

学校编码: 10384
学 号: 19820061151802

分类号
UDC
密级

厦 门 大 学

硕 士 学 位 论 文

GaN 基 LED 中极化效应的研究与应用

**Research and utilization of polarization effects in GaN based
LED**

郑 清 洪

指导教师姓名: 刘 宝 林 教授

专 业 名 称: 凝 聚 态 物 理

论文提交日期: 2009 年 05 月

论文答辩时间: 2009 年 06 月

学位授予日期: 年 月

答辩委员会主席:

评 阅 人:

2009 年 06 月

厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下,独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果,均在文中以适当方式明确标明,并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范(试行)》。

另外,该学位论文为()课题(组)的研究成果,获得()课题(组)经费或实验室的资助,在()实验室完成。(请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称,未有此项声明内容的,可以不作特别声明。)

声明人(签名):

年 月 日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

1. 经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，
于 年 月 日解密，解密后适用上述授权。

2. 不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年 月 日

摘要

本论文结合科研项目，针对 III-V 族氮化物中存在的极化电场，自洽求解薛定谔方程和泊松方程。提出了利用及消除极化电场的方法，为 GaN 基 LED 工艺优化提供理论基础，并通过实验降低 p 型 GaN 欧姆接触电阻，提高 LED 的内量子效率。所做的研究工作主要分三个部分：

1. 计算机模拟极化电场影响下，量子阱和超晶格中的一维薛定谔方程和泊松方程的自洽求解。计算得到电子和空穴的各级本征函数和本征值，该方法可以推广到求解任意势中的定态薛定谔方程。
2. 根据极化电场使能带发生摆动，提高 Mg 杂质的离化率，增大空穴浓度，提出利用 InGaN/AlGaIn 超晶格做 GaN 基 LED 的 p 型接触顶帽层，降低欧姆接触电阻并充当电流扩展层作用。计算比较相同 Mg 掺杂条件下 InGaN/AlGaIn、AlGaIn/GaN 和 InGaIn/GaN 三种超晶格的能带结构、Mg 受主电离情况和平均空穴浓度。同时计算得到 Mg 掺杂浓度的最佳值，最后实验上实现了良好的 p 型欧姆接触。
3. 根据 GaN 基 LED 量子阱中存在的极化电场使电子空穴发生分离，从而降低复合几率，提出了 In 组份调制的方法，抵消部分极化电场，从而提高复合几率。最后通过变温 PL 谱测量 LED 的内量子效率。

本文所提出的利用和消除 GaN 基 LED 中的极化电场的方法，主要创新之处在于利用 InGaIn/AlGaIn 中更强的极化效应提高 Mg 杂质的电离率，以及 In 组份的渐变对极化电场的抵消，改善 LED 的能带结构。

关键词：极化效应；超晶格；内量子效率

Abstract

Based on the polarization effect in III-V nitride, we solve self-consistently the Schrödinger and Poisson equation. Both utilization and elimination of the polarization field are proposed. Experimentally, specific contact resistance to p-GaN is reduced and internal quantum efficiency of LED is improved. The main work we have done are listed as follows,

1. Solving self-consistently the Schrödinger and Poisson equation under the influence of polarization fields via computer simulation. Eigenfunction of the electron and hole and their corresponding eigenvalues are investigated. The simulation can be generalized to solve the time-independent Schrodinger equations with arbitrary potentials.
2. As polarization field lead to oscillation of the valence band edges, result in enhancement of Mg ionization and improvement of hole concentration, InGaN/AlGaN superlattice strained-layers (SLS) is introduced as a cladding layer for GaN based LED. The SLS can reduce specific contact resistance and served as a current spreading layer. The band structure, ionization of Mg and averaged hole concentration of InGaN/AlGaN, InGaN/GaN and AlGaN/GaN SLS are compared at the same Mg doping level. The Optimal Mg doping level is also given. Experimentally, lower specific contact resistance to p-GaN is realized.
3. To overcome the separation of electron and hole due to the polarization filed, In composition modulated LED is proposed. It can counteract part of the polarization and improve the recombine rate of electron and hole. The IQE of the LED is measured by variable temperatures PL.

This dissertation presents the utilization and elimination of the polarization field in GaN based LED, the main innovation of this paper is that we use InGaN/AlGaN SLS to obtain relative higher hole concentration, and use gradual changed In composition to get to get a better band structure for LED.

