

Спектры излучения гетероструктур с квантовыми ямами типа InGaN/AlGaIn/GaN: модель двумерной комбинированной плотности состояний

© М.Л. Бадгутдинов, А.Э. Юнович[†]

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова (физический факультет),
119992 Москва, Россия

(Получена 23 мая 2007 г. Принята к печати 28 августа 2007 г.)

Спектры люминесценции светодиодов на основе гетероструктур InGaN/AlGaIn/GaN с множественными квантовыми ямами проанализированы на основе модели двумерной комбинированной плотности состояний в активной области, которая учитывает флуктуации потенциала, статистику заполнения ям носителями и особенности вывода излучения из структуры. Модель описывает положение максимума спектров и экспоненциальные спады интенсивности в коротковолновой и длинноволновой областях, а также их изменение с током. Обсуждаются проблемы ограничения модели и физический смысл определяемых параметров. Примеры аппроксимации спектров синих светодиодов на основе гетероструктур InGaN/AlGaIn/GaN показывают необходимость независимого определения температуры активной области и учета интерференции в плоской структуре. Отличия формы спектров от простой модели зависят не только от свойств квантовых ям, но и от неоднородностей распределения In в InGaIn.

PACS: 78.67.De, 78.60.Fi, 85.60.Dw

1. Введение

Спектры электролюминесценции светодиодов (СД) на основе гетероструктур из нитрида галлия и его твердых растворов изучались в последнее десятилетие весьма подробно в многочисленных экспериментальных и теоретических работах (см., например, [1]). Однако количественный анализ формы спектров светодиодов и их изменения в зависимости от тока и температуры требует более подробного рассмотрения в связи с развитием технологии создания СД и их широким применением.

Анализ спектров синих и зеленых СД на основе гетероструктур типа InGaIn/AlGaIn/GaN проводился ранее на основе сравнительно простой теоретической модели двумерной (2D) структуры с 4 параметрами, учитывающей флуктуации потенциала и статистическое распределение носителей заряда в активной области [2–4]. Реальная структура активных областей СД с p - n -гетеропереходами InGaIn/AlGaIn/GaN намного сложнее простой 2D модели. В активной области имеется не одна, а несколько (3–5) квантовых ям. Существенную роль играют неоднородности распределения In типа „квантовых островков“ в твердом растворе InGaIn [5–8]. Спонтанная и пьезоэлектрическая поляризация в множественных квантовых ямах (МКЯ) меняется как вследствие модулированного легирования [9,10], так и при инжекции электронно-дырочных пар в активную область [11]. При увеличении уровня инжекции роль разных квантовых ям изменяется, есть свидетельства в пользу того, что основную роль играет квантовая яма, ближайшая к p -области [12]. Рекомбинация в структуре неоднородна по площади и зависит от контактов,

особенно при больших токах [13–15]. Теоретический анализ распределения потенциала, электрического поля и концентраций электронов и дырок в МКЯ InGaIn/GaN, проведенный в работах [12,13] с учетом диффузии и дрейфа носителей тока при инжекции, включает много параметров и позволяет дать качественное, но не количественное описание формы спектров излучения.

Форма спектров излучения СД зависит не только от механизмов излучательной рекомбинации в активной области, но и от вывода излучения из кристалла. В плоской структуре с зеркальными поверхностями существенную роль играет интерференция света в резонаторе типа Фабри–Перо; но часть излучения выходит из кристалла, многократно отражаясь под разными углами, частично поглощается в коротковолновой части и выходит из кристалла через боковые грани. Боковое излучение сглаживает общий спектр; поглощение сдвигает его в длинноволновую сторону.

Однако простая теоретическая модель довольно хорошо описывает особенности спектров излучения СД на основе структур с p - n -гетеропереходами InGaIn/AlGaIn/GaN [2–4]. В данной работе была поставлена задача такого экспериментального исследования спектров, чтобы их теоретический анализ помог выявить пределы применимости простой модели. Следовало уточнить физический смысл параметров модели и возможности однозначного их определения из сравнения модели с экспериментально наблюдаемыми особенностями спектров. Представлялось важным дополнить анализ спектров учетом интерференции и изучить спектры как готовых СД, так и образцов, не содержащих элементов, фокусирующих боковое излучение.

[†] E-mail: yunovich@phys.msu.ru

2. Методика экспериментов

2.1. Образцы светодиодов

Исследовались СД синего свечения компании „Светлана–Оптоэлектроника“ [15]. Структуры были выращены методом металлорганической эпитаксии на подложках из сапфира. На них последовательно были выращены: слой i -GaN; слой n -GaN:Si с концентрацией электронов $n = 10^{18} \text{ см}^{-3}$; активная область структуры, содержащая 5 слоев InGaN/GaN с шириной ям InGaN $\sim 3 \text{ нм}$ и шириной барьеров GaN $\sim 10 \text{ нм}$; барьерный слой, ограничивающий инжекцию электронов в p -область, — либо нелегированный i -GaN, либо p -Al_xGa_{1-x}N:Mg; верхний инжектирующий дырки слой p -InGaN:Mg толщиной 200–300 нм. Контакты к n - и p -областям наносились планарной технологией по методике, описанной в работе [15]. На p -области создавалось металлическое зеркало; „чипы“ были смонтированы методом „flip-chip“ — p -областью к теплоотводящему корпусу (рис. 1). Свет

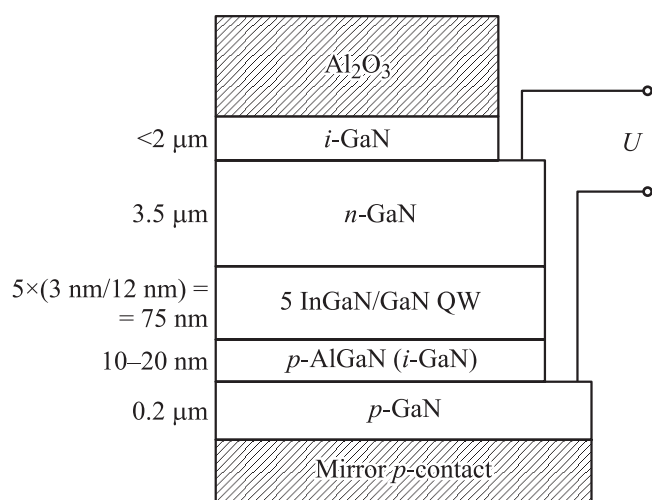


Рис. 1. Схема расположения слоев гетероструктуры InGaN/AlGaN/GaN в светодиодах.

