有较大的有效质量和很低的迁移率，电子阻挡层和量子阱垒层也对空穴的注入和传输起到的阻碍作用，这样空穴的注入效率就会大大降低。综上所述，电子在 p 区溢出和较低的空穴注入效率也是主要影响机制之一。本文从上述两个方面对 LED 的结构加以改进并进行了系统的理论研究，获得了如下有创新和有意义的研究结果：

1、系统研究了采用晶格匹配的 $p\text{-Al}_{0.82}\text{In}_{0.18}\text{N}$ 取代传统的 $p\text{-AlGaIn}$ 作为电子阻挡层的 LED 的性能。模拟结果表明由于增加了有效势垒高度，器件的光功率

大为增加, efficiency droop 现象减弱。

2、研究了具有 dip-shaped 量子阱结构 LED 的光电特性, 模拟结果表明: 由于极化效应减弱, 使得波函数的重叠增加和辐射复合效率增大进而改善了 LED 的光电特性。

3、研究了采用 $p\text{-Al}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{N}$ 作为量子阱垒层结构的 LED 特性, 模拟结果表明: 在低掺杂的情况下, 与传统的 $p\text{-GaN}$ 结构相比, $p\text{-Al}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{N}$ 作为垒层在改善空穴注入和电子阻挡方面, 效果显著。

4、研究了具有 $p\text{-Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$ 作为空穴注入层的 LED 的光电性能, 模拟结果表明: 与 $p\text{-GaN}$ 空穴注入层相比, 前者在空穴注入效率及电子阻挡效率方面有着较大的提高使得 LED 的性能更加优越。

5、研究了 InGaN/GaN 多量子阱与 $p\text{-AlGaN}$ 电子阻挡层之间不同厚度的 $u\text{-GaN}$ 间隔层对 LED 光电性能的影响, 实验结果表明: 当 $u\text{-GaN}$ 厚度为 50nm, 驱动电流为 20mA 的情况下, LED 的光功率最大, 反向漏电流较小, 通过对其光电性能的分析 and 软件模拟, 这些性能的改善主要归因于 $u\text{-GaN}$ 间隔层有利于改善耗尽层的质量, 进而减少多量子区域的 SRH 复合。

关键词: 氮化镓; 发光二极管; 多量子阱; MOCVD

STRUCTURE DESIGN AND GROWTH OF GAN BASED LED EPITAXIAL WAFER



Major: Materials Physics and Chemistry Name: Taiping Lu
Supervisor: Shuti Li

ABSTRACT

GaN-based semiconductors as a new photoelectric materials, with wide direct band gap, high stability, high thermal conductivity, high hardness and other excellent properties, can be widely used in display instructions, solid-state lighting, solar cells, solid-state lasers, UV detectors, and various areas of microelectronics devices. However, the phenomenon referred to as efficiency droop is that quantum efficiency monotonically decreases as the injection current increases. The efficiency "droop" is a severe problem for further application of high power GaN based light emitting diodes. There are many reports about the mechanism of efficiency droop such as electron leakage, Auger recombination, junction heating, polarization field, filling of localized states, injection efficiency, dislocation density and quantum confined stark effect (QCSE). However, the mechanism of efficiency droop is not very clear, and hence there is no effective method to completely solve this problem. For a long time, GaN films are usually grown along the c axis. However, GaN and its alloys have a strong spontaneous polarization and piezoelectric polarization in $\langle 0001 \rangle$ direction. Such polarization effects in nitride epitaxial layer produce stronger built-in electric field, causing the band bending, tilting, and separating electron and hole in space, so that the luminous efficiency is greatly reduced. On the other hand, For GaN-based devices, due to high active energy of Mg dopants, it is a great challenge to get high hole concentration,

under the case that the crystal quality is not deteriorated, so the hole injection efficiency is greatly limited; Furthermore, the holes have a relatively high effective mass and therefore a very low mobility, it is difficult for holes to transport from p-type layer to active region. Besides, the electron blocking layer (EBL) is found to act as a potential barrier for and holes, the holes are more difficult to transport into and across the quantum wells (QWs), and thus the hole injection efficiency is low in InGaN based LEDs. In contrast to holes, electrons in GaN based materials have a relatively small effective mass and therefore a very high mobility. Electrons can overflow across quantum barrier (QBs) and EBL potential relatively easily and cause insufficient electron blocking. As a result, the leakage current in the p-type region can recombine with holes, and thus reduce the hole injection efficiency and the quantum efficiency. To sum up, for the exploration of efficiency droop in blue InGaN LEDs, alleviating the polarization field, increasing the hole injection efficiency and reducing the electron leakage in p-type layer may be a key issue. In this work, we have studied the LEDs with different structures to improve the optical and electrical properties of LED and some innovative and meaningful research results were got as follows:

- 1、 We have studied InGaN based light-emitting diodes (LEDs) with different electron blocking layer(EBL). It was found that the conventional structure with p-AlGaIn electron blocking layer had a serve electron leakage, and showed inferior light output power, dramatically efficiency droop. In contrast to the p-AlGaIn LED, the LED with p-AlInN EBL showed improved light output power, lower current leakage and efficiency droop. Based on numerical simulation and analysis, these improvements of the electrical and optical characteristics are mainly attributed to efficient electron blocking in InGaN/GaN MQWs by lattice matched p-AlInN EBL.

- 2、 InGaN based LEDs with traditional rectangular QWs and dip-shaped QWs have been numerically investigated. It was found that the conventional structure with rectangular QWs had a serve electron leakage, and showed inferior light output power, dramatically efficiency droop. In contrast to the rectangular QWs, the LED with dip-shaped QWs showed improved light output power, lower current leakage and efficiency droop. Based on numerical simulation and analysis, these improvements of

the electrical and optical characteristics are mainly attributed to alleviation of the electrostatic field in InGaN/GaN MQWs by using dip-shaped QWs

3、InGaN based LEDs with different p-type QBs have been studied. The simulation results show that newly designed LEDs with p-AlGaIn QBs have better performances than the conventional LED with p-GaN QBs, and improved light output power, lower current leakage and reduction in efficiency droop were observed in this new structure. The physical origin for the performance improvement is mainly due to the smaller effective potential height for holes and larger effective potential height for electrons, and thus enhanced hole injection efficiency and efficient electron blocking.

4、InGaN based LEDs with different p-type hole injection layer (HIL) have been numerically investigated. The simulation results show that the LEDs with p-AlGaIn HIL have better performances than the LEDs with p-GaN HIL, improved light output power, lower current leakage and reduction in efficiency droop were observed in this structure. The physical origin for the performance improvement is mainly due to the smaller polarization field induced less band bending at the interface between the HIL and EBL, and thus enhanced hole injection efficiency and efficient electron blocking.

5、InGaN based light-emitting devices (LEDs) with undoped GaN interlayer of variant thickness grown by metal-organic chemical vapor deposition technique have been investigated. It was found that the thickness of undoped GaN interlayer greatly affected LEDs' performance. The LEDs with 50 nm undoped GaN interlayer showed improved light output power and low reverse-leakage current compared with the others at 20 mA. Based on electrical and optical characteristics analysis and numerical simulation, these improvements are mainly attributed to improving the quality of depletion region by inserting an undoped GaN layer, as well as reduction of the Shockley-Read-Hall recombination in InGaN/GaN MQWs.

KEY WORDS: LED; GaN; MQW; MOCVD

目 录

1 绪论.....	1
1.1 引言.....	1
1.2 III-V 族氮化物简介.....	2
1.3 GaN 基器件应用.....	4
1.3.1 GaN 基 LED.....	5
1.3.2 激光器二极管.....	5
1.3.3 GaN 基紫外光探测器.....	6
1.3.4 电学器件.....	7
1.4 GaN 基发光二极管.....	8
1.4.1 LED 的工作原理.....	8
1.4.2 发光二极管光源的基本特征.....	10
1.4.3 LED、荧光灯和白炽灯性能比较分析.....	11
2 Apsys 软件及相关物理模型简介.....	12
2.1 前言.....	12
2.2 物理模型及相关参数简介.....	12
3 p-AlInN 作为蓝光 LED 电子阻挡层的研究.....	16
3.1 研究背景.....	16
3.2 结构及参数设置.....	16
3.3 结果与讨论.....	17
3.4 小结.....	22

4 具有凹形量子阱结构蓝光 LED 的研究	23
4.1 研究背景	23
4.2 结构及参数设置	23
4.3 结果与讨论	25
4.4 小结	30
5 p-AlGaIn 作为蓝光 LED 量子阱垒层的研究	32
5.1 研究背景	32
5.2 结构及参数设置	32
5.3 结果与讨论	33
5.4 小结	40
6 蓝光 LED 空穴注入层的研究	41
6.1 研究背景	41
6.2 结构及参数设置	41
6.3 结果与讨论	42
6.4 小结	49
7 μ -GaIn 间隔层厚度对 GaN 基蓝光 LED 性能的影响	50
7.1 研究背景	50
7.2 实验过程	50
7.3 结果与讨论	51
7.4 小结	55
8 结论	56
参考文献	57

致 谢.....	63
作者攻读学位期间发表的学术论文目录.....	64

第一章 绪论

1.1 引言

第一代以硅为原材料的半导体使计算机技术发展到了一个前所未有的高度,第二代以 GaAs 为代表的化合物半导体使手持设备小型化得以实现。对微电子和光电子领域来说,高速仍然是微电子的追求目标,耐高温、大功率、抗辐照等还是没有很好解决的问题;光电子领域则是研究全光谱的发光器件,特别是短波长(绿光、蓝光以至紫外波段)LED 和 LD 等器件,也有许多问题尚待解决;光电集成(OEIC)是人们长期追求的目标,但由于光、电材料相互之间存在兼容性问题,目前还没有很好地实现光电集成。事实上,由于第一代和第二代半导体材料本身的性质,决定了上述问题、目标是不可能在前两代半导体材料体系中得以解决的。以温度特性为例,对第一代半导体材料, Si 工艺的器件、电路工作温度不能超过 130℃;而第二代半导体材料的 GaAs 工艺产品的极限工作温度为 200℃。因此,发展以 GaN 为代表的第三代半导体的就成了大势所趋。在光电子方面, GaN 在光显示、光存储、光照明等领域都有广阔的应用前景。比如用高效率蓝绿光 LED 制作的超大屏幕全色显示,可用于室内室外各种场合的动态信息显示,在超大型、全平面、高清晰、无辐射、低功耗、真彩色大屏幕显示领域也占相当大的比重。高效率白光 LED 作为新型高效节能固体光源,使用寿命超过 10 万小时,比白炽灯节电 5~10 倍,达到了节约资源、减少环境污染的双重目的,将会在世界范围内引发照明电光源的一场划时代的深刻革命。蓝光 LD 用于制作下一代 DVD,其光盘存储密度是现在 CD 光盘存储密度的 20 倍以上,这对信息的存储、读取和转移都将产生巨大的推进作用。作为第三代化合物半导体, GaN 基半导体材料具有宽带隙、高电子漂移速度、高热导率、耐高电压、耐高温、抗腐蚀、抗辐射等突出优点,特别适合制作高频、高效、高温、高压、大功率微波器件,基于 GaN 的 AlGaIn/GaN HEMT 器件具有输出功率密度大、耐高温、抗辐射等特点^[1],能满足下一代电子装备对微波功率器件更大功率、更高频率、更小体积和更恶劣条件高温下工作的要求。表 1-1 给出了三代典型半导体材

料的特性参数。

表 1-1 三代典型半导体的特性参数比较

材料	禁带类型	禁带宽度(eV)	熔点(℃)	热导率(W·cm ⁻¹ ·K ⁻¹)	电子迁移率(cm ² ·V ⁻¹ ·s ⁻¹)	相对介电常数	电子饱和速率(cm·s ⁻¹)	击穿电场V·cm ⁻¹
Si	间接	1.119	1420	1.40	1350	11.9	1×10 ⁷	0.37×10 ⁶
GaAs	直接	1.428	1238	0.54	8000	13.18	2×10 ⁷	0.4×10 ⁶
GaN	直接	3.39	1700	1.5	1250	8.9	2.5×10 ⁷	4.1×10 ⁶
SiC	间接	2.994	2380	4.9	1000	9.7	2×10 ⁷	1.54×10 ⁶
金刚石	间接	5.5	4000	20	2200	5.5	2.5×10 ⁷	7×10 ⁶

从表 1-1 可以看出,与第一、第二代电子材料相比,第三代宽禁带半导体材料具有能隙更宽、电子饱和速率更高、击穿电压更大、介电常数更小、导热性能更好等特点。对 GaN 而言,其化学性质更稳定、耐高温、耐腐蚀,非常适合于制作抗辐射、高频、大功率和高密度集成的电子器件以及蓝、绿光和紫外光电子器件。所有这些优良的性质,很好地弥补了前两代半导体材料本身固有的缺点,从而成为飞速发展的研究前沿。

1.2 III-V 族氮化物简介

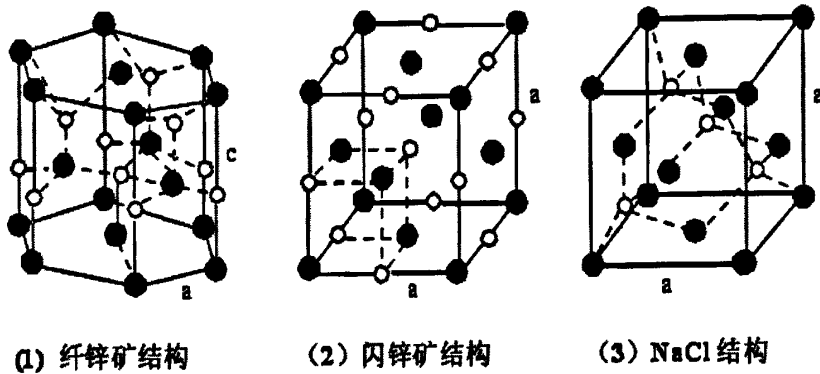


图 1-1 氮化镓的三种基本结构

一般氮化物主要指由 III 族原子—铝 (Aluminum, Al)、镓 (Gallium, Ga)、铟 (Indium, In) 与 V 族元素—氮 (Nitrogen, N) 化合而成的材料,如氮化铝 (Aluminum Nitride, AlN)、氮化镓 (Gallium Nitride, GaN)、氮化铟 (Indium Nitride, InN) 等二元化合物,铝镓氮 (Aluminum Gallium Nitride, AlGaN)、铟镓氮 (Aluminum Indium Nitride, AlInN) 等三元化合物,以及铝镓铟氮 (Aluminum Gallium Indium Nitride, AlGaInN) 四元化合物。由于 III-V 氮化

物系列材料大部分属于直接带隙结构，且带隙宽度为 (0.7 eV-6.2 eV) [2]，发光波长涵盖紫外到红外波段，适当的调整化合物的成份比例，即可得到需要的发光波长，非常适合作为发光组件的材料。

GaN、InN、AlN 以及由它们组成的三元合金可能具有的结构有六方对称性的纤锌矿结构、立方对称性的闪锌矿结构和 NaCl 结构，如图 1-1 所示。它们的稳定结构是具有六方对称性的纤锌矿结构，是由六角单胞组成，因而具有两个晶格常数—— a 和 c 。每个单胞由两套沿 c 轴方向错位 ($3/8 c$) 的六角密堆积 (HCP) 的子晶格构成，每个子晶格由一种原子组成 [3]。闪锌矿结构由立方单胞构成，单胞中的原子位置与金刚石晶体结构相似，这两种结构的单胞都是由沿体对角线方向错位 $1/4$ 体对角线距离的两个面心立方子晶格镶嵌而成。在这两种结构中，每个 III 族原子连接四个 N 原子，同样，每个 N 原子与四个 III 族原子相连接。这两种结构的最大不同是原子层的堆积顺序 [3]，两种结构的堆垛方式如图 1-2 所示。

对闪锌矿晶格，原子堆积方式为： $\cdots Ga_A N_A Ga_B N_B Ga_C N_C Ga_A N_A Ga_B N_B Ga_C N_C \cdots$

对纤锌矿结构，原子堆积方式为： $\cdots Ga_A N_A Ga_B N_B Ga_A N_A Ga_B N_B Ga_A N_A Ga_B N_B \cdots$

NaCl 结构是氮化物在高压下的存在相 [4]，AlN 的 NaCl 相被预言在 12 Gpa [5] 或 23 Gpa [6] 时出现，并被 Ueno 等人观察到。GaN 和 InN 分别在 50 Gpa [7] 和 16~17 Gpa [8] 出现。

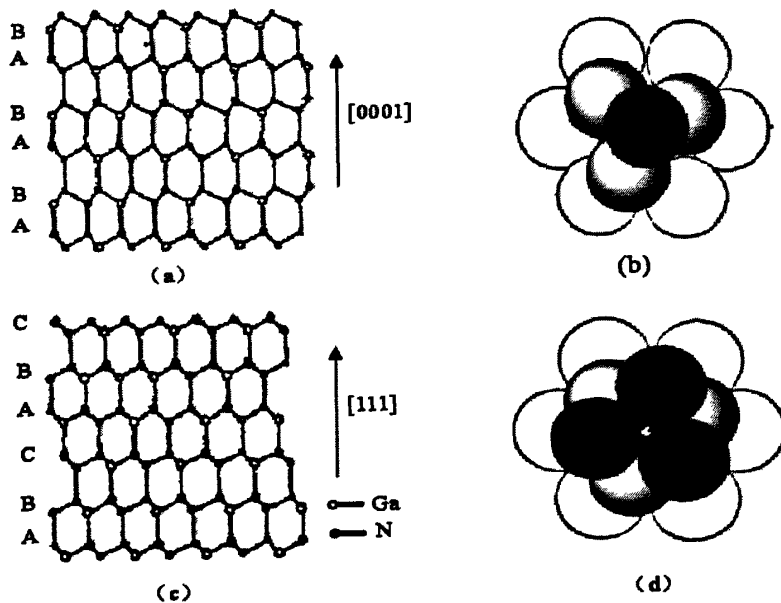


图 1-2 纤锌矿 (a, b) 和闪锌矿结构 (c, d) 的堆垛方式

纤锌矿结构的 GaN 生长方向一般垂直于 (0001) 基面, 在那里原子被排列在由两个很接近的六角形层构成的双层内, 一层由阳离子占据, 另一层由阴离子构成, 因此双层具有两个极性面。这样 GaN 的基面(basal surface)可能由 Ga 占据, 也可能由 N 占据 (图 1-3)。据报导, 用 MOCVD 技术在蓝宝石衬底的 C 平面上沉积的高质量 GaN 外延膜是垂直于 (0001) 方向生长的, 表面由 Ga 占据, 而 MBE 生长一般发生在 (0001) 面, 形成 N 占据的表面^[9, 10]。Ponce 等人发现单晶的光滑面对应于 (0001) Ga 面, 而 (0001) N 面则粗糙得多^[11]。

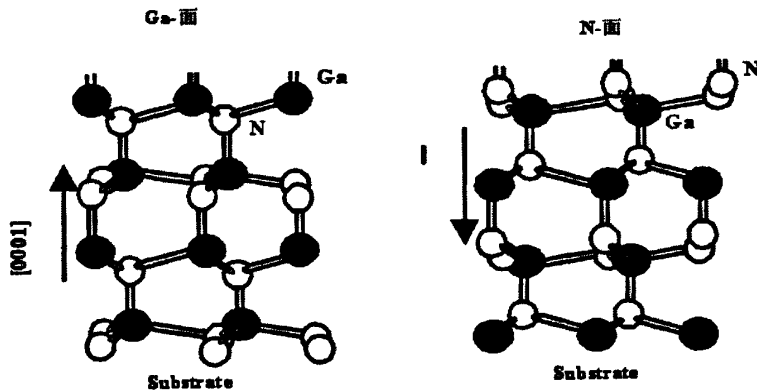


图 1-3 纤锌矿结构 GaN (Ga-和 N-面) 的极性

1.3 GaN 基器件应用

近十多年以来, 氮化物一直是半导体工业研究的热点。氮化物材料现在与 GaAs 及 InP 一样成为化合物半导体工业中的主流。氮化物半导体材料之所以引起国内外众多研究者的兴趣, 主要是因为其特殊的性能; 氮化物 GaN、InN 和 AlN 合金的带隙覆盖了整个可见光区, 并扩展到紫外范围, 适合制备短波长光电器件; 除其独特的光学性能以外, 氮化物还表现出高的热稳定性、高的击穿电场、高化学稳定性和优良的导热性, 这使它特别适合于制作工作于高温及恶劣环境的大功率电子器件。GaN 基半导体材料是新兴半导体光电产业的核心材料和基础器件, 不仅带来 IT 行业数字化存储技术的革命, 也将推动通讯技术的发展, 并彻底改变人类传统照明的历史。

