

AlInGaN 量子阱垒层材料的优化*

文 锋^{1,†} 刘德明¹ 黄黎蓉²

(1 华中科技大学光电子科学与工程学院, 武汉 430074)

(2 华中科技大学武汉光电国家实验室, 武汉 430074)

摘要: 采用 $k \cdot p$ 方法理论, 考虑了极化电场和自由载流子重新分布等因素, 通过薛定谔方程和泊松方程自洽求解得到 InGaN/AlInGaN, InGaN/GaN, InGaN/InGaN, InGaN/AlGaN 量子阱导带和价带的能带结构, 并由此计算了不同量子阱结构的自发发射谱. 分析对比发现 AlInGaN 材料特有的自发极化和压电极化效应在阱垒界面处形成的极化电荷对量子阱发光特性有重要的影响. 以 AlInGaN 为垒, 优化其中各元素的组分可以减小极化电场的影响, 提高量子阱自发发射谱强度. 同时, 综合考虑了极化电荷和势垒高度的影响, 提出了具体的优化方法, 并给予了物理解释.

关键词: AlInGaN; 极化电场; 自发发射谱; 垒材料

PACC: 7280E; 7110C; 7115J

中图分类号: TN304.23

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2007)06-0893-05

1 引言

LED(light emitting diode)具有节能、环保等诸多优点, 是公认的可以替代白炽灯的新一代照明光源^[1,2]. 目前白光 LED 的发光效率已超过 50 lm/W, 如应用于日常照明仍需提高其发光效率. 白光 LED 大多是由蓝光 LED 芯片涂敷 YAG 荧光粉得到, 而目前蓝光 LED 芯片的效率并不高, 因此提高白光 LED 的效率关键是提高蓝光 LED 芯片的效率.

III 族氮化物较大的自发极化常数和压电极化常数导致的内建自发极化电场和压电极化电场, 是影响蓝光 LED 内量子效率的重要原因^[3]. 通常的蓝光量子阱 LED 采用 InGaN 为阱层材料, GaN 为垒层材料^[4]. InGaN/GaN 晶格失配较大, 内建压电极化电场也较大. 而 AlInGaN 是一种四元化合物, 通过调整其中各元素的组分, 可获得晶格常数与任意 x 的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 匹配的量子阱. 以 AlInGaN 为垒, 可以减小压电极化电场, 提高量子阱发光强度. Zhang 的实验^[5]已经证明, InGaN/AlInGaN 蓝光 LED 的光致发光强度高于 InGaN/GaN 和 InGaN/AlGaN 蓝光 LED, 但是他们并没有从理论上研究垒层材料影响量子阱发光特性的具体原因, 也没有对垒 AlInGaN 中各元素的组分进行优化. 因此, 理论上迫切需要研究以下两方面: (1) AlInGaN 垒材

料对量子阱的发光特性有何影响; (2) 如何优化 AlInGaN 中各元素的组分, 提高量子阱的发光强度. 作者首先选择了阱层材料相同但垒层材料不同的 4 种量子阱结构 InGaN/AlInGaN, InGaN/GaN, InGaN/InGaN 和 InGaN/AlGaN 作为研究对象, 计算对比了不同量子阱结构的内建势能分布、电子空穴波函数和自发发射谱, 确定了极化电场大小对自发发射谱强度的重要影响. 导带和价带能带结构分别由抛物带模型和 RSP 模型求得, 计算过程中考虑了极化电场和载流子重新分布的影响, 通过薛定谔方程和泊松方程联立自洽求解. 继而又从极化电场的形成原理出发, 综合考虑垒材料变化所引起的应变、势垒势能的变化对自发发射谱的影响, 得到了优化 AlInGaN 垒材料中各元素组分以提高量子阱发光强度的途径.

2 物理模型

导带和价带的能带结构需要通过求解薛定谔方程获得. $k \cdot p$ 方法理论是将薛定谔方程在 k 空间某一特定的点展开, 忽略远离这一点的与 k 相关的微扰项, 从而获得简化的哈密顿矩阵. 因此 $k \cdot p$ 方法理论可以很好地描述布里渊区中心附近的能带结构, 是研究直接带隙材料半导体发光特性的行之有效的理论. 本文采用 $k \cdot p$ 方法理论对薛定谔方程进行求解.