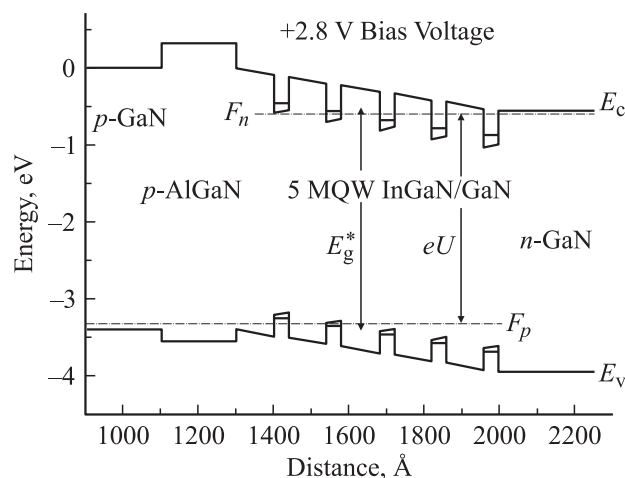


Рис. 2. Энергетическая диаграмма p - n -гетероструктуры InGaN/AlGaN/GaN при прямом смещении $V = 2.8 \text{ В}$.

выводился из кристалла через сапфировую подложку. Для исследования спектров часть СД была покрыта пластиковой куполообразной линзой, как в готовом приборе, а часть — нет.

На рис. 2 показана энергетическая диаграмма, рассчитанная аналогично [4], но с учетом влияния пьезоэлектрических полей в МКЯ. Диаграмма показана при прямом напряжении смещения. В области МКЯ разность квазиуровней Ферми постоянна и равна падению потенциала на этой области: $eU = F_n - F_p$, где F_n и F_p — квазиуровни Ферми в n -GaN и p -GaN соответственно.

2.2. Экспериментальная установка

Автоматизированная установка для измерения спектров электролюминесценции СД на базе монохроматора МДР-12 обеспечивала точность измерений и спектральное разрешение установки менее 1 \AA (0.3 – 0.4 мэВ). Измерения проводились с шагом $\Delta\lambda = 0.1$ – 1 нм с усреднением по 3–15 измерениям в точке. Цифровые приборы обеспечивали динамический диапазон установки до 5 порядков. Шумы и наводки ограничивали диапазон для единичного спектра на уровне сигнала 10^{-2} – 10^{-3} от интенсивности в максимуме; шумы исключались при теоретическом анализе. Измерения спектров проводились в интервале токов от 0.1 до 350 мА.

2.3. Зависимость спектров электролюминесценции от температуры

Для температурных измерений использовали элемент Пельтье, который охлаждал или нагревал радиатор с закрепленным в нем СД. Температура радиатора измерялась термопарой. Измерения спектров электролюминесценции в диапазоне от -11 до $+56^\circ\text{C}$ показали, что показатель коротковолнового экспоненциального спада E_1 пропорционален температуре: $E_1 = mkT$ (m — постоянная величина, близкая к единице), а при изменении тока — потребляемой электрической мощности $W = JV$ (рис. 3). Линейная зависимость $E_1(W)$ позволяла определить тепловое сопротивление СД, которое для образцов без массивного теплоотвода составляло ~ 50 – 80 К/Вт .

Это позволило при аппроксимации спектров теоретической моделью (см. разд. 3.1) фиксировать значение параметра E_1 , которое соответствовало температуре активной области. Эта температура оценивалась исходя из значений температуры корпуса СД, теплового сопротивления диода и подаваемой на него мощности $W = JV$.

2.4. Зависимость спектров электролюминесценции от угла наблюдения

Для образцов без фокусирующего пластикового купола были измерены спектры электролюминесценции при различных углах наблюдения. Частичное поглощение коротковолновой части излучения в кристалле при боковом выводе ($\sim 80^\circ$ от нормали к плоскости кристалла) сдвигает спектр в длинноволновую область

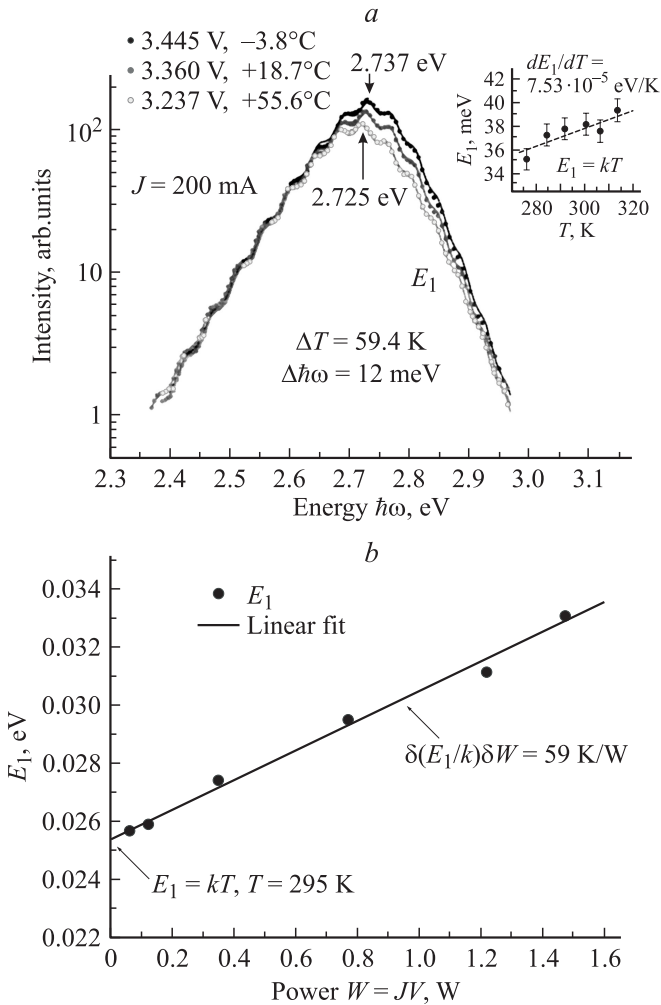


Рис. 3. *a* — зависимости спектров электролюминесценции от температуры. На вставке — изменение знаменателя в показателе экспоненциального спада E_1 с температурой, измеренной на корпусе диода. *b* — зависимость E_1 от электрической мощности, подаваемой на диод.

на 50–60 мЭВ. Кроме того, в боковом излучении не наблюдается интерференционная модуляция спектров. Поэтому сравнение спектров с теоретической моделью проводилось главным образом для образцов без фокусирующей линзы при нормальном выводе излучения.

