

# 不同掺杂类型的 GaN 间隔层和量子阱垒层 对双波长 LED 作用的研究\*

张运炎 范广涵<sup>†</sup>

(华南师范大学光电子材料与技术研究所, 广州 510631)

(2010年3月14日收到; 2010年5月4日收到修改稿)

采用软件理论分析的方法对不同掺杂类型的 GaN 间隔层和量子阱垒层在 InGaN/GaN 多量子阱双波长发光二极管中对发光光强、内量子效率、电子空穴浓度分布、溢出电流等作用进行模拟分析. 分析结果表明, p 型掺杂的 GaN 间隔层与量子阱垒层的引入同不掺杂和 n 型掺杂两种类型比较, 可以大大减少溢出电子流, 极大地提高各量子阱内空穴浓度, 提高双波长发光二极管的发光强度, 极大的改善内量子效率随电流增大而下降问题.

**关键词:** GaN, 掺杂类型, 数值模拟, 双波长发光二极管

**PACS:** 85.60.Jb, 85.50.-n, 87.15.A-, 78.60.Fi

## 1. 引言

近年来, 随着 LED 技术的不断进步, LED 在发光效率、使用寿命以及成本控制等方面都取得了长足进展. 随着生产运用的需要, 科研人员正把目光注意到多波长发光二极管芯片的研制上来. 多波长发光二极管, 也就是在同一个芯片上能够同时发多种波长. 较我们现在所用的色光组合法: 用多个封装好的发不同波长光的 LED 组合出我们所需要的色光, 多波长 LED 芯片有其独特的优点, 吸引着众人的目光. 它可以减少生产成本, 特别是芯片制造成本和封装成本. 同时它的体积较小, 有利于提高集成度. 多波长发光二极管有一个重要用途, 就是大功率白光发光二极管的制作. 目前市场上主流的大功率白光 LED 主要是以 GaN 蓝光芯片激发发射黄光的荧光粉获得白光. 尽管该类 LED 在发光效率方面不断提升, 但其在显色指数指标上的不足, 阻碍了其在普通照明领域的应用和推广. 并且由于荧光粉的无辐射复合使得 LED 效率下降, 转化效率低, 同时老化实验表明, 荧光粉的劣化是 LED 寿命缩短的一大原因<sup>[1]</sup>. 因而科研人员致力于研发无荧

光粉的单芯片半导体白光 LED<sup>[2-9]</sup>, 调整芯片光谱, 让它直接发出的各种波长的光组合成白光, 因而多波长 LED 芯片就是一种最佳选择, 这就可以避免使用荧光粉从而克服荧光粉的各种不足. 本文对双波长 LED 的发光机理进行软件模拟研究, 并深入讨论了不同掺杂类型的 GaN 间隔层和量子阱垒层对双波长 LED 发光光强、内量子效率、电子空穴浓度分布等的影响, 对白光 LED 的制作具有指导作用.

## 2. 理论模型和器件结构

### 2.1. 器件模拟的基本方程

APSYS (advanced physical models of semiconductor devices)<sup>[10]</sup> 模拟软件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

$$\begin{aligned} & \nabla \cdot J_n - \sum_j R_n^j - R_{sp} - R_{st} - R_{au} + G_{opt}(t) \\ &= \frac{\partial n}{\partial t} + N_D \frac{\partial f_D}{\partial t}, \end{aligned} \quad (1)$$

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

\* 2009 年省部产学研结合引导项目 (批准号: 2009B090300338), 粤港关键领域重点突破项目 (批准号: 2007A010501008) 和教育部博士点基金项目 (批准号: 350163) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: gfan@snu.edu.cn

