

# InGaN/GaN 多量子阱蓝色发光二极管的 实验与模拟分析\*

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)

(2008 年 3 月 24 日收到, 2008 年 5 月 11 日收到修改稿)

分别采用量子阱模型和量子点模型对蓝色 InGaN/GaN 多量子阱发光二极管电学和光学特性进行模拟, 并和实验测量结果进行了比对. 结果发现, 量子点模型的引入, 很好地解决了  $I-V$  和电致发光二方面的实验与理论模型间符合程度不好的问题. 同时, 在  $I-V$  曲线特性模拟中发现, 在量子点理论模型的基础上, 只有考虑到载流子的非平衡量子传输效应, 才能得到和实验相接近的  $I-V$  曲线, 揭示着在 InGaN/GaN 多量子阱发光二极管电输运特性中, 载流子的非平衡量子传输效应扮演重要角色.

关键词: InGaN/GaN, 发光二极管, 数值模拟, 量子点模型

PACC: 7280E, 7860F, 7850G

## 1. 引 言

自从 1994 年 GaN 基蓝色发光二极管(LED)诞生以来, 以 GaN 为基础的半导体发光材料有了很大的进步. 虽然 GaN 基 LED 已经产业化, 但芯片出光效率低的问题仍没很好的解决. 由于衬底和外延膜的晶格不匹配导致 LED 内部存在大量的非辐射缺陷, 使得 GaN 基 LED 内部光电转换效率很低, 这大大限制了 GaN 基发光二极管的外量子效率和使用寿命. 如何提高其发光效率是目前研制大功率 GaN 基 LED 器件的重要课题之一. 尽管实验已证明 GaN 量子阱(QW)LED 的发光机理是载流子在 InGaN 量子点中的辐射复合发光<sup>[1-3]</sup>, 量子点是真正的发光中心, 直接决定着 LED 的发光波长和发光效率. 但是, 近年来针对 GaN 基 LED 的器件计算都是建立在量子阱模型的基础上进行的<sup>[4-6]</sup>, 还没能把 InGaN 量子点对 LED 光学和电学性能的影响考虑在模型中, 这就导致不能对 LED QW 器件进行有效真实的模拟. 本研究使用 APSYS(Advanced Physical Models of Semiconductor Devices)模拟软件将分别采用量子阱和量子点模型对蓝色 LED 的光学和电学特性进行

模拟分析, 并与实验结果进行比对. 结果发现, 量子点模型的引入, 很好地解决了  $I-V$  和 EL 二方面的实验与理论模型间符合程度不好的问题. 而在  $I-V$  曲线特性模拟中也发现, 在量子点理论模型的基础上, 只有考虑到载流子的非平衡量子传输效应, 才能得到和实验相接近的  $I-V$  曲线, 揭示着在 InGaN/GaN 多量子阱发光二极管电输运特征里, 载流子的非平衡量子传输效应扮演重要角色.

## 2. 实 验

实验所使用的样品为蓝宝石公司采用金属有机化学气相沉积(MOCVD)方法在蓝宝石(0001)衬底上生长的 InGaN/GaN 多量子阱(MQW)LED, 其生长条件与文献[7]所述相同. LED 器件结构由下至上, 依次包括: 100  $\mu\text{m}$  蓝宝石衬底, 1.0  $\mu\text{m}$  GaN 缓冲层, 2.5  $\mu\text{m}$  n-GaN(Si), 6 个周期的  $\text{In}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{N}$ (3 nm)/GaN(12 nm)量子阱激活层, 30 nm p- $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ , 最后为 200 nm 的 p-GaN(Mg)覆盖层, n 型和 p 型导电层的掺杂浓度分别约为  $3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  和  $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , 器件构型为 300  $\mu\text{m} \times 300 \mu\text{m}$  的正方形. EL 光谱采用

\* 国家自然科学基金(批准号: 10474020)和上海市基础研究重大项目(批准号: 06dj14008)资助的课题.

† E-mail: jwli@issp.ac.cn

‡ E-mail: bozhang@mail.sitp.ac.cn

Jobin-Yvon LabRam-INFINITY 显微拉曼-荧光光谱仪测量,探测器为液氮冷却下的 Si CCD 探测器,恒流源为 236 源表(Keithley),所有测量都在室温下进行.模拟中器件模型的建立也是在实验器件结构的基础上进行搭建的.

