

AlGa_N 基紫外分布式布拉格反射镜的结构优化

张李骊, 刘战辉, 钟霞

南京信息工程大学物理与光电工程学院, 江苏 南京 210044

摘要 采用传统的相关性分析方法,结合光学传输矩阵理论为基础的商用膜系设计软件,对紫外波段(中心波长 314 nm) AlGa_N 基布拉格反射镜的反射光谱进行了一系列模拟,研究了部分结构参数与反射率、中心波长的相关性及相关系数。理论分析结果表明:在保持周期厚度不变的情况下,分层厚度,尤其是 AlGa_N 分层厚度的变化对最终反射率和中心波长的影响最大,且为负相关,并借此优化得到具有较高反射率、较宽探测波段的紫外 AlGa_N 基布拉格反射镜结构参数。相关性分析和优化结果与实际相符,为紫外 AlGa_N 基布拉格反射镜的设计和应用提供了新的思路和研究手段。

关键词 光学设计; 分布式布拉格反射镜; 结构优化; AlGa_N 基; 相关性分析; 紫外

中图分类号 TN304.2

文献标识码 A

doi: 10.3788/LOP55.062203

Structure Optimization of AlGa_N-Based Ultraviolet Distributed Bragg Reflector

Zhang Lili, Liu Zhanhui, Zhong Xia

School of Physics and Optoelectronic Engineering, Nanjing University of Information Science and Technology, Nanjing, Jiangsu 210044, China

Abstract Commercial coating design software based on optical transfer matrix theory and traditional method of correlation analysis are used to obtain a series of simulated reflection spectrum of ultraviolet AlGa_N-based Bragg reflector (center wavelength of 314 nm). The correlation between partial structural parameters and reflectivity or center wavelength are studied, as well as the correlation coefficients. The results of correlation analysis show that the thickness of the AlGa_N layer is the most impact factor on the reflectivity and the center wavelength, which is a negative correlation. Bases on this conclusion, we obtain an optimal UV AlGa_N DBR structure with high reflectivity and wide detection band. Furthermore, the correlation analysis and optimization results match the actual data, which provide a new way and method for the design and application of UV AlGa_N DBR.

Key words optical design; distributed Bragg reflector; structure optimization; AlGa_N-based; correlation analysis; ultraviolet

OCIS codes 220.4241; 220.4610; 230.1480; 230.0250

1 引言

紫外发光二极管(LED),尤其是广泛应用于工业、仪器仪表、医药等领域的紫外谐振腔发光二极管(RCLEDs),已经引起了越来越多的关注,高反射率分布布拉格反射镜(DBR)是其中的重要组成部分^[1-5]。目前,大多数高反射率的 GaN 基 DBR 结构的反射率都达到了 99% 以上,但 GaN 材料的短波

效应限制了它们在紫外波段的应用^[6-7]。只有改用铝组分较高的 AlGa_N 材料代替氮化物 DBR 结构中的 GaN,才能使其在紫外波段得到进一步发展,但 AlN 和衬底 GaN 之间的晶格失配和热失配会使 DBR 结构产生面内晶格弛豫,进而引起裂纹^[8],降低了器件的性能。虽然无裂纹氮化物基紫外 DBR 已研制成功,且以提高 DBR 反射率为目的的设计和 optimization 已有很多研究^[9-10],但大多数只是针对单一样

收稿日期: 2017-11-14; 收到修改稿日期: 2017-12-22

基金项目: 南京信息工程大学校预研基金(2014x033)、南京信息工程大学校科研启动基金(2013x023)

作者简介: 张李骊(1978—),女,博士,讲师,主要从事 GaN 基半导体方面的研究。E-mail: zllpaper@163.com

品的研究,虽然有指导意义,但由于受到制备技术和设备的限制,其成果不可复制和转移。此外,虽然 DBR 结构参数与最终反射率之间会有影响已是众所周知,但是对 DBR 结构参数与最终反射率之间的相关性研究及其相关系数研究的报告仍鲜有报道。因此,如果能得到结构参数与最终反射率之间的相关性,并进行参数量化,在提高紫外 AlGaIn 基 DBR 晶体质量、结构优化及其反射率方面,就会具有更加普遍的实用价值。

