

國 立 交 通 大 學

光 電 工 程 研 究 所
碩 士 論 文

InAlGa_N 在藍紫光半導體雷射和紫外光發光
二極體的模擬研究

Numerical study on quaternary InAlGa_N alloy in
blue-violet LDs and ultraviolet LEDs

研 究 生：羅傳煜

指導教授：郭浩中 博士

中華民國 九十四 年 六 月

InAlGaN 在藍紫光半導體雷射和紫外光發 光二極體的模擬研究

Numerical study on quaternary InAlGaN alloy in
blue-violet LDs and ultraviolet LEDs

研究生:羅傳煜

Student : Chuan-Yu Luo

指導教授:郭浩中 博士

Advisor : Dr. H. C. Kuo



A Thesis

Submitted to Department of Computer and Information Science
College of Electrical Engineering and Computer Science

National Chiao Tung University

in partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of

Master

in

Computer and Information Science

June 2005

Hsinchu, Taiwan, Republic of China

中華民國 九十四 年 六 月

國立交通大學

論文口試委員會審定書

本校光電工程研究所碩士班羅傳煜君

所提論文：InAlGaN 在藍紫光半導體雷射和紫外光發光二極體的模擬研究

合於碩士資格標準、業經本委員會評審認可。

口試委員：王興宗
王興宗 教授

張立
張立 教授

林佳鋒
林佳鋒 教授

張振雄
張振雄 教授

指導教授：郭浩中

所 長：賴明杰 教授

系主任：馮厚靈 教授

中華民國 94 年 6 月 21 日

摘要

在本論文中嘗試在半導體雷射結構 $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}/\text{In}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{N}$ ，發光波長落在 405nm，使用四元化合物 InAlGaN ，取代一般的三元化合物 AlGaN 當作電子阻擋層(blocking layer)，並且讓四元化合物 InAlGaN 中 Al:In 比例為 5:1，使其對 GaN 晶格匹配。模擬的結果發現，以四元化合物 InAlGaN 當作電子阻擋層，可以比一般使用三元化合物 AlGaN 當作阻擋層，得到更低的臨界電流值。

我們建議使用四元化合物 InAlGaN 當作電子阻擋層，鋁的含量在 20%-35% 時，可以將特性溫度(characteristic temperature, T_0) 維持在 134K-140K，雖然略低於使用三元化合物的特性溫度(147K)，但是整體的輸出表現優於使用三元化合物，顯示出使用 InAlGaN 材料當作電子阻擋層的好處。在本論文的結構下，模擬得到最好的輸出特性為使用 $\text{In}_{0.05}\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ 作為電子阻擋層。

另外我們亦嘗試建立使用 InAlGaN 作為 LED 主動層發光的架構，發光的波長在 368nm 左右，目前模擬的結果和實際元件發光的特性相符，對於不同結構設計所影響的輸出特性，例如變化不同的量子井數目，和電子阻擋層結構影響的分析，也做了一些比較和討論。

Abstract

The $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}/\text{In}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{N}$ LD structures using quaternary InAlGaN with variant Al and In compositions as electronic blocking layers are numerically investigated. Varying the aluminum (Al) composition in InAlGaN electronic blocking layer with a fixed indium (In) value (Al:In=5:1) indicates that lower threshold current and higher characteristic temperature (T_0) value can be obtained when the Al compositions in InAlGaN are 20%-35%. The results indicate that using quaternary InAlGaN provides lower threshold current but lower T_0 value than conventional $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ electronic blocking layer.

We also construct 368nm LED structure using quaternary InAlGaN as active region by simulation. The simulation results fit experiment characteristics very well. Base on agreement of experiment characteristics to simulation results, we also numerically investigate by using different number of quantum wells and different electronic blocking layer structures to discuss output characteristic changes. The results indicate that although more quantum wells and electronic blocking layer with enough Al composition can suppress leakage current from high temperature. But output power loss is still large as temperature increasing.

致 謝

在交通大學光電工程研究所半導體雷射技術實驗室的二年研究所生涯中，首先感謝指導教授郭浩中和王興宗兩位老師指導，使我瞭解作研究的態度以及許多實驗技巧，終身受用。實驗室裡的學長姐盧廷昌、張亞銓、蔡睿彥、賴芳儀、薛道鴻、姚忻宏、張鴻儒等學長姐，提供在研究方面的意見，獲益無窮；特別是感謝直屬帶領的張詒安學長，在課業上、論文上給予的幫助以及指導。實驗室同學裕鈞、永昌、國峰、敏瑛、蕙婷、瑞溢以及文燈彼此互通有無，互相幫助、鼓勵，在研究上的切磋討論都是很好的回憶。感謝這麼多人讓我的研究得以完成。

最後，我要感謝親愛的父母對我的栽培與鼓勵，使我能無後顧之憂的專心作研究，在此與我親愛的家人一同分享畢業的喜悅。雖常不能夠常常回去，但是能夠也體會到家人的關心和愛，感謝家人們背後默默的支持，有太多人要感謝，因此我感謝上帝感謝 神吧。

即使事情小，不做的話，過了千年還是留著沒做；像泰山一樣的大事，做了，便解決了。

目 錄

中文摘要.....	i
英文摘要.....	ii
誌謝.....	iii
目 錄.....	iv
圖表目錄.....	vi
第一章 簡介.....	1-1
1.1 氮化物系列材料簡介.....	1-1
1.2 四元化合物氮化鋁銦鎵的特性.....	1-3
1.2.1 光特性方面.....	1-3
1.2.2 材料特性方面.....	1-6
1.3 AlInGa _N 在元件方面的應用.....	1-8
參考文獻.....	1-14
第二章 物理模型與理論計算.....	2-1
2.1 簡介.....	2-1
2.2 軟體的模型.....	2-2
2.2.1 漂流-擴散/流體動力模型.....	2-3
2.2.2 增益模型.....	2-4
2.2.3 自恰載子密度模型.....	2-6

2.2.4 熱模型.....	2-8
2.3 結 論.....	2-10
參考文獻.....	2-12
第三章 數值模擬與分析.....	3-1
3.1 簡介.....	3-1
3.2 AlInGaN as electron blocking layer for 405nm LD.....	3-2
3.2.1 研究動機.....	3-2
3.2.2 元件結構.....	3-5
3.2.3 基本材料係數.....	3-8
3.2.4 能隙的計算.....	3-10
3.2.5 極化電荷的計算.....	3-11
3.2.6 模擬與結果分析.....	3-17
3.2.6 結論.....	3-26
3.3 365nm LED structure using AlInGaN alloys.....	3-27
3.3.1 元件結構.....	3-27
3.3.2 模擬與結果分析.....	3-29
3.3.2.1 模擬變溫量測輸出功率.....	3-31
3.3.2.2 改變量子井數目的分析.....	3-32
3.3.2.3 改變阻擋層的分析.....	3-34

3.3.3 結論.....	3-38
參考文獻.....	3-39
第四章 總結與未來展望.....	4-1
Appendix A. Basic software user guides.....	I
Appendix B. code for AlInGaN as electron blocking layer for 405nm LD	VIII
Appendix C. code for 365nm LED structure using AlInGaN alloys	XIV



圖 目 錄

圖 1.2-1	Room-temperature PL spectrum comparison of $\text{Al}_{0.15}\text{In}_{0.05}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 、 $\text{GaN}/\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 以及 $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$	1-4
圖 1.2-2	(a) Emission spectra and (b) EL intensity of the UV LEDs with InAlGaN , AlGaN and GaN active regions.....	1-5
圖 1.2.2-1	(a) Lattice mismatch in $\text{AlInGaN}/\text{GaN}$ with 9% of Al (open circles) and 17% of Al (solid dots) vs In molar fraction (b) energy band-offset in $\text{AlInGaN}/\text{GaN}$ with different In content.....	1-7
圖 1.3-1	340nm LED 元件結構及 PL 和 EL 的光譜圖.....	1-8
圖 1.3-2	量子井數目對輸出功率作圖.....	1-8
圖 1.3-3	280nm LED 結構圖.....	1-9
圖 1.3-4	不同電流下的 EL 光譜圖和 PL 光譜圖.....	1-9
圖 1.3-5	結構圖.....	1-10
圖 1.3-6	(a)以 pulse current 量測不同 In 含量之光譜圖 (b)不同輸出波長的臨界電流密度.....	1-11
圖 1.3-7	變溫 L-I 特性曲線，波長在 376nm.....	1-11
圖 1.3-8	365nm LD 操作在 25°C 的 L-I 和 V-I 特性曲線.....	1-12
圖 1.3-9	365nm LD 25°C 輸出功率在 2mW 的光譜圖.....	1-13
圖 2.2.3-1	(a)Without polarization (b)With polarization 對於能帶的影響....	2-6
圖 2.3-1	各個方程式間彼此互相的關連.....	2-10
圖 2.3-2	Flow diagram of how the simulator performs a typical simulation.	2-11
圖 3.2.1-1	一般半導體雷射結構.....	3-2
圖 3.2.1-2	多了一層 InGaN 的半導體雷射結構.....	3-3

圖 3.2.1-3	interlayer 厚度對(a)臨界電流(b)slope efficiency.....	3-4
圖 3.2.2	半導體雷射結構立體圖.....	3-5
圖 3.2.5-1	Wurtzite 結構.....	3-12
圖 3.2.5-2	固定 Al 含量 12%，變化 In 含量(a) M. Asif Khan 量測的結果 (b)依照先前計算方式所得的數據.....	3-16
圖 3.2.6-1	兩種材料當作電子阻擋層的特性比較.....	3-17
圖 3.2.6-2	(a) $\text{In}_{0.04}\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.76}\text{N}$ (b) $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 光場分佈和結構折射率的比較 圖.....	3-18
圖 3.2.6-3	常溫下使用四元和三元材料當作電子阻擋層，L-I特性曲線圖	3-19
圖 3.2.6-4	四元材料固定鋁鎵比5：1和三元材料，溫度對臨界電流值特性 比較.....	3-21
圖 3.2.6-5	四元材料固定鋁鎵比5：1和三元材料，溫度對洩漏電流百分比 的比較圖.....	3-22
圖 3.2.6-6	(a)以能隙較高的 $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 當作電子阻擋層(b)以能隙較低的 $\text{Al}_{0.1}\text{In}_{0.02}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 當作電子阻擋層.....	3-23
圖 3.2.6-7	固定Al的含量，變化In的成分所做的L-I特性曲線圖.....	3-24
圖 3.2.6-8	$\text{In}_x\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75-x}\text{N}$ 溫度對洩漏電流.....	3-25
圖 3.3.2-1	(a)量測不同電流下，發光波長對強度光譜圖.....	3-29
圖 3.3.2-1	(b)模擬不同電流下，發光波長對強度光譜圖.....	3-30
圖 3.3.2-2	量測值與模擬數據，波長分佈比較圖.....	3-30

圖 3.3.2-3 不同溫度下的 L-I 曲線圖(a)實際量測結果(b)使用 APSYS 軟體模擬結.....	3-21
圖 3.3.2-4 在 300K 時不同量子井數的 L-I 曲線圖.....	3-30
圖 3.3.2-5 在 300K 時量子井數量與洩漏電流百分率分佈圖.....	3-33
圖 3.3.2-6 不同溫度下，量子井數目與洩漏電流趨勢圖.....	3-33
圖 3.3.2-7 改變阻擋層的厚度所得到的 L-I 特性曲線.....	3-34
圖 3.3.2-8 (a)300K(b)380K 改變阻擋層 Al 含量所得到的 L-I 特性曲線	3-35
圖 3.3.2-9 (a)300K (b)380K 下不同 Al 含量之下的洩漏電流百分率.....	3-36
圖 3.3.2-10 (a)在 120 mA (b)在 150 mA 隨著溫度上升，輸出功率也隨之下降.....	3-35



