

Олег Рабинович, к. ф.-м. н. | rawork2008@mail.ru
Валерий Сушков, д. т. н. | sushkov@misis.ru

Моделирование характеристик многокомпонентных гетероструктур

для производства светоизлучающих диодов

Области применения

Латинское изречение *Per crucem ad lucem* («Через крест к свету») как нельзя точно описывает пройденный излучающими диодами (ИД) путь, и особенно — в видимой части спектра светоизлучающими диодами (СИД). Трудно назвать другую область современной науки и техники, которая оказывала бы сейчас столь же сильное воздействие на развитие экономики и технологий, как полупроводниковая электроника [1].

Эпоха светоизлучающих диодов имеет более чем столетнюю историю. Столпами-«атлантами», взвалившими на свои плечи этот интересный, но сложный труд, были Хенри Джозеф Раунд (Henry Joseph Round), Олег Владимирович Лосев, Ник Холоньяк (Nick Holonyak), Херберт Поль Маруска (Herbert Paul Maruska), Джеймс Тиджен (James Tietjen), Жак Панков (Jacques I. Pankove), Жорес Иванович Алферов, Хедрис Моркос (Hedis Morkoc), Исаму Акасаки (Isamu Akasaki), Хироси Аmano (Hiroshi Amano), Судзи Накамура (Shuji Nakamura) и, конечно, их многочисленные соавторы и помощники [2–4].

Нитридные материалы привлекают к себе пристальное внимание из-за их уникальных свойств. Одно из наиболее значимых преимуществ соединений III группы, таких как GaN, InN, AlN и их твердых растворов $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ и $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ — это большой диапазон ширины запрещенной зоны 1,95–6,3 эВ, в зависимости от состава. Именно поэтому данные материалы обладают значительным потенциалом для использования их в коротковолновой, электролюминесцентной, высокотемпературной, высокоомощной и высокочастотной электронике. Вдобавок сильные связи взаимодействия и высокая теплопроводность GaN и его твердых растворов делают их особенно интересными для применения в оптоэлектронике, например в полноцветных экранах, емкостных накопителях информации, «солнечно-слепых» фотоприемниках, ультрафиолетовых детекторах, СВЧ-приборах, светоизлучающих и лазерных диодах.

Количество областей применения ИД неуклонно растет. Сегодня тщательно отлаженные и постоянно совершенствующиеся технологии производства высококачественных многокомпонентных гетероструктур (AlInGaP

и AlGaInP) и, как следствие, появление высокоэффективных ИД на их основе позволили решить проблему низкого светового выхода, а также ограниченного диапазона цветов, что ранее препятствовало применению ИД в освещении. Широкое распространение ИД стало возможным благодаря существенному росту их светового потока и уменьшению стоимости. Яркость, квантовый выход и многообразие цветов свечения достигли такого уровня, что это может привести к революции в освещении и в других областях применения ИД.

По результатам исследований [5], использование СИД в диапазоне свечения 400–700 нм позволяет существенно влиять на форму, сроки цветения и созревания плодов и даже на химический состав лекарственных растений. Например, освещение фуксий красным цветом свечения позволяет им зацвести на 4 недели раньше, а облучение на длине ~465 нм приводит к яркой и насыщенной окраске растений.

СИД широко используются в медицине:

- как «точный» (узкофокусированный), безопасный и недорогой источник света (нет нагрева помещения, можно управлять интенсивностью свечения, отсутствуют отвлекающие/вредные вещества);
- для диагностики состояния больных и даже опухолей;
- для светотерапии при желтухе у новорожденных и в дерматологии, а также для профилактики и снятия усталости, для поднятия тонуса сотрудников (освещение СИД в 10000 лк в течение 30 мин. предотвращает депрессию);
- для очищения воды любого качества от болезнетворных бактерий с помощью ультрафиолетовых ИД (УФИД): по данным разных групп исследователей, удается достичь результата очистки от 60 до 95% [6].

Широкое применение СИД в авиастроении значительно снижает энергозатраты, что особенно важно при взлете и посадке. Повышается комфорт пассажиров, например, корпорация Boeing в своем последнем детище 787 Dreamliner использует СИД для освещения салона, пассажирских кресел и кабины пилотов. В легкомоторных самолетах компании Cessna СИД используются в системах габаритных огней, это решает задачу достижения необходимого цвета свечения, что очень жестко регламентировано [7].

Philips Lumileds Lighting Company представила так называемый «белый» метод для малых экранов, например дисплеев в автомобилях (рис. 1). Он требует бокового излучения СИД белого цвета свечения, идущего в акриловый световод, расположенный по краю экрана. Для более крупных мониторов (компьютерные ЖК) используется преимущество широкого диапазона цветопередачи. Применяется излучение от СИД с ламбертиановским излучением внутри световода. Оптическая система смешивает и распределяет белый свет по всему экрану [8].

В городе Торонто на центральных улицах установлены СИД-осветители, КПД которых 90% и более. Для сравнения — до 30% излучения современных осветительных ламп рассеивается в про-



Рис. 1. Пример использования СИД компании Philips Lumileds Lighting Company: а) внешний вид диода; б) пример сборки; в) схема устройства экрана; г) внешний вид экрана

странстве. Применение СИД в осветителях может уменьшить загрязнение среды на 18000 т CO₂ и С в год, что будет соответствовать удалению 3600 автомобилей с дорог города [9]. В зданиях же внедряется внутреннее освещение, основанное на СИД-лампах, которые потребляют в 9 раз меньше энергии и служат в 5 раз дольше, чем аналогичные галогеновые. Использование СИД-ламп сэкономит жильцам \$40000 в год и улучшит окружающую среду, уменьшив выбросы в атмосферу на 110 т CO₂ [10].

Модели и эксперименты

Успехи в разработке и производстве диодов, излучающих в видимой и ультрафиолетовой областях спектра, изготовленных на основе многокомпонентных гетероструктур (МКТ) с квантово-размерными In_xGa_{1-x}N ямами (КЯ), стимулировали проведение работ по компьютерному моделированию их электрических и оптических характеристик [11–14]. По своей направленности эти работы во многом близки к работам [15, 16] по моделированию характеристик лазеров на основе AlInGaN МКТ: оптимизация конструктивных параметров (толщины эпитаксиальных слоев, количества КЯ, длины ям и барьеров в активной области приборов) и физических параметров (содержания Al и In, типов проводимости и степени легирования эпитаксиальных слоев).

Цель проведенной авторами работы состояла в интерпретации имеющихся экспериментальных данных, в том числе полученных в ходе данного исследования, на основе результатов, полученных при моделировании. Для моделирования СИД и УФИД использовалась некоммерческая программа SimWindows 1.5, разработанная Дэвидом Уинстоном (D.W. Winston) в Центре Оптоэлектронных Систем при Колорадском Университете (Боулдер, США).

Данный программный продукт основан на весьма точных физических моделях в одномерном приближении (1D) [17]. Их обзор приведен в [18]. Кратко необходимо пояснить:

- В уравнении Пуассона учитываются заряды ионизированных примесных атомов, свободных носителей заряда и связанных

носителей заряда в КЯ. Уравнения для заряда в КЯ используют несколько предположений: есть только одно связанное состояние E_{qnp} находящееся в середине КЯ и имеющее постоянную величину энергии относительно дна зоны проводимости, положение уровня Ферми в данной яме постоянно относительно дна зоны проводимости.

- В программе используются выражения для трех видов тока: дрейфово-диффузионного в областях прибора, состоящих из объемных материалов, или в областях с плавным изменением состава материала; тока термоэлектронной эмиссии носителей заряда в КЯ и из них для контактов КЯ с объемными материалами; термоэлектронного и туннельного токов при резких границах между двумя объемными материалами.
- Для процессов рекомбинации носителей заряда в программе учитываются механизмы спонтанной и стимулированной излучательной рекомбинации «зона-зона» и механизмы безызлучательной рекомбинации по моделям Шокли-Рида-Холла и Оже, при этом для областей прибора с КЯ в выражениях для скоростей рекомбинации учитывается двумерная природа носителей заряда и их волновых функций.

Для моделирования СИД на основе твердых растворов Al_{1-x}In_xGa_{1-x-y}N в настоящей работе были созданы файлы параметров приборов (device file) и параметров материалов (material file). Для каждого конкретного СИД в его файле прибора указывались: геометрические размеры эмиттеров, КЯ и барьеров; количество КЯ и барьеров; состав твердого раствора; тип проводимости, концентрации и энергии активации легирующих примесей в каждой области СИД. В файл параметров материалов должны быть занесены такие характеристики материала, как ширина запрещенной зоны, показатель преломления, оптическое поглощение, теплопроводность, подвижность и время жизни носителей заряда, электронное сродство, коэффициенты излучательной и безызлучательной рекомбинации и т. д., всего 25 параметров. Для системы AlInGaN полный вид этого файла приведен в работе [18].

