



非等温模型下多量子势垒结构对 LED 性能的影响

王天虎^①, 徐进良^{②*}, 王晓东^{②*}

① 华北电力大学能源的安全与清洁利用北京市重点实验室, 北京 102206;

② 华北电力大学低品位能源多相流与传热北京市重点实验室, 北京 102206

* 联系人, E-mail: xjl@ncepu.edu.cn; wangxd99@gmail.com

2012-04-26 收稿, 2012-06-04 接受

国家自然科学基金-广东省联合基金重点项目(U1034004)、国家杰出青年科学基金(50825603)、国家重点基础研究发展计划(2011CB710703)和中央高校基本科研业务费专项资金(11ZG01)资助

摘要 引入了多量子势垒结构作为发光二极管的电子阻挡层来提高其性能. 在非等温多物理场耦合模型下, 对芯片的内量子效率、发热特性、光谱特性、以及光电转换效率做了系统分析. 结果表明: 发光二极管的内量子效率及光电转换效率得到显著改善, 光谱强度明显升高, 且多量子势垒结构的引入保证了芯片的热稳定性和发光稳定性. 原因主要是由于多量子势垒结构的引入改善了电子阻挡层的能带结构, 减少了漏电流, 显著增强了活性区中载流子浓度.

关键词

发光二极管
内量子效率
多量子阱
光谱强度
漏电流

由于发光二极管(LED)的长寿命、体积小、低能耗等诸多优点, 已经被广泛应用在许多商业领域. 包括全彩色显示、交通灯、液晶显示器背光以及白光照明等^[1~4]. 对于高功率领域的应用, LED 需工作在大电流密度下, 这时就存在效率下垂效应^[5]. 效率下垂效应归因于较低的空穴注入率及电子从活性区溢出到 p 型区的漏电流, 这是由于在 GaN 基的材料体系中, 空穴具有较大的有效质量从而导致较低的迁移率造成的^[6,7].

为抑制电子漏电流, 在 p-GaN 层和多量子阱结构之间加上 p-Al_xGa_{1-x}N 电子阻挡层(EBL)可有效抑制电子漏电流^[8~11], 而且此结构在 III 族氮化物材料体系的 LED 中已得到广泛应用. 然而, 当 Al 组分较高时, 由于 Mg 具有很高的活化能, 导致 p-Al_xGa_{1-x}N EBL 的空穴传导率很低. 另一方面, Al_xGa_{1-x}N EBL 中的极化效应使 EBL 的有效势垒降低, 减小了对电子的限制能力, 从而加剧漏电流效应^[12]. Iga 等人^[13]在 1986 年第一个用理论的方法研究了多量子势垒(MQB), 并指出这种结构可以增加对电子起限制作用的有效势垒. 1991 年, 这个效应被 Kishino 等人^[14]在

GaInP/ AlInP 红光激光二极管的实验研究中证明. 此后, 为克服 p-Al_xGa_{1-x}N EBL 的缺点, 一些 MQB EBL 结构被提出用来改善 LED 的性能. Hidaki 的研究中, 发现 AlGaIn/AlGaIn 多量子势垒电子阻挡层可显著增加 LED 的外量子效率^[15]. Kim 等人^[16]指出, AlGaIn/GaN/InGaIn 多量子势垒可有效阻止电子的漏电流, 并增强空穴在量子阱中的输运能力. 这些研究结果都证明了 MQB EBL 结构可有效的提高 LED 的性能.

