GaInAs/Ge / Н. А. Калюжный, А. С. Гудовских, В. В. Евстропов, В. М. Лантратов, С. А. Минтаиров, Н. Х. Тимошина, М. З. Шварц, В. М. Андреев // ФТП. – 2010. – Т. 44, № 11. – С. 1568—1576.

 Кобелева, С. П. Диффузия фосфора в германии на границе наногетероструктуры InGaP/Ge / С. П. Кобелева, Д. А. Кузьмин, С. Ю. Юрчук, В. Н. Мурашев, И. М. Анфимов, И. В. Щемеров, Б. В. Жалнин // Изв. вузов. Материалы электрон. техники. – 2011. – № 2. – С. 56—60.

3. **Малкович, Р. Ш.** К анализу координатно–зависимой диффузии / Р. Ш. Малкович // ЖТФ. – 2006. – Т. 76, № 2. – С. 137—140.

Работа выполнена на оборудовании ЦКП «Металлургия и материаловедение» НИТУ МИСиС в рамках реализации ФЦП «Научные и научно– педагогические кадры инновационной России» на 2009—2013 годы.

УДК 621.315.592

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ КВАНТОВОГО ВЫХОДА InGaN/Si-СВЕТОДИОДОВ ОТ ПЛОТНОСТИ ТОКА

© 2012 г. О. И. Рабинович, В. П. Сушков ФГАОУ ВПО «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

Исследован эффект уменьшения квантового выхода InGaN светоизлучающих диодов при увеличении плотности тока. Определены причины, влияющие на этот эффект. Показаны способы уменьшения падения квантового выхода и положительные результаты применения кремниевых подложек в многокомпонентных наногетероструктурах для InGaN светоизлучающих диодов.

Ключевые слова: светодиод, InGaN, кремний, деградация, моделирование.

Введение

Успехи и достижения в исследовании и производстве многокомпонентных наногетероструктур (**МКНГ**) на основе твердых растворов $Al_y In_x Ga_{1-x-y} N$ сделали реальностью применение светоизлучающих диодов (**СИД**) на их основе практически во всех областях промышленности.

Высокая теплопроводность соединений элементов III группы Периодической таблицы Д. И. Менделеева и широкий диапазон изменения значений запрещенной зоны, несмотря на отличительную черту материалов пьезоэлектрическое поле и возможную спонтанную поляризацию, делают их особенно интересными для применения в оптоэлектронных приборах, высокомощной и высокочастотной электронике [1—5]. Одними из главных представителей оптоэлектронных полупроводниковых приборов являются СИД. Количество областей применения InGaN СИД неуклонно растет. Сегодня практически решены проблемы ограниченности диапазона цветов и создания СИД белого цвета свечения, что ранее препятствовало использованию СИД в освещении.

Широкое применение СИД на основе AlGaInN МКНГ обнаруживает и проблемы, требующие решения: изучение и прогнозирование деградации рабочих характеристик СИД при влиянии различных воздействий, увеличение эффективности.

Необходимо иметь способ получения оптимальных параметров МКНГ и СИД с максимальной экономией материальных затрат. Для подобных сложных объектов расчеты основных зависимостей, определяющих качество СИД, таких как вольтамперные характеристики (ВАХ), внутренний квантовый выход излучения и его зависимость от плотности тока, требуют использования численных методов компьютерного моделирования [6], учитывающих все многообразие конструктивных, физических и технологических параметров МКНГ. Подобный подход был успешно продемонстрирован для AlGaInN-лазеров в работах Sh. Nakamura и А. Томчука, а также в работах [7—9] с использованием программы Sim Windows. Применение компьютерного моделирования представляется оптимальным, так как позволяет не только уточнить теоретические характеристики InGaN МКНГ, но и значительно сэкономить материальные средства при отработке технологии их получения.

Цель работы — исследование эффекта уменышения квантового выхода InGaN СИД при увеличении плотности тока.

Структура моделируемых светоизлучающих диодов

Структура всех моделируемых СИД–приборов состояла из GaN–эмиттера *n*-типа проводимости, In_xGa_{1-x}N квантово–размерной ямы **(КЯ)** в активной области и GaN–эмиттера *p*-типа.