Первый этап заключался в определении оптимальных параметров активной области структуры. Для моделирования кристаллов СИД синего и зеленого цветов свечения было создано по 30 файлов приборов для каждого цвета. В них использовалась статистика Ферми-Дирака, учитывалась неполная ионизация легирующих примесей. Структура всех приборов состояла из GaN-эмиттера n-типа, In_xGa_{1-x}N-активной области с КЯ в активной области и GaN-эмиттера p-типа.

При моделировании кристаллов СИД синего цвета свечения содержание In (x) принималось равным 0,2, а для зеленого — x = 0,35, что является типичными значениями для СИД таких цветов. Концентрация доноров (Si) в GaN-эмиттере n-типа составляла $N_d = 10^{19}$ см⁻³, а акцепторов (Mg) в GaN-эмиттере p-типа — $N_a = 10^{19}$ см⁻³.

Приборные файлы содержали следующие параметры квантово-размерных ям и барьеров в активной области:

- длина синих In_{0,2}Ga_{0,8}N и зеленых In_{0,35}Ga_{0,65}N КЯ в активной области 2 нм при длине GaN-барьеров 3 нм, или 3,5 нм при длине GaN-барьеров 4,5 нм;
- количество квантово-размерных ям изменялось от 1 до 5;
- для каждого набора квантово-размерных ям было создано 3 типа приборов с различным легированием квантово-размерных ям и барьеров: ii-тип (без специального легирования), np-тип (легированы донорами, $N_d = 10^{18}$ см⁻³), p-тип (легированы акцепторами, $N_a = 10^{18}$ см⁻³);
- при моделировании температура принималась равной 300 К.

Для примера на рис. 2, 3 представлен ряд характеристик: зонная диаграмма, распределение потенциала поперек структуры, распределение концентраций электронов и дырок и распределение полной скорости рекомбинации носителей заряда в зависимости от координаты (Grid Position) для СИД синего цвета свечения, содержащих 4 нелегированные КЯ с длиной 3,5 нм и барьерами длиной 4,5 нм ii-типа при плотности тока 100 А/см² и напряжении 3,6 В.

Хорошо видно, что инжектированные электроны и дырки неравномерно распреде-

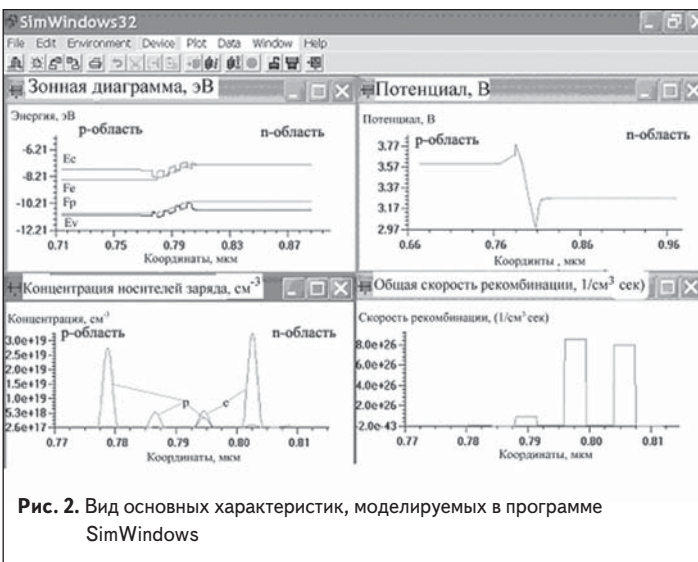


Рис. 2. Вид основных характеристик, моделируемых в программе SimWindows

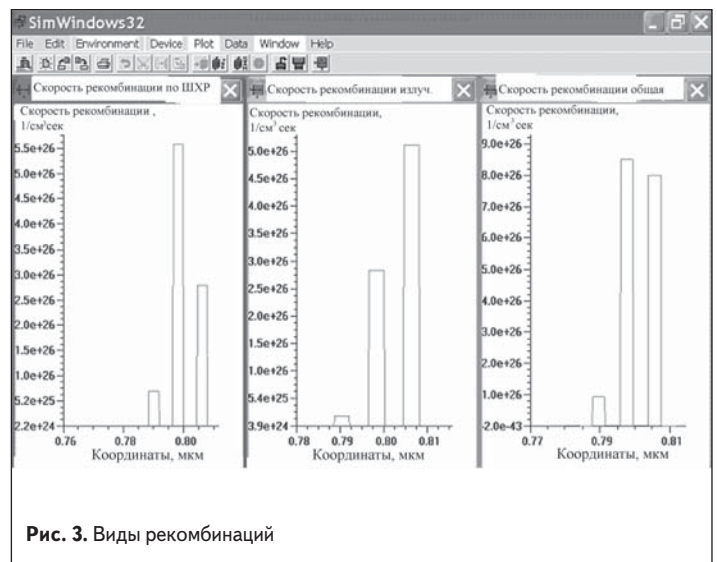


Рис. 3. Виды рекомбинаций

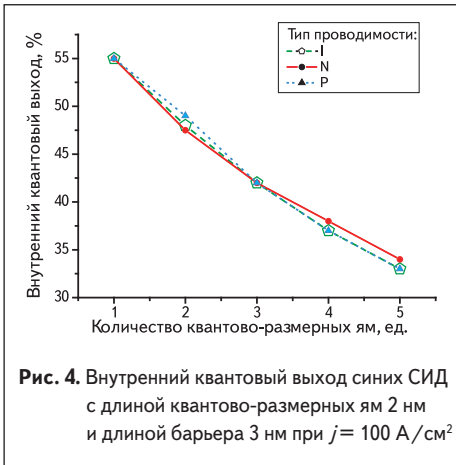


Рис. 4. Внутренний квантовый выход синих СИД с длиной квантово-размерных ям 2 нм и длиной барьера 3 нм при $j = 100 \text{ А/см}^2$

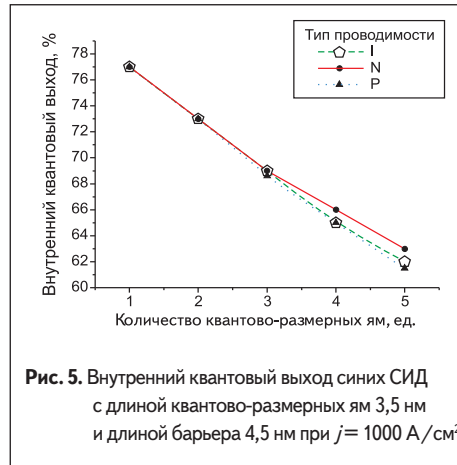


Рис. 5. Внутренний квантовый выход синих СИД с длиной квантово-размерных ям 3,5 нм и длиной барьера 4,5 нм при $j = 1000 \text{ А/см}^2$

лены в КЯ: концентрация электронов убывает по направлению к p-GaN-эмиттеру, а концентрация дырок — к n-GaN-эмиттеру. Рекомбинация всех носителей сосредоточена в КЯ, инъекции электронов в p-GaN-эмиттере и дырок в n-GaN-эмиттере практически отсутствуют. В активной области имеет место локальное изменение электростатического потенциала, обусловленное пространственным распределением электронов и дырок.

Неравномерное распределение электронов и дырок в КЯ приводит к неравномерному распределению скоростей излучательной (U_{B-B}) и безизлучательной (U_{Total}) рекомбинации (рис. 3).

Были проведены расчеты внутреннего квантового выхода излучения в активной области, состоящей из КЯ и барьеров для разных количества и размеров КЯ и различных условий их легирования:

$$\eta = \frac{\sum U_{B-B}}{\sum U_{Total}}, \quad (1)$$

где: U_{B-B} — скорость излучательной рекомбинации электронов и дырок; $U_{Total} = U_{B-B} + U_{SHR} + U_{Aug}$ — полная скорость рекомбинации; U_{SHR} , U_{Aug} — скорости безизлучательной рекомбинации по механизмам Шокли-Холла-Рида и Оже соответственно.

Программа вычисляет двумерные значения концентраций электронов, дырок и скоростей рекомбинации в КЯ, но полученные результаты переводит для удобства в трехмерные величины путем деления двумерных значений на длины ям.

Характерный вид зависимости внутреннего квантового выхода СИД синего (рис. 4–7) и зеленого (рис. 8–11) цветов свечения от размеров и количества КЯ и их типа проводимости при значениях плотности тока 100 А/см^2 и 1000 А/см^2 приведены на рис. 4–11.