为基础, 结合边界条件自洽解泊松方程

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

得到 LED 器件电学与光学特性. (1)和(2)式中  $J_n = n\mu_n \nabla E_m$ ,  $J_p = p\mu_p \nabla E_{fp}$  分别是电子流与空穴流密度 (其中  $\mu$  为迁移率,  $E_f$  为准费米能级),  $R_p^j$  代表通过边界上第  $j$  个能极时, 每个单位体积的空穴结合率,  $R_{sp}$  代表自发辐射复合速率,  $R_{st}$  代表受激辐射复合速率,  $R_{au} = (C_n n + C_p p)(np - n_i^2)$  代表俄歇复合速率 ( $C_n, C_p$  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),  $G_{opt}(t)$  代表光产生率. (3)式中  $\nabla V$  为电场,  $\epsilon_{dc}$  为相对介电常数,  $n, p$  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;  $N_{vj}$  为第  $j$  个 SHR 深能级陷阱的密度;  $f_{vj}$  为电子占据第  $j$  个深能级陷阱的概率,  $\delta$  为 1 代表施主, 为 0 代表受主.

载流子的传输机理包含了电子和空穴在元件内部的漂移和扩散. 同时还考虑了载流子的自发辐射复合和缺陷所造成的 SRH 非辐射复合. 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<sup>[11]</sup> 和有效质量近似模型<sup>[12]</sup>. InGaN 与 AlGaIn 的能带间隙可用下列方程式表示:

$$E_g(A_{1-x}B_x) = (1-x)E_g(A) + xE_g(B) - x(1-x)C, \quad (4)$$

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

在氮化物元件各层交接面中, 考虑了内建极化效应机理<sup>[13-15]</sup>. 在模拟中, 三元氮化物材料极化效应公式如下.

自发极化为

$$P_{sp}(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = -0.0413x - 0.0339(1-x) + 0.0378x(1-x), \quad (5)$$

$$P_{sp}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = -0.0898x - 0.0339(1-x) + 0.0191x(1-x), \quad (6)$$

其单位为  $\text{C}/\text{m}^2$ .

压电极化为

$$P_{pz}(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = xP_{pz}(\text{InN}) + (1-x)P_{pz}(\text{GaN}), \quad (7)$$

$$P_{pz}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = xP_{pz}(\text{AlN}) + (1-x)P_{pz}(\text{GaN}), \quad (8)$$

其中

$$P_{pz}(\text{InN}) = -1.373\epsilon + 9.541\epsilon^2, \quad (9)$$

$$P_{pz}(\text{GaN}) = -0.918\epsilon + 9.541\epsilon^2, \quad (10)$$

$$P_{pz}(\text{AlN}) = -1.808\epsilon + 5.642\epsilon^2, \quad \epsilon < 0, \quad (11)$$

$$P_{pz}(\text{AlN}) = -1.808\epsilon - 7.888\epsilon^2, \quad \epsilon > 0, \quad (12)$$

$\epsilon$  为薄膜结构与基板间的应变, 计算如下:

$$\epsilon = (a_{\text{sub}} - a)/a, \quad (13)$$

$a_{\text{sub}}$  为基板晶格常数,  $a$  为氮化物薄膜晶格常数.

以上方程按照有限元方法在空间离散后形成非线性方程组, 然后用求解非线性方程组的方法, 如牛顿法进行迭代求解. 本文采用 crosslight 公司的半导体器件模拟专用软件 Apsys 进行数值计算, 该软件具有数值稳定和计算速度高的特点.

## 2.2. 器件结构

本文研究了 InGaIn 量子阱结构的发光二极管, 其中器件面积为  $300 \mu\text{m} \times 300 \mu\text{m}$ , 器件结构如表 1 所示, 从下到上依次为  $3 \mu\text{m}$  GaN (n 型掺杂浓度为  $5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ ); 活性层 (1); 间隔层 (n 或 p 型掺杂浓度均为  $3 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ ); 活性层 (2);  $0.03 \mu\text{m}$  的 p-Al<sub>0.07</sub>Ga<sub>0.93</sub>N (p 型掺杂浓度为  $3 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ ) 电子阻挡层;  $0.15 \mu\text{m}$  p-GaN (p 型掺杂浓度为  $7 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ ). 每个活性层包括两个量子阱层及它们的垒层, 本文选取的两种活性层分别以 In<sub>0.11</sub>Ga<sub>0.89</sub>N 和 In<sub>0.18</sub>Ga<sub>0.82</sub>N 为阱层材料, 厚度均为  $2.2 \text{nm}$ , 两种量子阱结构的垒层为 GaN, 为 n, p 型掺杂或者不掺杂, 具体见以下讨论分类, 掺杂浓度均为  $3 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$  厚度均为  $15 \text{nm}$ . 具体结构如上表中所示.

