

Численное моделирование InGaN/AlGaN-светодиодов с градиентными AlGaN-барьерами

© Д.С. Артеев^{1,2}, А.В. Сахаров^{1,2}, А.Е. Николаев^{1,2}, С.Н. Родин^{1,2}, А.Ф. Цацульников²

¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

² Научно-технологический центр микроэлектроники и субмикронных гетероструктур
Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия
E-mail: ArteevDS@mail.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 5 мая 2026 г.

В окончательной редакции 23 июля 2026 г.

Принята к публикации 28 июля 2026 г.

Выполнено одномерное численное моделирование светодиодных структур ближнего ультрафиолетового диапазона с InGaN-квантовыми ямами и различными профилями состава AlGaN-барьерных слоев: однородными $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$ и градиентными AlGaN. Показано, что использование градиентных барьеров с увеличением мольной доли AlN по направлению к p -области позволяет повысить внутреннюю квантовую эффективность до 56 % и эффективность инжекции до 89 % за счет изменения профиля зон и пространственного распределения носителей заряда, что приводит к снижению безызлучательной рекомбинации в барьерных слоях. Также показано, что при неоптимальном дизайне доля рекомбинации Шокли–Рида–Холла в барьерных слоях может достигать 70 % от ее общего темпа в структуре.

Ключевые слова: нитрид галлия, светодиод, InGaN, AlGaN, моделирование, квантовая яма.

DOI: 10.61011/FTP.2026.07.63947.9778

Светодиоды ближнего ультрафиолетового (УФ) диапазона на основе III-N гетероструктур привлекают внимание как перспективная замена традиционных ртуть-содержащих ламп в различных областях, таких как фотолитография, фотокатализ, 3D-печать, биомедицина и т.д. Помимо этого, УФ-светодиоды используются в качестве накачки люминофоров для создания светодиодов белого света с повышенным индексом цветопередачи. Для получения излучения с длиной волны 360–380 нм необходимо использование InGaN-квантовых ям (КЯ) с малой (несколько процентов) мольной долей InN. В качестве барьеров в таких структурах обычно применяются слои AlGaN, обеспечивающие больший разрыв зон на гетерограницах, уменьшающие термический выброс и улучшающие локализацию носителей в КЯ по сравнению с GaN-барьерами. Вместе с тем увеличение содержания Al в барьере может сопровождаться усилением встроенных поляризационных полей и ухудшением баланса инжекции электронов и дырок.

Одним из подходов для управления профилем энергетических зон, транспортом и пространственным распределением носителей заряда является использование барьерных слоев переменного состава. В ряде работ с использованием численного моделирования показано, что применение таких барьеров позволяет повысить внутреннюю квантовую эффективность (ВКЭ) светодиодов. Так, в работе [1] для структур глубокого УФ диапазона с $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{N}$ КЯ было предсказано почти двухкратное увеличение максимальной ВКЭ при использовании линейно-градиентных барьеров. В работе [2] для структуры с $\text{Al}_{0.40}\text{Ga}_{0.60}\text{N}$ показано увеличение ВКЭ в

1.5 раза при использовании трехступенчатых AlGaN-барьеров. Аналогичный подход был предложен для светодиодов желтого спектрального диапазона, где использование градиентных InGaN-барьеров также приводит к повышению расчетной эффективности [3]. Несмотря на опубликованные работы, посвященные использованию градиентных барьерных слоев для светодиодов глубокого УФ и видимого спектральных диапазонов, их влияние на распределение носителей заряда и процессы рекомбинации в InGaN/AlGaN-светодиодах ближнего УФ диапазона до настоящего времени остается изученным существенно менее подробно.

