

# 量子阱渐变层材料及结构对 GaN 基 LED 性能的影响

王进军\*, 杨艳莹, 白斌辉, 徐晨昱

陕西科技大学电子信息与人工智能学院, 陕西 西安 710021

**摘要** In 组分渐变 InGaN/GaN 量子阱结构可以有效解决晶格失配所带来的 LED 发光效率降低的问题。采用 Silvaco 软件建立了 In 组分渐变量子阱结构数值计算模型, 研究了量子阱中渐变层 In 组分及渐变层厚度对极化电荷密度、载流子浓度及 LED 功率谱密度的影响。研究表明: 随着渐变层中 In 组分的增加, 载流子浓度以及极化电荷密度都在增大, 但极化电荷密度增幅较小, 峰值功率谱密度随着 In 组分增加的增长幅度逐渐减小; 功率谱密度随着渐变层顶层厚度的增加先增大后减小, 渐变层非顶层厚度不均匀时的功率谱密度比均匀时的功率谱密度小。

**关键词** 材料; GaN 基 LED; 量子阱; 渐变层; 功率谱密度

**中图分类号** TN312+.8 **文献标志码** A

**DOI:** 10.3788/AOS221395

## 1 引言

随着以 GaN 为主体的第三代半导体迅猛发展, 与之相关的照明产业也迅速兴起。寿命更长、发光效率更高、污染更小的 GaN 基白光 LED 迅速取代了传统照明光源<sup>[1]</sup>。

目前, GaN 基 LED 有源区大多采用 InGaN/GaN 量子阱结构, 但由于 III 族氮化物自身的物理特性<sup>[2-5]</sup>, InGaN/GaN 量子阱中 In 原子和 Ga 原子的尺寸存在较大的差异, InN 和 GaN 之间存在较大的晶格失配, 导致极化电场的产生, 引起能带倾斜: 一方面, 部分空穴逃逸, 导致载流子的辐射复合效率下降, 进而诱发量子斯塔克效应 (QCSE)<sup>[6]</sup>; 另一方面, In—N 比 Ga—N 的键能小, 更容易形成 In 间隙原子缺陷, 从而引入晶体缺陷, 降低了内量子效率<sup>[7]</sup>。渐变 InGaN/GaN 量子阱结构能够在很大程度上降低量子阱中的极化场强度, 减弱极化效应, 进而克服量子斯塔克效应<sup>[8-13]</sup>。

本文基于 Silvaco TCAD 软件中的 Atlas 工具构建了 In 组分渐变的量子阱结构 GaN 基 LED 的数值计算模型, 采用“控制变量”法模拟计算了渐变层中的 In 组分、渐变层顶层厚度和单层厚度对极化电荷密度、载流子浓度和 LED 功率谱密度的影响。

## 2 In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N 渐变层 GaN 基 LED 结构设计及建模

In 组分渐变的量子阱结构 GaN 基 LED 的数值计算模型如图 1 所示<sup>[14]</sup>, 在单量子阱 LED 结构中增加渐变层, 自下而上依次为 0.100 μm 的蓝宝石衬底、4.390 μm 的 N 型 GaN 层、In 组分渐变 In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N 层、0.003 μm 的恒定组分 In<sub>0.38</sub>Ga<sub>0.62</sub>N 层、0.100 μm 的 P 型 Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>N 势垒层、0.500 μm 的 P-GaN 层、5 nm 的 ITO 透明导电层。其中: N 型 GaN 的掺杂浓度为  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ; P 型 Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>N 势垒层的掺杂浓度为  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ; P 型 GaN 的掺杂浓度为  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ; 阳极欧姆接触电极材料为厚度为 5 nm/5 nm 的 Ti/Au 复合电极; 阴极欧姆接触电极材料为厚度为 5 nm/5 nm 的 Ti/Al 复合电极。In 组分渐变 In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N 层共分为 5 个子层, 自下而上分别用 S<sub>ub1</sub>~S<sub>ub5</sub> 表示, 对应的厚度依次记为 H<sub>1</sub>~H<sub>5</sub>, 与 S<sub>ub1</sub> 和 S<sub>ub5</sub> 对应的层分别称为渐变层底层和渐变层顶层。In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N 层的总厚度记为 H。

模拟计算中主要的物理模型包括复合模型、载流子统计模型、载流子输运模型、自洽薛定谔-泊松方程和内置电场的自发极化和压电极化模型。

复合模型主要用于计算电子与空穴的复合, 但发光复合主要是辐射复合, 器件工作时也包含非辐射复合, 即俄歇复合与肖特基-瑞利-霍尔 (SRH) 复合。载流子总复合速率为

收稿日期: 2022-06-29; 修回日期: 2022-08-15; 录用日期: 2022-09-22; 网络首发日期: 2022-10-02

基金项目: 2018 年陕西省教育厅科研计划专项项目 (18JK0103)