1.3.1 GaN 基 LED

发光二极管(Light Emitting Diode : LED), 是利用固体半导体作为发光材料, 制作的 PN 结。当 PN 结两端加上正向电压, 半导体中的导带电子和价带空穴发生复合, 放出过剩的能量而引起光子发射。半导体发光二极管的制作材料采用直接带隙半导体。直接带隙半导体材料的导带底和价带顶的准动量 K 值相等, 而间接带隙半导体材料的导带底和价带顶的 K 值不同。直接带隙半导体材料发生电子跃迁的几率远远大于间接带隙半导体材料, 因为前者不需要其它粒子如声子的参与就满足动量守恒; 而后者如发生跃迁, 则需要其它粒子的参与, 以满足跃迁前后系统动量守恒, 大大的减小了跃迁几率。GaN 基蓝、绿光 LED 制备成功, 从根本上解决了 LED 中三基色(红、绿、蓝)缺蓝色和高亮度绿色的问题, 大大拓展了发光二极管的应用范围。蓝、绿光 LEDs 具有体积小、冷光源、响应时间短、发光效率高、防爆、节能、使用寿命长等特点, 在大屏幕彩色显示、信号灯、景观照明、车辆及交通运输、多媒体显像、LCD (Liquid Crystal Display) 背光源、光线通讯、卫星通讯等领域大有用武之地。高亮度 GaN 基蓝光 LED 使商用及户外大屏幕全色平板显示成为现实。近年来, 高亮度、低能耗、长寿命、结构紧凑、全固体化的半导体显示器风靡全世界, 占据了整个大屏幕显示市场。而且随着蓝光和绿光 LED 价格的不断降低, 可以预见大屏幕显示市场会越来越大。在丰富了色彩的同时, 蓝色 LED 的另一个应用是在家庭和商业照明方面替代低效的白炽灯和日光灯。日光灯照明虽然效率比白炽灯高许多, 但由于其发出的光闪烁和色调不柔和, 在许多家庭中不受欢迎。而用红、绿、蓝三基色 LED 组合, 可以获得更有效、更令人满意的光源。另一种方法是把荧光粉涂覆在 InGaN 基 LED 上, 荧光粉受激发射出更长的波长与 LED 本身发出的光复合成白光。GaN 基 LEDs 普通白光照明也已经实现, 在不远的将来将取代目前的白炽灯和日光灯, 成为新一代全固态绿色光源。

1.3.2 激光器二极管

虽然 LED 市场是 III 族氮化物市场的主体, 但是许多应用需要特殊的器

件特征,如:高的电光转换效率、稳定光输出、高输出功率和窄的发光光谱,能满足这些要求只有激光器二极管(LDs)。由于蓝光 LDs 在光探测、光通信和信息高密度光存储等领域的广阔应用前景,在成功开发出 GaN 基蓝绿光 LEDs 后,研究的重点转向III族氮化物蓝光 LDs 器件的开发。应用范围包括医疗、高档 DVD 播放器、基因重组、投影显示、激光打印机和生化反应传感和启动作用。

不同的应用,对 LD 的波长和输出功率的要求有所不同。投影显示需要人眼敏感的特定的颜色,且要求是高功率输出,如需波长为 450nm 功率达 200mW 的 LD。生化反应传感需要波长为 470-490nm 的 LD,这种波长相对长一点的 LD,目前用 MOCVD 方法还无法获得。

目前III族氮化物 LD 用的多的领域是高质量的激光打印机和新一代的 DVD 播放器(现已命名为 DVD-HD)。这两种应用都需要连续稳定的光源,这样光就能聚焦为一个很小的衍射斑点。衍射斑点面积的大小与波长的平方成正比。斑点面积越小,同一大小的光盘上就可以存储越多的信息。对于激光打印机,光斑面积越小,打印机的清晰度越高。蓝光 LDs 的成功开发,对 IT 业的数据存储产生了革命性的影响,在民用和军事领域都有广泛的应用,在光纤通讯、光电探测、数据存储及激光高速印刷等领域大显身手,它将数据的存储量提高数倍,并大大提高了探测器的精确性和隐蔽性。

1.3.3 GaN 基紫外光探测器

在探测器方面,由于 GaN 材料在 365nm(紫外光)波段具有很好的截止响应特性,因此降低了对滤波器的要求,这使得 GaN 基的光探测器能够在不受长波长辐射的影响下,在紫外光波段进行工作。它对于波长大于 365nm 的可见光和红外光是不敏感的,而对于波长小于 365nm 紫外光却有大的光响应,而且 GaN 比其它III-V 族氮化物有更大的电子迁移率,在相同紫外光照射下能产生更大的光电流,从而使探测器有更高的灵敏度。GaN 基光探测器的探测灵敏度高,光谱响应分布好,覆盖了 200~365nm 的光谱范围,在可见光与红外范围没有响应,特别适合可见光盲区和太阳盲区的紫外辐射探测。其优越的性能,如直接带隙带来的高量子效率、在苛刻物理化学环境中的高稳定性、实现异质结的能力、固有的白光盲区、低的表面重组率以及通过调整

合金组分可以获得一个合适的陡峭的截止波长等,使 GaN 基光探测器的应用前景十分诱人。1992 年, Khan 等^[12]采用 MOCVD 法在蓝宝石衬底上制造了第一只 GaN 光电导探测器,在 100~365nm 波长范围内,光响应接近于常数。随后人们在此基础上,研制出了性能更优越的光电导探测器、p-n 结型和肖特基势垒型光生伏特探测器等。GaN 基紫外光探测器具有体积小,重量轻,耐高温,耐腐蚀,抗辐照等特点,这些使其在科研、军事、太空、环保等很多领域应用广泛,如紫外辐射测量、激光探测器、太空飞船的监视和识别、飞行器制导、空间通讯、臭氧监测、火焰传感、污染监测、引擎和燃烧室的监控等。

1.3.4 电学器件

GaN 材料体系的优良特性决定了其在微波器件领域的广泛应用潜力。首先, GaN 材料体系可以制备出优质的半导体微结构材料;其次,极高的电子饱和迁移率 ($2.5 \times 10^7 \text{cm/s}$) 和不大的介电常数,非常适合制作微波器件;另外,良好的衬底绝缘性能和散热性能,有利于制作高温、大功率器件。目前,随着 MBE 技术在 GaN 材料应用中的进展和关键薄膜生长技术的突破,目前已成功地生长出 GaN 多种异质结构。用 GaN 材料制备出了金属半导体场效应晶体管(MESFET)、异质结场效应晶体管 (HFET)、调制掺杂场效应晶体管(MODFET)等新型器件。调制掺杂的 AlGaIn/GaN 结构具有高的电子迁移率($2000 \text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$)、高的饱和速度($1 \times 10^7 \text{cm/s}$)、较低的介电常数,是制作微波器件的优先材料;GaN 较宽的禁带宽度(3.4eV)及蓝宝石等材料作衬底,散热性能好, GaN 具有优良的电学特性,可以和 AlGaIn 组成异质结构,该结构可以在室温下获得更高的电子迁移率、极高的峰值电子速度($3 \times 10^7 \text{cm/s}$)和饱和电子速度($2 \times 10^7 \text{cm/s}$),并获得比第二代化合物半导体异质结器件中更高的二维电子气浓度,通过调制掺杂,加上 GaN 体系很强的极化效应,在 AlGaIn/GaN 接口可以形成电子面密度高达 10^{13}cm^{-2} 量级的二维电子气(2DEG),十分适合于高频、大功率电子器件的研制。更重要的是 GaN 可以形成调制掺杂的 AlGaIn/GaN 结构,由于电子和施主杂质母体在空间上的分离,在 AlGaIn/GaN 接口形成的二维电子气(2DEG)具有很高的迁移率,所以

GaN HEMT 适合于微波高端大功率。目前已经普遍认为 AlGaN/GaN 超晶格材料是制造 X 波段微波功率器件和射频电路的理想材料。GaN 基电子器件可以在高温及恶劣环境下工作,如核反应设备内、航空航天器件、石油勘探设备、汽车引擎和电机等。

1.4 GaN 基发光二极管

发光二极管,即 LED(Light Emitting Diode),是一种通过同质 p-n 结或异质结电注入,自发辐射发射非相干光的发光器件。发光二极管的特性是发射的光子有比较窄的光谱范围,谱宽由参与光辐射复合的导带和价带载流子分布所决定,一般为几十纳米,比 LD(Laser Diode)高出一个数量级。发光二极管是一种电-光功率转换效率较低的器件,绝大部分输入电功率变成了热能。由于人眼对光的波长响应范围为 0.4 μm -0.7 μm ,因此用来制作可见光 LED 的半导体材料的禁带宽度应落在 1.8eV-2.8 eV 之间。

1.4.1 LED 的工作原理

发光二极管是一种特殊的二极管,和普通二极管一样,发光二极管由半导体芯片组成,这些半导体材料会预先通过注入或掺杂等工艺产生 p-n 结。与其它二极管一样,发光二极管中的电流也是单向导通,两种不同的载流子:空穴和电子在不同的电极电压作用下形成电流流过 p-n 结。当空穴和电子相遇而产生复合,电子会跌落至较低的能级,同时以光子的形式释放剩余能量。

当半导体材料处于热平衡状态时,光子发射和吸收两个过程保持平衡。此时,要使半导体发光,必须激发材料使其处于非平衡状态,通过非平衡载流子的复合才能使光从半导体中发射出来。注入式电致发光是重要的激发方法。在 LED 中,存在同质 p-n 结构和异质 p-n 结构的 LED。

(1) 同质 p-n 结注入发光

同质 p-n 结注入发光的机理如图 1-4 所示,当 p-n 结加正向偏压时,电子从 n 区向 p 区扩散,同时空穴从 p 区向 n 区扩散,半导体中载流子分布从平衡变为非平衡。在实际的 p-n 结中,扩散长度远大于势垒区宽度,电子和空穴通过势垒区时因复合而消失的几率很小。因此在正向偏压下, p-n 结势

垒区和两侧扩散区便注入了非平衡少数载流子。这些非平衡的少数载流子与多数载流子复合，发射出光子。

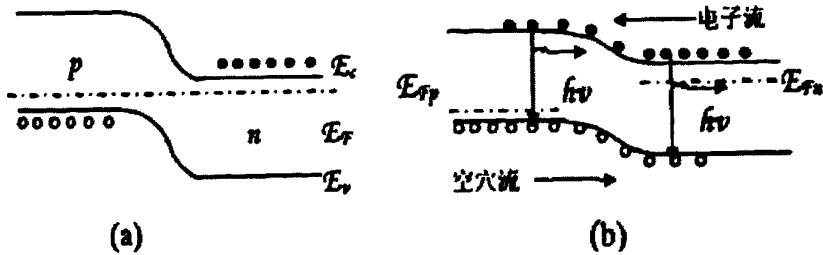


图 1-4 同质 p-n 结注入发光过程

(2) 异质 p-n 结注入发光

异质结的发光原理如图 1-5 所示，与同质结的发光原理基本相同，不同的是，p 区和 N 区禁带宽度不等(假设 n 区禁带宽度大于 p 区)，此时势垒不对称，空穴的势垒比电子的势垒要高得多。电流主要由电子从 n 区进入 p 区形成，禁带宽度 E_g 比较大的 N 区为电子注入源，而较小的 p 区为复合发光区，其辐射光谱主要决定于 p 区材料。由于异质结禁带宽度差形成的势垒对空穴的限制比同质结强很多，所以其电子注入效率很高。并且由于 N 区禁带宽度较大，从 p 区产生的光子进入该区时不易被再吸收，因此发光效率比同质结高。

在 LED 中，采用双异质结构，提高注入比，使电子注入效率更高，可限制少数载流子泄漏，减小了有源区的长度，减少了材料对光子吸收，因此发光效率显著提高。由于限制层的禁带宽度 E_g 大于有源层，因此对于有源层发出的光子来说是透明的，减小了体内吸收。

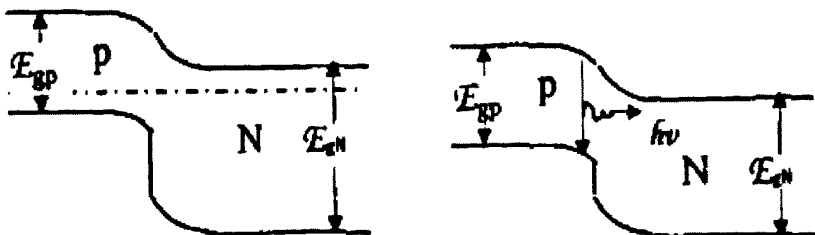


图 1-5 异质 p-n 结注入发光过程

1.4.2 发光二极管光源的基本特征

(1) 发光效率高

经过几十年的技术发展,LED的发光效率有了较大的提升。白炽灯、卤钨灯的发光效率为12~24流明/瓦,荧光灯为50~70流明/瓦,钠灯为90~140流明/瓦,大部分的电能变成热量被损耗掉。LED作为一种电致发光器件,它也可通过调整LED的材料和结构调整发光波长,将发光波长都集中在可见光区域,不会因为热辐射而浪费能源。理论上其内量子效率可达100%,流明效率可达200lm/W。

(2) 耗电量少

目前,照明消耗约占整个电力消耗的20%,降低照明用电是节省能源的重要途径,为实现这一目标业界开发出许多种节能照明器具,并达到了一定的成效。但是,距离“绿色照明”的要求还远远不够,开发和应用更高效、可靠、安全、耐用的新型光源势在必行。LED亮度高,驱动电压低,功耗小,易与集成电路匹配;在同样照明效果的情况下,耗电量是白炽灯泡的八分之一,荧光灯管的二分之一。据估计,如采用光效比荧光灯还要高两倍的LED来替代中国大陆的白炽灯和荧光灯,每年可节约的电能相当于三峡工程的一年的发电量。就桥梁护栏灯为例,同样效果的一支日光灯40多瓦,而采用LED每支的功率只有8瓦,而且可以七彩变化。

(3) 使用寿命长

传统的光源采用电子光场辐射发光,具有诸多缺点如灯丝发光易烧、热沉积、光衰减等。而LED灯体积小、重量轻,易小型化和集成化,环氧树脂封装,可承受高强度机械冲击和震动,不易破碎。LED的寿命很长,理论上可达10万小时。LED灯具的使用寿命可达5~10年。

(4) 安全可靠性强

LED具有发热量低,无热辐射,冷光源,可以安全触摸等优点,并且能精确控制光色及发光角度,光色柔和,无眩光。制作材料中不含汞、钠元素等可能危害健康的物质。选择不同的半导体材料,控制不同的掺杂元素和浓度,可获得各种波长的光。内置微处理系统可以控制发光强度,调整发光方式,实现光与艺术结合。

(5) 有利于环保

LED为全固体发光体,机械性能好,可靠性高,耐震、耐冲击不易破碎,

废弃物可回收，没有污染。光源体积小，可以随意组合，易开发成轻便薄短小型照明产品，也便于安装和维护。

1.4.3 LED、荧光灯和白炽灯性能比较分析

爱迪生将人们带入白炽灯时代，而半导体照明的出现，将给长达 120 多年的“钨丝统治”时代划上句号。节能、环保将是未来社会工业发展的主流，半导体照明在节能、环保方面极具发展潜力。普通的白炽灯采用的是热发光技术，其以发热的形式浪费了 90% 的能源，属“二次光源”，而半导体照明灯属“一次光源”，其耗电量远远低于白炽灯。半导体已在电子领域完成了一次革命，而另一次革命就将发生在照明领域。

同传统的照明方式——荧光灯、白炽灯相比，半导体照明具有其独特的特点及优势。如下表 1-2 所示：

表 1-2 LED、荧光灯和白炽灯性能比较分析

	发光二极管	白炽灯	日光灯
色温 (K)	可调	2500~3000	3000~10000
类型	冷发光	热发光	气体发光
寿命 (h)	100000	1000	10000
反应时间	10~100ns	100ms	100ns
可见光辐射能量	10%~12%	5%	23%
红外辐射能量	0%	90%	36%
紫外辐射能量	0%	0%	0%
辐射能量总和	10%~12%	95%	59%
热能	88%~90%	5%	41%
优缺点	省电，耐震动，反应时间快，价格高	反应时间慢，耗电，易碎	反应时间较快，含有汞会产生污染且易碎

第二章 Apsys 软件及相关物理模型简介

2.1 前言

本论文使用加拿大 Crosslight 公司开发的软件 (advanced physical models of semiconductor devices) 模拟二维 LED 的光电特性^[13]。APSYS 是一套功能十分强大的模拟软件, 只需要通过建立适当的物理模型 (physical models), 给定结构及材料的特性, 输入正确的材料参数, 这套软件就可以对半导体元器件进行模拟。APSYS 软件通过求解各种的特性方程式 (物理模型) 来架构出仿真的特性与结果, 模拟方程式包括泊松方程 (Poisson's equation)、电流连续性方程 (current continuity equations)、载流子传输方程 (carrier transport equations)、量子力学波动方程 (quantum mechanical wave equations)、热传输方程 (heat transport equations)、标量波动方程 (scalar wave equations) 以及一些描述载流子特性、边界条件等理论公式。模拟所用的材料参数均来源于软件所包含的材料库中, 我们可以对其自行修改并更新其中的参数, 参数的设定在模拟过程中十分重要, 本章将对 GaN 基 LED 中的物理模型和相关参数的设置做简单的介绍。

2.2 物理模型及相关参数简介

本文所采用的 Crosslight 公司的半导体器件模拟专用软件 APSYS (Advanced Physical Models of Semiconductor Devices) 是利用二维有限元的分析方法, 以漂移-扩散模型和电流连续方程

$$\nabla \cdot J_n - \sum_j R_n^{tj} - R_{sp} - R_{st} - R_{au} + G_{opt}(t) = \frac{\partial n}{\partial t} + N_D \frac{\partial f_D}{\partial t} \quad (2-1)$$

$$\nabla \cdot J_p + \sum_j R_p^{tj} + R_{sp} + R_{st} + R_{au} - G_{opt}(t) = -\frac{\partial p}{\partial t} + N_A \frac{\partial f_A}{\partial t} \quad (2-2)$$

为基础, 结合边界条件自洽解泊松方程

$$-\nabla \cdot \left(\epsilon_0 \epsilon_{dc} \frac{\nabla V}{q} \right) = -n + p + N_D (1 - f_D) - N_A f_A + \sum_j N_{tj} (\delta_j - f_{tj}) \quad (2-3)$$

得到 LED 器件电学与光学特性。

(1) 和 (2) 式中

$$J_n = n \mu_n \nabla E_{fn} \quad (2-4)$$

$$J_p = p \mu_p \nabla E_{fp} \quad (2-5)$$

分别是电子流与空穴流密度，其中 μ 为迁移率， E_f 为准费米能级。

器件中的非辐射复合过程采用 Shockley-Read-Hall (SRH) 深能级陷阱复合和俄歇复合。

SRH 复合速率表示为：

$$R_n^{tj} = c_{nj} n N_{tj} (1 - f_{tj}) - c_{nj} n_{1j} N_{tj} f_{tj} \quad (2-6)$$

$$R_p^{tj} = -c_{pj} p N_{tj} f_{tj} - c_{pj} p_{1j} N_{tj} (1 - f_{tj}) \quad (2-7)$$

c_{nj} , c_{pj} 为载流子俘获系数， n_{1j} (p_{1j}) 为电子或空穴准费米能级与 j 陷阱中能级 E_{tj} 合并时的载流子浓度， N_{tj} 为第 j 个 SHR 深能级陷阱的密度， f_{tj} 为电子占据第 j 个深能级陷阱的概率， δ 为 1 代表施主，为 0 代表受主。

俄歇复合速率表示为：

$$R_{au} = (C_n n + C_p p) (np - n_i^2) \quad (2-8)$$

C_n 、 C_p 为材料的俄歇系数是常数且取决于材料本身， n_i 指本征载流子密度。

R_{sp} 代表自发辐射复合速率； R_{st} 代表受激辐射复合速率； $G_{opt}(t)$ 代表光产生率； n 、 p 为电子与空穴浓度； N_A 、 N_D 为浅层施主，受主掺杂密度； f_D 、 f_A 分别为电子占据施主和空穴占据受主杂质的概率。(3) 式中 ∇V 为电场， ϵ_{dc} 为相对介电常数。

在处理含应力的 InGaN 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^[14]和有效质量近似模型^[15]。InGaN 与 AlGaIn 的能带间隙可用下列方程式表示：

$$E_g(A_{1-x}B_x) = (1-x)E_g(A) + xE_g(B) - x(1-x)C \quad (2-9)$$

A 表示 GaN 二元合金, B 表示 InN 或 AlN 二元合金, C 为弯曲系数。

在氮化物组件各层交接面中, 考虑了内建极化效应机制^[16-18]。在模拟中, 三元氮化物材料极化效应公式如下:

自发极化为:

$$P_{sp}(In_xGa_{1-x}N) = -0.0413x - 0.0339(1-x) + 0.0378x(1-x) \quad (2-10)$$

$$P_{sp}(Al_xGa_{1-x}N) = -0.0898x - 0.0339(1-x) + 0.0191x(1-x) \quad (2-11)$$

其单位为 C/m^2

压电极化为:

$$P_{pz}(In_xGa_{1-x}N) = xP_{pz}^{(InN)} + (1-x)P_{pz}^{(GaN)} \quad (2-12)$$

$$P_{pz}(Al_xGa_{1-x}N) = xP_{pz}^{(AlN)} + (1-x)P_{pz}^{(GaN)} \quad (2-13)$$

其中:

$$P_{pz}^{(InN)} = -1.373\varepsilon + 9.541\varepsilon^2 \quad (2-14)$$

$$P_{pz}^{(GaN)} = -0.918\varepsilon + 9.541\varepsilon^2 \quad (2-15)$$

$$P_{pz}^{(AlN)} = -1.808\varepsilon + 5.642\varepsilon^2 \quad \varepsilon < 0 \quad (2-16)$$

$$P_{pz}^{(AlN)} = -1.808\varepsilon - 7.888\varepsilon^2 \quad \varepsilon > 0 \quad (2-17)$$