В данной работе выполнено одномерное численное моделирование InGaN/(Al)GaN-светодиодной структуры в программном пакете 1D-DDCC, реализующем самосогласованное решение одномерных уравнений Пуассона и непрерывности для электронов и дырок [4]. В расчетах учитывались спонтанная и пьезоэлектрическая поляризация, а также механизмы безызлучательной рекомбинации Шокли–Рида–Холла (SRH) и Оже (Auger). Эффекты квантового ограничения были учтены с использованием так называемой „Localization landscape theory“ [5], которая позволяет вычислить эффективный потенциал и использовать его в рамках диффузионно-дрейфовой модели без прямого самосогласованного решения системы уравнений Шрёдингера–Пуассона, обеспечивая существенное ускорение расчетов. Большинство материальных параметров InGaN и AlGaN были позаимствованы из работы [6]. В качестве базовой рассматривалась гетероструктура, состоящая из толстого буферного $n\text{-Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$ ($[\text{Si}] = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$) слоя,

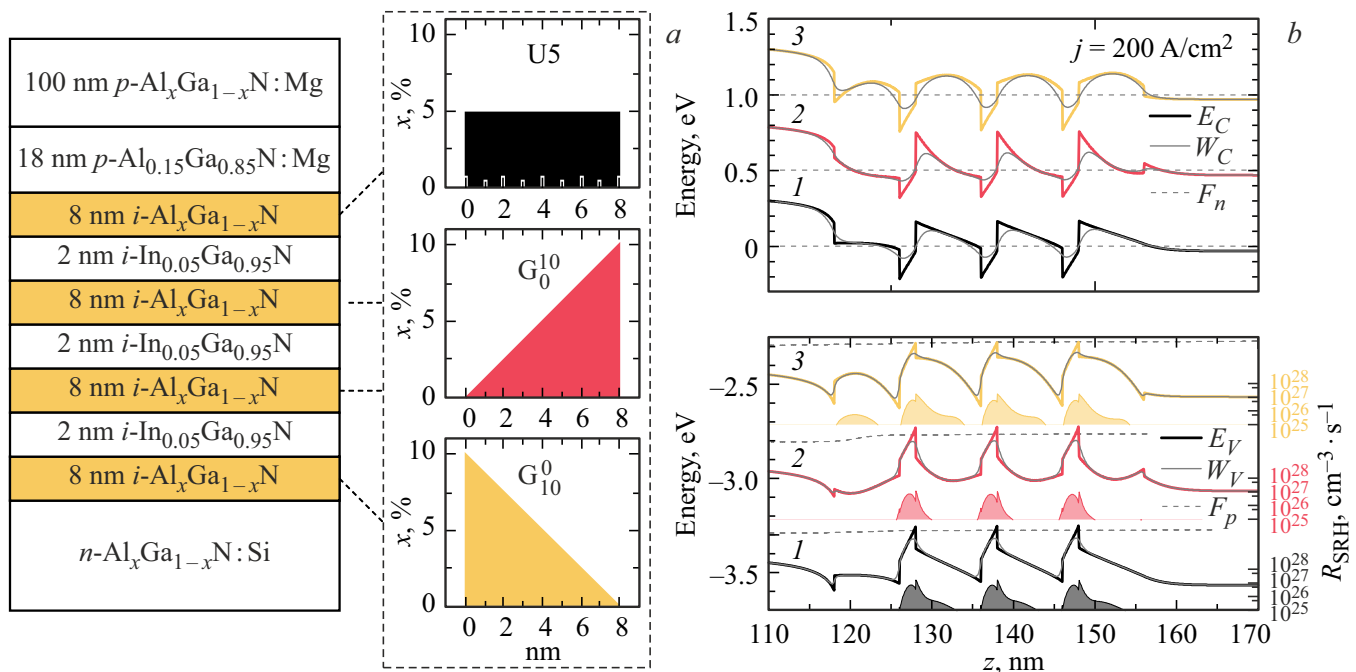


Рис. 1. Схематическое послойное изображение исследуемых структур (а) и рассчитанные энергии дна зоны проводимости E_C и потолка валентной зоны E_V , эффективного потенциала W_C и W_V , квазиуровней Ферми F_n и F_p для электронов и дырок соответственно, при плотности протекающего тока $j = 200 \text{ A/cm}^2$. Закрашенные области показывают темп безызлучательной рекомбинации Шокли–Рида–Холла R^{SRH} (b). Цифрами обозначены группы кривых, относящихся к структурам: 1 — U5, 2 — G_0^{10} , 3 — G_{10}^0 .