通信作者: \*wangjinjun@sust.edu.cn

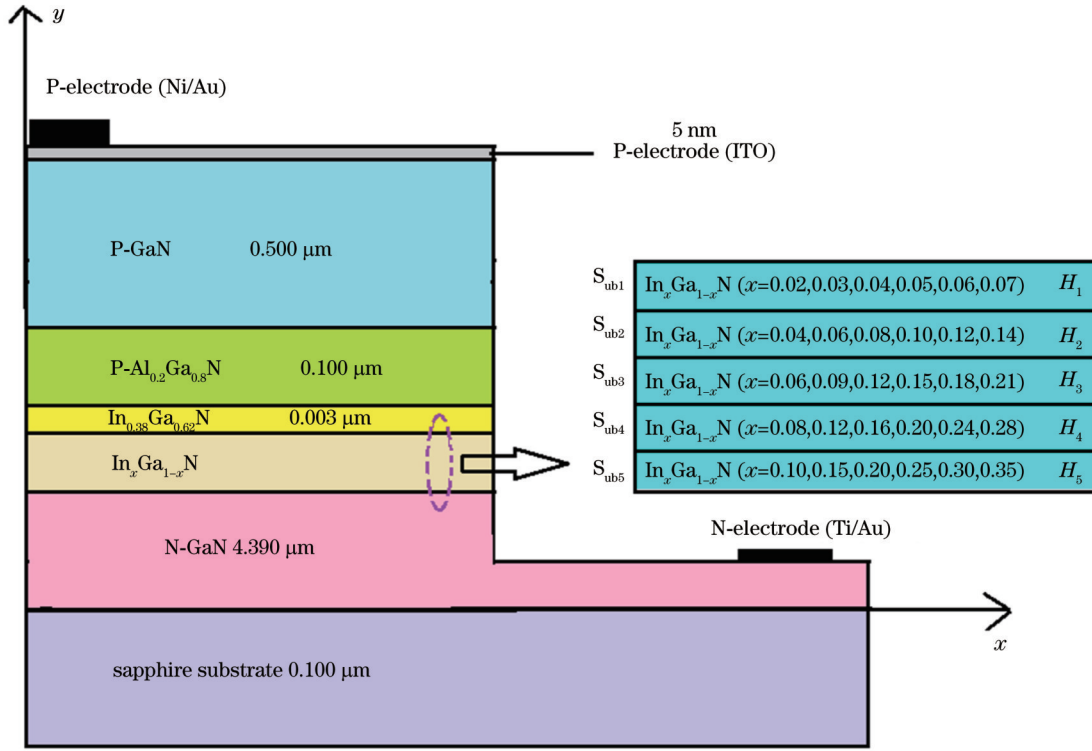


图 1 GaN 基 LED 结构图

Fig. 1 Diagram of GaN-based LED structure

$$R = R_{\text{rad}} + R_{\text{Auger}} + R_{\text{SRH}}, \quad (1)$$

式中:  $R$  为器件工作时电子与空穴的总复合速率;  $R_{\text{rad}}$  为辐射复合速率;  $R_{\text{Auger}}$  为俄歇复合速率;  $R_{\text{SRH}}$  为 SRH 复合速率。

SRH 复合模型为

$$R_{\text{SRH}} = \frac{pn - n_i^2}{T_{\text{aup0}} \left[ n + n_i \exp\left(\frac{E_{\text{trap}}}{kT_L}\right) \right] + T_{\text{aun0}} \left[ p + n_i \exp\left(\frac{-E_{\text{trap}}}{kT_L}\right) \right]}, \quad (2)$$

式中:  $p$  为空穴浓度;  $n$  为电子浓度;  $n_i$  为本征载流子浓度;  $T_{\text{aup0}}$ 、 $T_{\text{aun0}}$  分别为电子与空穴的寿命;  $E_{\text{trap}}$  为 SRH 复合时的陷阱能量;  $T_L$  为温度。

俄歇复合模型为

$$R_{\text{Auger}} = A_{\text{ugn}}(pn^2 - nm_i^2) + A_{\text{ugp}}(np^2 - pn_i^2), \quad (3)$$

式中:  $A_{\text{ugn}}$ 、 $A_{\text{ugp}}$  分别为电子和空穴的俄歇系数。

载流子统计模型主要用于计算电子浓度和空穴浓度, 电子与空穴服从费米-狄拉克(Fermi-Dirac)统计模型, 电子浓度  $n$  和空穴浓度  $p$  的计算公式分别为

$$n = N_C F_{1/2} \left( \frac{E_{\text{Fn}} - E_C}{kT_L} \right), \quad (4)$$

$$p = N_V F_{1/2} \left( \frac{E_V - E_{\text{Fp}}}{kT_L} \right), \quad (5)$$

式中:  $N_C$ 、 $N_V$  分别为导带和价带的有效态密度;  $E_{\text{Fn}}$ 、 $E_{\text{Fp}}$  分别为电子和空穴的费米能级;  $E_C$ 、 $E_V$  分别为导带底与价带顶的能量;  $F_{1/2}$  为费米分布函数;  $k$  为玻

尔兹曼常数。

载流子的输运方程也称为电流密度方程, 电子电流密度方程如下:

$$J_n = qn\mu_n E + qD_n \nabla n, \quad (6)$$

$$J_p = qp\mu_p E - qD_p \nabla p, \quad (7)$$

式中:  $\mu_n$ 、 $\mu_p$  分别为电子与空穴的迁移率;  $D_n$ 、 $D_p$  分别为电子与空穴的扩散系数;  $\nabla n$ 、 $\nabla p$  分别为电子与空穴的浓度梯度;  $J_n$ 、 $J_p$  分别为电子电流密度与空穴电流密度;  $E$  为电场强度;  $q$  为单位电荷量。

一维单电子薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (8)$$

式中:  $\hbar$  为约化普朗克常数;  $m^*$  为电子的有效质量;  $\psi(x)$  为电子波函数;  $E$  为电子总能量;  $V(x)$  为电子势能。

泊松方程描述静电势空间和空间电荷密度的分布:

$$\text{div}(\epsilon \nabla \psi') = \rho, \quad (9)$$

式中:  $\psi'$  为静电势;  $\epsilon$  为介电常数;  $\rho$  为空间电荷密度。

极化电场对 III 族氮化物多量子阱结构的光电子学特性能够产生很大的影响。其中  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  与  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  的自发极化系数可分别表示为

$$P_{\text{sp}}(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = xP_{\text{sp}}(\text{InN}) + (1-x)P_{\text{sp}}(\text{GaN}) + b_{\text{InGaN}}x(1-x), \quad (10)$$

$$P_{\text{sp}}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = xP_{\text{sp}}(\text{AlN}) + (1-x)P_{\text{sp}}(\text{GaN}) + b_{\text{AlGaN}}x(1-x), \quad (11)$$

式中： $P_{sp}(\text{InN})$ 、 $P_{sp}(\text{GaN})$ 、 $P_{sp}(\text{AlN})$  为自发极化系数； $b_{\text{InGa}_x\text{N}}$ 、 $b_{\text{AlGa}_x\text{N}}$  为对应三元化合物的弯曲系数。