然而, 这些研发与设计都是基于等温模型的, 没有考虑 LED 内部的非均匀温度场, 以及热量在 LED 内部的传递与扩散. 实际上, 载流子在 LED 内部的输运及复合决定了芯片的内热源, 导致 LED 内部存在显著的温度梯度. 另一方面, 载流子的扩散系数、迁移率、输运、复合以及能带结构等都受内部温度的影响. 这些效应是等温模型所不能解释的. 文献[17]建立了非等温多物理场耦合模型, 精细刻画了 LED 内部非均匀的热源分布及温度场, 并对等温模型和非等温模型下 LED 的内量子效率进行了对比研究, 得出在大注入条件下等温模型无法准确预测芯片的 IQE, 需利用非等温模型. 为保证在大注入条件下对

英文版见: Wang T H, Xu J L, Wang X D. The effect of multi-quantum barrier structure on light-emitting diodes performance by a non-isothermal model. Chin Sci Bull, 2012, 57, doi: 10.1007/s11434-012-5389-3

芯片性能的准确预测,本文在非等温模型的基础上,系统研究引入MQB EBL对LED内部热效应,以及与热效应紧密相连的内量子效率、光谱特性、光电转换效率的影响,并与传统设计的单势垒电子阻挡层LED进行对比研究,从热效应角度系统分析MQB EBL对提高LED效率的内在物理机制.

1 芯片结构与模型

本文设计了两种芯片结构,记为芯片A和芯片B,两种芯片只有电子阻挡层部分不同.图1为LED芯片结构示意图.厚 $100\text{ }\mu\text{m}$ 的蓝宝石衬底上生长有 $0.05\text{ }\mu\text{m}$ 未掺杂的GaN缓冲层,然后生长 $3\text{ }\mu\text{m}$ 的n-GaN层(掺杂浓度 $5\times 10^{18}\text{ cm}^{-3}$),接下来是5个周期的 $\text{In}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{N}/\text{In}_{0.08}\text{Ga}_{0.92}\text{N}$ 多量子阱结构,阱厚 $0.004\text{ }\mu\text{m}$,垒厚 $0.01\text{ }\mu\text{m}$,量子阱上是一层 $0.02\text{ }\mu\text{m}$ 厚的p型电子阻挡层,p型掺杂浓度为 $5\times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$,芯片A中为单层p- $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ EBL,芯片B为4个周期的p- $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$ 多量子势垒(MQB EBL).最后生长 $0.25\text{ }\mu\text{m}$ 的p-GaN层(掺杂浓度 $1\times 10^{18}\text{ cm}^{-3}$),衬底宽度 $300\text{ }\mu\text{m}$,活性区宽度 $200\text{ }\mu\text{m}$.n型电极和p型电极的宽度分别为 50 和 $80\text{ }\mu\text{m}$.

本文利用我们前面的工作^[17],利用非等温多物理场耦合模型将LED内部的热产生机理与热扩散效应考虑在内.假设LED芯片工作在稳态条件下,且忽略外延层界面上的接触热阻,衬底底部设为等温边界条件($T=313\text{ K}$),其他外边界绝热.模型中包含

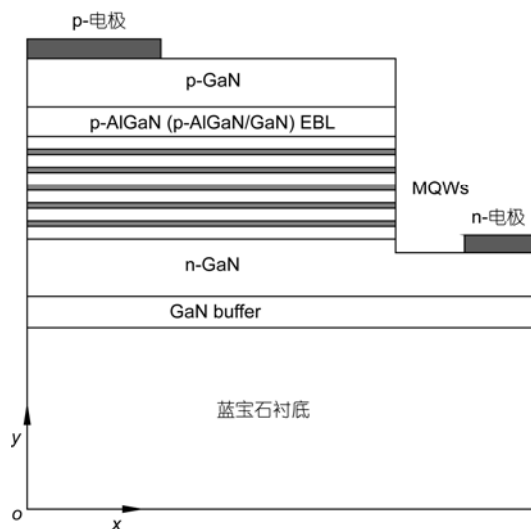


图1 LED芯片结构示意图

了描述电势分布的泊松方程,描述载流子输运和浓度分布的连续性方程,描述温度分布的能量方程,通过自洽求解泊松方程和薛定谔方程来得到载流子在量子阱中的分立能级及波函数.能带的计算方法与材料的物性参数参考文献[18,19],模型控制方程及相关物理量的计算参考文献[17].注入LED中的电流分为在量子阱中复合的电流 I_{QW} 与漏电流 I_{leak} , I_{QW} 又包括辐射复合电流 I_{rad} ,Shockley-Read-Hall(SRH)复合电流 I_{SRH} ,与俄歇复合电流 I_{Auger} ,即