трех нелегированных 2-нм $\text{In}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$ -квантовых ям, разделенных 8-нм $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$ нелегированным барьерным слоем (концентрация фоновых донорных примесей в данных слоях принята равной $1 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), 18-нм $p\text{-Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N:Mg}$ электронно-блокирующего слоя и 100-нм контактного $p\text{-Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N:Mg}$ слоя с концентрацией магния $8 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Выбранный дизайн соответствует типичным III-N светодиодным структурам и близок к ранее исследованным нами структурам синего диапазона [7], при этом состав КЯ, барьерных слоев и электронно-блокирующего слоя были скорректированы с учетом необходимой длины волны излучения в ближнем УФ диапазоне. Для удобства изложения данная структура в дальнейшем обозначается как U5 (U — uniform). Энергия активации магния рассчитывалась на основе работы [8] и составила 198 и 248 мэВ для $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$ и $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ соответственно. Концентрация свободных дырок в контактном p -слое составила $\sim 1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, что соответствует типичным максимальным значениям в $p\text{-GaN:Mg}$, выращенным методом газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений [9,10], которая является основным промышленным способом выращивания светодиодных структур на основе III-N. Донорные примеси полагались полностью ионизованными. Для сравнения рассмотрена структура, в которой все $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$ -слои, включая буфер, были заменены на GaN (структура U0). Помимо структур с однородными барьерами были проанализированы струк-

туры, в которых все четыре барьерных (Al)GaN слоя были заменены слоями с линейным градиентом состава. В первом случае молярная доля AlN возрастает от 0.00 до 0.10 по мере роста слоя, т.е. по направлению от n -слоев к p -слоям (структура G_0^{10} , G — gradient), во втором — наоборот, уменьшается от 0.10 до 0.00 (структура G_{10}^0). Схематическое изображение дизайна структур показано на рис. 1, а.

Известно, что подвижность носителей заряда в твердых растворах AlGaN ниже, чем в бинарных соединениях GaN или AlN, из-за рассеяния на флуктуациях состава. Подвижность электронов в слоях рассчитывалась с использованием правила Матиссена как

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu^{\text{GaN}}} + \frac{1}{\mu^{\text{alloy}}}, \quad (1)$$

где μ^{GaN} — подвижность электронов в бинарном GaN на основе эмпирической аппроксимации из работы [11], а подвижность, ограниченная рассеянием на флуктуациях состава твердого раствора, рассчитывалась по формуле (2), где $U_0 = \partial E_C / \partial x$ — потенциал сплавного рассеяния, а N — концентрация катионов [12]. Подвижность дырок во всех слоях была принята равной $10 \text{ cm}^2/(\text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$:

$$\mu^{\text{alloy}} = \frac{\pi^{3/2} q \hbar^4 N}{2\sqrt{2} U_0 x (1-x) m^{*5/2} (kT)^{1/2}}. \quad (2)$$