根据 Vegard 定律， $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  与  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  的压电极化系数可表示为

$$P_{pz}(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = xP_{pz}(\text{InN}) + (1-x)P_{pz}(\text{GaN}), \quad (12)$$

$$P_{pz}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = xP_{pz}(\text{AlN}) + (1-x)P_{pz}(\text{GaN}), \quad (13)$$

式中： $P_{pz}(\text{InN})$ 、 $P_{pz}(\text{GaN})$ 、 $P_{pz}(\text{AlN})$  为压电极化系数。

量子阱内的 SRH 寿命估计为 1 ns，俄歇系数设置为  $1.0 \times 10^{-34} \text{ cm}^6/\text{s}$ ，光学复合速率为  $1.1 \times 10^{-8} \text{ cm}^3/\text{s}$ ，施主能级与受主能级分别为 0.080 eV 与 0.101 eV，采用 Gummel 非线性迭代进行求解。对每组模型分别输入步长为 0.05 V 的电压，最高输入电压为 5 V，计算分析在 5 V 电压下，有源区中极化电荷密度、载流子浓度、功率谱密度的数值特性。

### 3 渐变层中 In 组分对器件性能的影响

#### 3.1 In 组分均匀变化对极化电荷密度、载流子浓度以及功率谱密度的影响

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  渐变层 5 个子层厚度分别取  $H_1=H_2=H_3=H_4=1 \text{ nm}$ 、 $H_5=3 \text{ nm}$ ，渐变子层 In 组分  $x$  自下而上依次均匀增加 (表 1)，6 种模型情况下极化电荷密度、内部载流子浓度以及功率谱密度数值的计算结果如图 2~4 所示。

表 1 In 组分  $x$  均匀增加的模型参数表

Table 1 Model parameters for uniform increase of In component  $x$

Model	In component $x$				
	$S_{ub1}$	$S_{ub2}$	$S_{ub3}$	$S_{ub4}$	$S_{ub5}$
1	0.02	0.04	0.06	0.08	0.10
2	0.03	0.06	0.09	0.12	0.15
3	0.04	0.08	0.12	0.16	0.20
4	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25
5	0.06	0.12	0.18	0.24	0.30
6	0.07	0.14	0.21	0.28	0.35
7	0.38	0.38	0.38	0.38	0.38

从图 2 可以看出，在 In 组分自下而上依次均匀增加的模型情况下，渐变层非顶层极化电荷密度随着 In 组分的增加而不断增大，而渐变层顶层极化电荷浓度随 In 组分的增加逐渐减小。 $\text{In}_{0.38}\text{Ga}_{0.62}\text{N}$  层与 P 型  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$  势垒层交界 (4.400  $\mu\text{m}$ ) 处，极化电荷密度再次随着 In 组分的增加而增大。产生上述结果的主要原因是：在  $S_{ub1} \sim S_{ub4}$  渐变层区域，In 组分的增加使得晶格失配加剧，进而增强了极化电场<sup>[15]</sup>，极化电荷密度随着 In 组分的递增逐渐增大； $S_{ub5}$  渐变层顶层区域 In 组分越大，其与恒定 In 组分的  $\text{In}_{0.38}\text{Ga}_{0.62}\text{N}$  层的晶格失配程度降低，极化减弱，极化电荷浓度降低；而在

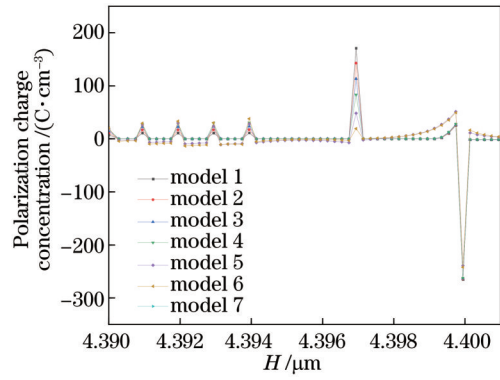


图 2 In 组分不同极化电荷密度

Fig. 2 Different polarization charge densities of In components

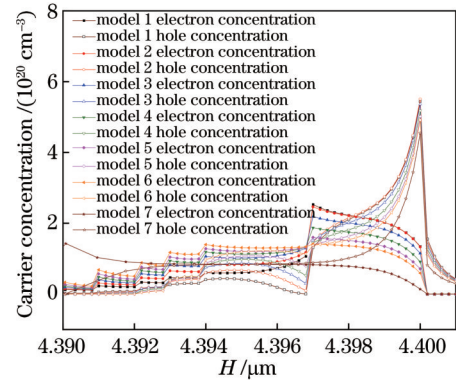


图 3 In 组分不同的内部载流子浓度分布

Fig. 3 Distribution of internal carrier concentration of different In components

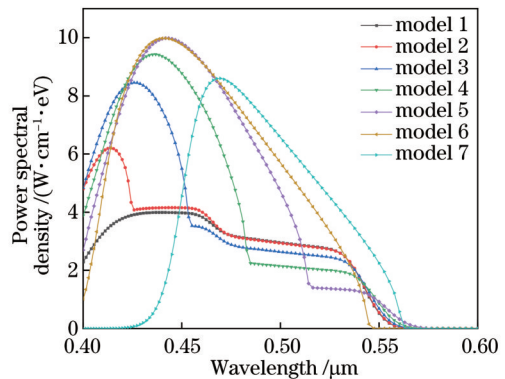


图 4 In 组分不同的功率谱密度图

Fig. 4 Power spectral density for different In components

$\text{In}_{0.38}\text{Ga}_{0.62}\text{N}$  层与 P 型  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$  势垒层交界区域，由于同时存在 InGaN/GaN 异质结与 AlGaIn/GaN 异质结，InGaIn/GaN 异质结的压电极化效应与 AlGaIn/GaN 异质结自发极化效应叠加增强，极化电荷密度增大<sup>[16]</sup>。

从图 3 可以看出，在 In 组分自下而上依次均匀增加的模型情况下，载流子浓度随着渐变层 In 组分的增加均逐渐增大，但增幅逐渐减小。这主要是因为 In 组分的增大使 InGaIn/GaN 量子阱的深度增大，禁带宽度