ε 为薄膜结构与基板间的应变, 计算如下:

$$\varepsilon = (a_{sub} - a) / a \quad (2-18)$$

a_{sub} 为基板晶格常数, a 为氮化物薄膜晶格常数。

APSYS 模拟程序按照有限元方法在空间离散泊松方程、电流连续性方程、载流子输运方程和量子机制的波动方程的基础上, 形成非线性方程组, 然后用求解非线性方程组的方法, 如牛顿法进行迭代求解, 从而得到 LED 器件电学与光学特性。软件还考虑了氮化物组件各层交接面的内建极化效应。同时兼顾了载流子的自发辐射复合和缺陷所造成的 SRH 非辐射复合速率问题。此软件具有数值稳定和计算速度高的特点。

表 2-1 模拟中所用的 GaN, InN 及 AlN 的相关参数

Parameters	GaN	AlN	InN
a_{lc} (Å) at $T = 300$ K	3.189	3.112	3.545
c_{lc} (Å) at $T = 300$ K	5.185	4.982	5.703
E_g (eV) at 0 K	3.510	6.10	0.69
E_g (eV) at 300 K	3.437	6.00	0.608
α (meV K ⁻¹)	0.914	2.63	0.414
β (K)	825	2082	154
Δ_{cr} (eV)	0.010	-0.227	0.024
Δ_{so} (eV)	0.017	0.036	0.005
$m_{ }^*$ at 300 K	0.21	0.32	0.07
m_{\perp}^* at 300 K	0.20	0.30	0.07
E_P (eV)	19.8	13.6	11.4
F	-0.82	0	-1.63
A_1	-7.21	-3.86	-8.21
A_2	-0.44	-0.25	-0.68
A_3	6.68	3.58	7.57
A_4	-3.46	-1.32	-5.23
A_5	-3.40	-1.47	-5.11
A_6	-4.90	-1.64	-5.96
A_7 (eV Å)	0.0937	0	0
a_1 (eV)	-7.1	-3.4	-4.2
a_2 (eV)	-9.9	-11.8	-4.2
D_1 (eV)	-3.6	-2.9	-3.6
D_2 (eV)	1.7	4.9	1.7
D_3 (eV)	5.2	9.4	5.2
D_4 (eV)	-2.7	-4.0	-2.7
D_5 (eV)	-2.8	-3.3	-2.8
D_6 (eV)	-4.3	-2.7	-4.3
C_{11} (GPa)	390	396	223
C_{12} (GPa)	145	137	115
C_{13} (GPa)	106	108	92
C_{33} (GPa)	398	373	224
C_{44} (GPa)	105	116	48
d_{13} (pm V ⁻¹)	-1.0	-2.1	-3.5
d_{33} (pm V ⁻¹)	1.9	5.4	7.6
d_{15} (pm V ⁻¹)	3.1	3.6	5.5
P_{sp} (C/m ²)	-0.034	-0.090	-0.042

第三章 p-AlInN 作为蓝光 LED 电子阻挡层的研究

3.1 研究背景

InGaN/GaN 基高亮度发光二极管 (LED) 因为在显示、背光源和普通照明中的应用而备受关注。然而, 随着注入电流的增加量子效率下降是阻碍其进一步发展的主要原因。电子在 p 区的泄漏是主要影响机制之一, Choi 等人的实验结果表明, 与传统的 p-AlGaN 电子阻挡层相比, 采用晶格匹配的 $\text{In}_{0.18}\text{Al}_{0.82}\text{N}$ 电子阻挡层的 LED 在光输出功率和电致发光 (EL) 方面显示出优越性^[19]。提高蓝光 LED 的量子效率, 提高空穴注入和减少电子泄漏可能是解决问题的关键所在。

3.2 结构及参数设置

本文采用由 Crosslight 软件公司设计的 APSYS 数值模拟程序对传统的电子阻挡层结构和与 GaN 晶格匹配的 p- $\text{Al}_{0.82}\text{In}_{0.18}\text{N}$ 电子阻挡层结构的 InGaN/GaN 多量子阱 LED 的光学和电学性质进行了研究。

本章设计的器件结构图如图 3-1 所示, InGaN 基 LED 生长在 c 面蓝宝石衬底上, 其结构包括 $2.0\mu\text{m}$ 厚的 u-GaN 和 $2.0\mu\text{m}$ 厚的 n-GaN ($n=5\times 10^{18}\text{cm}^{-3}$)。活性层包括 6 个 2.8nm 厚的 $\text{In}_{0.16}\text{Ga}_{0.84}\text{N}$ 量子阱和 6 个 10nm 厚的 GaN 垒层, 最后一个量子阱垒层上为 20nm 厚的 p- $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$ ($p=5\times 10^{17}\text{cm}^{-3}$) 或者 20nm 厚的 p- $\text{Al}_{0.82}\text{In}_{0.18}\text{N}$ ($p=5\times 10^{17}\text{cm}^{-3}$) 电子阻挡层, 最后为 170nm 厚的 p-GaN ($p=1\times 10^{18}\text{cm}^{-3}$)。器件的几何尺寸为 $300\times 300\mu\text{m}^2$ 的正方形结构。InGaN, AlInN 和 AlGaIn 的禁带宽度由以下表示:

$$E_g(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = x \cdot E_g(\text{InN}) + (1-x) \cdot E_g(\text{GaN}) - 1.4x \cdot (1-x) \quad (3-1)$$

$$E_g(\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}) = x \cdot E_g(\text{AlN}) + (1-x) \cdot E_g(\text{InN}) - 3.4x \cdot (1-x) \quad (3-2)$$

$$E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = x \cdot E_g(\text{AlN}) + (1-x) \cdot E_g(\text{GaN}) - 0.7x \cdot (1-x) \quad (3-3)$$

其中 $E_g(\text{InN})$, $E_g(\text{AlN})$ 和 $E_g(\text{GaN})$ 为带隙能量, 分别取 0.78eV , 6.25eV 和 3.51eV ^[20]。LED 器件内部吸收均设定为 500m^{-1} , 为简化模拟, 工作温度

设定为 300K, 光提取效率为 0.78。在模拟中使用的半导体材料的其它参数可以在文献^[21]中找到。

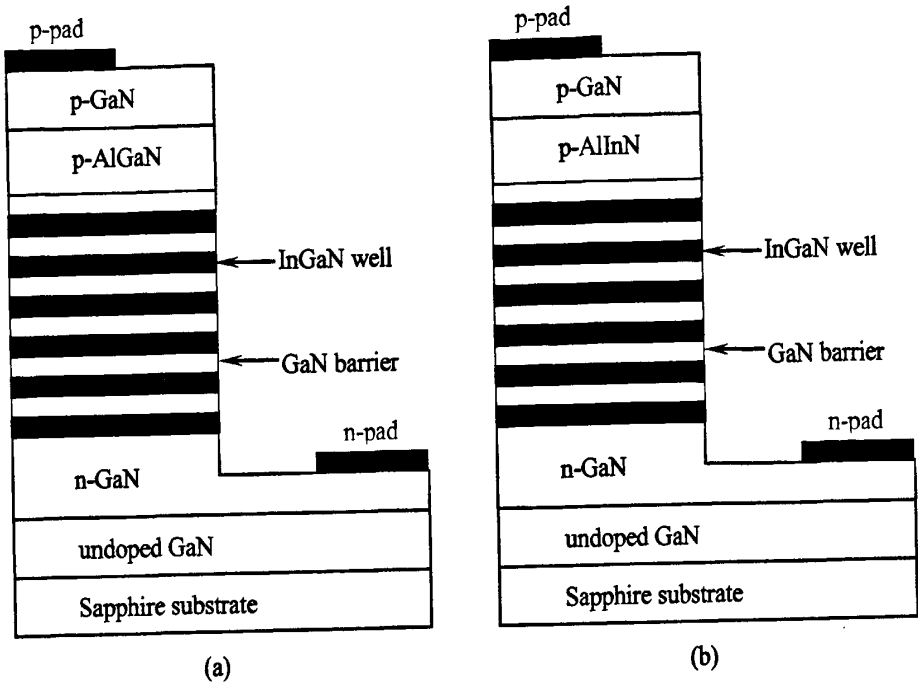


图 3-1 (a) 具有 p-AlGaIn 和 (b) p-AlInN 电子阻挡层 LED 的结构图

3.3 结果与讨论

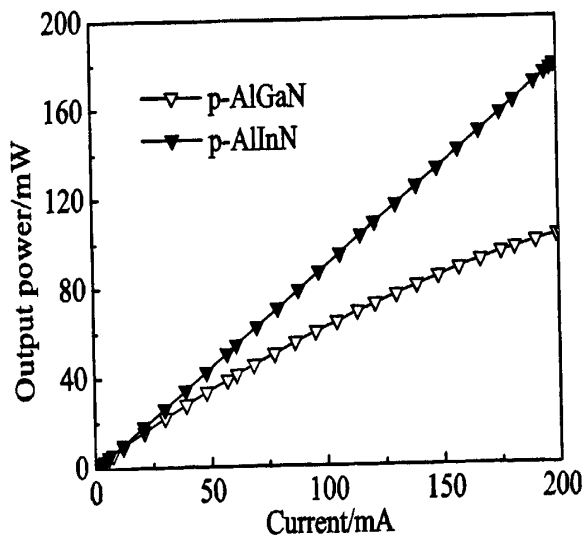


图 3-2 光功率随电流变化曲线

模拟得到器件的光功率随电流变化曲线如图 3-2 所示。从图中可以看出, 驱动电流较小时, 两种结构的光功率之间的差异非常小; 随着注入电流进一

步增加, 两者之间的差异逐渐增大。采用 p-AlInN 作为电子阻挡层的 LED, 光功率随电流增加近似为线性增加, 但采用 p-AlGaN 的 LED 随电流增大, 光功率的增速放缓。在 200mA 的驱动电流下, 采用 p-AlInN 作为电子阻挡层的 LED 光功率为普通采用 p-AlGaN 作为电子阻挡层的 LED 的两倍左右。

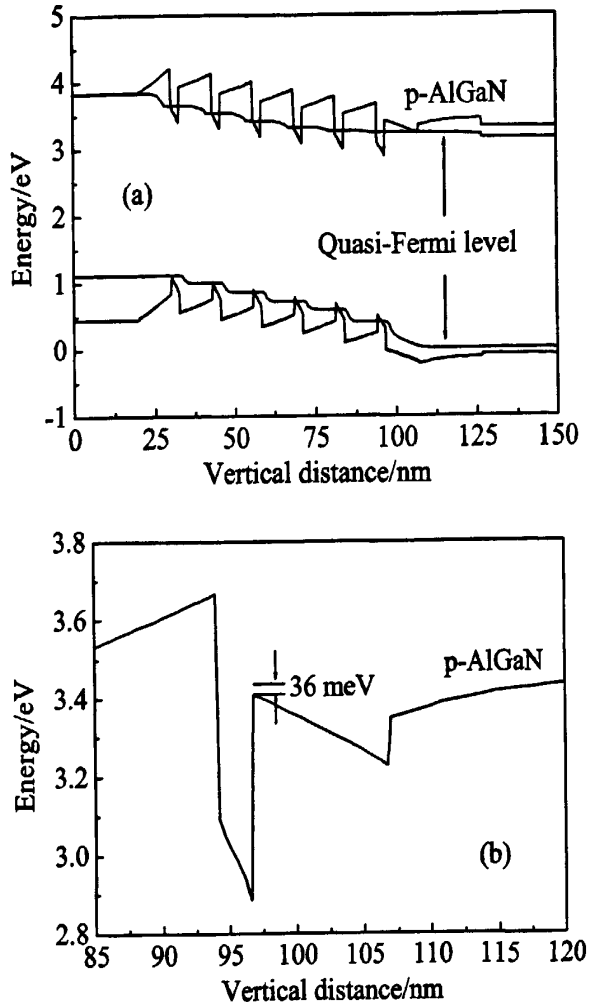


图 3-3 (a) 采用 p-AlGaN 作为电子阻挡层的 LED 的能带图和 (b) 放大靠近电子阻挡层的导带图

采用 p-AlGaN 作为电子阻挡层结构的 LED 的能带图如图 3-3a 所示。极化场所引起的倾斜三角形势垒会阻碍电子的传输并且导致 n 区的导带会比在 p 区高, 这与 Park 等人得到的结果一致^[22, 23], 能带倾斜会导致严重的电子泄漏。相对于空穴而言, 氮化镓基材料的电子有效质量比较小并且具有非常高的迁移率, 电子可以轻易的越过 p-AlGaN 电子阻挡层所形成的势垒, 导致电子阻挡不充分。图 3-3b 为导带在 p-AlGaN 电子阻挡层附近放大的图像, 由于极化场导致能带倾斜, 电子阻挡层的势垒高度仅为 36meV, 电子可以轻易

越过势垒，从而导致在 p 区的严重的电子溢出。

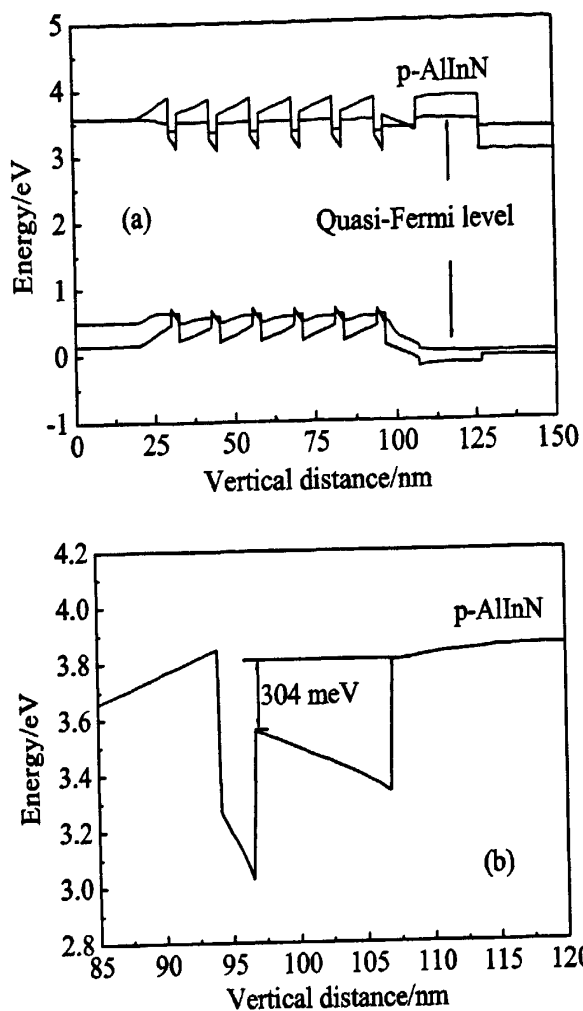


图 3-4 (a) 采用 p-AlInN 作为电子阻挡层的 LED 的能带图和 (b) 放大靠近电子阻挡层的导带图。

图 3-4a 给出了具有 p-AlInN 电子阻挡层结构的 LED 的能带图，图中所示的能带倾斜并没有图 3-3a 中那么严重，这是因为 $\text{Al}_{0.82}\text{In}_{0.18}\text{N}$ 电子阻挡层与氮化镓晶格匹配，从而大大减少了极化场。图 3-4b 显示了 p-AlInN 附近的导带扩大图，最后一个量子阱垒层和电子阻挡层的势垒高度约为 304meV，远远高于具有 p-AlGaIn 结构的势垒高度。正是由于势垒高度的大幅度增加，电子在 p 区的溢出大大减少，从而实现了对电子的有效阻挡。

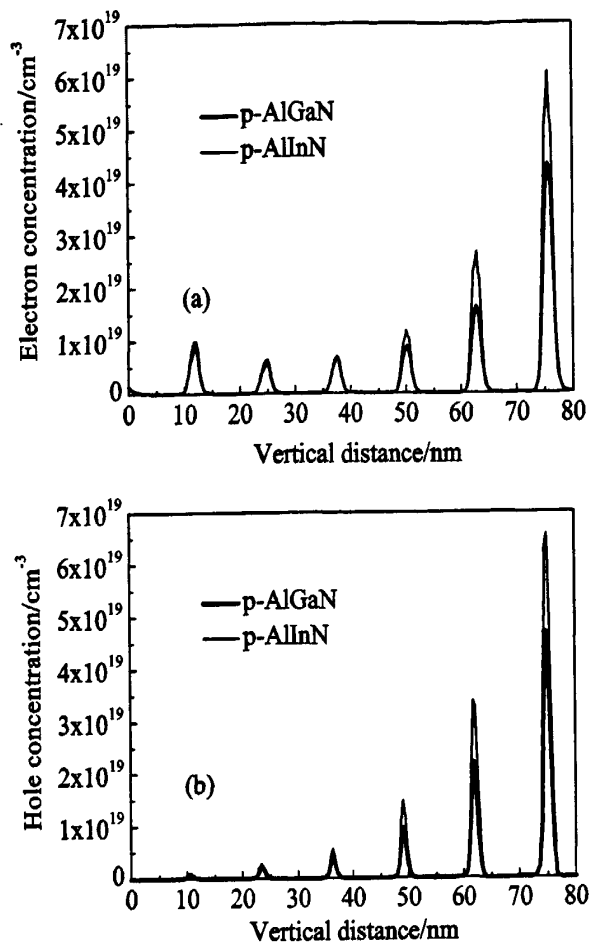


图 3-5 具有两种不同结构的 LED 在量子阱区域的 (a) 电子和 (b) 空穴浓度分布图

两种结构的载流子浓度分布如图 3-5 所示, 由图可知, 两种结构的电子分布相对均匀, 而空穴分布不均匀, 空穴几乎集中分布在靠近 p 区的量子阱中, 在最后一个量子阱中电子和空穴大量积累, 以 p-AlInN 作为电子阻挡层结构的 LED 尤为明显。

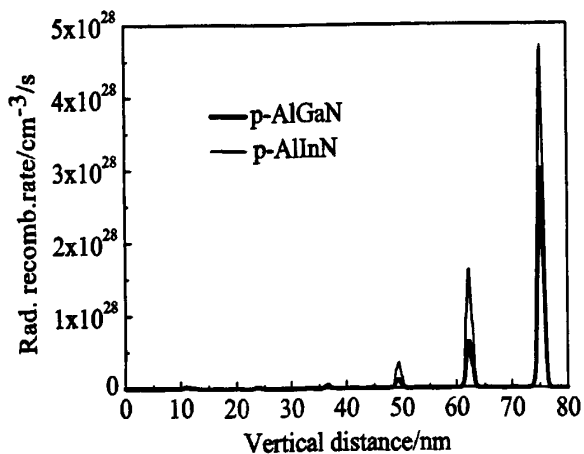


图 3-6 两种不同结构的 LED 的复合速率分布图

两种结构的辐射复合速率在量子阱区域分布如图 3-6 所示, 其速率分布和空穴分布十分相似, 辐射复合主要发生在靠近 p 型区的量子阱中, 由于具有 p-AlInN 结构的 LED 的载流子浓度更大, 故有较大的辐射复合速率。

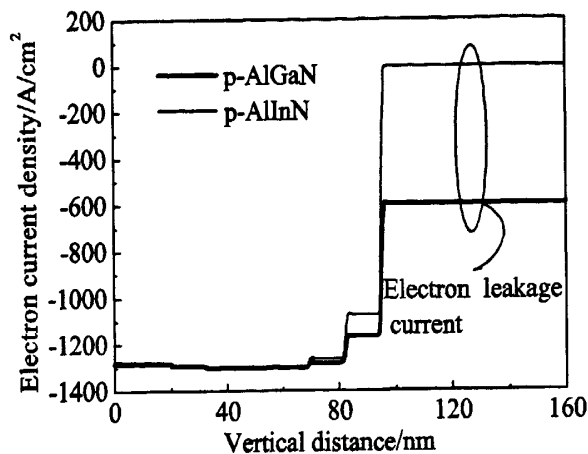


图 3-7 具有两种不同结构的 LED 的电子电流密度分布图

在 200mA 外加电流情况下, 两种结构的电子电流密度分布如图 3-7 所示。对具有传统 p-AlGaN 电子阻挡层结构的 LED 来说, 电子泄漏非常严重, 但对具有 p-AlInN 结构的 LED 来说, 电子溢出可以忽略不计。从量子阱有源区溢出的电子可以在 p 区与空穴发生复合, 从而降低 LED 的效率, 这反映了由于极化导致的电子泄漏是 LED 效率下降的主要机制之一。