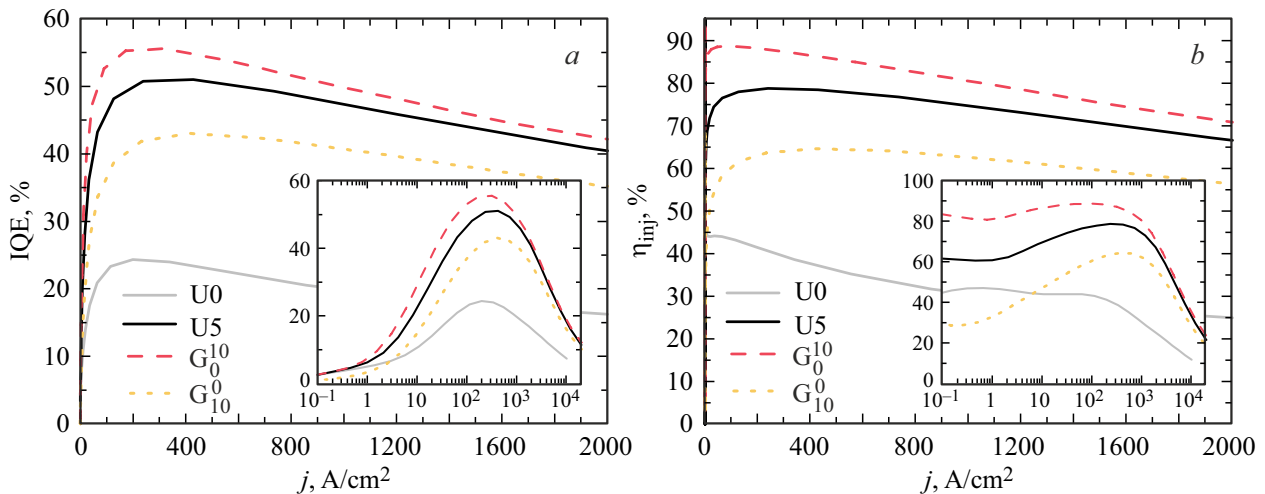


Рис. 2. Зависимость внутренней квантовой эффективности (а) и эффективности инжекции (б) от плотности тока. На вставках — то же, но в логарифмическом масштабе по оси x .

Время жизни безызлучательной рекомбинации Шокли–Рида–Холла оценивалось исходя из модели [13]

$$\tau_{n,p} = (4\pi D_{n,p} N_D)^{-1} \left[\frac{2D_{n,p}}{aV_{n,p}S} - \frac{3}{2} - \ln(\pi a^2 N_D) \right], \quad (3)$$

где $D_{n,p} = \mu_{n,p} \cdot kT/q$ — коэффициент диффузии, $V_{n,p}$ — тепловая скорость, $S = 0.5$ — доля электрически активных центров на ядре дислокации, a — постоянная кристаллической решетки. Плотность дислокаций принималась равной $N_D = 1 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$, что по порядку величины является типичным значением для наших гетероструктур на основе GaN, выращенных на стандартной (плоской) сапфировой подложке [7,14]. В InGaN КЯ значения времен жизни принимались на порядок выше рассчитанного по формуле (3) для феноменологического учета эффекта флуктуаций состава индия, при котором локализация носителей в обогащенных индием областях позволяет существенно снизить их безызлучательную рекомбинацию на дислокациях. В расчетах использовались значения коэффициентов рекомбинации, заданные в программном пакете по умолчанию. Исключение составлял коэффициент излучательной рекомбинации B вне КЯ, который был принудительно задан равным нулю, т.е. излучательная рекомбинация учитывалась только в КЯ. При этом в КЯ принималось значение $B = 2 \cdot 10^{-11} \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$, а коэффициент оже-рекомбинации во всех слоях — $C = 2 \cdot 10^{-31} \text{ см}^6 \cdot \text{с}^{-1}$.

На рис. 1, б представлены рассчитанные зонные диаграммы для структур U5, G_0^{10} и G_{10}^0 при плотности тока $j = 200 \text{ А/см}^2$. Видно, что использование градиентных барьерных слоев существенно изменяет профиль зон по сравнению с однородными барьерами из-за возникновения распределенных поляризационных зарядов, что, как будет показано далее, существенно влияет на транспорт носителей заряда.

Внутренняя квантовая эффективность (ВКЭ) структур рассчитывалась как отношение тока излучательной рекомбинации к общему току, протекающему через структуру:

$$IQE = \frac{j_{\text{rad}}}{j} = \frac{q}{j} \int R^{\text{rad}}(z) dz, \quad (4)$$

где $R^{\text{rad}}(z)$ — темп излучательной рекомбинации. Зависимость внутренней квантовой эффективности от плотности протекающего тока показана на рис. 2, а. Видно, что максимальная эффективность структуры U0 с GaN-барьерами составляет всего 24 % из-за малого разрыва зон между GaN и $\text{In}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$, что приводит к слабой локализации носителей в КЯ. На рис. 2, б показана эффективность инжекции (ЭИ) в КЯ, которая определяется отношением рекомбинационного тока в КЯ к общему току:

$$\eta_{\text{inj}} = \frac{j_{\text{QW}}^{\text{rec}}}{j} = \frac{q}{j} \int_{\text{QW}} R(z) dz, \quad (5)$$