Keywords: polarization effect; superlattice; Internal quantum efficiency

目 录

第一章 绪论	1
1.1 引言	1
1.2 III-V 族氮化物材料特性简介	3
1.3 GaN 及其三元化合物的材料生长	5
1.3.1 GaN 材料衬底	5
1.3.2 GaN 材料外延生长设备	7
1.4 GaN 材料 p 型掺杂的现状	8
1.5 GaN 基材料极性的概述	9
1.6 本文的研究内容和目的	10
参考文献	11
第二章 GaN 基材料的极性及其极化电场	12
2.1 GaN 基材料极性的定义	12
2.2 镓极性 GaN 材料和氮极性 GaN 材料	13
2.2.1 两种极性 GaN 材料的性质差异	13
2.2.2 两种极性之间的转变	14
2.3 GaN 基材料中的自发极化和压电极化	15
2.4 极化电场对器件性能的影响	18
2.5 本章小结	20
参考文献	21
第三章 一维薛定谔方程和泊松方程的自洽求解	22
3.1 理论模型	22
3.2 掺杂超晶格结构	24
3.2.1 p 型超晶格结构	24
3.2.2 n 型超晶格结构	26
3.3 非掺杂的量子阱结构	26
3.4 本章小结	28
参考文献	29
第四章 InGaN/AlGaIn 超晶格提高 p 型 GaN 掺杂效率	30
4.1 超晶格提高空穴浓度降低欧姆接触	30
4.2 利用 InGaN/AlGaIn 超晶格提高空穴浓度	32
4.3 掺杂浓度对超晶格掺杂效率的影响	35
4.4 实验结果及讨论	37
4.4 本章小结	41
参考文献	42
第五章 In 组分渐变量子阱	43
5.1 极化电场对发光二极管内量子效率的影响	43

5.2 阱层 In 组分（渐变）调制.....	46
5.3 In 组分渐变的发光二极管（LED）.....	47
5.3.1 外延结构生长.....	47
5.3.2 变温 PL 谱测试.....	48
5.3.3 LED 内量子效率的测量.....	52
5.4 本章小结.....	53
参考文献.....	54
第六章 研究工作总结及展望.....	55
附录一：研究生期间发表论文及申请专利.....	57
附录二：薛定谔方程的计算源代码（matlab）.....	58
致谢.....	62

Contents

第一章 绪论	1
1.1 引言	1
1.2 III-V 族氮化物材料特性简介	3
1.3 GaN 及其三元化合物的材料生长	5
1.3.1 GaN 材料衬底	5
1.3.2 GaN 材料外延生长设备	7
1.4 GaN 材料 p 型掺杂的现状	8
1.5 GaN 基材料极性的概述	9
1.6 本文的研究内容和目的	10
参考文献	11
第二章 GaN 基材料的极性及其极化电场	12
2.1 GaN 基材料极性的定义	12
2.2 镓极性 GaN 材料和氮极性 GaN 材料	13
2.2.1 两种极性 GaN 材料的性质差异	13
2.2.2 两种极性之间的转变	14
2.3 GaN 基材料中的自发极化和压电极化	15
2.4 极化电场对器件性能的影响	18
2.5 本章小结	20
参考文献	21
第三章 一维薛定谔方程和泊松方程的自洽求解	22
3.1 理论模型	22
3.2 掺杂超晶格结构	24
3.2.1 p 型超晶格结构	24
3.2.2 n 型超晶格结构	26
3.3 非掺杂的量子阱结构	26
3.4 本章小结	28
参考文献	29
第四章 InGaN/AlGaIn 超晶格提高 p 型 GaN 掺杂效率	30
4.1 超晶格提高空穴浓度降低欧姆接触	30
4.2 利用 InGaN/AlGaIn 超晶格提高空穴浓度	32
4.3 掺杂浓度对超晶格掺杂效率的影响	35
4.4 实验结果及讨论	37
4.4 本章小结	41
参考文献	42
第五章 In 组分渐变量子阱	43
5.1 极化电场对发光二极管内量子效率的影响	43

5.2 阱层 In 组分（渐变）调制.....	46
5.3 In 组分渐变的发光二极管（LED）.....	47
5.3.1 外延结构生长.....	47
5.3.2 变温 PL 谱测试.....	48
5.3.3 LED 内量子效率的测量.....	52
5.4 本章小结.....	53
参考文献.....	54
第六章 研究工作总结及展望.....	55
附录一：研究生期间发表论文及申请专利.....	57
附录二：薛定谔方程的计算源代码（matlab）.....	58
致谢.....	62