3. Модель описания спектров люминесценции

3.1. Модель излучательной рекомбинации в двумерной структуре, учитывающая флуктуации потенциала и степени заполнения состояний

3.1.1. В работах [2–4] спектры излучения СД $I(\hbar\omega)$ на основе нитридных гетероструктур с квантовыми ямами были описаны следующей феноменологической моделью. Двумерный характер структуры был описан

функцией 2D комбинированной плотности состояний $N^{2D}(\hbar\omega, E_g^*, E_0)$, в которой влияние различных флуктуаций потенциала было учтено экспоненциальным спадом с параметром E_0 , а эффективная ширина запрещенной зоны E_g^* предполагалась зависящей от флуктуаций потенциала (E_c^* и E_v^*) и от уровней размерного квантования в квантовых ямах:

$$N^{2D}(\hbar\omega, E_g^*, E_0) = \frac{N_0^{2D}}{1 + \exp\left(-\frac{\hbar\omega - E_g^*}{E_0}\right)}. \quad (1)$$

3.1.2. Функции заполнения электронных состояний вблизи дна зоны проводимости $f_c(E_c^*, F_n, kT)$ и дырочных состояний вблизи потолка валентной зоны $1 - f_v(E_v^*, F_p, kT)$ предполагались квазиравновесными с квазиуровнями Ферми для электронов F_n и для дырок F_p [16]. Предполагалось, что оптические переходы — прямые, с сохранением энергии: $\hbar\omega = E_c - E_v$, $E_g^* = E_c^* - E_v^*$, а разность квазиуровней Ферми считалась равной падению потенциала на активной области eU :

$$\begin{aligned} f_c[1 - f_v] &= \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_c - F_n}{E_1}\right)} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_v - F_p}{E_1}\right)} \\ &= \left[1 + \exp\left(\frac{(m_{cv}^*/m_c^*)(\hbar\omega - E_g^*) - \Delta F_n}{kT}\right) \right]^{-1} \\ &\times \left[1 + \exp\left(\frac{(m_{cv}^*/m_v^*)(\hbar\omega - E_g^*) - \Delta F_p}{kT}\right) \right]^{-1}, \end{aligned} \quad (2)$$

$$eU = F_n - F_p$$

$$= (E_c^* + \Delta F_n) - (E_v^* - \Delta F_p) = E_g^* + \Delta F, \quad (3)$$

где m_c^* и m_v^* — эффективные массы электронов и дырок соответственно,

$$m_{cv}^* = \left(\frac{1}{m_c^*} + \frac{1}{m_v^*} \right)^{-1}$$

— приведенная масса.

В работе [4] было указано, что количественное описание спектров зависит и от функции интерференционной модуляции f_{if} :

$$I(\hbar\omega) = A_0^* N^{2D}(\hbar\omega, E_g^*, E_0) f_c(1 - f_v) f_{if}, \quad (4)$$

где постоянный множитель A_0^* зависит от интенсивности и нормировки спектров.

3.2. Упрощения модели и нормировка спектров

3.2.1. Рассмотренная модель в первых публикациях была разработана для описания структур с одиночными квантовыми ямами [2–4]. В модели предполагается, что комбинированная плотность состояний (1) при энергиях, больших E_g^* , стремится к постоянной величине N_0^{2D} , как для идеальных 2D структур. Это позволяет, в отличие от учета флуктуаций экспонен-

циальным „хвостом“ Урбаха [17], в 3D случаях представить функцию $N^{2D}(\hbar\omega, E_g^*, E_0)$ аналитически во всей спектральной области формулой (1) [18]. Это может оказаться не соответствующим плотности состояний в реальных структурах с МКЯ InGaN/AlGaIn/GaN, с сильными неоднородностями распределения In в InGaIn. Представлялось важным исследовать, в какой мере это упрощение достаточно для описания реальных спектров.

3.2.2. Если в структурах существенны флуктуации и нет резких краев запрещенной зоны, а края зон описываются эффективными параметрами E_c^* и E_v^* , то не корректно вводить в формуле (2) эффективные массы m_c^* , m_v^* и m_{cv}^* .

В работах [2–4] предполагалось, что вместо параметров $(m_c^*/m_{cv}^*)kT$ и $(m_v^*/m_{cv}^*)kT$ допустимо ввести феноменологический параметр $E_1 = mkT$, где $1 < m < 2$. Но с увеличением тока диод нагревается, величина kT заметно изменяется, и подбор параметра E_1 оказывается неоднозначным. Исключить это упрощение модели возможно, если в условиях малой концентрации носителей тока их распределение не вырождено. Тогда произведение $f_c(1 - f_v)$ в (2) можно записать в виде

$$f_c(1 - f_v) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{(\hbar\omega - E_g^*) - \Delta F}{kT}\right]} \equiv f_F(E_g^*, \Delta F, kT), \quad (2a)$$

где

$$\Delta F = -(E_g^* - eU) = (\Delta F_n + \Delta F_p) < 0. \quad (3a)$$

Из формул (2a), (3a) следует, что если независимо определить температуру T в активной области, то для расчета реальных спектров при малых концентрациях носителей необходимо подбирать параметры ΔF , eU и E_g^* , связанные уравнением (3a).

3.2.3. Произведение функций $N^{2D}(\hbar\omega, E_g^*, E_0)$ и $f_F(E_g^*, \Delta F, kT)$ в точке максимума спектра $\hbar\omega_{\max}$ должно иметь производную, равную нулю, откуда следует, что положение $\hbar\omega_{\max}$ (без учета интерференции) и параметры E_g^* , ΔF , E_0 , $E_1 = kT$ связаны уравнением

$$\Delta F = \hbar\omega_{\max} - E_g^* + E_1 \ln \left[\frac{E_0}{E_1} \left(1 + \exp \frac{\hbar\omega_{\max} - E_g^*}{E_0} \right) - 1 \right]. \quad (5)$$

Это уравнение позволяет для описания спектра подбирать положение максимума $\hbar\omega_{\max}$, а параметр ΔF вычислять из (5), не увеличивая число подгоночных параметров.

3.2.4. Для облегчения расчетов при анализе экспериментальных спектров оказалось удобным нормировать функции $N^{2D}(\hbar\omega, E_g^*, E_0)$ и $f_F(E_g^*, \Delta F, kT)$ к единице в точке максимума $\hbar\omega_{\max}$ и ввести множители нормировки в константу A_0 :

$$A_0 = A_0^* N^{2D} \left\{ 1 + \exp \left[-\frac{\hbar\omega_{\max} - E_g^*}{E_0} \right] \right\}^{-1} \times \left\{ 1 + \exp \left[\frac{\hbar\omega_{\max} - (E_g^* + \Delta F)}{E_1} \right] \right\}^{-1}. \quad (6)$$

3.2.5. Если амплитуда интерференционной модуляции существенна, то величина $\hbar\omega_{\max}$ и интенсивность в максимуме A_0 должны зависеть от параметров функции интерференционной модуляции f_{if} . Поэтому максимум гладкой функции $\hbar\omega_{\max}$ целесообразно искать из сравнения модельного и экспериментального спектров, введя функцию f_{if} по формуле

$$f_{if}(a, \Delta E, E_\phi) = \frac{1}{1 - a \cos \frac{2\pi(\hbar\omega - E_\phi)}{\Delta E}}, \quad (7)$$

где a — глубина модуляции, ΔE — период интерференции, E_ϕ — фаза модуляции (вблизи $\hbar\omega_{\max}$). Для учета дисперсии показателя преломления был введен еще параметр b :

$$\Delta E = \frac{\Delta E_0}{1 + b(\hbar\omega - E_\phi)}, \quad (7a)$$

где ΔE_0 — период интерференции вблизи $\hbar\omega_{\max}$. Учет интерференции привел к введению 4 параметров: a , ΔE_0 , E_ϕ и b . Сравнение модельных и экспериментальных спектров показало, что дисперсия показателя преломления (параметр b) дает малую поправку, а другие три параметра мало изменяются с изменением тока.