где $R(z) = R^{\text{SRH}}(z) + R^{\text{rad}}(z) + R^{\text{Auger}}(z)$. Видно, что даже на малых плотностях тока менее 45 % инжектированных носителей рекомбинируют в КЯ, т.е. высокоэффективный светодиод с длиной волны $\sim 370 \text{ нм}$ на основе структуры с GaN-барьерами невозможен. При использовании $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$ -барьеров (структура U5) ситуация намного улучшается, а именно ВКЭ возрастает до 51 %, а ЭИ — до 79 %. Для количественного анализа были вычислены относительные вклады тока SRH-рекомбинации, оже-тока и тока утечки (j_{SRH}/j , j_{Auger}/j , j_{Leakage}/j) и представлены на рис. 3, а. Действительно, утечки в структуре U0 с GaN-барьерами играют большую роль уже на самых малых токах и становятся сравнимы с током безызлучательной рекомбинации при $j \sim 300 \text{ А/см}^2$; потери на оже-рекомбинацию пренебрежимо малы. В структуре U5 потери на рекомбина-

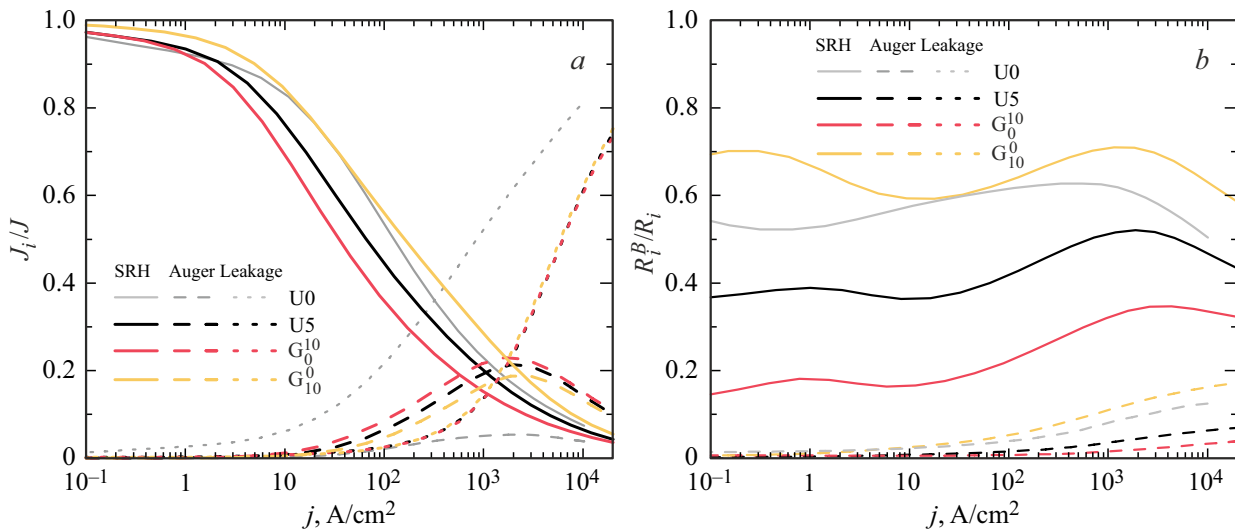


Рис. 3. Зависимости относительных вкладов токов безызлучательной (SRH) и Оже (Auger) рекомбинации и утечки (Leakage) в полный ток (а), доля темпа безызлучательной и оже-рекомбинации в барьерных слоях по отношению к суммарному темпу каждого из этих рекомбинационных каналов (b) от плотности протекающего тока.

цию по механизму Шокли–Рида–Холла доминируют до $j \sim 1000 \text{ A/cm}^2$, где они сравниваются с оже-потерями; утечки становятся доминирующим механизмом потерь после $j \sim 1700 \text{ A/cm}^2$. При этом было замечено, что значительная часть безызлучательной рекомбинации происходит не в КЯ, а в окружающих барьерных слоях: от 52 до 62 % для структуры U0 и от 36 до 52 % для структуры U5 (рис. 3, b). Необходимость учета сильной SRH-рекомбинации именно в барьерном слое между квантовыми ямами для объяснения наблюдаемых экспериментальных данных ранее была продемонстрирована в работе [15].