本文从相互之间存在影响的 DBR 结构参数与最终反射率之间的相关关系着手,采用传统的相关性分析方法,结合光学传输矩阵理论为基础的商用膜系设计软件,对高反射率 AlGaIn 基布拉格反射镜的中心反射率进行了一系列模拟,研究了部分结构参数之间的相关性,得到了结构参数与中心反射率、中心波长的相关系数,并对两者之间关系的相关性进行了量化,为 DBR 结构的设计尤其是难制备高铝组分氮化物 DBR 结构的设计和制备提供了理论指导,并在此基础上优化设计出一种在紫外区域具有较高中心反射率的布拉格反射镜。

2 基本原理

2.1 DBR 理论

DBR 是由两种厚度为 $1/4$ 波长、高低折射率半导体材料交替组成的多层膜结构。因此组成布拉格反射镜的半导体材料厚度需要满足布拉格反射公式:

$$d_i = \frac{\lambda}{4n_i}, \quad (1)$$

式中: d_i 为组成反射镜的半导体材料各层厚度; λ 为反射中心波长; n_i 为组成反射镜的半导体材料各自对应的折射率。

DBR 的理论计算有解析方法和数值方法两种。

光入射到布拉格反射镜内部,在各个膜层都会发生干涉,当各反射光相位差为 2π 的整数倍时就会形成较强干涉,即有最大反射率。因此光垂直入射时的最大反射率可表示为^[11]:

$$R = \left[\frac{1 - \frac{n_i}{n_0} \left(\frac{n_1}{n_2} \right)^{2N}}{1 + \frac{n_i}{n_0} \left(\frac{n_1}{n_2} \right)^{2N}} \right]^2, \quad (2)$$

式中: n_1 和 n_2 为 DBR 的两种不同折射率; n_0 和 n_i 为入射面和出射面的折射率。通过(2)式可以求出中心反射率大于 99% 的 DBR 的层数。

传输矩阵法(TMM)源于 Maxwell 方程和电磁波的边界条件,多应用于多层呈周期性交替排列的介质。对于多层膜系,通过传递矩阵方法可以模拟出膜系的反射和透射谱。因此 DBR 的数值模拟基础^[12-13]一般基于传输矩阵法。

解析方法可以计算出 DBR 的主要特性参数,并有助于理解各材料结构参数影响 DBR 特性的物理实质和变化规律,而数值方法能够给出更准确的数值结果,并得到完整的光谱反射,二者结合,即可对 DBR 进行参数优化设计,并精确模拟优化结果。

2.2 相关性分析

相关性分析^[14]是指对两个或多个具备相关性的变量元素进行分析,从而衡量两个变量因素的相关程度。相关性元素之间需要存在一定的联系或者概率,才可以进行相关性分析。相关分析侧重于随机变量之间的种种相关特征,而不考虑两者的因果关系。例如,以 x 、 y 分别表示 DBR 的周期厚度与中心反射率,侧重于关注二者之间的密切程度,一般使用统计学意义的相关系数 r 来定量考察两参数 A 和 B 的相关性大小,其计算公式为:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \in [-1, 1], \quad (3)$$

式中: \bar{x} 和 \bar{y} 分别为 x 和 y 的平均值。

表 1 所示为相关系数值与相关程度的参考表。由表 1 可见,两个变量的相关性越强,相关系数就越接近 ± 1 ;反之,两个变量的相关性越弱,相关系数越接近 0。相关系数的值若为正值,则为正相关;若为负值,则为负相关;若为 0,则为不相关。

表 1 相关系数值与相关程度的关系

Table 1 Relationship of correlation coefficient and correlation degree

$ r $	Correlation degree
1.0-0.9	Very strong
0.9-0.7	Strong
0.7-0.5	Weak
<0.5	Very weak

在 GaN 基底上生长的 AlGaIn/AlN DBR 结构示意图如图 1 所示。设计中心波长为 320 nm,其中 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ 和 AlN 的 $1/4$ 波长层厚分别为 33.1 nm 和 38.1 nm。