### 3. 理论模型

#### 3.1. 器件模拟的基本方程

APSYS 模拟软件是利用二维有限元的分析方法,以漂移-扩散模型

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

和电流连续方程

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

$$\begin{aligned} \nabla \cdot J_p + \sum_j R_p^j + R_{sp} + R_{st} + R_{au} - G_{opt}(t) \\ = -\frac{\partial p}{\partial t} + N_A \frac{\partial f_A}{\partial t} \end{aligned} \quad (3)$$

为基础,通过自洽解泊松方程<sup>[8]</sup>得到 LED 器件电学与光学特性.(1)式中  $f_D, f_A$  分别为电子占据施主和空穴占据受主杂质的概率; $N_j$  为第  $j$  个 SHR 深能级陷阱的密度; $f_{ij}$  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.(2)和(3)式中  $R_p^j, R_{sp}, R_{st}, R_{au}, G_{opt}(t)$  分别代表第  $j$  个 SRH 深能级陷阱复合速率,自发辐射复合速率,受激辐射复合速率,俄歇复合速率和光产生率.

体系载流子密度  $J_n, J_p$  分别可表示为

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

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

其中  $\mu_n, \mu_p$  分别为电子和空穴的迁移率; $E_{fn}, E_{fp}$  分别为电子和空穴的准费米能级.

器件中的非辐射复合过程采用 SRH 复合和俄歇复合.SRH 复合速率表示为

$$R_n^j = c_{nj} n N_j (1 - f_{ij}) - c_{nj} n_{1j} N_j f_{ij}, \quad (6)$$

$$R_p^j = -c_{pj} p N_j f_{ij} - c_{pj} p_{1j} N_j (1 - f_{ij}). \quad (7)$$

俄歇复合速率为

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

在(6)和(7)式中, $c_{n_{ij}}$  为载流子俘获系数, $n_{ij}(p_{ij})$  为电子或空穴准费米能级与  $J$  陷阱中能级  $E_{ij}$  合并时的载流子浓度.(8)式中, $C_n, C_p$  为材料的俄歇系数.

#### 3.2. 量子点模型

##### 3.2.1. 量子点能级的计算

量子点模型是根据 Krestnikov 等人通过高分辨率透射显微镜(HRTEM)对 InGaN 量子阱区域所观察到<sup>[9]</sup> In 含量在量子点和量子阱界面呈梯度变化规律的基础上搭建的,为了考虑这种效应,假定 XRD 所测 In 含量就是包裹在量子点外面的量子阱的 In 含量.

本文主要考虑半径为  $r$ ,高度为  $H$  的圆柱状  $In_x Ga_{1-x} N$  量子点径向和  $Z$  方向上被带隙较宽的  $In_y Ga_{1-y} N$  阱层所包围( $y < x$ ) (见图 1).假设量子点之间的耦合作用可以忽略,在有效质量近似以及不考虑量子点内电子-电子之间的相互作用的情况下,量子点的能级结构可通过求解量子点体系的薛定谔方程得到.

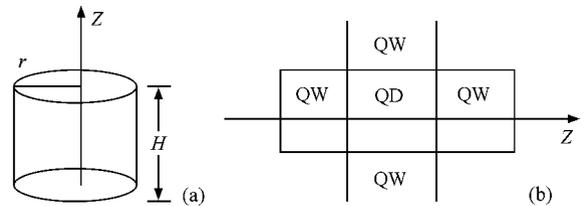


图 1 半径为  $r$  高度为  $H$  沿径方向柱状量子点示意图 (a) (b) 为圆柱状  $In_x Ga_{1-x} N$  量子点被带隙较宽的  $In_y Ga_{1-y} N$  量子阱所包围 ( $y < x$ )

量子点体系的薛定谔方程以柱坐标的方式可写成<sup>[11]</sup>

$$\begin{aligned} \left[ -\frac{1}{r^2} \left( r \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + r \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) - r \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_c(r, z) \right] \Psi(r, \theta, z) \\ = E \Psi(r, \theta, z), \end{aligned} \quad (9)$$

