

光学学报

(10 $\bar{1}1$)面 InGa \bar{N} 量子阱中的静电场反转对蓝光发光二极管光电性能的影响

尹瑞梅¹, 贾伟^{1,2*}, 董海亮¹, 贾志刚¹, 李天保¹, 余春燕¹, 张竹霞¹, 许并社^{1,2,3}

¹太原理工大学新材料界面科学与工程教育部重点实验室, 山西 太原 030024;

²山西浙大新材料与化工研究院, 山西 太原 030032;

³陕西科技大学材料原子和分子科学研究所, 陕西 西安 710021

摘要 通过 InGa \bar{N} /Ga \bar{N} 单量子阱模型研究了极化强度随晶面取向的变化, 结果显示半极性(10 $\bar{1}1$)面量子阱中的极化电场反转导致其能带向上弯曲, 电子波函数靠近 n 侧, 这有望抑制电子泄漏。对(10 $\bar{1}1$)面 InGa \bar{N} /Ga \bar{N} 多量子阱蓝光发光二极管(LED)外延结构的模拟表明半极性(10 $\bar{1}1$)面提高了量子垒的有效阻挡势垒, 抑制了电子泄漏。此外, (10 $\bar{1}1$)面极大地降低了空穴注入势垒, 实现了载流子的均衡分布, 降低了俄歇复合概率, 最终在电流密度为 300 A/cm² 时, 与(0001)面 42% 的效率骤降相比, (10 $\bar{1}1$)面 Ga \bar{N} 基 LED 的效率骤降低至 9%, 发光强度提高 48%。(10 $\bar{1}1$)面 InGa \bar{N} 量子阱的静电场反转特性是其具有优异光电性能的一个重要原因。

关键词 光电子学; 发光二极管; (10 $\bar{1}1$); 静电场反转; 载流子浓度匹配; 效率骤降; 电子泄漏

中图分类号 TN303; TN312+.8

文献标志码 A

DOI: 10.3788/AOS202242.2125001

Effect of Electrostatic Field Inversion in (10 $\bar{1}1$)-Plane InGa \bar{N} Quantum Wells on Photoelectric Properties of Blue Light-Emitting Diodes

Yin Ruimei¹, Jia Wei^{1,2*}, Dong Hailiang¹, Jia Zhigang¹, Li Tianbao¹, Yu Chunyan¹, Zhang Zhuxia¹, Xu Bingshe^{1,2,3}

¹Key Laboratory of Interface Science and Engineering in Advanced Materials, Ministry of Education, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, Shanxi, China;

²Shanxi-Zheda Institute of Advanced Materials and Chemical Engineering, Taiyuan 030032, Shanxi, China;

³Institute of Atomic and Molecular Science, Shaanxi University of Science & Technology, Xi'an 710021, Shaanxi, China

Abstract In this paper, polarization intensity as a function of crystallographic orientation is studied by the InGa \bar{N} /Ga \bar{N} single quantum well model. The results reveal that the polarization electric field inversion in the semi-polar (10 $\bar{1}1$) quantum well leads to upward bending of the energy band, and the electron wave function in the quantum well is close to the n-side, which is likely to successfully suppress electron leakage. The simulation of the epitaxial structure of (10 $\bar{1}1$)-plane InGa \bar{N} /Ga \bar{N} multi-quantum-well blue light-emitting diodes (LEDs) demonstrates that LEDs grown on the semi-polar (10 $\bar{1}1$) plane can elevate the effective blocking barrier of the quantum barrier and suppress electron leakage. Moreover, the (10 $\bar{1}1$) plane greatly reduces the hole injection barrier, promotes the even distribution of carriers, and reduces Auger recombination probability. Finally, the efficiency droop in (10 $\bar{1}1$)-plane Ga \bar{N} -based LEDs is drastically reduced to 9% at the current density of 300 A/cm² compared with 42% efficiency droop in the (0001) plane, and electroluminescence intensity is increased by 48%. The electrostatic field inversion of the (10 $\bar{1}1$)-plane InGa \bar{N} quantum well is an important reason for its excellent photoelectric properties.

Key words optoelectronics; light-emitting diodes; (10 $\bar{1}1$); electrostatic field inversion; carrier concentration matching;

收稿日期: 2022-03-16; 修回日期: 2022-04-26; 录用日期: 2022-05-23

基金项目: 国家自然科学基金(61604104, 21972103, 61904120)、山西省自然科学基金(201901D111109)、山西省重点研发项目(201903D1111009)、山西浙大新材料与化工研究院(2021SX-AT002)

通信作者: *jiawei@tyut.edu.cn

efficiency droop; electron leakage

1 引言

GaN 基发光二极管(LED)具有节能环保的优点,已被广泛应用于照明和显示等领域。目前商用 GaN 基 LED 是以极性 c 面生长的 InGaN/GaN 量子阱(QW)为核心结构,白光 LED 的光效已从诞生之初的 5 lm/W 发展到实验室高达 303 lm/W 的水平^[1],但是随着实际应用对大功率、高亮度及高品质 LED 的需求日益增加,(0001)面 GaN 基 LED 暴露出越来越多的问题,特别是效率骤降^[2]。目前有很多机制来解释这一现象,包括俄歇(Auger)复合^[3]、载流子泄漏^[4]、低空穴注入效率^[5]、量子限制斯塔克效应(QCSE)^[6]等。虽然效率骤降的机理依旧没有定论,但可以肯定的是,随着电流密度的增大,效率骤降的程度加大^[7]。因此,研究如何降低一定电流密度下多量子阱(MQWs)中的载流子浓度是意义非凡的。此外,尽管科学家们已经通过设计外延结构在解决这一问题上取得了一定的进展,但是极性(0001)面的强极化电场依旧是制约商用 GaN 基 LED 性能提升的关键因素。

半极性晶面可以明显减弱极化电场,降低对合金成分的依赖性,提高辐射复合率,缓解 GaN 基 LED 的效率骤降问题^[2]。目前,(1122)面已经实现了蓝、绿和黄光 LED^[8-9],(303 $\bar{1}$)独立式 GaN 衬底上成功制备出了高功率低效率骤降的紫光 LED^[10]。然而,半极性 GaN 器件在商业化前依然面临众多技术问题,特别是高质量衬底的生长。(2021)、(3031)、(202 $\bar{1}$)、(303 $\bar{1}$)这样的高指数半极性晶面由于表面不稳定性,通常不存在于 GaN 晶体中,制备技术相对困难,特别是(2021)晶面 GaN 只能通过图案化蓝宝石衬底技术实现^[11],(3031)晶面 GaN 只能通过斜切厚的 c 面 GaN 衬底来获得小尺寸的体 GaN^[10]。目前,低指数的(1120)、(10 $\bar{1}$ 1)和(1122)面 GaN 已经实现^[12]。Chiu 等^[13]和 Scholz 等^[14]先后在异质衬底上生长了大面积的半极性(10 $\bar{1}$ 1)面 GaN 外延层,并在其上生长了 InGaN/GaN MQWs,获得的外延层晶体质量良好,性能得到明显改善,然而此后对于(10 $\bar{1}$ 1)面 GaN 基薄膜 LED 的研究却很少,其性能改善的原因也不甚清楚。因此,研究低指数的(10 $\bar{1}$ 1)面 GaN 基薄膜 LED、进一步探索影响其光电性能的内在原因具有重要意义。

