

学校编码: 10384

分类号_____密级_____

学 号: 19820131152964

UDC_____

厦 門 大 學

硕 士 学 位 论 文

AlGaN 基深紫外 LED 的能带调控和极化诱导掺杂研究

The Study of Band Engineering and Polarization-induced Doping in AlGaN-based Deep Ultraviolet Light-Emitting Diode

刘松青

指导教师姓名: 李书平教授

专业名称: 凝聚态物理

论文提交日期: 2016年04月

论文答辩时间: 2016年05月

学位授予日期: 2016年 月

答辩委员会主席: _____

评 阅 人: _____

2016 年 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

III族氮化物作为新一代半导体材料，具有宽直接带隙、高电子漂移率、高热导率、耐高温、抗腐蚀、抗辐射等优点，适合制作高频、高功率、耐高温和抗辐射的电子器件，比如 AlGa_N 基紫外发光二极管。但是紫外发光二极管依然存在低量子效率、低光输出功率等问题，提高晶体质量和载流子注入效率是解决问题的两个主要思路。影响载流子注入效率的一个重要因素是内部极化场引起的能带弯曲，本文基于 APSYS 软件，主要围绕紫外 LED 的能带调控和极化诱导掺杂展开研究。

首先，本文回顾了紫外 LED 的发展历程，介绍了 AlGa_N 半导体材料的结构和性质，以及紫外 LED 的结构、发光机理和亟待解决的研究难题。接着，介绍了紫外 LED 器件的模拟方法，包含半导体器件模拟的基本方程和相关物理模型，以及 APSYS 软件的文件结构、操作程序和常见的收敛困难原因。

随后，我们围绕极化诱导掺杂方法展开研究，分别将恒定 Al 组分的 p-AlGa_N 和 n-AlGa_N 的 Al 组分改为 0.6 至 0.4 渐变，0.45 至 0.55 渐变，模拟结果表明 p 型极化诱导掺杂能大幅提升紫外 LED 的输出性能，n 型极化诱导掺杂带来的影响则相对较小一些。在能带结构上，可以发现极化诱导掺杂降低了价带弯曲的幅度，有益于空穴更好地注入。

最后，我们把目光转向电子阻挡层（EBL）的优化上，以使用传统超晶格电子阻挡层的紫外 LED 为基准参考结构，重新构建了下降垒组分（DSB）、上升垒组分（ISB）、三角垒组分（TSB）的超晶格 EBL 结构，结果表明下降垒组分的输出性能最优；最终，我们找到了最优的垒层组分设置，沿生长方向分别为 0.90、0.85、0.80、0.75、0.70、0.65。通过分析比较，我们认为新结构之所以能提高紫外 LED 器件的输出性能，主要的原因还是在于对能带结构进行了调控，对电子泄露有更强的抑制作用，且更利于空穴的注入。

关键词：深紫外发光二极管；能带调控；极化场调控；超晶格 EBL

Abstract

As a new generation of semiconductor materials, III nitride owning advantages like wide direct band gap, high thermal conductivity, high electron mobility, high temperature resistance, corrosion resistant and radiation resistant. Thus it is suitable for fabricating electronic device like AlGaIn-based deep UV LEDs. However, there still exist a number of problems like low quantum efficiency and low light output power for UV LEDs, and the two effective solutions maybe improving the crystal quality and carriers injection efficiency. As we know, the main factor that influencing carrier injection efficiency is band bending caused by polarization field. This paper turned mainly on band engineering and polarization-induced doping based on APSYS software.

First of all, this thesis reviewed the history of DUV LEDs, then introduced properties of AlGaIn materials, the structure, luminous mechanism and research difficulties of UV LEDs. We also introduced the simulation method of UV LEDs including basic equations and physical models. And the file structure, operating procedure and convergence issues of APSYS software have also been introduced.

Then we focus on polarization-induced doping method, we changed the constant Al mole composition into gradual form. In structure B, the Al mole composition of p-AlGaIn is graded from 0.6 to 0.4; in structure C, the Al mole composition of n-AlGaIn is graded from 0.45 to 0.55. The simulation result shows that p-type polarization doping method can largely improve the output performance of UV LEDs, and the impact brought by n-type polarization doping method is much smaller. From the band structure image, we can find that the polarization doping method can decrease band bending phenomenon, which is beneficial for hole injection.