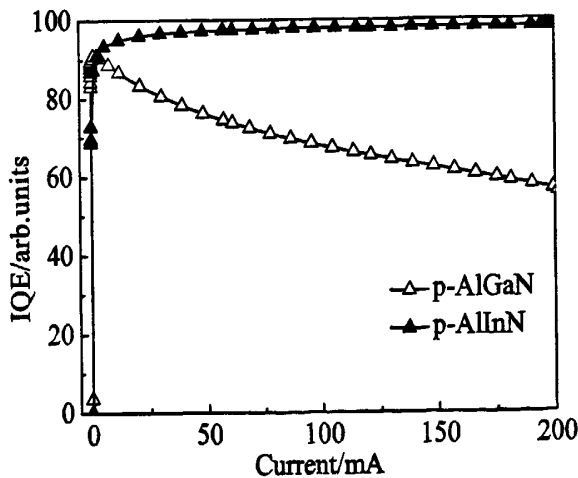


图 3-8 内量子效率随电流变化曲线

图 3-8 给出了内量子效率 (IQE) 与正向电流的关系图。随着正向电流增加, 两种不同结构 LED 的内量子效率表现出不同的特点。由于严重的电子泄漏, 在具有 p-AlGaN 电子阻挡层的 LED 中有明显的内量子效率下降现象,

但对具有 p-AlInN 电子阻挡层的 LED 来说,几乎没有观察到内量子效率的下降。这可以解释为最后一个量子阱垒层和电子阻挡层之间的势垒高度的增加有利于电子阻挡并降低电子在 p 区与空穴的复合。

尽管我们的理论计算表明, p-AlInN 相对于 p-AlGaIn 而言,具有较大优势,并且 Choi 等人的实验结果也表明, p-AlInN 作为电子阻挡层可以提高 LED 的光电特性,生长出高质量的 p-AlInN 是提高 LED 性能的关键所在。然而,由于 InN 与 AlInN 之间晶格参数、键能的巨大差异^[24],不同的最佳生长温度和压力,特别是相分离,带隙波动, InN 的聚集和弛豫过程^[25],这同时也是一个技术挑战。在之前的工作中,晶格匹配的 p-AlInN 样品已有相关报道^[26],然而,对于 AlInN 的生长需要进一步研究以提高 LED 的性能。

3.4 小结

本章应用 APSYS 模拟软件对具有不同电子阻挡层结构的 GaN 基 LED 进行了数值模拟研究。结果表面,常规采用 p-AlGaIn 作为电子阻挡层的 LED 结构中,电子泄漏非常严重,光输出功率较小,内量子效率下降十分严重。然而,在采用 p-AlInN 作为电子阻挡层的 LED 中,光输出功率较大,泄漏电流减小并且内量子效率降低得到缓解。在数值模拟和理论分析的基础上,这些光电特性的改善主要是由于采用晶格匹配的 p-AlInN 作为电子阻挡层,能将电子有效的限制在 InGaIn/GaN 多量子阱中。

第四章 具有凹形量子阱结构蓝光 LED 的研究

4.1 研究背景

传统的 GaN 基 LED 一般沿极轴[0001]方向生长,所以此种结构中存在很强的压电极化和自发极化。GaN 基材料的自发极化是由于沿[0001]方向缺乏反演对称性引起的。而存在于 InGaN 量子阱中的压电极化是由于量子阱(QW)和量子势垒层(QB)具有不同的镓成分所引起的晶格不匹配所致。压电效应会在量子阱区域形成很强的静电场和严重的能带弯曲。多量子阱区域巨大的静电场会将电子和空穴拉向相反的区域从而导致电荷在空间上的分离,使得量子阱区域的电子和空穴的波函数重叠严重减少(Γ_{e-hh}),最终导致辐射复合速率下降和光电器件的内置量子效率降低。目前已经提出多种方法来减轻存在于蓝光 LED 中的压电极化,诸如非极性面(γ -面和 M-面)量子阱结构生长在 R 面蓝宝石上^[27,28],半极性量子阱结构生长在 M-蓝宝石上^[29,30]以及采用晶格匹配的四元系 AlGaInN 结构^[31-33]。另一方面,设计非矩形量子阱结构,包括三角形量子阱^[34],交错量子阱^[35-37],梯形量子阱^[38]和凹型量子阱^[39]。最近,Zhao 等人^[37,40]提出了具有三层交错量子阱结构的 LED,这实际上和凹形量子阱结构是同一概念。他们的研究表明,凹型量子阱结构的自发辐射速率更大,光功率更强。Park 等人的研究表明,凹型量子阱结构具有较小的重空穴有效质量,较大的自发辐射系数和由光学矩阵元产生的 Kane 参数^[39]。然而,因为在这些结构上的研究还处于初期发展阶段,凹型量子阱结构的许多特性还没有得到很好的理解,因此,为了获得高量子效率和光功率的 LED,对凹型量子阱结构进行研究是十分必要的。减轻蓝光 LED 的量子效率下降现象,减少多量子阱区域的极化场的和 p 型层区域的电子泄漏可能是关键所在。

4.2 结构及参数设置

本文采用由 Crosslight 软件公司设计 APSYS 数值模拟程序对具有传统矩形量子阱结构和与新设计的具有凹形量子阱结构的 InGaN/GaN 多量子阱 LED 的光学和电学性质进行了研究。

本章设计的器件结构图如图 4-1 所示, InGaN 基 LED 在 c 面蓝宝石衬底上生长, 其结构包括 2.0 μm 的 u-GaN 和 2.0 μm 的 n-GaN ($n=5\times 10^{18}\text{ cm}^{-3}$)。对于普通结构来说, 量子阱区域包括 6 个 3nm 厚的 $\text{In}_{0.16}\text{Ga}_{0.84}\text{N}$ 量子阱和 6 个 10nm 厚的 GaN 垒层。新设计的结构包括 6 个 0.5nm- $\text{In}_{0.09}\text{Ga}_{0.91}\text{N}$ /2nm- $\text{In}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{N}$ /0.5nm- $\text{In}_{0.09}\text{Ga}_{0.91}\text{N}$ 凹形量子阱和 6 个 10nm 厚的 GaN 垒层, 在最后一个量子阱垒层上是 20nm 厚的 p- $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$ ($p=5\times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$) 的电子阻挡层, 最后为 170nm 厚的 p-GaN ($p=1\times 10^{18}\text{ cm}^{-3}$)。该器件的几何尺寸设计为 $300\times 300\mu\text{m}^2$ 的正方形结构。器件结构图如图 4-1 所示。

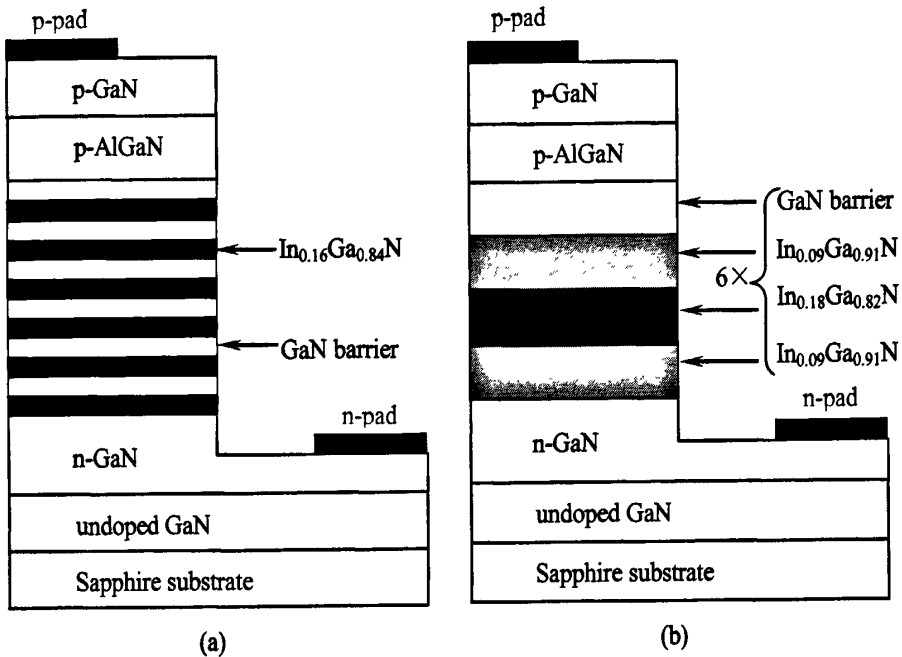


图 4-1 (a) 具有矩形量子阱和 (b) 凹形量子阱结构 LED 的结构图

InGaN 和 AlGaN 的禁带宽度由以下式子表示:

$$E_g(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = x \cdot E_g(\text{InN}) + (1-x) \cdot E_g(\text{GaN}) - 1.4x \cdot (1-x) \quad (4-1)$$

$$E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = x \cdot E_g(\text{AlN}) + (1-x) \cdot E_g(\text{GaN}) - 0.7x \cdot (1-x) \quad (4-2)$$

其中 $E_g(\text{InN})$, $E_g(\text{AlN})$ 和 $E_g(\text{GaN})$ 为带隙能量, 分别取 0.78eV, 6.25eV 和 3.51eV。LED 器件内部吸收均设定为 500m^{-1} , 为简化模拟, 工作温度设定为 300K, 光提取效率为 0.78。在模拟中使用的半导体材料的其它参数可以在文献^[21]中找到。

4.3 结果与讨论

模拟得到光功率随电流的变化曲线如图 4-2 所示, 可以看出, 在电流注入非常小的情况, 两种结构之间的差异是较小的。随着注入电流进一步增大, 两者之间的差异逐渐扩大。具有凹形量子阱结构的 LED 的光功率随着正向电流增大呈线性增加, 而具有传统的矩形量子阱结构的 LED, 光功率增加幅度随着电流增大而逐渐放缓。在 200mA 电流下, 具有凹形量子阱结构的 LED 的光功率约为普通矩形量子阱结构 LED 的两倍。

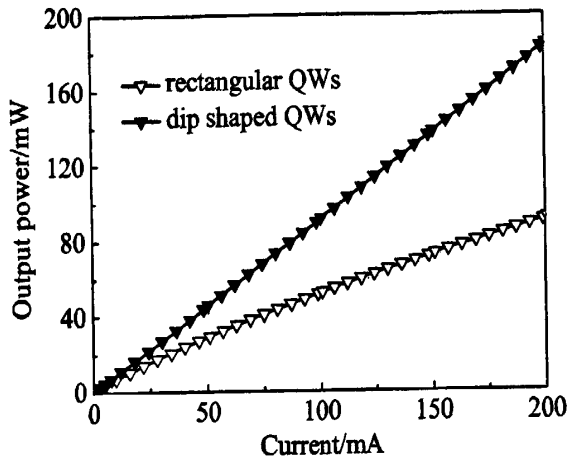


图 4-2 光功率随电流变化图

图 4-3 给出了两种不同量子阱结构的 LED 在 200mA 驱动电流下的载流子浓度分布图。可以看出, 两种不同量子阱结构的 LED 载流子分布显示出不同的特性, 矩形量子阱中的电子浓度分布相对均匀并且电子浓度从 n 区到 p 区逐渐增大, 但凹型量子阱的电子浓度从 n 端到 p 端急剧下降。而空穴浓度分布方面, 采用凹型量子阱结构的 LED 的空穴浓度分布相对均匀且空穴主要集中在靠近 n 端的量子阱中, 但对于矩形量子阱结构来说, 空穴浓度从 p 端到 n 端急剧下降。此外, 具有凹形量子阱结构的 LED 在多量子阱区域的电子浓度总和和空穴浓度总和均大于具有传统矩形量子阱结构的 LED。

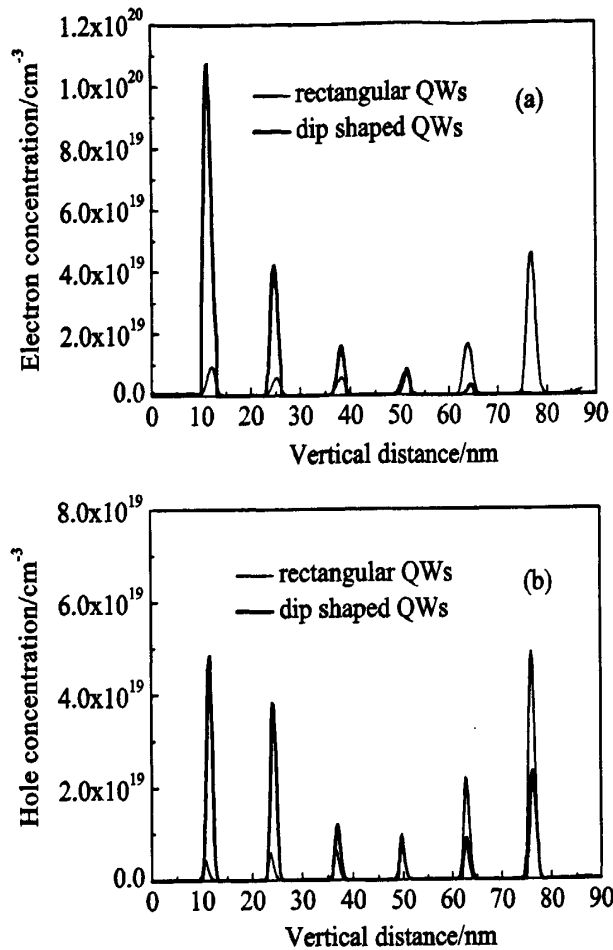


图 4-3 具有两种不同结构的 LED 在量子阱区域的 (a) 电子和 (b) 空穴浓度分布图

两种结构的自发发射光谱图如图 4-4 所示。这两个结构的自发辐射速率都随着正向电流从 50mA 增至 200mA 增加而增大。当电流为 200mA 时，具有矩形量子阱和凹形型量子阱结构的 LED 的峰值波长分别为 460nm 和 455nm。在任意电流下，具有凹形量子结构的 LED 的自发发射速率均大于普通矩形量子阱结构 LED 的自发发射速率。随着电流从 50mA 增大到 200mA，两者之间的自发辐射速率峰值强度之比相应从 2 增加到 2.5。

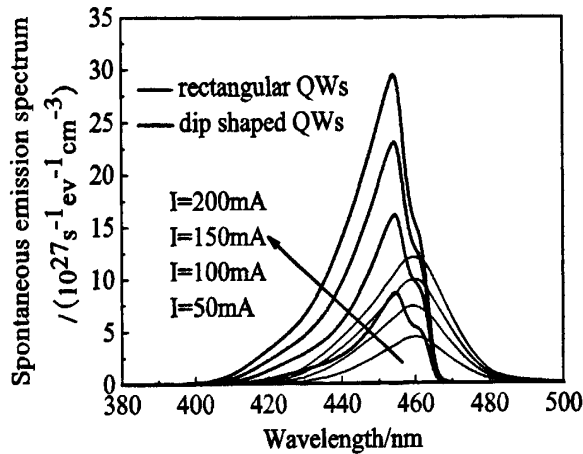


图 4-4 两种不同结构的 LED 的自发发射光谱图

模拟所得两种结构的静电场如 4-5 图所示。在 200mA 电流下，传统矩形量子阱结构的 LED 的静电场比较均匀分布在量子阱中，其静电场值约为 1MV/cm，并且大于其量子阱垒层的电场值。而在凹形量子阱中，量子阱中的电场值小于量子阱垒层的电场值。由图可知，在凹形量子阱中，静电场在量子阱区域明显减弱了，这是因为凹型量子阱包括三层结构，即两个 0.5nm 厚的 $\text{In}_{0.09}\text{Ga}_{0.91}\text{N}$ 中间夹着 2nm- $\text{In}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{N}$ 夹心层，从而大大减少了极化电场。而普通矩形结构的量子阱的最后一个量子阱垒层和 p-AlGa_N 电子阻挡层的界面处有较大的电场存在，这可能会导致势垒高度下降和高注入电流情况下严重的电子泄漏。可见新设计的凹形量子阱结构电场削弱，能带弯曲减小，这将有利于电子阻挡和空穴传输。

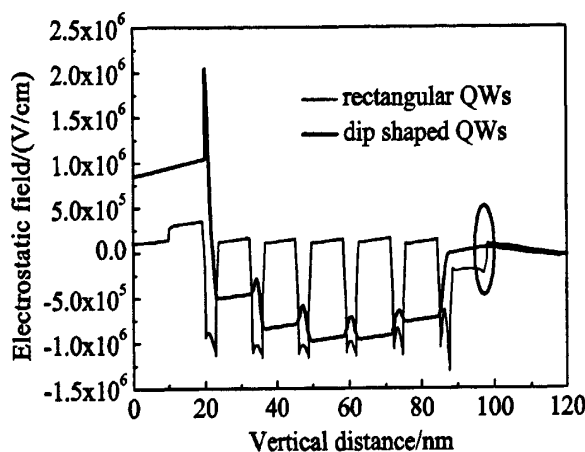


图 4-5 两种不同结构的 LED 的静电场分布图

两种结构在 200mA 电流下的电流密度分布图如图 4-6 所示。由于凹形量子阱中靠近 p 端的量子阱中缺乏电子，电子可以很好的被限制在量子阱中从

而电子在 p 区的泄漏几乎可以忽略不计。但对于普通矩形量子阱结构而言，电子渗透了每一个量子阱并且较大的电子电流存在于量子阱中，由于在多量子阱和电子阻挡层区域存在较大的极化场，能带弯曲比较严重，量子阱垒层和电子阻挡层很难有效的阻挡电子溢出，且溢出的电子可以和 p 区的空穴发生复合，从而降低量子效率，这也揭示了由极化场所引起的电子泄漏可能是量子效率在大注入电流情况下下降的主要原因之一。

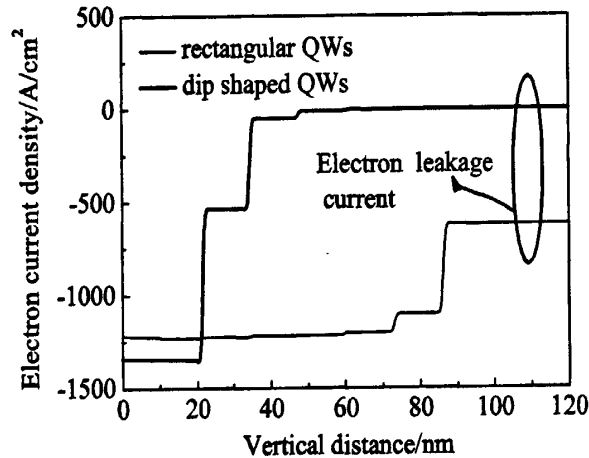


图 4-6 两种不同结构 LED 的电子电流分布图

计算所得的电子空穴波函数如图 4-7 所示，由于采用了凹形量子阱结构，量子阱区域的极化场所引起的静电场被大大削弱，电子和空穴的波函数重叠增加，从而辐射复合几率增强。凹形量子阱结构的 LED 的电子和空穴波函数重叠部分为 47.4%，而矩形量子阱结构仅为 33.1%。电子和空穴波函数重叠部分的增加将有助于电子和空穴复合，减少了电子在靠近 p 区的量子阱中的积累，因此，通过热激发或者隧穿到达 p 区的电子也就减少了，从而提高了电子阻挡效率。

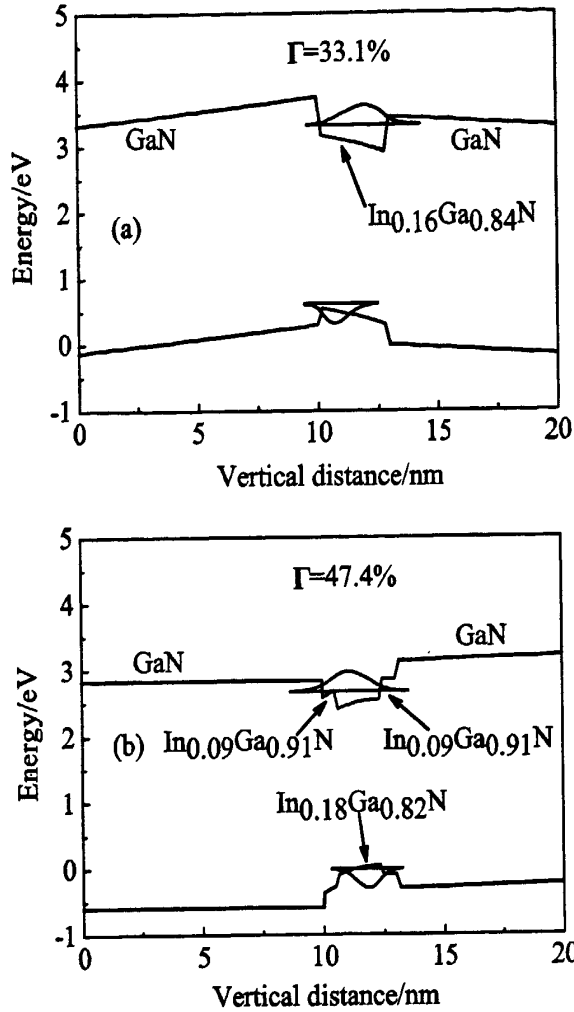


图 4-7 两种不同结构的波函数分布图

两种不同结构的辐射复合速率分布如图 4-8 所示。由图可知，两种结构的复合速率分布和多量子阱区域的载流子浓度分布相似，普通矩形量子阱结构的辐射复合主要是发生在靠近 p 区的量子阱中，而凹型量子阱结构的辐射复合主要发生在靠近 n 区，这是由于较大的电子和空穴浓度的重叠而导致这些区域具有较大的辐射复合速率。凹型量子阱的总辐射复合速率约为矩形量子阱的 3 倍。