3.2.6. Конечная формула для описания формы спектров, таким образом, имеет вид

$$I(\hbar\omega) = A_0 N^{2D} f_F f_{if}, \quad (8)$$

где функции $N^{2D}(\hbar\omega, E_g^*, E_0)$, $f_F(E_g^*, \Delta F, kT)$, $f_{if}(a, \Delta E, E_\phi)$ и константа A_0 определены уравнениями (2a)–(7a).

Для аппроксимации экспериментальных спектров формулой (8) была разработана программа на языке C++, которая позволяет численно подбирать параметры модельной многопараметрической функции методом „покоординатного спуска“. Критерием наилучшего согласия служила минимизация суммы среднеквадратичных отклонений экспериментального спектра от теоретического:

$$\sigma = \sqrt{\sum_{i=1}^N [F(x_i) - y_i]^2}$$

(суммирование производится по всем N точкам спектрального интервала). Было использовано два различных критерия подгонки параметров: I — минимизации суммы отклонений σ при представлении экспериментальных спектров в линейном масштабе до 10^{-6} отн. ед. или 2 — минимизация σ при представлении в полулогарифмическом масштабе. В первом случае наилучшим образом подбираются параметры, сильно влияющие на положение максимума спектра и его форму вблизи максимума. Во втором — параметры, влияющие на форму спада спектральной интенсивности вдали от максимума. Рассчитывались также полуширина и интегральная интенсивность спектров.

3.2.7. Заметим, что в реальных структурах имеется 5 квантовых ям и барьеров (рис. 2), с несколько отличающимися значениями ширины зоны, так что подбираемые параметры E_g^* , E_0 , E_1 и eU имеют смысл как усредненные, эффективные значения. Усреднение происходит как по ширине ямы, так и в плоскости, параллельной слоям структуры. В формуле (8) в области коротких длин волн величина $N^{2D}(\hbar\omega) = \text{const}$, как это должно быть для 2D структур. Такая экстраполяция может быть неоправданной, если существенно влияние макронеоднородностей, возникающих за счет флуктуаций концентрации In, приводящих к сегментации квантовой ямы или возникновению квантовых точек и нитей (плотность состояний — δ -функции и $(\hbar\omega)^{-1/2}$ соответственно), а также влияние широкозонных объемных слоев (плотность состояний $\sim (\hbar\omega)^{1/2}$). При сравнении формулы (8) с экспериментом представлялось интересным выяснить, насколько оправдана модельная экстраполяция и однозначно ли определение параметров.

4. Анализ спектров электролюминесценции синих светодиодов

4.1. Общий вид спектров

4.1.1. Рис. 4 иллюстрирует уравнение (8) на примере аппроксимации спектров одного из образцов синих светодиодов. На рисунке отдельными кривыми показаны функция комбинированной плотности состояний $N^{2D}(\hbar\omega, E_g^*, E_0)$, функция заполнения $f_F(\hbar\omega, E_g^*, \Delta F, E_1)$ и функция интерференционной модуляции $f_{if}(\hbar\omega, a, \Delta E, E_\phi)$. В пределах 2–3 десятич-

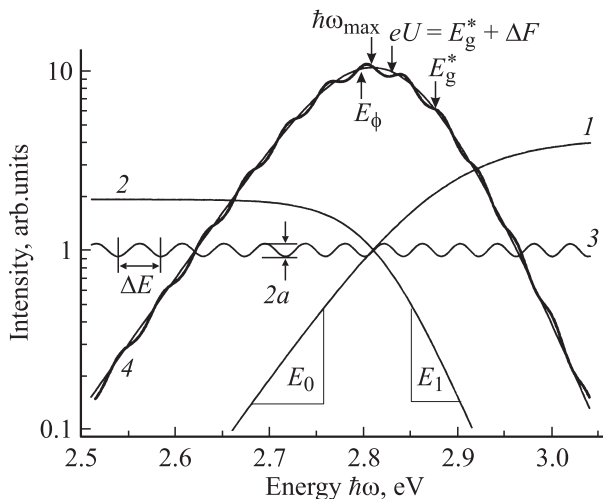


Рис. 4. Пример аппроксимации спектра электролюминесценции синего светодиода формулой (11): 1 — функция двумерной комбинированной плотности состояний $N^{2D}(\hbar\omega, E_g^*, E_0)$; 2 — функция заполнения состояний $f_F(\hbar\omega, E_g^*, \Delta F, E_1)$; 3 — функция интерференционной модуляции $f_{if}(\hbar\omega, a, \Delta E, E_\phi)$; 4 — произведение функций $N^{2D}f_F$. Жирной линией обозначен экспериментальный спектр.

ных порядков по интенсивности расчеты согласуются с опытом.

4.1.2. Видно, что максимум гладкой функции $N^{2D}f_F$ отличается от максимума экспериментального спектра вследствие влияния интерференции (функции f_{if}). Положение максимума $\hbar\omega_{\text{max}}$ ниже значения эффективной ширины запрещенной зоны E_g^* , как и должно быть при рекомбинации носителей в хвостах плотности состояний при небольших уровнях возбуждения. Значение $\hbar\omega_{\text{max}}$ близко (в пределах kT) к величине потенциала eU , равного $E_g^* + \Delta F$.

4.1.3. Знаменатель в показателе экспоненциального спада в длинноволновой области, $E_0 = 56.2 \pm 0.2$ мэВ, что заметно больше kT при комнатной температуре (26 мэВ). Это — особенность гетероструктур на основе нитридов по сравнению с гетероструктурами на основе арсенидов и фосфидов, которая объясняется большими флуктуациями потенциала за счет больших значений E_g нитридов, больших значений разрывов зон проводимости и валентной на гетерограницах, больших флуктуаций концентраций In и Al. Заметим, что аппроксимация спектров гауссовыми функциями не применима, если учитывать изменения интенсивности в большом динамическом диапазоне.