Lastly, we tried to optimize the structure of EBL, we designed three new UV LEDs with different superlattice EBL: decreased superlattice barriers composition(DSB) EBL, increased superlattice barrier composition(ISB) EBL and triangle superlattice barriers composition(TSB) EBL. The simulation results show that DSB structure owning best performance. And we finally found an optimal superlattice

structure, the Al mole composition of superlattice barrier is 0.90, 0.85, 0.80, 0.75, 0.70 and 0.65 along the growth direction. We attribute performance improvement to three main factors: 1) higher effective barrier in the conduction band suppressing the spill-over of electrons out of active region; 2) holes injection improvement due to lower potential height in the in valence band; 3) lower resistivity of the structure due to lower Al component on the whole.

Key Words: DUV LED; band engineering; polarization modification; superlattice EBL

目 录

| | |
|----------------------------------|----|
| 第一章 绪论 | 1 |
| 1.1 引言 | 1 |
| 1.2 AlGaIn 基紫外 LED 的基本性质 | 2 |
| 1.3 紫外 LED 的发展前景与所存问题 | 5 |
| 1.4 论文框架 | 7 |
| 参考文献 | 9 |
| 第二章 深紫外 LED 模拟方法介绍 | 13 |
| 2.1 模拟方法 | 14 |
| 2.2 APSYS 软件介绍 | 18 |
| 2.3 本章小结 | 22 |
| 参考文献 | 23 |
| 第三章 极化诱导掺杂研究 | 24 |
| 3.1 引言 | 24 |
| 3.2 基本结构和参数设定 | 25 |
| 3.3 模拟结果及原因分析 | 26 |
| 3.4 本章小结 | 34 |
| 参考文献 | 36 |
| 第四章 紫外 LED 超晶格电子阻挡层的优化研究 | 37 |
| 4.1 引言 | 37 |
| 4.2 基本结构和参数设定 | 37 |
| 4.3 超晶格 EBL 阱垒组分的优化选择 | 38 |
| 4.4 超晶格 EBL 变垒组分的研究 | 39 |
| 4.5 DSB-EBL 型 UV-LED 的优势分析 | 42 |
| 4.6 本章小结 | 45 |
| 参考文献 | 46 |
| 第五章 总结与展望 | 47 |
| 附录 硕士期间发表论文 | 49 |
| 致谢 | 50 |

Contents

| | |
|--|----|
| Chapter 1 Introduction | 1 |
| 1.1 Forward | 1 |
| 1.2 Basic characters of AlGaIn based UV LED..... | 2 |
| 1.3 Prospects and bottleneck of UV LED..... | 5 |
| 1.4 Framework of thesis | 7 |
| References | 9 |
| Chapter 2 Introduction about simulation method of UV LED. | 13 |
| 2.1 Simulation method | 14 |
| 2.2 Introduction about APSYS..... | 18 |
| 2.3 Conclusions..... | 22 |
| References | 23 |
| Chapter 3 Polarization induced doping | 24 |
| 3.1 Forward | 24 |
| 3.2 Structures and parameters..... | 25 |
| 3.3 Simulation results and analysis..... | 26 |
| 3.4 Conclusions..... | 34 |
| References | 36 |
| Chapter 4 Optimization of superlattice EBL in UV LED. | 37 |
| 4.1 Forward | 37 |
| 4.2 Structures and parameters..... | 37 |
| 4.3 Optimization of Al component in superlattice EBL | 38 |
| 4.4 Study of multiple superlattice barrier EBL..... | 39 |
| 4.5 The advantages of DSB-EBL UV LED..... | 42 |
| 4.6 Conclusions..... | 45 |
| References | 46 |
| Chapter 5 Summary and prospect | 47 |
| Appendix | 49 |
| Acknowledgements | 50 |

第一章 绪论

1.1 引言

III族氮化物作为新一代半导体材料，具有宽直接带隙、高电子漂移率、高热导率、耐高温、抗腐蚀、抗辐射等优点，适合制作高频、高功率、耐高温和抗辐射的电子器件^[1]。目前，GaN 基蓝、绿光 LED 的研究和市场都日趋成熟，在景观照明、屏幕背光源、光通讯等领域展现出广泛的应用价值。2014 年，诺贝尔物理学奖花落蓝光 LED 的发明者赤崎勇（Isamu Akasaki）、天野浩（Hiroshi Amano）和中村修二（Shuji Nakamura），再次证明了 LED 的发明在人类文明发展进程中的重要地位。