Анализируя результаты моделирования многокомпонентных гетероструктур для СИД синего и зеленого цветов свечения, можно сделать следующие выводы:

- Во всех приборах проявлялась сравнительно слабая зависимость внутреннего квантового выхода от степени легирования и типа проводимости квантово-размерной активной области СИД. Представленные результаты позволяют объяснить тот факт, что у кристаллов с наибольшей яркостью, произведенных ведущими мировыми фирмами, обнаруживают сходные рабочие характеристики независимо от отличий в технологии получения эпитаксиальных структур.
- В приборах с длиной квантово-размерных ям 2 нм при плотности тока $j = 100 \text{ А/см}^2$ внутренний квантовый выход уменьшался с увеличением количества квантово-размерных

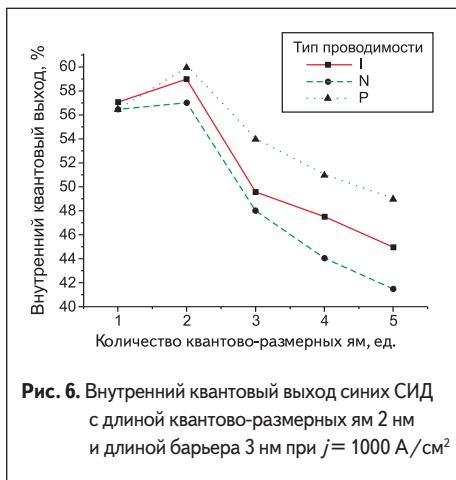


Рис. 6. Внутренний квантовый выход синих СИД с длиной квантово-размерных ям 2 нм и длиной барьера 3 нм при $j = 1000 \text{ А/см}^2$

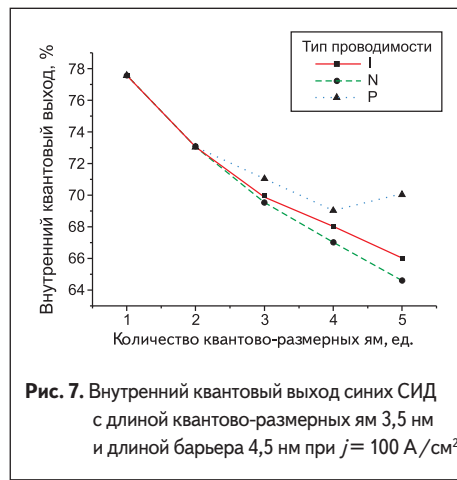


Рис. 7. Внутренний квантовый выход синих СИД с длиной квантово-размерных ям 3,5 нм и длиной барьера 4,5 нм при $j = 100 \text{ А/см}^2$

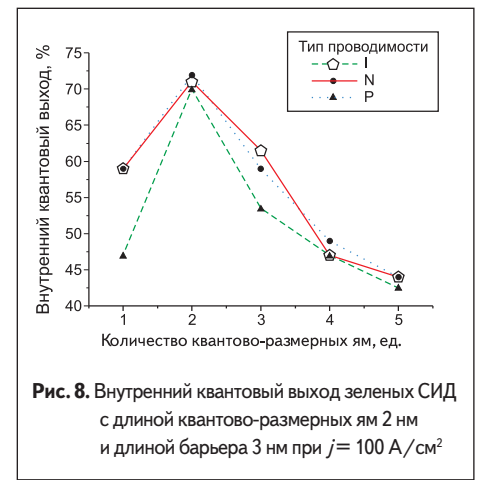


Рис. 8. Внутренний квантовый выход зеленых СИД с длиной квантово-размерных ям 2 нм и длиной барьера 3 нм при $j = 100 \text{ А/см}^2$

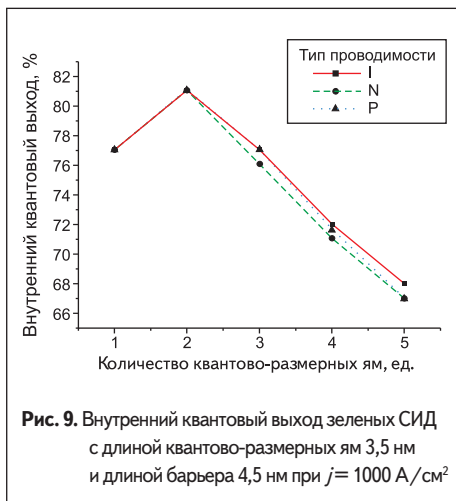


Рис. 9. Внутренний квантовый выход зеленых СИД с длиной квантово-размерных ям 3,5 нм и длиной барьера 4,5 нм при $j = 1000 \text{ А/см}^2$

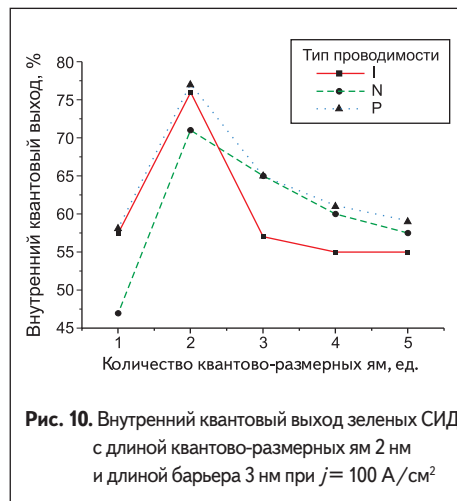


Рис. 10. Внутренний квантовый выход зеленых СИД с длиной квантово-размерных ям 2 нм и длиной барьера 3 нм при $j = 100 \text{ А/см}^2$

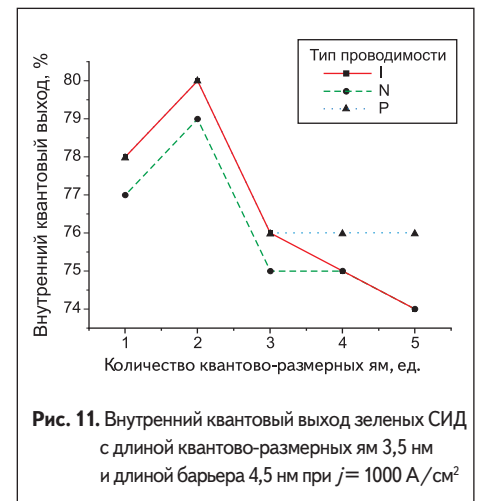


Рис. 11. Внутренний квантовый выход зеленых СИД с длиной квантово-размерных ям 3,5 нм и длиной барьера 4,5 нм при $j = 1000 \text{ А/см}^2$

ям. Максимальный внутренний квантовый выход η был порядка 47–49% (у зеленых 71–72%), а в приборе с пятью квантово-размерными ямами он (η) уже был 33–34% (у зеленых 43–44%).

- Во всех приборах при плотностях тока $j = 100 \text{ А/см}^2$ проявлялась зависимость внутреннего квантового выхода от количества квантово-размерных ям с длиной 3,5 нм: внутренний квантовый выход уменьшался. Максимальный внутренний квантовый выход η был порядка 59–60% (у зеленых 76–77%), а в приборе с пятью квантово-размерными ямами он (η) уже был 45–49% (у зеленых 57–59%).
- При плотности тока $j = 1000 \text{ А/см}^2$ у всех приборов наблюдалось увеличение внутреннего квантового выхода на 20–40% как у СИД синего, так и зеленого цветов свечения по сравнению с этим же параметром при плотности тока $j = 100 \text{ А/см}^2$. Таким образом, в МКГ с одним фиксированным однородным содержанием индия во всех квантово-размерных ямах следует ожидать суперлинейную зависимость мощности излучения от плотности тока в диапазоне 100–1000 А/см^2 , при условии равенства темпе-

ратур электронов, дырок и решетки в квантово-размерной активной области СИД.

На втором этапе работы проводилось моделирование характеристик СИД и УФИД, в активной области которых содержание индия изменялось в широких пределах. На наш взгляд, это могло бы позволить внести некоторые уточнения в понимание физических процессов, происходящих в этих приборах. Конструкция и параметры МКГ были уточнены по результатам моделирования на первом этапе и по различным опубликованным данным.