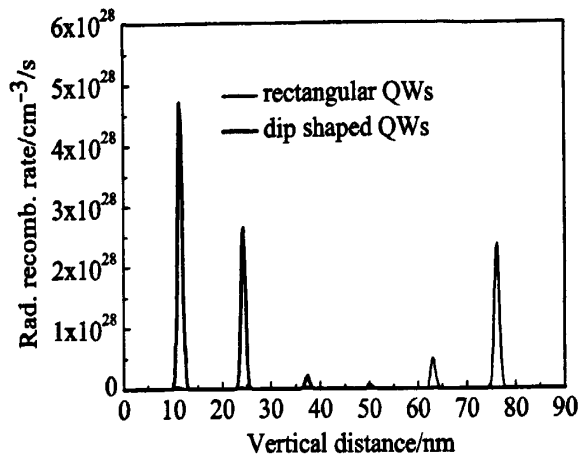


图 4-8 两种不同结构的复合速率分布图

内量子效率与正向电流的关系如图 4-9 所示，随着正向电流增加，两种不同结构表现出不同的特点。由于电子和空穴之间的波函数重叠较小和电子泄漏严重，导致矩形量子阱结构的 LED 有明显的量子效率下降现象。凹形量子阱结构的量子效率下降几乎可以忽略。可知，通过凹型量子阱可以减弱极化场所引起的能带弯曲并形成有效的电子阻挡，可使电子和空穴波函数之间重叠增大，从而增强载流子的辐射复合速率。

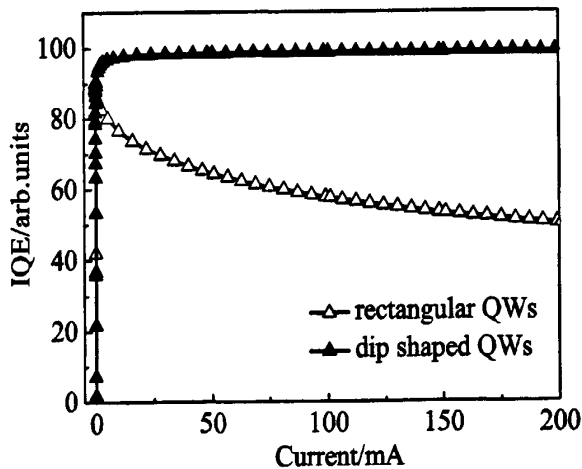


图 4-9 内量子效率随电流变化图

4.4 小结

本章采用 APSYS 模拟软件对具有不同量子阱结构的 GaN 基 LED 进行了数值模拟研究。结果表面，采用矩形量子阱作为阱层的常规结构中，电子泄漏非常严重，光输出功率较小，并存在严重的内量子效率下降。而采用凹形量子阱作为阱层的 LED 中，光输出功率较大，泄漏电流降低，内量子效率

降低得到缓解。在数值模拟和理论分析的基础上，这些光电特性的改善主要由于采用三层结构的 InGaN 作为量子阱，降低了由极化场所引起的静电场，增大了电子和空穴波函数的重叠，从而增大了辐射复合速率。

第五章 p-AlGaN 作为蓝光 LED 量子阱垒层的研究

5.1 研究背景

最近, Kuo 等人的研究表明, 当传统的 GaN 量子阱垒层被 n-AlGaN 所代替时, 载流子注入得到加强, 漏电流减小^[41]。Park 等人的实验结果表明, 镁掺杂在量子阱垒层中能提高 GaN 基 LED 的光荧光强度、热稳定性和光功率^[42]。对 GaN 基材料来说, 在不破坏晶体质量的情况下, 很难获得很高的自由空穴浓度, 因此空穴的注入效率有着较大的局限性。由于空穴具有较高的有效质量并且迁移率很低, 这样空穴很难从 p 区传输到多量子阱区域。此外, 电子阻挡层也充当着电子和空穴势垒的角色, park 等人^[43]报导了电子阻挡层在大注入电流情况下不利于空穴传输。David 等人^[44]报导了载流子在多量子阱中的分布是不均匀的, 辐射复合主要是发生在 p 区附近的量子阱中, 说明空穴很难均匀渗透每一个量子阱并在量子阱之间运输。然而, GaN 基材料的高电子浓度可以在实验中容易获得, 并且电子的有效质量相对较小, 具有较高的迁移率, 电子可以轻易的越过量子阱垒层和电子阻挡层所形成的势垒, 导致对电子的阻挡不充分, 造成电子泄漏。泄漏在 p 区的电子可以和空穴发生复合, 从而降低了空穴的注入效率和器件的量子效率。综上所述, 空穴很难运送到整个量子阱中, 造成空穴的注入效率在 InGaN 基 LED 中比较低。因此, 提高 InGaN 基 LED 的量子效率, 提高空穴注入和减少电子在 p 区的泄露可能是解决这一问题的关键所在。

5.2 结构及参数设置

本章采用 Crosslight 软件公司设计的 APSYS 数值模拟程序, 研究了传统结构下采用 p-GaN 作为量子阱垒层和新设计的采用 p-AlGaN 作为量子阱垒层的 InGaN/GaN 多量子阱 LED 的光学和电学性质。

本章设计的器件结构图如图 5-1 所示, InGaN 基 LED 生长在 c 面蓝宝石衬底上。其结构包括 2.0 μm 厚的 u-GaN 和 2.0 μm 厚的 n-GaN($n=5\times 10^{18}\text{ cm}^{-3}$)。活性层包括六个 3nm 厚的 $\text{In}_{0.16}\text{Ga}_{0.84}\text{N}$ 量子阱和六个 10nm 厚的 p-GaN

($p=1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) 或者 p-Al_{0.02}Ga_{0.98}N ($p=1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) 量子阱垒层。在最后一个量子阱垒层上是 20nm 厚的 p-Al_{0.1}Ga_{0.9}N ($p=5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$)，最后为 170 nm 厚的 p-GaN ($p=1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$)。该器件的几何尺寸设计为 $300 \times 300 \mu\text{m}^2$ 的正方形结构。

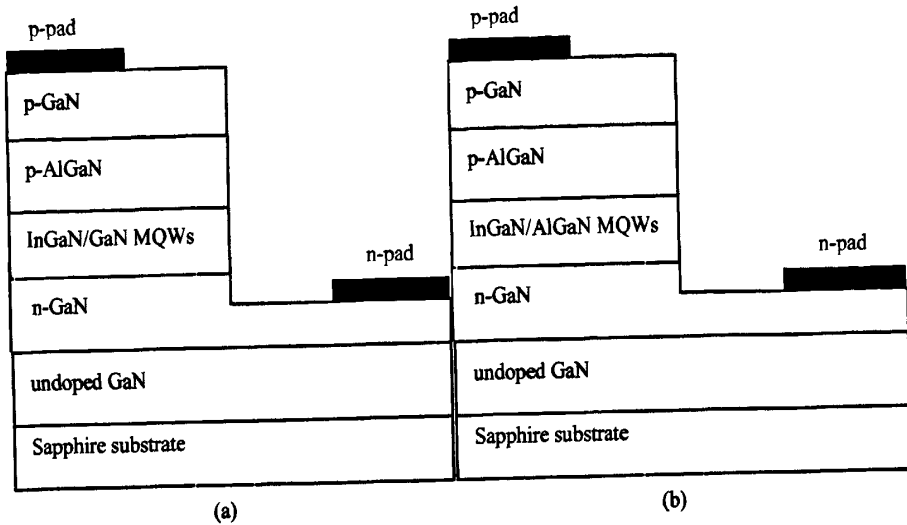


图 5-1 (a) 具有 p-GaN 和 (b) p-AlGaN 量子阱垒层结构的 LED 的结构图

InGaN 和 AlGaN 的禁带宽度由以下式子表示：

$$E_g(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = x \cdot E_g(\text{InN}) + (1-x) \cdot E_g(\text{GaN}) - 1.4x \cdot (1-x) \quad (5-1)$$

$$E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = x \cdot E_g(\text{AlN}) + (1-x) \cdot E_g(\text{GaN}) - 0.7x \cdot (1-x) \quad (5-2)$$

其中 $E_g(\text{InN})$ 、 $E_g(\text{AlN})$ 和 $E_g(\text{GaN})$ 为带隙能量，分别取 0.78eV，6.25eV 和 3.51eV。LED 器件内部吸收均设定为 500m^{-1} ，为简化模拟，工作温度设定为 300K，光提取效率为 0.78。在模拟中使用的半导体材料的其它参数可以在文献^[21]中找到。

5.3 结果与讨论

图 5-2 显示了模拟光功率随电流的变化曲线。可以看出，在电流注入非常小的情况，两种结果之间的差异是较小的。随着注入电流进一步增大，两者之间的差异逐渐增大。当 p-AlGaN 取代 p-GaN 作为量子阱垒层时，LED 的光功率增大，在 200mA 电流下，用 p-GaN 或者 p-AlGaN 作为量子阱垒层的 LED 的光功率分别为 120mW 和 143mW。

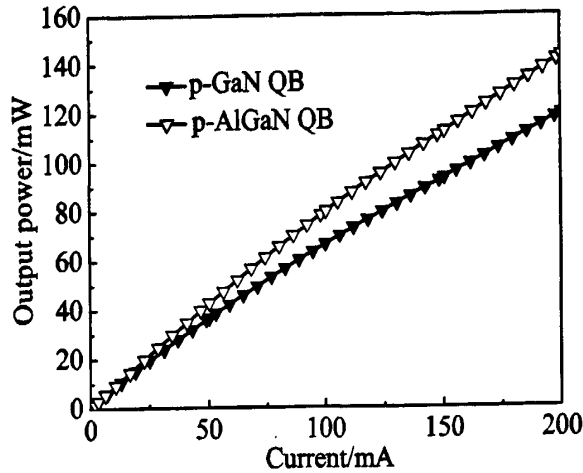


图 5-2 光功率随电流变化图

图 5-3 显示了在 200 mA 正向电流下，靠近电子阻挡层的静电场分布图。由于 p-Al_{0.02}Ga_{0.98}N 量子阱垒层和 p-Al_{0.1}Ga_{0.9}N 电子阻挡层之间有着较小的晶格失配，所以在这两者之间的交界面处有较小的静电场，从而由静电场所引起的能带弯曲会减弱，这样就会有更多的空穴注入到多量子阱区域，提高了空穴注入效率。在另一方面，较小的静电场能减弱导带弯曲，提高势垒高度，从而提高电子阻挡效率。

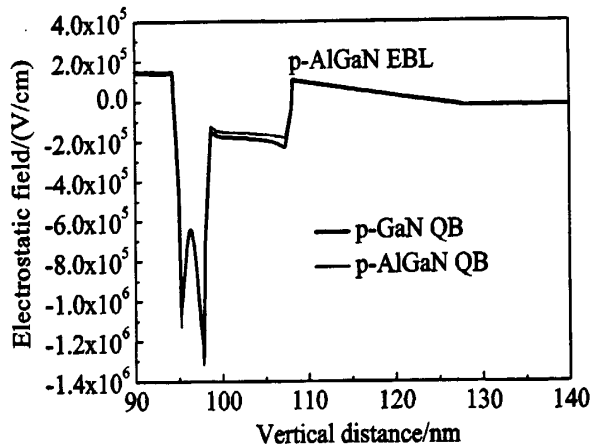


图 5-3 两种不同结构的 LED 的静电场分布图

为了进一步解释这一现象，具有 p-AlGa_{0.02}N 和 p-GaN 量子阱垒层结构的 LED 的能带图如图 5-4 所示。极化引起的倾斜三角形势垒会阻碍电子的传输并且导致的 n 区的导带会比在 p 区高。从图 5-4 中可以观察到，能带倾斜会减小势垒高度，导致严重的电子泄露。对于空穴而言，氮化镓基材料的电子有效质量较小并且具有非常高的迁移率，电子可以轻易的越过量子阱垒层和

电子阻挡层所形成的势垒，并导致电子泄露。用 p-AlGaN 作为量子阱垒层的势垒高度比用 p-GaN 高，较高的势垒高度有助于电子阻挡。

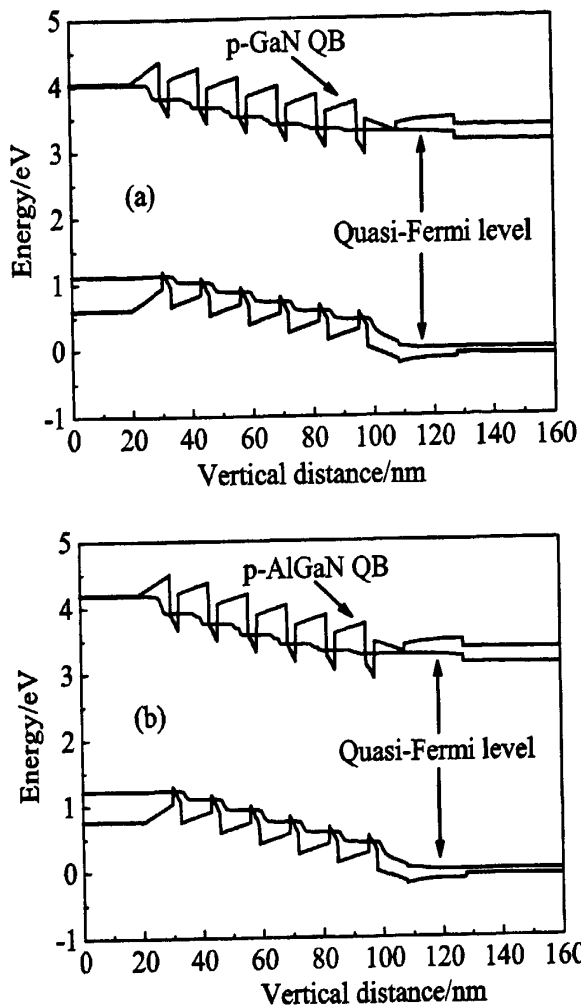


图 5-4 (a) 具有 p-GaN 和 (b) 具有 p-AlGaN 垒层的 LED 的能带图

两种结构在电子阻挡层附近的导带图如图 5-5 所示，当 GaN 量子阱垒层被 AlGaN 垒层所取代时，由于晶格失配所引起的极化场减弱了，从而能带弯曲程度得到缓解，用 p-GaN 作为量子阱垒层的电子的有效势垒高度为 203meV，而用 p-AlGaN 作为量子阱垒层的电子的有效势垒高度为 215meV，用 p-AlGaN 作为量子阱垒层具有较高的电子的势垒高度，这种结构也能较好的实现电子阻挡，提高电子阻挡效率。

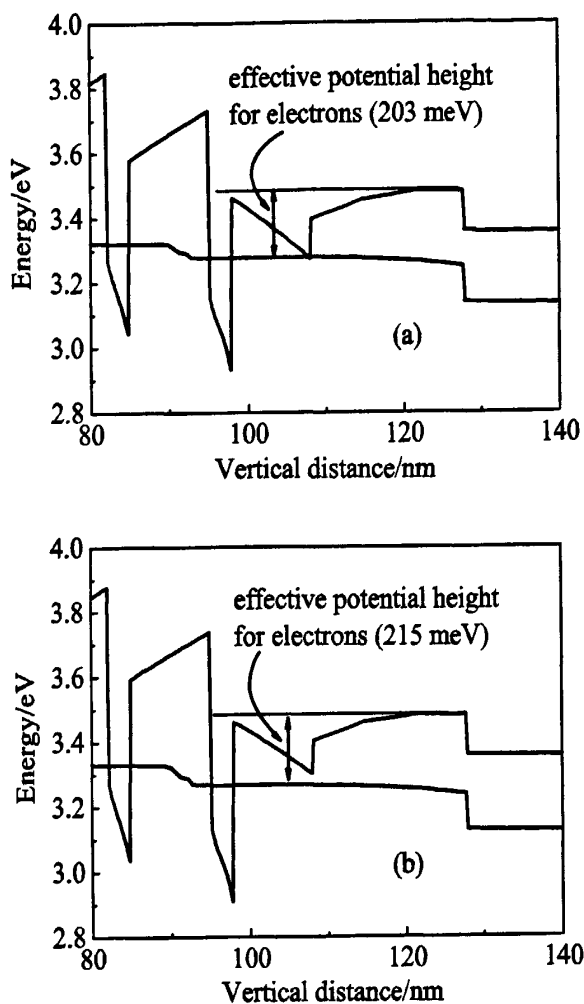


图 5-5 (a) 具有 p-GaN 和 (b) p-AlGaN 垒层的 LED 在电子阻挡层附近的导带图

两种结构在电子阻挡层附近的价带图如图 5-6 所示, 由图可知, 用 p-GaN 作为量子阱垒层的空穴的有效势垒高度为 257meV, 而用 p-AlGaN 作为量子阱垒层的空穴的有效势垒高度为 214meV, 用 p-AlGaN 作为量子阱垒层使得空穴的有效势垒高度大幅度减小, 这将提高空穴注入效率, 更多的空穴会传输到多量子阱区域。

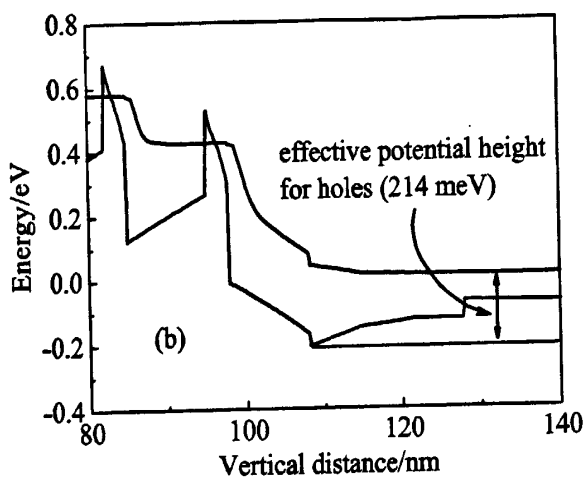
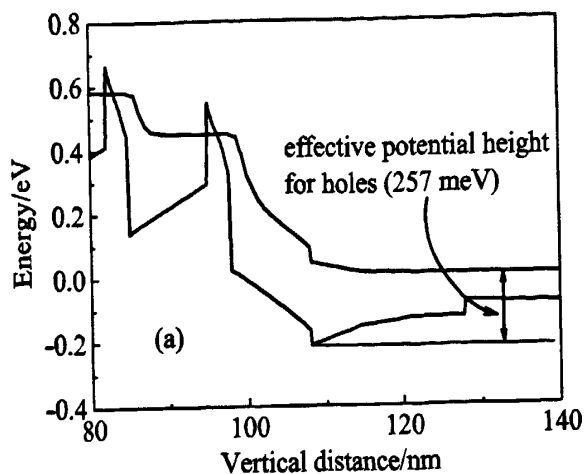


图 5-6 (a) 具有 p-GaN 和 (b) p-AlGa_N 垒层的 LED 在电子阻挡层附近的价带图

两种结构的载流子浓度分布如图 5-7 所示, 由图可知, 两种结构的电子与空穴分布相对均匀, 电子和空穴都集中分布在靠近 p 区的量子阱中, 在最后一个量子阱中电子和空穴大量积累, 并且具有 p-AlGa_N 量子阱垒层结构的 LED 中, 电子和空穴浓度更大, 从另一方面证实了空穴注入效率和电子阻挡效率的提高。

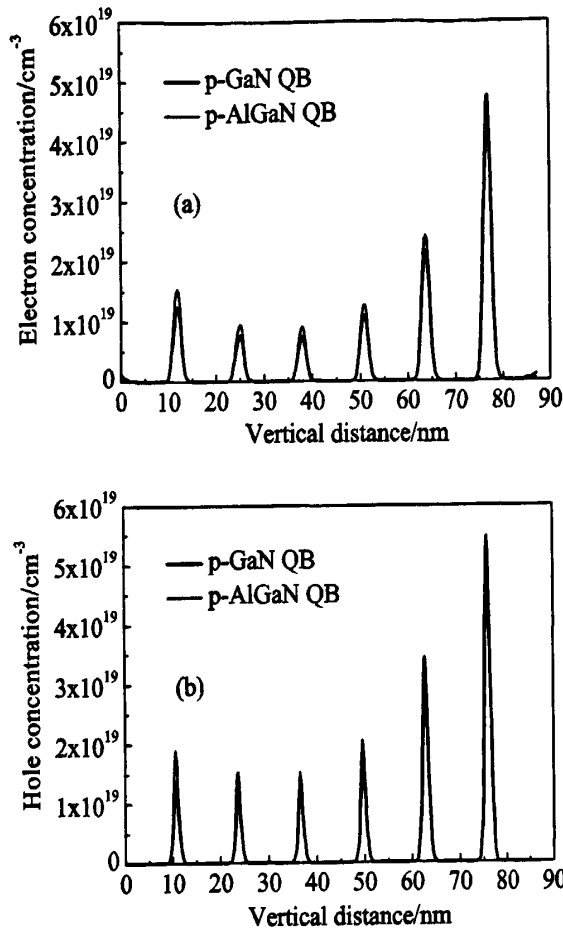


图 5-7 具有两种不同结构的 LED 在量子阱区域的 (a) 电子和 (b) 空穴浓度分布图

两种结构的辐射复合速率在量子阱区域分布如图 5-8 所示，其速率分布和空穴分布十分相似，辐射复合主要发生在靠近 p 区的量子阱中，由于具有 p-AlGaN 量子阱垒层结构的 LED 的载流子浓度更大，故有较大的辐射复合速率。