近年，研究人员逐渐把重点转移到短波长的紫外 LED 上。紫外 LED 指发光中心波长处于 400nm 以下的 LED，我们可根据具体的发光波长将紫外 LED 继续细分为 UV-A 波段（315-400nm）、UV-B 波段（280-315nm）和 UV-C 波段（200-280nm）^[2]。半导体的禁带宽度直接决定了 LED 的发光波长，通过改变组分，III族氮化物 LED 的发光波长可以覆盖 200nm（AlN 的禁带宽度）到 1378nm（InN 的禁带宽度）^[3]之间。深紫外 LED 凭借其短波长的发光具有丰富的应用前景，包括水质净化、医疗器械、全彩显示、光学存储以及白光显示等各个领域^[4]。

回顾紫外 LED 的发展历程，早在 1910 年，人们就已经合成了 GaN 材料，但由于 GaN 材料熔点高，离解压高的特性使得其单晶生长极为困难。1989 年，H.Amano 等人通过低能电子束照射获得低阻的 p 型 GaN^[5]，1991 年，S.Nakamura 等人通过快速热退火的方法成功获得了 p 型 GaN^[6]，这两项关键技术的突破很大程度上加快了 III族氮化物的研究进程。1998 年，Han 等人首次实现了 353nm 发光波长的 AlGaIn/GaN 多量子阱结构的生长^[7]，随着 MOCVD 和 MBE 生长技术的不断发展演进，紫外 LED 的发光波长也不断向短波段突破，比如 2001 年，Adivarahan 等人实现了第一个 340nm 的 UV-A LED^[8]，同年 Khan 等人采用脉冲原子层外延技术，AlGaIn 外延层质量得以提升，实现 305nm 的发光波长^[9]。2002 年，第一个低于 300nm 发光波长的 UV-LED 在美国南卡罗来纳州立大学成功制备，Adivarahan 在改进 p 型、n 型接触电阻后，器件的最大输出功率达到

0.25mW^[10]。随后, Adivarahan, Yasan 和 Wu 所在的研究组又取得了一系列重要进展, 实现了 280nm, 269nm, 254nm 和 250nm 的发光波长, 其中发光峰 269nm 的深紫外 LED 在 40mA 注入电流下最大功率为 0.85mW^[11-13]。2006 年, NTT 实验室采用 AlN 基 p-i-n 结构, 制备了发光波长低于 210nm 的深紫外 LED^[14], 但是在 40mA 的注入电流下仅有 0.02 μ W 的发光功率^[14]。深紫外 LED 量子效率低和发光功率低的问题一直困扰着人们, 其原因有很多, 比如 AlGa_xN 材料高位错密度会引起非辐射复合, 异质界面的自发极化和偏极化电荷使得能带弯曲影响载流子注入, 以及 p 型掺杂的困难等等, 如何提高深紫外 LED 的成为广大科研工作者们孜孜不倦研究的重点。

1.2 AlGa_xN 基紫外 LED 的基本性质

1.2.1 AlGa_xN 半导体结构与性质

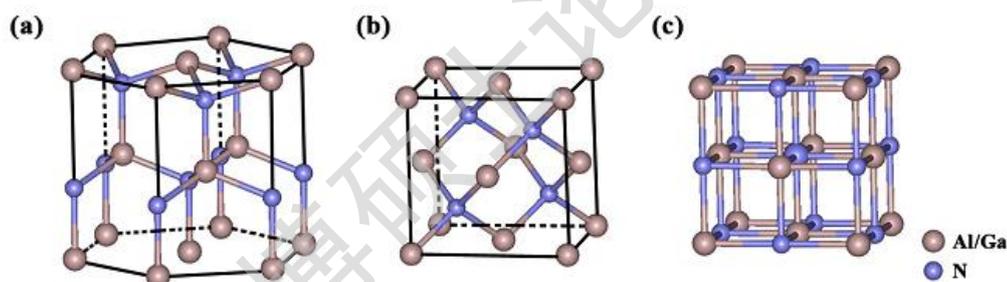


图 1.1 AlGa_xN 半导体材料晶体结构 (a) 纤锌矿 (b) 闪锌矿 (c) 岩盐矿^[15]