本文重点研究了半极性(10 $\bar{1}$ 1)面 InGaN/GaN MQWs 的静电场分布及其对 LED 光电特性的影响。首先,构建 In_{0.18}Ga_{0.82}N/GaN 单量子阱(SQW)模型,研究了极化电场与能带分布的特点,初步表明了半极性(10 $\bar{1}$ 1)面的优点。随后,通过 InGaN/GaN MQWs 模型对(0001)面和(10 $\bar{1}$ 1)面外延结构的能带排布、静电场分布、载流子浓度分布和复合特性以及电流密度变化情况等进行了对比分析和讨论。本文提出的半极性(10 $\bar{1}$ 1)面 InGaN QW 中的静电场反转特性可从文献

[7, 12]中推断证实;半极性(10 $\bar{1}$ 1)面 InGaN/GaN MQWs 蓝光 LED 外延结构与相同的极性(0001)结构的效率骤降、电子电流密度分布和载流子浓度分布结果与文献[13]的理论和实验结果相似,因此本文的研究结果具有一定的可靠性。

2 理论基础和器件结构

2.1 理论基础

以 GaN 为代表的 III 族氮化物材料的晶体结构包括闪锌矿和纤锌矿结构,其中纤锌矿结构是其热力学稳定结构^[15]。六方纤锌矿结构由于缺乏中心反演对称性,在 c 轴方向上 Ga 原子和 N 原子的重心不重合,因此 GaN 晶体具有极性,称之为自发极化^[16]。此外,LED 结构通常是赝晶生长在下层的衬底上,存在很明显的晶格失配和热失配,加之 GaN 具有很大的压电极化常数^[17],因此在外延层中存在很强的压电极化场,高达几 MV/cm^[16, 18]。在给定的外延层中,总极化是自发极化和压电极化的矢量和,相邻两层之间的界面电荷^[7]可表示为

$$(P_{sp, layer1} + P_{pz, layer1}) - (P_{sp, layer2} + P_{pz, layer2}) = \sigma_{pol}, \quad (1)$$

式中:下标 layer 1 和 layer 2 分别是衬底和应变的外延层; P_{sp} 和 P_{pz} 分别是自发极化和压电极化强度; σ_{pol} 是界面电荷。

上述的界面电荷在 QW 中引起极化电场,因此, QW 中的电场表示为 p-n 结内建电场 E_{bi} 和极化电场 E_{pz} 之和。为简化计算,在 SQW GaN 基 LED 模型中,假定 GaN 量子垒(QB)处于无应变状态(无应变衬底),QW 中的极化电场^[7]可表示为

$$E_{QW} = E_{sp, QW} + E_{pz, QW} = \frac{P_{sp, QB} - P_{sp, QW}}{\epsilon_{QW}} - \frac{P_{pz, QW}}{\epsilon_{QW}}, \quad (2)$$

式中: $P_{sp, QB}$ 和 $P_{sp, QW}$ 分别是 QB 和 QW 中的自发极化强度; $P_{pz, QW}$ 是 QW 中的压电极化强度; ϵ_{QW} 是 QW 材料对应的介电常数。对 InGaN 和 GaN 晶体而言, P_{sp} 可认为是几乎一致的^[7],因此,式(2)可简化为

$$E_{QW} \approx E_{pz, QW} = -\frac{P_{pz, QW}}{\epsilon_{QW}}. \quad (3)$$

由此可知, QW 中的 E_{QW} 方向与 QW 中的 $P_{pz, QW}$ 方向相反。

本文采用 SiLENSe (Simulator of Light Emitters based on Nitride Semiconductors) 仿真软件对 LED 外延结构进行了数值模拟。该软件运用了一维漂移-扩散模型、连续性方程和薛定谔-泊松方程解释纤锌矿材料的特性,即强的压电极化效应和自发极化电场;使用 $6 \times 6 \text{ k} \cdot \text{p}$ 方法计算 InGaN QW 的能带结构。在模拟过程中,假设不同极性的样品具有相同的晶体质量,并且应力条件对不同结构的影响相似,在该软件中,生长在衬底上的 GaN 模板厚度超过 500 nm 后,衬底上生长的 GaN 可视为近似弛豫,而应力主要来自 InGaN/GaN MQWs 和 AlGaIn 电子阻挡层(EBL)之间的晶格失配。

此外,假设不同结构 LED 的库仑屏蔽效应也近似相等。因为在相同的注入电流密度下,不同极性结构 LED 的外加电压诱导的电子和空穴的数量是相似的。模拟时,设置施加在外延结构两端的电压为 2~5 V。

2.2 器件结构

在研究 III 族氮化物的极化行为与生长取向的关系时,为最大限度地减小载流子传输的影响^[7],构建了蓝光 SQW LED 模型, QW 材料是 InGa_{0.18}N, 其 In 摩尔分数为 18%, QB 材料是 GaN。

为研究半极性 (10 $\bar{1}$ 1) MQWs 区的静电场反转对 LED 光电特性的影响,模拟了商用的极性 (0001) 面和半极性 (10 $\bar{1}$ 1) 面 InGa_{0.18}N/GaN MQWs LED。器件结构设计如图 1 所示。沿外延方向分别是蓝宝石 [(0001) 面 LED] 或独立式 GaN [(10 $\bar{1}$ 1) 面 LED] 衬底, 500 nm 厚的 Si 掺杂 n-GaN 层 (n 掺杂, 每立方厘米中有 5×10^{18} 个原子), 5 周期的 In_{0.2}Ga_{0.8}N/GaN MQWs 区, 阱和垒层厚度分别为 3 nm 和 8 nm、60 nm 厚的 Mg 掺杂 p-Al_{0.15}Ga_{0.85}N 层 (p 掺杂, 每立方厘米中有 5×10^{18} 个原子), 以及 200 nm 厚的 Mg 掺杂 p-GaN 层 (每立方厘米中有 2×10^{19} 个原子)。