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

内量子效率(IQE)定义为辐射复合电流与注入电流之比,可表述为

$$\text{IQE} = \frac{I_{\text{rad}}}{I} \quad (2)$$

2 结果分析与讨论

图2给出了芯片A和芯片B的IQE随电流的变化特性.从图可看出,相对于芯片A,芯片B的IQE显著提高,随着电流的升高更加明显.效率下垂度定义为 $(\text{IQE}_{\text{max}} - \text{IQE}_{I=600\text{ A/m}})/\text{IQE}_{\text{max}}$,计算得出,芯片A和芯片B的效率下垂度分别为 22.22% 和 9.37% ,IQE峰值分别为 39% 和 44% ,对应的注入电流分别为 201 和 270 A/m .以上结果表明MQB EBL结构的引入使IQE的特性得到显著改善,更有利于LED工作在大电流密度下.

图3给出了 600 A/m 电流下,两种芯片的导带图.芯片B性能优于芯片A的原因可解释如下:首先,Mg在p-AlGaN中的活化能较高,导致AlGaN层中的空穴传导率较低,由于MQB结构中包含GaIn,而Mg

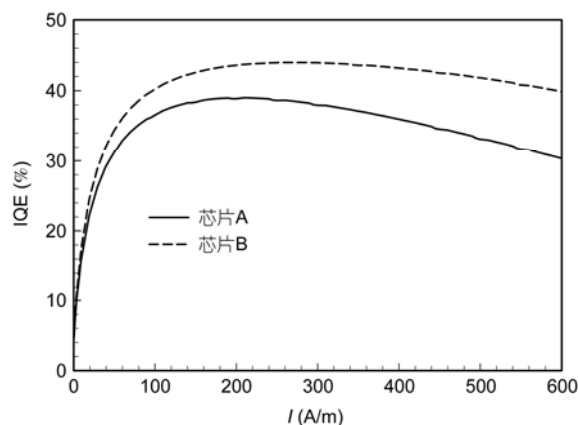


图2 芯片A和芯片B的IQE随电流的变化特性

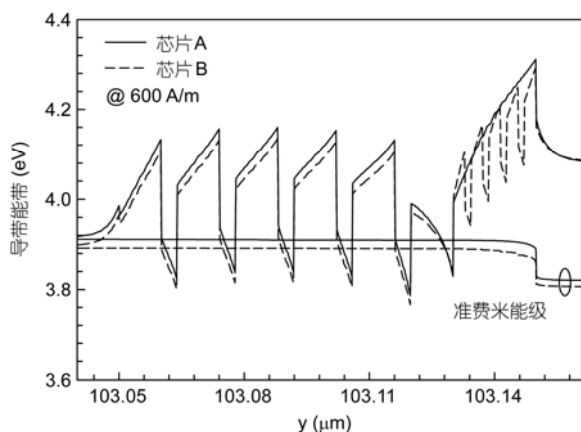


图3 600 A/m 电流下芯片 A 和芯片 B 的导带图

在 GaN 中的活化能远低于 AlGaIn, 因此 Mg 在 AlGaIn/GaN MQB EBL 中更容易活化, 空穴传导率显著提高, 从而使得 MQB EBL 的导带势垒高度高于单势垒 EBL(见图 3). 其次, 根据 Iga 等^[13]采用一维薛定谔方程求解电子在多量子势垒中的反射率和透射率的结果可知, 多量子势垒相比单势垒显著提高了高能电子的反射率, 相当于提高了有效势垒高度, 因此相比于单势垒 EBL, MQB EBL 可进一步强化对电子的限制. 由于势垒高度和反射率的提高, 芯片 B 中的漏电流显著低于芯片 A(图 4). 最后, AlGaIn 单势垒 EBL 和多量子阱界面上存在较大的晶格失配, 使得紧靠 EBL 的量子阱和 EBL 的界面处存在较强的极化效应, 使能带严重弯曲, 从而导致有效势垒高度降低. 该应力是量子阱内电子和空穴复合效率下降的重要原因, 而 AlGaIn/GaN MQB EBL 和量子阱之间具有较小的应力^[20], 使极化效应程度减弱, 因此改善了量子阱