第一章 绪论

1.1 引言

半导体材料具有能量损耗低、发光效率高、元件体积小、使用寿命长等优点，因此能在许多发光材料中脱颖而出成为最有前景的发光材料。III-V 族氮化物材料的发光波长覆盖广，被视为前景最广阔的半导体材料。通过近二十年的发展，III-V 族氮化物材料已经逐渐应用于紫外探测器^{[1][2]}，可见光及紫外光发光二极管（LED）^{[3][4][5]}，以及蓝光激光器（LD）等^{[6][7]}。GaN 基 LED 在户外显示，指示灯，广告以及交通警示灯等方面都有广泛的应用；LD 则是目前实现超高密度存储设备的关键元件。

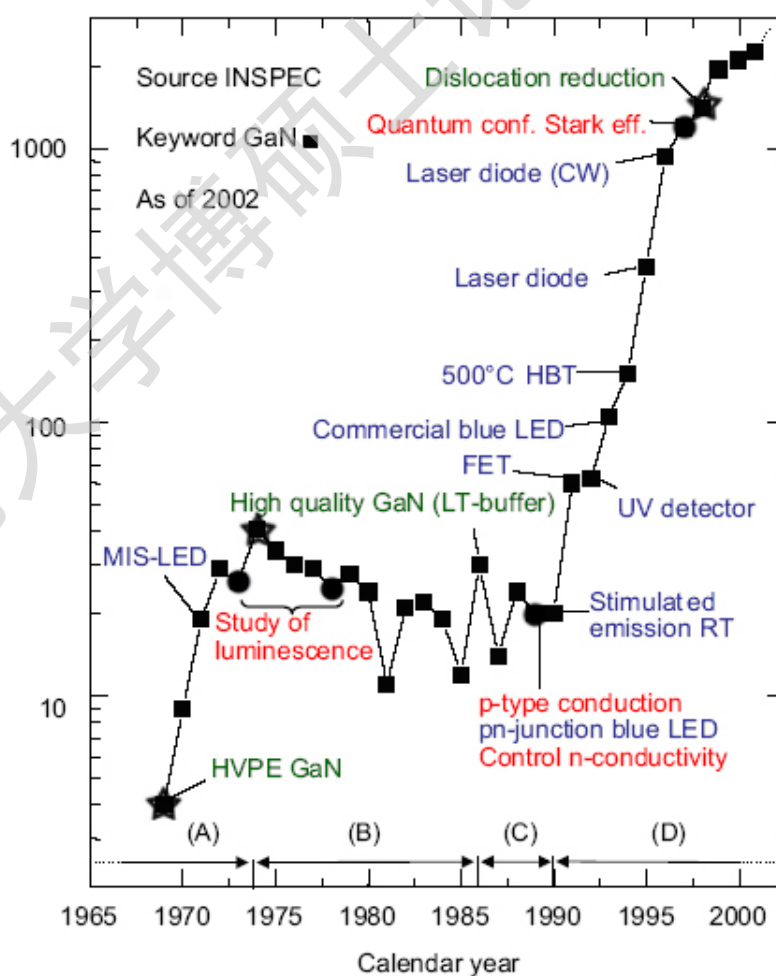


图 1-1 各年份 INSPEC 上有关氮化物论文发表数量

早期一直无法控制生长高质量的氮化物材料，导电性的控制问题也无法有效地解决，氮化物器件的发展停滞了很长一段时间。直到1986年，GaN晶体材料质量才有了很大的提升，1989年Akasaki利用低温电子束辐照较好的p型GaN^[8]，并研制出了世界上第一个p-n结GaN蓝紫光LED，并在1990年实现室温下紫外光的激射。这些突破推动了高性能蓝光LED、可长时间工作的LD和高传导氮化物器件的发展。图1-1给出了科学文摘（INSPEC）上各年份关于氮化物论文发表数量和一系列的重要事件^[9]。图中标出了关于氮化物的每个突破，星型为材料生长方面，圆型为电学相关性质方面，方型为器件方面。表1-1为氮化物电子器件发展历程^{[10][11]}。