Приборные файлы содержали следующие параметры квантово-размерных ям и барьеров в активной области:

- содержание индия в квантово-размерных ямах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ составляет $x = 0,05\text{--}0,35$ с шагом 0,05;
- количество квантово-размерных ям равно 4, длина каждой 2 нм при длине GaN-барьеров 3 нм;
- квантово-размерные ямы и барьеры в активной области имеют n-тип проводимости, концентрация доноров в них составляет $N_d = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, в барьерах $N_d = 10^{18} \text{ см}^{-3}$;

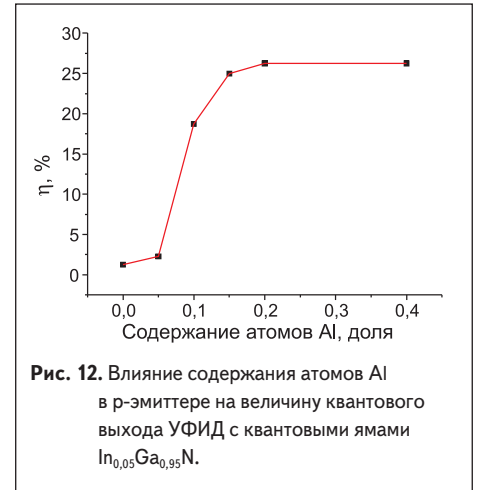


Рис. 12. Влияние содержания атомов Al в р-эмиттере на величину квантового выхода УФИД с квантовыми ямами $\text{In}_{0,05}\text{Ga}_{0,95}\text{N}$.

- концентрация доноров в GaN-эмиттере n-типа, легированном Si, составляет $N_d = 10^{18} \text{ см}^{-3}$;
- р-область состоит из контактного слоя GaN и $\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{N}$ -эмиттера с длиной 50 нм. Оба слоя легированы акцепторами (Mg) с концентрацией $N_a = 10^{19} \text{ см}^{-3}$;

Таблица 1. Зависимость напряжения от плотности тока и содержания атомов In X=0-15 в КЯ

J, А/см ²	x = 0 (без КЯ)			x = 0,05			x = 0,1			x = 0,15		
	U, В	ΔU, В	U _{порт} , В	U, В	ΔU, В	U _{порт} , В	U, В	ΔU, В	U _{порт} , В	U, В	ΔU, В	U _{порт} , В
10 ⁻¹	2,953	0	-0,241	2,883	-0,067	-0,273	2,754	-0,199	-0,325	2,62	-0,330	-0,366
1	3,022	0	-0,19	2,977	-0,045	-0,199	2,85	-0,172	-0,245	2,719	-0,303	-0,28
10	3,086	0	-0,140	3,062	-0,04	-0,194	2,947	-0,139	-0,164	2,839	-0,246	-0,184
20	3,104	0	-0,126	3,085	-0,019	-0,131	2,978	-0,127	-0,138	2,885	-0,219	-0,15
50	3,13	0	-0,106	3,116	-0,013	-0,087	3,022	-0,107	-0,105	2,955	-0,174	-0,102
80	3,142	0	-0,096	3,132	-0,01	-0,075	3,048	-0,096	-0,089	2,995	-0,148	-0,076
100	3,149	0	-0,086	3,14	-0,009	-0,070	3,06	-0,089	-0,081	3,014	-0,134	-0,064
200	3,169	0	-0,077	3,165	-0,005	-0,054	3,101	-0,068	-0,057	3,078	-0,091	-0,025
500	3,2	0	-0,058	3,201	-0,002	-0,031	3,164	-0,036	-0,030	3,168	-0,032	0,023

Таблица 2. Зависимость напряжения от плотности тока и содержания атомов In X=0,2-0,35 в КЯ

J, А/см ²	x = 0,2			x = 0,25			x = 0,3			x = 0,35		
	U, В	ΔU, В	U _{порт} , В	U, В	ΔU, В	U _{порт} , В	U, В	ΔU, В	U _{порт} , В	U, В	ΔU, В	U _{порт} , В
10 ⁻¹	2,547	-0,403	-0,345	2,563	-0,39	-0,241	2,693	-0,26	-0,059	3,083	0,131	0,353
1	2,681	-0,340	-0,233	2,829	-0,193	-0,028	3,261	0,239	0,427	3,85	0,828	1,024
10	2,915	-0,171	-0,051	3,391	0,306	0,451	4,035	0,95	1,103	4,667	1,582	1,738
20	3,021	-0,083	0,032	3,607	0,502	0,637	4,273	1,148	1,311	4,918	1,814	1,957
50	3,195	0,066	0,175	3,899	0,77	0,892	4,587	1,458	1,582	5,25	2,120	2,246
80	3,3	0,158	0,261	4,05	0,907	1,02	4,76	1,618	1,69	5,419	2,277	2,394
100	3,353	0,204	0,305	4,122	0,973	1,083	4,822	1,673	1,785	5,5	2,351	2,463
200	3,523	0,353	0,445	4,338	1,169	1,265	5,1	1,931	2,028	5,746	2,577	2,675
500	3,749	0,549	0,625	4,612	1,412	1,49	5,397	2,197	2,274	6,062	2,863	2,94

Таблица 3. Зависимость коэффициента неидеальности от плотности тока и содержания атомов In X=0-0,35 в КЯ

J, А/см ²	Значения коэффициентов неидеальности ВАХ n при различном содержании атомов In в квантово-размерных ямах, x							
	x = 0	x = 0,05	x = 0,1	x = 0,15	x = 0,2	x = 0,25	x = 0,3	x = 0,35
0,1	1,2	1,6	1,61	1,62	1,95	3,1	6,74	9,58
1	1,08	1,46	1,58	1,79	2,91	6,74	13	11,6
10	1,04	1,29	1,86	2,46	5,46	11,6	11,6	14,8
20	1,05	1,30	1,81	2,66	6,55	12,3	11	13,8
50	1,09	1,31	2,03	3,21	8,3	12,4	13,5	13,7
80	1,12	1,34	2,16	3,33	9	12,3	13	13,8
100	1,14	1,37	2,25	3,42	8,82	11,6	12	13
200	1,26	1,50	2,53	3,7	9,58	11,6	14,7	13
500	1,57	1,89	3,08	3,95	9,26	10,9	13	13