减小,载流子浓度上升,但由于增大 In 组分的同时会带来极化效应的增强,因此在 In 组分增大至一定值时,量子阱中的载流子浓度不会再有明显的增大。在 4.397  $\mu\text{m}$  之后,载流子浓度随 In 组分的增加而减小,这主要是由于量子阱在  $\text{In}_{0.38}\text{Ga}_{0.62}\text{N}$  处存在大量电子与空穴,载流子发生复合。可以看出,In 组分的增大可以引起复合效率的提高。

从图 4 可以看出,在 In 组分自下而上依次均匀增加的模型情况下,渐变层中 In 组分越多,峰值功率谱密度越高,但增幅逐渐减小,这与文献[17]中实验结果基本保持一致。峰值功率谱密度的增幅逐渐减小可能是由 In 组分多的 InGaN 薄膜中应变分布不均匀造成的<sup>[18]</sup>。对比 model 1~7 可以看出,采用 model 4~6 的渐变方法可以明显增大功率谱密度,但会引起光谱向短波方向移动。对比 model 4~6 的功率谱密度及半峰全宽可知,半峰全宽会随着 In 组分的增加而增大,引起单色性的变化。综合比较可得,model 4 的参数能够取得较好的器件性能及单色性。除此之外,渐变层底层 In 组分在 0.02~0.05 时出现多峰和光谱线展宽的现象,这是由于:In 组分间隔较小引起峰峰之间相互叠加的现象,使得出现多峰,且光谱线展宽,其实质是光的频率发生了变化,各种新的频率成分的光的叠加导致了光谱线展宽<sup>[19]</sup>。

### 3.2 渐变层顶层 In 组分变化对极化电荷密度、载流子浓度以及功率谱密度的影响

通过分析 3.1 节的数值计算结果,可以发现将 In 组分的增加梯度设置为 0.05 时,能够获取较好的综合结果。因此  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  渐变层 5 个子层厚度仍分别取  $H_1=H_2=H_3=H_4=1\text{ nm}$ 、 $H_5=3\text{ nm}$ 、 $S_{\text{ub}1}\sim S_{\text{ub}4}$  渐变子层 In 组分  $x$  分别取 0.05、0.10、0.15、0.20 固定不变,增加  $S_{\text{ub}5}$  渐变层顶层 In 组分(表 2),4 种模型情况下极化电荷密度、载流子浓度以及功率谱密度数值计算结果如图 5~7 所示。

表 2 渐变层顶层 In 组分  $x$  的模型参数表

Table 2 Model parameters of In component  $x$  at top layer of gradient layer

Model	In component $x$				
	$S_{\text{ub}1}$	$S_{\text{ub}2}$	$S_{\text{ub}3}$	$S_{\text{ub}4}$	$S_{\text{ub}5}$
8	0.05	0.10	0.15	0.20	0.23
9	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25
10	0.05	0.10	0.15	0.20	0.27
11	0.05	0.10	0.15	0.20	0.29

从图 5 可以看出:渐变层顶层极化电荷密度随  $S_{\text{ub}5}$  渐变层 In 组分的增加而增大;渐变层顶层与恒定组分  $\text{In}_{0.38}\text{Ga}_{0.62}\text{N}$  层之间的极化电荷密度随着  $S_{\text{ub}5}$  渐变层顶层 In 组分的增加而减小,这是因为  $S_{\text{ub}5}$  渐变层顶层 In 组分越大,其与恒定 In 组分的  $\text{In}_{0.38}\text{Ga}_{0.62}\text{N}$  层的晶格失配程度就减小,极化越弱,极化电荷密度越低。

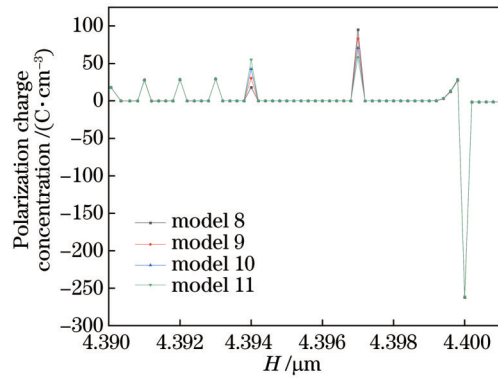


图 5 渐变层顶层 In 组分不同极化电荷密度  
Fig. 5 Diagram of polarization charge density for different In component at top layer of gradient layer

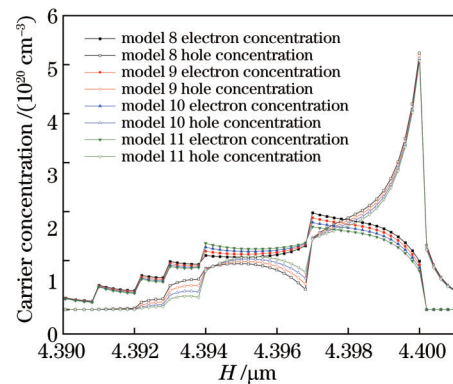


图 6 渐变层顶层 In 组分不同的内部载流子浓度  
Fig. 6 Distribution of internal carrier concentration for different In component at top layer of gradient layer

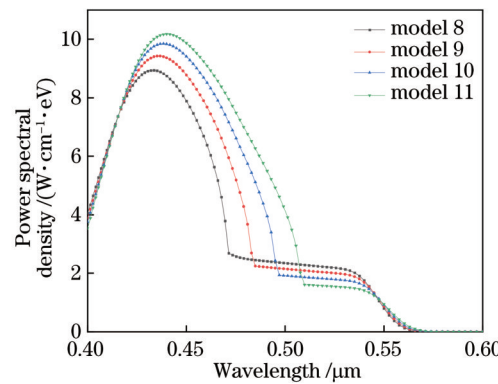


图 7 渐变层顶层 In 组分不同的功率谱密度图  
Fig. 7 Power spectral density for different In component at top layer of gradient layer