表 目 錄

表 3.2.3	Band structure parameters for wurtzite nitride binaries.....	3-9
表 3.2.4	bowing parameters for GaInN, AlGaIn, and AlInN.....	3-11
表 3.2.5-1	二元材料自發性極化參數.....	3-13
表 3.2.6-1	常溫300K下使用不同材料得到的光侷限係數.....	3-20
表 3.2.6-2	固定Al的含量，變化In成分的strain、光侷限因素和材料能隙表	3-26



第一章 簡 介

1.1 氮化物系列材料簡介

半導體發光元件包含發光二極體 (Light Emitting Diodes, LEDs) 與雷射二極體(Laser Diodes, LDs)，由於具有體積小、重量輕、高效率、高反應速度，以及堅固耐用等多項優點，目前已開發成照明產品、光通訊及光儲存等用途。

以 LED 來說，多數是應用在照明的市場，包括取代目前傳統光源或是應用在顯示器的背光源，也有比較低階的光通訊系統是用 LED 作為光訊號的來源。而雷射二極體(LD)依照波長的不同，各有不同的用途。光纖通訊以波長 1310 及 1550 nm 為主;而光儲存系統以第一代影碟來說，其雷射讀取頭的波長為 780 nm，第二代數位影音光碟系統(DVD)為 650 nm。目前新一代 DVD 讀取頭的波長為 405 nm，是利用氮化系材料的藍紫外雷射讀取頭，波長越短，儲存的容量相對越大，光碟記錄容量可進一步擴充至 50 GB。

眾多半導體發光元件材料中，以寬能隙氮化物為主的材料研究，近年來受到相當大的重視，原因是這些材料組合成化合物之後，光源的波長落在可見光(400-680 nm)的範圍，並且是直接能隙(direct band gap)，光電轉換效率非常高，能有效地將電能轉化成光能。

所謂的寬能隙氮化物材料(Nitride-based materials)包含氮化鋁

(AlN)、氮化鎵(GaN)、氮化銦(InN)二元的三五族(III-V)化合物半導體，或是由這些材料所組成的三元或四元化合物。例如把氮化鋁(AlN)和氮化鎵(GaN)利用合成的方式，成為三元的氮化鋁鎵($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$)，或是將三種上述所列的材料合成為四元的材料--氮化鋁銦鎵($\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$)。

由於四元化合物 (quaternary alloy) 屬於新穎的材料，可控制的變因較多，論文中將會討論四元材料的物理特性、目前的相關研究，以及模擬作為元件時，物理特性討論。



1.2 四元化合物氮化鋁銦鎵的特性

1.2.1 光特性方面

UV光源的LD和LED，除了可以使用在高容量的光儲存和取代未來光源的應用之外，同時也可以用在生化、醫學方面的螢光檢測上，一般使用的材料是AlGaIn和AlInGaIn這兩種，屬於氮化系的III-V族材料，但是由於AlGaIn結晶品質不佳，造成對元件特性不良的影響，在室溫時無法獲得有效的發光效率，目前一些研究顯示，AlGaIn發光效率比使用InGaIn來的差 [1]。所以越來越多的研究機構，對此一新的材料—氮化鋁銦鎵(AlInGaIn)的特性做討論，原因是四元的材料能夠讓元件的波長接近紫外波段，同時能夠得到較好的結晶品質，並且四元的材料因為在波長及晶格常數(lattice constant)的選擇上有很大的調整空間，所以AlInGaIn受到很大的矚目。

在2000年M. Asif Khan等人[2-3]，分別對三組量子井結構所做的研究當中，改變不同quantum barrier材料，分別是 $\text{Al}_{0.15}\text{In}_{0.05}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 、 $\text{GaN}/\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 以及 $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ ，同樣的quantum well都是 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ ，但不同的quantum barrier，以光致發光(Photoluminescence, PL)的方式，對其特性研究，也對於發光的機制作了討論。

發現對於 GaN/In_{0.2}Ga_{0.8}N 來說發光機制是基於 localized state emission，而 Al_{0.15}In_{0.05}Ga_{0.8}N/ In_{0.2}Ga_{0.8}N 的發光機制是基於 quantum well emission 所造成的。由圖 1.2-1 可以觀察到，四元材料當作 quantum barrier 所得到的 PL 強度是最高的。

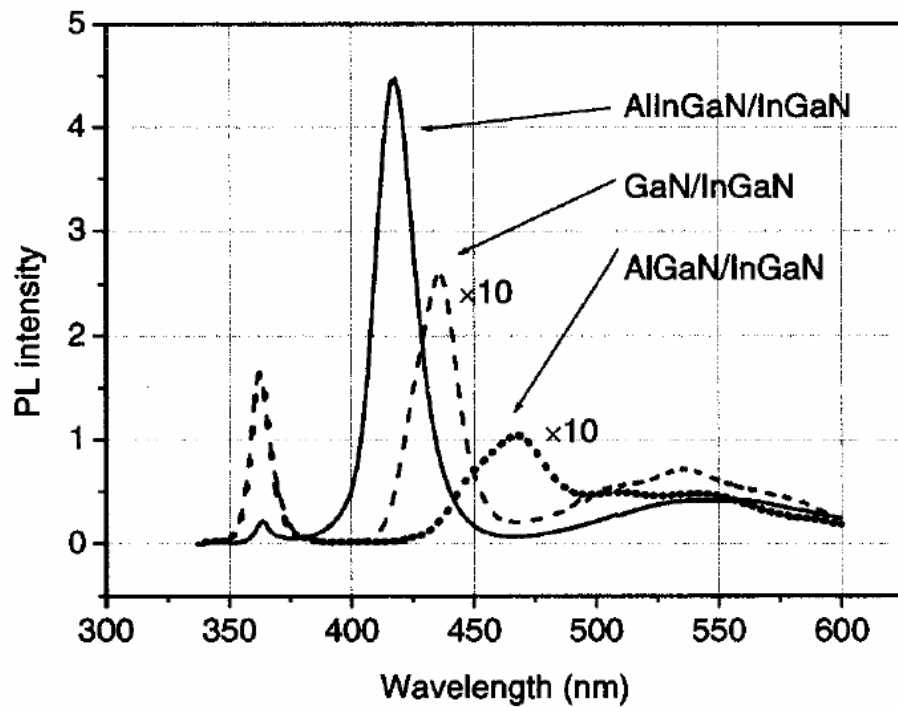


圖 1.2-1 Room-temperature PL spectrum comparison of Al_{0.15}In_{0.05}Ga_{0.8}N/ In_{0.2}Ga_{0.8}N、GaN/In_{0.2}Ga_{0.8}N 以及 Al_{0.15}Ga_{0.85}N/In_{0.2}Ga_{0.8}N

而在 2001 年 Hirayama 等人[4]，對於三種材料的電致發光 (Electroluminescence, EL) 特性作了比較，分別是 GaN、AlGaN 和 AlInGaN，圖 1.2-2 顯示他們的研究結果，可以觀察到使用 AlInGaN 當作發光層的優異表現，這對於尋找 UV 光源來說，的確是一大好處。

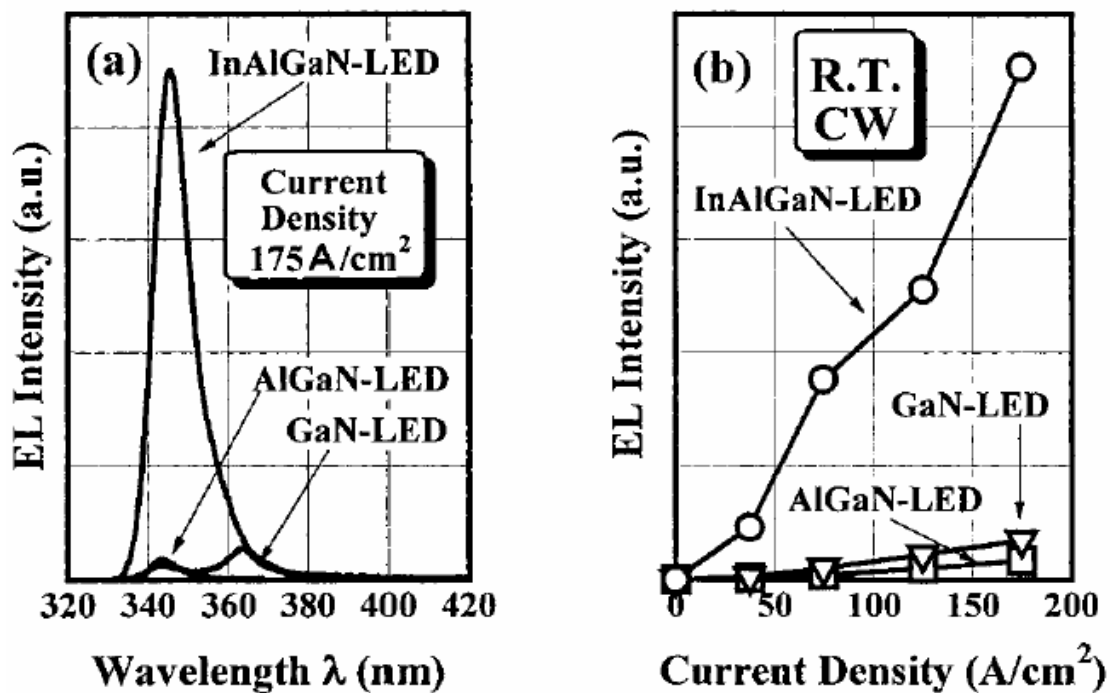


圖 1.2-2 (a) Emission spectra and (b) EL intensity of the UV

LEDs with InAlGaN, AlGaN and GaN active regions

但到目前為止，也有許多研究結果如：H. Yang 和 Y. F. Chen[5-6] 等人對於AlInGaN發光機制提出不同的看法。顯示不同的磊晶方式所得到的AlInGaN材料，其發光機制會因此而不同，但是不論研究所得到的發光機制如何，可以確定的一點是，使用AlInGaN作為磊晶的材料，的確會帶來一些好處，像是表面會比較平整，以及磊晶的品質相對的提升等等，對於發光的效率都會有所影響。

1.2.2 材料特性方面

由於AlInGaN材料特殊，是由三種二元化合物所組成的，因此在能隙和晶格常數的調整上，就可以藉由Al或是In的含量來做變化，非常具有彈性。

Material	a-lattice constant(a)	Eg(300 K)	Refractive index(400nm)
AlN	3.112 Å	6.1ev	2.03
InN	3.544 Å	0.77ev	2.9-3
GaN	3.189 Å	3.4ev	2.5

由Vegard's law可知，對於一個四元的材料 $\text{In}_y\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ 來說，晶格常數可以用線性的相加求得：

$$\text{Lattice constant} = 3.112 * x + 3.544 * y + 3.1892 * (1 - x - y) \quad (1-1)$$

現在我們假設，x就是Al的含量為0.1，y就是In的含量為0.02，帶入式(1-1)，我們可以得到在此一含量下， $\text{In}_{0.02}\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.88}\text{N}$ 的晶格常數為3.188576，這與GaN的晶格常數非常接近。以此根據Vegard's law的計算我們可以得到，當Al與In的比例為5：1時AlInGaN和GaN的晶格匹配(lattice match)。

在2000年也是由M. Asif Khan等人發表一連串關於四元化合物 AlInGaN 的文章[7-9]。藉由調整In的含量，來控制strain的大小，產生對二維電子氣(two-dimensional electron gas, 2DEG)的影響。而二維電子氣的大小與元件的遷移率(mobility)有關，同時也證實當Al和In的含量在5：1的時候，AlInGaN和GaN晶格常數匹配，能夠減少接面的應力(strain)，得到一個接近沒有應力的異質界面(heterointerface)。

圖1.2.2-1(a)顯示固定Al的含量在9%變動In的含量時，晶格常數(lattice constant)的差異 Δc 越來越小，到In的含量接近2%時，達到晶格匹配(lattice match)的含量。