4.1.4. Наклон коротковолнового спада спектра при значениях $\hbar\omega_{\text{max}} < \hbar\omega < E_g^*$, зависит от соотношения параметров E_0 и E_1 . Если E_0 заметно больше E_1 , то в пределах $\hbar\omega_{\text{max}} < \hbar\omega < E_g^*$, величина $d(\hbar\omega)/d(\ln I)$ приблизительно определяется выражением $d(\hbar\omega)/d(\ln I) \approx 1/(1/E_1 - 1/E_0)$. При $\hbar\omega > E_g^*$ величина $d(\hbar\omega)/d(\ln I) \approx E_1$ (I — интенсивность излучения).

4.1.5. Ширина экспериментальных спектров на половине интенсивности, $\Delta(\hbar\omega)_{1/2}$, оказывается меньше, чем для модельных. Это обусловлено предположением модели о комбинированной плотности состояний с экспоненциальным хвостом (формула (1)).

4.2. Аппроксимация спектров при фиксированном значении параметра $E_1 = kT$

Если не подгонять параметр E_1 и считать, что температура T активной области задана, а величина $E_1 = kT$, как и должно быть в предположении невырожденной статистики (формула (2а)), то могут быть выявлены важные особенности спектра.

На рис. 5 показаны экспериментальные спектры одного из образцов синих СД в сравнении с модельными спектрами. Модельные спектры были получены при $E_1 = kT$ и при разных алгоритмах подбора параметров минимизацией суммы среднеквадратичных отклонений σ либо в линейном масштабе, либо в полулогарифмическом. Параметры аппроксимации в обоих случаях приведены в таблице.

Видно, что в первом случае значительно лучше описывается область спектра вблизи максимума, наклоны обоих спадов модельного спектра немного более крутые, чем наклоны в эксперименте. Сумма квадратичных

Параметры модельной аппроксимации спектров (рис. 5) при разных алгоритмах их подбора (1 и 2). Точность значений указывается количеством знаков

Алгоритм	σ , отн. ед.	σ_{\log} , отн. ед.	Θ_{theor} , отн. ед.	Θ_{exp} , отн. ед.	$\Delta(\hbar\omega)_{1/2}^{\text{theor}}$, мэВ	$\Delta(\hbar\omega)_{1/2}^{\text{exp}}$, мэВ
1	0.733	8.602	8.623	8.833	0.142	0.126
2	7.862	0.019	8.173		0.142	
	A_0 , отн. ед.	$\hbar\omega_{\text{max}}$, эВ	E_g^* , эВ	ΔF , эВ	E_0 , мэВ	E_1 , мэВ
1	54.91	2.678	2.757	-0.0629	59.2	26.3
2	49.05	2.667	2.997	-0.3248	59.2	26.3
	E_ϕ , эВ	a	ΔE_0 , эВ	b , 1/эВ	eU , эВ	
1	2.692	0.112	0.0426	0.11	2.694	
2	2.690	0.097	0.0407	0.21	2.673	

отклонений в линейном масштабе σ равна 0.733, а в полулогарифмическом масштабе $\sigma_{\log} = 8.602$. Во втором случае значительно лучше описываются области спектра вдали от максимума, наклоны обоих спадов модельного спектра практически совпадают с экспериментом. Сумма квадратичных отклонений в линейном масштабе равна 7.862, а в полулогарифмическом — 0.0186. Интеграл интенсивности излучения по спектру Θ_{theor} в первом случае отличается от интеграла по экспериментальному спектру Θ_{exp} на 2.4%, во втором — на 7.5%.

Наклон длинноволнового спада определяется параметром $E_0 = 59.2$ мэВ. В первом случае значение эффективной ширины запрещенной зоны $E_g^* = 2.757$ эВ, что выше положения максимума $\hbar\omega_{\text{max}}$ на 79 мэВ, т.е. на величину порядка E_0 . Во втором случае $E_g^* = 2.997$ эВ, т.е. существенно выше, чем положение $\hbar\omega_{\text{max}}$, и ближе к значению ширины запрещенной зоны GaN $E_g = 3.4$ эВ.

Полученные в первом случае значения E_g^* согласуются с результатами независимых опытов по определению

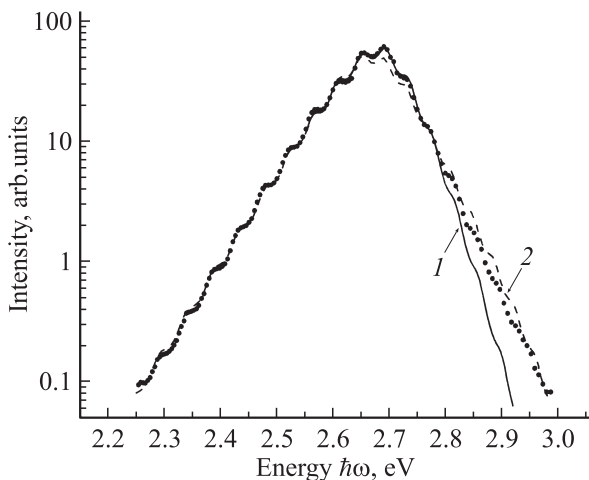


Рис. 5. Пример аппроксимации спектра электролюминесценции синего светодиода формулой (11) при фиксированном значении $E_1 = kT$ и разных алгоритмах подбора параметров: 1 — минимизация суммы квадратичных отклонений в линейном масштабе (σ), 2 — в полулогарифмическом масштабе (σ_{\log}). Точками обозначен экспериментальный спектр.

ширины запрещенной зоны в МКЯ InGaIn из опытов по исследованию спектров электроотражения [19]. Значения $eU = E_g^* + \Delta F$ в обоих случаях отличаются меньше, чем на kT , и близки к значению $\hbar\omega_{\text{max}}$.

Эти результаты можно понять следующим образом. При подборе параметров минимизацией величины σ в линейном масштабе в расчетной модели выделяются члены, связанные с рекомбинацией, которая идет в областях квантовых ям с меньшей шириной эффективной запрещенной зоны, определяемых флуктуациями потенциала. Эта часть составляет 85–95% от полного потока излучательной рекомбинации. Остальная часть полного потока излучательной рекомбинации определяется областями квантовых ям с большей шириной запрещенной зоны и частично областями барьеров между квантовыми ямами. Часть электронов с большей энергией может перетекать через барьеры и рекомбинировать там.

При подборе параметров минимизацией σ_{\log} в полулогарифмическом масштабе модель придает больший вес рекомбинации в „хвостах“ плотности состояний и в частях активной области структуры с большей шириной запрещенной зоны. Модель аппроксимирует спектры так, как будто активная область в целом имеет E_g^* , близкую к E_g GaN, а рекомбинация в МКЯ обусловлена флуктуационным потенциалом с протяженной в длинноволновую сторону комбинированной плотностью состояний.