表 1 器件结构表

p-GaN, $0.15 \mu\text{m}$ , $7 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$
p-Al <sub>0.07</sub> Ga <sub>0.93</sub> N, $0.03 \mu\text{m}$ , $3 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$
活性层 (2) In <sub>0.18</sub> Ga <sub>0.82</sub> N/GaN
间隔层, $17 \text{nm}$
活性层 (1) In <sub>0.11</sub> Ga <sub>0.89</sub> N/GaN
n-GaN, $3 \mu\text{m}$ , $5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$

在本文中, 针对间隔层及量子阱垒层进行了数种设计, 器件设计工作温度为  $300 \text{K}$ . 活性层 (1) 是 In<sub>0.11</sub>Ga<sub>0.89</sub>N/GaN, 活性层 (2) 是 In<sub>0.18</sub>Ga<sub>0.82</sub>N/GaN. 这里讨论了不同掺杂类型的间隔层及量子阱垒层对 LED 产生的影响.

### 3. 结果与讨论

虽然电子浓度,发光强度以及复合率等会随电流大小而变化,但是根据计算,间隔层及量子阱垒层对载流子的一系列作用,在其他大小的电流下与在 20 mA 电流下大体趋势相同,所以我们选取了 20 mA 作为代表,并结合内量子效率随电流的变化进行补充说明论证. 如果没有额外说明,芯片的电子空穴浓度分布图、载流子复合率位置分布图和自发发射谱图均是在 20 mA 驱动电流时得到的结果.

#### 3.1. 间隔层及量子阱垒层均不掺杂

从图 1 中可以看出,两种阱中的电子因为迁移率较大所以浓度大体相等,但是空穴迁移率较小所以不同阱的空穴浓度却相差较大,  $\text{In}_{0.11}\text{Ga}_{0.89}\text{N}$  阱中空穴浓度比  $\text{In}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{N}$  阱中空穴浓度小了近两个数量级. 空穴浓度分布差异导致了图 2 现象,从图 2 中可以看出,  $\text{In}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{N}$  阱中两个量子阱的空穴浓度很高,所以复合率均很大,但是  $\text{In}_{0.11}\text{Ga}_{0.89}\text{N}$  阱中的空穴浓度较小所以复合率相对  $\text{In}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{N}$  阱却小得非常多. 从图 3 也可以看出,  $\text{In}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{N}$  阱所发出波长为 0.46  $\mu\text{m}$  的光的发光峰,远远高于  $\text{In}_{0.11}\text{Ga}_{0.89}\text{N}$  阱所发出的波长为 0.41  $\mu\text{m}$  的光的发光峰.

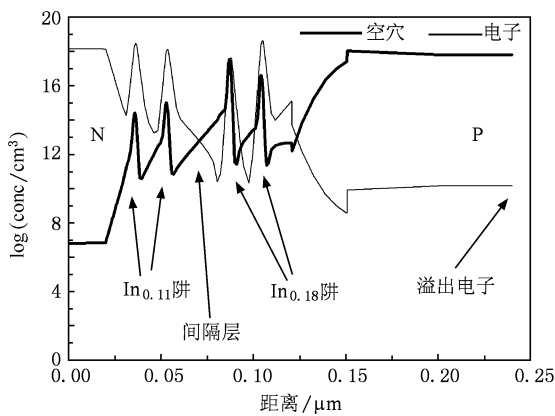


图 1 芯片电子空穴浓度分布图(不掺杂)

图 4 是芯片内量子效率随电流变化图,从图 4 中可以看出,随着电流的增大,内量子效率下降明显,从图 1 右下方的细线可以看出,当间隔层及量子阱垒层均不掺杂时的 LED,具有相当大的溢出电流. 这在很大程度上导致了内量子效率随电流增大而下降的问题. 从接下来的几种器件分析中可以证