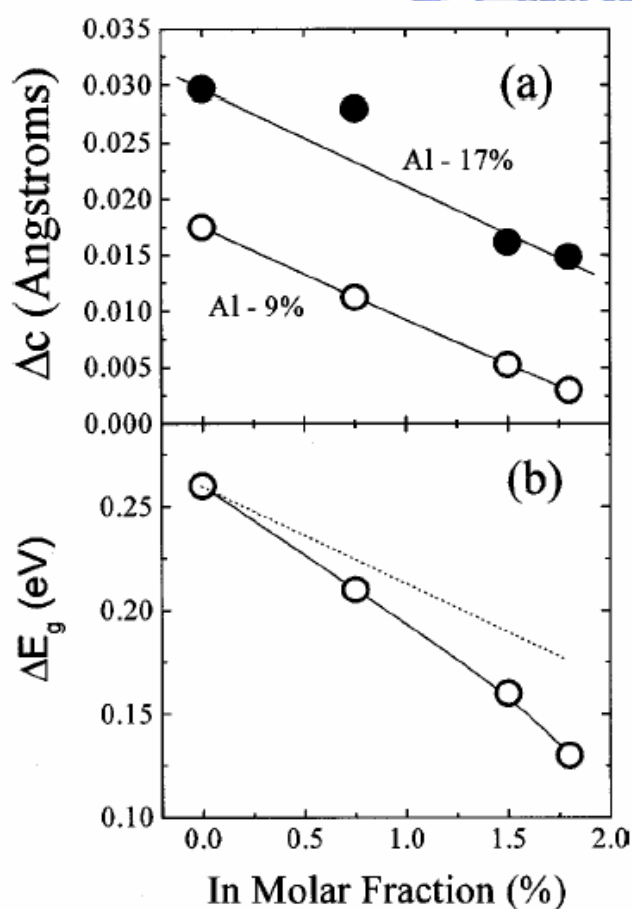


圖 1.2.2-1

- (a) Lattice mismatch in AlInGaN/GaN with 9% of Al (open circles) and 17% of Al (solid dots) vs In molar fraction;
- (b) energy band-offset in AlInGaN/GaN with different In content.[8]

1.3 AlInGaN在元件方面的應用

2001 年 M. Asif Khan 等人發表使用 AlInGaN 當作主動層的 LED[10]，基板為 SiC，並且使用 pulsed atomic layer epitaxy(PALE) 來成長[11]，波長在 340nm，圖 1.3-1 為元件結構及 PL 和 EL 的光譜圖，在量子井 10 個的時候得到最佳化的結果，圖 1-3.2。

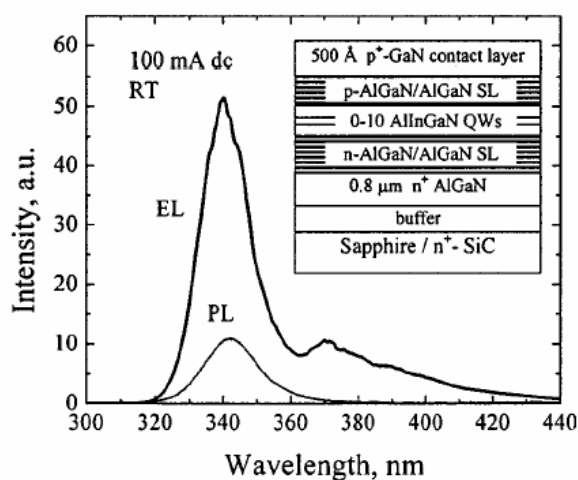


圖 1.3-1 340nm LED 元件結構及 PL 和 EL 的光譜圖
M. Asif Khan *et al.*

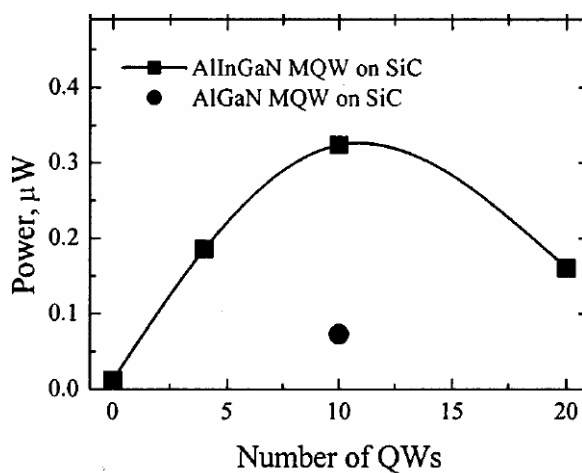


圖 1.3-2 量子井數目對輸出功率作圖 M. Asif Khan *et al.*

2002年A. Yasan等人發表波長在280nm的UV LED[12]，結構如圖1.3-3所示，是用五個 $\text{Al}_{0.36}\text{InGaN}/\text{Al}_{0.32}\text{InGaN}$ 的active region，上面和下面是各25對，每對厚 40\AA 的p-AlGaN/AlGaN SL和n-AlInGaN/AlInGaN SL所構成。圖1.3-4為不同的電流下EL的光譜圖以及PL的光譜圖。

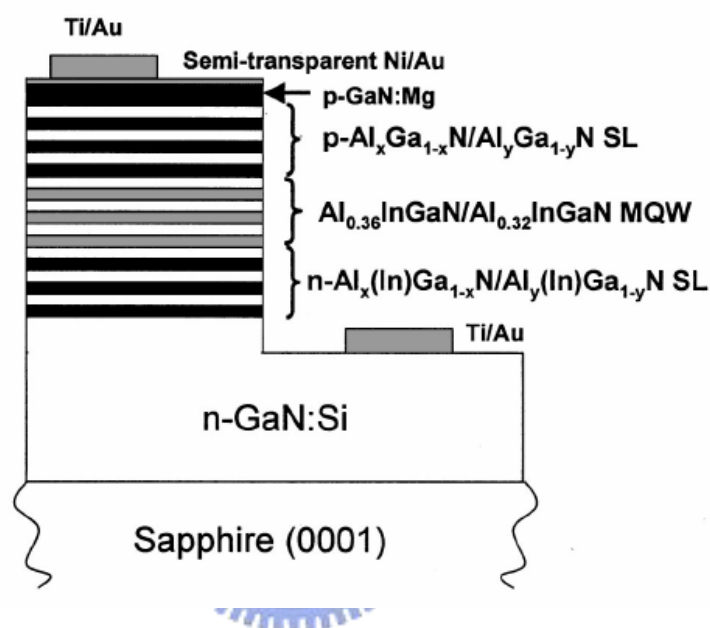


圖1.3-3 280nm LED 結構圖 A. Yasan *et al.*

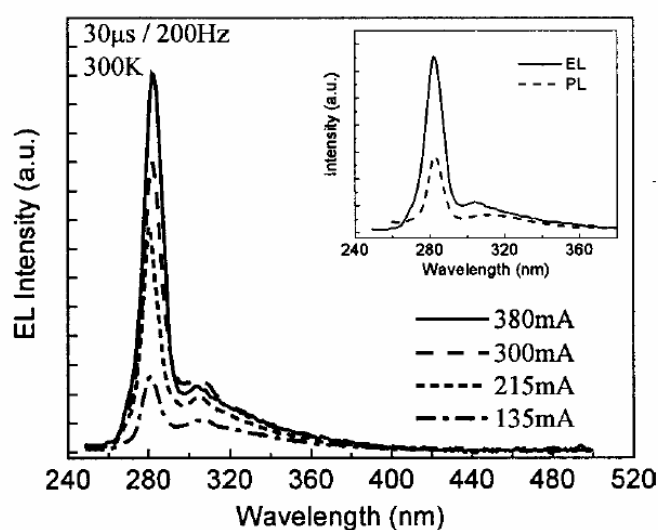


圖1.3-4 不同電流下的EL光譜圖和PL光譜圖 A. Yasan *et al.*

2003年Michael Kneissl等人發表了，使用厚度為35Å的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 作為quantum well，並以厚度70Å的 $\text{In}_{0.01}\text{Al}_{0.16}\text{Ga}_{0.83}\text{N}$ 當作quantum barrier的UV LD，波長隨著quantum well中的In含量不同而變動，詳細的結構如圖1.3-5。

在這篇報導中是在常溫下，以脈衝電流(pulsed current)驅動，最短的波長到達363.2nm，並且在波長為368-378nm的元件上得到最低的臨界電流密度(threshold current densities)約為5 kA/cm²，如圖1.3-6(a)(b)所示。

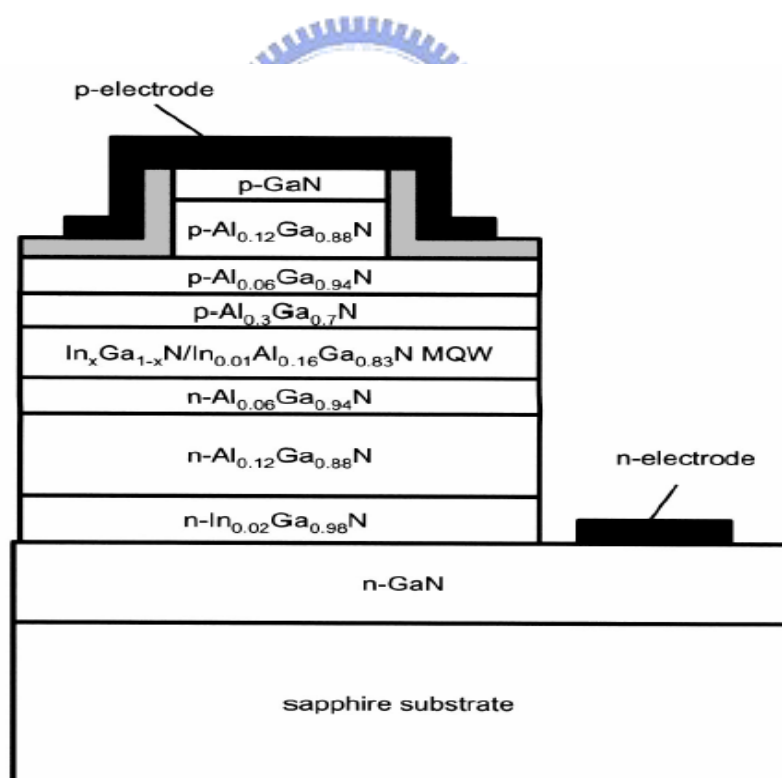


圖 1.3-5 結構圖 Michael Kneissl *et al.*

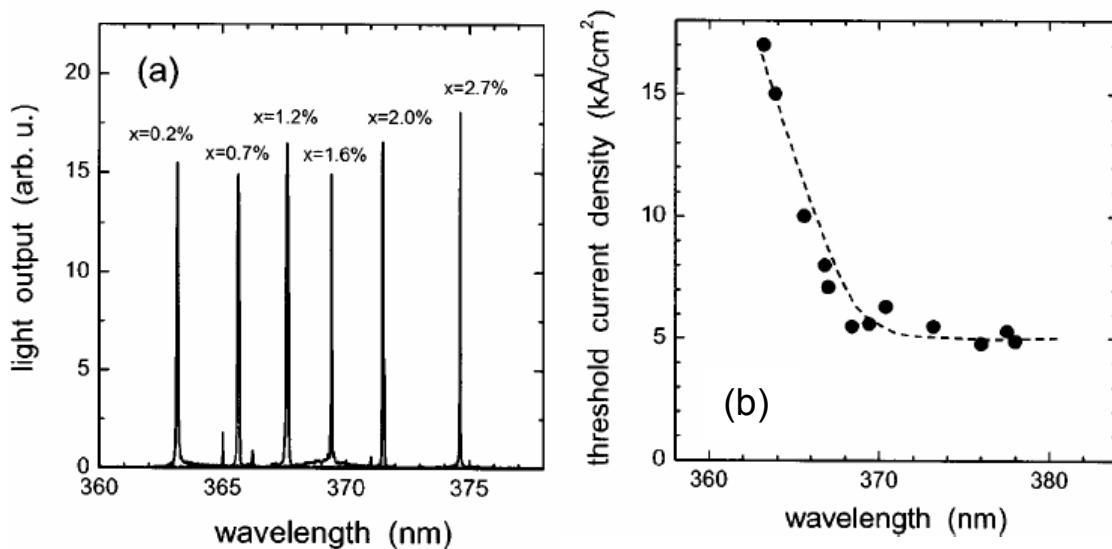


圖 1.3-6 (a)以 pulse current 量測不同 In 含量之光譜圖
(b)不同輸出波長的臨界電流密度 Michael Kneissl *et al.*