При такой интерпретации понятно, что разность квазиуровней Ферми eU (одинаковая по всей активной области в нашем приближении) близка к положению максимума $\hbar\omega_{\text{max}}$, но разность между шириной запрещенной зоны и величиной eU существенно различается в квантовых ямах и барьерах (см. рис. 2).

Параметр E_0 , определяемый флуктуациями потенциала, должен быть больше для частей активной области, включающих барьеры, чем для основной части квантовых ям, в которых идет большая часть излучательной рекомбинации.

Величина интегральной интенсивности модельных спектров меньше интегральной интенсивности экспериментальных спектров. Это связано с тем, что при аппроксимации в линейном масштабе по интенсивности

расчетной моделью не учитывается та часть излучения, которая идет в широкозонных слоях структуры. В то же время при аппроксимации в полулогарифмическом масштабе моделью хуже описывается часть спектра вблизи максимума. За счет излучения от широкозонных частей структуры и более „пологого“ вида спектров моделью предсказывается меньшая интенсивность излучения в максимуме.

4.3. Аппроксимация спектров при изменении тока

4.3.1. На рис. 6, *a, b* показаны спектры одного из синих СД при изменении тока в пределах $J = 1–350$ мА. Напряжение на СД при этом увеличивалось от $V = 2.671$ до 3.641 В, а потребляемая мощность $W = JV$ от 2.7 мВт до 1.27 Вт. Из этих значений, в соответствии с разд. 2.3, была определена температура

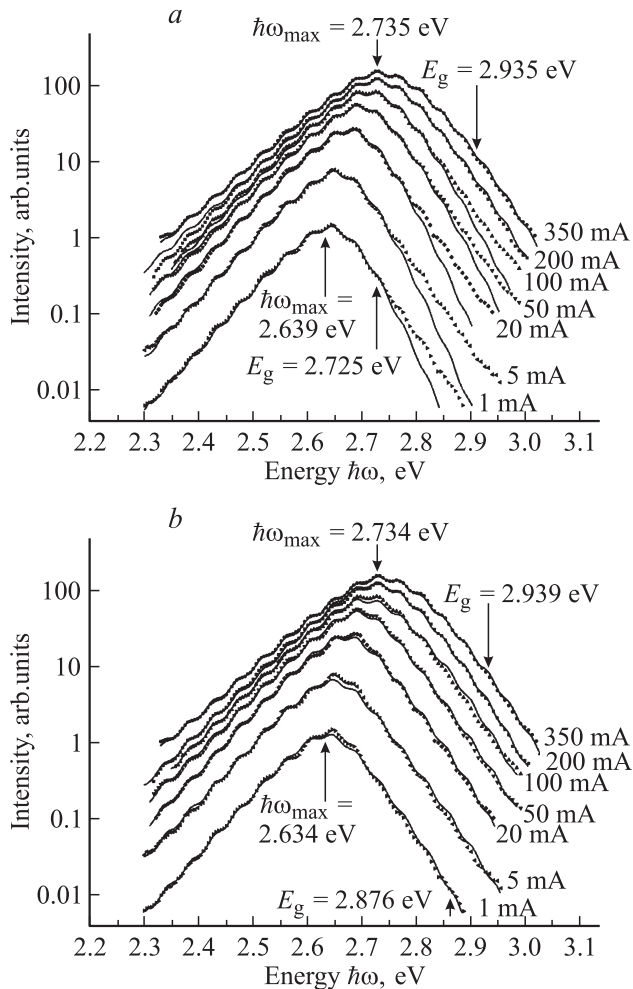


Рис. 6. Спектры электролюминесценции синего светодиода при изменении тока в пределах от 1 до 350 мА. Точки — экспериментальные данные. Модельные спектры рассчитаны при фиксированном параметре $E_1 = kT$ и разных алгоритмах подбора параметров: *a* — минимизация суммы квадратичных отклонений в линейном масштабе, *b* — в полулогарифмическом масштабе.

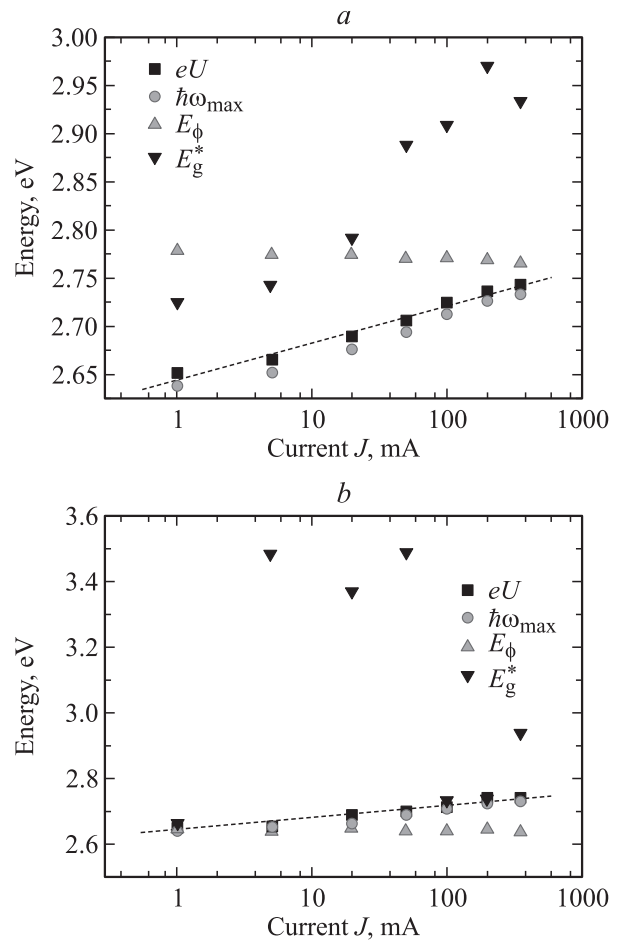


Рис. 7. Зависимости параметров спектров $\hbar\omega_{\max}$, eU , E_g^* и E_ϕ от тока при аппроксимации в линейном (*a*) и полулогарифмическом (*b*) масштабах.

активной области СД, которая увеличивалась с током от 292 до 375 К. Показаны экспериментальные и модельные спектры, рассчитанные при двух алгоритмах подбора параметров в предположении, что $E_1 = kT$.