При моделировании МКНГ СИД синего цвета свечения содержание In принимали равным x = 0,2, а для зеленого цвета свечения x = 0,35. Это типичные значения для СИД таких цветов. Концентрация и доноров (Te) в GaN-эмиттере *n*-типа проводимости по средним значениям, и акцепторов (Mg) в GaN-эмиттере *p*-типа составляла $N_{\rm d} = N_{\rm a} =$ $= 10^{19} \,{\rm cm}^{-3}$.

Приборные файлы содержали следующие параметры КЯ и барьеров в активной области:

– длина $\rm In_{0,2}Ga_{0,8}N$ (синего цвета свечения) и $\rm In_{0,35}Ga_{0,65}N$ (зеленого цвета свечения) КЯ в активной области составляла 2 нм при длине GaN–барьеров 3 нм или 3,5 нм при длине GaN–барьеров 4,5 нм;

- количество КЯ изменялось от 1 до 5;

– для каждого набора КЯ было выбрано 3 типа приборов с различным их легированием и барьеров: *i*-тип (без специального легирования), *n*-тип (легирование донорами, $N_{\rm d} = 10^{18}$ см⁻³), *p*-тип (легирование акцепторами, $N_{\rm a} = 10^{18}$ см⁻³);

 – при моделировании температуру принимали равной 300 К.

Подложкой считали карбид кремния.

Методика проведения моделирования

Программа Sim Windows основана на точных физических моделях в одномерном приближении (1D). Ключевыми постулатами программы являются следующие.

1. В уравнении Пуассона учитывают заряды ионизированных примесных атомов, свободных носителей заряда и связанных носителей заряда в КЯ.

2. В программе используют выражения для трех видов тока: дрейфового и диффузионного токов в областях прибора, состоящих из объемных материалов, или в областях с плавным изменением состава материала; тока термоэлектронной эмиссии для контактов КЯ с объемными материалами; термоэлектронного и туннельного токов при резких границах между двумя объемными материалами.

3. Для процессов рекомбинации носителей заряда в программе учитывают механизмы спонтанной и стимулированной излучательной рекомбинации «зона—зона» и механизмы безызлучательной рекомбинации по моделям Шокли—Рида—Холла (ШХР) и Оже. Для моделирования СИД на основе твердых растворов $In_xGa_{1-x}N$ авторами были созданы файлы параметров приборов (*device file*) и параметров материалов (*material file*).

Для каждого конкретного СИД в его файле прибора указывали 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 файле параметров материалов указывали такие параметры 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 более 25 параметров.

Результаты и их обсуждение

На рис. 1 представлены характеристики, полученные при моделировании: зонная диаграмма, распределение потенциала поперек структуры, распределение концентраций электронов и дырок и распределение полной скорости рекомбинации носителей заряда у СИД синего цвета свечения, содержащих 4 КЯ с нелегированными КЯ длиной 3,5 нм и барьерами длиной 4,5 нм *i*-типа проводимости при плотности тока 100 А/см² и напряжении 3,6 В.

Из рис. 1 хорошо видно, что инжектированные электроны и дырки неравномерно распределены в КЯ: концентрация электронов убывает по направлению к p-GaN-эмиттеру, а концентрация дырок убывает по направлению к n-GaN-эмиттеру. Рекомбинация всех носителей сосредоточена в КЯ, инжекция электронов в p-GaN-эмиттер и дырок в n-GaN-эмиттер практически отсутствует. В активной области имеет место локальное изменение электростатического потенциала, обусловленное пространственным распределением электронов и дырок.

Важнейшим параметром, описывающим излучающие свойства СИД, является внутренний квантовый выход η_{вн}. Если активная область СИД представляет собой набор КЯ с одинаковой длиной, то η_{вн} равен отношению скорости излучательной рекомбинации неравновесных носителей заряда к общей:

$$_{\rm H} = - \frac{\sum_{k=1}^{m} R_{_{\rm ИЗЛ}}}{\sum_{k=1}^{m} R_{_{\rm OбIII}}},$$

где *k* — номер КЯ от 1 до *m*.