* 武汉市科技攻关计划资助项目(批准号:20061002036)

† 通信作者. Email: wenf2004@163.com

2006-12-07 收到, 2006-12-29 定稿

忽略导带和价带能级之间的耦合作用,对导带和价带的能级分别求解.导带能级结构的计算可采用抛物带模型^[6],电子波函数可以表示为以下形式:

$$\Psi_{n,\mathbf{k}_i}^{c\eta} = \frac{e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_i}}{\sqrt{A}} \phi_n(z) | S, \eta \rangle \quad (1)$$

其中 \mathbf{k}_i 表示量子阱平面内的波矢; \mathbf{r}_i 表示阱平面内的位置矢量; A 是阱平面的面积.导带子带能量色散关系 E_n 和第 n 个子带的包络函数 Φ_n 可由下式求解:

$$\left[\left(\frac{\hbar}{2} \right) \left(\frac{\mathbf{k}_i^2}{m_i^2} + \frac{k_z^2}{m_z^2} \right) + V_c(z) + P_{ce}(z) \right] \Phi_n(z) = E_n \Phi_n(z) \quad (2)$$

式中 \hbar 为普朗克常数; m_i^2 、 m_z^2 分别表示电子在阱平面内和垂直于阱平面方向的质量; \mathbf{k}_i 、 k_z 表示这两个方向上的波矢.势能项包括晶格周期势 V_c 和应变产生的势能 P_{ce} .

价带重空穴带、轻空穴带及自旋裂矩带各能带之间互相耦合,对于纤锌矿结构晶体,其价带的哈密顿矩阵可用六带 RSP 模型^[6]描述.

$$H_{6 \times 6} = \begin{pmatrix} H^U & 0 \\ 0 & H^L \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$H^\sigma = \begin{pmatrix} F & K_i & \pm iH_i \\ K_i & G & \Delta \pm iH_i \\ \pm iH_i & \Delta \pm iH_i & \lambda \end{pmatrix} \quad \sigma = (U, L) \quad (4)$$

其中

$$F = \Delta_1 + \Delta_2 + \lambda + \theta, G = \Delta_1 - \Delta_2 + \lambda + \theta,$$

$$\lambda = \frac{\hbar}{2m_0} (A_1 k_z^2 + A_2 k_i^2) + \lambda_\epsilon$$

$$\lambda_\epsilon = D_1 \epsilon_{zz} + D_2 (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}),$$

$$\theta = \frac{\hbar}{2m_0} (A_3 k_z^2 + A_4 k_i^2) + \theta_\epsilon$$

$$\theta_\epsilon = D_3 \epsilon_{zz} + D_4 (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}),$$

$$K_i = \frac{\hbar^2}{2m_0} A_5 k_i^2, H_i = \frac{\hbar^2}{2m_0} A_6 k_z k_i$$

$A_1 \sim A_6$ 为价带有效质量参数; $D_1 \sim D_4$ 为价带形变势; ϵ_{xx} 、 ϵ_{yy} 、 ϵ_{zz} 分别是阱材料在 x 、 y 、 z 方向的应变.空穴波函数表示如下式所示, g_m 为各子带的包络函数, $|u_j\rangle$ 为基矢^[6].

$$\Psi_{n,\mathbf{k}_i}^{v,\sigma} = \frac{e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_i}}{\sqrt{A}} \sum_{j=1,2,3} g_{m,j}^\sigma(z, \mathbf{k}_i) | u_j^\sigma \rangle \quad (5)$$

价带各子带的能量 E_m 和包络函数 g_m 可由(6)式求得:

$$H_{3 \times 3}^\sigma g_m^\sigma(z, \mathbf{k}_i) = E_m^\sigma(\mathbf{k}_i) g_m^\sigma(z, \mathbf{k}_i) \quad (6)$$

事实上,由于 AlGaInN 材料特殊的极化性质,在量子阱垒界面处会形成一层极化电荷,巨大的内建极化电场对发光性质有重要影响.同时,载流子注入量子阱后电子和电子、电子和空穴之间库仑力的