其中,量子点和阱层内, $V_c(r, z) = 0$ ,阻挡层中, $V_c(r, z)$  为量子点材料与势垒材料的导带能量差.按照绝热近似,量子点的波函数可写成

$\Psi(r, \theta, z) = (1/\sqrt{2\pi}) e^{im\theta} g_r(z) f_m(r)$ , (10)  $g_r(z)$  为随径向尺寸  $r$  变化的函数,波函数  $f_m(r)$  可由下式确定,其中  $m$  为角动量量子数:

$$\left[ -\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_0(r, z) \right] g_r(z) = E_0(r)g_r(z), \quad (11)$$

$$\left[ -\frac{1}{r^2} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial}{\partial r} - m^2 \right) + E_0(r) \right] f_m(r) = E f_m(r). \quad (12)$$

能量  $E_0(r)$  为电子在  $r$  处沿  $Z$  方向运动的能量,也是径向运动的限制势.为计算量子点的能级,将  $E_0(r)$  分为  $n$  份,使  $V(r) = v_i, s_i \leq r \leq s_{i+1}$ ,其中  $0 \leq i \leq n, s_0 = 0, s_{n+1} = \infty, s_i < s_{i+1}, v_i < v_{i+1}$ .波函数  $f_m(r)$  可表示为

$$f_m(r) = A_i F(k_i, r) + B_i G(k_i, r), s_i \leq r \leq s_{i+1}, \quad (13)$$

其中,  $k_i^2 = |E - v_i|$ ,  $E > v_i$  时,  $F, G$  分别为贝塞耳函数  $J_m, Y_m$ ;  $E < v_i$  时,  $F, G$  分别为贝塞耳函数  $K_m, I_m$ .根据波函数连续和界面光滑条件,按照转移矩阵的方法得到

$$\begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix} = \left( \prod_{i=1}^n \hat{T}_i \right) \begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix} = \hat{T} \begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix}. \quad (14)$$

利用原点处波函数有限  $B_0 = 0$  和无穷远处波函数为零  $A_n = 0$ ,通过总的传输矩阵元  $T_{21}(E) = 0$  可以得到一系列离散束缚能  $E$ ,通过这可以把量子点的束缚态嵌入量子阱能态里.

### 3.2.2. 非平衡量子传输模型

在传统的载流子准平衡传输模型下,达到平衡态的载流子满足准费米分布,进入( $J_{in}$ )和逃逸( $J_{out}$ )量子阱的载流子密度能够被热电子辐射模型描述.而在实际器件里,由于较小的量子阱或量子点尺寸,

和较深的限制势阱,部分载流子可直接越过或未达到准平衡态就从量子阱或量子点区域逃逸,为了把这些效应考虑进去,在传统的载流子准平衡传输模型的基础上,我们采用 Xia 等提出的一种半经典非平衡量子传输理论<sup>[10]</sup>,体系载流子密流速率在半经典平衡态传输模型和非平衡量子传输模型下分别表示为

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{n}{\tau_{interb}} + J_{in} - J_{out}, \quad (15)$$

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{n}{\tau_{interb}} + J_{in} - J_{out} - J_{fesc}, \quad (16)$$

其中,  $\tau_{interb}$  表示载流子带间复合寿命,  $J_{in}$  和  $J_{out}$  分别表示注入和流出量子阱的载流子密度,  $J_{fesc}$  表示载流子在未到达热平衡之前就逃逸出量子阱或量子点的载流子密度.量子点或量子阱体系的逃逸电流  $J_{fesc}$  可由下式计算:

$$J_{fesc} = F_{fesc} \times n_1 \times V_{fesc} / d,$$

式中,  $F_{fesc}$  为逃逸出量子阱和量子点的载流子密度比率,  $N_{n,q}$  为量子点或量子阱体系中载流子浓度,  $V_{fesc}$  为载流子的平均局域热离化速度,  $d$  为量子点或量子阱的厚度.在逃逸数值模拟中,作为拟合参数,本文设定逃逸出量子阱和量子点的载流子百分比都为 10%.

模拟中具体材料参数设置请见文献[7].模拟中也考虑到量子点尺寸效应对光谱的影响,建立量子点模型时,采用两种尺寸,具有相同 In 含量的量子点对 EL 光谱进行模拟,具体量子点特征参数设置见表 1.