两个不同晶面的器件结构的区别在于衬底材料的选择, 这是因为 GaN 外延层在蓝宝石衬底上的择优生长取向为 (0001) 晶向, 而高性能半极性 GaN 基器件则是生长在独立衬底上, 目前独立式 GaN 衬底的位错密度已经可以低至 10^5 cm^{-2} 量级^[19]。本文在对器件结构进行模拟时采用控制变量法, 唯一变量是模拟器件的外延取向, 因此尽管对不同晶向上的 LED 结构选取了不同的衬底材料, 但各外延层的位错密度均设置为 $1 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$, 载流子的非辐射寿命是 $5 \times 10^{-8} \text{ s}$ 。此处需要注意的是, 位错密度是与位错有关的参数, 而非辐射寿命是与除位错以外的缺陷有关的参数。此外, 模拟器件尺寸是 $300 \mu\text{m} \times 300 \mu\text{m}$, InN 的俄歇系数 C_n 和 C_p 均设置为 $2.5 \times 10^{-30} \text{ cm}^6 \cdot \text{s}^{-1}$, GaN 和 AlN 的俄歇系数均设置为 0^[20]。模拟温度是 300 K, 电子和空穴迁移率分别为 $100 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ 和 $10 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ ^[21], 带偏移比为 70:30^[22], 其他材料参数参见文献^[23-24]。

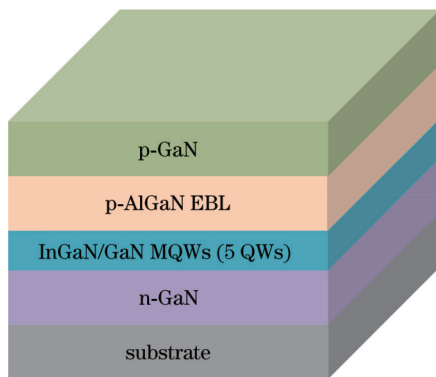


图 1 模拟的 InGaN/GaN MQWs LED 外延结构示意图

Fig. 1 Schematic of epitaxial structure of simulated InGaN/GaN MQWs LED

3 分析与讨论

3.1 不同晶面 InGa_{0.18}N SQW 的极化

图 2 为 In_{0.18}Ga_{0.82}N SQW 中的总极化强度与晶体取向的关系, 其中 θ 是衬底法向与 c 轴的夹角, θ 的计算方式参见文献^[19]。如图 2 所示, 总极化强度最大的晶向与 c 轴平行, 包括 (0001) Ga 面和 (000 $\bar{1}$) N 面。非极性面以及约 45° 对应的晶面 QW 中的极化电场是零, 在该方向附近, 极化强度方向发生改变。高于 90° 的晶面上 QW 中的极化电场有类似的趋势, 但其方向相反。其中半极性 (10 $\bar{1}$ 1) 面和 (10 $\bar{1}$ $\bar{1}$) 面的总极化强度如图 2 中的实心圆点所示, (0001) 和 (10 $\bar{1}$ $\bar{1}$) 面 QW 中的极化强度方向一致, 与之相比, (10 $\bar{1}$ 1) 面 QW 中极化电场方向反转, 插图是两个半极性面在六方纤锌矿结构中的位置。以上结果与文献^[7, 25]报道的一致。Ji 等^[26]将常规 GaN 基 LED 的最后一个 GaN QB 和 AlGaIn EBL 对调位置, 使得最后一个 QB 和 EBL 界面处的正极化电荷变为负极化电荷, 即发生极化电场反转, 抑制了电子泄漏, 达到改善效率骤降的目的。因此, 有理由认为 (10 $\bar{1}$ 1) 面 QW 中极化电场反转将调控能带结构, 影响载流子的注入和传输, 进而影响效率骤降。

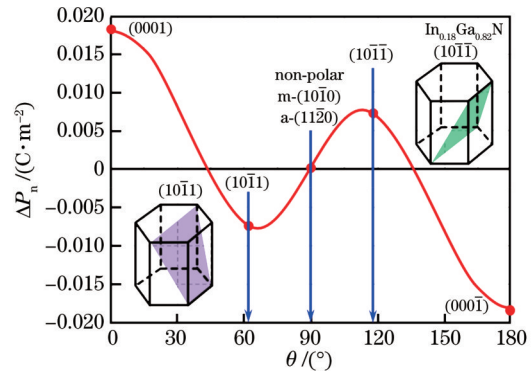


图 2 In_{0.18}Ga_{0.82}N SQW 中的总极化强度 ΔP_n 随晶面取向的变化 [插图分别为半极性 (10 $\bar{1}$ 1) 晶面和半极性 (10 $\bar{1}$ $\bar{1}$) 晶面]

Fig. 2 Total polarization intensity ΔP_n in In_{0.18}Ga_{0.82}N SQW as a function of crystallographic orientation [inserts are semi-polar (10 $\bar{1}$ 1) plane and semi-polar (10 $\bar{1}$ $\bar{1}$) plane]

图 3 是 (0001) 和 (10 $\bar{1}$ 1) 晶面上 3 nm In_{0.18}Ga_{0.82}N SQW 结构在 50 A/cm^2 下的能带结构和波函数图, 虚线和点划线分别表示电子和空穴波函数。已知 p-n 结的内建电场方向由 n 端指向 p 端, 如图 3 中 E_{bi} 所示。在极性 (0001) 面中, 3 nm In_{0.18}Ga_{0.82}N SQW 中的极化电场 E_{QW} 与 $E_{pz, QW}$ 近似相等, 在方向上与外延生长方向相反 [式 (3)], 且反平行于内建电场, 在数值上 E_{pz} 明显远大于 E_{bi} , 结果从 n 端到 p 端 QW 中的能带严重向下弯曲。而在半极性 (10 $\bar{1}$ 1) 面中, 二者在方向上同向平行, 结果 QW 中的能带沿着由 n 端到 p 端的方向向上弯曲, 与极性 (0001) 面相比, 沿 (10 $\bar{1}$ 1) 面法向外延生长的 QW 中的电场实现了反转, 这将使更多电子限制在 QW 中, 抑制电子逸出 MQWs 区, 降低非辐射复合率,