作用使得载流子重新分布,对内建极化电场有一定的屏蔽作用.因此,必须引入泊松方程进行自洽计算.泊松方程如(7)式所示:

$$\frac{\partial \epsilon(z)}{\partial z} \times \frac{\partial V_H(z)}{\partial z} + \epsilon(z) \frac{\partial V_H^2(z)}{\partial z^2} = -e^2 \rho(z) \quad (7)$$

其中 ϵ 为介电常数; $V_H(z)$ 为自由载流子产生的屏蔽势能; $\rho(z)$ 为阱中和垒上的自由载流子分布,如下式所示:

$$\rho(z) = |e| [p(z) - n(z)] + \rho_1(z_i) + \rho_2(z_f) \quad (8)$$

其中 $p(z)$ 和 $n(z)$ 分别为空穴和电子浓度分布,与各个子带的波函数有关; ρ_1 、 ρ_2 表示异质结界面处的极化电荷.极化电荷由压电极化和自发极化两部分构成,一般认为垒层厚,没有应变,只有自发极化电荷,阱层则存在两种电荷.阱垒的自发极化电荷 P_s 可由伏加定律求得,而阱中的压电极化电荷 P_p 满足如下关系^[7]:

$$P_p = 2 \frac{a - a_0}{a_0} \left(e_{31} - e_{33} \frac{c_{13}}{c_{33}} \right) \quad (9)$$

自洽计算获得同时满足薛定谔方程和泊松方程的能带结构后,自发发射谱可由(10)式计算^[8]:

$$g_{sp}(\hbar\omega) = \frac{n_r \omega}{\pi^2 \hbar c^2} \times \frac{2q^2}{c\epsilon_0 m_0 \omega L} \sum_{\sigma=U,L} \sum_{n,m} \int \frac{\mathbf{k}_i d\mathbf{k}_i}{2\pi} \times | (M_c)_{nm}^\sigma(\mathbf{k}_i) |^2 \times f_n^c(\mathbf{k}_i) \times [1 - f_{\sigma,m}^v(\mathbf{k}_i)] \times \frac{\hbar \gamma / \pi}{[E_{\sigma, nm}^{cv}(\mathbf{k}_i) - \hbar\omega]^2 + (\hbar\omega)^2} \quad (10)$$

其中 $f_n^c(\mathbf{k}_i)$ 为导带第 n 子带的费米能级; $f_{\sigma,m}^v(\mathbf{k}_i)$ 为价带第 m 子带的费米能级; n_r 为量子阱材料的折射率; $(M_c)_{nm}^\sigma(\mathbf{k}_i)$ 为 TE 模和 TM 模的跃迁矩阵元,可由(11)和(12)式求得.

$$| (M_x)_{nm}^\sigma(\mathbf{k}_i) |^2 = \frac{|\langle S | p_x | X \rangle|^2}{4} \{ \langle \phi_n | g_m^{(1)} \rangle^2 + \langle \phi_n | g_m^{(2)} \rangle^2 \} \quad (11)$$

$$| (M_x)_{nm}^\sigma(\mathbf{k}_i) |^2 = \frac{|\langle S | p_x | X \rangle|^2}{4} \{ \langle \phi_n | g_m^{(4)} \rangle^2 + \langle \phi_n | g_m^{(5)} \rangle^2 \} \quad (12)$$

3 数值计算结果分析与讨论

基于上述理论,作者采用 Peng 在文献[8]中的材料参数,对于四元化合物 AlInGaInN,除禁带宽度考虑了弯曲效应,其他的物理参数均采用伏加定律线性插值.计算与文献[8]结构相同的阱宽为 3nm 的 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{GaN}$ 单量子阱,自发发射谱的峰值发光能量为 2.7714eV,而电流为 900mA 时文献[8]实验所得的光致发光谱的峰值发光能量为 2.76eV,理论计算与实验结果符合得较好.