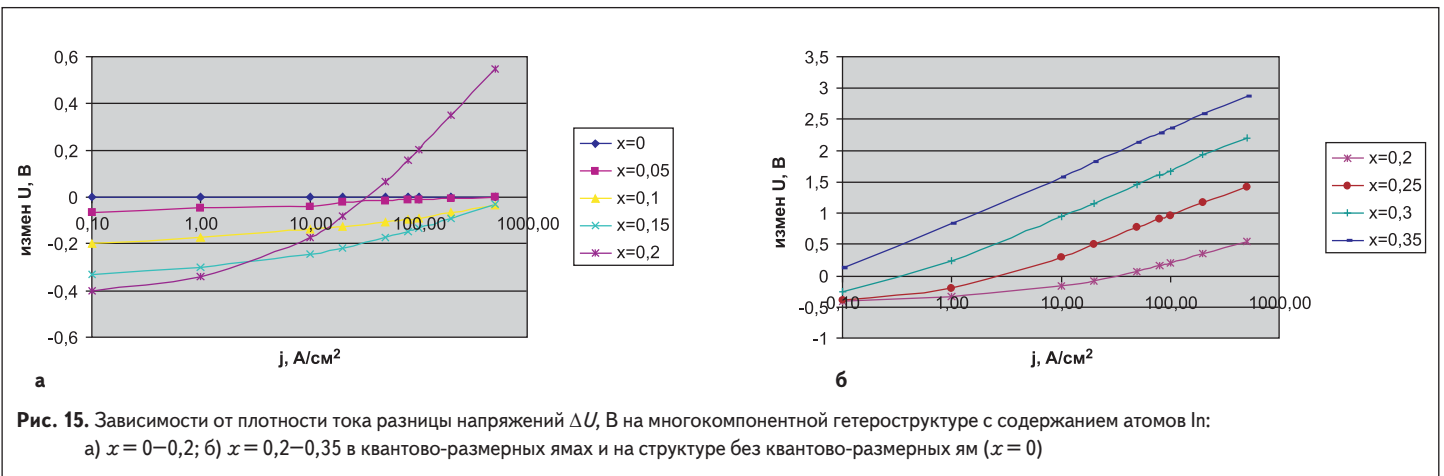
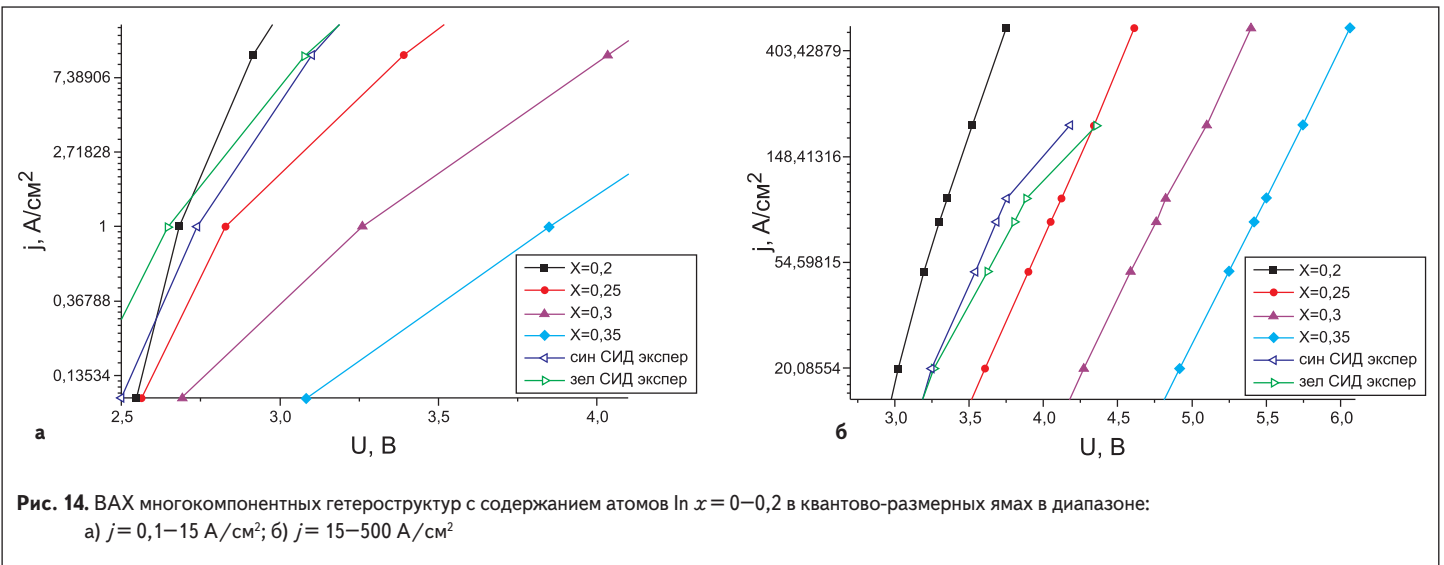
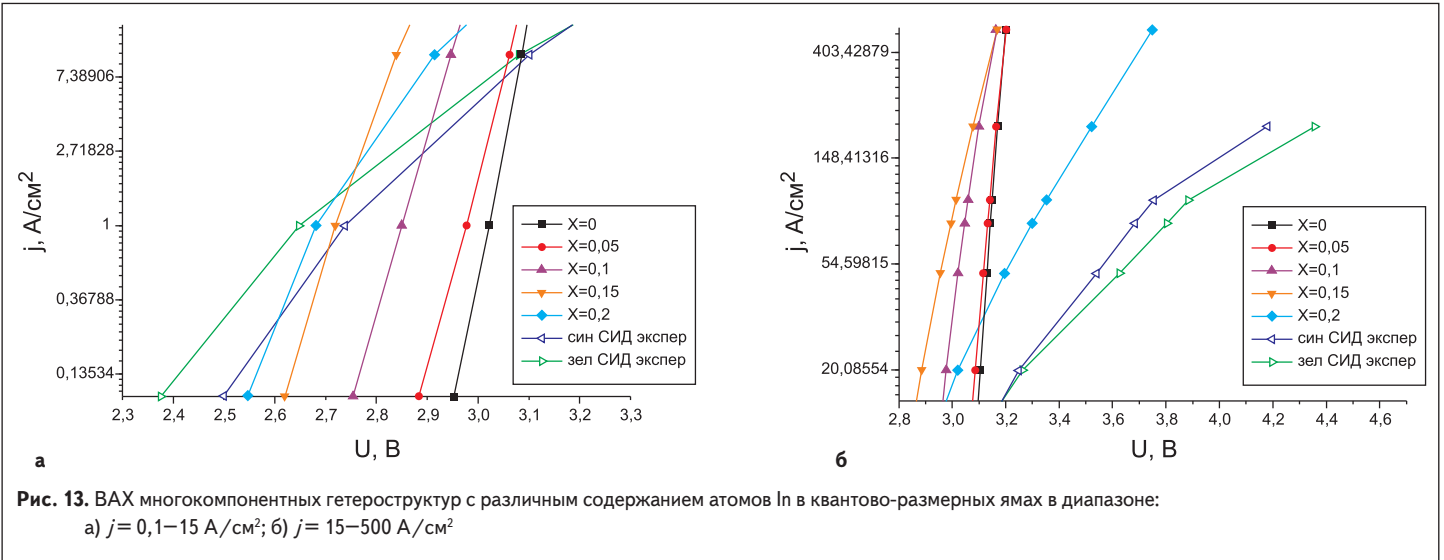
- при моделировании температура принималась равной 300 К.

Введение в конструкцию $p\text{-Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{N}$ -эмиттера обусловлено необходимостью исключить инжекцию электронов из активной области, что особенно важно при моделировании приборов с малым содержанием индия (x). На рис. 12 показано влияние содержания атомов Al в p-эмиттере на величину внутрен-

него квантового выхода, полученное при моделировании прибора с $x = 0,05$.

Для сравнения характеристик приборов также было проведено моделирование диода, у которого вместо области, содержащей КЯ и барьеры, находится область n-GaN с такой же протяженностью (20 нм) и с такой же концентрацией доноров ($N_d = 10^{17}$), как и в КЯ. Остальные параметры идентичны параметрам МКГ с КЯ.

Основные результаты моделирования приведены в табл. 1–3 и на рис. 13–18, где при заданной плотности тока: ΔU , В — разница напряжений на МКГ с данным содержанием индия в квантово-размерных ямах (x) и на структуре без квантово-размерных ям ($x = 0$); $U_{ном}$, В — падение напряжения на активной области МКГ с данным содержанием индия в квантово-размерных ямах (x) и на области



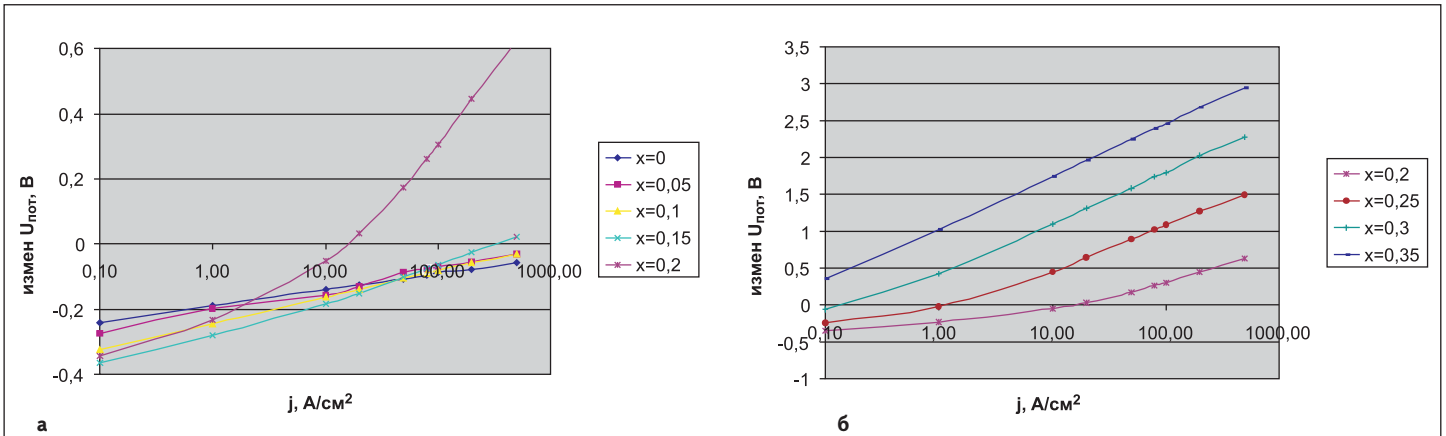


Рис. 16. Зависимости от плотности тока разницы падений напряжений $U_{потр}$ в активной области многокомпонентной гетероструктуры с содержанием атомов In: а) $x = 0-0,2$; б) $0,2-0,35$ в квантово-размерных ямах (x) и на области с той же протяженностью и теми же координатами в структуре без квантово-размерных ям ($x = 0$)

с той же протяженностью и теми же координатами в структуре без квантово-размерных ям ($x = 0$). На рисунках эти области расположены в точках 0,78 и 0,8 мкм, р-области находятся слева.