Далее рассмотрим образцы с градиентными барьерными слоями. На рис. 2 видно, что максимальная ВКЭ образца G_0^{10} с возрастанием мольной доли AlN по направлению роста слоя увеличилась до 56 %, ЭИ в КЯ — до 89 %. Улучшение связано с изменением профиля зон, что приводит к изменению пространственного распределения носителей заряда и, как следствие, распределению темпов рекомбинации. В частности, как видно из рис. 1, b, применение градиентных барьеров в структуре G_0^{10} приводит к снижению темпов рекомбинации Шокли–Рида–Холла в барьерных слоях. Для структуры G_0^{10} с обратным градиентом ситуация противоположная — профиль энергетических зон благоприятствует повышенной концентрации дырок в барьерных слоях, что приводит к повышенному темпу SRH-рекомбинации в них и, следовательно, к снижению ВКЭ и ЭИ до 43 % и 65 % соответственно. Примечательно, что относительный вклад токов утечки в полный ток одинаков для трех структур U5, G_0^{10} и G_{10}^0 (рис. 3, a) и определяется, по всей видимости, дизайном блокирующего слоя, который одинаков для всех структур. Эффективность рекомбинации в КЯ, которую можно

определить как (6), практически одинакова для всех структур, так как константы рекомбинации в КЯ для всех структур также одинаковы, и изменение дизайна барьеров влияет на величину безызлучательной рекомбинации в них. Так, по рис. 3, b видно, что в барьерных слоях неудачного дизайна (G_{10}^0) может происходить до 60–70 % SRH-рекомбинации, которая снижается до 20–30 % в структуре G_0^{10} :

$$\eta_{\text{QW}}^{\text{rec}} = \frac{\int_{\text{QW}} R^{\text{rad}}(z) dz}{\int_{\text{QW}} R(z) dx}. \quad (6)$$

Таким образом, выполненное в работе моделирование показало, что дизайн барьерных слоев существенно влияет на пространственное распределение носителей заряда и безызлучательной рекомбинации по структуре, определяя тем самым внутреннюю квантовую эффективность светодиода. Применение градиентных слоев AlGaIn с увеличением мольной доли AlN к p -области может являться эффективным способом повышения квантовой эффективности InGaIn/AlGaIn-светодиодных структур за счет управления распределением носителей и снижения потерь на безызлучательную рекомбинацию в барьерах. Помимо этого, полученные результаты показывают, что использование широко известной АВС-модели для анализа рекомбинационной динамики в подобных гетероструктурах требует осторожности. При неоптимальном дизайне в исследованных структурах существенная доля безызлучательной рекомбинации может происходить за пределами квантовых ям — в барьерных слоях, а также наблюдаются существенные потери, связанные с утечкой носителей. Следовательно, интерпретация экспериментальных зависимостей ВКЭ