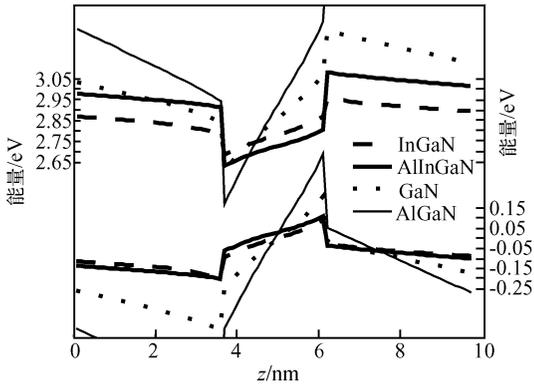


图 1 4 种量子阱内建势能分布

Fig.1 Potential distribution of the four structures

下面首先分析不同垒材料影响自发发射谱强度的根本原因,接着对 InGaN/AlInGaN 中垒 AlInGaN 的各元素组分进行了优化.

3.1 不同垒层材料对量子阱自发发射谱强度的影响

作者选取了 4 种阱材料、阱宽、垒宽相同但垒层材料不同的结构,且前后垒层材料和宽度相同.阱为 26nm 的 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$,垒分别为 72nm 的 GaN , $\text{Al}_{0.23}\text{Ga}_{0.77}\text{N}$, $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$, $\text{Al}_{0.23}\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.52}\text{N}$,其中 $\text{Al}_{0.23}\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.52}\text{N}$ 与阱 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 晶格常数几乎完全匹配.

计算这 4 种量子阱结构的内建势能分布和电子空穴波函数分别如图 1,图 2 所示.由图 1 可见,4 种结构均具有一定的内建极化电场,内建势能分布的形状由一般的方形变为三角形.显然 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{Al}_{0.23}\text{Ga}_{0.77}\text{N}$ 的极化电场最强, $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{Al}_{0.23}\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.52}\text{N}$ 的极化电场最弱.图 2 所示的电子空穴波函数分布图表明了极化电场对波函数的影响.它使电子波函数和空穴波函数横向压缩,纵向拉伸,分别向阱的两个方向偏移,极化电场越强,电子空穴波函数的空间分离程度越大,重叠程度越小.

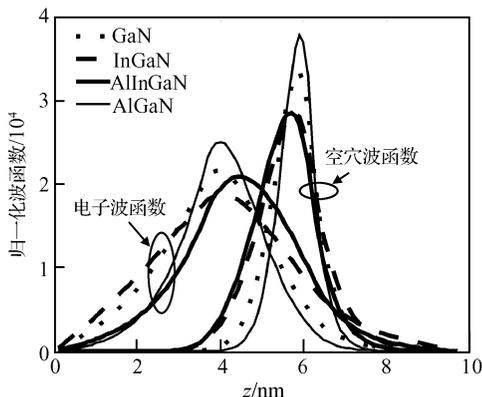


图 2 4 种量子阱的波函数分布

Fig.2 Wave function of the four structures

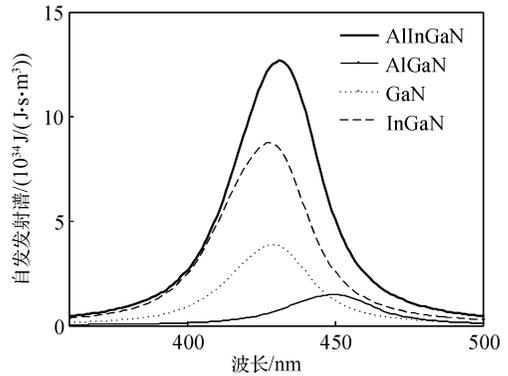


图 3 4 种结构的自发发射谱

Fig.3 Calculated spontaneous emission spectra of the four structures

计算 4 种结构在注入载流子浓度为 $3 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ 时的自发发射谱如图 3 所示,结果与 Zhang 等人^[5]对不同垒材料的量子阱的光致发光实验结果是一致的. InGaN/AlInGaN 的自发发射谱强度最强, InGaN/AlGaN 的发光强度最弱.对于 4 种结构的自发发射谱强度不同可以作如下解释:在同等注入载流子的条件下,跃迁几率是决定自发发射谱强度的重要因素.跃迁初态一般由导带电子波函数描述,跃迁终态由价带空穴波函数描述.电子空穴波函数的空间重叠程度直接决定了跃迁几率的大小.前面对内建势能分布和电子空穴波函数的计算表明,内建极化电场引起的电子空穴波函数空间分离是导致 4 种量子阱结构自发发射谱强度相差较大的主要原因.