圖 1.3-7 顯示最佳的結果是在連續操作電流下，室溫約 20°C 時，得到 5mW 的輸出功率，波長在 379nm 左右，可以看到有因為熱效應，使得輸出功率下降且造成臨界電流增加的趨勢。

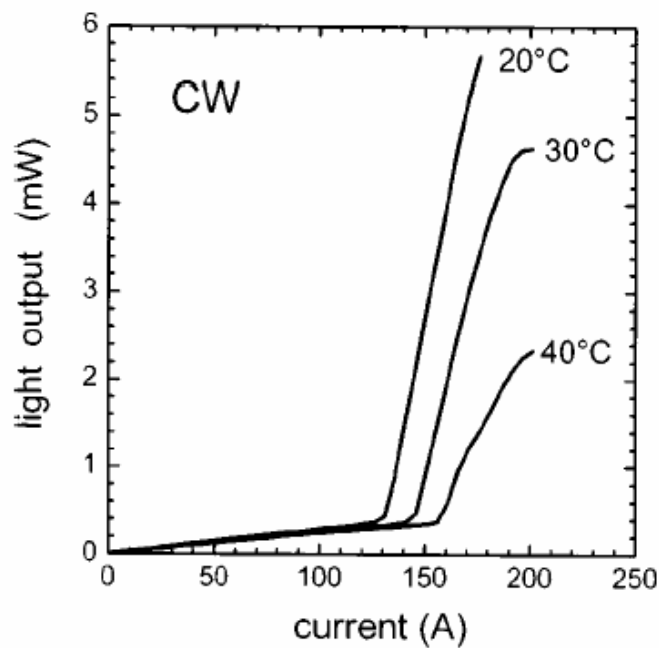


圖 1.3-7 變溫 L-I 特性曲線，波長在 376nm
Michael Kneissl *et al.*

到了 2003 年，Shingo MASUI 等人發表了，波長在 365nm，並且是使用 AlInGaN 的單一量子井 UV 的半導體雷射[14]，量子井材料為 $\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ ，把 In 的成分固定在 1-2% 之間，並以 $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ 當作 quantum barrier，在室溫 25°C 連續操作的條件下時，臨界電流為 50mA，如圖 1.3-8 所示，臨界電流密度為 $3.6\text{kA}/\text{cm}^2$ 。若是以連續電流，操作在輸出功率 3mW 時，半導體雷射的壽命已經可維持 2000 小時。

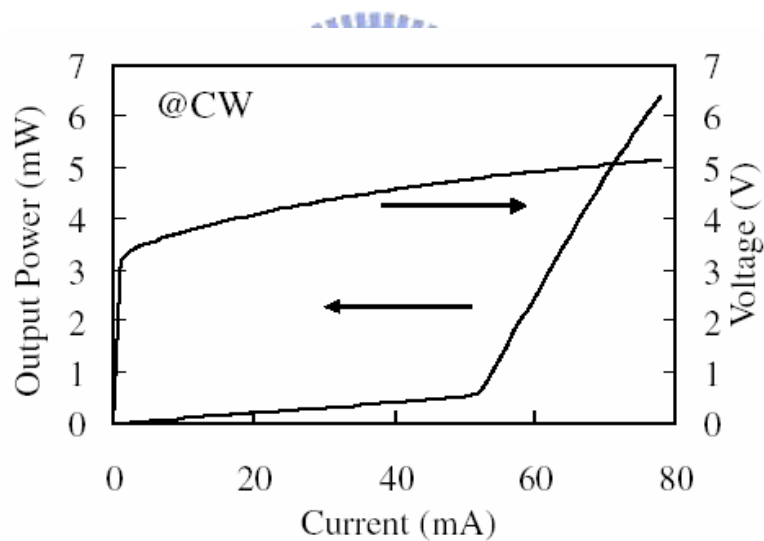


圖1.3-8 365nm LD 操作在25°C的L-I和V-I 特性曲線Shingo MASUI *et al.*

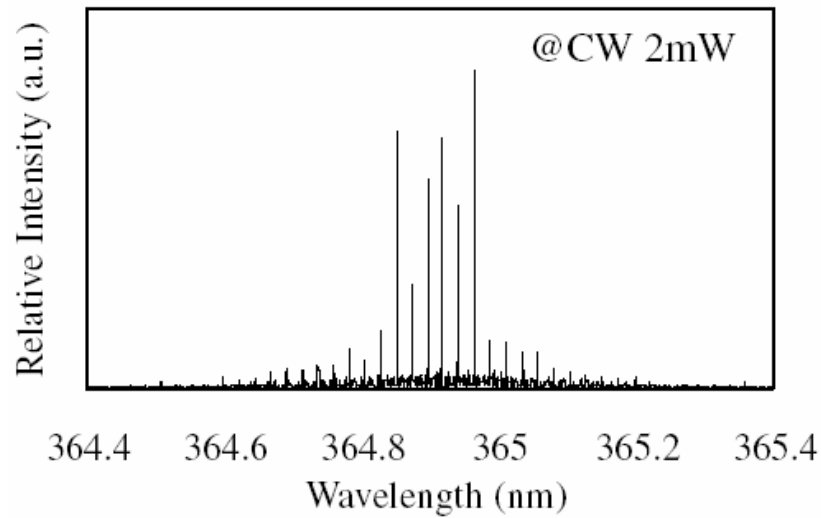


圖1.3-9 365nm LD 25°C 輸出功率在2mW的光譜圖 Shingo MASUI *et al.*

眾多的研究結果顯示，使用四元化合物 AlInGaN 在能隙的選擇和晶格常數的調整上，對於發展電子元件和高效率的發光元件時，具有相當大的潛力和優點，因此除了發光元件之外，一些電子元件的應用，也正在被許多的實驗室開發中。

參考文獻

1. H. Hirayama, Y. Enomoto, A. Kinoshita, A. Hirata, and Y. Aoyagi, "Optical Properties of AlGa_N Quantum Well Structures", *MRS Internet J. Nitride Semicond. Res.* **5S1**, W11.35 (2000).
2. Jianping Zhang, J. Yang, G. Simin, M. Shatalov, and M. Asif Khan, "Enhanced luminescence in InGa_N multiple quantum wells with quaternary AlInGa_N barriers", *Appl. Phys. Lett.* **77**, 2668 (2000)
3. M. Shatalov, A. Chitnis, V. Adivarahan, A. Lunev, J. Zhang, J. W. Yang, Q. Fareed, G. Simin, A. Zakheim, and M. Asif Khan, "Band-edge luminescence in quaternary AlInGa_N light-emitting diodes", *Appl. Phys. Lett.* **78**, 817 (2000)
4. H. Hirayama, A. Kinoshita, A. Hirata, and Y. Aoyagi, "Growth and optical properties of quaternary InAlGa_N for 300 nm band UV-emitting devices", *Phys. State Solid (a)* **188**, 83 (2001)
5. J. P. Liu, a) Y. T. Wang, and H. Yang, *et al.*, "Investigations on V-defects in quaternary AlInGa_N epilayers", *Appl. Phys. Lett.* **84**, 5449 (2004)
6. C. H. Chen and Y. F. Chen, *et al.*, "Mechanism of enhanced luminescence in In_xAl_yGa_{1-x-y}N quaternary epilayers", *Appl. Phys. Lett.* **84**, 1480 (2004)
7. M. Asif Khan, J. W. Yang, and G. Simin, *et al.*, "Piezoelectric doping in AlInGa_N/Ga_N heterostructures", *Appl. Phys. Lett.* **75**, 2806 (2000)
8. M. Asif Khan, J. W. Yang, and G. Simin, *et al.*, "Lattice and energy band engineering in AlInGa_N/Ga_N heterostructures", *Appl. Phys. Lett.* **76**, 1161 (2000)
9. G. Tamulaitis, K. Kazlauskas, S. Jursėnas, and A. Žukauskas, *et al.*, "Optical bandgap formation in AlInGa_N alloys", *Appl. Phys. Lett.* **77**, 2136 (2000)
10. V. Adivarahan, A. Chitnis, J. P. Zhang, M. Shatalov, J. W. Yang, G. Simin, and M. Asif Khan, *et al.*, "Ultraviolet light-emitting diodes at 340 nm using quaternary AlInGa_N multiple quantum wells", *Appl. Phys. Lett.* **79**, 4240 (2001)
11. J. P. Zhang, E. Kuokstis, Q. Fareed, H. Wang, J. W. Yang, G. Simin, *et al.*, "Pulsed atomic layer epitaxy of quaternary AlInGa_N layers", *Appl. Phys. Lett.* **79**, 925 (2001)
12. A. Yasan, R. McClintock, K. Mayes, S. R. Darvish, P. Kung, and M. Razeghi, "Top-emission ultraviolet light-emitting diodes with peak emission at 280 nm", *Appl. Phys. Lett.* **81**, 801 (2002)
13. Michael Kneissl, *et al.*, "Continuous-wave operation of ultraviolet InGa_N/InAlGa_N multiple-quantumwell", *Appl. Phys. Lett.* **82**, 2386 (2003)
14. Shingo MASUI, *et al.*, "365nm Ultraviolet Laser Diodes Composed of Quaternary AlInGa_N Alloy", *Jpn. J. Appl. Phys.* **42**, L 1318 (2003)

第二章 物理模型與理論計算

2.1 簡介

定性的理論分析，可以幫助我們瞭解半導體元件一些光電的輸出特性，能夠對於輸出特性，做模組化和最佳化的模擬。

本論文中所使用的套裝軟體為 LASTIP (Laser Technology Integrated Program)以及 APSYS(advanced physical model of semiconductor devices)，這兩套軟體都是由加拿大的 Crosslight 公司所出版。模擬的數值分析是基於 $k \cdot p$ 的理論，使用 Luttinger-Kohn 提出的 Hamiltonian 矩陣以及 envelope function 去解 quantum well subband 的結構。在物理的模型中包含基本的 Poisson's equation、current continuity equations、photon rate equation 和 scalar wave equation 等等，以及對於載子特性、邊界條件的描述等基本的公式。

2.2 軟體的模型

LASTIP軟體結合了二維的載子傳輸、熱流、光增益的計算，以及橫截面(transversal plane)波導等等。熱的影響對於半導體雷射來說非常的重要，因此幾乎所有的可能和熱有關的因素都會被考慮進去，這包含了電流和光吸收產生的Joule heating、recombination heat、Thomson heat、Peltier heat等影響[1]。

在APSYS軟體，結合了三維的載子傳輸、量子效應以及光線追跡的模型，傳輸模型方面包含了電子和電洞的漂流(drift) 和擴散(diffusion)的效應、Fermi statistics、異質接面的極化和熱離子發散效應，以及考慮到載子的Shockley-Read-Hall (SRH) recombination的模型。在量子理論中，以Schrödinger和Poisson equation並用疊代法，來求得改變不同偏壓時，量子井產生的變化。在量子井中電子電洞再結合自發性輻射的計算是用free-carrier model，並且考慮wurtzite價電帶結構。

在光模的模型中，所有光的模態都會被盡可能的討論到，因為這些非同調性的自發性輻射發光模態，都會對輸出功率做出貢獻。photon rate equation與drift-diffusion equations耦合的機制，以及各個材料折射率的增益也會被考慮進去。

2.2.1 漂流-擴散/流體動力模型(Drift-Diffusion/Hydrodynamic Models)

在半導體中許多的物理現象需要用不同的模型去敘述，drift-diffusion model是一個最普遍，能夠解釋許多已知的半導體元件的基本特性的一個模型，描述元件的行為，可以從Poisson's equation開始

$$-\nabla \cdot \left(\frac{\epsilon_0 \epsilon_{dc}}{q} \nabla V \right) = -n + p + N_D(1 - f_D) - N_A f_A + \sum_j N_{tj}(\delta_j - f_{tj}) \quad (2.1)$$