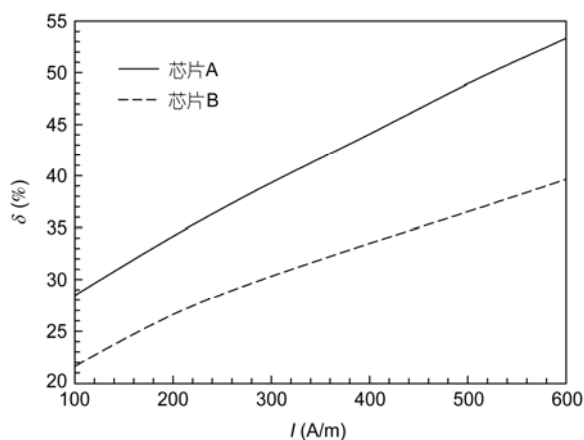


图4 芯片 A 和芯片 B 的漏电流率随注入电流的变化特性

内的复合效率.

图 4 和 5 进一步验证了以上分析. 正是由于 MQB EBL 提高了势垒高度, 增加了对电子的反射率, 以及减小了活性区最后一个势垒和 EBL 界面处的应力, 使得电子从活性区向 p 区的逃逸得到有效限制, 导致芯片 B 的漏电流率远低于芯片 A. 图 4 给出了芯片 A 和芯片 B 的漏电流率随注入电流的变化特性. 电子漏电流率 δ 定义为从活性区溢出到 p 型区的电流与注入电流之比, 即 $\delta = I_{\text{leak}}/I$. 由图 4 可知, 在相同的电流下, 芯片 B 的 δ 显著低于芯片 A, 两种结构的 δ 都随电流的升高而增加, 且两者之差也随着电流的升高而增加.

由于漏电流的减小, 不但提高了活性区中的电子浓度, 也使空穴向量子阱中的注入率随之增强. 原因是逸出到 p 区的电子减少后使 p 区中空穴和漏电子的复合减少, 使更多的空穴可以注入量子阱. 从而增加了活性区中的载流子浓度和复合率, 减少了 p 区的非辐射复合与焦耳热效应. 图 5 给出了 600 A/m 电流下, 芯片 A 和芯片 B 的活性区中电子和空穴的浓度分布. 在所有的量子阱中, 芯片 B 的载流子浓度都明显增强, 和芯片 A 相比, 电子平均浓度提高了 13.75%, 空穴平均浓度提高了 13.46%. 由于芯片 B 具有以上优点, 使得芯片 B 活性区中的辐射复合率得到增强(图 6(a)), 进而使 IQE 得到显著改善(图 2).

图 6 给出了电流在 600 A/m 时芯片 A 和芯片 B 的复合率. 复合率包括辐射复合率(Radiative), Shockley-Read-Hall 复合率(SRH)及俄歇复合率(Auger). 活性区中的载流子浓度升高后, 辐射复合率得到增强, 因而提高了 LED 的发光特性. 同时非辐射复合率也得