AlGa_xN 属于 III 族氮化物, 是三元混晶, 具有六方对称的纤锌矿结构 (Wurtzite, WZ)、立方对称的闪锌矿结构 (Zinc blende, ZB)、以及岩盐矿结构 (Rock salt, RS) 三种, 如图 1.1 所示。其中最稳定的结构为纤锌矿, 亚稳态结构为闪锌矿, 在高压的条件下纤锌矿结构可转变为岩盐矿结构。AlGa_xN 材料化学性质稳定, 具有热导率高、介电常数小、击穿电场高、电子饱和速度大等性质, 且有很好的耐高温性能。由于纤锌矿和闪锌矿缺乏中心对称性, 且 V 族原子的电负性和 III 族原子的电负性强度不同, 导致沿 c 轴方向的产生了自发极化, 即自发极化效应 (Spontaneous polarization)^[16]。此外, 由于在异质外延的过程中, V 族和 III 族材料拥有不同的热膨胀系数和晶格常数, 相互的应力作用导致内部电荷中心相对位移, 进而产生了压电极化效应 (Piezoelectric polarization)。同时, 因为 Ga 原子的电负性比 Al 原子的电负性强, AlGa_xN 材料的自发极化与压电极化效应均比

GaN 材料强, 沿[0001]方向有更大的自发极化和压电极化系数, 这种极化分布使其(0001)(Al/Ga 极性)和(000-1)(N 极性)两个不等价极性面具有不同的物理和化学性质^[15]。对于半导体光电器件而言, 极化场的存在会产生较多的不利影响, 比如常见的能带弯曲, 从而导致有效的辐射复合效率降低, 影响整体的发光效率。表 1.1 给出了 GaN, AlN 和 InN 材料的部分晶体结构和能带结构参数。

表 1.1 纤锌矿 GaN、AlN 和 InN 材料的部分晶体结构和能带结构参数^[1, 16-18]

| | GaN | AlN | InN |
|---------------------------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| 晶格常数 a (nm) | 0.3190 | 0.3110 | 0.35446 |
| 晶格常数 c (nm) | 0.5189 | 0.4980 | 0.57034 |
| 室温禁带宽度 E_g (eV) | 3.44 | 6.13 | 19.5 |
| 热导率 (W/cm/K) | 1.3 | 3.19 | 38.4 |
| 熔点 (K) | 2791 | 3025 | 1900 |
| 介电常数 | 10.4 | 9.14 | 9.3 |
| 电子亲和能 (eV) | 4.1 | 0.6 | 5.8 |
| 室温下导带有效态密度 N_C (cm^{-3}) | 2.3×10^{18} | 6.3×10^{18} | 9×10^{17} |
| 室温下导带有效态密度 N_V (cm^{-3}) | 4.6×10^{19} | 4.8×10^{20} | 5.3×10^{19} |
| 密度 (g/cm^3) | 6.15 | 3.23 | 6.81 |

1.2.2 AlGaN 基紫外 LED 的发光机理

从能带结构上看, 半导体材料分为直接带隙半导体材料和间接带隙半导体材料^[19]。如图 1.2 (a) 所示, 对于直接带隙半导体来说, 导带极小值和价带极大值发生在布里渊区同一点, 电子在跃迁过程中必须满足能量守恒和准动量守恒^[20], 即 $\bar{k}_2 - \bar{k}_1 = 0$ (其中 \bar{k}_2 为跃迁前电子的波矢量, \bar{k}_1 为跃迁后电子的波矢量, $\bar{k}_2 = \bar{k}_1$ 表示这种跃迁发生在 \mathbf{K} 空间的同一地点) 如图 1.2 (b) 所示, 对于间接带隙半导体来说, 导带极小值和价带极大值不是发生在布里渊区同一地点, 在跃迁的过程中必须伴随着声子的吸收或放出^[20], 即 $\bar{k}_2 - \bar{k}_1 = \pm \bar{q}$ (其中 \bar{q} 为声子的波矢, 正号表示放出声子, 负号表示吸收声子)。由于声子参与复合, 将导致发光效率的大幅降低并产生热能, 将损害发光器件的使用寿命, 因此大部分发光器件都选用直接带隙半导体材料。