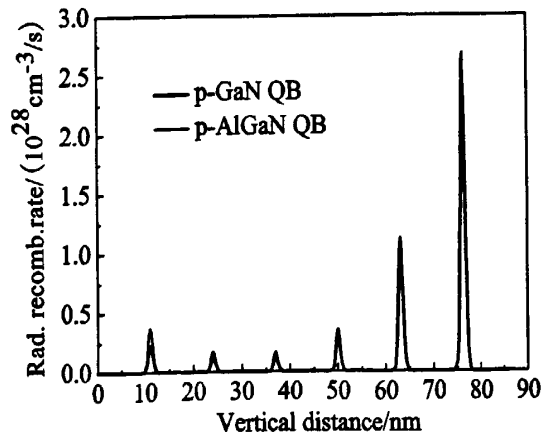


图 5-8 两种不同结构的复合速率分布图

在 200mA 外加电流情况下,两种结构的电子电流密度分布如图 5-9 所示。从图中可以观察到两种结构都有着明显的漏电流,并且采用 p-AlGaN 作为量子阱垒层结构的 LED 的漏电流较小。在毗邻 n 端的第一个量子阱中,两种结构具有相同的电子电流密度,由于 p-AlGaN 垒层对电子有较高的势垒高度,电子的传输就会受到阻碍,所以沿着材料生长方向,电子电流密度逐渐减小,并且此种结构减小的幅度较大,所以 p-AlGaN 垒层可以有效的把电子限制在量子阱中,这样电子阻挡层对电子的阻挡就能更有效,最终到达的 p 区的电子也就减少了。

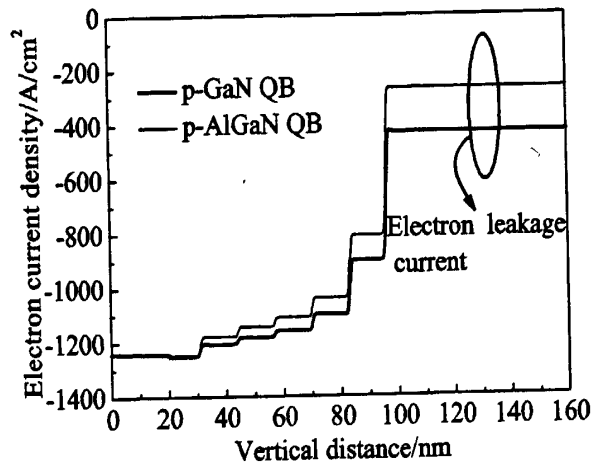


图 5-9 两种不同结构 LED 的电子电流分布图

内量子效率 (IQE) 与正向电流的关系如图 5-10 所示。随着正向电流增加,两种不同结构 LED 的内量子效率均呈现出量子效率下降现象。由于严重的电子泄露,具有 p-GaN 量子阱垒层结构的 LED 有明显的内量子效率下降现象,但具有 p-AlGaN 量子阱垒层结构的 LED 内量子效率的下降得到缓解,这可以解释为 p-AlGaN 作为量子阱垒层有利于电子阻挡和空穴的传输,从而提高空穴注入和电子阻挡效率。

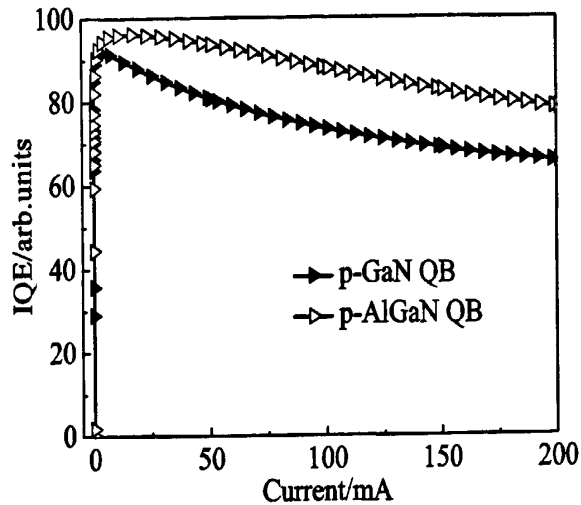


图 5-10 内量子效率随电流变化图

5.4 小结

本章应用 APSYS 模拟软件对具有不同量子阱垒层结构的 GaN 基 LED 进行了数值模拟研究。对 L-I 特性曲线, 静电场, 能带图, 载流子浓度, 载流子浓度, 辐射复合率以及内量子效率进行了系统的研究。结果表明, 当常规的 p-GaN 量子阱垒层被 p-AlGaN 所代替时, 光输出功率增大, 泄漏电流降低和内量子效率降低得到缓解, 这些光电特性的改善主要是由于 p-AlGaN 垒层能有效的将电子限制在 InGaN/GaN 多量子阱中并且提高空穴的注入效率。

第六章 蓝光 LED 空穴注入层的研究

6.1 研究背景

InGaN/GaN 基高亮度发光二极管 (LED) 因为在显示, 背光源和普通照明中的应用而备受关注。然而, 量子效率随着注入电流的增加而降低严重阻碍其进一步在大功率器件方面的应用。量子效率下降的主要机制可能是电子泄漏和较低的空穴注入效率。对于 GaN 基材料, 空穴的有效质量相对较高并且迁移率非常低, 镁掺杂剂具有很高的活化能导致自由空穴浓度较低。另外, 有研究表明在 p-AlGaIn 电子阻挡层也会阻碍空穴的注入^[45]。最近, Kuo^[46]等人的研究表明, 采用 n-AlGaIn 作为量子阱垒层可以提高空穴注入和电子阻挡效率。Wang 等人^[47]采用渐变组分的 p-AlGaIn 电子阻挡层以提高空穴注入效率。Chen 等人^[48]对最后一个量子阱垒层进行 p 型掺杂以提高光功率。在本文中, 引入 p-GaN 和 p-Al_{0.05}Ga_{0.95}N 空穴注入层 (HIL) 以提高空穴注入效率和光功率, 改善 LED 的光电特性。

6.2 结构及参数设置

本章采用由 Crosslight 软件公司设计 APSYS 数值模拟程序, 对具有 p-GaN 和 p-Al_{0.05}Ga_{0.95}N 空穴注入层结构的 InGaIn/GaN 多量子阱 LED 的光学和电学性质进行了研究。

本章设计的器件结构图如图 6-1 所示, InGaIn 基 LED 生长在 c 面蓝宝石衬底上。其结构包括 2.0 μ m 厚的 u-GaN 和 2.0 μ m 厚的 n-GaN ($n=5\times 10^{18}$ cm⁻³)。活性层包括六个 3nm 厚的 In_{0.16}Ga_{0.84}N 量子阱和六个 10nm 厚的 GaN 垒层。在最后一个量子阱垒层上是 30nm 厚的 p-GaN ($p=5\times 10^{17}$ cm⁻³) 或者 30nm 厚的 p-Al_{0.05}Ga_{0.95}N ($p=5\times 10^{17}$ cm⁻³) 的空穴注入层, 其后为 20nm 厚的 p-Al_{0.1}Ga_{0.9}N ($p=5\times 10^{17}$ cm⁻³) 电子阻挡层, 最后为 170nm 厚的 p-GaN ($p=1\times 10^{18}$ cm⁻³)。该器件的几何尺寸设计为 300 \times 300 μ m² 的正方形结构。器件结构图如图 1 所示。InGaIn 和 AlGaIn 的禁带宽度由以下表示:

$$E_g(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = x \cdot E_g(\text{InN}) + (1-x) \cdot E_g(\text{GaN}) - 1.4x \cdot (1-x) \quad (6-1)$$

$$E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = x \cdot E_g(\text{AlN}) + (1-x) \cdot E_g(\text{GaN}) - 0.7x \cdot (1-x) \quad (6-2)$$

其中 $E_g(\text{InN})$, $E_g(\text{AlN})$ 和 $E_g(\text{GaN})$ 为带隙能量, 分别取 0.78eV, 6.25eV 和 3.51 eV。LED 器件内部吸收均设定为 500m^{-1} , 为简化模拟, 工作温度设定为 300 K, 光提取效率为 0.78。在模拟中使用的半导体材料的其它参数可以在文献^[21]中找到。

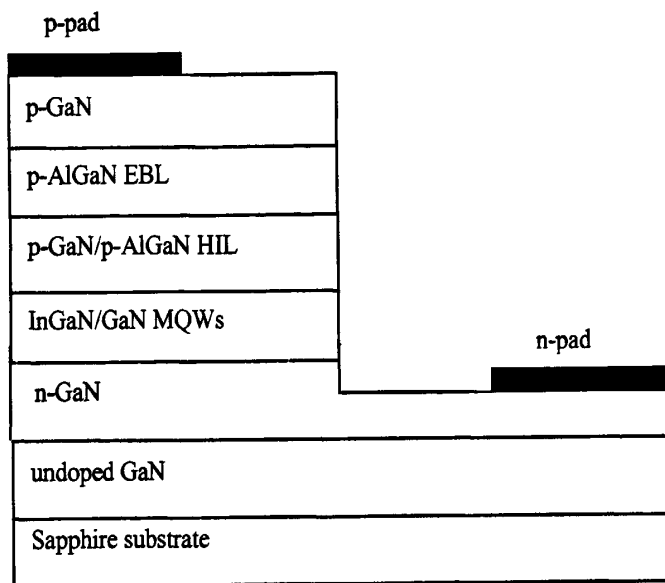


图 6-1 具有不同空穴注入层的 LED 的结构图

6.3 结果与讨论

模拟所得光功率随电流变化曲线如图 6-2 所示。从图中可以看出, 驱动电流较小时, 两个结构的光功率的差异非常小; 随着注入电流进一步增加, 两种结构的差异逐渐增大。对具有 p-AlGaN 空穴注入层结构的 LED 来说, 光功率随为电流近似为线性增加, 但对具有 p-GaN 空穴注入层的 LED 来说, 随电流增大, 光功率的增速放缓。在 200mA 的驱动电流下, 具有 p-AlGaN 空穴注入层结构的 LED 的光输出功率为 173mW, 而普通的具有 p-GaN 空穴注入层的为 133mW。

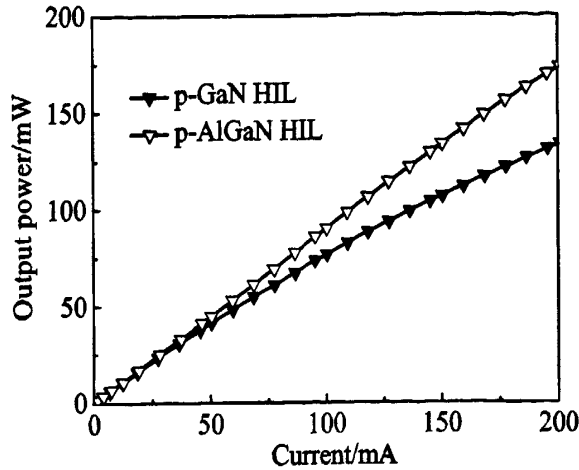


图 6-2 光功率随电流变化曲线

图 6-3 显示了在 200mA 的正向电流下,靠近电子阻挡层的静电场分布图。由于 p-Al_{0.05}Ga_{0.95}N 空穴注入层和 p-Al_{0.1}Ga_{0.9}N 电子阻挡层之间有着较小的晶格失配,所以在这两者之间的接口处的静电场较小,并且在电子阻挡层区域的静电场也被削弱,从而由静电场所引起的能带弯曲减小,对电子的势垒高度增加,而对空穴的势垒高度降低。这样就有利于对电子的阻挡和空穴的注入。

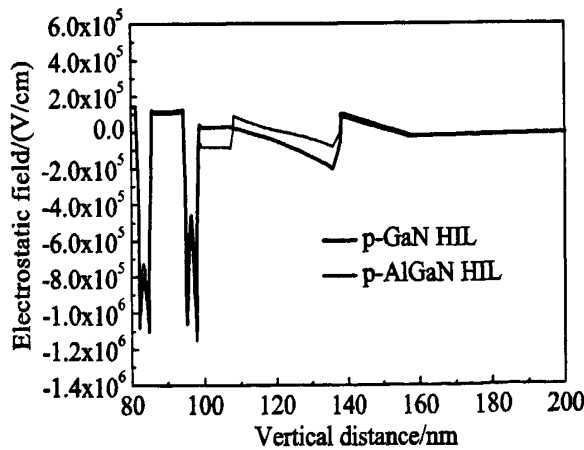


图6-3 两种不同结构的LED的静电场分布图

具有 p-AlGaIn 和 p-GaN 空穴注入层结构的 LED 的能带图如图 6-4 所示。极化场所引起的倾斜三角形势垒会阻碍电子的传输并且导致的 n 区导带比 p 区高,能带倾斜导致严重的电子泄露。从图中可以看出两者的能带弯曲程度和费米能级的位置不一样,具有 p-AlGaIn 空穴注入层结构的能带弯曲较弱,电子在 p 区的费米能级更低,说明电子的填充水平较低,而空穴的费米能级

也较低则意味着空穴的传输得到加强，空穴填充水平较高，更多的空穴注入到多量子阱区域。

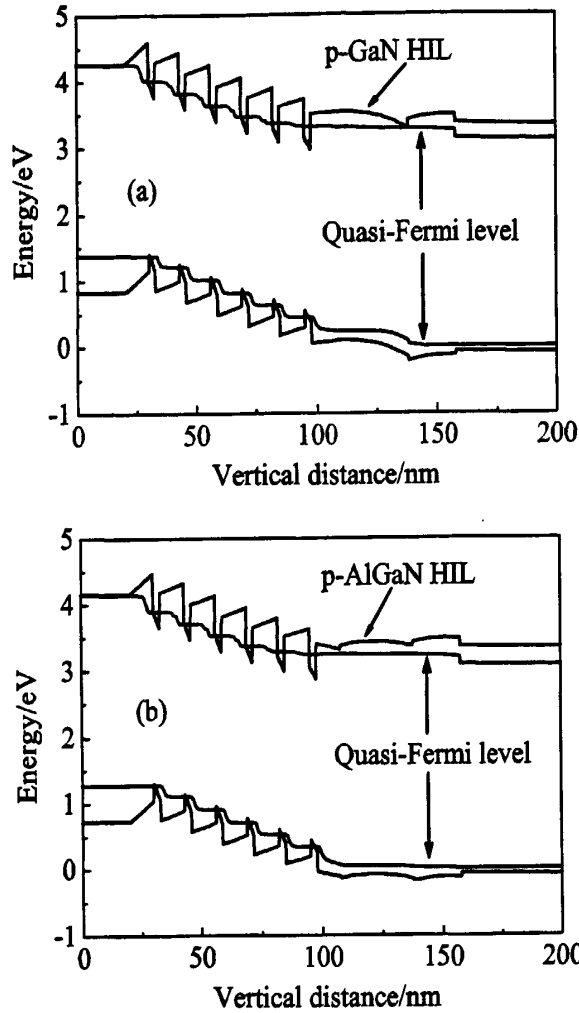


图6-4 (a) 具有p-GaN和(b)p-AlGaIn空穴注入层结构的LED的能带图

两种结构在空穴注入层附近的导带图如图 6-5 所示，p-GaN 空穴注入层与 p-AlGaIn 电子阻挡层有较大的晶格失配，两者界面存在较强的极化场，在大电流情况下，导带弯曲十分严重，并在两者的界面处形成电子的势阱，势阱中的电子可以通过热激发或者隧穿到达 p 区，造成电子的泄露，而采用 p-AlGaIn 作为空穴注入层，由于晶格失配所引起的极化场强度减弱了，从而能带弯曲程度得到缓解。用 p-GaN 作为空穴注入层的电子的有效势垒高度为 207meV，而用 p-AlGaIn 作为空穴注入层的电子的有效势垒高度为 250meV，大幅度增加的电子的势垒高度，有利于电子阻挡。

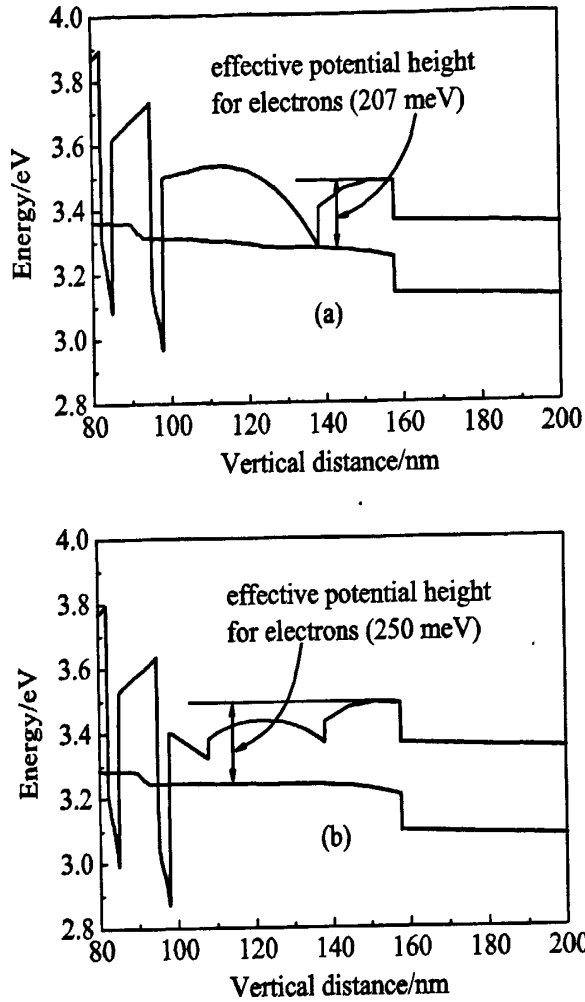


图6-5 (a) 具有p-GaN和(b)p-AlGaN空穴注入层结构的LED在电子阻挡层附近的导带图
 两种结构在空穴注入层附近的价带图如图 6-6 所示, 当采用 p-GaN 作为空穴注入层时, 价带弯曲十分严重, 同时费米能级也急剧上升, 导致空穴的填充水平降低, 而 p-AlGaN 空穴注入层在这两方面都有很大的改善. 用 p-GaN 作为空穴注入层的空穴的有效势垒高度为 217meV, 而用 p-AlGaN 作为空穴注入层的空穴的有效势垒高度为 190meV, 随着空穴的有效势垒高度的减小, 更多的空穴将注入到量子阱中, 从而提高空穴注入效率。

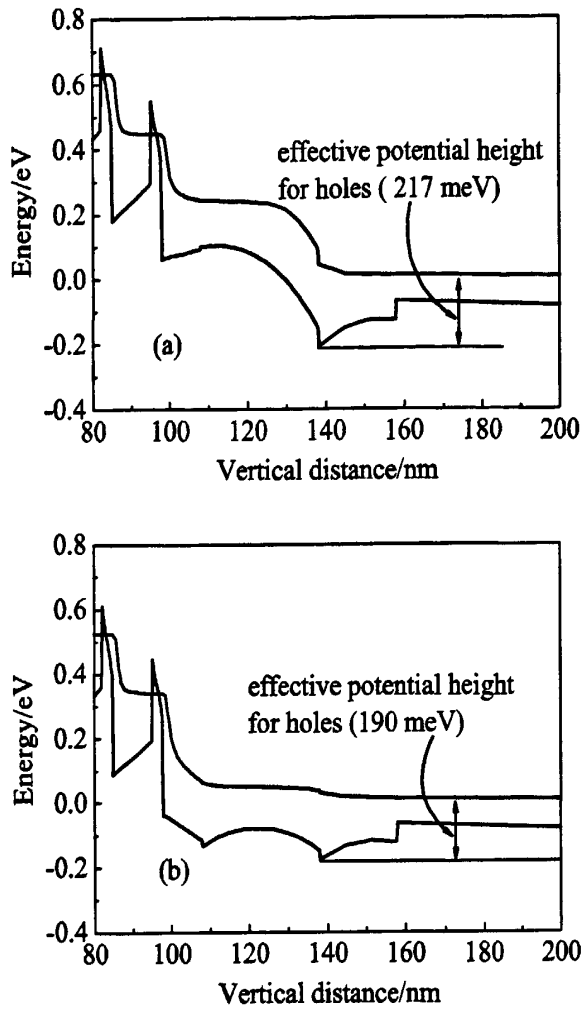


图6-6 (a) 具有p-GaN和(b)p-AlGaIn空穴注入层结构的LED在电子阻挡层附近的价带图
 两种结构的载流子浓度分布如图6-7所示，由图可知，两种结构的电子与空穴分布相对均匀，电子和空穴都集中在靠近p区的量子阱中，在最后一个量子阱中电子和空穴大量积累。在具有p-AlGaIn空穴注入层结构的LED中，电子和空穴浓度更大，从另一方面证实电子被有效的限制在量子阱中和空穴注入效率的提高。