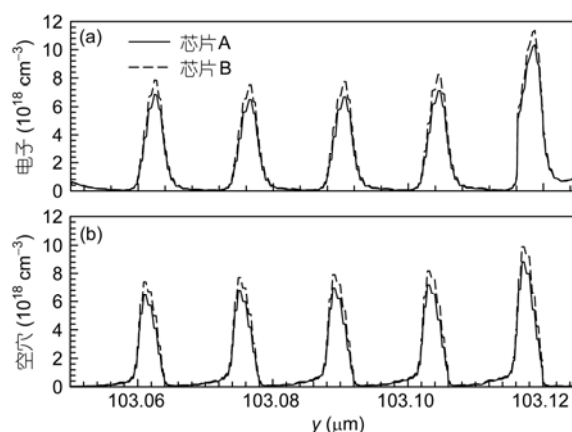


图5 600 A/m 电流下, 芯片 A 和 B 的活性区中电子和空穴的浓度分布

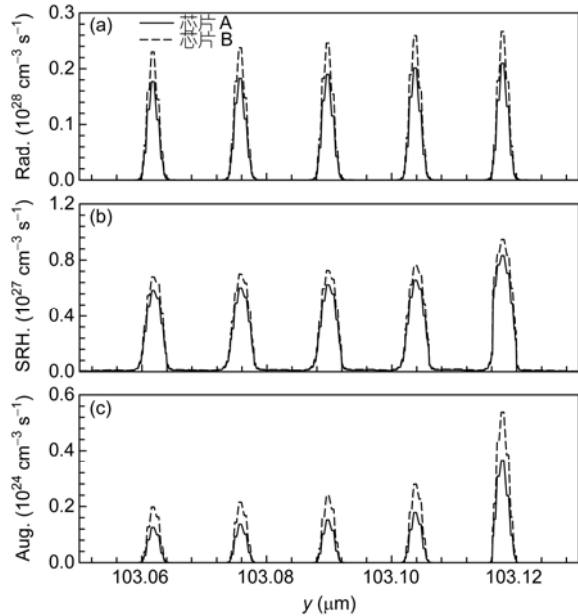


图6 电流 600 A/m 时芯片 A 和 B 的复合率

到增强(图 6(b), 6(c)), 使得非辐射复合热增加. 图 7 给出了内热源强度随电流的变化特性. 文献 17 指出, 焦耳热和非辐射复合热是外延层中内热源的主要贡献者, 汤姆逊热和珀尔帖热很小可以忽略. 因此, 图 7 中只列出了焦耳热(图 7(a)), 非辐射复合热(图 7(b))及总内热源(图 7(c))随电流变化的特性. 从图 7 得出: 芯片 B 的焦耳热降低了, 但非复合热却相应升高, 总的内热源强度几乎没有变化. 可见, MQB EBL 结构的引入, 在提高辐射复合率的同时, 并没引起内热源强度的升高. 原因是, 漏电流的减少使得焦耳热效应减弱, 同时活性区的辐射复合率与非辐射复合率相应提高(方程(1)), 增加了非辐射复合热, 两者的共同作用使总内热源几乎没有变化. 图 8 和 9 比较了芯片 A 和芯片 B 的外延层温度分布. 可以看出, 由于两者芯片内部的产热基本相同, 外延层温度分布基本一致. 因此, MQB EBL 结构在提高 IQE 的同时, 保证了芯片的热稳定性.

图 10 给出了芯片 A 和芯片 B 的光谱特性随电流的变化规律. 在相同的电流下, 芯片 B 的光谱强度要高于芯片 A, 且两者光谱强度之差随电流的升高而增加. 在小电流 100 A/m 和大电流下 600 A/m 时, 芯片 B 的光谱强度分别增加了 11.7% 和 28.3%. 另一方面, 和相同电流下芯片 A 的光谱相比, MQB EBL 结构的引入在提高光谱强度的同时并没有使光谱发生