从图 6 可以看出:在  $S_{\text{ub}1}\sim S_{\text{ub}5}$  区域,载流子浓度随  $S_{\text{ub}5}$  渐变层 In 组分的增加而增大;在恒定层  $\text{In}_{0.38}\text{Ga}_{0.62}\text{N}$  处,载流子浓度随  $S_{\text{ub}5}$  渐变层顶层 In 组分的增加而减小。这是由于载流子发生复合,并且复合效率随  $S_{\text{ub}5}$  渐变层顶层 In 组分的增加而提高。

从图 7 可以看出,峰值功率谱密度与半峰全宽都随着  $S_{\text{ub}5}$  渐变层顶层 In 组分的增加而增大,产生这种

现象的原因是:随着  $S_{ub5}$  渐变层顶层 In 组分的增大,其量子阱深度增加,使载流子的复合加强,功率谱密度变大;同时,随着 In 组分的增大,波长发生红移,光谱线再次展宽。

## 4 渐变层厚度对器件性能的影响

### 4.1 渐变层顶层厚度对极化电荷密度、载流子浓度以及功率谱密度的影响

$In_xGa_{1-x}N$  渐变层 5 个子层  $S_{ub1} \sim S_{ub5}$  的 In 组分  $x$  分别取 0.05、0.10、0.15、0.20、0.25,  $S_{ub1} \sim S_{ub4}$  子层厚度分别取  $H_1=H_2=H_3=H_4=1$  nm, 增加  $S_{ub5}$  渐变层顶层厚度  $H_5$  (表 3), 4 种模型情况下极化电荷密度、载流子浓度和功率谱密度数值的计算结果如图 8~10 所示。

表 3 渐变层顶层厚度增加的模型参数表

Model	$H_1$	$H_2$	$H_3$	$H_4$	$H_5$
12	1	1	1	1	2
13	1	1	1	1	3
14	1	1	1	1	4
15	1	1	1	1	5

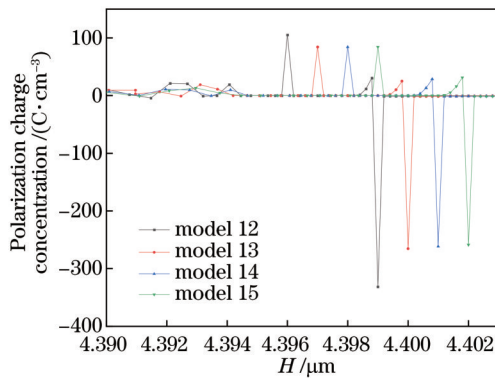


图 8 渐变层顶层厚度不同的极化电荷密度

Fig. 8 Polarization charge density for different thickness of top layer of gradient layer

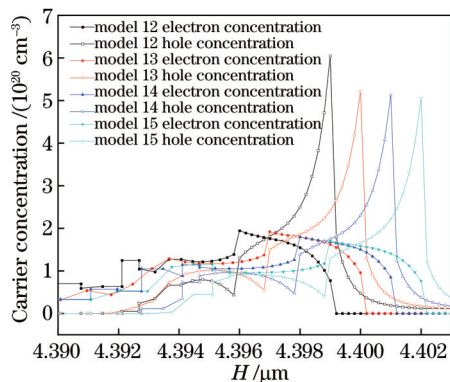


图 9 渐变层顶层厚度不同的内部载流子浓度分布

Fig. 9 Distribution of internal carrier concentration for different thickness of top layer of gradient layer

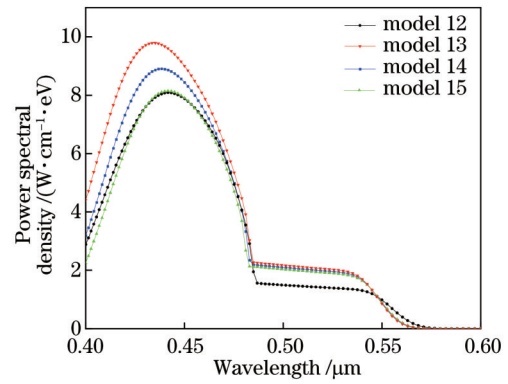


图 10 渐变层顶层厚度不同的功率谱密度

Fig. 10 Power spectral density for different thickness of top layer of gradient layer

从图 8 可以看出:在  $S_{ub1} \sim S_{ub5}$  区域,其极化电荷浓度相差较小,但在  $S_{ub5}$  渐变层顶层与恒定 In 组分的  $In_{0.38}Ga_{0.62}N$  界面处,极化电荷浓度随着  $S_{ub5}$  渐变层顶层厚度的增加不断减小,并且减小幅度也逐渐变小,其主要原因是:  $S_{ub5}$  渐变层顶层厚度的增加能够使得晶格失配产生的应力得到充分释放,极化减弱,极化电荷密度减小。

从图 9 可以看出,在  $S_{ub1} \sim S_{ub5}$  区域,载流子浓度随  $S_{ub5}$  渐变层顶层厚度的增大而减小,其减小幅度较小。在发生复合之后,当  $H_5=2$  nm 时,仍有较大的载流子浓度,这可能是由于:顶层厚度过薄,发生电子隧穿,复合效率降低<sup>[20]</sup>。

从图 10 可以看出:随着  $S_{ub5}$  渐变层顶层厚度的增大,峰值功率谱密度出现先增大后减小的变化趋势。根据图 9,载流子复合效率逐渐提高且提高的趋势逐渐变缓,功率谱密度先增大,顶层厚度的进一步增加又会导致电子泄漏,空穴浓度降低,从而导致复合速率降低,功率谱密度减小<sup>[21-23]</sup>。

### 4.2 渐变层非顶层厚度对极化电荷密度、载流子浓度以及功率谱密度的影响

$In_xGa_{1-x}N$  渐变层 5 个子层  $S_{ub1} \sim S_{ub5}$  的 In 组分  $x$  分别取 0.05、0.10、0.15、0.20、0.25, 由于渐变层  $S_{ub1}$ 、 $S_{ub2}$  中 In 组分较小,带来的极化效应也较弱,此处不对其进行计算分析。  $S_{ub1}$ 、 $S_{ub2}$  子层厚度分别取  $H_1=1$  nm、 $H_2=1$  nm 以及  $S_{ub5}$  渐变层顶层厚度取  $H_5=3$  nm, 改变  $S_{ub3}$ 、 $S_{ub4}$  子层厚度 (表 4), 5 种模型情况下的极化电荷密度、载流子浓度以及功率谱密度数值计算结果如图 11~13 所示。