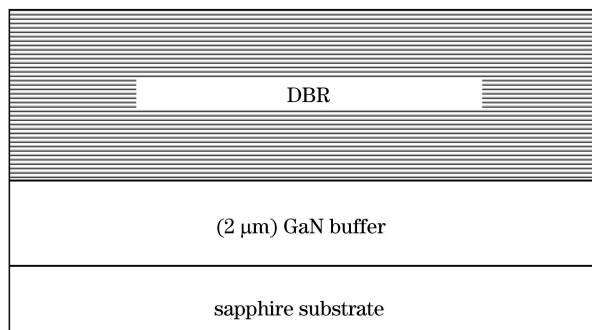


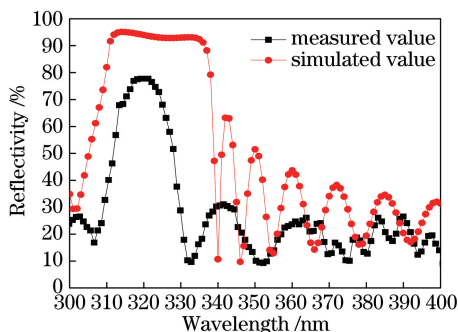
图1 DBR结构示意图

Fig. 1 Schematic of DBR structure

3 实验结果与分析

3.1 周期厚度与反射率、中心波长之间的相关性分析

图2所示为中心波长为320 nm时30周期的模拟反射光谱与实际制备DBR样品得到的反射光谱对比图。实验样品采用金属有机化合物化学气相沉积(MOCVD)技术在蓝宝石衬底上进行制备,采用紫外可见分光光度计表征反射谱,实测峰值反射率为314 nm处的77%,而理论模拟值为314 nm处的95%,表明实际的生长层厚与设计值有所偏离。这是因为膜层生长时对于薄膜厚度的控制存在偏差,导致实际的反射率低于理论值。但两者在300~400 nm波长范围内的平均反射率基本一致,反射峰值出现的位置也相吻合,模拟结果在一定程度上可以反映实际DBR结构生长的反射特性。

图2 30周期的 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{AlN}$ DBR结构的理论反射光谱和实测结果Fig. 2 Measured and simulated reflection spectrometry of $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{AlN}$ DBR with 30 pairs

随后通过微调层厚来观察DBR结构反射光谱发生的变化。保持周期厚度不变,微调 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ 层厚,分别减小或者增加3,6,9 nm,与此同时,AlN层厚分别增加或减小相同厚度,再通过软件模拟得到6组反射光谱图,并与没有微调层厚时的反射光谱放在一起进行比较,结果如图3所示。

从图3中可以看出:微调层厚之后,不仅峰值反射率有所增大,而且随着 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ 层厚的减小或增加,即AlN层厚增加或减小,中心波长值也会随之略减小,并且高反射区宽度略减小。

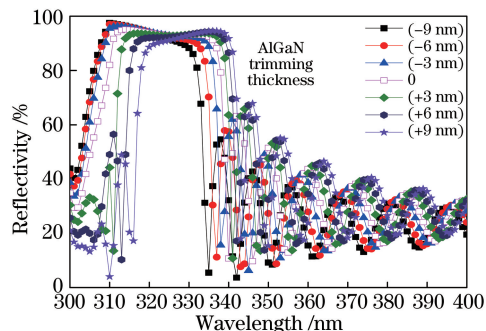
图3 微调 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ 厚度后对应的反射光谱模拟图

Fig. 3 Simulated DBR reflection spectra with changed and unchanged thickness of AlGaIn

相关性分析得到的结果如表2所示。

表2 分层厚度(AlGaIn)与中心波长、最高反射率的相关系数

Table 2 Correlation coefficients between AlGaIn's thickness and center wavelength or reflectivity

Iterm	AlGaIn's thickness	Center wavelength	Reflectivity
AlGaIn's thickness	1		
Center wavelength	0.915042496	1	
Reflectivity	-0.895691451	-0.877 521 154	1

从表2中可以看出,分层AlGaIn厚度微调对中心波长的影响略大于最高反射率,且为正相关。厚度微调与最高反射率之间的相关系数接近0.9,且为负相关。因此,微调层厚对中心反射率和中心波长有影响,使中心反射率增大,而且使中心波长值产生相应的减小或者增加。更进一步地,在周期厚度不变的前提下,中心波长值的变动趋势会随着AlGaIn基的变化而变化,且变化趋势一致,但是不论哪种偏移,都会使中心反射率增大,高反射区宽度略有减小。

3.2 周期膜层顺序与反射率、中心波长之间的相关性分析

以更加容易在较少周期数内获得的高反射率的 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{AlN}$ DBR结构为例,其中 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ 和AlN的折射率比为1.15,层厚分别对应为33.1 nm和38.1 nm,改变该DBR的膜层材料生长顺序,得到30周期AlN/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ DBR结构和