表1-1 氮化物电子器件的发展

Year	Accomplishments
1969	GaN by HVPE
1971	MIS LED GaN by MOCVD
1974	GaN by MBE
1983	AlN buffer layer by MBE
1986	Specular films using AlN buffer
1989	p-type Mg-doped GaN by LEEBI and GaN p-n junction LED
1991	GaN buffer layer by MOCVD
1992	Mg activation by thermal annealing AlGaIn/GaN two-dimensional electron gas GaN MESFET
1993	AlGaIn/GaN HEMT Theoretical prediction of piezoelectric effect in AlGaIn/GaN InGaIn/AlGaIn DH blue LEDs (1 cd)
1994	Microwave GaN MESFET Microwave IIFET, MISFET GaN/SiC HBT high-quality Al _x Ga _{1-x} N
1995	AlGaIn/GaN HEMT by MBE p-n GaN photovoltaic detector Doped channel AlGaIn/GaN HEMT
1996	Ion-implanted GaN JFET 1st blue laser diode

1997	Quantification of piezoelectric effect AlGa _x N/GaN HEMT on SiC
1998	1st AlGa _x N/GaN HBT 1st GaN MOSFET
1999	visible blind Al _x Ga _{1-x} N photodiodes use of superlattices for enhanced p-type doping in AlGa _x N
2000	Shortest wavelength Al _x Ga _{1-x} N photodiodes (227nm)
2002	280 nmUVLED
2003	265 nmUVLED
2004	back-illuminated solar-blind AlGa _x N photodiode with external QEZ 68% at 0V
2005	back-illuminated solar-blind AlGa _x N avalanche photodiodes
2007	back-illuminated linear mode GaN avalanche photodiodes
2008	1st back-illuminated APD with δ -doped p-GaN

1.2 III-V 族氮化物材料特性简介

III-V 族氮化物主要是以铝镓氮 (AlInGa_xN) 系列材料为主, 包括 GaN、AlN、InN、AlInN、GaInN、AlInN 和 AlInGa_xN 等。InN 的能隙为 0.78 eV, AlN 的能隙为 6.25 eV^[12], 其禁带宽度覆盖了红光到紫外光间的光谱, 图 1-2 为 III-V 族氮化物材料的禁带宽度和晶格常数, 其中 InN 的禁带宽度由原来的 2.0 eV 修正到 0.78 eV。III-V 族氮化物都是直接带隙的材料, 无论我们如何调整其组成的成分和组分含量都不会造成发光效率的大幅降低。因而它适用于制作高效发光元件, 包括高效白光 LED、蓝光 DVD、大型户外电视、液晶显示器的背光源等。

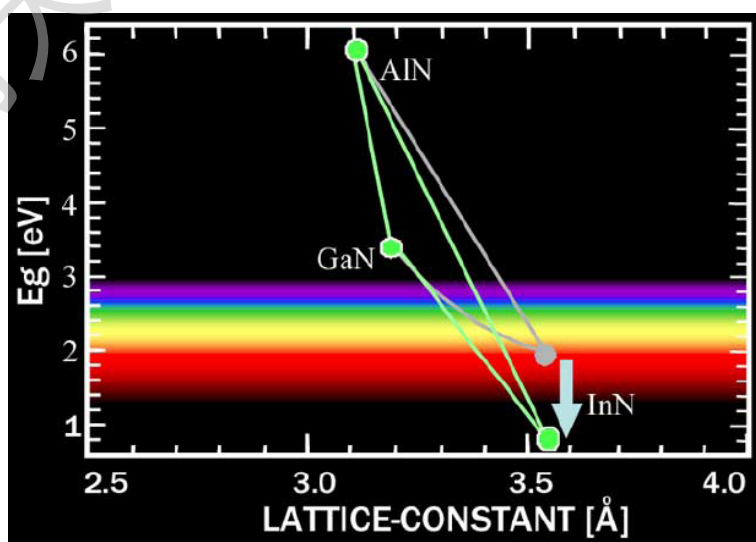


图1-2 纤锌矿结构AlInGa_xN系列材料的禁带宽度与晶格常数的关系

六方对称的纤锌矿（Wurtzite）结构是GaN、InN、AlN及相关III-V族氮化物的稳定结构，其中最简结构包含四个原子。如图1-3所示，以GaN为例，在纤锌矿结构中，氮原子和镓原子分别处在彼此构成的四面体中。纤锌矿结构是由两套六方密堆积结构沿c轴方向平移 $5c/8$ 套构而成，沿c轴 [0001] 方向的堆垛顺序为AA*BB*AA*BB…。除此之外，III-V族氮化物还具有亚稳相的闪锌矿

（Zincblende）结构，还有高压情况下才存在的岩盐矿结构。其中闪锌矿结构的III-V族氮化物也是直接带隙材料，而且具有更好的p型掺杂效率^[13]，同时作为量子阱发光材料时也具有更好的光增益系数^[14]，但在高温时容易发生相变，阻碍了材料的制备和器件的发展。因此，目前用于器件的GaN材料都是纤锌矿结构的。