从图 11 可以看出,渐变层非顶层厚度均匀结构 model 16 中极化电荷密度与非均匀的结构 model 17~20 无明显差别。只有在  $S_{ub5}$  渐变层顶层与恒定 In 组分的  $In_{0.38}Ga_{0.62}N$  界面处, model 16 的极化电荷略少于其余结构:一方面是由于渐变层非顶层厚度均匀结构 model 16 中材料位错密度更低,应力更小,极化效应减弱;另一方面是由于 model 16 中渐变层非顶层厚度都

表 4 渐变层非顶层厚度改变的模型参数表

Table 4 Model parameters for changing thickness of non top layer of gradient layer unit: nm

Model	$H_1$	$H_2$	$H_3$	$H_4$	$H_5$
16	1	1	1	1	3
17	1	1	1	2	3
18	1	1	1	3	3
19	1	1	2	1	3
20	1	1	3	1	3

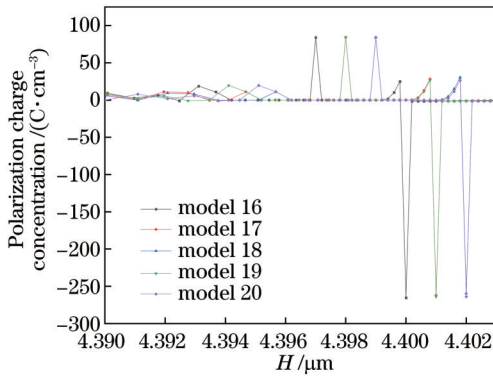


图 11 渐变层非顶层单层厚度不同的极化电荷密度

Fig. 11 Polarization charge density for different single layer thickness of non top layer of gradient layer

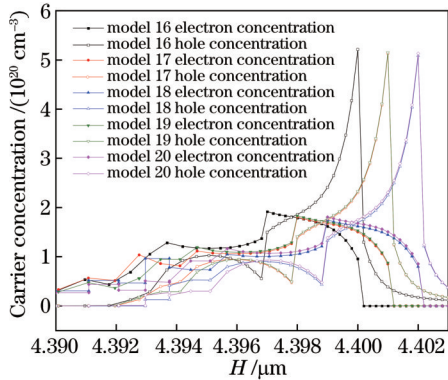


图 12 渐变层非顶层单层结构不同的内部载流子分布图

Fig. 12 Internal carrier distribution for different single layer structure of non top layer of gradient layer

为 1 nm 时能够有效减小 In 组分带来的应力, In 组分的增加使得厚度增加, 根据 3.1 节的分析, 极化效应增强。除此之外, 可以看出, model 17 与 model 19, model 18 与 model 20 的极化电荷在  $S_{ub5}$  之后几乎保持一致。可以看出, 增大渐变层非顶层厚度对极化电荷密度的影响较小。

从图 12 可以看出, 在  $S_{ub1} \sim S_{ub5}$  区域, 非顶层厚度均匀结构 model 16 中载流子浓度大于非顶层厚度不一致的结构 model 17~20, 这是由于 model 17~20 单层厚度的增加引入了缺陷, 而缺陷会形成大量复合中心, 之后捕获载流子发生非辐射复合, 从而使注入有源区发生辐射复合的自由载流子减少, 因此, 在非辐射复合

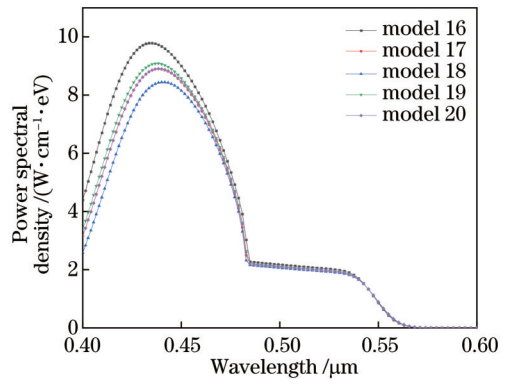


图 13 渐变层非顶层单层厚度不同的功率谱密度图

Fig. 13 Power spectral density for different thickness of non top layer of gradient layer

之后, model 16~20 的载流子浓度几乎一致。

从图 13 可以看出: 相比于渐变层非顶层厚度不均匀结构 model 17~20, 渐变层非顶层厚度均匀结构 model 16 的位错与缺陷相对较小, 能够减少非辐射复合, 使功率谱密度增大; 对比 model 16~18 可以看出, 功率谱密度随着  $H_4$  厚度的增加而减小。分别对比 model 17 与 model 19, model 18 与 model 20, 可以发现: 当增加厚度一致时,  $S_{ub3}$  层的功率谱密度优于  $S_{ub4}$  层。另外, 渐变层非顶层厚度不均匀结构 model 17~20 存在谱线红移, 其主要原因是: 渐变层非顶层厚度均匀结构中晶格失配带来的应力能够被 1 nm 结构层抵消, 而在厚度不均匀结构中增加厚度也在一定程度上增加了 In 组分, 使得能带更弯曲, 有效带隙变窄, 波长红移<sup>[24]</sup>。

## 5 结 论

本文基于 Silvaco TCAD 软件构建了 In 组分渐变的量子阱结构 GaN 基 LED 的数值计算模型, 采用“控制变量”法模拟计算了渐变层中的 In 组分、渐变层顶层厚度以及单层厚度对极化电荷密度、载流子浓度和 LED 功率谱密度的影响。随着渐变层中 In 组分的增大, 载流子浓度以及极化电荷密度都在增大, 但极化电荷密度增幅较小, 随着 In 组分的增大, 峰值功率谱密度的增加幅度逐渐减小; 功率谱密度随着渐变层顶层厚度的增加先增大后减小, 渐变层非顶层厚度不均匀时的功率谱密度比均匀时的功率谱密度小。研究结果对高效 GaN 基 LED 的设计、开发具有重要的指导价值。