 $\eta_{\scriptscriptstyle \rm B}$

Моделирование проводили первоначально в предположении, что нет большой разницы между характеристическими временами $\tau_{n0} \approx \tau_{p0} = 10^{-9}$ с. При этом не был увиден эффект уменьшения квантового



Рис. 1. Интерфейс окна программы с основными характеристиками моделирования



Рис. 2. Экспериментальные (1, 3) и расчетные (2, 4) зависимости квантового выхода СИД зеленого (1) и синего (2—4) цвета свечения от плотности тока:

1, 3 — эксперимент; 2, 4 — результат моделирования (2 — в предположении, что характеристические времена не равны; 4 — в предположении, что характеристические времена равны)

выхода (рис. 2, кривая 4). Далее предполагали, что существует большая разница характеристических времен $\tau_{n0} = 10^{-11}$ с и $\tau_{p0} = 10^{-8}$ с, что дало хорошее согласие с экспериментальными данными (рис. 2). Причем считали, что значение коэффициента захвата в механизме излучательной рекомбинации B = $= 10^{-10}$ см³/с не зависит от плотности тока [10]. Такая асимметрия и столь большая разница времен может наблюдаться для примесей и дефектов, образующих глубокие донорные уровни, например кислорода или дислокаций, играющих роль электронных ловушек. Поскольку кислород, образуя с дефектами комплексы, создает глубокие энергетические уровни вблизи середины запрещенной зоны, то захват электронов этими центрами будет происходить быстрее, чем дырок. Как следствие, в широком интервале плотностей тока $\eta_{\rm BH}$ будет уменьшаться с ростом уровня инжекции за счет перераспределения инжектированных носителей между КЯ (см. рис. 2).

Предположение, что уменьшение квантового выхода при увеличении плотности тока происходит из– за сильного различия характеристических времен жизни, согласуется с результатами работы [11], где экспериментально установлено, что времена жизни носителей заряда в InGaN/GaN–КЯ СИД значительно различаются по своему значению.

Использование Si(111) в качестве подложки при выращивании МКНГ существенно уменьшит концентрацию дефектов в материале при малом рассогласовании постоянных решеток, что уменьшает различие характеристических времен жизни. Например, исследователи Purdue University (штат Индиана, США) использовали подложки кремния, покрытые хорошо отражающим эпитаксиальным слоем нитрида циркония [12]. Нитрид циркония химически взаимодействует с кремнием, изменяя его свойства. Исследователи решили проблему существенного рассогласования постоянных решеток Si и InGaN, предварительно осадив на кремний барьерный слой стабильного нитрида алюминия. Эпитаксиальный слой ZrN обеспечивает омический контакт к слою GaN n-типа проводимости и служит хорошим рефлектором для отраженного света, в то время как слой AlN выполняет три функции: барьер, препятствующий взаимодействию с кремнием; хороший проводник тепла и электрический изолятор. Для осаждения обоих слоев использован метод реактивного распыления. Учеными из компании Lattice Power Corporation также были проведены исследования в этой области и получены впечатляющие результаты. При использовании буферных слоев AlGaN и с помощью профилирования поверхности подложек кремния, которые снимают высокое напряжение, появляется возможность выращивать правильно структурированные МКНГ больших размеров (миллиметрового диапазона) с очень низким содержанием дефектов 5 · 10⁸ см⁻² и практически одинаковыми характеристическими временами. Для большего увеличения квантового выхода и исключения оптического поглощения подложкой используют флип-чип-технологию производства МКНГ. На профилированную подложку Si(111) наносят GaN, металлический контакт наносят на *p*-область GaN-пленки (это будет играть роль отражателя выходящего света), металл припайки контакта (обычно золото или его сплавы) наносят поверх р-металла. Далее кремниевая подложка отделяется химическим травлением с последующим нанесением *n*-контакта, и завершается процесс убиранием шероховатостей с поверхности, так как свечение выходит со стороны *n*–GaN.

Дополнительным положительным фактором использования кремния является то, что Si-подложки массово выпускают значительно бо́льших размеров по сравнению с Al_2O_3 , что позволит значительно увеличить выход годного МКНГ в одном процессе и таким образом снизить их стоимость. Кроме того, кремний лучше рассеивает тепло, чем Al_2O_3 , что увеличит надежность и долговечность работы СИД примерно на 20 %.