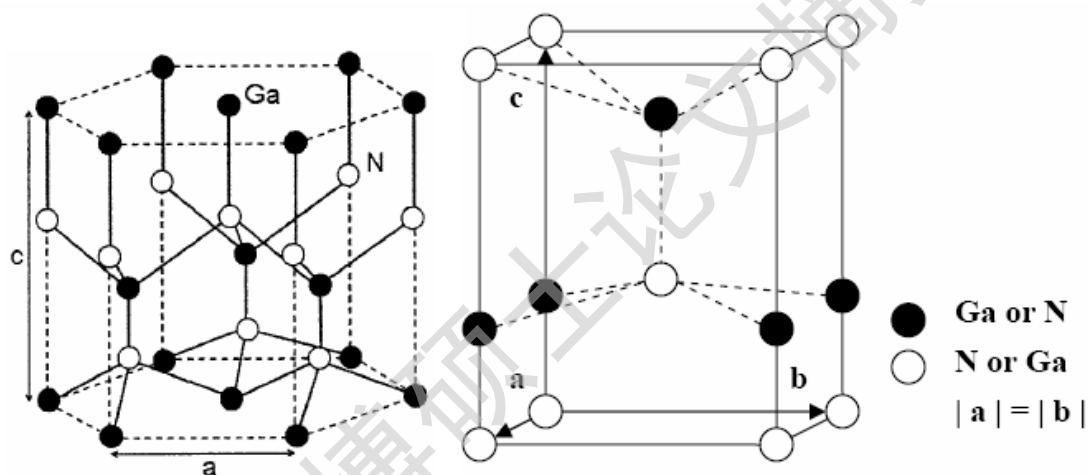


图1-3 GaN的六方晶系纤锌矿结构

表1-1进一步给出了纤锌矿III-V族氮化物的一些基本参数。

表1-2 III-V族氮化物的材料的基本性质和重要参数^[12]

参数	GaN	AlN	InN
晶格常数(T=300 K): a(Å)	3.189	3.112	3.545
c(Å)	5.185	4.982	5.703
禁带宽度 E_g (eV)	3.510	6.25	0.78
禁带温度系数: α (meV/K)	0.909	1.799	0.245
β (K)	830	1462	624
自发极化常数: P_{sp} (C/cm ²)	-0.034	-0.090	-0.042
压电极化常数: e_{33} (C/cm ²)	0.73	1.46	0.97

$e_{31}(\text{C}/\text{cm}^2)$	-0.049	-0.60	-0.57
弹性系数: $c_{11}(\text{GPa})$	390	396	223
$c_{12}(\text{GPa})$	145	137	115
$c_{13}(\text{GPa})$	106	108	92
$c_{33}(\text{GPa})$	398	373	224
$c_{44}(\text{GPa})$	105	116	48
电子有效质量: $m_e(m_0)$	0.2	0.33	0.2
空穴有效质量: $m_{hh}(m_0)$	1.1	3.53	1.1
相对介电常数: ϵ_r	10.4	10.4	14.6
熔点($^{\circ}\text{C}$)	1700	3000	1100
电子迁移率: (cm^2/Vs)	1000	135	3200

1.3 GaN 及其三元化合物的材料生长

虽然III-V族氮化物被称为是第三代半导体，但对其的研究开始于19世纪70年代。AlN粉末的合成始于1872年，InN粉末则在1910年合成出来，Juza等人于1938年让氨气通过高温的镓金属表面获得了少量的小针状GaN^[15]。1959年，Grimmeiss等用同样的方法制备出小体积的GaN晶体^[16]。1985年，Aksaki等人利用AlN低温缓冲层在蓝宝石上首次生长出了高质量的GaN单晶^[17]。下面我们着重描述GaN材料的制备方法。

1.3.1 GaN 材料衬底

由于氮在镓金属中的低溶解度和氮化镓中的高蒸汽压，GaN的体单晶制备非常困难，即使在高温、高压下获得的GaN单晶尺寸也较小，未能满足工业生产需求。现在较成熟的工艺是外延生长，由于缺少GaN的体单晶，GaN的生长一般为异质外延。异质外延时衬底材料对异质外延GaN的晶体质量有很大的影响，进一步决定器件的质量，因此衬底的选择至关重要。一般来说，评价衬底材料要综合考虑以下的几个因素：