## 参 考 文 献

[1] 李晋闽, 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] Dong L, Mantese J V, Avrutin V, et al. Strain induced variations in band offsets and built-in electric fields in InGaN/

- GaN multiple quantum wells[J]. *Journal of Applied Physics*, 2013, 114(4): 043715.
- [3] Zahir N, Talik N A, Harun H N, et al. Improved performance of InGaN/GaN LED by optimizing the properties of the bulk and interface of ITO on p-GaN[J]. *Applied Surface Science*, 2021, 540: 148406.
- [4] 朱丽虹, 蔡加法, 李晓莹, 等. In 组分渐变提高 InGaN/GaN 多量子阱发光二极管发光性能[J]. *物理学报*, 2010, 59(7): 4996-5001.
- Zhu L H, Cai J F, Li X Y, et al. Luminous performance improvement of InGaN/GaN light-emitting diodes by modulating In content in well layers[J]. *Acta Physica Sinica*, 2010, 59(7): 4996-5001.
- [5] Liu J X, Liang H W, Xia X C, et al. Indium incorporation induced morphological evolution and strain relaxation of high indium content InGaN epilayers grown by metal-organic chemical vapor deposition[J]. *Crystal Growth & Design*, 2017, 17(6): 3411-3418.
- [6] Ambacher O. Growth and applications of group III-nitrides[J]. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 1998, 31(20): 2653-2710.
- [7] 张连, 魏学成, 路坤熠, 等. 能带调控提高 GaN/InGaN 多量子阱蓝光 LED 效率研究[J]. *中国科学: 物理学 力学 天文学*, 2015, 45(6): 64-69.
- Zhang L, Wei X C, Lu K Y, et al. Investigation of the GaN-based light-emitting diodes with engineered energy band in InGaN multiple quantum wells[J]. *Scientia Sinica (Physica, Mechanica & Astronomica)*, 2015, 45(6): 64-69.
- [8] 刘轩, 王美玉, 李毅, 等. 阶梯状量子阱结构对蓝光 GaN 基 LED 性能的改善[J]. *半导体技术*, 2019, 44(10): 767-772.
- Liu X, Wang M Y, Li Y, et al. Performance improvement of GaN-based blue LED with step-like quantum well structure[J]. *Semiconductor Technology*, 2019, 44(10): 767-772.
- [9] Zhou Q B, Wang H, Xu M S, et al. Quantum efficiency enhancement of a GaN-based green light-emitting diode by a graded indium composition p-type InGaN layer[J]. *Nanomaterials*, 2018, 8(7): 512.
- [10] Yamada H, Iso K, Saito M, et al. Compositional dependence of nonpolar m-plane  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  light emitting diodes[J]. *Applied Physics Express*, 2008, 1(4): 041101.
- [11] Roccato N, Piva F, de Santi C, et al. Modeling the electrical characteristics of InGaN/GaN LED structures based on experimentally-measured defect characteristics[J]. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2021, 54(42): 425105.
- [12] 黄晶, 陈鹏. 具有卓越光输出效率的 GaN 基 LED 模拟研究[J]. *灯与照明*, 2021, 45(3): 44-46.
- Huang J, Chen P. With excellent optical output efficiency simulation of GaN based LED[J]. *Light & Lighting*, 2021, 45(3): 44-46.
- [13] 王梦琦, 栾梦恺, 孙虎, 等. InGaN 多量子阱中载流子的传输和复合发光机制[J]. *山东科学*, 2013, 26(5): 18-21.
- Wang M Q, Luan M K, Sun H, et al. Transfer and composite photoluminescence mechanism of the carriers in InGaN multiple quantum wells[J]. *Shandong Science*, 2013, 26(5): 18-21.
- [14] 张恒, 曲爽, 王成新, 等. 一种无荧光粉的高效白光 LED 外延结构及其生长方法: CN104900771A[P]. 2015-09-09.
- Zhang H, Qu S, Wang C X, et al. High-efficiency white light LED epitaxial structure having no fluorescent powder and growing method thereof: CN104900771A[P]. 2015-09-09.
- [15] Bourim E M, Han J I. Electrical characterization and thermal admittance spectroscopy analysis of InGaN/GaN MQW blue LED structure[J]. *Electronic Materials Letters*, 2015, 11(6): 982-992.
- [16] Lan T, Yao S, Zhou G Z, et al. Effect of strain modification on crystallinity and luminescence of InGaN/GaN multiple quantum wells grown by MOCVD[J]. *Applied Physics A*, 2018, 124(9): 619.
- [17] 李洪斌. In 组分渐变的 InGaN/GaN 多量子阱结构光学特性[D]. 济南: 山东大学, 2019: 42-46.
- Li H B. Optical properties of InGaN/GaN multiple quantum wells with a gradually changing in content[D]. Jinan: Shandong University, 2019: 42-46.
- [18] Roberts C, Yan Q M, Miao M S, et al. Confinement effects on valence-subband character and polarization anisotropy in  $(1\bar{1}\bar{2})$  semipolar InGaN/GaN quantum wells[J]. *Journal of Applied Physics*, 2012, 111(7): 073113.
- [19] 李芸, 杨治美, 马瑶, 等. 影响 GaN 基蓝光 LED 能带结构与光谱特性关系的仿真研究[J]. *光散射学报*, 2017, 29(3): 271-276.
- Li Y, Yang Z M, Ma Y, et al. Simulation study of influence on relationship between energy band structure and spectral characteristics of blue GaN-based LED[J]. *The Journal of Light Scattering*, 2017, 29(3): 271-276.
- [20] 刘诗文, 郭霞, 艾伟伟, 等. InGaN/GaN 多量子阱蓝光 LED 电学特性研究[J]. *半导体光电*, 2006, 27(3): 240-243.
- Liu S W, Guo X, Ai W W, et al. Electrical characteristics of InGaN/GaN MQW blue light-emitting diodes[J]. *Semiconductor Optoelectronics*, 2006, 27(3): 240-243.
- [21] 郭亮, 郭亚楠, 羊建坤, 等. 量子垒高度对深紫外 LED 调制带宽的影响[J]. *发光学报*, 2022, 43(1): 1-7.
- Guo L, Guo Y N, Yang J K, et al. Effect of barrier height on modulation characteristics of AlGaIn-based deep ultraviolet light-emitting diodes[J]. *Chinese Journal of Luminescence*, 2022, 43(1): 1-7.
- [22] 刘诗涛, 王立, 伍菲菲, 等. InGaN/GaN 多量子阱 LED 载流子泄漏与温度关系研究[J]. *发光学报*, 2017, 38(1): 63-69.
- Liu S T, Wang L, Wu F F, et al. Temperature-dependent carrier leakage in InGaN/GaN multiple quantum wells light-emitting diodes[J]. *Chinese Journal of Luminescence*, 2017, 38(1): 63-69.
- [23] Cheng L W, Ma J, Cao C R, et al. Improved carrier injection and confinement in InGaN light-emitting diodes containing GaN/AlGaIn/GaN triangular barriers[J]. *Chinese Physics B*, 2018, 27(8): 52-56.
- [24] 曹文斌, 王文义. 应变调制 InGaN/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 InGaN/GaN multiple quantum well with strain modulation[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2020, 57(15): 152305.