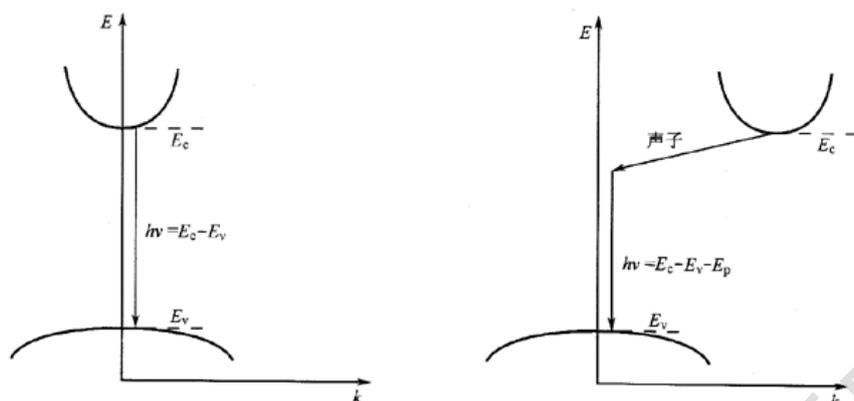


图 1.2 (a) 直接带隙半导体辐射复合 (b) 间接带隙半导体辐射复合

深紫外 LED 的基本结构是电致发光的半导体材料，发光原理如图 1.3 所示，p-n 结在正向偏压下，电子和空穴分别由 N 区和 P 区注入，在有源区发生辐射复合，从而把多余的能量以光的形式释放出来，电能直接转换为光能^[21]，光的强弱与电流有关。一个有效的发光器件除了完整的结构外，也要对 p 型区和 n 型区进行有效的掺杂，以产生足够的空穴和电子。在 III-V 族材料生长的过程中，常常产生缺陷，这些缺陷会成为非辐射复合，复合产生的不是光子而是声子，影响 LED 的整体性能和出光效率。