以及電子和電洞流的連續方程

$$\nabla \cdot J_n - \sum_j R_n^{tj} - R_{sp} - R_{st} - R_{au} + G_{opt}(t) = \frac{\partial n}{\partial t} + N_D \frac{\partial f_D}{\partial t} \quad (2.2)$$

$$\nabla \cdot J_p + \sum_j R_p^{tj} + R_{sp} + R_{st} + R_{au} - G_{opt}(t) = -\frac{\partial p}{\partial t} + N_A \frac{\partial f_A}{\partial t} \quad (2.3)$$

V 、 n 和 p 分別代表電位、電子和電洞的濃度。 N_D 、 N_A 、 N_{tj} 為shallow donors、shallow acceptors和deep level trap的濃度， f_D 、 f_A 、 f_{tj} 代表他們佔據的能階。 J_p 、 J_n 為電子電洞流密度。 R_p^{tj} ， R_n^{tj} ， R_{sp} ， R_{st} ， R_{au} 分別代表電子、電洞的deep level trap，spontaneous，stimulated，Auger的復合速率。這些方程式提供了描述半導體元件中電子的行為。

2.2.2 增益模型(Gain Model)

在一般的增益模型理論中，對於塊材(bulk)和量子井而言，材料的增益和損失可以視為是波長和載子密度的函數。由於寬能隙的氮化系材料擁有較低的介電常數(dielectric constant)，在AlGaInN量子結構的光增益部分是由Coulomb enhanced gain spectral function[2]來計算

$$g(\hbar\omega) = \text{real} \left\{ \int_{E_{g0}}^{\infty} \frac{g_0(E_{cv})}{1 - q_1(E_{cv}, \hbar\omega)} \left[1 - i \frac{E_{cv} - \hbar\omega}{\Gamma_{cv}} \right] L(\hbar\omega - E_{cv}) dE_{cv} \right\}, \quad (2.4)$$

在這裡

$$q(E_{cv}, \hbar\omega) = \frac{-ia_0 E_0 E_{cv}}{\pi k |M_{ji}(E_{cv})|} \int_0^{\infty} dk' k' \frac{|M_{ji}(E_{cv'})|}{E_{cv'}} \times \frac{f_e(E_{cjk'}) + f_h(E_{vik'}) - 1}{\Gamma_{cv} + i(E_{cv} - \hbar\omega)} \times \Theta(k, k'), \quad (2.5)$$

而

$$\Theta(k, k') = \int_0^{2\pi} d\theta \frac{1 + C_{pl} k a_0 q^2 / 32\pi N_{2D}}{1 + q/k + C_{pl} k a_0 q k^3 / 32\pi N_{2D}}, \quad q^2 = k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta, \quad (2.6)$$

其中 θ 為向量 k 和 k' 平面的角度。 $g_0(E_{cv})$ 是 spectral wave function，包含了 $g_{ji}(E_{cv})$ 從第 j 個電子次能階(j^{th} -subband electrons)和 第 i 個電洞次能階(i^{th} -subband holes) transition 之總和。 Γ_{cv} 是代表 Lorentzian width 也等於 \hbar/τ_{cv} ，在計算上簡化了式子上面的 $\hbar\omega$ 和 E_{cv} ，而在計算上我們把這一個值

當成常數。 a_0 為 exciton Bohr radius， $a_0 = \frac{4\pi\hbar^2 \epsilon_b \epsilon_0}{e^2 m_{rj}}$ 。 E_0 為 Rydberg energy。 E_{cv}

可表示為 $E_{cv}(k) = E_g + \Delta E_g + E_{cjk} + E_{vik}$ ，其中 E_{cjk} 和 E_{vik} 是在主動區的量子井中，包含第 j 個導電帶中的次能階(j^{th} -subband of conduction band)和第 i 個

價電帶中的次能階(i^{th} -subband of valence band)，所得到電子和電洞的能量。

$|M_{ji}|^2$ 是 transition matrix element。 C_{pl} 是範圍從 1 到 4 的單位常數。

$N_{2D}=n \times (\text{quantum well thickness})$ ，代表在量子井中的二維載子密度。而增益光譜是以 Lorentzian function 延展開的。



2.2.3 自恰載子密度模型(Self-Consistent Carrier Density Model)

當位能井(potential well)在強大的電場下，如壓電場(piezoelectric field)造成的影響，這時量子井就會斜向一邊，被侷限的波函數也會跟著斜向一邊，optical transition 的行為就會不同於在平坦下的量子井，因此對於元件的特性就會產生一些影響。圖 2.2.3(a)為沒有壓電場影響的能帶圖；圖 2.2.3(b)為壓電場導致能帶彎曲，造成載子重新分佈，因此需要一個模型來重新計算能帶和波函數。

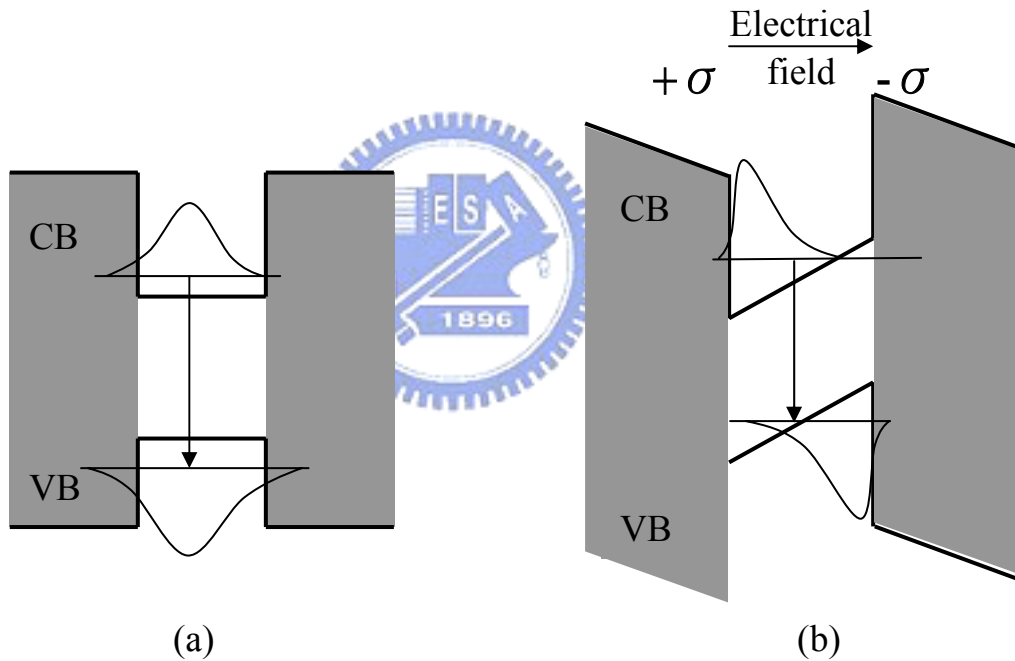


圖 2.2.3-1 (a)Without polarization (b)With polarization
對於能帶的影響

而自恰載子密度模型(self-consistent carrier density model)，就被用來解出在量子井中的壓電場，來修正位能帶和波函數。

$$n_{2D}(x, y) = \sum_j g_n^j(y) \rho_j^0 kT \ln \left\{ 1 + \exp \left[\left(E_{fn}(x, y) - E_j \right) / kT \right] \right\}, \quad (2.7)$$

其中下標 j 表示為所有的侷限態(confined states)， $g_n^j(y)$ 為假設量子井平行 x 軸的電波函數， ρ_j^0 為二維態密度(2D density of states)， E_j 為 confined level。

而自恰的過程分為下列程序：

- (1) 首先在熱平衡時，開始使用平坦的能帶去解，會得到一個初始的位能分佈。
- (2) 接下來使用自恰載子密度模型，並將第一步中得到的位能帶入，此時會得到新的載子分佈密度。
- (3) 在第二步中使用疊代法，直到載子和位能分佈，收斂為止。
- (4) 在幾次的疊代法後，增加偏壓然後重複的進行第二步和地三步的動作。如此就能得到正確的位能帶和波函數分佈。

2.2.4 熱模型(Thermal Model)

熱效應在半導體元件中，對於元件的特性影響重大，因此在熱模型中考慮了所有的熱來源，以及這些熱源是如何的來影響元件的特性，因為許多材料的參數都跟熱有關，因此盡可能的，在熱模型中都被考慮進去[3-4]。

根據能量守恆，熱的分佈滿足以下熱方程式

$$C_p \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot \kappa_t \nabla T + H \quad (2.8)$$

C_p 是 specific heat， ρ 是材料密度， κ_t 是熱導率， H 是熱來源(heat source)。

熱來源(heat source)的總類包含以下：

Joule heat—包含穩態(steady state)及含有低頻電場，表示為


$$H_{joule-dc} = \frac{J_n^2}{q\mu_n n} + \frac{J_p^2}{q\mu_p p} \quad (2.9)$$

其中 J_n 、 J_p 為電子與電洞電流密度， n 、 p 為電子和電洞密度， μ_n 、 μ_p 為電子與電洞的遷移率。另外一部份來自於 optical frequency，當光在半導體材料中傳播時，會因為材料的吸收導致 Joule heat 的產生，因此在半導體雷射中內部損失(internal loss)的影響，會隨著光在內部震盪，產生與震盪頻率有關的 Joule heat。

$$H_{joule-op} = S \hbar \omega^2 \overline{n_1} \alpha_i |W|^2 / (k_0 < \epsilon_1 >) \quad (2.10)$$

W 是 oscillating field， S 為光子數目， ω 是 oscillation frequency of radiation fields， α_i 是 internal loss， n_1 為材料的折射率。

Recombination heat—當電子電洞對結合的時候會產生光子(radiative)或者轉變為熱(non-radiative)，在實際的元件中大多數spontaneous radiative recombination的光子是被元件本身吸收，並且轉變為熱。而以radiative recombination放光的半導體雷射，最終發的光在共振腔之外，以此不用考慮到此一熱來源。Recombination heat表示為

$$H_{rec} = (R_{trap} + R_{Aug} + R_{spon})(E_{fn} - E_{fp}) \quad (2.11)$$

Thomson and Peltier heat—其中的Thomson heat是由熱電功率(thermoelectric power)交換所引起的，當電子電洞對復合的時候可以表示為

$$H_T = qR_{total}T(P_p - P_n) \quad (2.12)$$

P_p 、 P_n 為thermoelectric power for hole and electrons。Peltier heat為隨著空間變化的熱電功率，表示為

$$H_p = -T(J_n \nabla P_n + J_p \nabla P_p) \quad (2.13)$$

2.3 結 論

上述介紹的，是比較重要的一些物理模型，這些物理模型可以在Ref[5]中找到概略的介紹，另外，對於方程式間的相關連性可以用圖2.1來做說明，以及一個完整的模擬程序可以用圖2.2說明。

