

# AlGa<sub>N</sub> 基深紫外 LED 电子阻挡层的智能优化设计\*

冯丽雅<sup>1)</sup> 路慧敏<sup>1)†</sup> 朱一帆<sup>1)</sup> 陈毅勇<sup>2)</sup> 于彤军<sup>2)</sup> 王建萍<sup>1)</sup>

1) (北京科技大学计算机与通信工程学院, 北京 100083)

2) (北京大学物理学院, 人工微结构物理和介观物理国家重点实验室, 北京 100081)

(2022 年 10 月 20 日收到; 2022 年 12 月 12 日收到修改稿)

为了提高 AlGa<sub>N</sub> 基深紫外发光二极管 (light emitting diode, LED) 的内量子效率 (internal quantum efficiency, IQE), 本文采用了基于 InAlGa<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub> 超晶格的电子阻挡层 (electron blocking layer, EBL) 结构, 结果表明与传统的单层和双层电子阻挡层结构相比, 超晶格 EBL 结构能够有效提高 LED 的内量子效率. 在此基础上, 本文提出了基于 JAYA 智能算法的 LED 结构优化方法, 应用该方法以最大化内量子效率为目标, 对 InAlGa<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub> 超晶格 EBL 结构进行优化设计. 结果表明, 采用优化超晶格 EBL 结构后电子泄露和空穴注入问题都有所改善, 在 200 mA 电流注入时深紫外 LED 的内量子效率比采用单层结构 EBL 提高了 41.2%.

**关键词:** 深紫外 LED, 内量子效率, 智能优化算法, 电子泄漏

**PACS:** 85.60.Jb

**DOI:** 10.7498/aps.72.20222004

## 1 引言

随着半导体材料研究的深入及技术的成熟, 半导体发光器件在深紫外波段的应用不断拓宽. 基于 AlGa<sub>N</sub> 材料的深紫外 (deep ultraviolet, DUV) 发光二极管 (light emitting diode, LED) 广泛应用于杀菌消毒、传感、水质净化、医学治疗以及非视距通信等诸多领域<sup>[1-3]</sup>. 特别是在全球新型冠状病毒 (COVID-19) 肆虐的当下, 研究人员已经证明, 波长在 280 nm 以下 (UVC) 的深紫外光可以在几秒钟内有效灭活 COVID-19<sup>[4-7]</sup>, 因而也受到了极大的关注和重视. 然而, 尽管材料和器件制备技术不断提升, 与成熟的 InGa<sub>N</sub> 基可见光 LED 相比, AlGa<sub>N</sub> 基深紫外 LED 的广泛应用仍存在许多需要克服的困难, 特别是外量子效率 (external quan-

tum efficiency, EQE) 明显偏低带来的辐射功率过小的问题. 因此, 深紫外 LED 效率提升方法的研究对其在各领域应用前景具有至关重要的作用, 近年来受到了广泛的关注.

AlGa<sub>N</sub> 基深紫外 LED 的外量子效率提升可以通过内量子效率 (internal quantum efficiency, IQE) 和光提取效率 (light extraction efficiency, LEE) 改善来实现, 其中内量子效率取决于载流子有效注入到有源区以及在有源区产生辐射复合的情况. 除了提高 LED 外延质量外, 可以通过在有源区和 P 型区之间增设电子阻挡层 (electron blocking layer, EBL) 改善载流子注入情况提升内量子效率. 具体来说, 在提高电子注入效率方面, 可通过对 EBL 结构的设计, 增大其对电子向 P 型区运输时的阻挡作用, 以此来抑制电子泄漏. 2010 年, Hirayama 等<sup>[8]</sup> 报道了多量子势垒 (multiple

\* 国家自然科学基金 (批准号: 62234003)、广东省基础与应用基础研究基金 (批准号: 2021B1515120086) 和佛山市人民政府科技创新专项资金 (批准号: BK20BF013) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: hmlu@ustb.edu.cn

quantum barrier, MQB)EBL 的使用, 通过与传统的单层的 EBL 结构对比分析可知, 增强的 EBL 有效势垒高度抑制了电子泄漏. 在提高空穴注入效率方面, 一些学者尝试修改有源区最后一层量子垒的材料为 InAlGa<sub>N</sub>, 通过设定合理的 In 组分, 与原有的 EBL 共同组成了双层的 InAlGa<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub> 结构, 从而提高空穴运输 [9,10]. 此外, 国内外的学者们也提出了一些新的改进方法, 有部分学者提出梯度 EBL 结构, 通过梯度的设定 EBL 中的 Al 组分, 形成渐变的空穴储层, 有效的调控电子泄漏势垒 [11,12]; 在此基础上, 更有学者提出梯度超晶格 EBL 结构, 使得梯度的 EBL 呈现周期性的变化, 有效减少了极化电荷和晶格失配的现象 [13]. 上述研究主要涉及了 EBL 中 Al 组分和 In 组分选择, 通过控制变量的方式动态改变参数确定最优结构的形式过于单一, 且因为参数选择范围和组合方式个数有限, 不能充分考虑多个影响因素之间内在的制约关系, 无法确定最优的参数组合, 上述方式在结构优化上具有很大的局限性. 近年来, 诸如粒子群算法、遗传算法、模拟退火算法、JAYA 算法等智能优化算法在光子器件结构设计中起到了关键作用. 相较于其他启发式算法, JAYA 算法 [14] 具有简单高效、收敛快、寻优强并且不需要任何特定于算法的超参数的特点, 因此近年来已被应用在许多不同的组合优化问题上 [15,16]. 该项研究中, 针对 AlGa<sub>N</sub> 基深紫外 LED 的 EBL 结构设计引入智能优化算法, 打破了目前结构优化设计的研究瓶颈, 有望最大化载流子注入过程改善, 进一步提升内量子效率.

本文针对 AlGa<sub>N</sub> 基深紫外 LED, 通过与传统单层或双层 EBL 内量子效率结果进行对比, 采用了效果最优的 InAlGa<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub> 超晶格的 EBL 结构. 在此基础上, 本文提出了基于 JAYA 智能算法的 EBL 结构优化方法, 即对超晶格 EBL 中的 Al 组分、In 组分以及厚度等多个关键的影响参数同时进行智能寻优, 相较于简单的参数扫描, 该方法可根据算法的核心公式, 综合考虑不同影响因子的作用, 优化内容更加丰富; 且对参数智能的更新迭代能够使得各个影响因子更快的趋近于最优值, 优化过程更加科学、高效. 该方法将能够得到最大 LED 内量子效率作为优化目标, 智能化搜索对应目标的最优结构参数组合, 进而对 InAlGa<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub> 超晶格 EBL 结构进行优化设计, 以最大化该结构对内量子效率的提升作用. 该项研究中, 通过对采用优化和未优化 EBL 结构的深紫外 LED 的光电子学特性分析, 验证了该方法的有效性.