这一点也反映在了波函数的分布中。图 3(b)中电子

波函数被限制在了 QW 靠近 n 端的一边。

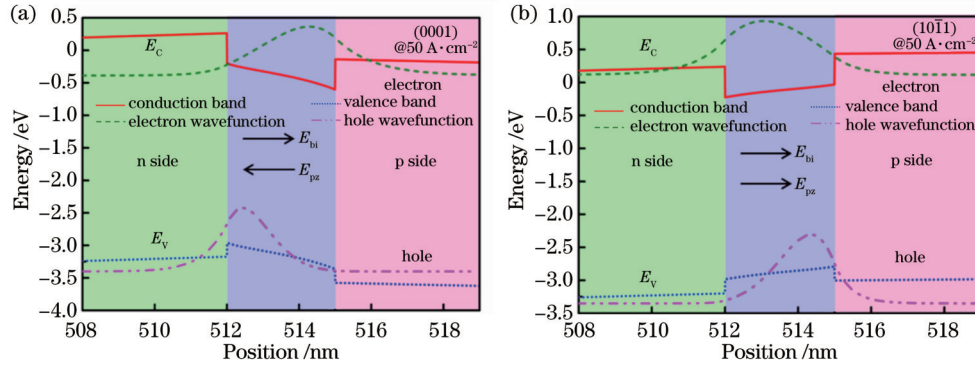


图 3 在电流密度为 50 A/cm²条件下,不同晶面的 3 nm In_{0.18}Ga_{0.82}N SQW 的能带排布和波函数分布。(a) (0001)面;(b) (10 $\bar{1}1$)面
Fig. 3 Energy band profiles and wave function diagrams of 3 nm In_{0.18}Ga_{0.82}N SQW with different crystallographic planes at current density of 50 A/cm². (a) (0001) plane; (b) (10 $\bar{1}1$) plane

3.2 (0001) 面和 (10 $\bar{1}1$) 面 GaN 基 MQWs LED 的光电特性

3.2.1 静电场与能带分布

图 4 是(0001)面和(10 $\bar{1}1$)面 GaN 基 LED 在注入电流密度为 50 A/cm²下的静电场分布图。从图 4 中可以看出,(10 $\bar{1}1$)面 InGa_n/Ga_n MQWs LED 中的静电场分布与(0001)面上的情况明显不同:在数值上,(10 $\bar{1}1$)面上 QW 中的静电场约是(0001)面 QW 中电场强度的 1/3;在方向上,(10 $\bar{1}1$)面 QW 中的静电场方向

与(0001)面完全相反,且(10 $\bar{1}1$)面 QW 中的电场方向为正,这与式(2)和图 3(b)中的结果一致,即发生了静电场反转。此外,(10 $\bar{1}1$)面上每个 QB 中的电场均匀分布,而(0001)面上沿着 n 端到 p 端的方向,QB 中的电场逐渐增大。在最后一个 GaN QB 与 AlGa_n EBL 以及 AlGa_n EBL 与 p-GaN 交界处,由晶格失配引起的极化电场在(10 $\bar{1}1$)面上明显减弱,这有利于降低能带弯曲程度,增加有效势垒高度,改善电子泄漏现象^[27]。

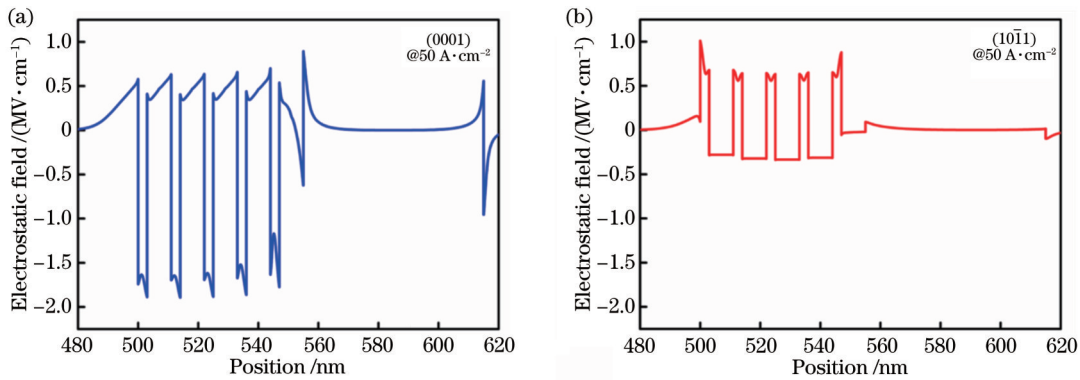


图 4 在电流密度为 50 A/cm²的条件下 GaN 基 MQWs LED 的静电场分布图。(a) (0001)面;(b) (10 $\bar{1}1$)面
Fig. 4 Electrostatic field distributions of GaN-based MQWs LED at current density of 50 A/cm². (a) (0001) plane; (b) (10 $\bar{1}1$) plane

静电场对能带结构的具体影响可以从图 5 中观察到。不同晶面上 QW 中能带的弯曲情况与图 3 中结果一致。电子和空穴波函数的分布如图 5 中央的实线和虚线所示,由于电子和空穴均倾向于聚集在势能低处,因此在(0001)面上,电子波函数位于 QW 中靠近 p 端的一侧,空穴波函数倾向于 QW 中靠近 n 端的一侧,而在(10 $\bar{1}1$)面上,由于静电场反转,电子和空穴波函数分布情况与(0001)面完全相反,同时(10 $\bar{1}1$)面 MQWs 中的静电场强度明显降低,缓解了能带弯曲,使得电子和空穴波函数的重叠程度明显增加^[27]。表 1 计算了不同晶面 GaN 基 MQWs LED 的能带结构中 QB 对电子的有效阻挡势垒,该势垒定义为 QB 导

带极大值与下层 QW 的电子费米能级之差,用 ΔE_{PB} 表示,从 n 端到 p 端依次将 QB 标记为 1、2、3、4 和 5。(0001)面 LED 中各 QB 对电子的平均有效阻挡势垒是 362 meV,远低于(10 $\bar{1}1$)面的 425.4 meV,特别是(0001)面的 QB5 的有效势垒急剧下降,这与最后一个 QB 和 EBL 之间强的极化电场密切相关。以上结果说明了(10 $\bar{1}1$)面的静电场反转提高了 QB 的电子阻挡势垒,可以有效抑制电子泄漏,进而降低非辐射复合率。此外,在靠近 p 端的最后一个 QB 与 AlGa_n EBL 界面处,(0001) GaN 基 LED 中能带发生了严重的弯曲。其中电子的有效势垒高度定义为 EBL 导带最大值与 EBL 下层的电子费米能级之间的能量差,

空穴的有效势垒高度定义为 EBL 价带最小值与 EBL 上层空穴费米能级之间的能量差^[28]。计算结果表明：(0001) 面 LED 中电子的有效势垒明显降低，等于 587 meV，(0001) 面削弱了 EBL 限制载流子逃逸的作用，而在 (10 $\bar{1}1$) 面 GaN 基 LED 中电子的有效势垒高

度是 753 meV，EBL 势垒的提高再次抑制了电子的逃逸。此外，(10 $\bar{1}1$) 面上空穴注入势垒是 232 meV，低于 (0001) 面上的 352 meV，这一减小的价带偏移降低了空穴注入势垒，促进了空穴的注入和其在 MQWs 中的传输^[22]。