1. 衬底材料和外延薄膜间的晶格匹配和热膨胀系数匹配
2. 衬底材料和外延薄膜间的化学稳定性匹配

3. 衬底材料的界面特性较好
4. 衬底材料光学性能好，对器件所发光吸收小
5. 导电性好，能制成上下结构
6. 尺寸足够大
7. 材料制备的难易程度及其成本高低

用于研究GaN生长的衬底有： Al_2O_3 、 SiC 、 LiAlO_2 、 Si 、 ZnO 、 GaAs 等，目前用于生产的主要有 SiC 和 Al_2O_3 。表1-3为用于GaN外延生长的衬底材料的一些物理性质。

表1-3 GaN外延衬底材料部分物理性质

衬底	晶体结构	失配度 ($\Delta a/a$)	热膨胀系数 ($10^4/\text{K}, 300\text{K}$)
Al_2O_3	六方	14%	7.5
6H-SiC	六方	3.5%	4.2
Si	立方	17%	3.59
ZnO	六方	1.9%	2.9
GaN	六方	0	3.59

蓝宝石衬底是当前用于GaN生长最常用的衬底，它和GaN纤锌矿结构具有相同的六方对称性。其优点是稳定性好，禁带宽度大于GaN，价格适中，制备工艺成熟。缺点是晶格失配度大，绝缘不导电，导热性差。不过这些缺点都被很好地克服掉，如晶格失配问题被低温缓冲层所克服；绝缘问题由同侧台阶电极所克服。主要是导热性问题，在大功率发光器件中较为严重，不过也可以通过把GaN外延片与Si的键合再结合激光剥离克服^[18]。

SiC 衬底是除蓝宝石外，用于外延生长GaN的另一个常用衬底^[19]。它是美国Cree公司为了避开日本的日亚公司的蓝宝石衬底的专利而开发的。其优点是导电、导热性能良好，化学稳定性好，不吸收可见光，相对蓝宝石，晶格匹配和热失配程度也较小；缺点是价格过高，质量不如 Al_2O_3 和Si好。

LiAlO_2 衬底主要用于非极性GaN外延生长的研究^[20]，这对于提高GaN基LED的内量子效率有广阔的前景，目前仅处于研究阶段。

Si衬底有其价格优势，国内很多实验组也在开展研究，特别是南昌大学在

这方面已经有了较全面的成果^[21]。

ZnO衬底和GaN之间的晶格匹配较好，而且容易被酸碱腐蚀从而获得GaN单晶材料，缺点是价格高，化学稳定性差，高温下会和GaN反应，目前只能用MBE在相对低温下生长GaN^[22]。

1.3.2 GaN 材料外延生长设备

金属有机物化学汽相沉积 (Metalorganic chemical vapor deposition, MOCVD)

MOCVD也称MOVPE，是金属有机物化学汽相沉积的缩写，是目前生长III族氮化物多层结构最主流的方法，也是目前唯一能制备出高亮度氮化物发光二极管并用于规模化生产的生长技术。MOCVD设备可分为5个主要部分：反应腔、反应源和载气供应系统、控制系统、尾气处理系统以及安全保障系统。其工作原理是有机源在载气携带下输运到反应腔入口混合，然后输运到衬底处，气体源在高温下裂解、发生化学反应，在衬底上沉积。最后反应副产物经由尾气排出。

GaN材料外延生长，一般使用三甲基镓 (TMGa) 和氨气分别作为Ga源和N源，氢气和氮气则作为载气。典型的GaN的MOCVD生长温度大约为1030 °C，生长速率大约为2 μm/h。硅烷 (SiH₄) 和二茂化镁 (MgCp₂) 分别作为n型掺杂的Si源和p型掺杂的Mg源，掺杂浓度最大值均可以到10²⁰ cm⁻³数量级。

分子束外延 (Molecular Beam Epitaxy, MBE)

MBE是目前除了MOCVD外，用于GaN基材料外延生长研究最多的生长技术。直接以Ga或Al的固体升华分子束作为III族源，以NH₃作为V族源材料，在衬底表面反应生成氮化物。该方法可以实现较低温度下生长GaN，但是低温下NH₃的裂解率很低，整个生长中反应速度慢。近来，人们利用RF或ECR等离子体辅助增强技术提高N源裂解率，取得了较好的结果。

氢化物汽相外延 (Hydride Vapor Phase Epitaxy, HVPE)

HVPE是最早用于生长GaN的外延材料生长技术，与MOCVD一样也是属于汽相沉积装置，两者有一定的共同点。

Degree papers are in the "[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)". Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to etd@xmu.edu.cn for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库