## 2 研究方法

采用基于 InAlGa<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub> 超晶格和传统单层/双层 EBL 的 AlGa<sub>N</sub> 基深紫外 LED 结构如图 1 所示. 其中结构 A(图中表示为 Structure A)是一种参考结构, 蓝宝石上的外延层由 2.2 μm 的 AlN 缓冲层、2 μm 的 n-Al<sub>0.56</sub>Ga<sub>0.44</sub>N 接触层 (Si 掺杂浓度为 5×10<sup>18</sup> cm<sup>-3</sup>) 以及 5 对 Al<sub>0.45</sub>Ga<sub>0.55</sub>N(3 nm)/Al<sub>0.56</sub>Ga<sub>0.44</sub>N(12 nm) 多量子阱 (MQW)、25 nm 厚的 Al<sub>0.60</sub>Ga<sub>0.40</sub>N EBL、50 nm 厚的 p-Al<sub>0.40</sub>Ga<sub>0.60</sub>N

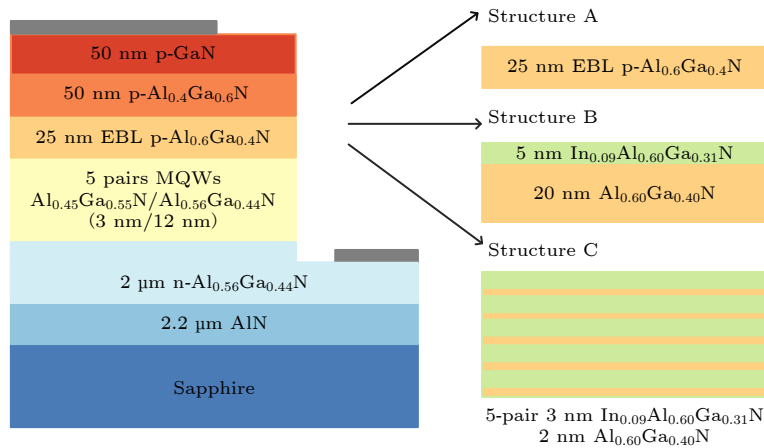


图 1 AlGa<sub>N</sub> 基 DUV LED 结构示意图 (左) 和结构 A(单层 EBL)、B(双层 EBL)、C(超晶格结构 EBL)(右)

Fig. 1. Structure diagram of AlGa<sub>N</sub> based DUV LED(left)and Structure A (single layer EBL), B (double-layer EBL), C (superlattice structure EBL)(right).

和 p-GaN 接触层 (Mg 掺杂浓度  $2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ) 组成. 除了 EBL 部分之外, 结构 B (表示为 Structure B) 和结构 C (表示为 Structure C) 与 Structure A 都相同, 图中进一步给出了结构 B 和 C 的 EBL 具体结构. 结构 B 同样也作为参考结构, 其 EBL 由 20 nm 厚的  $\text{Al}_{0.60}\text{Ga}_{0.40}\text{N}$  和 5 nm 厚的  $\text{In}_{0.09}\text{Al}_{0.60}\text{Ga}_{0.31}\text{N}$  两层组成, 而本文采用的结构 C 的 EBL 结构则包括五周期的  $\text{In}_{0.09}\text{Al}_{0.60}\text{Ga}_{0.31}\text{N}$  (3 nm)/ $\text{Al}_{0.60}\text{Ga}_{0.40}\text{N}$  (2 nm) 超晶格层组成. 为了便于特性比较, 结构 A、结构 B 和结构 C 中的 EBL 厚度为 25 nm, LED 横截面积均为  $300 \mu\text{m} \times 300 \mu\text{m}$ .

本文对采用不同 EBL 结构的 AlGaIn 基深紫外 LED 的光电子学特性以及内量子效率进行仿真分析, 主要使用包括泊松方程、漂移扩散传输方程和薛定谔方程等在内的经典模型<sup>[17]</sup>. 此外, 本文使用能充分体现 LED 内部物理机制的 APSYS 专业仿真工具, 从半导体器件的电学、光学和热学属性出发, 以有限元分析方法为基础, 通过对器件内部物理过程进行 2D/3D 建模, 对平衡态与非平衡态下的能带结构、载流子输运和量子力学效应的仿真计算, 实现对深紫外 LED 的光电子学特性和效率的分析. 其中内量子效率充分考虑了泄漏电流的影响, 定义为量子阱内辐射复合对应电流  $I_{\text{rad}}$  占总电流  $I$  的百分比:

$$\eta_{\text{QE}} = \frac{I_{\text{rad}}}{I} = \frac{I_{\text{rad}}}{I_{\text{rad}} + I_{\text{SRH}} + I_{\text{Auger}} + I_{\text{leak}}}. \quad (1)$$

即总电流除了辐射复合对应的电流, 也包括 SRH 复合电流  $I_{\text{SRH}}$  和俄歇复合电流  $I_{\text{Auger}}$ , 以及载流子辐射复合饱和引起的泄露电流  $I_{\text{leak}}$ . 随着注入电流的增大载流子复合辐射饱和现象加剧, 泄露电流占总电流的比例增大, 导致内量子效率骤降的现象. 此外, 辐射和非辐射复合对应的电流可进一步表示成:

$$\begin{cases} I_{\text{rad}} = qVAn, \\ I_{\text{SRH}} = qVBn^2, \\ I_{\text{Auger}} = qVCn^3, \end{cases} \quad (2)$$

其中  $n$  为载流子浓度,  $q$  为电子电荷,  $V$  为量子阱有效体积,  $A$  为 SRH 复合系数,  $B$  为辐射复合系数,  $C$  为俄歇复合系数. 可以得知随着注入电流的增大, 具有更大的增速, 和泄露电流一同会引起内量子效率的下降. 本文中所采用的参数均为常用值, 其中带偏移比设置为 0.7/0.3<sup>[18]</sup>, 俄歇复合系数和 SRH 复合寿命分别设置为  $1.0 \times 10^{-30} \text{ cm}^6/\text{s}$  和

10 ns<sup>[19]</sup>, 工作温度为 300 K<sup>[20]</sup>, 其他参数和模型可在先前的研究中找到<sup>[21–23]</sup>.