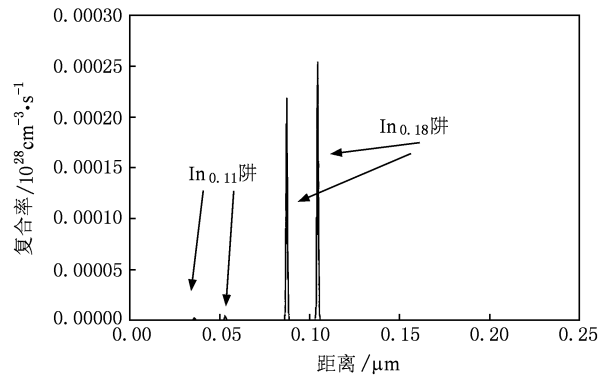


图 2 芯片载流子复合率位置分布图(不掺杂)

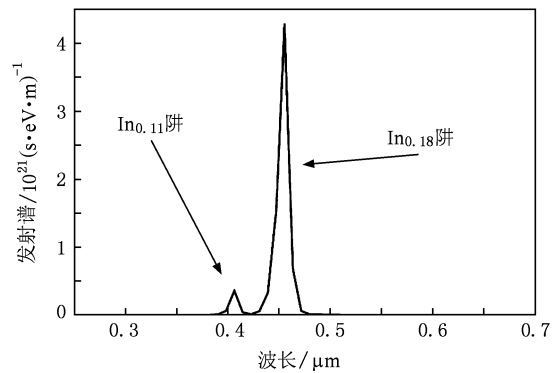


图 3 芯片自发发射谱图(不掺杂)

明这一点.

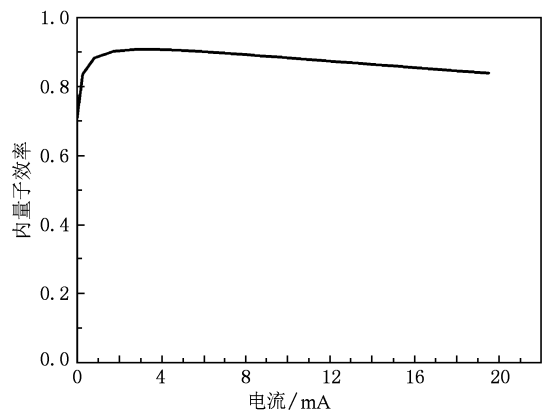


图 4 芯片内量子效率随电流变化图(不掺杂)

#### 3.2. 间隔层及量子阱垒层均为 n 型掺杂(掺杂浓度 $3 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ )

从图 5 对比图 1 可以看出,随着 n 型掺杂间隔层及量子阱垒层的引入,减小了电子势垒增强了电子的流动性,四个量子阱中的电子浓度大小变得几

乎一样. 但是由于 n 型间隔层及量子阱垒层对空穴的阻挡作用使四个阱中的空穴浓度都有不同程度的减小. 其中越是远离 P 极, 也即远离空穴源量子阱, 其阱中的空穴浓度就下降得越是严重,  $\text{In}_{0.11}\text{Ga}_{0.89}\text{N}$  阱中的空穴浓度下降了四个数量级. 所以从这里可以看出, n 型 GaN 间隔层及量子阱垒层, 对减小电子势垒增强电子的迁移和阻碍空穴的流动有相当大的作用.