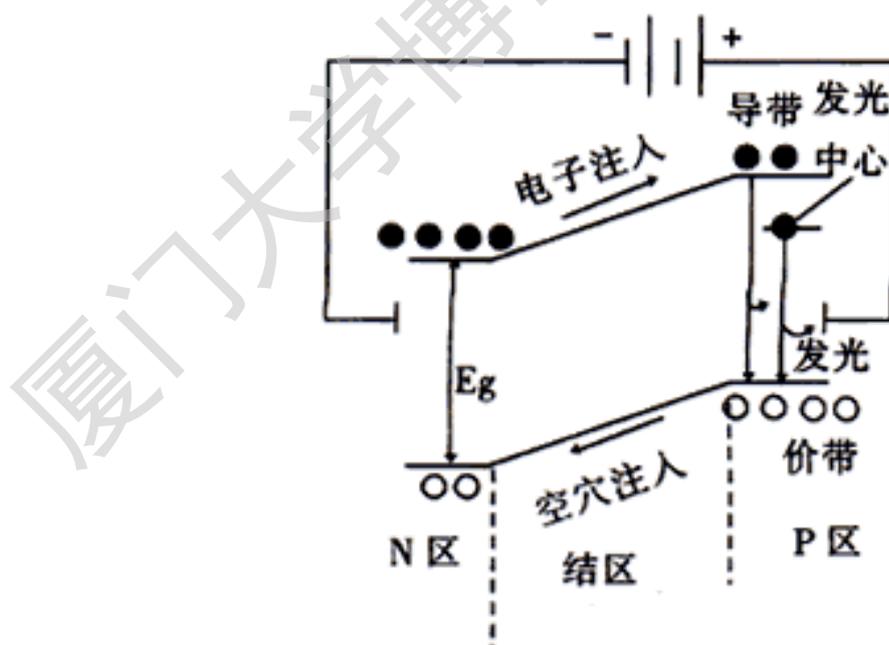


图 1.3 LED 的发光原理图

1.3 紫外 LED 的发展前景与所存问题

1.3.1 市场应用前景

如前所述，由于紫外 LED 具有众多优点，世界各国对此领域也加大了研发力度，使得紫外 LED 的芯片和封装技术不断得以成熟发展，成本也不断降低。除了在特殊照明、紫外杀毒、水净化等领域均具有广泛的市场应用前景外^[22]，也凭借其节能环保、涂层性能优异、生产效率高等优势，在紫外油墨固化领域得到广泛的应用和发展，占整个辐射固化市场的 95%^[23]。此外，紫外 LED 的应用领域还渐渐延伸到了新的领域，例如混合油墨印刷和紫外喷墨，在印刷、包装、建材、家装、电子、家电、汽车、光纤、广告、装潢、等行业得到了越来越广泛的应用^[24-25]。据法国咨询公司 Yole Development 发布的数据报告显示，紫外 LED 的市场规模 2016 年将达到 1.5 亿美元，在传统紫外光源市场上的占用率将从 2011 年的 10.4% 增加到 2016 年的 28.1%。

1.3.2 紫外 LED 现存问题与解决方案

同蓝、绿光 LED 类似，紫外 LED 的发光效率主要取决于内量子效率 (Internal Quantum Efficiency)、载流子注入效率 (Carrier Injection Efficiency) 和光抽取效率 (Light extraction efficiency) 三个因素^[26]。由于高 Al 组分 AlGaIn 材料的引入，紫外 LED 尤其是深紫外发光波段的 LED 在材料外延、掺杂、表面出光、欧姆接触等方面产生了一些亟待解决的新问题。

1) 高 Al 组分 AlGaIn 材料制备

为了获得较高质量的 AlGaIn 材料，人们在异质外延的过程中通常要采用低温缓冲层，比如采用与 AlGaIn 材料晶格失配较小的 AlN 做缓冲层。但是由于 AlN 的结晶温度高达 2800℃，外延生长的过程 Al 源和 N 源之间容易发生预反应，产生多种形态的反应物^[27]，影响生长表面和界面的平整度。随着 MOCVD 技术的发展，后来人们普遍采用价格适中、商用成熟的蓝宝石作为衬底，在衬底上进行 AlN 薄膜的外延生长。

由于 AlGaIn 材料的本质特性，Al 原子的粘滞系数比 Ga 原子大^[26]，Al 原子不易迁移到低能态的台阶和晶格扭折处，会聚集成岛或核，呈三维形态生长，这就造成了界面不平整、缺陷密度高的结果。为了解决这些问题，人们采取了一些

办法, 比如利用纳米图形衬底减小外延层的位错密度^[28]; 也有研究人员在 AlN 和 AlGa_N 间采用超晶格 Al/AlGa_N 结构来释放失配应力^[29]; 横向外延生长(ELO)的方法亦能降低晶体的位错密度, 获得较好的晶体质量^[30]。

2) 光抽取效率低

目前普通 LED, 尤其是紫外 LED 的外量子效率很低, 主要原因是光线在 p 型层的界面发生完全内反射, 另外, 由于 GaN 和 SiC 材料都会吸收紫外线, 也会导致 LED 芯片的光抽取效率极低。目前, 研究者主要通过表面粗化的方式降低出射光线在界面处的全反射概率^[31]; 利用倒装芯片结构, 有效降低出光表面材料及电极结构对出射光的吸收^[32]; 在 LED 非出光面制作一面反射镜(如布拉格反射镜^[33]、全方位角反射镜^[34]), 增大光出射效率; 或在器件表面或衬底制作光子晶体, 既能增强光的出射, 也能避免金属反射镜造成的反射损失^[35]。

3) 欧姆接触

高 Al 组分的 AlGa_N 材料, 由于 p 型 AlGa_N 和 n 型 AlGa_N 的表面势垒较大, 且 p 型掺杂困难, 导致空穴载流子浓度较低, 使得隧穿欧姆接触不易形成。人们在电极材料选择和热退火条件摸索方面做了很多的工作, 以求达到良好的欧姆接触。对于 n 型 AlGa_N, 人们通常采用 Ti/Al/Ni/Au^[35], V/Al/V/Au^[36]做接触电极, 对于 p 型 AlGa_N, 人们则会在其上先沉积一层较薄的 p 型 GaN 来降低接触势垒, 并采用 Ni/Au^[37]做电极材料。此外, 热退火亦是电极制作过程中至关重要的一步, 人们常用快速退火的方式处理紫外 LED 的电极, 针对不同的金属电极类型, 其退火的时间、温度和气氛都需要特别优化, 比如在制作 p 型 GaN 和 Ni/Au 电极欧姆接触时, 气体氛围应选取氧气或空气, 因为氧可吸收 H 原子, 降低 Mg-H 复合体生成概率, 提升 Mg 的激活率^[38]。