为进一步提升 AlGaIn 基深紫外 LED 的内量子效率, 针对结构 C 所采用的 InAlGaIn/AlGaIn 超晶格 EBL 结构, 本文提出一种基于智能优化的方法实现对超晶格 EBL 结构的优化, 该方法包括性能计算、数据处理和数据收集 3 个模块. 其中性能计算模块能够采用专业仿真软件 APSYS 计算不同 EBL 结构参数深紫外 LED 的内量子效率. 数据处理模块以智能优化算法为核心, 以得到最优的内量子效率为目标, 针对需要优化的 EBL 结构搜索能够实现此目标的最佳参数组合, 采用的 JAYA 优化算法基本公式如下:

$$X_{j,k}^{i+1} = X_{j,k}^i + r_1(X_{j,\text{best}}^i - |X_{j,k}^i|) - r_2(X_{j,\text{worst}}^i - |X_{j,k}^i|), \quad (3)$$

其中  $i, k, j$  分别代表优化过程迭代的次数 ( $i \leq 20$ ), 随机生成的参数组序号和参数组中某个参数序号.  $X_{j,k}^i$  表示迭代第  $i$  次时, 第  $k$  组参数中的第  $j$  个参数,  $X_{j,\text{best}}^i$  和  $X_{j,\text{worst}}^i$  分别表示第  $i$  代的所有参数组中的能使得目标值最大和最小的第  $j$  个参数,  $r_1$  和  $r_2$  控制缩放大小, 取值在  $[0, 1]$  之间. 数据收集模块将计算部分得到的结构和效率结果按照指定格式存入数据库中, 便于数据处理部分的调用, 本文通过利用数据分析相关工具, 将性能分析和数据处理模块生成的数据集按照指定的格式存入指定的数据文件中. 基于以上方法, 本文给出了面向最大化 AlGaIn 基深紫外 LED 内量子效率的 InAlGaIn/AlGaIn 超晶格 EBL 结构优化设计的仿真实现, 其伪代码如 Algorithm 1 所示.

本文采用如上给出的基于 JAYA 算法的智能优化方法和相应的代码程序, 对 InAlGaIn/AlGaIn 超晶格 EBL 的结构进行优化设计, 其中 JAYA 优化算法中设定的每代参数组数量大小为 4 个, 迭代次数为 20 次. 针对 InAlGaIn/AlGaIn 超晶格 EBL 结构, 选取量子垒的 Al 组分 QB\_ $x$ 、厚度 QB\_ $d$  以及量子阱的 Al 组分 QW\_ $x$ 、厚度 QW\_ $d$  和量子阱的 In 组分  $y$  作为待优化的关键参数, 其优化起始值依次为 min\_values:(0.5, 0.001, 0.1, 0.001, 0.001), 终止值依次为 max\_values:(0.9, 0.005, 0.5, 0.005, 0.1), 其中厚度对应的参数单位为  $\mu\text{m}$ . 根据本文给出的 EBL 结构优化方法, 以 100 mA 处对应 IQE 的值为优化目标, 首先在给定范围内随机

**Algorithm 1** Pseudo-code of the algorithm.

**Input:** objective function  $f(X)$ , problem bounds (LB,UB), problem dimensionality (D), population size (P), maximum number of generations (G)  
**Output:** best solution and best objective function value

```

1: // initialization
2: initialize database = None,  $i = 0$ 
3: randomly initialize P solutions within the problem bounds (LB,UB)
4: evaluate the initial P solutions
5: save solutions in database and best objective function value
6: // loop
7: while  $i < G$  do
8:   // find the best and worst solutions in the current population
9:   for each  $k \in [1, \dots, P]$  do
10:    for each  $j \in [1, \dots, D]$  do
11:      calculate  $X_{j,k}^{i+1}$  according to Eq. (1)
12:      // saturate  $X_{j,k}^{i+1}$  within the problem bounds (LB,UB)
13:      if  $X_{j,k}^{i+1} < LB_j$  then
14:         $X_{j,k}^{i+1} = LB_j$ 
15:      else if  $X_{j,k}^{i+1} > UB_j$  then
16:         $X_{j,k}^{i+1} = UB_j$ 
17:      end if
18:    end for
19:  end for
20:  // find solutions in database
21:  if solutions.size > 0 then
22:    return  $f(X_{j,k}^{i+1})$ 
23:  else
24:    calculate  $f(X_{j,k}^{i+1})$ 
25:  end if
26:  // replace the current solution in case of improvement
27:  if  $f(X_{j,k}^{i+1}) > f(X_{j,k}^i)$  then
28:     $X_{j,k}^{i+1} = X_{j,k}^i$ 
29:  end if
30: end while
31: return  $X_{j,k}^{i+1}, f(X_{j,k}^{i+1})$ 

```

初始化 4 组结构参数, 通过在数据库中直接搜索或者调用 APSYS 进行仿真计算得到每个参数组合对应的 IQE 结果, 根据当前结构参数得到的 IQE 结果和算法规则不断地更新结构参数, 直到满足迭代截止条件, 从而得到给定优化范围内使 AlGaIn 基深紫外 LED 内量子效率最大的 EBL 结构参数。

### 3 结果与讨论

本文首先对图 1 中 3 种不同 EBL 结构的 AlGaIn 基深紫外 LED 的内量子效率进行分析, 通过计算得到的内量子效率随电流密度变化的曲线如图 2 所示。由图 2 可以看出, 不同的 EBL 结构对深紫外 LED 的 IQE 曲线表现出不同的影响效果, 采用 InAlGaIn/AlGaIn 超晶格时, 深紫外 LED 的内

量子效率明显优于采用单层结构和双层结构时的结果。从图 2 可以得知, 结构 A 和结构 B 的内量子

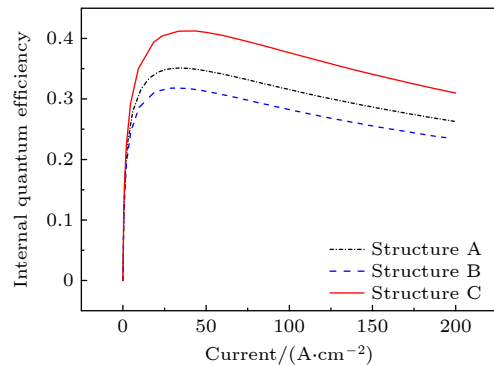


图 2 不同 EBL 结构 AlGaIn 基深紫外 LED 内量子效率随电流密度变化曲线

Fig. 2. Variation curves of internal quantum efficiency with current density in AlGaIn based DUV LED with different EBL structures.

效率的最大值分别约为 0.34 和 0.32, 而结构 C 达到 0.41, 相比于结构 A 和结构 B, 结构 C 分别提高了 20% 和 28%. 尽管结构 B 采用了相对复杂的双层结构 EBL, 并且具有和结构 C 中 EBL 相同的组分大小, 却没有表现出比传统单层结构更好的性能, 由此可以看出, 采用不同的 EBL 结构和参数对 AlGaIn 基深紫外 LED 的内量子效率的变化起着至关重要的作用.