4.3.2. Зависимости параметров $\hbar\omega_{\max}$, eU , E_g^* и E_ϕ от тока показаны на рис. 7. Наблюдается согласованное увеличение значений параметров с ростом тока (за исключением E_g^*), причем $\hbar\omega_{\max} < eU < E_g^*$ и значения eU довольно близки к значениям $\hbar\omega_{\max}$. Определение положения максимума спектра $\hbar\omega_{\max}$ зависит от критерия аппроксимации, но не больше чем на четверть периода модуляции $\Delta E_0/4$. Зависимости интегральной интенсивности излучения и тока через диод от U , представленные на рис. 8, имеют экспоненциальный характер: $\Theta, J \propto \exp(eU/kT)$.

Величина $E_g^* > eU$, как и должно быть для невырожденного случая и экспоненциального длинноволнового „хвоста“ спектра. Однако для некоторых образцов при больших токах выполняется обратное соотношение $E_g^* < eU$. В этих случаях величина коротковолнового экспериментального наклона $d(\hbar\omega)/d(\ln I)$ больше, чем в модели, и приближение невырожденной статистики

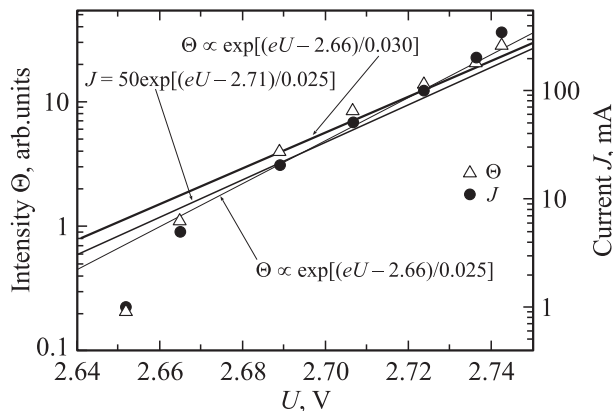


Рис. 8. Зависимости интегральной интенсивности излучения (Θ) светодиода и тока (J) от падения напряжения на активной области U . Точки — экспериментальные значения.

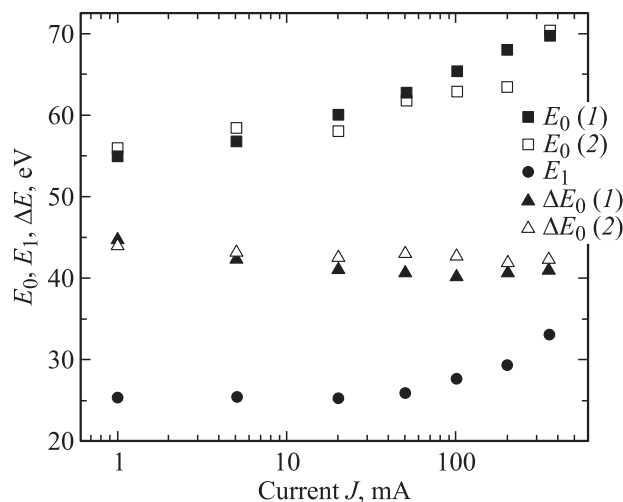


Рис. 9. Зависимости E_0 , E_1 , ΔE_0 от тока при разных критериях аппроксимации 1 и 2 (см. раздел 3.2.6).

не работает. При аппроксимации спектров в полулогарифмическом масштабе величина E_g^* , как правило, больше, чем при аппроксимации в линейном масштабе. Эта величина в некоторых случаях близка к ширине запрещенной зоны GaN $E_g = 3.4$ эВ. Это указывает на то, что часть рекомбинации идет в широкозонных частях активной области.

4.3.3. Зависимости E_0 , E_1 , ΔE_0 (теоретической и экспериментальной) от тока с разными обозначениями точек приведены на рис. 9. Параметр E_0 заметно увеличивается с ростом тока. Ранее указывалось, что E_0 для спектров структур типа InGaN/AlGaIn/GaN имеет значения 50–60 мэВ, но о зависимости E_0 от уровня возбуждения сообщений не было. В некоторых случаях величина E_0 проходит через минимум в области токов вблизи 20 мА. Значение параметра E_1 задавалось равным энергии носителей в активной области kT и не варьировалось в процессе подгонки.

Ширина линии излучения на половине интенсивности определяется значениями E_0 и E_1 . В подавляющем боль-

шинстве случаев экспериментальная ширина меньше теоретической, вне зависимости от критерия подгонки, что связано с возможным немонотонным видом функции плотности состояний.

4.4. Параметры интерференционной модуляции спектров

4.4.1. Период модуляции ΔE_0 слабо зависит от способа подгонки и от тока. Слабая зависимость ΔE_0 от тока обусловлена сравнительно малым изменением показателя преломления с ростом тока и нагревом структуры. Величина периода интерференции в схеме резонатора Фабри–Перо определяется величиной показателя преломления n и толщиной кристалла. Так, при нормальной дисперсии $dn/d(\hbar\omega) > 0$ (здесь n — показатель преломления)

$$\Delta E_0 = \frac{hc}{2Dn \left(1 + \frac{\hbar\omega}{n} \frac{dn}{d(\hbar\omega)} \right)},$$

где D — толщина области, в которой идет интерференция. Малое влияние параметра b на остальные параметры свидетельствует о слабой дисперсии показателя преломления в узкой спектральной области, соответствующей ширине линии излучения.

4.4.2. Сдвиг фазы E_ϕ практически не зависит от тока и находится вблизи $\hbar\omega_{\max}$. При существенном сдвиге максимума излучения с током ($\Delta(\hbar\omega_{\max}) > \Delta E_0$) возможно скачкообразное изменение E_ϕ на величину периода интерференции. Для исключения этого целесообразно при подгонке варьировать E_ϕ вблизи одного и того же значения в пределах одной четверти периода для всей системы спектров СД.

5. Заключение

Модель аппроксимации спектров люминесценции светодиодов на основе гетероструктур InGaN/AlGaIn/GaN, которая учитывает двумерную комбинированную плотность состояний в активной области с флуктуациями потенциала, невырожденную статистику заполнения носителями и особенности вывода излучения из структуры, применима к сложным гетероструктурам с множественными квантовыми ямами.

Возможно однозначное количественное описание спектров светодиодов параметрами модели: положением $\hbar\omega_{\max}$ и относительной интенсивностью A_0 в максимуме спектра, падением потенциала eU в активной области, знаменателем в показателе длинноволнового спада спектра E_0 , параметрами интерференционной модуляции.

Однозначное определение параметров возможно при предположении, что параметр коротковолнового спада спектра $E_1 = kT$ соответствует температуре активной области структуры T , которая оценивалась из значений температуры корпуса СД в радиаторе, теплового сопротивления диода и подаваемой на него мощности.