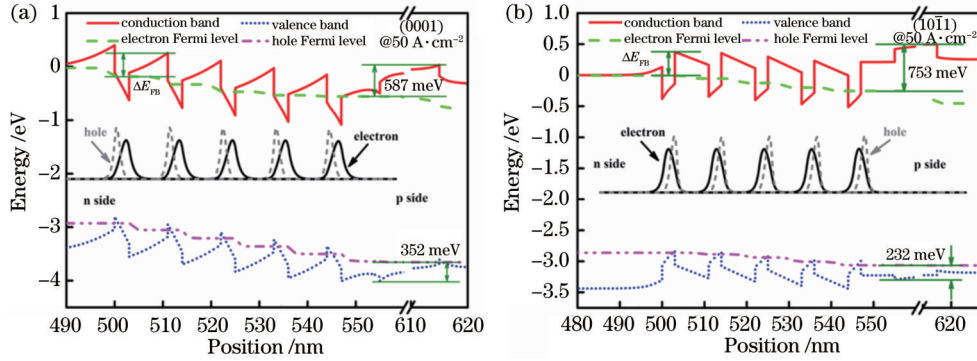


图 5 在电流密度为 50 A/cm² 的条件下 GaN 基 MQWs LED 的能带排布和电子与空穴波函数分布。(a) (0001) 面; (b) (10 $\bar{1}1$) 面
Fig. 5 Energy band profiles and electron and hole wave function distributions of GaN-based MQWs LED at the current density of 50 A/cm². (a) (0001) plane; (b) (10 $\bar{1}1$) plane

表 1 不同晶面 GaN 基 MQWs LED 能带结构中 QB 对电子的有效势垒 ΔE_{PB}

Table 1 Effective potential barrier ΔE_{PB} for QB to electrons in band structure of GaN-based MQWs LEDs with different crystal planes

Crystal orientation	$\Delta E_{PB}(\text{QB1}) / \text{meV}$	$\Delta E_{PB}(\text{QB2}) / \text{meV}$	$\Delta E_{PB}(\text{QB3}) / \text{meV}$	$\Delta E_{PB}(\text{QB4}) / \text{meV}$	$\Delta E_{PB}(\text{QB5}) / \text{meV}$	Average of $\Delta E_{PB} / \text{meV}$
(0001)	428.8	440.0	433.6	378.8	129.0	362.0
(10 $\bar{1}1$)	377.3	398.2	419.0	417.6	465.0	425.4

3.2.2 载流子的传输和复合特性

MQWs 的载流子浓度分布和电流密度变化情况直接说明了 (10 $\bar{1}1$) 面上静电场反转对载流子的影响，如图 6 所示。图 6(a)、(b) 分别是极性 (0001) 面和半极性 (10 $\bar{1}1$) 面的载流子浓度分布情况，对于 (0001) 面 LED，空穴主要集中于靠近 p 端的最后一个 QW 中，空穴浓度高于其中的电子浓度，且在前 4 个 QW 中空穴浓度依然低于电子浓度。然而在 (10 $\bar{1}1$) 面中，电子浓度从 n 端到 p 端逐渐减小，这与表 1 中 QB 的电子阻挡势垒的逐渐增加有关。(10 $\bar{1}1$) 面载流子浓度较 (0001) 面有所降低，但整体上电子和空穴浓度匹配度更高，有效降低了过剩载流子浓度，这也表明了 (10 $\bar{1}1$) 晶面可以将载流子有效限制在 MQWs 中，防止载流子的逃逸。此外，在 (0001) 面 LED 中，最后一个 GaN QB 与 AlGaIn EBL 以及 AlGaIn EBL 与 p-GaN 界面处存在大量电子和空穴的积累，这是由于晶格失配在此处产生了大的极化电场，如图 4 所示，(0001) 面空穴在有源区外的积累同样也是空穴注入率低的原因，而在 (10 $\bar{1}1$) 面，这一现象几乎可以忽略不计。图 6(c)、(d) 是 MQWs 的电流密度分布情况，在 (0001) 面 GaN 基 LED 中，5 个 QW 中的电子电流密度大致相等，而在 (10 $\bar{1}1$) 面上，从 n 端到 p 端，电子电流密度梯度减小，这是因为该取向上极化电场明显减小，且静电场反转降低了电子向 p 区传输的速率。值得注意的是，(0001)

面 LED 中 p 区的电子浓度远高于 (10 $\bar{1}1$) 面，如图 6(a) 中虚线所示，这直接说明了 (0001) 面的电子泄漏严重，与图 5(a) 中电子有效势垒低的结果相一致。此外，(0001) 面上空穴电流密度很小，且在各 QW 中变化不明显，而 (10 $\bar{1}1$) 面上空穴电流密度从 p 端到 n 端呈梯度降低，且整体上远高于 (0001) 面上的空穴电流密度，这是由于减小的价带偏移降低了空穴注入势垒以及 QW 中静电场反转提高了空穴的限制能力。

载流子分布的改善也促使 MQWs 中的载流子复合状况发生了变化，如图 7 所示。由图 7(a) 可知，在 (0001) 面 GaN 基 LED 中，载流子的辐射复合基本发生在靠近 p 端的最后一个 QW 中，其余 QW 中的辐射复合率很低。而在 (10 $\bar{1}1$) 面 GaN 基 LED 中，5 个 QW 中都发生了明显的辐射复合，且分布相对均匀，这与该面上 MQWs 中载流子的匹配分布密切相关，同时 (10 $\bar{1}1$) 面 LED MQWs 中总的辐射复合率远高于 (0001) 晶面。相应地，图 7(b) 的非辐射复合具有类似的特点，不同的是 (10 $\bar{1}1$) 面 GaN 基 LED 中总的非辐射复合率远低于极性 (0001) 面。图 7(c)、(d) 是 MQWs 中的肖克利-里德-霍尔 (SRH) 和俄歇复合率，在电流密度为 50 A/cm² 时，俄歇复合在非辐射复合中占据主导地位。根据 ABC 模型，各复合机制与载流子浓度的关系^[29-31]可表示为