基于上文采用的 InAlGaIn/AlGaIn 超晶格 EBL 结构, 该项研究中通过对超晶格 EBL 结构参数的扫描分析, 给出了不同结构参数对应的深紫外 LED

的内量子效率曲线, 如图 3 所示. 仿真计算过程中, 采用控制变量的方法, 即保持结构中其他参数一致, 分别调整关键的影响因子, 包括超晶格 EBL 垒层的 Al 组分和厚度  $QB\_x$ 、 $QB\_d$ , 阱层的 Al 组分和厚度  $QW\_x$ 、 $QW\_d$  以及阱层中 In 组分  $y$  的大小, 并分别对比每个结构参数变化时 IQE 曲线, 旨在从中观察各个影响因子对 IQE 曲线的影响效果并总结其影响规律. 其中图 3(a) 给出了超晶格垒层 Al 组分分别设定为 0.60, 0.65 和 0.70 时内量子效率随电流密度变化的结果, 可以看出当垒层 Al 组分增大时 IQE 的最大值不断增大. 类似地,

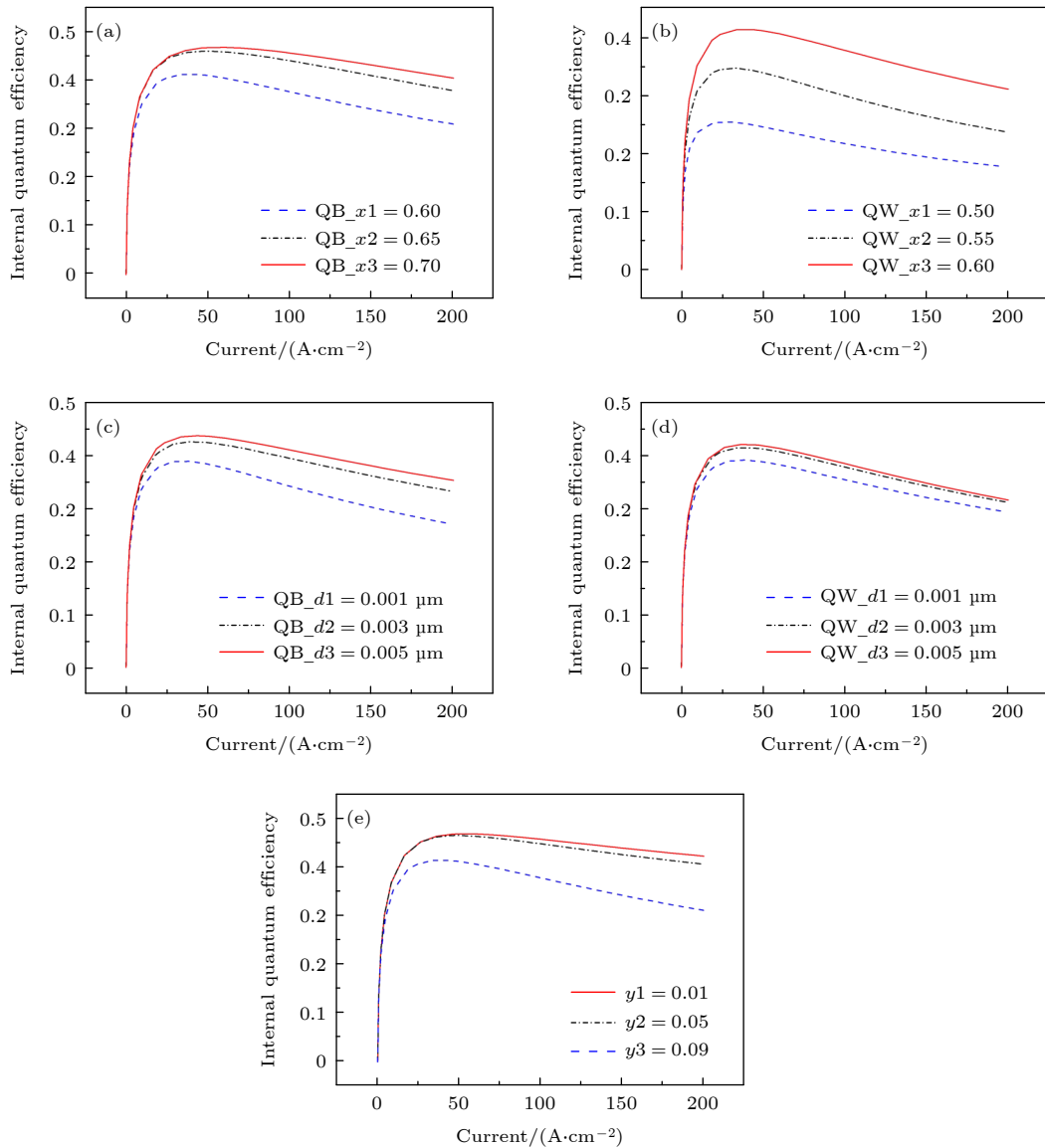


图 3 InAlGaIn/AlGaIn 超晶格 EBL 结构参数不同时 IQE 曲线结果对比图 (a) 量子垒的 Al 组分  $QB\_x$ ; (b) 量子阱的 Al 组分  $QW\_x$ ; (c) 量子垒的厚度  $QB\_d$ ; (d) 量子阱的厚度  $QW\_d$ ; (e) 量子阱掺 In 的大小  $y$

Fig. 3. Comparison of IQE curves results for InAlGaIn/AlGaIn superlattice EBL with different structural parameters: (a) Al component of quantum barrier  $QB\_x$ ; (b) Al component of quantum well  $QW\_x$ ; (c) thickness of quantum barrier  $QB\_d$ ; (d) thickness of quantum well  $QW\_d$ ; (e) In component in quantum well  $y$ .

从图 3(b) 给出的不同超晶格阱层 Al 组分的 IQE 曲线可以看出, 阱层 Al 组分的增大也有利于内量子效率的提升. 反观图 3(c) 和 (d), 当垒层或阱层厚度逐渐增大时, IQE 曲线同样会得到改善, 但相比于 Al 组分变化的影响效果没有特别显著. 图 3(e) 中, 将量子阱掺 In 的大小  $y$  分别设定为  $y_1 = 0.01$ ,  $y_2 = 0.05$  和  $y_3 = 0.09$ , 可以看出 In 组分的不断增大会导致 IQE 的最大值逐渐变小, 而且 In 组分越高效率骤降现象越明显. 综上所述, 如上分析的 InAlGa<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub> 超晶格 EBL 结构的 5 个影响因子对 IQE 曲线都体现出了不同程度的影响效果, 但如果要兼顾各影响因子的作用实现 IQE 最大化, 则需要联合调节结构参数, 这很难通过简单的参数扫描来完成.