4) AlGa_N 材料的 p 型掺杂

随着 Al 组分的增加, 无论是 p 型还是 n 型掺杂都变得更加困难, 尤其是 p 型掺杂, 一直是困扰业界的一个大难题。p 型掺杂困难主要归因于在高 Al 组分的 AlGa_N 材料中, H 和受主杂质 Mg 结合成 Mg-H 复合体钝化了 Mg 受主, 使其激活困难, 电阻过高。1989 年, H.Amano 等利用低能电子束辐射, 获得低阻的 p 型 GaN^[5]; 1991 年, S.Nakamura 等发明了快速热退火法成功获得了 p 型 GaN^[6]; 1998 年, T.Yamamoto 等提出共掺杂的方法, 能降低受主能级升高施主能级^[39];

此外, John Simon 也提出了利用组分渐变极化诱导 Mg 掺杂的方法^[40]。本研究组也曾提出 Mg 和 Si 共掺的方法, 使得在材料中形成一个局域的极化场, 并抬升了价带顶的能级, 降低价带电子激发到受主能级形成空穴的所需能量, 从而 Mg 的溶解度和空穴溶度均得以提高^[41]。

5) 载流子注入效率低

紫外 LED 载流子注入效率的高低除了受到晶体质量、掺杂浓度、受主激活效率等基本因素的影响外, 人们也发现由于材料的自发极化和压电极化效应造成的能带弯曲现象会对空穴的注入形成阻挡势垒, 降低空穴的注入效率, 同时富余的电子也会由于向下倾斜的垒层更容易泄露到 p 型区域, 导致内量子效率下降, 即 Efficiency Droop。这一问题的解决办法我们通常称之为能带调控, 比如在有源区和 p 型区域之间插入电子阻挡层, 可以有效抑制电子的泄露^[42]; 在完整的紫外 LED 上方铺撒石墨烯氧化层, 能中和极化电荷, 抑制极化现象^[43]; 或者针对最后多量子阱区域的最后一个势垒进行掺杂和加厚处理, 也能对能带结构进行调控^[44]。

1.4 论文框架

基于以上的描述, 紫外 LED 面临诸多困难, 尤其是 p 型掺杂、载流子注入效率低的问题降低了紫外 LED 的整体发光效率, 给研究者们带来很大的烦恼, 究其原因, 极化场所引起的能带弯曲是一个重要的影响因素。因此, 本文重点围绕能带结构的调控进行研究, 运用 Crosslight Software Inc. 出品的半导体 TCAD 模拟软件——APSYS 进行详细的计算分析, 研究了 p 型/n 型区域 Al 组分渐变对紫外 LED 性能的影响, 并试图对超晶格电子阻挡层进行优化, 实现对极化场和能带结构的调控, 提高紫外 LED 的发光效率。本篇论文各章节的主要内容呈如下分布:

第一章: 简要介绍了 AlGaIn 基紫外 LED 的发展历程和基本性质, 同时探讨了目前存在的研究难题和业内常用的一些解决办法。

第二章: 简要介绍了半导体计算机辅助设计 (TCAD) 的方法和 APSYS 软件的基本原理、计算模型和物理方程。此外, 也对 APSYS 软件的文件结构、操作程序和常见收敛困难原因进行了介绍。

第三章：针对紫外 LED p 型掺杂的困难，引入极化诱导掺杂的方式，并观察其对极化场的调控作用，将其和参考结构进行分析对比。

第四章：针对本组之前提出的超晶格 EBL 进行进一步优化，提出一个下降垒组分的超晶格电子阻挡层结构 (Decreased-Superlattice-Barrier Electron Blocking Layer)，观察其对能带的调控效果，将其和参考结构进行分析对比。

第五章：归纳总结全文内容，指出不足之处，并对未来的研究工作进行了展望。

Degree papers are in the “[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)”.

Fulltexts 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.