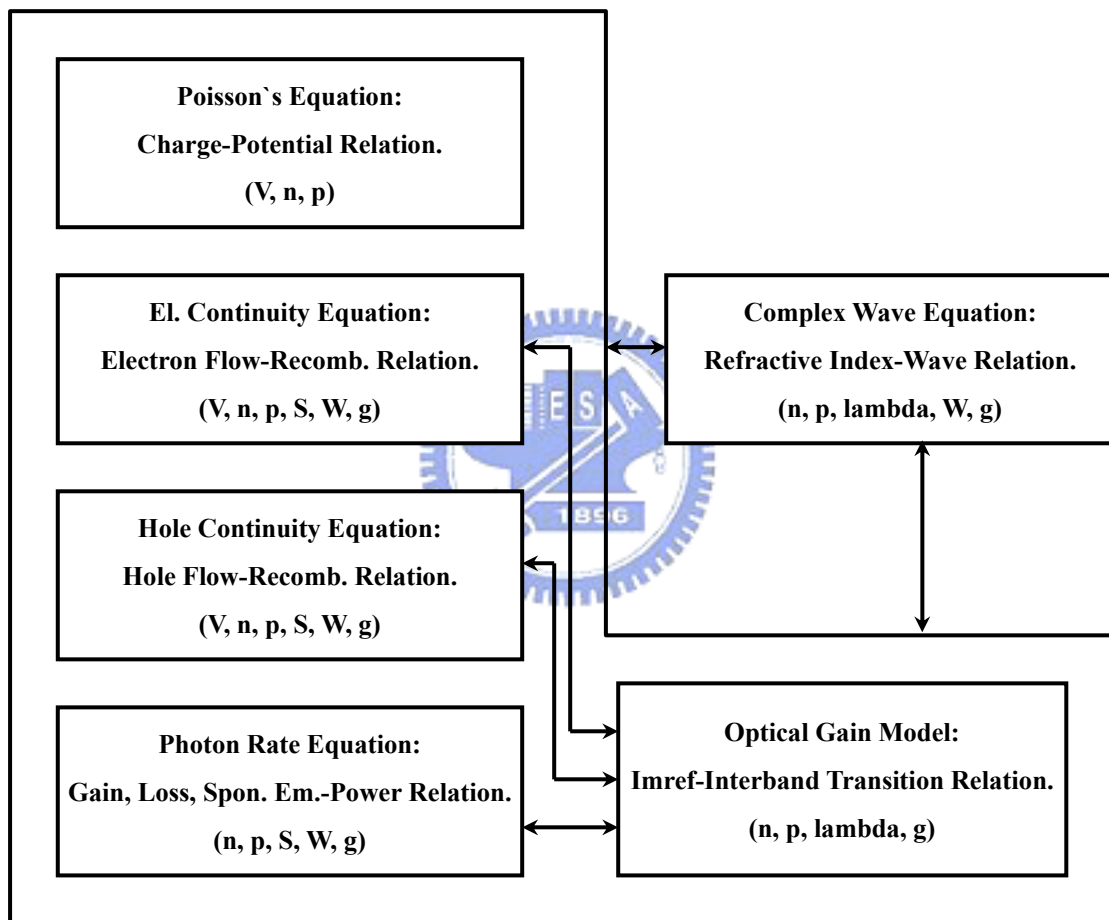


圖 2.3-1 各個方程式間彼此互相的關連[6]

其中 V 代表電位， n 與 p 則代表電子與電洞之濃度。光子數目與光場強度分別以 S 與 W 來表示， λ 代表發光波長，增益值以 g 表示。

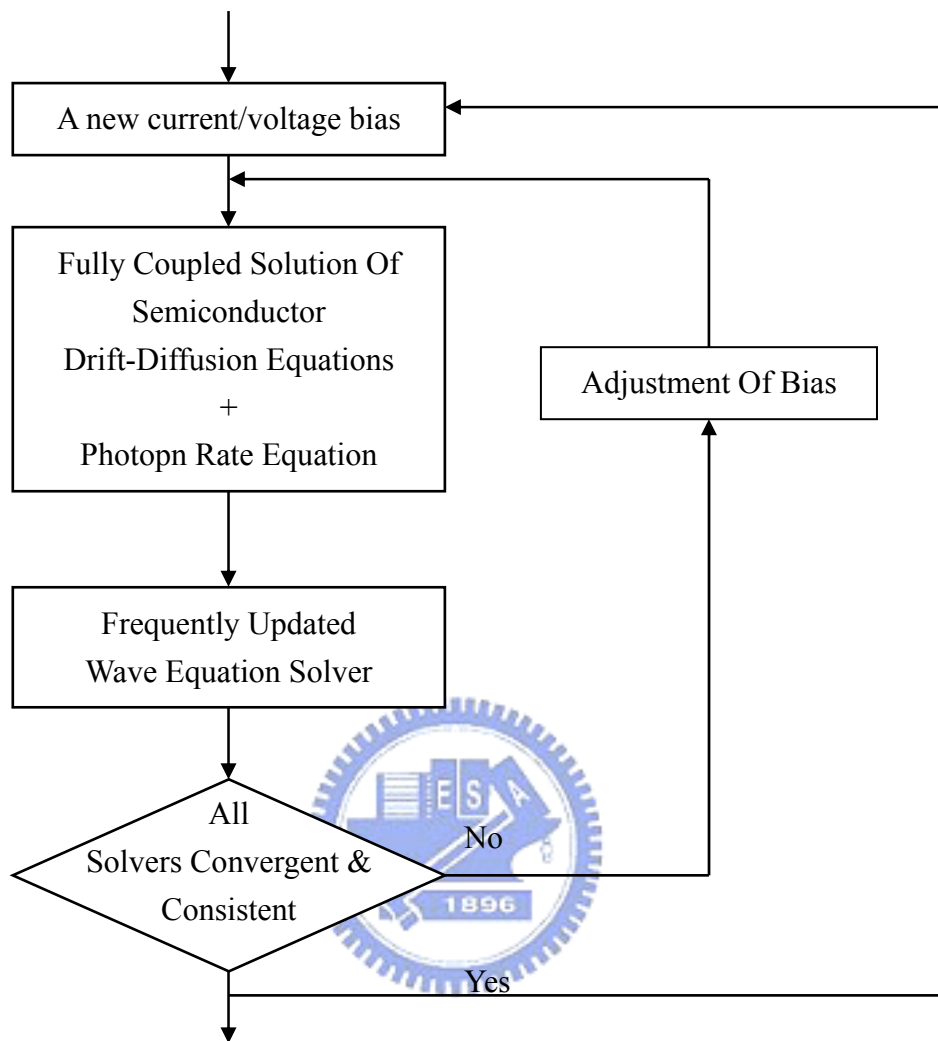


圖 2.3-2 Flow diagram of how the simulator performs a typical simulation.

參考文獻

1. Z.-M. Li, "Physical Models and Numerical Simulation of Modern Semiconductor Lasers," Physics and Simulation of Optoelectronic Devices V; ed. M. Osinski and W. W. Chow; SPIE, vol. 2994, 698-708 (1997)
2. S. L. Chuang, *Phys. Rev. B* **43**, 9649 (1991)
3. Liou, L.L.; Ebel, J.L.; Huang, C.I, "Thermal effects on the characteristics of AlGaAs/GaAs heterojunction bipolar transistors using two-dimensional numerical simulation", *Electron Devices, IEEE Transactions* **40**, Issue 1, 35 (1993)
4. GERHARD K. WACHUTKA, "Rigorous thermodynamic treatment of heat generation and conduction in semiconductor device modeling", *Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems, IEEE Transactions* **9**, 1141 (1990)
5. Crosslight Software General Description Version 2003.4 Edition 1
6. 張誌源, "氮化銦鎵量子井雷射之電子溢流現象與電洞不均勻性探討", 國立彰化師範大學物理研究所碩士論文 (2002)



第三章 數值模擬與分析

3.1 簡介

本章以加拿大 Crosslight 公司所開發的模擬軟體 Lastip 以及 Apsys 作為工具，分別對半導體雷射、發光二極體，進行特性模擬與分析。LASTIP (Laser Technology Integrated Program)，是一套用來設計、分析半導體雷射元件的二維模擬程式；主要是分析邊射型雷射 (Edge Emitting Laser diode) 的光電特性為主，也可以對元件進行熱特性的分析和研究。

另一軟體為 APSYS (Advanced Physical Models of Semiconductor Devices)，這套軟體對於光電半導體、電子元件，如：OLED、LED、PD (Photodetectors)、HBT (Heterojunction Bipolar Transistors)、HEMT (High Electron Mobility Transistors) 等，均可進行元件在光、電、熱特性的分析，在本論文中主要用來分析發光二極體的特性。

3.2 AlInGaN as electron blocking layer for 405nm LD

3.2.1 研究動機

一開始的動機是2003年由Asano等人在IEEE JSTQE的報導中提出一種結構 [1]，來改善半導體雷射的特性，其中一個重要的設計就是減少主動區 (active region)附近的應力(strain)。

一般在半導體雷射中會有一層以AlGaIn作為電子阻擋層 (electron blocking layer)，用來防止在主動區的銦在磊晶的過程中被吸附(In desorption)以及能夠防止載子的溢流(carrier overflow)，一般的半導體雷射的結構如圖

3.2.1-1所示。

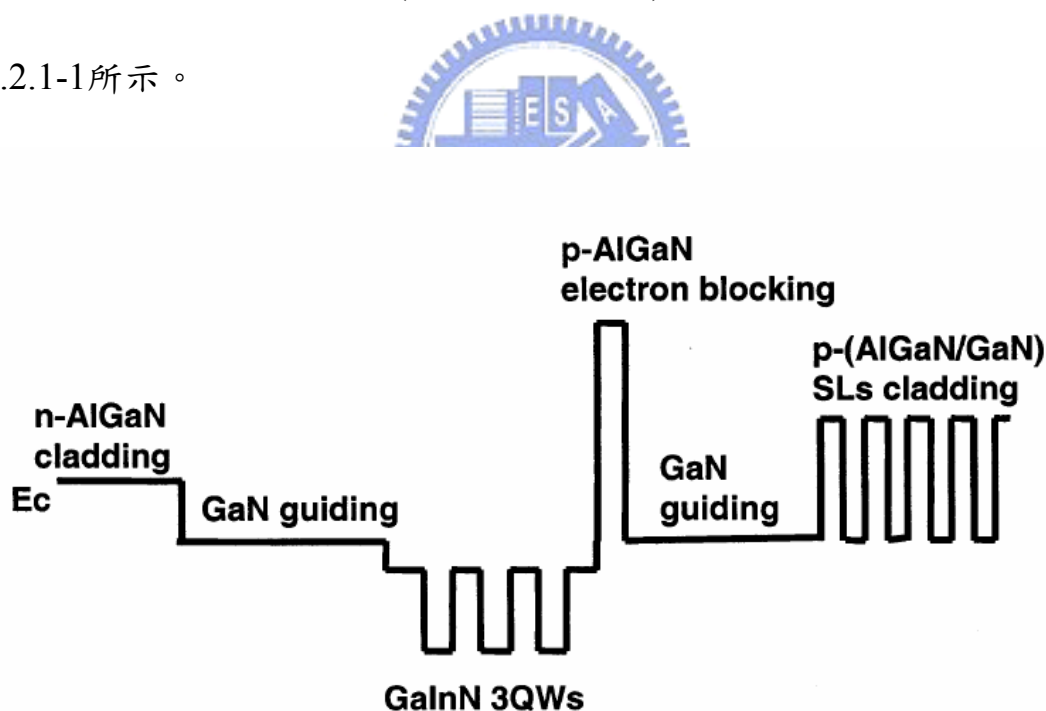


圖 3.2.1-1 一般半導體雷射結構

在報導中提出一種新的結構，如圖 3.2.1-2 所示，在此一新的結構當中在 quantum barrier 和 electron blocking layer 之間加入了一層 InGaIn，命名為 interlayer。