$\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{AlN}$ DBR 结构反射光谱对比图,如图 4 所示。

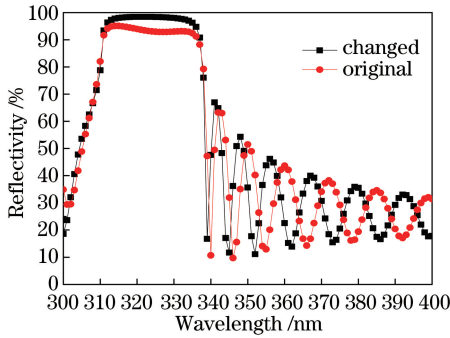


图 4 30 周期的 $\text{AlN}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ DBR 结构与 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{AlN}$ DBR 结构的反射光谱对比图

Fig. 4 Reflection spectrometry of $\text{AlN}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ DBR and $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{AlN}$ DBR with 30 pairs

从图 4 中可以看出, $\text{AlN}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ DBR 结构的中心反射率比 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{AlN}$ DBR 结构的中心反射率略高,并且在反射光谱短波段范围的内偏差较大,但随着波长的增大,反射光谱趋向平缓,二者差别并不很明显。通过相关性系数分析,得到如表 3 所示的结果。

表 3 DBR 周期内膜层顺序与反射率的相关系数

Table 3 Correlation coefficient of the layer's order in the DBR period and reflectivity

Item	Wavelength	Changed	Original
Wavelength	1		
Changed	-0.662722357	1	
Original	-0.662199086	0.903308	1

从表 3 中可以看出,仅改变相同周期的 DBR 膜层顺序,对中心反射率的影响不大,因此,如果只考虑中心反射率,则可以不考虑分层的生长顺序,但这只是从理论上对此进行取舍。事实上,在制备 DBR 时还必须考虑晶格常数是否匹配的问题,很明显 GaN 与 AlN 晶格常数并不如 GaN 与 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ 晶格常数匹配得好,因此在实际生长过程中很可能造成位错甚至裂纹,从而影响材料质量。出于这种原因,在进行结构设计时,一般会选择 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{AlN}$ DBR 结构。

在实际生长膜层材料时,需要考虑的不仅是基底材料与第 1 层生长膜层之间的折射率比,同样也必须考虑晶格常数的匹配问题。但这二者通常是相互矛盾的,因此需要根据实际情况权衡考虑。通常情况下,晶格失配会产生应变外延层,同时 DBR 内部应力也会对其反射率和波长产生影响。众所周知,异质外延生长的 GaN 基外延膜中的应变来源十

分复杂^[15],由复杂应变来源导致的应力计算所需要的相关参数数值差异很大,因此得到的结果也有很大不同,而 AlGaIn 基 DBR 薄膜内部的应力同样会受到衬底、缓冲层、制备方式、DBR 结构组分、周期及其薄膜厚度等因素的影响,其对 DBR 反射率和波长的影响更为复杂,同时也给实验样品的制备和测试带来了困难,这里暂不涉及这部分内容。

4 结 论

将相关性分析理论引入到 DBR 结构研究中,可以更有效地找到对 DBR 结构光学性能影响较大的因素,将结构参数与中心反射率之间的相关程度进行量化,从而为 DBR 结构的设计和制备提供理论指导。理论分析表明,周期数、周期厚度、分层厚度以及膜层材料顺序对 DBR 最终反射率的影响程度是不同的。在保持周期厚度不变的情况下,分层厚度尤其是 AlGaIn 分层厚度的变化对最终反射率和中心波长的影响最大,且为负相关;在满足布拉格反射方程的情况下,周期数、膜层材料顺序对 DBR 光学性能的影响较弱。以此作为优化依据,得到紫外波段 AlGaIn 基 DBR 的最佳结构参数为:30 周期 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{AlN}$ DBR,厚度分别为 33.1,38.1 nm;在最佳结构下,所得中心波长为 314 nm,最高反射率为 95%,高反射区半峰全宽达到 23 nm,具有较高的反射率和较宽的探测波段。