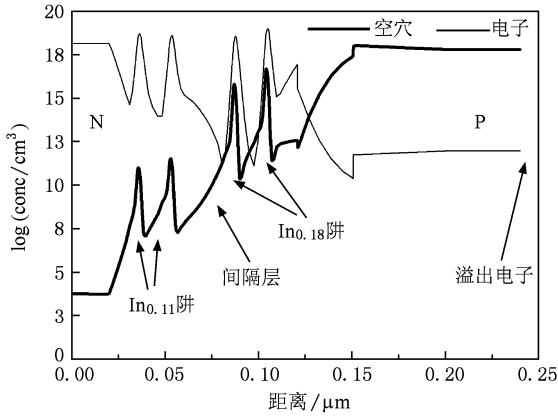


图5 芯片电子空穴浓度分布图(n 掺杂)

从图6相比图3可以看出, 不仅  $\text{In}_{0.11}\text{Ga}_{0.89}\text{N}$  阱所发出的波长为  $0.41 \mu\text{m}$  的光的发光峰消失, 就连  $\text{In}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{N}$  阱所发出波长为  $0.46 \mu\text{m}$  的光的发光峰也有很大的减小. 这是由于空穴浓度的减小, 导致复合率降低, 从而引起发光强度下降.

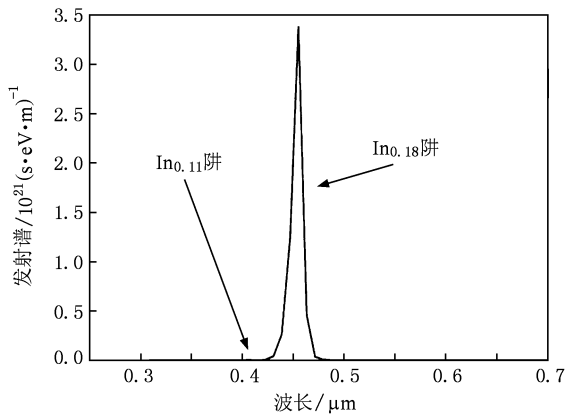


图6 芯片自发射谱图(n 掺杂)

从图7可以看出, 当间隔层及量子阱垒层均为 n 型掺杂时的 LED 芯片, 其内量子效率随电流减小得非常迅速, 对比图4, 这种下降就更加明显. 对比图5与图1从它们的右侧代表电子浓度的细实线可

以看出, 当间隔层及量子阱垒层均为 n 型掺杂时的 LED 芯片的溢出电流比当间隔层及量子阱垒层均不掺杂时的 LED 芯片的溢出电流大了两个数量级. 可见, 当间隔层及量子阱垒层均为 n 型掺杂时提高了电子的流动性, 但是也使得电子更容易流出, 形成溢出电流.

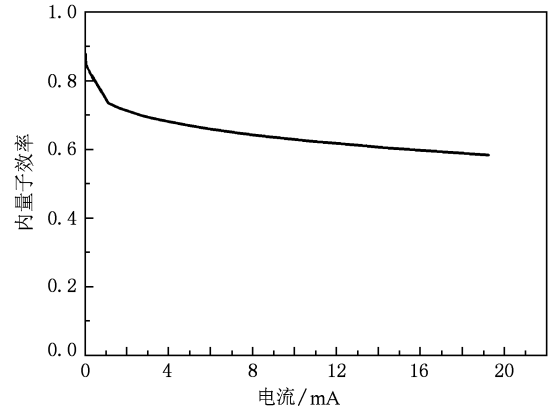


图7 芯片内量子效率随电流变化图(n 掺杂)

### 3.3. 间隔层及量子阱垒层均为 p 型掺杂 (掺杂浓度 $3 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ )

从图8对比图1与图5中可以看出, 对间隔层及量子阱垒层进行 p 型掺杂后, 由于 p 型掺杂能减小空穴势垒大大增强空穴的流动性, 所以四个量子阱中的空穴浓度都大幅度增加, 增幅达几个数量级. 虽然间隔层及量子阱垒层进行 p 型掺杂后电子势垒增大了, 不利于电子的扩散流动, 但是对于迁移率较高的电子来说影响并不是很大, 其浓度只略有下降.