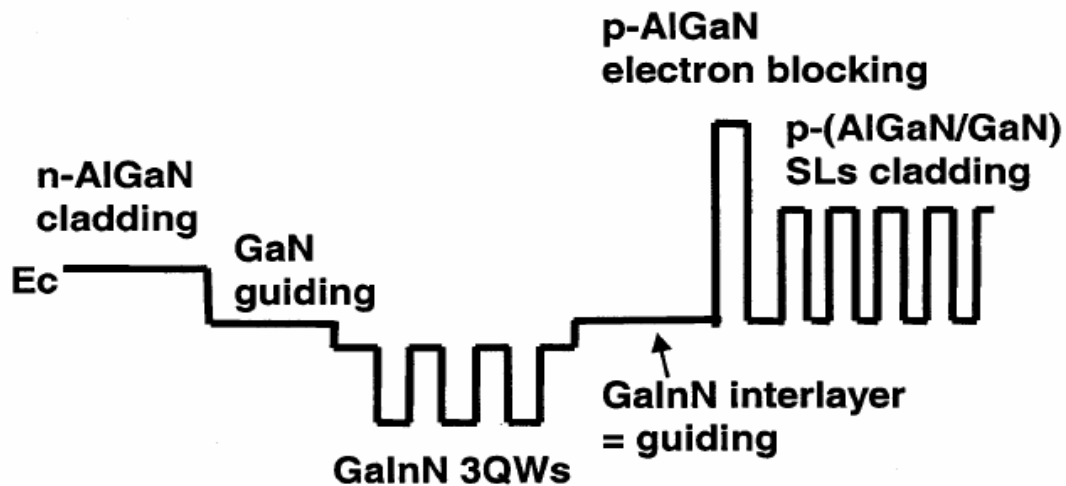
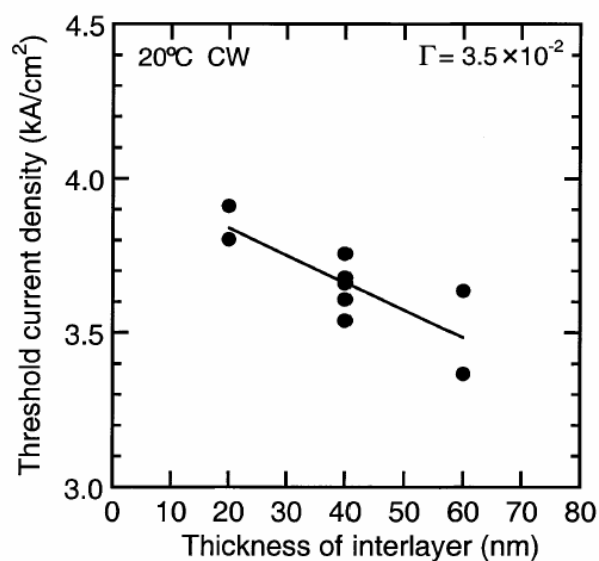
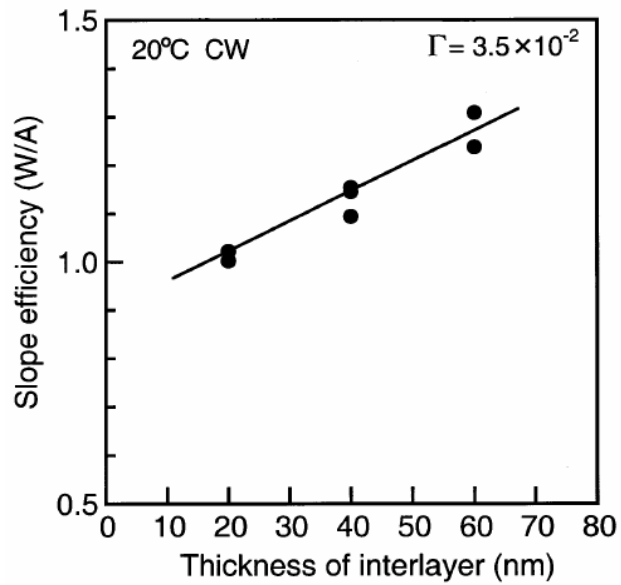


圖 3.2.1-2 多了一層 InGa_N 的半導體雷射結構

結果我們可以從圖 3.2.3 知道，隨著 interlayer 厚度不斷的增加，臨界電流密度(threshold current density)也隨之下降(圖 3.2.1-3 a)，同時 slope efficiency 增加(圖 3.2.1-3 b)，作者歸因於 interlayer 厚度增加，來自於 electron blocking layer 的應力減小，進而增加了半導體雷射的特性。



(a)



(b)

圖 3.2.1-3 interlayer 厚度對(a)臨界電流(b)slope efficiency

基於上述的理由，以及在第二章中，我們介紹過四元化合物 AlInGaN 的特性，在鋁和銦含量比例在接近 5:1 時，晶格常數(lattice constant)會和 GaN 匹配(match)。這可以用來減少，由於材料之間不同的晶格數差異，所累積的應力。因此結合這兩點我們提出以四元的化合物當作電子阻擋層的想法，既可以減少應力，又能夠保持原有電子阻擋層的特性。

3.2.2 元件結構

如圖 3.2.2 所示為這次模擬中我們使用的結構，最底層是厚度 3 μm 的 n-GaN，並且在元件右方區塊設定一個 n-contact 的金屬電極，在程式中預設為歐姆接觸(Ohmic contact)，使電子流能夠容易地由金屬進入半導體材料中。

往上面一層為 n-type 的 $\text{Al}_{0.07}\text{Ga}_{0.93}\text{N}$ ，厚度是 1 μm 的包覆層(cladding layer)，是來幫助從活性層的光能夠局限在活性區(active region)內，緊接著是 n-type 的 GaN 厚度為 0.1 μm 的導引層(guiding layer)，作用是可以使活性層所發的光被引導在活性層中，進而使光損失最少，亦能增加雷射的增益(gain)。主動區(active layer)的材料為兩對 $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}/\text{In}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{N}$ ，以厚度 2.5 nm 的 $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$ 當作 quantum well，以厚度 5 nm 的 $\text{In}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{N}$ 作為 quantum barrier，根據模擬結果發光波長在 405 nm。

在最後一層的 quantum barrier 接著是用能隙較大的材料做為電子阻擋層(electron blocking layer)，在本篇論文中以三元 ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$)和四元的材料 ($\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$)分別作特性的分析和比較。上方的材料為 p-type GaN 導引層，厚度為 0.1 μm ，以及 p-type $\text{Al}_{0.07}\text{Ga}_{0.93}\text{N}$ 包覆層，厚度為 0.7 μm 。最後一層是 p-type GaN，厚度為 0.1 μm ，其上的 p-contact 金屬也是設定為 Ohmic contact，減少接面電阻。

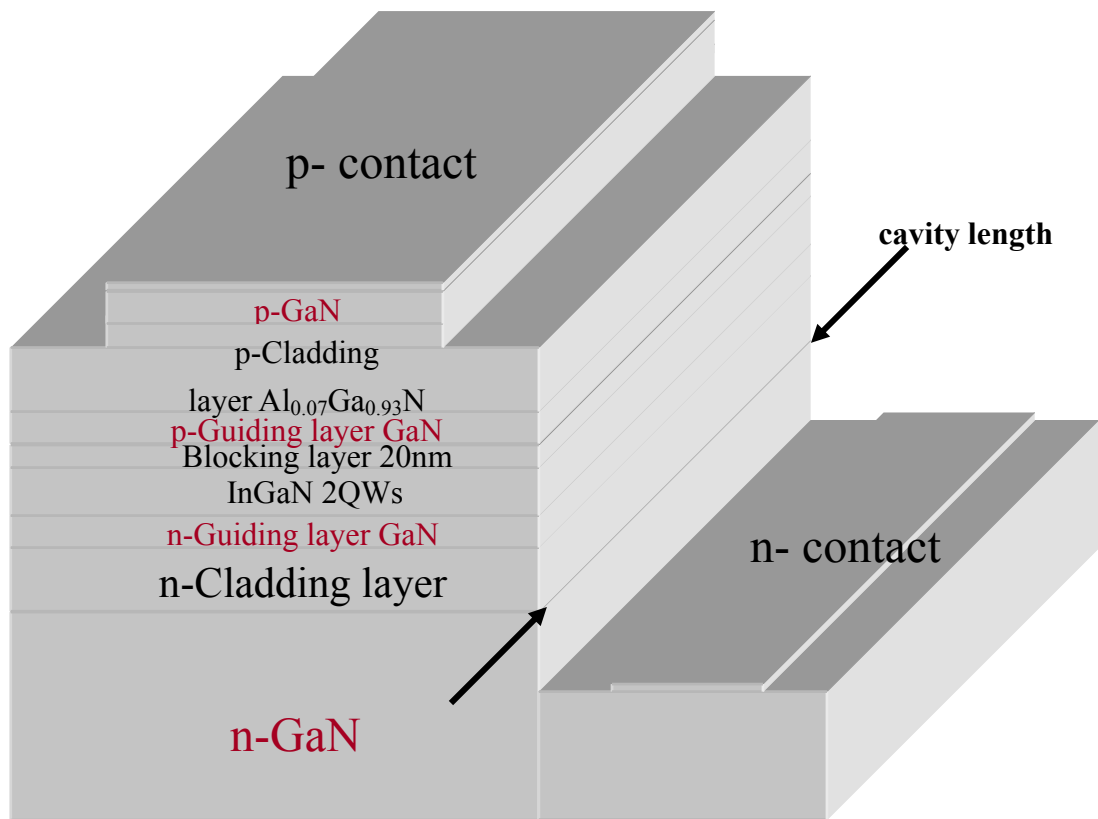


圖 3.2.2 半導體雷射結構立體圖

由於是側射型雷射(edge emitting laser)，我們設定雷射共振腔的腔長(cavity length)為 $500\text{ }\mu\text{m}$ ，而共振腔的兩側反射率分別設定為 0.18 以及 0.5，在一般的元件中，有一面會使用抗反射膜(anti-reflection coating)降低反射率，另一面會使用高反射膜(high-reflection coating)提高反射率，以增加出光的機會，和半導體雷射的特性。另外我們假定內部的損失(internal loss)為 45 cm^{-1} 。

Layer	Material	Thickness(nm)	Doping(10^{18}cm^{-3})
contact layer	GaN	100	0.5(p)
cladding layer	$\text{Al}_{0.07}\text{Ga}_{0.93}\text{N}$	700	0.1(p)
guiding layer	GaN	100	0.1(p)
blocking layer	$\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$	20	0.2(p)
quantum barrier	$\text{In}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{N}$	5	0.2(n)
quantum well	$\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$	2.5	0.2(n)
quantum barrier	$\text{In}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{N}$	5	0.2(n)
quantum well	$\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}$	2.5	0.2(n)
quantum barrier	$\text{In}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{N}$	5	0.2(n)
guiding layer	GaN	100	2(n)
cladding layer	$\text{Al}_{0.07}\text{Ga}_{0.93}\text{N}$	1000	2(n)
Substrate	GaN	3000	2(n)

表 3.2.2 結構所使用的條件參數列表

3.2.3 基本材料係數

由於在本文中所使用的材料InN，過去其能隙(energy bandgap)均被認為是在1.8e-2.1eV，但是隨著磊晶技術的改良和進步，最近的幾年中已經逐漸的把InN的能隙修正為0.7-0.8 eV左右[2-4]。原因是因為過去的磊晶方式無法讓InN真正成長為單晶層(single-crystalline layer)，可能會形成銦的氧化物，使得能隙較高。例如In₂O₃的能隙便是在3.1 eV左右。隨著磊晶技術的提升已經能夠控制InN成長為良好的單晶層，也使得InN的能隙修正為0.7-0.8 eV。

其他材料的能隙也會因為磊晶的條件不同，會有些許的誤差，在本文中所使用的材料參數，如表3.2.3所示[5]，並且使用Varshni formula 來修正能隙隨溫度而變化的特性。



Parameter	Symbol	Unit	InN	GaN	AlN
Electron eff. mass(c-axis)	m_c^z	m_0	0.07	0.2	0.32
Electron eff. mass(transversal)	m_c^t	m_0	0.07	0.2	0.3
Hole eff. mass parametrt	A_1	-	-8.81	-7.21	-3.86
Hole eff. mass parametrt	A_2	-	-0.68	0.44	-0.25
Hole eff. mass parametrt	A_3	-	7.57	6.68	3.58
Hole eff. mass parametrt	A_4	-	-5.23	-3.46	-1.32
Hole eff. mass parametrt	A_5	-	-5.11	-3.40	-1.47
Hole eff. mass parametrt	A_6	-	-5.96	-4.90	-1.64
Direct bandgap at 300K	E_g	eV	0.71	3.355	6.11
Spin-orbit energy	Δ_{so}	eV	0.005	0.01	0.019
Crystal-field energy	Δ_{cr}	eV	0.04	0.017	-0.169
Lattice constant	a_0	Å	3.545	3.189	3.112
Elastic constant	C_{33}	GPa	224	398	373
Elastic constant	C_{13}	GPa	92	106	108
Hydrost. deform. Potential (interband)	a	eV	-3.5	-11.3	-11.8
Hydrost. deform. Potential (E_c)	a_c	eV	-3.5	-4.9	-3.4
Shear deform. potential	D_1	eV	-3.7	-3.7	-17.1
Shear deform. potential	D_2	eV	4.5	4.5	7.9
Shear deform. potential	D_3	eV	8.2	8.2	8.8
Shear deform. potential	D_4	eV	-4.1	-4.1	-3.9
Spontaneous polarization	P_{sp}	C/m ²	-0.042	-0.034	-0.09
Varshni parameter	α	meV/K	0.245	0.909	1.799
Varshni parameter	β	K	624	830	1462

表 3.2.3 Band structure parameters for wurtzite nitride binaries.