为突破 AlGa<sub>N</sub> 基深紫外 LED 的 InAlGa<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub> 超晶格 EBL 参数扫描式结构设计分析的局限性, 以进一步提升内量子效率, 本文采用前面给出的基于 JAYA 智能优化的设计方法, 通过在合理的范围内不断寻优实现 InAlGa<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub> 超晶格 EBL 结构参数联合优化. 最终获得的超晶格参数组合 (量子垒 AlGa<sub>N</sub> 的 Al 组分  $QB\_x$  和厚度  $QB\_d$ , 量子阱 InAlGa<sub>N</sub> 的 Al 组分  $QW\_x$ , 厚度  $QW\_d$  和 In 组分的大小  $y$ ) 的优化结果分别为 (0.76, 0.0040, 0.45, 0.0010, 0.1), 即 EBL 由五周期的 In<sub>0.1</sub>Al<sub>0.45</sub>Ga<sub>0.45</sub>N(1 nm)/Al<sub>0.76</sub>Ga<sub>0.24</sub>N(4 nm) 超晶格层组成, 其优化的过程如图 4 所示. 在图 4(a) 中, 量子垒的 Al 组分  $QB\_x$  呈现出先递增后递减的趋势, 体现出优化算法智能寻优的过程. 如图 4(b) 和 (c) 所示, 量子阱的 Al 组分大小  $QW\_x$  和量子垒厚度  $QB\_d$  的变化趋势是符合单个因素扫描分析时单调递增的趋势的. 考虑到量子垒和量子阱之间的组分和厚度的影响, 在图 4(d) 中, 量子阱的厚度  $QW\_d$  优化曲线出现震荡变化的趋势. 与一般因素分析时不同的是, 图 4(e) 表明, 量子阱在掺 In 组分为 0.1 时, 和前面的参数组合体现出了更好的性能. 如图 4(f), 优化结构参数在 100 mA 处 IQE 的值进一步提高到了 0.48. 由此可见, 各个参数之间有明显的约束关系, 很好的体现了本文所提出应用智能优化设计 EBL 结构的意义所在.

为深入研究采用本文给出的优化方法得到的 InAlGa<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub> 超晶格 EBL 优化结构的合理性和有效性, 本文对未优化 EBL 结构 (即 Structure C) 和采用优化 EBL 结构 (即 Optimized structure)

的 AlGa<sub>N</sub> 基深紫外 LED 的电学特性和光学特性进行了具体的对比分析. 其中图 5(a) 和 (b) 分别显示了注入电流为 200 mA 时, 结构 C 和采用优化 EBL 结构 LED 的导带和价带的带边图, 其中橙色虚线表示准费米能级, 横坐标表示外延结构的具体位置. 对于导带, 对比可以观察到采用优化 EBL 结构时, 有效势垒高度从未优化 EBL 结构的 398 meV 增大为 534 meV, 导带费米能级在 EBL 和 P 型区一侧逐渐向远离带边的半导体内部移动, 即有利于减小泄露引起的分布在 P 型区电子的几率. 而针对价带, 从图中可以得出, 结构 C 的有源区有效势垒高度为 397 meV, 而采用优化 EBL 结构后减小为 343 meV, 即空穴注入有望能够得到改善并提升有源区的空穴分布几率. 因此, 采用优化的 InAlGa<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub> 超晶格 EBL 结构后, 由于更高的电子有效势垒高度和更低的空穴有效势垒高度, AlGa<sub>N</sub> 基深紫外 LED 有望在减小电子向 P 型区泄露的同时增大空穴的注入.

本文进一步计算了 EBL 结构优化前后的 AlGa<sub>N</sub> 基深紫外 LED 的电子和空穴的分布情况, 以探索优化 EBL 结构对载流子分布的作用效果. 为方便对比, 图 6(a) 和 (b) 分别给出了在 200 mA 电流下, 采用未经优化和优化 EBL 时 LED 的电子和空穴浓度分布情况分布, 其中蓝色虚线表示采用未优化 EBL 时 LED 内部的载流子浓度, 红色实线表示采用优化 EBL 结构后 LED 内部的载流子浓度. 从图 6(a) 可以看出, 采用优化 EBL 与结构 C 相比, 深紫外 LED 中电子浓度分布在 EBL 区大幅度下降, 即采用优化 EBL 结构能够明显削弱电子的泄露. 而从图 6(b) 可以看出, 采用优化 EBL 结构后深紫外 LED 多量子阱有源区的空穴浓度明显高于结构 C 的结果, 除了 EBL 有效空穴势垒高度减小带来的好处外, 较少的电子泄露也会使 P 型区空穴的消耗较低, 从而进一步提升空穴的注入效率. 这与前文中的机理分析相一致, 也再一次证明了优化 EBL 结构在抑制深紫外 LED 电子泄露和加强空穴注入两方面发挥的有效作用.

基于载流子分布情况, 本文还分析了采用优化 InAlGa<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub> 超晶格 EBL 结构时深紫外 LED 的发光特性, 并与采用未经优化 EBL 结构 C 的结果进行了对比. 图 7(a) 绘制了采用不同 EBL 结构时深紫外 LED 的光功率-电流 (light output power-injection current, L-I) 特性曲线, 结果表明