下面探究 4 种量子阱结构具有不同极化电场的根本原因.内建极化电场不同可以由界面极化电荷形成的原理解释:异质结界面处的电荷为阱垒极化电荷之差^[7],4 种结构阱垒中的极化电荷的变化导致了界面处的电荷的变化.垒上只有自发极化电荷,自发极化电荷与自发极化常数有关,AlN 自发极化常数最大,InN 次之,GaN 最小.阱中极化电荷由自发极化电荷和压电极化电荷两部分组成.阱材料相同,自发极化电荷是相同的,密度为 -0.0356 C/m^2 .压电极化电荷不同, $\text{Al}_{0.23}\text{Ga}_{0.77}\text{N}$ 与阱的晶格失配最大,压电极化电荷最大, $\text{Al}_{0.23}\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.52}\text{N}$ 与阱几乎匹配,压电极化电荷非常小.4 种结构的垒的自发极化电荷密度 P_s ,阱的压电极化电荷密度 P_z 和界面总极化电荷密度 P 如表 1 所示.其 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{Al}_{0.23}\text{Ga}_{0.77}\text{N}$ 界面处的极化电荷密度最大, $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{Al}_{0.23}\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.52}\text{N}$ 界面处电荷密度最小,正是这几种结构界面极化电荷密度的差异导致了他们的极化电场不同.界面处极化电荷越多,极化电场越大,对波函数和自发发射谱强度的影响也越大.

表 1 4 种结构界面的全自发极化电荷 P_s 、压电极化电荷 P_z 、总电荷 P 和应变 E_{xx}

Table 1 Spontaneous polarization charges P_s , piezoelectric polarization charges P_z , total charges P and the strain E_{xx} of the four structures

	$E_{xx}/(\text{C}/\text{m}^2)$	$P_s/(\text{C}/\text{m}^2)$	$P_z/(\text{C}/\text{m}^2)$	$P/(\text{C}/\text{m}^2)$
GaN	-0.0218	-0.0340	0.0317	0.0310
$\text{Al}_{0.23}\text{Ga}_{0.77}\text{N}$	-0.0272	-0.0469	0.0396	0.0508
$\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$	-0.0109	-0.0348	0.0158	0.0150
$\text{Al}_{0.23}\text{In}_{0.25}\text{Ga}_{0.52}\text{N}$	-4.9077×10^{-6}	-0.0489	7.1365×10^{-6}	0.0133

3.2 垒材料 AlInGaN 中各元素组分的优化

前面的计算表明,以 AlInGaN 为垒可以减小极化电场,提高量子阱发光强度,但是如何选择垒 AlInGaN 中各元素的组分使 InGaN/AlInGaN 量子阱发光强度最大呢?下面以 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ 为例,对 $\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ 的各元素组分进行优化.

如 3.1 所述,提高量子阱自发发射谱强度的关键是减少界面极化电荷,界面极化电荷的多少可以由垒中 Al, In 组分调节.从表 1 可见,垒上的自发极化电荷和阱中的自发极化电荷方向一致,阱中压应变引起的压电极化电荷和自发极化电荷方向相反,张应变引起的压电极化电荷和自发极化电荷的方向一致.通过调整 Al, In 的组分可以引入适当的张应变或压应变,使应变产生的极化电荷和阱垒中自发极化产生的总电荷抵消从而消除内建极化电场. AlN 的晶格常数最大, GaN 次之, InN 最小; Al 组分增加,垒的晶格常数增加,阱垒间晶格失配增加; In 组分增加,垒的晶格常数减小.所以可以同时调整 Al, In 两种元素的组分来调整压电极化电荷的大小.同时,这两种元素组分的增加都会引起垒中自发极化电荷的增加.