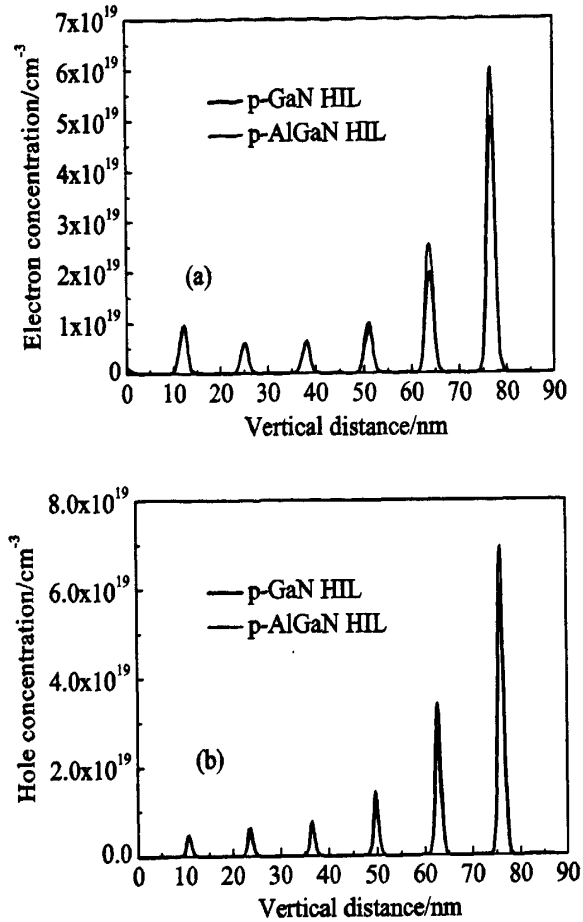


图6-7具有两种不同结构的LED在量子阱区域的 (a) 电子和 (b) 空穴浓度

两种结构的辐射复合速率在量子阱区域分布如图6-8所示,其速率分布和空穴分布十分相似,辐射复合主要发生在靠近p区的量子阱中,由于其它量子阱中的电子和空穴浓度均较小,故辐射复合速率小。具有p-AlGaIn空穴注入层结构的LED的载流子浓度更大,故有较大的辐射复合速率。

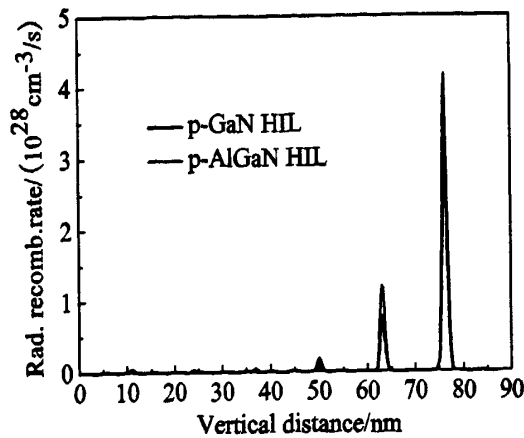


图6-8两种不同结构的复合速率分布图

在 200mA 外加电流情况下，两种结构的电子电流密度分布如图 3-5 所示。从图中可以观察到采用 p-GaN 作为空穴注入层的 LED 中的漏电流较大。在毗邻 n 端的第一个量子阱中，两种结构具有相同的电子电流密度，而靠近 p 区的量子阱差异较大，由于 p-Al_{0.05}Ga_{0.95}N 空穴注入层与 p-Al_{0.05}Ga_{0.95}N 电子阻挡层之间的极化场较弱，能带弯曲较轻，故电子的有效势垒高度较大，对电子能形成有效的电子阻挡，从而减小电子溢出。

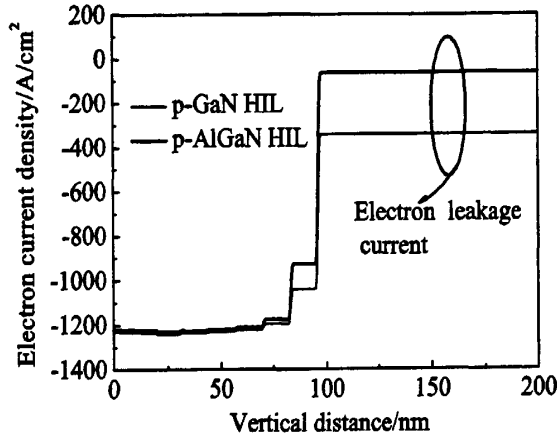


图6-9两种不同结构LED的电子电流分布图

内量子效率 (IQE) 与正向电流的关系如图 6-10 所示。两种不同结构 LED 的内量子效率随着正向电流增加显示出不同的特性。由于严重的电子泄露和空穴注入效率较低，在具有 p-GaN 空穴注入层结构的 LED 中有明显的内量子效率下降现象，但对具有 p-AlGaN 空穴注入层结构的 LED 来说，内量子效率的下降得到缓解，这可以解释为 p-AlGaN 作为空穴注入层既能有利于空穴的注入还能实现对电子的有效阻挡。

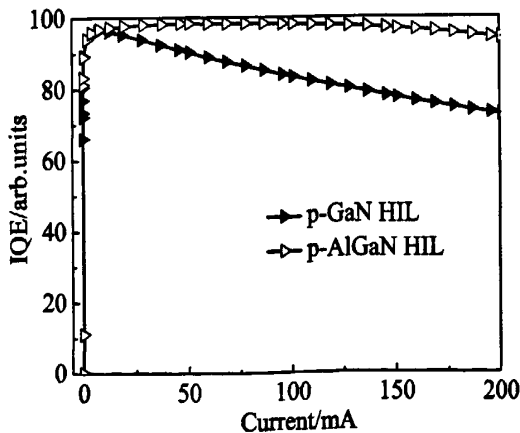


图6-10 内量子效率随电流变化图

6.4 小结

本章应用 APSYS 模拟软件对具有不同空穴注入层结构的 GaN 基 LED 进行了数值模拟研究。对 L-I, 静电场, 能带图, 载流子浓度, 载流子浓度、辐射复合率以及内量子效率进行了系统的研究。结果表明, 当 p-GaN 空穴注入层被 p-AlGaIn 空穴注入层所代替时, 光输出功率增大, 漏电流降低, 内量子效率随电流增加而降低的现象得到缓解, 这些光电特性的改善主要是由于 p-AlGaIn 空穴注入层能提高空穴的注入效率并有效的将电子限制在 InGaIn/GaN 多量子阱中。

第七章 u-GaN 间隔层厚度对 GaN 基蓝光 LED 性能的影响

7.1 研究背景

InGaN/GaN 基高亮度发光二极管 (LED) 因为在显示、背光源和普通照明中的应用而备受关注。由于 LED 的发光效率与多量子阱区域的复合机制密切相关, 所以对复合机制进行深入的研究是非常必要的。长期以来, 很多学者和研究组对复合机制进行了大量研究并提出了一系列的影响机制, 包括: 电子泄漏、空穴注入效率、极化场、俄歇复合、热效应、位错密度、局域态填充效应和量子限制斯塔克效应。本章对 u-GaN 间隔层厚度对 GaN 基蓝光 LED 性能的影响及其影响机理进行了研究。实验结果表明: u-GaN 间隔层的厚度对 LED 的光电性能影响较大, 通过分析其光电特性和软件模拟, 其影响机制与 SRH 复合密切相关。

7.2 实验过程

本次实验采用 Thomas Swan MOCVD 设备生长 GaN 基 LED, 实验中所有样品均使用 2 英寸 c 面蓝宝石作为衬底, 以氨气(NH_3)、三甲基镓(TMGa)、三甲基铟(TMIn)和三甲基铝(TMAI)、作为氮源、镓源、铟源和铝源, 硅烷(SiH_4)和二茂镁(Cp_2Mg)分别用于 GaN 的 N 型和 P 型掺杂。外延生长工艺如下: 其外延层结构包括 25nm 的低温成核层, 2.0 μm 厚的 u-GaN 和 2.0 μm 厚的 n-GaN ($n=5\times 10^{18}\text{cm}^{-3}$)。活性层包括六个 3nm 厚的 $\text{In}_{0.16}\text{Ga}_{0.84}\text{N}$ 量子阱和五个 10nm 厚的 GaN 垒层。在最后一个量子阱与 p-AlGaIn 之间为 u-GaN 间隔层, 其后为 20nm 厚的 p- $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$ ($p=5\times 10^{17}\text{cm}^{-3}$) 电子阻挡层, 最后为 170nm 厚的 p-GaN ($p=1\times 10^{18}\text{cm}^{-3}$)。u-GaN 间隔层的厚度分别为 5nm、15nm、30nm、50nm、70nm, 所有的样品均在相同的条件下生长, 并采用传统的芯片工艺制成 $300\times 300\mu\text{m}^2$ 大小的芯片, 芯片为垂直结构并处于未封装状态, 芯片的 I-V 特性为常温下测量所得, 光功率通过具有校正计的积分球测得。LED 的结构图如图 7-1 所示:

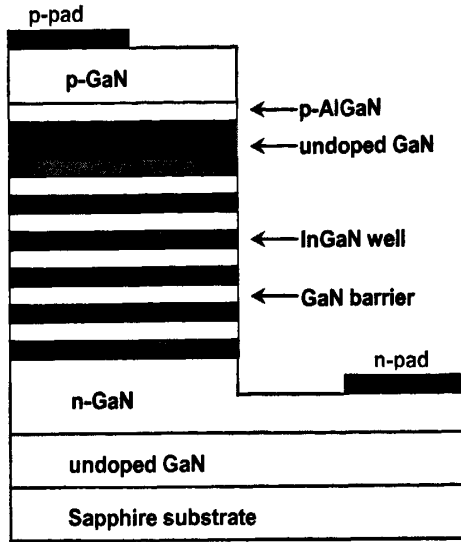


图 7-1 具有 u-GaN 间隔层的 LED 的结构图

7.3 结果与讨论

不同 u-GaN 间隔层厚度下，实验和模拟所得 I-V 曲线如图 7-2 所示。在注入电流较小的情况下，实验数据和模拟所得电压具有相同的变化趋势。当 u-GaN 的厚度从 5nm 增加到 70nm，注入电流为 20 mA 的情况下，模拟所得的芯片电压从 3.13V 增大到 3.22V，而实验所测得的电压则从 3.17V 增至 3.28V。随着 u-GaN 间隔层厚度的增加。正向电压有所增大，这主要归因于 u-GaN 间隔层厚度的增加使得 LED 芯片的导电性能变差。

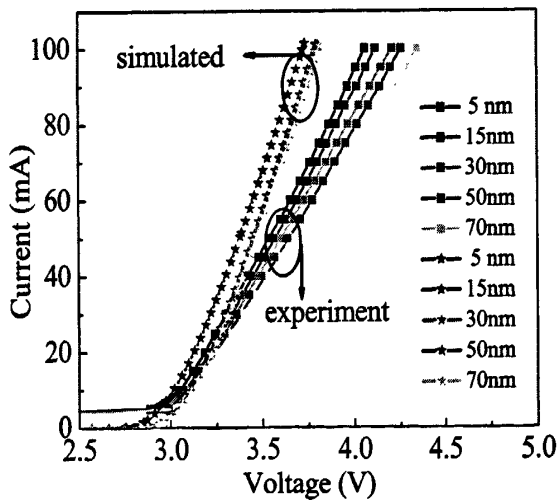


图 7-2 实验（方块）和模拟（星形）所得的 I-V 曲线图

各样品的光强随电流的变化曲线图如图 7-3 所示，从图中可以清楚的看

到, 当 u-GaN 间隔层的厚度从 5nm 增大到 50nm 时, 样品的光强逐渐增大, 当厚度进一步增大到 70nm 时, 光强反而有所下降。在所加电流为 20mA 的情况下, u-GaN 间隔层的厚度为 50nm 时, 光强为 65mcd; 而 u-GaN 厚度为 5nm 时, 光强仅为 18mcd。前者的光强为后者的 360%。尽管增加 u-GaN 的厚度能使更多的光从多量子阱区域逃逸, 提高了光提取效率, 但这并不能解释光强如此之大的增加, 相关解释将在其后给出。

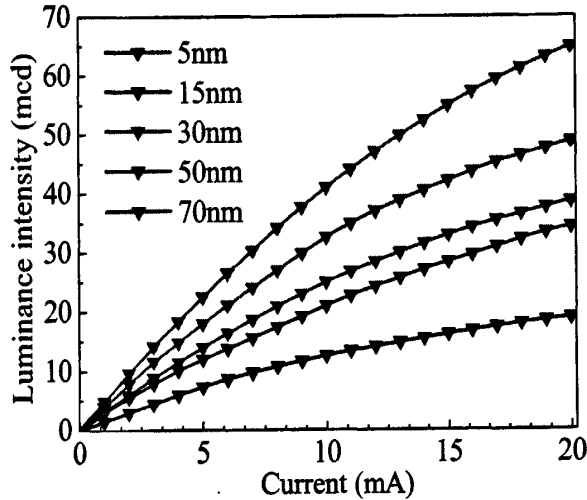


图 7-3 光强随电流的变化曲线图

峰值波长与半高宽随 u-GaN 间隔层厚度的变化关系图如图 7-4(a) 所示。在 20mA 驱动电流情况下, 所有样品的半高宽均在 19nm 左右, 表明 LED 的质量并没有随着 u-GaN 厚度的增加而变差, 由于增加 u-GaN 厚度将使得量子限制斯塔克效应增强^[49], 所以样品的峰值波长有所红移, 光功率与反向漏电流随 u-GaN 间隔层厚度的变化关系图如图 7-4(b) 所示, 在驱动电流为 20mA 的情况下, 光功率随 u-GaN 厚度的增加近似为抛物线性变化, 当 u-GaN 厚度为 50nm 时, 光功率最大; 另一方面, 在所加反向电压为 -8V 的情况下, 当 u-GaN 厚度从 5nm 增加到 50nm 时, 反向漏电流从 0.69 μ A 下降到 0.01 μ A, 进一步增大 u-GaN 厚度, 反向漏电流亦保持在 0.01 μ A 左右。

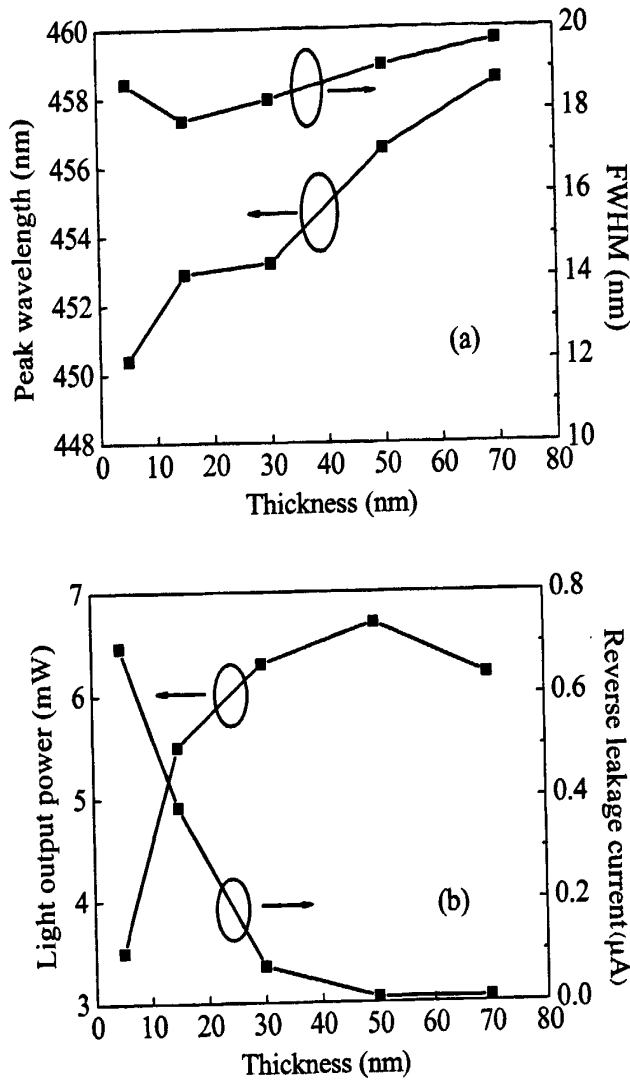


图 7-4 (a) 峰值波长与半高宽与 (b) 光功率和反向漏电流

随 u-GaN 间隔层厚度的变化关系图

Kuksenkov^[50] 和 Cao^[51]等人发现反向漏电流与耗尽层中的缺陷态密切相关。与 u-GaN 相比, InGaN 的生长温度较低, 故 InGaN 多量子阱中的缺陷较多, 增大 u-GaN 的厚度将有助于改善耗尽层的质量, 进而减小反向漏电流。由实验结果可知, u-GaN 间隔层厚度对 LED 的光功率影响较大, 表明 u-GaN 间隔层可能会减少非辐射复合, 非辐射复合包括 SRH 复合和俄歇复合, 在小电流情况下, 软件模拟结果为俄歇复合远远小于 SRH 复合, 这和 Kuo 等人所得的结果一致^[52], 俄歇系数较小一般为 $1 \times 10^{-34} \text{ cm}^6/\text{s}$ 量级。所以 50nm 间隔层的 LED 中的光功率的增大可以归因于多量子区域 SRH 复合的减少。Shockely^[53]首先报到了当产生复合过程发生在耗尽层区域时, 半导体二极管

就好偏离其理想特性。Sah^[54] and Choo^[55]证明了在耗尽层区域的 SRH 产生和复合会对半导体二极管的特性产生巨大影响。Nash 等人^[56]在 AlInSb 中红外 LED 中利用光刻技术移除部分耗尽层减少了 SRH 复合, 并使得 LED 的光功率增加和反向漏电流减小。为了进一步解释实验现象, 采用了 crosslight 公司设计的 APSYS 数值模拟程序, 对具有不同 u-GaN 间隔层厚度的 InGaN/GaN 多量子阱 LED 的光电性质进行了研究。LED 器件内部吸收均设定为 500m^{-1} , 为简化模拟, 工作温度设定为 300 K, 光提取效率为 0.78。

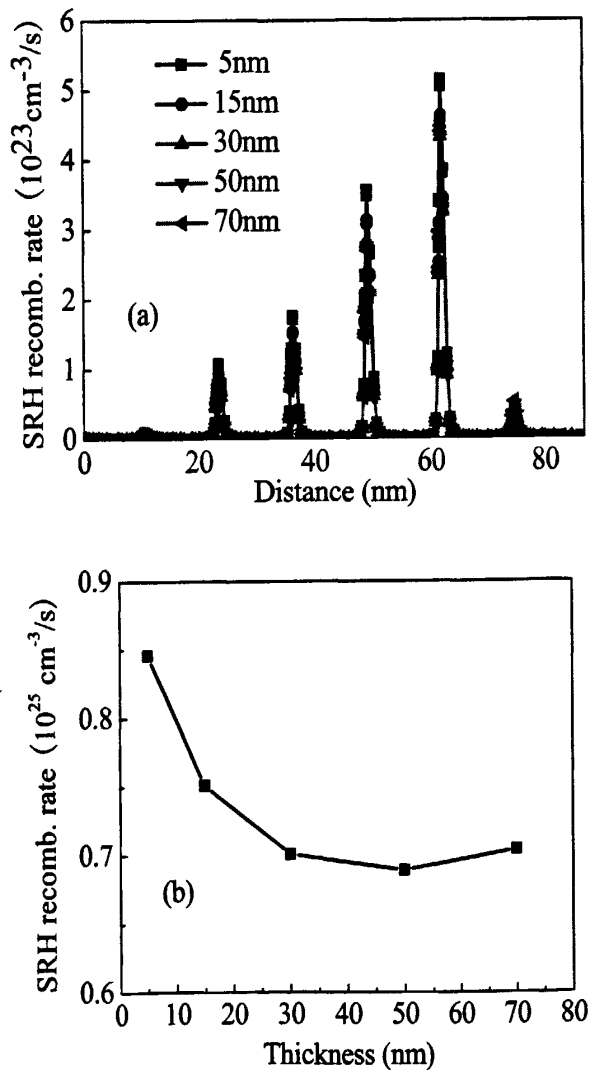


图 7-5 (a) 模拟所得 SRH 复合速率在多量子区域的分布图

与 (b) 总 SRH 复合速率随 u-GaN 间隔层厚度的变化关系图

在驱动电流为 20mA 的情况下, 模拟所得 SRH 复合速率在多量子区域的分布如图 7-5 (a) 所示, 随着 u-GaN 间隔层厚度的增加, 每个量子阱中的 SRH