Прежде всего, необходимо рассмотреть механизмы протекания тока через МКГ. Как указывалось выше, для областей прибора, состоящих из объемных материалов (в нашем случае во всех областях в приборе без квантово-размерных ям, $x = 0$), в программе используются выражения для дрейфово-диффузионного тока. В приборах с КЯ используются выражения для тока термоэлектронной эмиссии (ТТЭ) носителей заряда в КЯ и из них и выражения для дрейфово-диффузионного тока в остальных областях, включая барьеры между КЯ. В работе [17] получены точные выражения для ТТЭ, учитывающие статистику Ферми-Дирака при вычислениях безразмерных значений планковских потенциалов электронов

$$\eta_c(x) = [E_{fn}(x) - E_c(x)] / kT(x)$$

и дырок

$$\eta_v(x) = [E_v(x) - E_{fp}(x)] / kT(x),$$

где: $E_v(x), E_c(x)$ — положения краев валентной зоны и зоны проводимости, $E_{fp}(x), E_{fn}(x)$ — положения квазиуровней Ферми дырок и электронов в зависимости от координаты x . Эти выражения также описаны в работе [18]. В работе [17] показано, что при глубине КЯ U_c в зоне проводимости и U_v в валентной зоне более $3kT$ можно использовать статистику Больцмана, и точные выражения для ТТЭ могут быть аппроксимированы к простому виду:

$$\begin{aligned} J_n(x) &= A_n^* \times T^2 \times e^{U_c/kT} \times e^{\eta_c(x)}; \\ J_p(x) &= A_p^* \times T^2 \times e^{U_v/kT} \times e^{\eta_v(x)}, \end{aligned} \quad (2)$$

где A_n^*, A_p^* — постоянные Ричардсона.

Программа позволяет вычислять значения планковских потенциалов электронов и дырок, значения постоянных Ричардсона, значения U_c и U_v , и, в итоге, вычислить суммарную ве-

личину тока $J = J_n(x) + J_p(x)$ при различных величинах напряжения U , приложенного к МКГ с различным содержанием индия x в КЯ.

ВАХ, вычисленные для МКГ с различной величиной x в диапазоне плотностей тока $J = 0,1-500$ А/см², представлены в табл. 1 и на рис. 13–14. Оказывается, поскольку в диапазоне $x = 0,05-0,35$ выполняются условия U_c, U_v более $3kT$ и выражения (2) справедливы, ВАХ можно представить в привычном виде:

$$J = J_s(x) \times e^{[U_m(J,x)]/kT}, \quad (3)$$

где: $J_s(x)$ — параметр, зависящий от содержания атомов In (x) в ямах, $n(J, x)$ — коэффициент неидеальности, зависящий от величины плотности тока и состава, U — напряжение, приложенное к МКГ. Вычисленные значения $n(J, x)$ представлены в табл. 2 и на рис. 18.

Анализ поведения ВАХ гетероструктур с различным содержанием индия выявляет следующие основные закономерности:

1. В отсутствие квантовых ям ($x = 0$, области малых плотностей тока, вплоть до $J = 0,1$ А/см², $n > 1$)

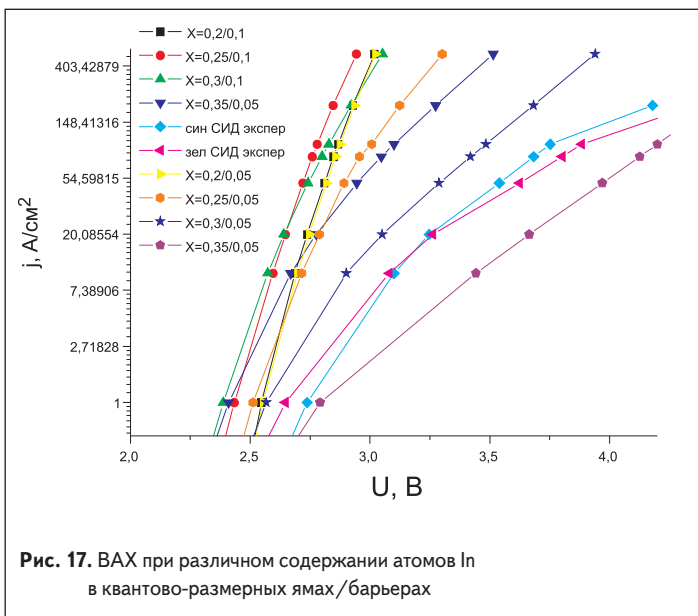


Рис. 17. ВАХ при различном содержании атомов In в квантово-размерных ямах/барьерах

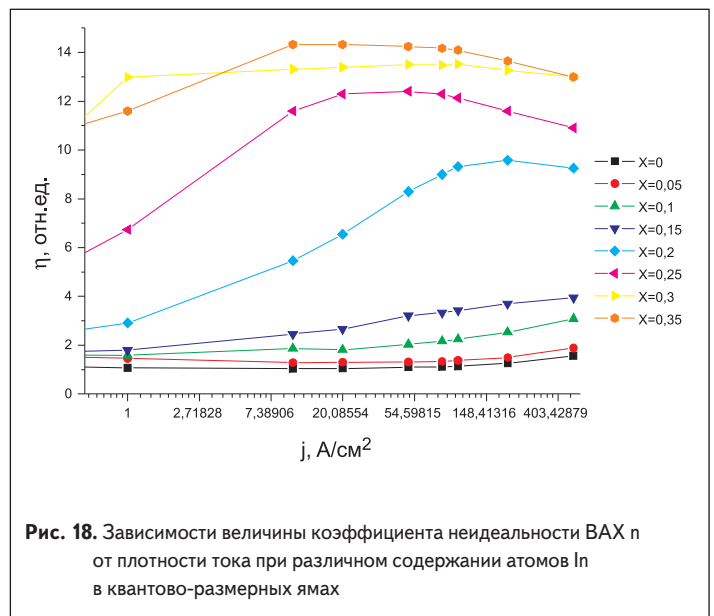


Рис. 18. Зависимости величины коэффициента неидеальности ВАХ n от плотности тока при различном содержании атомов In в квантово-размерных ямах

характеристика имеет хорошо известный вид, что связано с существенным влиянием на величину тока процессов рекомбинации электронов и дырок в области объемного заряда (ООЗ). Затем все более начинает преобладать ток надбарьерной инжекции носителей заряда, при этом $n \rightarrow 1$ при малом уровне инжекции ($J = 1\text{--}20 \text{ А/см}^2$) и $n \rightarrow 2$ при увеличении ее уровня ($J = 20\text{--}500 \text{ А/см}^2$). Наличие КЯ начинает сказываться на виде ВАХ уже при значениях $x = 0,05\text{--}0,1$, особенно в диапазоне $x = 0,1\text{--}0,35$. При $x > 0,1$ величина n постепенно растет во всем диапазоне $J = 0,1\text{--}500 \text{ А/см}^2$, достигая значений $n > 2$ и даже $n \gg 2$ при $x > 0,15$.

2. При малой плотности тока, например при $J = 1 \text{ А/см}^2$, напряжение на МКГ с содержанием индия в квантовых ямах $x > 0,25$ меньше напряжения на структуре с $x = 0$, причем абсолютная величина разницы напряжений ΔU сначала растет с увеличением x до 0,2, затем ΔU уменьшается, и при $x > 0,3$ напряжение на МКГ становится больше, чем напряжение на структуре с $x = 0$ (табл. 1 и рис. 15). С увеличением плотности тока зависимость ΔU от x сохраняет свой характер, но постепенно смещается в область меньших значений x . Так, например, при $J = 100 \text{ А/см}^2$ ΔU растет с увеличением x до 0,15, затем ΔU уменьшается, и при $x > 0,2$ напряжение на МКГ становится больше, чем напряжение на структуре с $x = 0$.

3. С увеличением плотности тока имеет место зависимость падения напряжения $U_{ном}$ на активной области МКГ с данным содержанием индия в КЯ (x) и на области с той же протяженностью и теми же координатами в структуре без КЯ ($x = 0$) (табл. 1 и рис. 16). При $x = 0\text{--}0,15$ величина $U_{ном}$ плавно уменьшается с ростом J от 0,1 до 500 А/см^2 , однако при $x > 0,2$ уменьшение $U_{ном}$ прекращается уже при $J = 10 \text{ А/см}^2$. При дальнейшем увеличении J величина $U_{ном}$ растет. При этом с ростом X при одинаковой плотности тока величина $U_{ном}$ постепенно приближается к величине разницы напряжений ΔU на МКГ с данным содержанием индия в КЯ (X) и на структуре без КЯ ($x = 0$).

Таким образом, можно сделать вывод, что при достаточно больших значениях плотности тока, наблюдающиеся отклонения ВАХ гетероструктур с КЯ от «идеальной» ВАХ с $x = 0$, отражаемые зависимостями значений коэффициента неидеальности n от J и X , в основном обусловлены особенностями физических процессов, происходящих в активной квантово-размерной области.