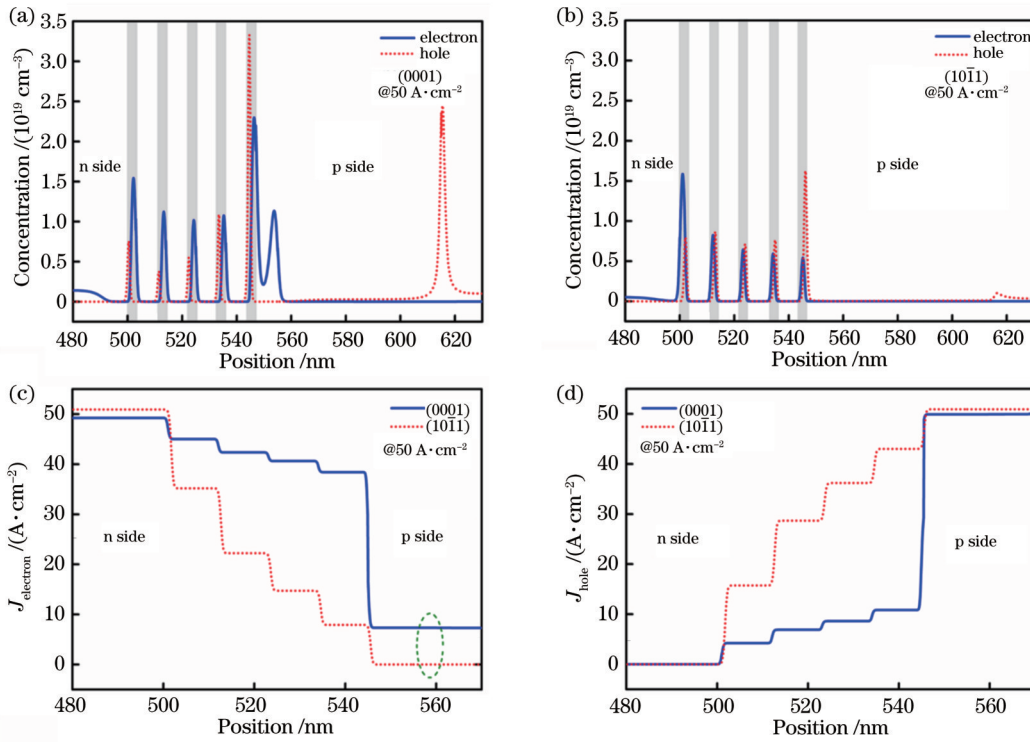


图 6 在电流密度为 50 A/cm^2 的条件下 GaN 基 LED MQWs 中的载流子浓度分布。(a) (0001) 面和 (b) $(10\bar{1}1)$ 面的载流子浓度分布; (c) 电子和 (d) 空穴的电流密度分布

Fig. 6 Carrier concentration distributions of MQWs in GaN-based LED at current density of 50 A/cm^2 . Carrier concentration distributions of (a) (0001) plane and (b) $(10\bar{1}1)$ plane; current density distributions of (c) electrons and (d) holes

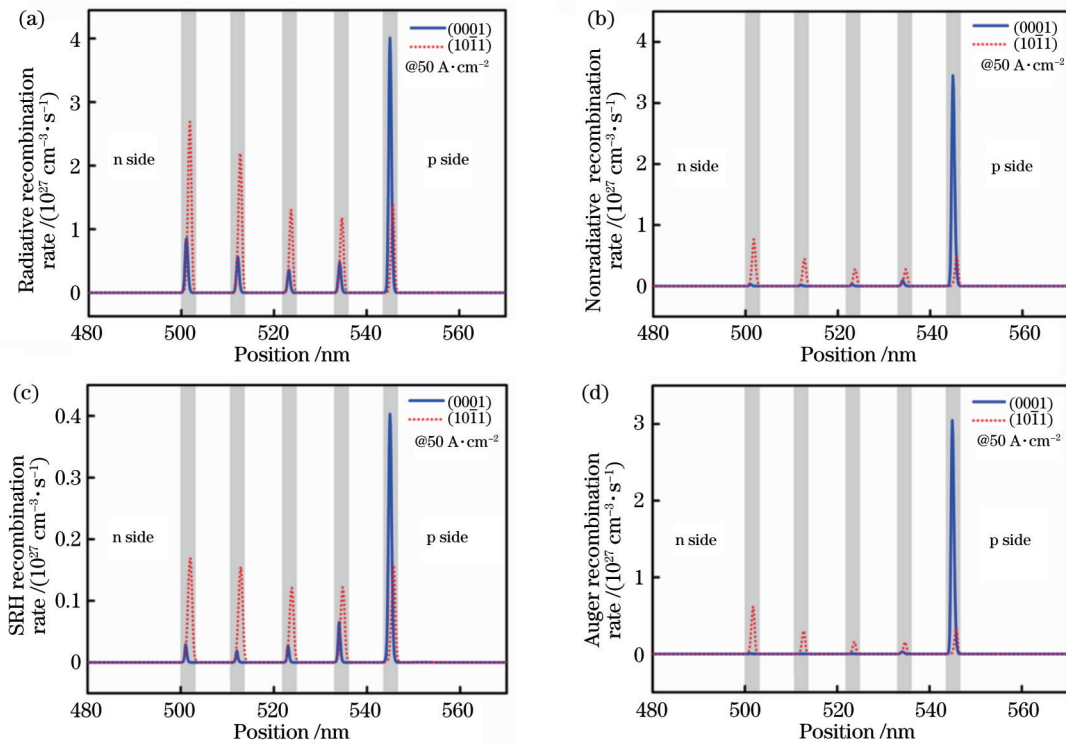


图 7 在电流密度为 50 A/cm^2 的条件下 (0001) 面和 $(10\bar{1}1)$ 面 GaN 基 MQWs LED 中的载流子复合分布。(a) 辐射复合率; (b) 非辐射复合率; (c) SRH 复合率; (d) Auger 复合率

Fig. 7 Carrier recombination profiles in GaN-based MQWs LEDs on (0001) plane and $(10\bar{1}1)$ plane at current density of 50 A/cm^2 . (a) Radiative recombination rate; (b) nonradiative recombination rate; (c) SRH recombination rate; (d) Auger recombination rate

$$\begin{cases} R_{\text{SRH}} \propto n \\ R_{\text{Rad}} \propto n^2 \\ R_{\text{Auger}} \propto n^3 \\ R = R_{\text{SRH}} + R_{\text{Rad}} + R_{\text{Auger}} + f(n) \end{cases}, \quad (4)$$

式中: n 为载流子浓度; R 、 R_{SRH} 、 R_{Rad} 和 R_{Auger} 分别为总复合、SRH 复合、辐射复合和俄歇复合的速率; $f(n)$ 表示载流子泄漏引起的非辐射复合。由式(4)可知, 俄歇复合速率与载流子浓度的三次幂成正比, 因此在大电流密度下, 俄歇复合在整个非辐射复合中占主要地位。此外, 与(0001) GaN 基 LED 相比, (10 $\bar{1}\bar{1}$) 面 MQWs 中的俄歇复合率显著降低, 这得益于 MQWs 中的平均载流子浓度的降低, 如图 6(b) 所示。