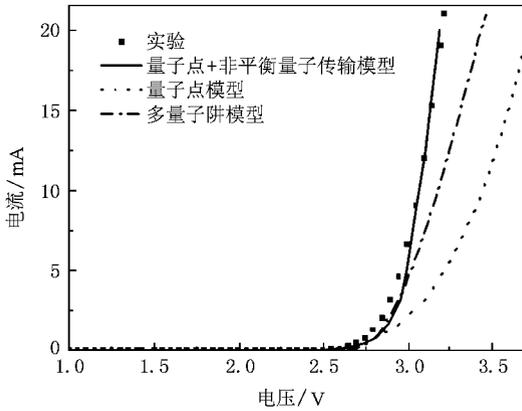
表 1 模拟中采用的 InGaN 量子点特征参数

	量子阱	量子点 1	量子点 2	文献
铟含量 In	0.12	0.5	0.5	[12]
高度 $H/\text{nm}$		1.5	1.5	[12]
直径 $D/\text{nm}$		4	3	[13]
非辐射符合寿命 $\tau/\text{ns}$	5	50	50	[14]
两种量子密度之比		1:10		估计
量子阱中包含量子点的密度 $N_{00}/\text{cm}^{-2}$		$2.5 \times 10^{11}$		[15]

## 4. 结果与讨论

图 2 给出了室温蓝色发光二极管的  $I-V$  特性实验曲线以及分别利用量子点模型和量子阱模型理论计算的  $I-V$  特性曲线.由图 2 可见,相对于量子阱模型理论得出的  $I-V$  特性曲线,利用量子点模型理论计算的  $I-V$  结果和实验结果基本重合.同时,在量子点模型理论计算的基础上我们也分析了体系载流子

非平衡量子传输特性的引进对器件  $I-V$  特性模拟结果的影响.结果发现,在考虑非平衡量子传输的情况下的  $I-V$  特性时,20 mA 电流注入下器件正向电压约为 3.2 V,和实验得出结果基本相同,而不考虑非平衡量子传输的情况下,20 mA 电流注入下器件正向电压约为 3.7 V,偏离实验值约为 0.5 V.类似的利用量子点模型对绿色发光二极管  $I-V$  特性的模拟结果已被报道<sup>[7]</sup>.结果发现,在考虑非平衡量子传输的情况下的  $I-V$  特性时,20 mA 电流注入下绿色发光二

图2 蓝色发光二极管的  $I-V$  特性曲线

极管正向电压约为 3.5 V, 接近实验值约 3.3 V, 而不考虑非平衡量子传输的情况下 20 mA 电流注入下器件正向电压约为 5 V, 偏离实验值约为 1.7 V. 造成实验和理论较大偏离原因可能是电子经过量子阱或量子点区域时, 由于较小的量子阱或量子点的尺寸和较深的限制势阱, 那些平均自由程大于量子阱或量子点尺寸的载流子可以直接从量子阱或量子点区域进行逃逸, 也存在部分进入量子阱或量子点区域内的载流子未达到准平衡态就从量子阱或量子点区域中逃逸出来. 量子阱或量子点尺寸越小, 限制势阱越深, 电子需要经过越多的碰撞才能达到准平衡态, 从而它也有越多的机会通过量子隧穿或电子之间的散射获得足够的能量逃逸出量子阱或量子点区域. Martin 等人在实验中也发现<sup>[16]</sup>, InGaN/GaN MQW LED 的发光效应随着注入电流的增大会显著降低, 表明其中有很大的溢出电流, 但根据传统的载流子准平衡态传输模型, 当注入电流流过量子阱或量子点时, 载流子会被晶格离化, 并经过散射达到准平衡态, 并满足准费米分布. 但根据准费米能级计算得到的溢出电流非常小, 说明传统的载流子准平衡传输模型不能有效解释 GaN 基 LED 中的电流溢出效应. 而在我们的实验中, 在量子点理论模型的基础上, 只有考虑到载流子的非平衡量子传输效应, 才能得到和实验相接近的  $I-V$  曲线, 这也暗示着在 InGaN/GaN 多量子阱发光二极管  $I-V$  特征里, 载流子的非平衡量子传输效应扮演重要角色. 在后面的利用量子点模型理论模拟中我们都把载流子非平衡量子传输特性信息考虑进去.