При малых значениях $x = 0,05\text{--}0,1$ с ростом плотности тока концентрация электронов и дырок в КЯ увеличивается, а неравномерность распределения по ним уменьшается, при этом величина напряженности тормозящего электрического поля в квантово-размерной области снижается, достигая, к примеру, нуля при $x = 0,1$ и $J = 100 \text{ А/см}^2$.

Понижение напряженности электрического поля в квантово-размерной области СИД с ростом уровня инжекции было рассмотрено также в работе [19].

При одном и том же значении J и при $x > 0,1$ в активной области постепенно начинает возникать ускоряющее электрическое поле, достигающее, например, при $x = 0,2$ и $J = 100 \text{ А/см}^2$ величины $3 \cdot 10^5 \text{ В/см}$, а при $x = 0,3$ и $J = 100 \text{ А/см}^2$ величины $1,5 \cdot 10^6 \text{ В/см}$. Этот эффект обусловлен необходимым увеличением концентрации электронов и дырок в КЯ для поддержания одной и той же величины плотности тока, так как с увеличением X увеличивается глубина ям и значения U_c и U_v растут (2). Одновременно увеличивается неравномерность распределений электронов и дырок по КЯ, в активной области возникает дополнительная разность потенциалов — иными словами, появляется дополнительное напряжение на МКГ по сравнению со структурой $x = 0$.

Следует также отметить, что неравномерность распределений электронов и дырок по КЯ приводит к неравномерности распределения скоростей излучательной и безызлучательной рекомбинации по ним, причем эта неравномерность увеличивается с ростом x . Например, при $x > 0,2$ активно работают только две средние КЯ.

Моделирование показало, что видом ВАХ при одной и той же величине x можно управлять количеством ям, степенью легирования и введением индия в состав барьеров. Как показано и в работе [13], увеличение концентрации доноров в барьерах снижает падение напряжения на МКГ. На рис. 17 показано, что введение In в состав барьеров при $x > 0,2$ приводит к существенному улучшению ВАХ, особенно при больших плотностях тока.

Третий этап настоящей работы состоял в уточнении модели МКГ для СИД синего и зеленого цветов свечения и в проведении сравнения результатов моделирования и экспериментальных, в том числе собственных, данных.

Результаты моделирования, рассмотренные выше, получены без учета двух наиболее важных обстоятельств. Во-первых, в модели не было учтено присутствие в квантово-размерной активной области сильного электрического поля, обусловленного спонтанной поляризацией и большим пьезоэлектрическим коэффициентом в МКГ, выращенных на c -подложках. Во многих работах считается, что в достаточно коротких ямах и при сравнительно большой концентрации инжектированных носителей заряда влиянием этого поля можно пренебречь. Заметим, что обычно плотность рабочего тока в СИД и УФИД составляет более 20 А/см^2 . Во-вторых, известно, что в активной области СИД имеет место неоднородное распределение содержания атомов In. Был предложен ряд моделей, учитывающих эту неоднородность, например, в виде гауссовского (П. Г. Елисеев [20]) или экспоненциального (А. Э. Юнович,

Ф. И. Маняхин [21]) хвоста энергетических состояний в квантово-размерных ямах. Было предположено, что кристалл СИД, имеющий площадь p - n -перехода S_0 , может быть рассмотрен как совокупность параллельно соединенных «микро-СИД», соответствующих областям с различным содержанием атомов In в МКГ и имеющих площади p - n -перехода $S(x)$. При этом отношение $S(x)/S_0$ может быть описано распределением Гаусса (рис. 19):

$$S(x) = \frac{S_{СИД} \times 10^{-2}}{\sqrt{2 \times \pi} \times \sigma} \times \exp\left[-\frac{(X - X_0)^2}{2 \times \sigma^2}\right] = \frac{S_{СИД}}{\sqrt{2 \times \pi} \times 0,017} \times \exp\left[-\frac{(X - X_0)^2}{2 \times (0,017)^2}\right], \quad (4)$$

где: $S_{СИД}$ — полная площадь гетероструктуры СИД, величина x изменяется дискретно в пределах $x = 0,15\text{--}0,25$ с шагом $dx = 0,01$, а величина $x_0 = 0,2$.

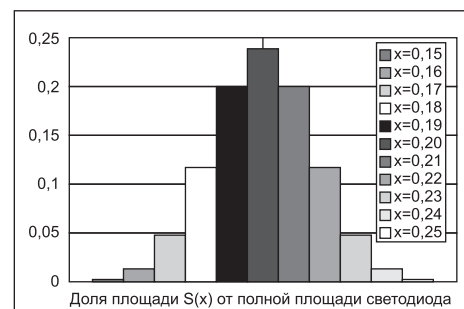


Рис. 19. Диаграмма гауссовского распределения $S(x)/S_{СИД}$ в зависимости от содержания атомов In(x)

Имея результаты моделирования характеристик каждого «микро-СИД» (ВАХ, внутренний квантовый выход и т. п.), можно рассчитать ВАХ, квантовый выход и спектры излучения СИД в целом. При этом предполагается, что дрейфом и диффузией инжектированных носителей заряда в КЯ в СИД в целом и в направлениях, параллельных плоскости p - n -перехода, можно пренебречь.

При расчете ВАХ и спектров СИД синего цвета свечения были использованы результаты моделирования МКГ с содержанием индия $x = 0,15\text{--}0,25$, описанные выше. Для сравнения с экспериментальными ВАХ, измеренными С. Г. Никифоровым [22] на диодах компании Cree, при расчетах было учтено последовательное сопротивление контактов к МКГ в целом, равное 23 Ом. Эта величина была получена из измерений ВАХ образцов при плотности тока 500 А/см^2 в импульсном режиме. Сравнение расчетных и экспериментальных характеристик представлено на рис. 20. Наилучшее совпаде-

Таблица 4. Соответствие содержания атомов In к занимаемой площади

Содержание x	0,15	0,16	0,17	0,18	0,19	0,20	0,21	0,22	0,23	0,24	0,25
$S(x)/S_{СИД}$	0,0027	0,014	0,048	0,117	0,200	0,239	0,200	0,117	0,048	0,014	0,0027

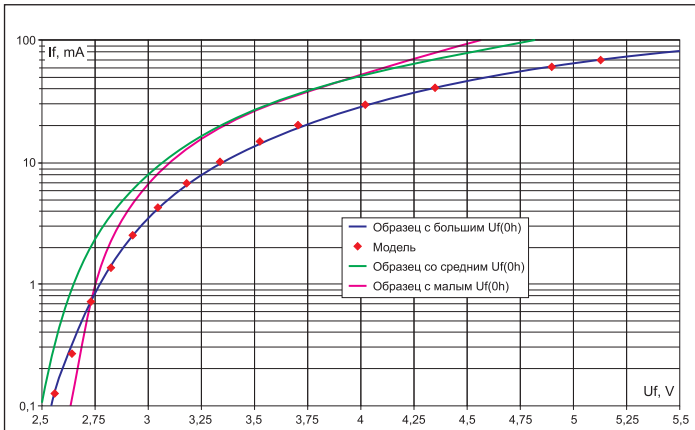


Рис. 20. Экспериментальные ВАХ СИД синего цвета свечения и результаты моделирования

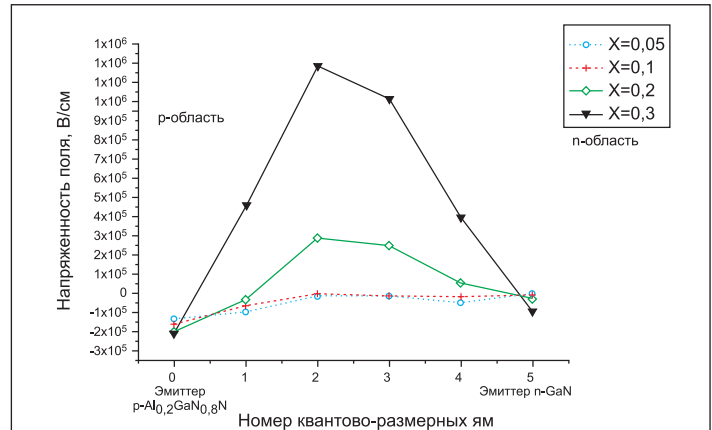


Рис. 21. Зависимость напряженности поля от содержания атомов In и ее распределение по КЯ при $J = 100 \text{ A/cm}^2$

ние наблюдалось для СИД, имеющих в партии приборов наибольшее значение напряжения при рабочем токе 80 mA (плотность тока 170 A/cm^2) (табл. 4).