参 考 文 献

- [1] Berneburg M, Röcken M, Benedix F. Phototherapy with narrowband vs broadband UVB [J]. Acta Dermato-venereologica, 2005, 85(2): 98-108.
 - [2] Fiedler A, Rehdorf J, Hilbers F, *et al.* Detection of semen (human and boar) and saliva on fabrics by a very high powered UV-/VIS- light source [J]. The Open Forensic Science Journal, 2008, 1: 12-15.
 - [3] Wang T, Liu Y H, Lee Y B, *et al.* 1 mW AlInGaIn-based ultraviolet light-emitting diode with an emission wavelength of 348 nm grown on sapphire substrate [J]. Applied Physics Letters, 2002, 81(14): 2508-2010.
 - [4] Zheng Y Y, Wu C Y, Lin F, *et al.* AlGaInP light emitting diode with coupled distributed Bragg reflector structure [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2017, 54(5): 052301.
- 郑元宇, 吴超瑜, 林峰, 等. 复合分布式布拉格反射镜结构 AlGaInP 发光二极管 [J]. 激光与光电子学进展, 2017, 54(5): 052301.

- [5] Zhang C, Zhang J R, Wang Y M, *et al.* Design of broad-angle extreme ultraviolet multilayer coatings based on quantum evolutionary algorithm [J]. *Acta Optica Sinica*, 2017, 37(6): 0631001.
张超, 张杰瑞, 王一名, 等. 基于量子进化算法的宽角度极紫外多层膜设计 [J]. *光学学报*, 2017, 37(6): 0631001.
- [6] Vredenberg A M, Hunt N E J, Schubert E F, *et al.* Controlled atomic spontaneous emission from Er^{3+} in a transparent Si/SiO₂ microcavity [J]. *Physical Review Letters*, 1993, 71(4): 517-520.
- [7] Wang T, Parbrooka P J, Harrison C N, *et al.* Highly improved performance of a 350 nm ultraviolet light-emitting diode containing $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ distributed Bragg reflectors [J]. *Journal of Crystal Growth*, 2004, 267(3): 583-587.
- [8] Butté R, Feltin E, Dorsaz J, *et al.* Recent progress in the growth of highly reflective nitride-based distributed Bragg reflectors and their use in microcavities [J]. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2005, 44(10): 7207-7216.
- [9] Gordie B, Denis N, Nikiforov A Y, *et al.* Deep ultraviolet distributed Bragg reflectors based on graded composition AlGa_N alloys [J]. *Applied Physics Letters*, 2015, 106(22): 221107.
- [10] Mitrofanov O, Schmult S, Manfra M J, *et al.* High-reflectivity ultraviolet AlGa_N/AlGa_N distributed Bragg reflectors [J]. *Applied Physics Letters*, 2006, 88(17): 171101.
- [11] Liu C, Pei L, Li Z X, *et al.* Characteristics of the fiber Bragg grating based all-fiber acousto-optic modulator [J]. *Acta Physica Sinica*, 2013, 62(3): 034208.
刘超, 裴丽, 李卓轩, 等. 光纤布拉格光栅型全光纤声光调制器的特性研究 [J]. *物理学报*, 2013, 62(3): 034208.
- [12] Miao P, Deng J, Shi Y L, *et al.* Calculation of the band structures for the type II superlattices by transfer matrix method and graphic method [J]. *Semiconductor Optoelectronics*, 2012, 33(2): 207-210.
苗霏, 邓军, 史衍丽, 等. 传输矩阵法和图解法计算二类超晶格能带结构 [J]. *半导体光电*, 2012, 33(2): 207-210.
- [13] Feng Y, Hao Y Q, Wang X T, *et al.* Structural optimization and fabrication of 850 nm vertical-cavity surface-emitting laser [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2017, 44(3): 0301005.
冯源, 郝永芹, 王宪涛, 等. 850 nm 垂直腔面发射激光器结构优化与制备 [J]. *中国激光*, 2017, 44(3): 0301005.
- [14] Li G L, Huang Z Y, Li Y, *et al.* Analysis of the effect of active layer thickness on polymer solar cell performance based on optical and opto-electronic model [J]. *Acta Physica Sinica*, 2011, 60(7): 077207.
李国龙, 黄卓寅, 李衍, 等. 基于光学与光-电转换模型对聚合物电池功能层厚度与性能相关性分析 [J]. *物理学报*, 2011, 60(7): 077207.
- [15] Kisielowski C, Kruger J, Ruvimov S, *et al.* Strain-related phenomena in GaN thin films [J]. *Physical Review B*, 1996, 54(24): 17745-17749.