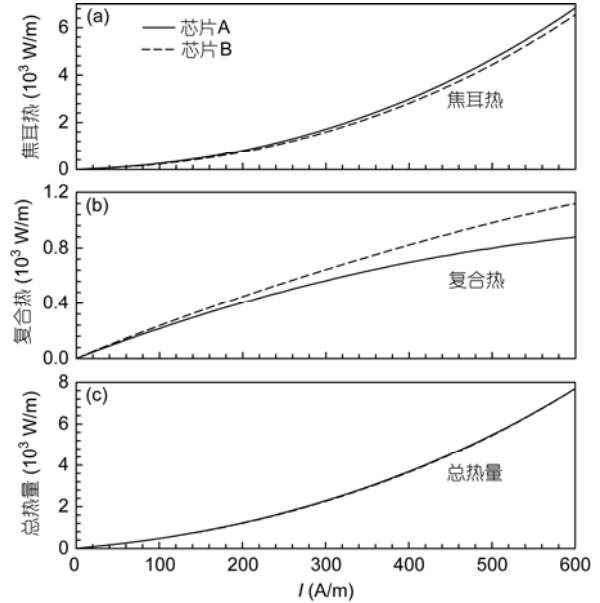


图7 芯片 A 和 B 内热源随电流的变化特性

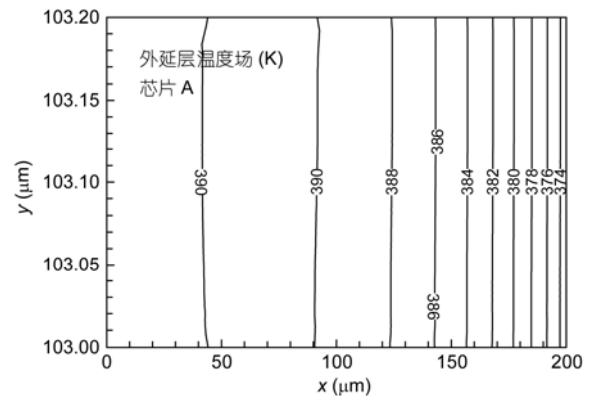


图8 电流 600 A/m 时芯片 A 的外延层温度分布

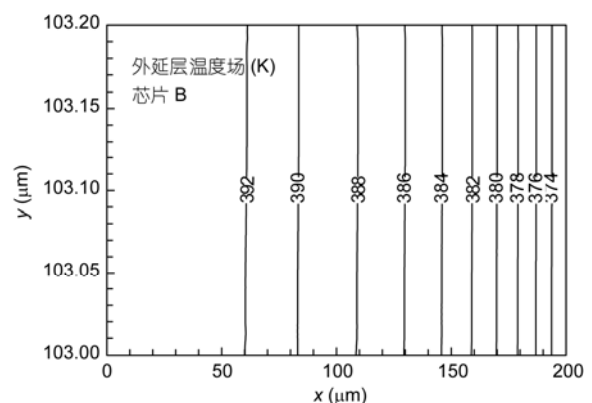


图9 电流 600 A/m 时芯片 B 的外延层温度分布

移位. 文献[21]指出, 热效应是引起光谱发生红移的重要原因. 而图 8, 9 表明两种结构的外延层温度分布

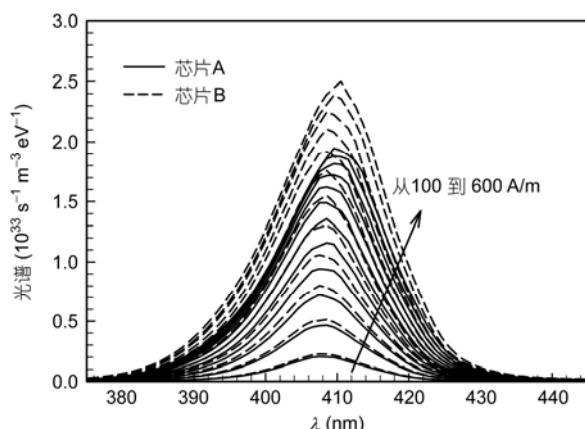


图 10 芯片 A 和 B 的光谱特性

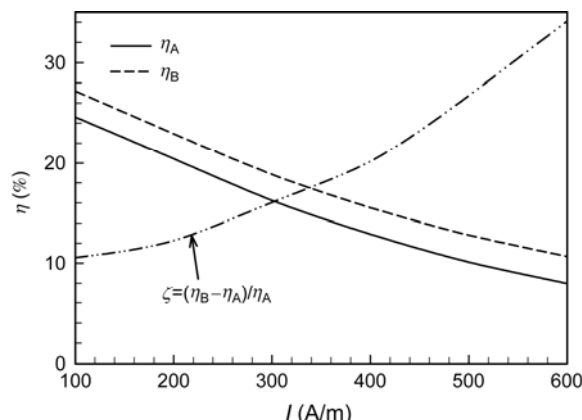


图 11 芯片 A 和 B 的光电转换效率

基本相同, 导致两种结构的热效应相似, 并没有改变量子阱的带隙, 因此光谱没有发生移位. 以上结果表明 MQB EBL 结构保证了 LED 发光特性的稳定性.

本文非等温模型的结果与 Yang 等人^[21]的实验结果一致. 实验中采用了两种电流模式, 脉冲模式中(对应于等温模型), 整个注入电流范围内光谱单调蓝移. 在连续电流模式中(对应于非等温模型), 在小电流时光谱发生蓝移, 在大电流下, 由于非等温效应, 光谱发生红移, 而本文非等温模型的预测结果也是在大电流时光谱发生红移(见图 10).