В заключение исследовалось поведение ВАХ (рис. 13 и 14). При достаточно больших значениях плотности тока наблюдающиеся отклонения ВАХ МКГ с КЯ от ВАХ без КЯ ($x = 0$), отражаемые зависимостями значений коэффициента неидеальности n от J и x (рис. 18), в основном обусловлены особенностями физических процессов, происходящих в активной квантово-размерной области.

Анализ поведения ВАХ и зависимость коэффициента неидеальности от плотности тока у МКГ с различным содержанием атомов In выявляют следующее:

- в отсутствие КЯ ($x = 0$) ВАХ имеет общеизвестный вид;
- в области малых плотностей тока (вплоть до $J = 0,1 \text{ A/cm}^2$) $n > 1$. Это связано с существенным влиянием на величину тока процессов рекомбинации электронов и дырок в области объемного заряда;
- далее все более начинает преобладать ток надбарьерной инжекции носителей заряда, при этом $n \rightarrow 1$ при малом уровне инжекции ($J = 1\text{--}20 \text{ A/cm}^2$) и $n \rightarrow 2$ при увеличении уровня инжекции ($J = 20\text{--}500 \text{ A/cm}^2$);
- наличие КЯ начинает сказываться на виде ВАХ уже при значениях $x = 0,05\text{--}0,1$, особенно в диапазоне $x = 0,1\text{--}0,35$;
- при $x > 0,1$ величина n постепенно растет во всем диапазоне $J = 0,1\text{--}500 \text{ A/cm}^2$, достигая значений $n > 2$ и даже $n \gg 2$ при $x > 0,15$.

При малых значениях $x = 0,05\text{--}0,1$ с ростом плотности тока концентрация электронов и дырок в КЯ увеличивается, а неравномерность их распределения по КЯ уменьшается, при этом величина напряженности тормозящего электрического поля в квантово-размерной области снижается, достигая нуля при $x = 0,1$ и $J = 100 \text{ A/cm}^2$. При одном и том же значении J и при $x > 0,1$ в активной области постепенно начинает возникать ускоряющее электрическое поле, достигающее при $x = 0,2$ и $J = 100 \text{ A/cm}^2$ величины $3 \cdot 10^5 \text{ V/cm}$, а при $x = 0,3$ и $J = 100 \text{ A/cm}^2$ — величины $1,5 \cdot 10^6 \text{ V/cm}$ (рис. 21).

Этот эффект обусловлен необходимым увеличением концентрации электронов и дырок в КЯ для поддержания одной и той же величины плотности тока, так как с увеличением x увеличивается глубина КЯ и значения U_c и U_v растут. Одновременно повышается неравномерность распределения электронов и дырок по КЯ (табл. 5), в активной области возникает дополнительная разность потенциалов, т. е. появляется дополнительное напряжение на МКГ по сравнению со структурой $x = 0$.

Литература

1. Jhou Y. D. et al. Nitride-based light emitting diode and photodetector dual function devices with InGaN/GaN multiple quantum well structure // Sol. State Electr. 2005. V. 49.
2. Holonyak N. Jr. From transistors to lasers and light-emitting diodes // MRS Bulletin. 2005. July.

3. Akasaki I. Nitride semiconductors — impact on the future world // J. Cryst. Growth. 2002. V. 237–239.
4. Schubert E. F. Light-emitting diodes. Cambridge: Cambridge University Press. 2006.
5. Fischer A. L. LEDs in the Greenhouse // Photonics spectra. 2008. July.
6. Whitaker T. LED modules make dirty water potable // Compound Semiconductor. 2005. May.
7. Whitaker T. Boeing turns to LED lighting for its new 787 Dreamliner // LEDs Magazine. 2006. June.
8. Whitaker T. LEDs attempt the jump from small screen to large screen // Compound semiconductor. 2004. V. 10. № 11.
9. Whitaker T. LED streetlights help Toronto become brighter and greener // LEDs magazine. 2007. April.
10. Owen B. Toronto condominium adopts LED lamps for interior lighting // LEDs magazine. 2008. January.
11. Мумрин В. Ф., Буласевич К. А., Подоjsкая Н. И. et al. Modelling study of MQW LED operation // Phys. Stat. Sol. 2005. V. 2. № 7.
12. Сушков В. П., Рабинович О. И., Архипов А. Л. Компьютерное моделирование излучающих свойств светодиодов на основе гетероструктур InGaN и AlGaInP. Труды IV российско-японского семинара «Перспективные технологии и оборудование для материаловедения, микро- и наноэлектроники». М.: МГИУ. 2006.
13. Рабинович О. И., Сушков В. П., Шишов А. В. Компьютерное моделирование InGaN

Таблица 5. Концентрация электронов и дырок в КЯ при плотности тока $J = 100 \text{ A/cm}^2$

Содержание атомов индия (x) в КЯ	Концентрация электронов в КЯ, cm^{-3}				Концентрация дырок в КЯ, cm^{-3}			
	КЯ № 1	КЯ № 2	КЯ № 3	КЯ № 4	КЯ № 1	КЯ № 2	КЯ № 3	КЯ № 4
0,05	$3,76 \cdot 10^{-16}$	$2,05 \cdot 10^{-18}$	$2,87 \cdot 10^{-18}$	$4,34 \cdot 10^{-18}$	$5 \cdot 10^{-18}$	$2,46 \cdot 10^{-18}$	$2,11 \cdot 10^{-18}$	$1,46 \cdot 10^{-18}$
0,1	$1,19 \cdot 10^{-17}$	$6,4 \cdot 10^{-18}$	$6,54 \cdot 10^{-18}$	$9,48 \cdot 10^{-18}$	$1,1 \cdot 10^{-19}$	$6,01 \cdot 10^{-18}$	$5,35 \cdot 10^{-18}$	$3,37 \cdot 10^{-18}$
0,2	$8,32 \cdot 10^{-17}$	$7,53 \cdot 10^{-18}$	$7,49 \cdot 10^{-18}$	$1,3 \cdot 10^{-19}$	$1,59 \cdot 10^{-19}$	$6,61 \cdot 10^{-18}$	$5,59 \cdot 10^{-18}$	$2,9 \cdot 10^{-18}$
0,3	$3,48 \cdot 10^{-16}$	$4,21 \cdot 10^{-18}$	$2,82 \cdot 10^{-19}$	$7,06 \cdot 10^{-19}$	$5,6 \cdot 10^{-19}$	$1,64 \cdot 10^{-19}$	$2,37 \cdot 10^{-18}$	$5,41 \cdot 10^{-17}$

- светодиодов. 5-я Всеросс. конф. «Нитриды галлия, индия и алюминия – структуры и приборы». СПб: СПбПУ. 2007.
14. Рабинович О. И., Сушков В. П. Моделирование InGaN светодиодов. Труды V российско-японского семинара «Оборудование, технологии и аналитические системы для материаловедения, микро- и наноэлектроники». М.: МИСиС. 2007.
 15. Piprek J., Nakamura Sh. Physics of high-power InGaN/GaN lasers // IEEE Proc.-Optoelectron. 2002. V. 149. № 4.
 16. Tomczyk A., Sarzala R. P., Czyszanowski T., Wasiak M., Nakwaski W. Fully self-consistent three-dimensional model of edge-emitting nitride diode lasers // Opto-Electron. Rev. 2003. V. 11. № 1.
 17. Winston D. W. Physical simulation of optoelectronic semiconductor devices. The thesis for the Doctor of Philosophy degree. Dep. of Electrical and Computer Engineering of the University of Colorado. 1996.
 18. Сушков В.П., Кузнецов Г. Д., Рабинович О. И. Компьютерное моделирование параметров полупроводниковых компонентов микроэлектроники. Уч.-метод. пособие. М.: МИСиС, «Учеба». 2005.
 19. Маняхин Ф. И. Природа сопротивления компенсированного слоя и механизмы рекомбинации в светодиодных структурах // Известия вузов. Сер. МЭТ. 2006. № 4.
 20. Eliseev P. G., Perlin P., Lee J., Osinski M. «Blue» temperature-induced shift and band-tail emission in InGaN-based light sources // Appl. Phys. Lett. 1997. V. 71 (5).
 21. Кудряшов В. Е., Мамакин С. С., Туркин А. Н. и др. Спектры и квантовый выход излучения светодиодов с квантовыми ямами на основе гетероструктур из GaN — зависимость от тока и напряжения // Физика и техника полупроводников. 2001. Т. 35. Вып. 7.
 22. Никифоров С. Г. Разработка методик контроля деградации характеристик светодиодов на основе твердых растворов AlGaInP и AlGaInN: дис. на соиск. уч. ст. канд. тех. наук. М., 2007.