以 0.01 为组分比例的最小变化单位,计算与 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 晶格失配小于 0.01% 的所有 AlInGaN 的界面极化总电荷和自发发射谱峰值,如图 4 所示.可见对于本文计算的量子阱结构, $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{Al}_{0.14}\text{In}_{0.23}\text{Ga}_{0.63}\text{N}$ 的自发发射谱强度最大.由图 4 还发现,自发发射谱的峰值随界面极化电荷增加先增加后减小.当极化电荷较大,密度超过 $0.03\text{C}/\text{cm}^2$ 时,自发发射谱峰值强度随界面极化电荷的增加而减小,与前面所计算的极化电场对自发发射谱强度的影响一致;但是当极化电荷较少,密度小于 $0.03\text{C}/\text{cm}^2$ 时,自发发射谱峰值随极化电荷增加而增加,可见,此时自发发射谱的峰值并不是只受极化电场的影响.

下面分析界面极化电荷较小时,影响自发发射

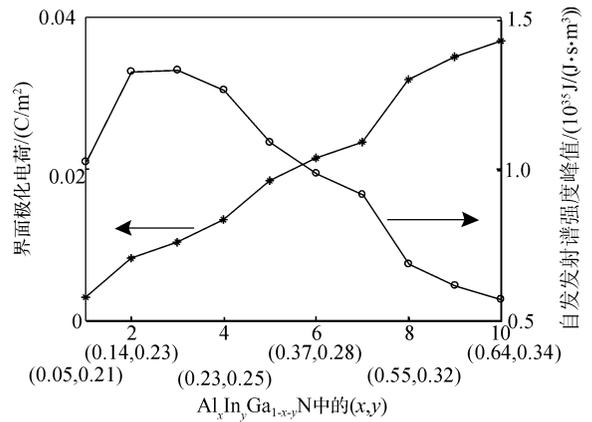


图 4 界面极化电荷与 $\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ 中 x, y 的关系
Fig.4 Interface polarized electrons of $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$

谱强度的因素.选取界面极化电荷较小的 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{Al}_{0.05}\text{In}_{0.23}\text{Ga}_{0.72}\text{N}$ 和 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{Al}_{0.14}\text{In}_{0.23}\text{Ga}_{0.63}\text{N}$ 两种量子阱结构,由图 4 可见, $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{Al}_{0.05}\text{In}_{0.23}\text{Ga}_{0.72}\text{N}$ 的界面极化电荷小于 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{Al}_{0.14}\text{In}_{0.23}\text{Ga}_{0.63}\text{N}$,自发发射谱峰值强度也小于 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{Al}_{0.14}\text{In}_{0.23}\text{Ga}_{0.63}\text{N}$.计算其内建势能分布如图 5 所示, $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{Al}_{0.14}\text{In}_{0.23}\text{Ga}_{0.63}\text{N}$ 的内建极化电场虽然大,但是 $\text{Al}_{0.14}\text{In}_{0.23}\text{Ga}_{0.63}\text{N}$ 的禁带宽度比 $\text{Al}_{0.05}\text{In}_{0.23}\text{Ga}_{0.72}\text{N}$ 的禁带宽度大,势垒对量子阱中能级的限制也更好,所以虽然其极化电场强度大,但其自发发射谱强度仍然很大.可见,由于 AlN, GaN, InN 的禁带宽度差异较大, AlInGaN 中各元素组分的变化将导致其禁带宽度也在较大的一个范围内变化.因此优化垒组分时,不但要考虑压电场的作用,也要考虑组分变化时,势垒势能变化对发光光谱特性的影响.

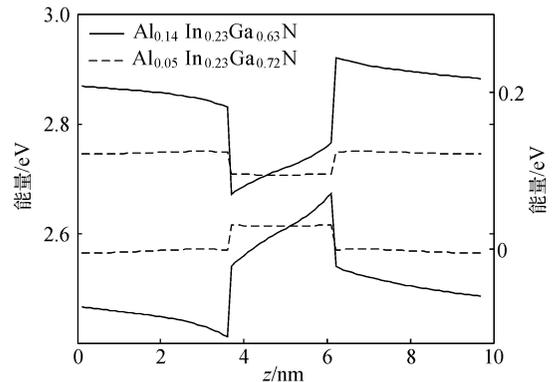


图 5 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{Al}_{0.14}\text{In}_{0.23}\text{Ga}_{0.63}\text{N}$ 和 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{Al}_{0.05}\text{In}_{0.23}\text{Ga}_{0.72}\text{N}$ 的势能分布
Fig.5 Potential distribution of $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{Al}_{0.14}\text{In}_{0.23}\text{Ga}_{0.63}\text{N}$ and $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{Al}_{0.05}\text{In}_{0.23}\text{Ga}_{0.72}\text{N}$