光电转换效率 η 定义为发光功率与输入 LED 的电功率之比, 它是衡量 LED 性能的重要参数. 图 11 为芯片 A 和芯片 B 的光电转换效率. 两种结构的 η 都随电流的增加而降低, 在整个电流范围内芯片 B 的 η 要高于芯片 A. 光电转换效率增加度 ζ 定义为 $\zeta = (\eta_B - \eta_A) / \eta_A$, 式中, η_B 表示芯片 B 的光电转换效率, η_A 表示芯片 A 的光电转换效率. 随着电流的增加, 效率增加度也随之升高, 在电流 600 A/m 时, ζ 可达 34.1%, 意味着在大电流下具有 MQB EBL 结构的 LED 芯片更显示出其优越性能. 图 2 中芯片 B 的 IQE 的效率下降度远低于芯片 A, 与光转换效率特性吻合.

3 结论

本文在非等温多物理场耦合模型下对分别具有单势垒 EBL 结构(传统设计)和 MQB EBL 结构的两种芯片(分别记为芯片 A 和芯片 B)进行了对比研究. 针对于芯片 B, 对其内量子效率, 内热源特性, 光谱特性以及光电转换效率进行了系统分析, 结论如下:

- (1) MQB EBL 结构的引入显著提高了芯片 B 的内量子效率, 和芯片 A 相比, IQE 下降度显著降低了 12.85%, IQE 的峰值电流可增加到 270 A/m.
- (2) 芯片 B 在提高发光辐射复合率的同时, 并没有使芯片发热量增加, 两种芯片的外延层温度分布基本相同, 使输入 LED 芯片的电功率更多的转化为光能, 保证了芯片的热稳定性.
- (3) 和芯片 A 相比, 在同等电流下, 芯片 B 发光强度显著增强, 电流越大增强程度越高, 且在相同的注入电流下光谱没有发生相对红移或蓝移, 保证了 LED 芯片发光的稳定性.
- (4) 芯片 B 的光电转换效率特性明显优于芯片 A, 效率增加度 ζ 也随着电流的升高而增加, 在 600 A/m 时 ζ 可达 34.1%, 表明具有 MQB EBL 结构的 LED 在大电流下更具优越性.