Параметр эффективной ширины запрещенной зоны E_g^* определяется неоднозначно. Если критерием аппроксимации выбрать минимизацию суммы квадратичных отклонений модельного и экспериментального спектров в линейном масштабе, то величина E_g^* близка к эффективной ширине запрещенной зоны в квантовых ямах InGaN, определенной из независимых опытов по спектроскопии электроотражения. Если критерий минимизации суммы квадратичных отклонений используется для спектров в полулогарифмическом масштабе, то величина E_g^* оказывается завышенной и может достигать значений E_g в барьерах GaN. Это можно интерпретировать как свидетельство того, что часть потока излучательной рекомбинации (порядка 5–10%) идет в широкозонных областях структуры, вне МКЯ.

Параметр E_0 , характеризующий величину флуктуаций потенциала, увеличивается с увеличением тока на 5–10 мэВ, что частично обусловлено увеличением роли широкозонных частей структуры в рекомбинации.

Обработка спектров по модели выявляет роль интерференции вплоть до значений глубины модуляции $< 1\%$. Положение максимума спектра зависит от интерференции в пределах половины ее периода, порядка 20 мэВ. Период модуляции практически не меняется с увеличением тока, его значение позволяет определить толщину кристалла со структурой. Дисперсия показателя преломления в пределах спектральной полосы излучения мало влияет на форму спектра.

Авторы выражают благодарность сотрудникам ЗАО „Светлана—Оптоэлектроника“ Е.Д. Васильевой, Б.С. Явичу, Ф.М. Снегову, А.А. Богданову, Д.А. Николаеву и А.В. Феопентову за предоставление образцов и обсуждение результатов, а также С.С. Широкову и А.В. Чуюсу за помощь в экспериментах.

Работа поддержана грантом РФФИ № 07-02-00866-а.

Список литературы

- [1] E.F. Schubert. *Light Emitting Diodes* (Cambridge University Press, 2006). www.LightEmittingDiodes.org
- [2] В.Е. Кудряшов, А.Н. Туркин, А.Э. Юнович, А.Н. Ковалев, Ф.И. Маняхин. ФТП, **33** (4), 445 (1999).
- [3] К.Г. Золина, В.Е. Кудряшов, А.Н. Туркин, А.Э. Юнович. ФТП, **31** (9), 1055 (1997).
- [4] А.Е. Yunovich, V.E. Kudryashov. Phys. Status Solidi B, **228** (1), 141 (2001).
- [5] И.Л. Крестников, А.В. Сахаров, В.В. Лундин, Ю.Г. Мухомин, А.П. Каргашова, А.С. Усиков, А.Ф. Цацульников, Н.Н. Леденцов, Ж.И. Алферов, И.П. Сошников, E. Hahn, V. Neubauer, A. Rosenauer, D. Litvinov, D. Gerthsen, A.C. Plaut, F. Hoffmann, D. Bimberg. ФТП, **34** (4), 496 (2000).
- [6] Д.С. Сизов, В.С. Сизов, Е.Е. Заварин, В.В. Лундин, А.В. Фомин, А.Ф. Цацульников, Н.Н. Леденцов. ФТП, **39** (4), 492 (2005).
- [7] П.С. Вергелес, Е.Б. Якимов, Н.М. Шмидт. Тез. докл. 5-й Всеросс. конф. „Нитриды галлия, индия и алюминия: структуры и приборы“ (М., 2007) с. 113.
- [8] А.В. Андрианов, В.Ю. Некрасов, Н.М. Шмидт, Е.Е. Заварин, А.С. Усиков, Н.Н. Зиновьев, Н.М. Ткачук. ФТП, **36** (6), 679 (2002).
- [9] N. Gardner, C. Kocot, W. Goetz, M. Huerschen, C. Flory, D. Bour, T. Takeuchi, S. Stockman, M. Misra, Yu.-C. Shen, M. Krames, R.S. Kern. 4th Int. Conf. on Nitride Semicond. (Denver, July, 2001). Book of Abstract, p. 38, PM B6.1.
- [10] С.С. Мамакин, А.Э. Юнович, А.Б. Ваттана, Ф.И. Маняхин. ФТП, **37** (9), 1131 (2003).
- [11] A. Hangleiter, J.S. Im, H. Kollmer, S. Heppel, J. Off, F. Scholz. MRS Internet J. Nitride Semicond. Res., **3**, 15 (1998). <http://nsr.mij.mrs.org/3/15/>
- [12] К.А. Bulashevich, V.F. Mymrin, S.Yu. Karpov, I.A. Zhmakin. J. Comput. Phys., **213** (1), 214 (2006).
- [13] К.А. Bulashevich, I.Yu. Evstratov, V.F. Mymrin, S.Yu. Karpov. Phys. Status Solidi C, **4** (1), 45 (2007).
- [14] X. Guo, E.F. Schubert. Appl. Phys. Lett., **78**, 3337 (2001).
- [15] Д.А. Закгейм, И.П. Смирнова, И.В. Рожанский, С.А. Гуревич, М.М. Кулагина, Е.М. Аракчеева, Г.А. Онушкин, А.Л. Закгейм, Е.Д. Васильева, Г.В. Иткинсон. ФТП, **39** (7), 885 (2005).
- [16] С.Г. Калашников, В.Л. Бонч-Бруевич. *Физика полупроводников* (М., Наука, 1979).
- [17] F. Urbach. Phys. Rev., **92**, 1324 (1953).
- [18] R. Chingolani, W. Stolz, K. Ploog. Phys. Rev. B, **40**, 2950 (1989).
- [19] Л.П. Авакянц, М.Л. Бадгутдинов, П.Ю. Боков, А.В. Червяков, С.С. Широков, А.Э. Юнович, А.А. Богданов, Е.Д. Васильева, Д.А. Николаев, А.В. Феопентов. ФТП, **41** (9), 1078 (2007).

Редактор Т.А. Полянская

Luminescence spectra of InGaN/AlGaIn/GaN heterostructures with multiple quantum wells: model of two dimensional joint density of states

M.L. Badgutdinov, A.E. Yunovich

Lomonosov Moscow State University,
Department of Physics,
119992 Moscow, Russia

Abstract The luminescence spectra of light-emitting diodes based on InGaN/AlGaIn/GaN heterostructures with multiple quantum wells are analyzed in the framework of a model of two dimensional joint density of states. In the model, potential fluctuations in the active layer, carrier statistics in the wells and the peculiarities of light output from the structure was taken into consideration. The model describes the position of the spectral maximum and exponential decays of the intensity in the short-wave and long-wave region. Model limitations and the physical meaning of the accepted parameters are discussed. Examples of approximations of the experimental spectra for the blue light-emitting diodes show the necessity to determine independently the temperature of the active layer and to take into consideration the interference in the plane structure. The deviations in the spectral shapes from the model are shown to depend not only on the properties of the quantum wells, but also on inhomogeneous In distribution in InGaIn.