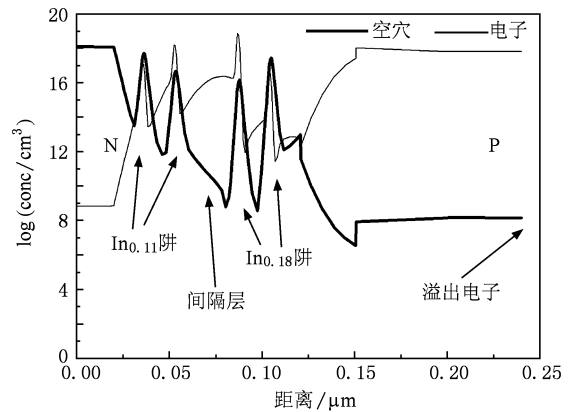


图8 芯片电子空穴浓度分布图(p 掺杂)

从图9对比图2可以看出, 四个阱中的电子空

穴分布使得四个阱中的复合率都相对比较均衡,两种阱的复合率相差不大. 再从图 10 中可以看出,  $\text{In}_{0.11}\text{Ga}_{0.89}\text{N}$  阱所发出的波长为  $0.41 \mu\text{m}$  的光的发光峰同  $\text{In}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{N}$  阱所发出波长为  $0.46 \mu\text{m}$  的光的发光峰的峰高齐平.

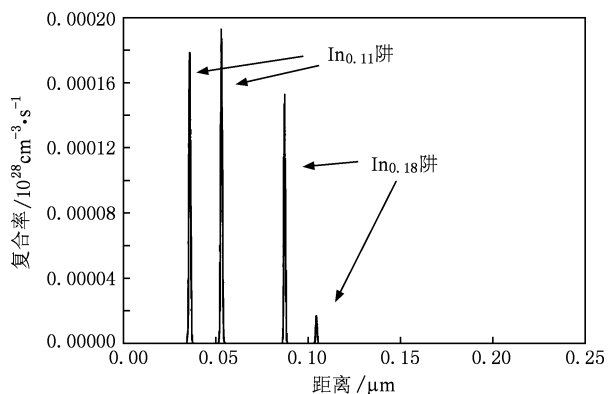


图9 芯片载流子复合率位置分布图(p掺杂)

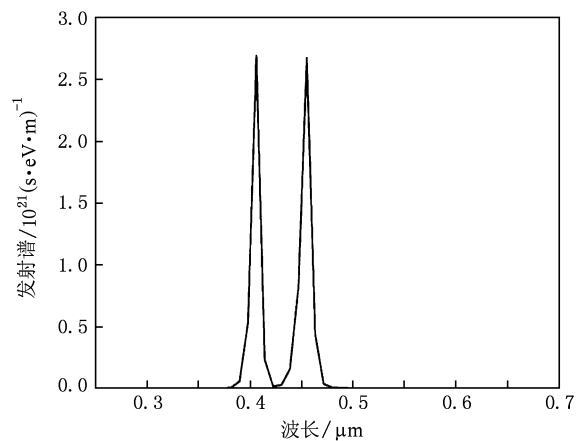


图10 芯片自发发射谱图(p掺杂)

从图 11 可以看出,芯片内量子效率随电流变下降非常缓慢,在 20 mA 时几乎没有下降迹象,内量子效率高达 95%,到达 80 mA 时尚且还有 85% 的内

量子效率. 而图 4 与图 7 中,在 20 mA 时,芯片内量子效率已经下降十分明显. 从图 8 右侧代表电子浓度的粗实线可以看出,溢出电流下降十分明显,对比图 1 下降了两个数量级,对比图 5 下降了四个数量级. 这是因为间隔层及量子阱垒层均为 p 型掺杂时减小了空穴势垒增大了空穴浓度提高了载流子复合率,同时对电子的阻碍作用使得溢出电子流大大减小.