参考文献

- 1 Shur M S. Solid-state lighting: Toward superior illumination. Proc IEEE, 2005, 93: 1691–1703
- 2 Krames M R, Shchekin O B, Mueller-Mach R, et al. Status and future of high-power light-emitting diodes for solid-state lighting. IEEE J Display Technol, 2007, 3: 160–175
- 3 Liu Q, Duan L, Zhang D Q, et al. Transparent organic light-emitting diodes based on Cs_2CO_3 :Ag/Ag composite cathode. Chin Sci Bull, 2010, 55: 1479–1482

- 4 Zhang W W, Wu Z X, Zhang X W, et al. Dependence of the stability of organic light-emitting diodes on driving mode. *Chin Sci Bull*, 2011, 56: 2210–2214
- 5 Kim M H, Schubert M F, Dai Q, et al. Origin of efficiency droop in GaN-based light-emitting diodes. *Appl Phys Lett*, 2007, 91: 183507
- 6 David A, Grundmann M J, Kaeding J F, et al. Carrier distribution in (0001) InGaN/GaN multiple quantum well light-emitting diodes. *Appl Phys Lett*, 2008, 92: 053502
- 7 Wang C H, Chen J R, Chiu C H, et al. Temperature-dependent electroluminescence efficiency in blue InGaN-GaN light-emitting diodes with different well widths. *IEEE Photon Technol Lett*, 2010, 22: 236–238
- 8 Chitnis A, Zhang J P, Adivarahan V, et al. Improved performance of 325-nm emission AlGaIn ultraviolet light-emitting Diodes. *Appl Phys Lett*, 2003, 82: 2565–2567
- 9 Tu R C, Tun C J, Pan S M, et al. Improvement of near-ultraviolet InGaIn-GaN light-emitting diodes with an AlGaIn electron-blocking layer grown at low temperature. *IEEE Photon Technol Lett*, 2003, 15: 1342–1344
- 10 Kim K H, Fan Z Y, Khizar M, et al. AlGaIn-based ultraviolet light-emitting diodes grown on AlN epilayers. *Appl Phys Lett*, 2004, 85: 4777–4779
- 11 Hirayama H. Quaternary InAlGaIn-based high-efficiency ultraviolet light-emitting diodes. *J Appl Phys*, 2005, 97: 091101
- 12 Han S H, Lee D Y, Lee S J, et al. Effect of electron blocking layer on efficiency droop in InGaIn/GaN multiple quantum well light-emitting diodes. *Appl Phys Lett*, 2009, 94: 231123
- 13 Iga K, Uenohara H, Koyama F. Electron reflectance of multiquantum barrier (MQB). *Electron Lett*, 1986, 22: 1008–1010
- 14 Kishino K, Kikuchi A, Kaneko Y, et al. Enhanced carrier confinement effect by the multiquantum barrier in 660 nm GaInP/AlInP visible lasers. *Appl Phys Lett*, 1991, 58: 1822–1824
- 15 Hideki H, Yusuke T, Tetsutoshi M, et al. Marked enhancement in the efficiency of deep-ultraviolet AlGaIn light-emitting diodes by using a multiquantum-barrier electron blocking layer. *Appl Phys Expr*, 2010, 3: 031002
- 16 Kim K S, Kim J H, Jung S J, et al. Stable temperature characteristics of InGaIn blue light emitting diodes using AlGaIn/GaN/InGaIn superlattices as electron blocking layer. *Appl Phys Lett*, 2010, 96: 091104
- 17 Wang T H, Wang X D, Xu J L. The investigation of high power LED by a non-isothermal coupling model(in Chinese). *J Engin Thermophys*, 2012, 33: 647–650
- 18 Chuang S L, Chang C S. k·p method for strained wurtzite semiconductors. *Phys Rev B*, 1996, 54: 2491–2504
- 19 Vurgaftman I, Meyer J R. Band parameters for nitrogen-containing semiconductors. *J Appl Phys*, 2003, 94: 3675–3696
- 20 Chiaria S, Furno E, Goano M, et al. Design criteria for near-ultraviolet GaN-based light-emitting diodes. *IEEE Trans Electron Devices*, 2010, 57: 60–70
- 21 Yang Y, Cao X A, Yan C H. Investigation of the nonthermal mechanism of efficiency rolloff in InGaIn light-emitting diodes. *IEEE Trans Electron Devices*, 2008, 55: 1771–1775