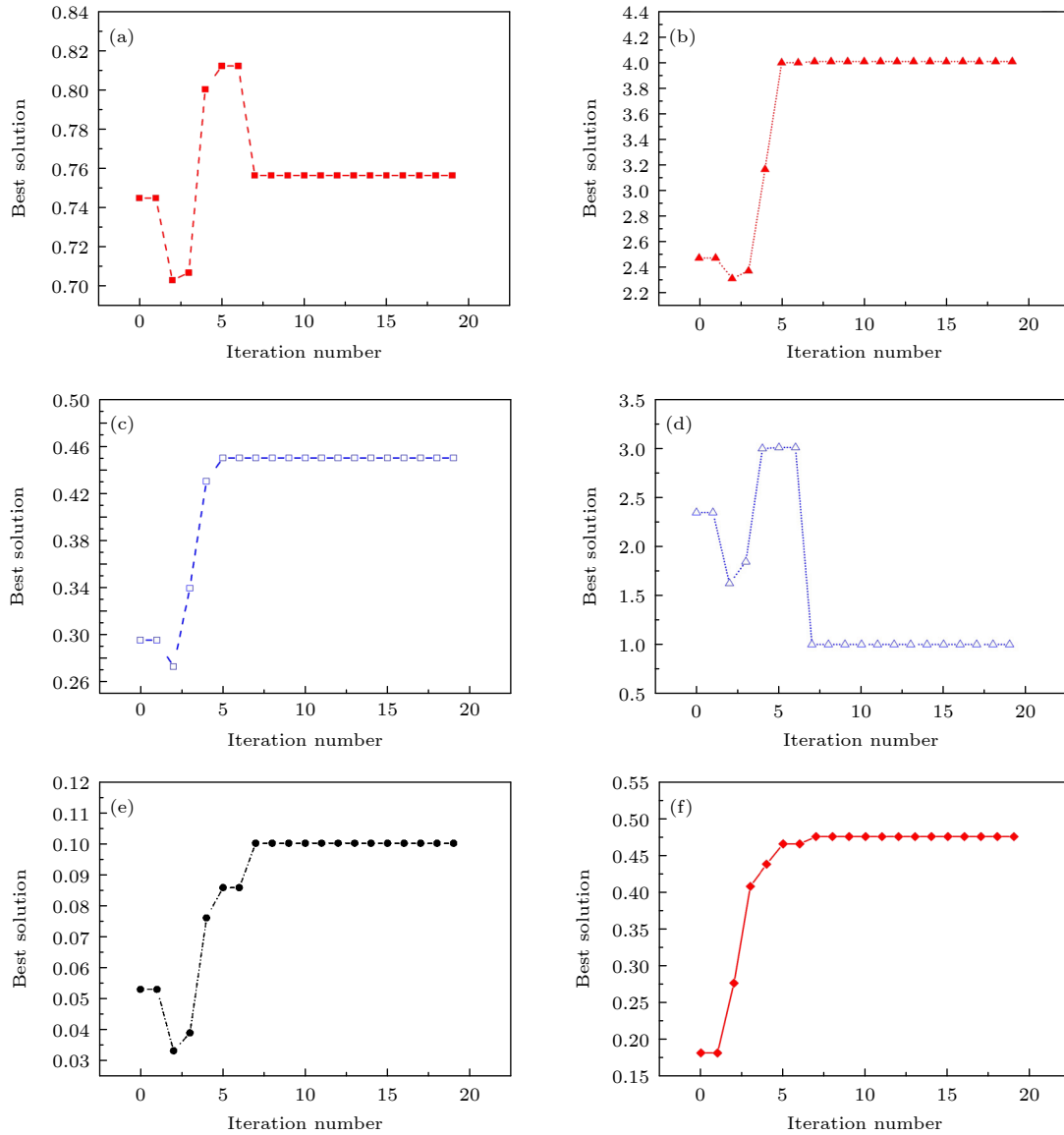


图 4 InAlGa<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub> 超晶格 EBL 结构参数和 IQE 随优化中迭代次数变化曲线: (a) 量子垒的 Al 组分 QB<sub>x</sub>; (b) 量子垒的厚度 QB<sub>d</sub>; (c) 量子阱的 Al 组分 QW<sub>x</sub>; (d) 量子阱的厚度 QW<sub>d</sub>; (e) 量子阱掺 In 的大小 y; (f) 内量子效率 IQE

Fig. 4. Curves of EBL structure parameters and IQE for InAlGa<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub> superlattice changing with iterations in optimization: (a) Al component of quantum barrier QB<sub>x</sub>; (b) thickness of quantum barrier QB<sub>d</sub>; (c) Al component of quantum wells QW<sub>x</sub>; (d) thickness of quantum well QW<sub>d</sub>; (e) ln component in quantum well y; (f) the internal quantum efficiency IQE.

相同的注入电流下采用优化 EBL 结构时 LED 明显具有更高的光输出功率。随着注入电流的增大, 结构 C 的输出功率在 200 mA 时增速明显变慢至 520 mW, 而采用优化 EBL 结构后功率输出功率接近线性增长, 在 200 mA 时达到 780 mW, 即优化 EBL 结构有利于效率骤降现象的抑制。图 7(b) 中显示了 200 mA 注入电流下结构 C 和采用优化 EBL 结构时深紫外 LED 的自发辐射谱, 可以看出由于采用相同的有源区量子阱结构二者的中心波长接近均约为 288 nm, 即对 EBL 的优化不会破坏 LED 辐射的典型光谱特性。而采用优化 EBL 结

构后 LED 的辐射强度, 相对于结构 C 的强度提高了 57%。即采用优化 EBL 结构对电子泄露的抑制和空穴注入的改善, 能够有效提高载流子辐射复合进而提升深紫外 LED 的发光特性。

为验证发光特性改善带来的效率提升, 本文对比分析了采用优化和未优化 InAlGa<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub> 超晶格 EBL 结构 AlGa<sub>N</sub> 基深紫外 LED 的内量子效率, 相应的 IQE 随注入电流变化曲线如图 8 所示。从图 8 可以看出, LED 在采用优化 EBL 结构后 IQE 明显提升, 结果表明, 其 IQE 峰值从结构 C 的约为 0.41 提升到了 0.48, 即通过采用优化 EBL 结构

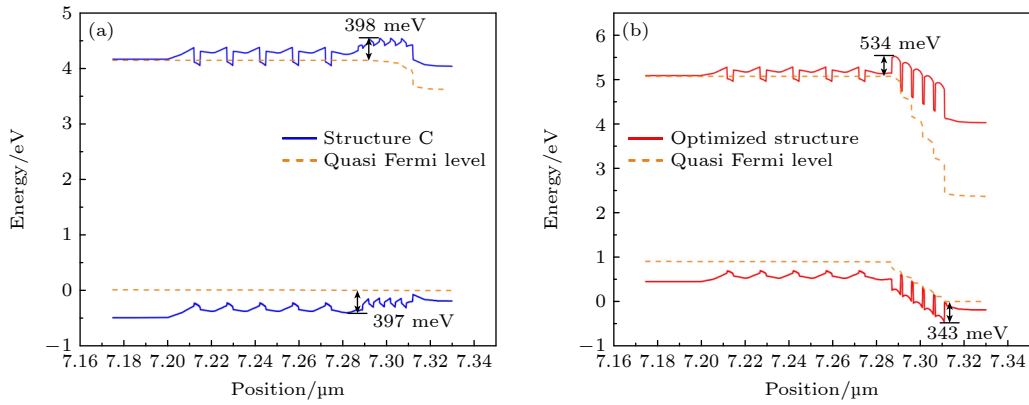


图 5 采用不同 EBL 结构时 AlGaIn 基深紫外 LED 的能带图 (a) 结构 C; (b) 优化 EBL 结构

Fig. 5. Energy band diagram of AlGaIn based DUV LED with different EBL structures: (a) Structure C; (b) optimized structure.