复合速率均呈增大趋势。总 SRH 复合速率随 u-GaN 间隔层厚度的变化关系如图 7-5 (b) 所示, 由图可知总 SRH 复合速率的变化趋势和光功率变化趋势正好相反, 当 u-GaN 间隔层的厚度为 50nm 时, 总 SRH 复合速率最小, 光功率最大。通过插入合适厚度的 u-GaN 间隔层有利于改善耗尽层的质量进而减少在多量子阱区域的非辐射复合。当 u-GaN 间隔层厚度进一步增加到 70nm 时, 总 SRH 复合速率增大, 这与光功率下降一致。

7.4 小结

本章研究了 InGaN/GaN 多量子阱与 p-AlGaIn 电子阻挡层之间不同厚度的 u-GaN 间隔层对 LED 光电性能的影响, 实验结果表明: 当 u-GaN 厚度为 50nm, 驱动电流为 20mA 的情况下, LED 的光功率最大, 反向漏电流较小, 通过对其光电性能的分析 and 软件模拟, 这些性能的改善主要归因于 u-GaN 间隔层有利于改善耗尽层的质量, 进而减少多量子区域的 SRH 复合。

结论

本论文使用了加拿大 Crosslight 公司开发的半导体软件 Apsys 对不同结构的 LED 进行了数值模拟, 研究了采用晶格匹配的 $p\text{-Al}_{0.82}\text{In}_{0.18}\text{N}$ 作为电子阻挡层、凹形量子阱结构、 $p\text{-Al}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{N}$ 作为量子阱垒层、 $p\text{-Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$ 作为空穴注入层以及 $u\text{-GaN}$ 间隔层厚度对 LED 性能的影响, 并取得一些研究结果:

1、研究了采用晶格匹配的 $p\text{-Al}_{0.82}\text{In}_{0.18}\text{N}$ 取代传统的 $p\text{-AlGaN}$ 作为电子阻挡层的 LED 的性能。模拟结果表明: 采用 $p\text{-Al}_{0.82}\text{In}_{0.18}\text{N}$ 作为电子阻挡层的 LED 的有效势垒高度大大增加, 器件的光功率增加, efficiency droop 现象减弱。

2、研究了具有 dip-shaped 量子阱结构 LED 的光电特性, 模拟结果表明: 具有凹形量子阱结构的 LED, 由于极化效应减弱, 使得波函数的重叠增加和辐射复合效率增大进而改善 LED 的光电特性。

3、研究了采用 $p\text{-Al}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{N}$ 作为量子阱垒层结构的 LED 特性, 模拟结果表明: 在低掺杂的情况下, 与传统的 $p\text{-GaN}$ 结构相比, $p\text{-Al}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{N}$ 作为垒层在改善空穴注入和电子阻挡方面, 效果显著。

4、研究了具有 $p\text{-Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$ 作为空穴注入层的 LED 的光电性能, 模拟结果表明: 与 $p\text{-GaN}$ 空穴注入层相比, 前者在空穴注入效率及电子阻挡效率方面有着较大的提高使得 LED 的性能体现出优越性。

5、研究了 InGaN/GaN 多量子阱与 $p\text{-AlGaN}$ 电子阻挡层之间不同厚度的 $u\text{-GaN}$ 间隔层对 LED 光电性能的影响, 实验结果表明: 当 $u\text{-GaN}$ 厚度为 50nm, 驱动电流为 20mA 的情况下, LED 的光功率最大, 反向漏电流较小, 通过对其光电性能的分析 and 软件模拟, 这些性能的改善主要归因于 $u\text{-GaN}$ 间隔层有利于改善耗尽层的质量, 进而减少多量子区域的 SRH 复合。

本文得到了国家自然科学基金 (50602018), 广东省科学与科技计划 (2010B090400456; 2009B011100003; 2010A081002002) 和广州市科学与科技计划 (2010U1-D00191) 的支持。

参考文献

- [1] Shuji Nakamura, Yasuhiro Harada, Masayuki Seno. Novel metalorganic chemical vapor deposition system for GaN growth[J]. Appl. Phys. Lett. 1991, 58 18: 2021-2023.
- [2] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys[J]. J. Appl. Phys. 2001, 89: 5815.
- [3] S.Nakamura. The Roles of Structural Imperfections in InGaN-Based Blue Light-Emitting Diodes and Laser Diodes[J]. Science, 1998, 281, 956
- [4] P.Perlin, C.Jauberthie-Carillon, J.P.Ithie, AA.S.Miguel, I.Grzegory, A.Polian. Raman scattering and x-ray-absorption spectroscopy in gallium nitride under high pressure[J]. Phys.Rev.B, 1992, 45, 12925
- [5] I.Gorczyca, N.E.Christensen. Optical and structural properties of III-V nitrides under pressure[J]. Physica B, 1993, 185, 410
- [6] M.Ueno, M Yoshida, A Onodera, O Shimomura. Structural phase transition of 3-5 nitrides under high pressure[J]. Jpn.J.Appl.Phys. 1993, 32, 42
- [7] S.Nohammad and H.Morkoc. Emerging gallium nitride based devices[J]. Prog.Quant.Electr 1996, 20, 361
- [8] M.Ueno, A.Onodera, O.Shimomura, K.Takemura. Stability of the wurtzite-type structure under high pressure: GaN and InN[J]. Phys.Rev.B 1992, 49, 10123
- [9] A.R.Smith, R.M.Feenstra, D.W.Greve, J.Neugebauer and J.E. Northrup. Reconstructions of the GaN (000 $\overline{1}$) Surface[J]. Phys. Res. Lett. 1997, 79, 3934
- [10] 梁春广, 张冀. GaN-第三代半导体的曙光[J]. 半导体学报 1999, 20, 89
- [11] F.A.Ponce, D.P.Bour, W.T.Yong, M.Saunders and J.W.Steeds. Determination of lattice polarity for growth of GaN bulk single crystals and epitaxial layers[J]. Appl.Phys.Lett. 1996, 69, 337
- [12] Khan M.A, Kuznia J.N, Hove J.M.V, Pan N, Carter J. Observation of a two-dimensional electron gas in low pressure metalorganic chemical vapor

- deposited GaN-Al_xGa_{1-x}N heterojunctions[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1992, 60(24): 3027-3029
- [13] APSYS by Crosslight Software Inc., Burnaby, Canada (<http://www.crosslight.com>)
- [14] Chuang S L, Chang C S. A band-structure model of strained quantum-well wurtzite semiconductors[J]. *Semicond. Sci. Technol.* 1997, 12, 252
- [15] Chuang S L, Chang C S. k·p method for strained wurtzite semiconductors[J]. *Phys. Rev. B* 1996, 54, 2491
- [16] Goano M, Bellotti E, Ghillino E, Garetto C, Ghione G, Brennan K F. Band structure nonlocal pseudopotential calculation of the III-nitride wurtzite phase materials system. Part I. Binary compounds GaN, AlN, and InN[J]. *J. Appl. Phys.* 2000, 88, 6476
- [17] Bernardini F, Fiorentini V, Vanderbilt D. Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides[J]. *Phys. Rev. B* 1997, 56, 10024
- [18] Fiorentini V, Bernardini F, Ambacher O. Evidence for nonlinear macroscopic polarization in III-V nitride alloy heterostructures [J]. *Appl. Phys. Lett.* 2002, 80, 1204
- [19] Choi S, Kim H J, Kim S S, Liu J, Kim J, Ryou J H, Dupuis R D, Fischer A M and Ponce F A. Improvement of peak quantum efficiency and efficiency droop in III-nitride visible light-emitting diodes with an InAlN electron-blocking layer [J]. *Appl. Phys. Lett.* 2010, 96, 221105
- [20] Stringfellow G B, Craford M G. *High Brightness Light Emitting Diodes* [C]. 1997 (San Diego: CA Academic), p. 412
- [21] Vurgaftman I and Meyer J R. Band parameters for nitrogen-containing semiconductors[J]. *J. Appl. Phys.* 2003, 94, 3675
- [22] Kim M H, Schubert M F, Dai Q, Kim J K, Schubert E F, Piprek J and Park Y, Origin of efficiency droop in GaN-based light-emitting diodes[J], *Appl. Phys. Lett.* 2007, 91, 183507
- [23] Schubert M F, Xu J, Kim J K, Schubert E F, Kim M H, Yoon S, Lee S M, Sone C, Sakong T and Park Y. Polarization-matched GaInN/AlGaInN

- multi-quantum-well light-emitting diodes with reduced efficiency droop[J]. Appl. Phys. Lett. 2008, 93, 041102
- [24] Lu G J, Zhu J J, Jiang D S, Wang Y T, Zhao D G, Liu Z S, Zhang S M and Yang H. Structural and optical properties of $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{N}$ epilayers on GaN template grown by metalorganic chemical vapor deposition[J]. Chinese Phys. B 2010, 19, 026804
- [25] Song J, Xu F J, Yan X D, Lin F, Huang C C, You L P, Yu T J, Wang X Q, Shen B, Wei K and Liu X Y. High conductive gate leakage current channels induced by In segregation around screw-and mixed-type threading dislocations in lattice-matched InAlN/GaN[J]. Appl. Phys. Lett. 2010, 97, 232106
- [26] Wang H L, Yin Y A and Li S T. Improvement of the crystal quality of AlInN by using the patterned sapphire substrate[J]. 2010 Proceedings of OSA-IEEE-COS Topical conference on Advances in Optoelectronics and Micro/nano-optics Guangzhou, China, December 3-6, 2010
- [27] Paskova T. Development and prospects of nitride materials and devices with nonpolar surfaces[J]. Phys. Status Solidi 2008, 245, 1011
- [28] Chakraborty A, Haskell B A, Keller S, Speck J S, DenBaars S P, Nakamura S, and Mishra U K. Nonpolar InGaN/GaN emitters on reduced-defect lateral epitaxially overgrown a-plane GaN with drive-current-independent electroluminescence emission peak[J]. Appl. Phys. Lett. 2004, 85, 5143
- [29] Kojima K, Funato M, Kawakami Y, Masui S, Nagahama S and Mukai T. Stimulated emission at 474 nm from an InGaN laser diode structure grown on a (11 22) GaN substrate[J]. Appl. Phys. Lett. 2007, 91, 251107
- [30] Brinkley S E, Lin Y D, Chakraborty A, Pfaff N, Cohen D, Speck J S, Nakamura S and DenBaars S P. Polarized spontaneous emission from blue-green m-plane GaN-based light emitting diodes[J]. Appl. Phys. Lett. 2011, 98, 011110
- [31] Kim M H, Schubert M F, Dai Q, Kim J K, Schubert E F, Piprek J and Park Y. Origin of efficiency droop in GaN-based light-emitting diode[J]. Appl. Phys. Lett. 2007, 91, 183507

- [32] Schubert M F, Xu J, Kim J K, Schubert E F, Kim M H, Yoon S, Lee S M, Sone C, Sakong T and Park Y. Reduction in efficiency droop, forward voltage, ideality factor, and wavelength shift in polarization-matched GaInN/GaInN multi-quantum-well light-emitting diodes[J]. *Appl. Phys. Lett.* 2008, 93, 041102
- [33] Kuo Y K, Tsai M C and Yen S H. Numerical simulation of blue InGaN light-emitting diodes with polarization-matched AlGaInN electron-blocking layer and barrier layer[J]. *Opt. Commun.* 2009, 282, 4252
- [34] Choi R J, Hahn Y B, Shim H W, Han M S, Suh E K, Lee H J. Efficient blue light-emitting diodes with InGaN/GaN triangular shaped multiple quantum wells[J]. *Appl. Phys. Lett.* 2003, 82, 2764
- [35] Liao C T, Tsai M C, Liou B T, Yen S H and Kuo Y K. Improvement in output power of a 460 nm InGaN light-emitting diode using staggered quantum well[J]. *J. Appl. Phys.* 2010, 108, 063107
- [36] Arif R A, Ee Y K and Tansu N. Polarization engineering via staggered InGaN quantum wells for radiative efficiency enhancement of light emitting diodes[J]. *Appl. Phys. Lett.* 2007, 91, 091110
- [37] Zhao H P, Liu G Y, Li X H, Huang G S, Poplawsky J D, Penn S T, Dierolf V and Tansu N. Growths of staggered InGaN quantum wells light-emitting diodes emitting at 520–525 nm employing graded growth-temperature profile[J]. *Appl. Phys. Lett.* 2009, 95, 061104
- [38] Han S H, Lee D Y, Shim H W, Kim G C, Kim Y S, Kim S T, Lee S J, Cho C Y and Park S J. Improvement of efficiency droop in InGaN/GaN multiple quantum well light-emitting diodes with trapezoidal wells[J]. *J. Phys. D.* 2010, 43, 354004
- [39] Park S H, Ahn D, Koo B H and Kim J W. Dip-shaped InGaN/GaN quantum-well light-emitting diodes with high efficiency[J]. *Appl. Phys. Lett.* 2009, 95, 063507
- [40] Zhao H, Arif R A and Tansu N. Design Analysis of Staggered InGaN Quantum Wells Light-Emitting Diodes at 500–540 nm[J]. *IEEE J. Sel. Top. Quantum*

- Electron. 2009, 15, 1104
- [41] Chang J Y, Tsai M C and Kuo Y K. Advantages of blue InGaN light-emitting diodes with AlGaIn barriers[J]. Opt. Lett. 2010, 35, 1368
- [42] Han S H, Cho C Y, Lee S J, Park T Y, Kim T H, Park S H, Kang S W, Kim J W, Kim Y C and Park S J. Effect of Mg doping in the barrier of InGaIn/GaN multiple quantum well on optical power of light-emitting diodes[J]. Appl. Phys. Lett. 2010, 96, 051113
- [43] Han S H, Lee D Y, Lee S J, Cho C Y, Kwon M K, Lee S P, Noh D Y, Kim D J, Kim Y C and Park S J. Effect of electron blocking layer on efficiency droop in InGaIn/GaN multiple quantum well light-emitting diodes[J]. Appl. Phys. Lett. 2009, 94, 231123
- [44] David A, Grundmann M J, Kaeding J F, Gardner N F, Mihopoulos T G, Krames M R, Mihopoulos T G and Krames M R. Carrier distribution in (0001) InGaIn/GaN multiple quantum well light-emitting diodes[J]. Appl. Phys. Lett. 2008, 92, 053502
- [45] Han S H, Lee D Y, Lee S J, Cho C Y, Kwon M K, Lee S P, Noh D Y, Kim D J, Kim Y C and Park S J. Effect of electron blocking layer on efficiency droop in InGaIn/GaN multiple quantum well light-emitting diodes[J]. Appl. Phys. Lett. 2009, 94, 231123
- [46] Chang J Y, Tsai M C and Kuo Y K. Enhancement in hole-injection efficiency of blue InGaIn light-emitting diodes from reduced polarization by some specific designs for the electron blocking layer[J]. Opt. Lett. 2010, 35, 9
- [47] Wang C H, Ke C C, Lee C Y, Chang S P, Chang W T, Li J C, Li Z Y, Yang H C, Kuo H C, Lu T C and Wang S C. Hole injection and efficiency droop improvement in InGaIn/GaN light-emitting diodes by band-engineered electron blocking layer[J]. Appl. Phys. Lett. 2010, 97, 261103
- [48] Chen J R, Lu T C, Kuo H C, Fang K L, Huang K F, Kuo C W, Chang C J, Kuo C T and Wang S C. Study of InGaIn-GaN Light-Emitting Diodes With Different Last Barrier Thicknesses[J]. IEEE Photon. Technol. Lett. 2010, 22, 12

- [49] Leroux M, Grandjean N, Massies J, Gil B, Lefebvre P and Bigenwald P. Barrier-width dependence of group-III nitrides quantum-well transition energies[J]. *Phys. Rev. B*. 1999, 60, 1496
- [50] Kuksenkov D V, Temkin H, Osinsky A, Gaska R and Khan M A. Origin of conductivity and low-frequency noise in reverse-biased GaN p-n junction[J]. *Appl. Phys. Lett.* 1998, 72, 1365
- [51] Cao X A, Stokes E B, Sandvik P, LeBoeuf S F, Kretchmer J, Walker D. Defect generation in InGaN/GaN light-emitting diodes under forward and reverse electrical stresses[J]. *IEEE Electron. Dev. Lett.* 2002, 23, 535
- [52] Yen S H, Tsai M C, Tsai M L, Shen Y J, Hsu T C, Kuo Y K. Theoretical investigation of Auger recombination on internal quantum efficiency of blue light-emitting diodes[J]. *Appl Phys A*, 2009, 97, 705–708
- [53] Shockley W, Syst Bell. The theory of pn junctions in semiconductors and pn junction transistors[J]. *Tech. J.* 1949, 28, 435
- [54] Sah C T, Noyce R N and Shockley W. Carrier Generation and Recombination in P-NV Junctions and P-N Junction Characteristics[J]. *Proc. IRE.* 1957, 45, 1228
- [55] Choo S C. Carrier generation-recombination in the space-charge region of an asymmetrical pn junction[J]. *Solid-State Electron.* 1968, 11, 1069
- [56] Nash G R and Ashley T. Reduction in Shockley–Read–Hall generation-recombination in AlInSb light-emitting-diodes using spatial patterning of the depletion region[J]. *Appl. Phys. Lett.* 2009, 94, 23510

致 谢

本论文及其研究工作是在导师李述体研究员的悉心指导下完成的。在论文的选题、研究和撰写过程中，李老师对我所做的工作给予了充分的指导和大力支持。李老师知识渊博、治学态度严谨、富于创新、洞察力敏锐、在学术上给我深刻的教育和启迪。同时李老师平易近人、严以律己宽以待人的为人处事方式以及对我生活、学习工作无微不至的关怀，使我终生难忘。三年来，李老师不仅向我传授从事科研的学问和方法，而且教给我做人的哲理，使我终生受益，在此，向李老师表示最诚挚的谢意。

本文的实验除了李老师的指导，还要感谢其它老师的支持，衷心感谢范广涵教授，梅霆教授，尹以安老师，何苗教授，章勇副教授，周天明副研究员，郑树文老师，宿世臣老师，在基础理论和材料测试方面给予的帮助。

感谢苏军师兄和曹健兴师兄的引导和帮助，感谢张康，陈献文，张辉，王鑫，张运炎，李锐，陈肇飞，黄园媛等同学在学习和生活上的帮助，感谢刘超师弟在论文修改中所作的大量工作，感谢王海龙，仵乐娟，杨孝东师弟对我工作的大力支持。感谢许毅钦，陈鑫，王幸福，赵壁君，童金辉师弟对本论文校正及修改所做的工作。感谢材料所这个大家庭中的各位同学！

还有非常感谢上面提到的国家自然科学基金，广东省科学技术项目以及广州市科学技术项目对本实验的基金支持！

最后，感谢多年来一直支持我鼓励我的父母，使我顺利完成学业，他们的爱是我一生的财富，也是我进取和图强的动力和源泉。

作者攻读学位期间发表的学术论文目录

- 1 **Lu Tai-ping**, Li Shu-ti^{*}, Zhang Kang, Liu Chao, Xiao Guo-wei, Zhou Yu-gang, Zheng Shu-wen, Yin Yi-an, Wu Le-juan, Wang Hai-long and Yang xiao-dong. Advantage of blue InGaN multiple quantum wells light-emitting diodes with p-AlInN electron blocking layer. Chinese Physics B. (accepted).
- 2 **Lu Tai-ping**, Li Shu-ti^{*}, Zhang Kang, Liu Chao, Xiao Guo-wei, Zhou Yu-gang, Zheng Shu-wen, Yin Yi-an, Wu Le-juan, Wang Hai-long and Yang xiao-dong. Simulation study of blue InGaN light-emitting diodes with dip-shaped quantum wells. Chinese Physics B. (accepted).
- 3 **Taiping Lu**, Shuti Li^{*}, Kang Zhang, Yian Yin, Chao Liu, Lejuan Wu, Hailong Wang, Xiaodong yang, Guowei Xiao, Yugang Zhou. Effect of the thickness of undoped GaN interlayer between multiple quantum wells and p-doped layer on performance of GaN light-emitting diodes. (submitted to Optics Express).
- 4 **Lu Tai-ping**, Li Shu-ti^{*}, Zhang Kang, Liu Chao, Xiao Guo-wei, Zhou Yu-gang, Zheng Shu-wen, Yin Yi-an, Wu Le-juan, Wang Hai-long and Yang xiao-dong. Simulation study of blue InGaN multiple quantum wells light-emitting diodes with p-type quantum barriers. (submitted to Chinese Physics Letters).

参加项目:

- 1、国家自然科学基金 项目名称“磷化镓为 p 型层的高亮度 GaN 基 LED 外延片设计与生长”，项目编号：50602018，2007.01-2009.12
- 2、广州市科技攻关重大项目 项目名称“高效大功率 LED 图形衬底外延生长和芯片技术开发及产业化”，项目编号：2010U1-D00191，2010.10-2011.12
- 3、广东省科技厅省部产学研结合项目 项目名称“图形衬底 GaN 基 LED 外延及芯片关键技术”，项目编号：2010B090400456，2010.10-2012.10
- 4、广东省战略性新兴产业专项资金 LED 产业项目 项目名称“基于硅集成的照明用倒装焊大功率 LED 芯片、高压芯片及相关产品的产业化”，2011.01-2012.12