# Effect of Material and Structure of Quantum Well Gradient Layer on Performance of GaN-Based LED

Wang Jinjun\*, Yang Yanying, Bai Binhui, Xu Chenyu

*School of Electronic Information and Artificial Intelligence, Shaanxi University of Science & Technology, Xi'an 710021, Shaanxi, China*

## Abstract

**Objective** The active region of conventional GaN-based LEDs mostly adopts the InGaN/GaN quantum well structure. However, due to the large size difference between In and Ga atoms, there is a large lattice mismatch between InN and GaN, which leads to the generation of polarized electric field and tilted energy band. On the one hand, some holes escape, which results in decreased radiation recombination efficiency, thus inducing the quantum-confined Stark effect. On the other hand, since the bond energy of In—N is smaller than that of Ga—N, it is easy to form in gap atoms, thereby introducing crystal defects and reducing the internal quantum efficiency. The In composition gradient InGaN/GaN quantum well structure can solve the LED luminous efficiency reduction caused by lattice mismatch. However, the effects of In composition and thickness of the gradient layer on polarization charge concentration, carrier concentration, and LED power spectral density are still unclear. It is particularly important to study the effects of the material and structure of the quantum well gradient layer on the performance of GaN-based LED for improving the efficiency of GaN-based LEDs.

**Methods** The numerical calculation model of GaN-based LED with In component gradient quantum well structure is built by Silvaco TCAD software. Based on the composite model, carrier statistical model, carrier transport model, self-consistent Schrodinger Poisson equation, and spontaneous polarization and piezoelectric polarization model of the built-in electric field, the effects of In component in the gradient layer and thickness of the top layer of the gradient layer on the polarization charge concentration, carrier concentration, and power spectral density are simulated and calculated. Firstly, the thickness of the gradient layer keeps constant, and the In composition of the gradient layer is changed. The changes of polarization charge concentration, carrier concentration, and power spectral density with In composition are calculated and analyzed. Secondly, the influence of the In composition on the top layer of the gradient layer is analyzed by keeping the In composition of other layers unchanged. Finally, the better In component in the above results is selected to analyze and calculate the influence of the thickness of the top layer of the graded layer.

**Results and Discussions** The polarization charge concentration at the non-top layer of the gradient layer increases with the rising In composition of the gradient layer, and the polarization charge concentration at the top layer of the gradient layer gradually decreases with the increase in the In composition (Fig. 2). This is mainly because the lattice mismatch in the non-top layer increases, the polarization electric field improves, and the polarization charge concentration increases with the rising In composition. However, the larger In composition at the top layer of the gradient layer leads to a smaller lattice mismatch with the  $\text{In}_{0.38}\text{Ga}_{0.62}\text{N}$  layer, weaker polarization, and lower polarization charge concentration. The carrier concentration and power spectral density increase with the rising In composition in the gradient layer (Figs. 3 and 4), which is mainly because the increase in In composition increases the depth of InGaN/GaN quantum well and the carrier concentration, and enhances recombination efficiency. The interface charge between the top layer of the gradient layer and  $\text{In}_{0.38}\text{Ga}_{0.62}\text{N}$  decreases with the increasing thickness of the top layer of the gradient layer (Fig. 8). This is mainly because the increase in the thickness of the top layer of the sub5 gradient layer can fully release the stress generated by the lattice mismatch, weaken the polarization, and reduce the polarization charge density. The carrier concentration also decreases with the increase in the thickness of the top layer of the gradient layer (Fig. 9), and the peak power spectral density increases first and then decreases with the rising thickness of the top layer of the gradient layer (Fig. 10). This is because when the thickness of the top layer of the gradient layer is too small, electron tunneling may occur to reduce the carrier concentration and the recombination efficiency. On the contrary, when the thickness of the top layer of the gradient layer is too large, it will lead to the electron leakage, hole concentration and recombination rate will be reduced, and the power spectral density decreases. The peak power spectral density of the non-uniform thickness structure of the gradient layer is smaller than that of the non-uniform thickness structure of the top layer (Fig. 13). This is mainly because the dislocation and defect of the non-uniform thickness structure of the gradient layer are relatively small, which can reduce non-radiative recombination and increase the power spectral density.

**Conclusions** The thickness of In component in the gradient layer exerts a significant effect on the performance of



GaN-based LED with In component gradient quantum well structure. With the increasing In component in the gradient layer, the peak power spectral density of LED decreases gradually with the increase in In component. The power spectral density first increases and then decreases with the rising thickness of the top layer of the gradient layer. The power spectral density for the not uniform thickness of the non-top layer of the gradient layer is smaller than that for the uniform thickness. Reasonable control of the In composition and thickness of the gradient layer can address LED luminous efficiency reduction caused by lattice mismatch. The results can provide guidance for the design and development of high-efficiency GaN-based LEDs.

**Key words** materials; GaN-based LED; quantum well; gradient layer; power spectral density