Первые промышленные результаты производства СИД на Si-подложках подтверждают правильность выбранного пути. Компания Bridgelux Inc. сообщила о достижении существенного прогресса в процессе разработки СИД, основанных на технологии GaN СИД-на-Si. Был продемонстрирован прибор, обеспечивающий световой поток 135 лм/Вт затраченной энергии. Для сравнения, традиционные лампы накаливания обеспечивают данный показатель на уровне 10—15 лм/Вт [13].

Заключение

Проведено исследование эффекта падения квантового выхода СИД при увеличении протекающего тока на основе компьютерного моделирования. Установлено, что эффект является следствием большого различия характеристических времен жизни носителей заряда (минимум на два порядка величины). Показано, что при использовании кремниевых подложек при выращивании МКНГ данный эффект может быть нивелирован.

Библиографический список

1. **Jhou**, **Y. D.** Nitride–based light emitting diode and photodetector dual function devices with InGaN/GaN multiple quantum well structures / Y. D. Jhou, C. H. Chen, R. W. Chuang, S. J. Chang, Y. K. Su, P. C. Chang, P. C. Chen, H. Hung, S. M. Wang, C. L. Yu // Solid State Electronics – 2005. – V. 49. – P. 1347–1351.

2. Gao, F. Complexes, clustering, and native-defect-assisted diffusion of aluminum in silicon / F. Gao, E. J. Bylaska, W. J. Weber // Phys. Rev. B. – 2004. – V. 70. – P. 2452081—2452088.

3. Akasaki, I. Nitride semiconductors — impact on the future world / I. Akasaki // J. Cryst. Growth. – 2002. – V. 237–239. – P. 905—911.

4. **Pankove, J. I.** Photoemission from GaN / J. I. Pankove, H. Schade // Appl. Phys. Lett. – 1974. – V. 25, N 1. – P. 53—55.

5. **Zukauskas, A.** Quaternary AlInGaN MQWs for Ultraviolet LEDs / A. Zukauskas, M. S. Shur, R. Gaska // MRS Bulletin. – 2001. – V. 10. – P. 764—769.

6. Basic research needs for solid-state lighting. Report of the Basic Energy Sciences Workshop on Solid-State Lighting [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://www.sc.doe.gov/bes/reports/files/SSL_rpt.pdf

7. Winston, D. W. Physical simulation of optoelectronic semiconductor devices. The thesis for the Doctor of Philosophy degree. / D. W. Winston // Department of Electrical and Computer Engineering of the University of Colorado, 1996.

 Рабинович, О. И. Компьютерное моделирование InGaN светодиодов / О. И. Рабинович, В. П. Сушков // 5-я Всерос. конф. «Нитриды галлия, индия и алюминия – структуры и приборы». – СПб. : Политех. ун–т, 2007. – С. 81—82.

9. Rabinovich, O. I. New results of InGaN LED simulation / O. I. Rabinovich, S. G. Nikiforov, V. P. Sushkov // Proc. of SPIE V. 6468, Physics and Simulation of Optoelectronic Devices XV, San Jose, California, USA, 2007. – P. 64680U–1—64680U–10.

10. Таблицы свойств материалов и сборник экспериментальных данных [Электронный ресурс] / Физико-Технический Институт им. А. Ф. Иоффе РАН – Режим доступа: http://www. matprop.ru.

11. Van de Walle, Ch. G. Small valence–band offsets at GaN/ InGaN heterojunctions / Ch. G. Van de Walle, J. Neugebauer // Appl. Phys. Lett. – 1997. – V. 70. – P. 2577—2579.

12. Adyr, F. G. Organometallic vapor phase epitaxial growth of GaN on ZrN/AlN/Si substrates / F. G. Adyr, T. E. Simpsion// Appl. Phys. Lett. – 2008. – V. 93. – P. 023109—023111.

13. Технические данные и характеристики СИД и МКНГ / Compound Semiconductors [Электронный ресурс] – Режим доступа: http://www.compoundsemiconductor.net/csc/details. php?cat=news&id=19734144.