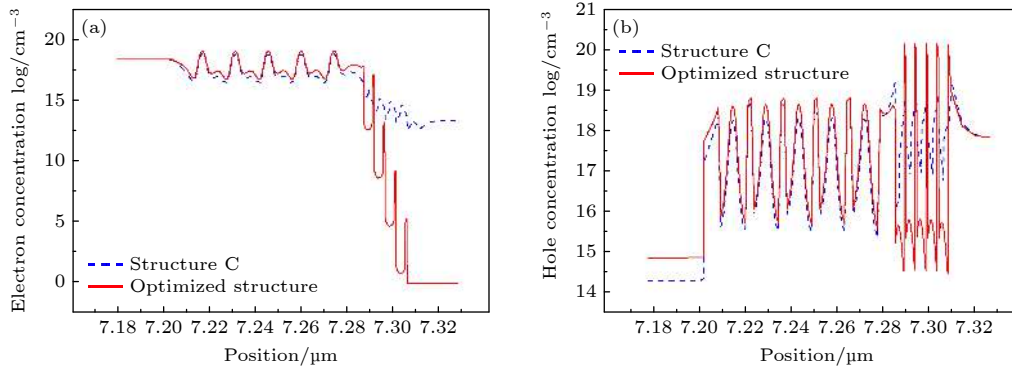


图 6 采用不同 EBL 结构时 AlGaIn 基深紫外 LED 的载流子浓度分布 (a) 电子浓度; (b) 空穴浓度

Fig. 6. Carrier concentration distribution of AlGaIn based DUV LED with different EBL structures: (a) Electron concentration distribution; (b) hole concentration distribution.

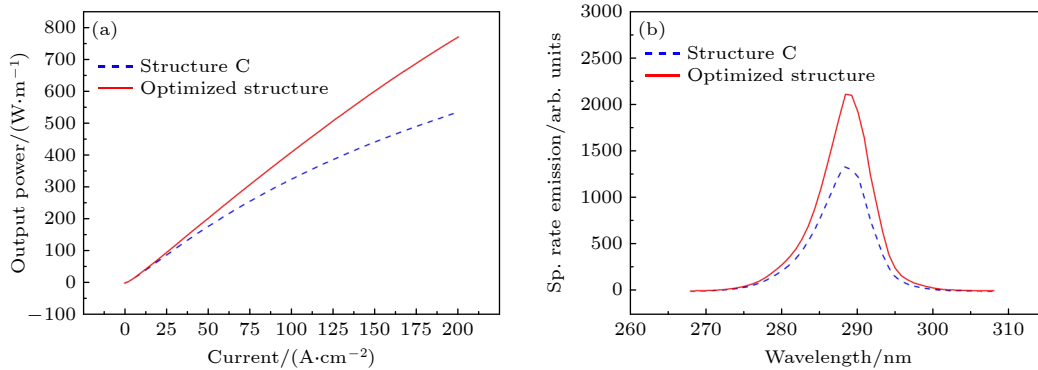


图 7 采用优化和未优化 EBL 结构时 AlGaIn 基深紫外 LED 的发光特性: (a) L-I 特性曲线; (b) 发射光谱

Fig. 7. Optical properties of AlGaIn based DUV LED with different EBL structures : (a) L-I characteristic curve; (b) emission spectrum.

IQE 峰值在采用随机超晶格 EBL 结构结果的基础上进一步提高了 17%. 与此同时, 从图中也可以得知, 在 200 mA 注入电流密度下, 采用未优化和优化 EBL 结构时, 深紫外 LED 的 IQE 下降幅度分别为 25% 和 4%, 即 LED 的效率骤降现象通过采用优化结构 EBL 也得到了明显的改善, 这主要源于电子泄露的减少和空穴的有效注入增大了辐射

复合载流子占总载流子数的比例, 在增大 LED 光辐射强度的同时也有利于内量子效率的提升和效率骤降现象的抑制. 因此, 本文通过最大化内量子效率采用智能优化算法对 InAlGaIn/AlGaIn 超晶格 EBL 结构参数进行联合优化, 能够得到更有利于提升载流子复合几率的 EBL 结构, 最终提升 AlGaIn 基深紫外 LED 的效率特性.



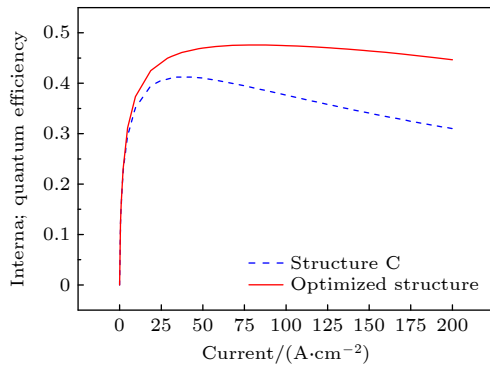


图 8 采用优化和未优化 EBL 结构时 AlGaIn 基深紫外 LED 的内量子效率随电流密度变化曲线

Fig. 8. Internal quantum efficiency versus current density curve of AlGaIn based DUV LED with and without optimized EBL structure.

## 4 结 论

针对 AlGaIn 基深紫外 LED, 本文采用了一种基于 InAlGaIn/AlGaIn 超晶格的 EBL 结构, 结果表明 LED 内量子效率结果与传统单层或双层 EBL 相比有明显提升. 在此基础上提出基于 JAYA 智能算法的 LED 结构优化方法, 以最大化 LED 内量子效率为目标, 对 InAlGaIn/AlGaIn 超晶格 EBL 结构进行优化设计, 并进一步对采用优化和未优化 EBL 结构的深紫外 LED 的光电子学特性进行了分析. 结果表明, 采用优化的 InAlGaIn/AlGaIn 超晶格 EBL 结构后, 深紫外 LED 的电子泄露得到了更有效的抑制以及空穴注入也得到有效改善, 增大了载流子在有源区复合的数量和几率进而提升了光辐射强度, 最终使深紫外 LED 的内量子效率提升以及效率骤降现象得到抑制. 该基于智能算法的优化方法能够突破目前包括电子阻挡层在内 LED 结构的优化局限性, 能够为实现 AlGaIn 基深紫外 LED 效率的提高提供了新的思路和方法.