3.2.3 效率骤降

图 8 是模拟的(0001)面和(10 $\bar{1}\bar{1}$)面 GaN 基 LED 的电致发光谱和内量子效率(IQE)曲线。由图 8 可知, 在 InGaN QW 中的 In 摩尔分数相等的条件下, (10 $\bar{1}\bar{1}$)面 GaN 基 LED 的发光波长较(0001)面 LED 发生了蓝移, 波长漂移约为 10 nm, 这是因为该晶面取向中的极化强度明显减小, QCSE 减弱, 使得有效禁带宽

度增大^[32]。此外, 因电子泄漏减少, 辐射复合率提高, (10 $\bar{1}\bar{1}$)面 GaN 基 LED 的发光强度提高了 48%^[26]。图 8(b)中, (10 $\bar{1}\bar{1}$)面 LED 的 IQE 接近 70%, 高于(0001)面 LED, 这得益于(10 $\bar{1}\bar{1}$)面 MQWs 中辐射复合率的大大提升。与大量文献结果一致, (0001)面 GaN 基 LED 在极低的电流密度下达到了最大值, 而(10 $\bar{1}\bar{1}$)面 LED 的峰值出现在约 30 A/cm²处。电流密度^[7]可表示为

$$J = qd(An + Bn^2 + Cn^3), \quad (5)$$

式中: J 是注入电流密度; q 是单位电荷带电量; d 是 MQWs 的厚度。因此在注入电流密度一定且 MQWs 厚度不变的条件下, 半极性面 QW 中的载流子浓度降低[图 6(b)], 因此在相同的载流子浓度下, (10 $\bar{1}\bar{1}$)面 GaN 基 LED 可以在更高的电流密度下达到 IQE 最大值。同时, 当电流密度为 300 A/cm²时, (0001)面和(10 $\bar{1}\bar{1}$)面 LED 的效率骤降分别为 9% 和 42%, 这是因为在相同电流密度下, 半极性(10 $\bar{1}\bar{1}$)面 LED 有效抑制了电子的泄漏, 缓解了过饱和载流子的问题, 降低了非辐射复合率, 故半极性(10 $\bar{1}\bar{1}$)LED 有效改善了效率骤降^[33]。

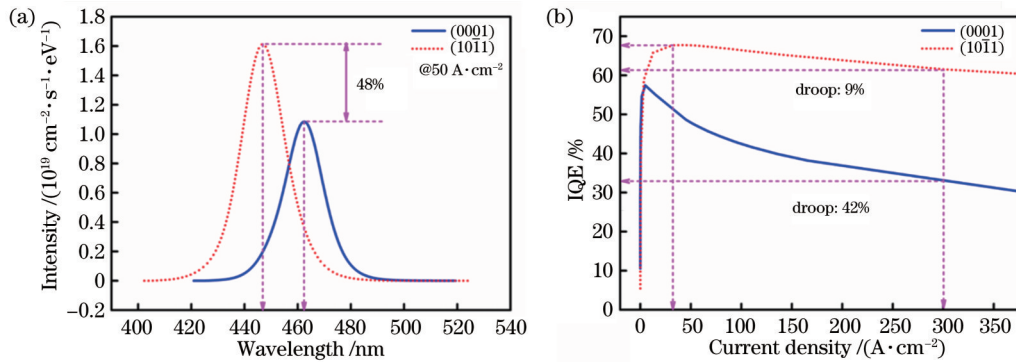


图 8 模拟的(0001)面和(10 $\bar{1}\bar{1}$)面 GaN 基 LED 的电致发光谱和 IQE 曲线。(a)电致发光谱;(b) IQE 曲线

Fig. 8 Simulated electroluminescence spectra and IQE curves of GaN-based LEDs on (0001) plane and (10 $\bar{1}\bar{1}$) plane.

(a) Electroluminescence spectra; (b) IQE curves

4 结 论

通过 InGaN/GaN SQW LED 模型研究了极性(0001)面和半极性(10 $\bar{1}\bar{1}$)面上极化电场的特点, 并分析了不同晶面上极化电场对 QW 中的能带分布以及电子和空穴波函数重叠的影响。结果显示半极性(10 $\bar{1}\bar{1}$)面 QW 的极化电场发生了反转, 能带向上弯曲, QW 中的电子靠近 n 端一侧。对极性(0001)面和半极性(10 $\bar{1}\bar{1}$)面蓝光 MQWs LED 的模拟结果与以上结果一致, 计算表明(10 $\bar{1}\bar{1}$)面 GaN QB 的平均势垒是 425.4 meV, 远高于(0001)面的 362 meV, 特别是与靠近 p 端的最后一个 QB 的对比更加明显。因此半极性(10 $\bar{1}\bar{1}$)面 InGaN QW 的静电场反转提高了 QB 限制电子逃逸的能力, 有利于抑制电子泄漏, 提升 MQWs 对载流子的限制能力。此外, 半极性(10 $\bar{1}\bar{1}$)面提高的电子阻挡势垒和降低的空穴注入势垒促进了载流子的匹配分布, 降低的载流子浓度抑制了俄歇复合, 进而提高

了发光效率。半极性(10 $\bar{1}\bar{1}$)面 InGaN QW 的静电场反转是继减小的极化电场之后又一提高 GaN 基 LED 光电性能的重要原因。

参 考 文 献

- [1] 李晋闯, 刘志强, 魏同波, 等. 中国半导体照明发展综述[J]. 光学学报, 2021, 41(1): 0116002.
Li J M, Liu Z Q, Wei T B, et al. Development summary of semiconductor lighting in China[J]. Acta Optica Sinica, 2021, 41(1): 0116002.
- [2] Cho J, Schubert E F, Kim J K. Efficiency droop in light-emitting diodes: challenges and countermeasures[J]. Laser & Photonics Reviews, 2013, 7(3): 408-421.
- [3] Iveland J, Martinelli L, Peretti J, et al. Direct measurement of Auger electrons emitted from a semiconductor light-emitting diode under electrical injection: identification of the dominant mechanism for efficiency droop[J]. Physical Review Letters, 2013, 110