4 结论

本文计算并分析了不同垒材料的 AlInGaN 量子阱自发发射谱. 结果表明, AlInGaN 材料特有的自发极化和压电极化性质在阱垒界面处形成的极化电荷在很大程度上改变了量子阱的势能分布, 对量子阱发光性质有重要的影响. 通过优化垒材料 AlInGaN 中各元素的组分, 可以减少阱垒界面处的极化电荷, 获得自发发射强度更高的量子阱. 本文计算得出的结果与 Zhang^[5] 的实验结果一致, 同时本文进一步以 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ 为例, 综合考虑了极化电荷和势垒势能高度的影响, 提出了具体的优化垒材料 AlInGaN 中各元素组分的方法, 对实验有非常重要的指导意义.

参考文献

- [1] Tsao J Y. Light emitting diodes (LEDs) for general illumination. Washington DC: Optoelectronics Industry Development Association (OIDA), 2002
- [2] Gee J M, Tsao J Y, Simmons J A. Prospects for LED Lighting. Proc of SPIE 5187:227
- [3] Lahiri B, Datta R, Kundu S. Effect of polarization on two-dimensional carrier distribution in nitride quantum wells. Physica E, 2005, 25(4):449
- [4] Liu Shiwen, Guo Xia, Ai Weiwei, et al. Electrical characteristics of InGaN/GaN MQW blue light-emitting diodes. Semicond Optoelectron, 2006 27(3):240
- [5] Zhang J P, Yang J, Simin G, et al. Enhanced luminescence in InGaN multiple quantum wells with quaternary AlInGaN barriers. Appl Phys Lett, 2000, 77(17):2668
- [6] Chuang S L, Chang C S. A band-structure model of strained quantum-well wurtzite semiconductors. Semicond Sci Technol, 1997, 12:252
- [7] Ambacher O, Smart J, Shealy J R, et al. Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N- and Ga-face AlGaIn/GaN heterostructures. J Appl Phys, 1999, 85(6):3222
- [8] Peng L H, Hsu Y C, Chuang C W. Structure asymmetry effects in the optical gain of piezostained InGaIn quantum wells. IEEE J Sel Topics Quantum Electron, 1999, 5(3):756

Research on Optimizing Barrier Material for AlInGaN Quantum Wells*

Wen Feng^{1,†}, Liu Deming¹, and Huang Lirong²

(1 School of Optoelectronics Science and Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

(2 Wuhan National Laboratory for Optoelectronics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

Abstract: A self-consistent solution that simultaneously satisfies the Schrödinger equations and Poisson equation is used to calculate the band structure and gain spectra of InGaIn/AlInGaIn, InGaIn/GaN, InGaIn/InGaIn, and InGaIn/AlGaIn. It is found that the polarized electrons on the interface of the heterostructure are the main factor limiting the optical gain. The intensity of the spontaneous emission spectrum can be improved if AlInGaIn, which can reduce the number of polarized electrons, is used as a barrier. Considering the effect of the polarized electrons and the barrier energy gap, a method is put forward to optimize the proportion of every element in the AlInGaIn barrier, and physical explanations are given.

Key words: AlInGaIn; polarized field; spontaneous emission spectrum; barrier material

PACC: 7280E; 7110C; 7115J

Article ID: 0253-4177(2007)06-0893-05

* Project supported by the Key Technologies Research and Development Program of Wuhan (No.20061002036)

† Corresponding author. Email: wenf2004@163.com

Received 7 December 2006, revised manuscript received 29 December 2006

©2007 Chinese Institute of Electronics