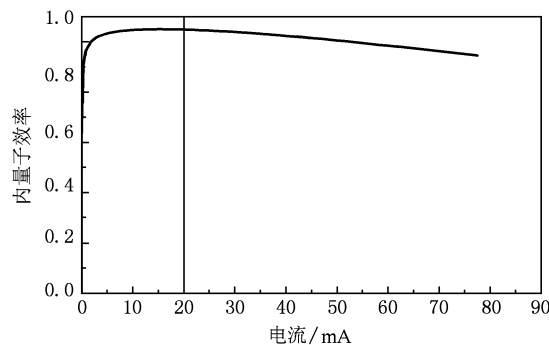


图11 芯片内量子效率随电流变化图(p掺杂)

## 4. 结 论

通过对比不掺杂间隔层量子阱垒层 LED、n 型掺杂间隔层量子垒阱层 LED 和 p 型掺杂间隔层量子阱层 LED 的电子空穴浓度分布图、自发发射谱图、载流子复合率位置分布图和内量子效率随电流变化图,可以看出,p 型掺杂间隔层量子垒阱层 LED 较其他两种类型的 LED 能大大提高量子阱中空穴浓度,极大地减小溢出电子流,增强并均衡各量子阱中的载流子复合率,增大内量子效率并且很大程度上改善了内量子效率随电流增大而下降的问题,增大了总的发光强度,提高了能量的有效利用率. 这对白光 LED 的制作具有重要的指导意义.

- [1] Zheng D S, Qian K Y, Luo Y 2005 *Semiconductor Optoelectronics* **26** 87
- [2] Shen G D, Zhang N G, Liu J P, Niu N H, Li T, Xing Y H, Lin Q M, Guo X 2007 *Semiconductor Optoelectronics* **28** 349
- [3] Yamada M, Narukawa Y, Mukai T 2002 *J. Appl. Phys.* **41** 246
- [4] Qi Y D, Liang H, Tang W, Lu Z D, Kei May Lau 2004 *Journal of Crystal Growth* **272** 333
- [5] Damilano B, Grandjean N, Pernot C, Massies J 2001 *J. Appl.*

*Phys.* **40** 918

- [6] Li Y L, Gessmann T H 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 2167
- [7] Yamada M, Narukawa Y, Mukai T 2002 *J. Appl. Phys.* **41** 246
- [8] Chen H S, Yeh D M, Lu C F 2006 *IEEE Photon. Technol. Lett.* **18** 1430
- [9] Ozden I, Makarona E, Nurmikko A V, Takeuchi T, Krames M 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 2532
- [10] Crosslight Software Inc <http://www.crosslight.com> [February

- 2,2010]
- [11] Chuang S L, Chang C S 1997 *Semicond. Sci. and Technol.* **12** 252
- [12] Chuang S L, Chang C S 1996 *Phys. Rev. B* **54** 2491
- [13] Goano M, Bellotti E, Ghillino E, Garetto C, Ghione G, Brennan K F 2000 *J. Appl. Phys.* **88** 6476
- [14] Bernardini F, Fiorentini V, Vanderbilt D 1997 *Phys. Rev. B* **56** 10024
- [15] Fiorentini V, Bernardini F, Ambacher O 2002 *App. Phys. Lett.* **80** 1204

## Theoretical study of GaN interval layers and quantum well barrier layers of different doping types in dual-wavelength LED\*

Zhang Yun-Yan Fan Guan-Han<sup>†</sup>

(*Institute of Opto-Electronic Materials and Technology, South China Normal University, Guangzhou 510631, China*)

(Received 14 March 2010; revised manuscript received 4 May 2010)

### Abstract

A 2D simulation of electrical and optical characteristics of dual-wavelength LED with GaN interval layers and quantum well barrier layers of different doping types was conducted with APSYS software. It showed that with the use of p-type doped GaN interval layer and quantum well barrier layers, we can greatly improve the hole concentration in QWs and reduce the electron overflow of the chip. We can also increase the luminous intensity and dramatically improve the dropping of internal quantum efficiency of the LED when the current increases.

**Keywords:** GaN, doping types, numerical simulation, dual-wavelength LED

**PACS:** 85.60.Jb, 85.50.-n, 87.15.A-, 78.60.Fi

\* Project supported by the Project of Combination of Production and Research Guided by Ministry in 2009 (Grant No. 2009B090300338), the Doctorate Foundation of the State Education Ministry of China (Grant No. 350163) and the Crucial Field and Key Breakthrough Project of Guangdong Province and Hongkong, China (Grant No. 2007A010501008).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: gfan@senu.edu.cn