## 参考文献

- [1] Ren Z J, Yu H B, Liu Z L, et al. 2020 *J. Phys. D Appl. Phys.* **53** 073002
- [2] Wang J X, Yan J X, Guo Y A, et al. 2015 *Sci. Sin. Phys. Mech. Astron.* **45** 067303
- [3] Khan A, Balakrishnan K, Katona T 2008 *Nat. Photonics* **2** 067303
- [4] Kneissl M, Seong T Y, Han J, Amano H 2019 *Nat. Photonics.* **13** 233
- [5] Park J S, Kim J K, Cho J, Seong T Y 2017 *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **6** Q42
- [6] Xia Z H, Liang S H, Li B Q, Wang F, Zhang D M 2021 *Optik* **231** 166392
- [7] Storm N, McKay L G A, Downs S N, et al. 2020 *Sci. Rep.* **10** 22421
- [8] Hirayama H, Tsukada Y, Maeda T, Kamata K 2010 *Appl. Phys. Express* **3** 031002
- [9] Islam N U, Usman M, Khan S, Jamil T, Rasheed S, Ali S, Saeed S 2021 *Optik* **248** 168212
- [10] Usman M, Malik S, Hussain M, Jamal H, Khan MA 2021 *Opt. Mater.* **112** 110745
- [11] Mondal R K, Chatterjee V, Pal S 2020 *Semicond. Sci. Technol.* **35** 055031
- [12] Wang Y F, Mussaab I Niass, Wang F, Liu Y H 2020 *Chin. Phys. B* **29** 480
- [13] Jamil T, Usman M, Jamal H, Khan S, Rasheed S, Ali S 2021 *J. Electro. Mater.* **50** 5612
- [14] Rao R V 2016 *Int. J. Ind. Eng. Comp.* **7** 19
- [15] Gao K Z, Yang F J, Zhou M C, Pan Q K, Suganthan P N 2019 *IEEE Trans. Cybernetics.* **49** 1944
- [16] Gao K Z, Zhang Y C, Sadollah A, Lentzakis A, Su R 2017 *Swarm. Evol. Comput.* **37** 58
- [17] Mymrin V F, Bulashevich K A, Podolskaya N I, et al. 2005 *Phys. Status Solidi C* **2** 2928
- [18] Kim S J, Kim T G 2014 *Phys. Status Solidi A* **211** 656
- [19] Kuo Y K, Chang J Y, Chen F M, Shih Y H, Chang H T 2016 *IEEE Quantum Elect.* **52** 3300105
- [20] Xing Z Q, Zhou Y J, Liu Y H, Wang F 2020 *Chin. Phys. Lett.* **37** 027302
- [21] Vurgaftman I, Meyer J R, Ram-Mohan L R 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 5815
- [22] Chuang S L, Chang C S 1996 *Phys. Rev. B* **54** 2491
- [23] Dugdale D J, Brand S, Abram R A 2000 *Phys. Rev. B* **61** 12933

# Intelligent optimization design of electron barrier layer for AlGaIn-based deep-ultraviolet light-emitting diodes\*

Feng Li-Ya<sup>1)</sup> Lu Hui-Min<sup>1)†</sup> Zhu Yi-Fan<sup>1)</sup> Chen Yi-Yong<sup>2)</sup>  
Yu Tong-Jun<sup>2)</sup> Wang Jian-Ping<sup>1)</sup>

1) (School of Computer and Communication Engineering, Beijing University of Science and Technology, Beijing 100083, China)

2) (State Key Laboratory of Artificial Microstructure Physics and Mesoscopic Physics,  
School of Physics, Peking University, Beijing 100081, China)

( Received 20 October 2022; revised manuscript received 12 December 2022 )

## Abstract

AlGaIn-based deep-ultraviolet light-emitting diodes (DUV LEDs) are widely used in sterilization, sensing, water purification, medical treatment, non-line of sight (NLOS) communication and many other fields. Especially it has been reported that the global novel coronavirus (COVID-19) can be effectively inactivated by the DUV light with a wavelength below 280 nm (UVC) within a few seconds, which has also attracted great attention. However, the external quantum efficiency (EQE) of UVC LED is still at a low level, generally not more than 10%. As an important component of EQE, internal quantum efficiency (IQE) plays a crucial role in realizing high-performance DUV-LED. In order to improve the IQE of AlGaIn-based DUV-LED, this work adopts an electron blocking layer (EBL) structure based on InAlGaIn/AlGaIn superlattice. The results show that the superlattice EBL structure can effectively improve the IQE compared with the traditional single-layer and double-layer EBL structure for the DUV-LED. On this basis, the optimization method based on JAYA intelligent algorithm for LED structure design is proposed in this work. Using the proposed design method, the InAlGaIn/AlGaIn superlattice EBL structure is further optimized to maximize the LED's IQE. It is demonstrated that the optimized superlattice EBL structure is beneficial to not only the suppression of electron leakage but also the improvement of hole injection, leading to the increase of carrier recombination in the active region. As a result, the IQE of the DUV-LED at 200 mA injection current is 41.2% higher than that of the single-layer EBL structure. In addition, the optimized structure reduces IQE at high current from 25% to 4%. The optimization method based on intelligent algorithm can break through the limitation of the current LED structure design and provide a new method to improve the efficiency of AlGaIn-based DUV-LED.

**Keywords:** deep ultraviolet light emitting diode, internal quantum efficiency, intelligent optimization algorithm, electron leakage

**PACS:** 85.60.Jb

**DOI:** 10.7498/aps.72.20222004

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 62234003), the Basic and Applied Basic Research Foundation of Guangdong Province, China (Grant No. 2021B1515120086) and the People's Government's Special Foundation for Science and Technology Innovation of Foshan Municipal (Grant No. BK20BF013).

† Corresponding author. E-mail: [hmlu@ustb.edu.cn](mailto:hmlu@ustb.edu.cn)



## AlGa<sub>N</sub>基深紫外LED电子阻挡层的智能优化设计

冯丽雅 路慧敏 朱一帆 陈毅勇 于彤军 王建萍

### Intelligent optimization design of electron barrier layer for AlGa<sub>N</sub>-based deep-ultraviolet light-emitting diodes

Feng Li-Ya Lu Hui-Min Zhu Yi-Fan Chen Yi-Yong Yu Tong-Jun Wang Jian-Ping

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 048502 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20222004

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222004>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

太赫兹量子级联激光器中有源区上激发态电子向高能级泄漏的研究

Electrons leakage from upper laser level to high energy levels in active regions of terahertz quantum cascade lasers

物理学报. 2019, 68(2): 021101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181882>

基于深紫外激光-光发射电子显微技术的高分辨率磁畴成像

High resolution imaging based on photo-emission electron microscopy excited by deep ultraviolet laser

物理学报. 2020, 69(9): 096801 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200083>

基于激子阻挡层的高效率绿光钙钛矿电致发光二极管

High efficiency green perovskite light-emitting diodes based on exciton blocking layer

物理学报. 2020, 69(3): 038501 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191263>

具有大光电导增益的氧化镓薄膜基深紫外探测器阵列

Gallium oxide thin film-based deep ultraviolet photodetector array with large photoconductive gain

物理学报. 2022, 71(20): 208501 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220859>

基于N型纳米晶硅氧电子注入层的钙钛矿发光二极管

Perovskite light-emitting diodes based on n-type nanocrystalline silicon oxide electron injection layer

物理学报. 2019, 68(12): 128103 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190258>

类KBe<sub>2</sub>BO<sub>3</sub>F<sub>2</sub>结构硼酸盐深紫外非线性光学材料的研究进展

Exploration of the deep-ultraviolet nonlinear optical materials in the derivatives of KBe<sub>2</sub>BO<sub>3</sub>F<sub>2</sub>

物理学报. 2019, 68(2): 024208 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182145>