图 3 显示了在室温 20 mA 电流注入下蓝色发光二极管电致发光光谱的实验和数值模拟的结果. 比较结果发现, 采用量子点模型计算的 EL 峰位以及

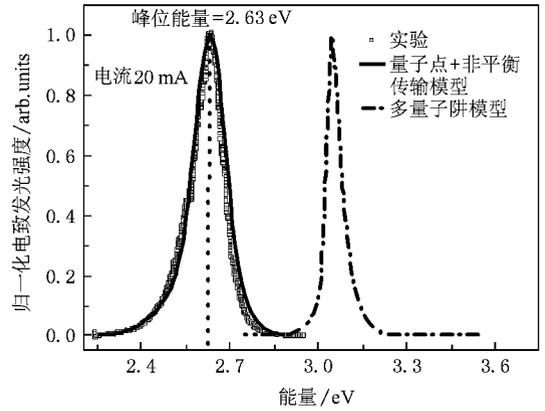
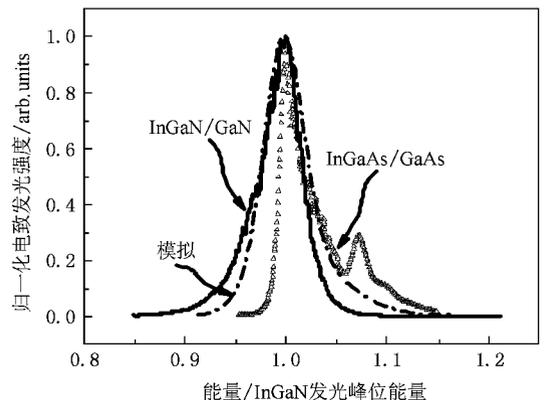


图3 注入电流为 20 mA 下不同模型下蓝色发光二极管的电致发光光谱

发光光谱的半高宽值和实验基本符合. 而在相同条件下单纯采用量子阱模型模拟的自发辐射发光峰位 (3.05 eV) 远远偏离实验值 (2.63 eV). 在电致发光光谱谱线形上我们也发现量子阱电致发光光谱线形和量子点发光光谱线形上存在明显不同. 图 4 给出了典型的 InGaAs/GaAs 量子阱电致发光光谱曲线和含量子点 InGaN/GaN 电致发光光谱曲线. 图中可以明显看出, InGaAs/GaAs 纯量子阱电致发光光谱谱线上主波长高能边出现了增益谱非对称展宽, 而含量子点 InGaN/GaN 电致发光光谱谱线上峰值波长低能边出现增益谱非对称展宽. 造成 InGaN/GaN 增益谱非对称展宽的原因是在 InGaN/GaN MQW LED 中, 由于 InN 和 GaN 存在相分离, 这种相分离导致体系内富 In 类量子点的存在, 量子点大小分布造成的量子点态非均匀展宽引起 InGaN/GaN 电致发光光谱曲线峰值波长低能边出现了增益谱非对称展宽. 我们利

图4 量子阱 InGaAs/GaAs 电致发光光谱和量子点 InGaN/GaN 电致发光光谱 (其中,  $E_0$  为 InGaN/GaN 电致发光光谱峰位所对应的能量)

用量子点模型在考虑载流子非平衡传输特性基础上得出的 EL 光谱线形与实验 EL 光谱线形基本符合. 这进一步表明 InGaN/GaN QW LED 中, 富 In 类量子点结构主导着 InGaN 基 LED 发光波长, 体现了 InGaN 基 LED 量子点发光而不是量子阱发光的本质.

## 5. 结 论

本文分别采用量子阱模型和量子点模型对蓝色

InGaN/GaN MQW LED 进行模拟, 并和实验测量结果进行了比对. 结果发现, 量子点模型的引入, 很好地解决了  $I-V$  和 EL 两方面的实验与理论模型间符合程度不好的问题. 而在  $I-V$  曲线特性模拟中也发现, 在量子点理论模型的基础上, 只有考虑到载流子的非平衡量子传输效应, 才能得到和实验相接近的  $I-V$  曲线. 揭示着在 InGaN/GaN 多量子阱发光二极管电输运特征里, 载流子的非平衡量子传输效应扮演重要角色.