исключительно в рамках АВС-модели может приводить к некорректной оценке физических механизмов ограничения эффективности и оценке рекомбинационных констант.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Y. Shen, Y. Zhang, L. Yu, K. Li, H. Pi, J. Diao, W. Hu, W. Song, C. Zhang, S. Li. *J. Disp. Technol.*, **11**, 677 (2015). DOI: 10.1109/JDT.2015.2421361
- [2] C. Xing, H. Yu, Z. Ren, H. Zhang, J. Dai, C. Chen, H. Sun. *IEEE J. Quant. Electron.*, **56**, 1 (2020). DOI: 10.1109/JQE.2019.2956344
- [3] S. Cui, G. Tao, L. Gong, X. Zhao, S. Zhou. *Materials*, **15**, 8649 (2022). DOI: 10.3390/ma15238649
- [4] DDCC-1D — Optoelectronic Device Simulation Laboratory [Электронный ресурс]. URL: <https://yrwu-wk.ee.ntu.edu.tw/index.php/ddcc-1d/> (дата обращения 02.05.2026).
- [5] M. Filoche, M. Piccardo, Y.-R. Wu, C.-K. Li, C. Weisbuch, S. Mayboroda. *Phys. Rev. B*, **95**, 144204 (2017). DOI: 10.1103/PhysRevB.95.144204
- [6] I. Vurgaftman, M.P. Lumb, J.R. Meyer. *Bands and Photons in III-V Semiconductor Quantum Structures* (Oxford University Press, 2020). DOI: 10.1093/oso/9780198767275.001.0001
- [7] W.V. Lundin, A.E. Nikolaev, A.V. Sakharov, S.O. Usov, E.E. Zavarin, P.N. Brunkov, M.A. Yagovkina, N.A. Cherkashin, A.F. Tsatsulnikov. *Semiconductors*, **48**, 53 (2014). DOI: 10.1134/S1063782614010199
- [8] C.-Z. Zhao, T. Wei, L.-Y. Chen, S.-S. Wang, J. Wang. *Superlat. Microstr.*, **109**, 758 (2017). DOI: 10.1016/j.spmi.2017.06.006
- [9] S. Huang, M. Ikeda, F. Zhang, M. Zhang, J. Zhu, S. Zhang, J. Liu. *J. Semiconductors*, **45**, 082501 (2024). DOI: 10.1088/1674-4926/24010017
- [10] Y. Nakagawa, M. Haraguchi, M. Fukui, S. Tanaka, A. Sakaki, K. Kususe, N. Hosokawa, T. Takehara, Y. Morioka, H. Iijima, M. Kubota, M. Abe, T. Mukai, H. Takagi, G. Shinomiya. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **43**, 23 (2004). DOI: 10.1143/JJAP.43.23
- [11] T.T. Mnatsakanov, M.E. Levinshtein, L.I. Pomortseva, S.N. Yurkov, G.S. Simin, M. Asif Khan. *Solid State Electron.*, **47**, 111 (2003). DOI: 10.1016/S0038-1101(02)00256-3
- [12] A.L. Efros, M.E. Raikh. In: *Optical Properties of Mixed Crystals*, ed. by R.J. Elliott, I.P. Ipatova (Elsevier, Amsterdam, 1988) v. 23, p. 133. DOI: 10.1016/B978-0-444-87069-8.50009-9
- [13] S.Yu. Karpov, Y.N. Makarov. *Appl. Phys. Lett.*, **81**, 4721 (2002). DOI: 10.1063/1.1527225
- [14] D.S. Arteev, A.V. Sakharov, E.E. Zavarin, W.V. Lundin, M.V. Rzhetski, E.V. Lutsenko, A.F. Tsatsulnikov. *Semicond. Sci. Technol.*, **36**, 125007 (2021). DOI: 10.1088/1361-6641/abfbd
- [15] D.S. Arteev, S.Y. Karpov, A.V. Sakharov, A.E. Nikolaev, S.O. Usov, W.V. Lundin, A.F. Tsatsulnikov. *Semicond. Sci. Technol.*, **35**, 045017 (2020). DOI: 10.1088/1361-6641/ab74

Редактор Г.А. Оганесян

Numerical simulation of InGaN/AlGaIn light-emitting diodes with compositionally graded AlGaIn barriers

D.S. Arteev^{1,2}, A.V. Sakharov^{1,2}, A.E. Nikolaev^{1,2}, S.N. Rodin^{1,2}, A.F. Tsatsulnikov²

¹ Ioffe Institute,

194021 St. Petersburg, Russia

² Submicron Heterostructures for Microelectronics, Research & Engineering Center of the Russian Academy of Sciences, 194021 St. Petersburg, Russia

Abstract One-dimensional numerical modeling was performed for near-ultraviolet light-emitting diode structures featuring InGaIn quantum wells and AlGaIn barrier layers with different composition profiles: homogeneous $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$ and graded AlGaIn. Replacing GaIn with $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$ increases the internal quantum efficiency from 24.4 to 51.0%. Graded barriers with the Al mole fraction increasing toward the *p*-side further improve the internal quantum efficiency to 55.6% and the injection efficiency to 88.6%, due to enhanced hole transport and suppressed non-radiative recombination in the barriers. Moreover, it is found that a significant fraction of non-radiative recombination can occur outside the quantum wells.