- (17): 177406.
- [4] Kim M H, Schubert M F, Dai Q, et al. Origin of efficiency droop in GaN-based light-emitting diodes[J]. *Applied Physics Letters*, 2007, 91(18): 183507.
- [5] Wang C H, Chang S P, Chang W T, et al. Efficiency droop alleviation in InGaN/GaN light-emitting diodes by graded-thickness multiple quantum wells[J]. *Applied Physics Letters*, 2010, 97(18): 181101.
- [6] 田康凯, 楚春双, 毕文刚, 等. AlGaIn 基深紫外发光二极管管穴注入效率的提高途径[J]. *激光与光电子学进展*, 2019, 56(6): 060001.
Tian K K, Chu C S, Bi W G, et al. Hole injection efficiency improvement for AlGaIn-based deep ultraviolet light-emitting diodes[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2019, 56(6): 060001.
- [7] Feezell D F, Speck J S, DenBaars S P, et al. Semipolar (20 $\bar{1}$) InGaN/GaN light-emitting diodes for high-efficiency solid-state lighting[J]. *Journal of Display Technology*, 2013, 9(4): 190-198.
- [8] Funato M, Ueda M, Kawakami Y, et al. Blue, green, and amber InGaN/GaN light-emitting diodes on semipolar {11 $\bar{2}$ 2} GaN bulk substrates[J]. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2006, 45(26): L659-L662.
- [9] Wu Z Y, Lu S Q, Yang P, et al. Green-amber emission from high indium content InGaIn quantum wells improved by interface modification of semipolar (11 $\bar{2}$ 2) GaN templates[J]. *CrystEngComm*, 2019, 21(2): 244-250.
- [10] Becerra D L, Zhao Y J, Oh S H, et al. High-power low-droop violet semipolar (30 $\bar{3}$ 1) InGaIn/GaN light-emitting diodes with thick active layer design[J]. *Applied Physics Letters*, 2014, 105(17): 171106.
- [11] Wang T. Topical review: development of overgrown semi-polar GaIn for high efficiency green/yellow emission [J]. *Semiconductor Science and Technology*, 2016, 31(9): 093003.
- [12] Zhao Y J, Fu H Q, Wang G T, et al. Toward ultimate efficiency: progress and prospects on planar and 3D nanostructured nonpolar and semipolar InGaIn light-emitting diodes[J]. *Advances in Optics and Photonics*, 2018, 10(1): 246-308.
- [13] Chiu C H, Lin D W, Lin C C, et al. Reduction of efficiency droop in Semipolar (1101) InGaIn/GaN light emitting diodes grown on patterned silicon substrates[J]. *Applied Physics Express*, 2011, 4(1): 012105.
- [14] Scholz F, Schwaiger S, Däubler J, et al. Semipolar GaInN quantum well structures on large area substrates [J]. *Physica Status Solidi (b)*, 2012, 249(3): 464-467.
- [15] Vurgaftman I, Meyer J R, Ram-Mohan L R. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys[J]. *Journal of Applied Physics*, 2001, 89(11): 5815-5875.
- [16] Butté R, Grandjean N. Effects of polarization in optoelectronic quantum structures[M]//Wood C, Jena D. *Polarization effects in semiconductors*. Boston: Springer US, 2008: 467-511.
- [17] Takeuchi T, Amano H, Akasaki I. Theoretical study of orientation dependence of piezoelectric effects in wurtzite strained GaInN/GaN heterostructures and quantum wells [J]. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2000, 39(2R): 413-416.
- [18] 曹文斌, 王文义. 应变调制 InGaIn/GaN 多量子阱的光谱漂移研究[J]. *激光与光电子学进展*, 2020, 57(15): 152305.
Cao W Y, Wang W Y. Research on spectral shift of InGaIn/GaN multiple quantum well with strain modulation[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2020, 57(15): 152305.
- [19] Monavian M, Rashidi A, Feezell D. A decade of nonpolar and semipolar III-nitrides: a review of successes and challenges[J]. *Physica Status Solidi (a)*, 2019, 216(1): 1800628.
- [20] 贾甜甜, 董海亮, 贾志刚, 等. n 波导层铜组分对 GaIn 基绿光激光二极管光电性能的影响[J]. *红外与激光工程*, 2021, 50(10): 20200489.
Jia T T, Dong H L, Jia Z G, et al. Influence of indium composition of n waveguide layer on photoelectric performance of GaIn-based green laser diode[J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2021, 50(10): 20200489.
- [21] Sun P, Dang S H, Li T B, et al. Carrier transport improvement in blue InGaIn light-emitting diodes via reduced polarization using a band-engineered electron blocking layer[J]. *Journal of Display Technology*, 2014, 10(12): 1101-1105.
- [22] Dong H L, Jia T T, Liang J, et al. Improved carrier transport and photoelectric properties of InGaIn/GaN multiple quantum wells with wider well and narrower barrier[J]. *Optics & Laser Technology*, 2020, 129: 106309.
- [23] Fiorentini V, Bernardini F, Ambacher O. Evidence for nonlinear macroscopic polarization in III-V nitride alloy heterostructures[J]. *Applied Physics Letters*, 2002, 80(7): 1204-1206.
- [24] Vurgaftman I, Meyer J R. Band parameters for nitrogen-containing semiconductors[J]. *Journal of Applied Physics*, 2003, 94(6): 3675-3696.
- [25] Romanov A E, Baker T J, Nakamura S, et al. Strain-induced polarization in wurtzite III-nitride semipolar layers[J]. *Journal of Applied Physics*, 2006, 100(2): 023522.
- [26] Ji X L, Wei T B, Yang F H, et al. Efficiency improvement by polarization-reversed electron blocking structure in GaIn-based light-emitting diodes[J]. *Optics Express*, 2014, 22(3): A1001-A1008.
- [27] Mondal R K, Chatterjee V, Pal S. AlInGaIn-based superlattice p-region for improvement of performance of deep UV LEDs[J]. *Optical Materials*, 2020, 104: 109846.
- [28] Shih Y H, Chang J Y, Sheu J K, et al. Design of hole-blocking and electron-blocking layers in Al_xGa_{1-x}N-based UV light-emitting diodes[J]. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 2016, 63(3): 1141-1147.
- [29] 赵勇兵, 钱晨辰. 载流子复合机制对不同发光波长 InGaIn 基 LED 调制带宽的影响[J]. *激光与光电子学进*

- 展, 2021, 58(21): 2123001.
- Zhao Y B, Qian C C. Effect of carrier recombination mechanism on modulation bandwidth of InGaN-based LEDs with different emission wavelengths[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2021, 58(21): 2123001.
- [30] Karpov S. ABC-model for interpretation of internal quantum efficiency and its droop in III-nitride LEDs: a review[J]. *Optical and Quantum Electronics*, 2015, 47(6): 1293-1303.
- [31] Dai Q, Shan Q F, Cho J, et al. On the symmetry of efficiency-versus-carrier-concentration curves in GaInN/GaN light-emitting diodes and relation to droop-causing mechanisms[J]. *Applied Physics Letters*, 2011, 98(3): 033506.
- [32] Ryou J H, Yoder P D, Liu J P, et al. Control of quantum-confined stark effect in InGaN-based quantum wells[J]. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2009, 15(4): 1080-1091.
- [33] Monavarian M, Rashidi A, Aragon A, et al. Explanation of low efficiency droop in semipolar $(20\bar{2}\bar{1})$ InGaN/GaN LEDs through evaluation of carrier recombination coefficients[J]. *Optics Express*, 2017, 25(16): 19343-19353.