- 
- [ 1 ] O'Donnell K P, Martin R W, Middleton P G 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 237
- [ 2 ] Yang H C, Kuo P F, Lin T Y, Chen Y F, Chen K H, Chen L C, Chyi J I 2000 *Appl. Phys. Lett.* **76** 3712
- [ 3 ] Chang H J, Chen C H, Chen Y F, Lin T Y, Chen L C, Chen K H, Lan Z H 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 021911
- [ 4 ] Pong B J, Chen C H, Yen S H, Hsu J F, Tun C J, Kuo Y K, Kuo C H, Chi G C 2007 *Solid-State Electronic* **50** 1588
- [ 5 ] Lin Y J, Chu Y L 2006 *Semiconductor Science and Technology* **21** (8) 1172
- [ 6 ] Gu X L, Guo X, Wu D, Xu L H, Liang T, Guo J, Shen G D 2008 *Acta Phys. Sin.* **56** 4977 [ 顾晓玲、郭霞、吴迪、徐丽华、梁庭、郭晶、沈光地 2007 物理学报 **56** 4977 ]
- [ 7 ] Zhang G Y, Yang Z J, Tong Y Z, Qin Z X, Hu X D, Chen Z Z, Ding X M, Lu M, Li Z H, Yu T J, Zhang L, Gan Z Z, Zhao Y, Yang C F 2003 *Optical Materials* **23** 183
- [ 8 ] APSYS User's Manual 2005 <http://www.crosslight.com>
- [ 9 ] Krestnikov I L, Ledentsov N N, Hoffmann A, Bimberg D, Sakharov A V, Lundin W V, Tsatsul'nikov A F, SUsikov A, Alferov Z I, Musikhin Y G, Gerthsen D 2002 *Phys. Rev. B* **66** 155310
- [ 10 ] Xia C S, Hu W D, Wang C, Li Z F, Chen X S, Lu W, Li Z M, Li Z Q 2006 *Optical and Quantum Electronics* **38** 1077
- [ 11 ] Wojs A, Hawrylak P, Fafard S, Jacak L 1996 *Phys. Rev. B* **54** 5604
- [ 12 ] Shim H W, Choi R J, Jeong S M, Le Van Vinh, Hong C H, Suh E K, Lee H J, Kim Y W, Hwang Y G 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 3552
- [ 13 ] Park I K, Kwon M K, Kim J O, Seo S B, Kim J Y, Lim J H, Park S J 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 133105
- [ 14 ] Okamoto K, Saijo S, Kawakami Y, Fujita S G, Terazima M, Mukai T, Shinmiya G, Nakamura S 2001 *Proc. SPIE* **4278** 150
- [ 15 ] Musikhin Y G, Gerthsen D, Bedarev D A, Bert N A, Lundin W V, Tsatsulnikov A F, Sakharov A V, Usikov A S, Alferov Z I, Krestnikov I L, Ledentsov N N, Hoffmann A, Bimberg D 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 2099
- [ 16 ] Martin G, Botchkarev A, Rockett A, Morkoc H 1996 *Appl. Phys. Lett.* **58** 2541

# Experimental and theoretical study of blue InGaN/GaN multiple quantum well blue light-emitting diodes<sup>\*</sup>

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 Science, Shanghai 200083, China)

2) (Department of Electronic Engineering, East China Normal University, Shanghai 200062, China)

(Received 24 March 2008; revised manuscript received 11 May 2008)

## Abstract

A 2D simulation of electrical and optical characteristics of InGaN/GaN multiple quantum well blue light-emitting diodes by APSYS software with a dot-well model and well model are investigated. It shows that  $I$ - $V$  and electrical luminescence simulation results based on the quantum dot model are in better agreement with the experimental data than that based purely on quantum well model. Moreover, simulation result also suggest that the non-equilibrium quantum transport plays an important role in the InGaN/GaN multiple quantum well light-emitting diodes.

**Keywords** : InGaN/GaN, light-emitting diode, numerical simulation, quantum dot model

**PACC** : 7280E, 7860F, 7850G

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10474020) and the Shanghai Municipal Commission of Science and Technology (Grant No. 06dj14008).

<sup>†</sup> E-mail: jwli@issp.ac.cn

<sup>‡</sup> E-mail: bozhang@mail.sitp.ac.cn