Varshni formula

在本文中由於討論到溫度變化對元件的影響，而隨著溫度的變化，材料的能隙也會隨之改變，影響到材料的特性，一般探討能隙隨溫度變化，會以 Varshni formula 來表示：

$$E_g(T) = E_g(T = 0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (3.1)$$

在此式中 α (meV/K)、 β (K) 稱之為 Varshni parameter， T 為溫度，以凱式溫度 (Kelvin, K) 表示。從式子中可知當溫度增加的時候，能隙會隨之減少。因此我們可以得到在任何溫度下的能隙值，這對我們往後分析元件在不同的溫度下，其特性表現相當有用。



3.2.4 能隙的計算

在前一小節中我們稍微介紹了 Varshni formula，此一公式可以用在任一的二元化合物中，但是目前並沒有對於三元、四元化合物的 Varshni formula，因此對於三元、四元化合物能隙的計算，必須建構在現有的二元化合物能隙上，並且使用 bowing parameter 來得到正確的能隙值。例如以三元的材料 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 為例：

$$e_{\text{AlGa}} = (1-x) \times e_{\text{Ga}} + x \times e_{\text{Al}} + (1-x) \times x \times \text{bow}_{\text{AlGa}} \quad (3.2)$$

x 為 Al 的含量， e_{AlGa} 為 AlGa 的能隙值， e_{Ga} 、 e_{Al} 分別各自為 Ga、Al 的能隙值， bow_{AlGa} 就是在計算 AlGa 能隙值的 bowing parameter。以線性疊加來計算，再加上一個二次的修正項來加以表示。在這裡我們使用的 bowing parameter 如表 3.2.4[4]所示。

Parameters	InGa	AlGa	AlIn
$E_g^{\Gamma}(\text{eV})$	2.4	0.7	2.5
$E_g^{\chi}(\text{eV})$	0.69	0.61	0.61
$E_g^L(\text{eV})$	1.84	0.8	0.8

表 3.2.4 bowing parameters for GaIn, AlGa, and AlIn.

3.2.5 極化電荷(polarization charge)的計算

另外在氮化系材料中一個重要的因素，就是會影響能帶結構的壓電效應。在 III-V 族的氮化合物 wurtzite 結構中，材料表現出一個巨觀的極化(polarization)現象[6-8]，此一現象來源主要有：

1. 自發性極化(spontaneous polarization, P_{sp})

由於 wurtzite 結構的不對稱性，使得氮化系材料本身帶有極性，稱為自發性極化現象，這使得在兩異質接面會有極化電荷的累積，而在晶體成長方向(0001)產生內建電場，這對於能帶結構會造成影響。

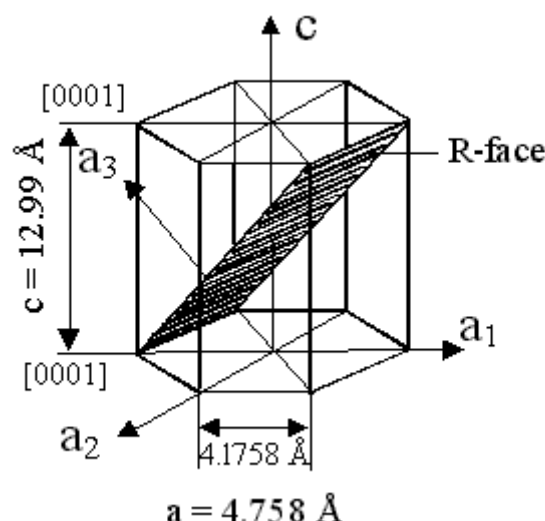


圖3.2.5-1 Wurtzite 結構

2. 壓電性極化(piezoelectric polarization, P_{pz})

此一現象是由於結構晶格常數不同，造成晶格不匹配產生張力效應，因而會有壓電極化現象。晶格常數相差越多，不匹配的情況越大，壓電性極化的程度越嚴重，對能帶結構的影響也就越大。

自發性極化計算

在簡介完壓電效應的來源後，實際的計算方式是依據 F. Bernardini and V. Fiorentini 在 2002 發表的文章[6]。一般二元材料自發性極化大小，我們使用的參數如下[5]

Parameter	Symbol	Unit	InN	GaN	AlN
spontaneous polarization	P_{sp}	C/m ²	-0.042	-0.034	-0.09

表 3.2.5-1 二元材料自發性極化參數

而三元材料自發性極化大小 P_{sp} ，要考慮 bowing parameter，因此計算的方式如下：

$$P_{sp}(A_xB_{1-x}N) = xP_{sp}(AN) + (1-x)P_{sp}(BN) + b^{AB}x(1-x) \quad (3.3)$$

式子中x為材料的組成比例， $P_{sp}(AN)$ 、 $P_{sp}(BN)$ 分別代表不同的氮化物， b^{AB} 為bowing parameter。我們選用的bowing parameter數值如下[5]：

Parameter	Unit	GaInN	AlGaIn	AlInN
bowing parameter	C/m ²	-0.037	-0.021	-0.07

表 3.2.5-2 三元材料自發性極化的 bowing parameter

壓電性極化計算

而對於非線性壓電性極化的大小 P_{pz} ，計算方式如下

$$P_{pz}^{AlN} = -1.808\varepsilon_1 + 5.624\varepsilon_1^2 \quad \text{for } \varepsilon_1 < 0$$

$$P_{pz}^{AlN} = -1.808\varepsilon_1 - 7.888\varepsilon_1^2 \quad \text{for } \varepsilon_1 > 0 \quad (3.4)$$

$$P_{pz}^{GaN} = -0.918\varepsilon_1 + 9.541\varepsilon_1^2 \quad (3.5)$$

$$P_{pz}^{InN} = -1.373\varepsilon_1 + 7.559\varepsilon_1^2 \quad (3.6)$$

ε_1 是所謂的basal strain，定義如下：

$$\varepsilon_1(x) = (a^{GaN} - a(x)) / a(x) \quad (3.7)$$

a^{GaN} 和 $a(x)$ 分別代表基板(substrate)和磊晶層的晶格常數，在文中假設磊晶層長在GaN基板上，所以用 a^{GaN} 來表示。接下來就是用線性的方式將壓電性極化相加：

$$P_{pz}^{ABN} = xP_{pz}^{AN} + (1-x)P_{pz}^{BN} \quad (3.8)$$

舉例來說若是要計算 $Al_{0.3}Ga_{0.7}N$ 的極化電荷(polarization charge)，根據前面的敘述，我們先計算自發性極化的大小，選用的參數如下

$$P_{sp}(AlN) = -0.09$$

$$P_{sp}(GaN) = -0.034$$

$$b^{AB} = 0.019$$

我們得到自發性極化的大小

$$\begin{aligned}P_{\text{sp}}(\text{AlGaIn}) &= 0.3 \times (-0.09) + 0.7 \times (-0.034) + 0.019 \times 0.3 \times 0.7 \\&= -0.04681\end{aligned}$$

接下來計算壓電性極化的大小

$$P_{\text{pz}}(\text{AlGaIn}) = -0.014868$$

將兩種效應和在一起，我們得到

$$P_{\text{sp}} + P_{\text{pz}} = -0.061678 \text{ (C/m}^2\text{)}$$

必須注意的是，這只是一種材料的，因此若是異質接面的材料，就必須在算出另外一個壓電極化和自發性極化的大小。假設長了某一種材料 A(top)/B(bottom)，A 是在 B 的上方，那麼算出 A、B 的極化大小後，再把 B 減去 A 的極化大小，在將減去後的值，除以 q 。此處 $q = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$ ，算出來的值就是極化電荷密度(polarization charge density)，單位為 cm^{-2} 或 m^{-2} 。

我們用此計算方式，將計算出來的結果和 M. Asif Khan[9]等人的結果作比較，計算的材料是 $\text{Al}_{0.12}\text{In}_x\text{Ga}_{0.88-x}\text{N}/\text{GaN}$ 的介面，由圖 3.2.5-2(a)、(b)可知道此計算方式和實驗所量測的結果吻合。因此我們就用這樣的方式來計算模擬中所用考慮到的壓電極化電荷的大小。

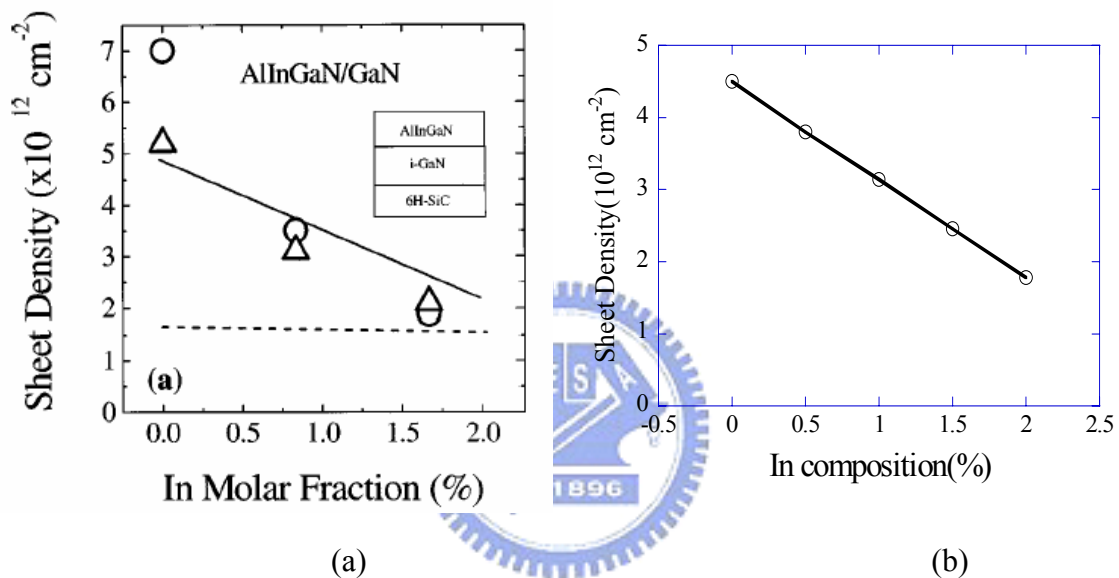


圖 3.2.5-2 固定 Al 含量 12%，變化 In 含量(a) M. Asif Khan 量測的結果(b)依照先前計算方式所得的數據

3.2.6 模擬與結果分析

在結構上面我們變動電子阻擋層(electron blocking layer)，來討論此層對元件特性的影響，首先我們使用 AlGa_{0.8}N 當作電子阻擋層與使用 AlInGa_{0.76}N 做特性的比較。由圖 3.2.6-1 我們可以清楚的看到，原先的結構使用 Al_{0.2}Ga_{0.8}N，與現在用 Al 比 In，5：1 比例的電子阻擋層 Al_{0.2}In_{0.04}Ga_{0.76}N 做比較，以 Al_{0.2}In_{0.04}Ga_{0.76}N 做為電子阻擋層，可以得到較低的臨界電流值 (threshold current, I_{th})，分析數據後發現，這歸因於擁有較好光侷限係數 (optical confinement factor, Γ)。

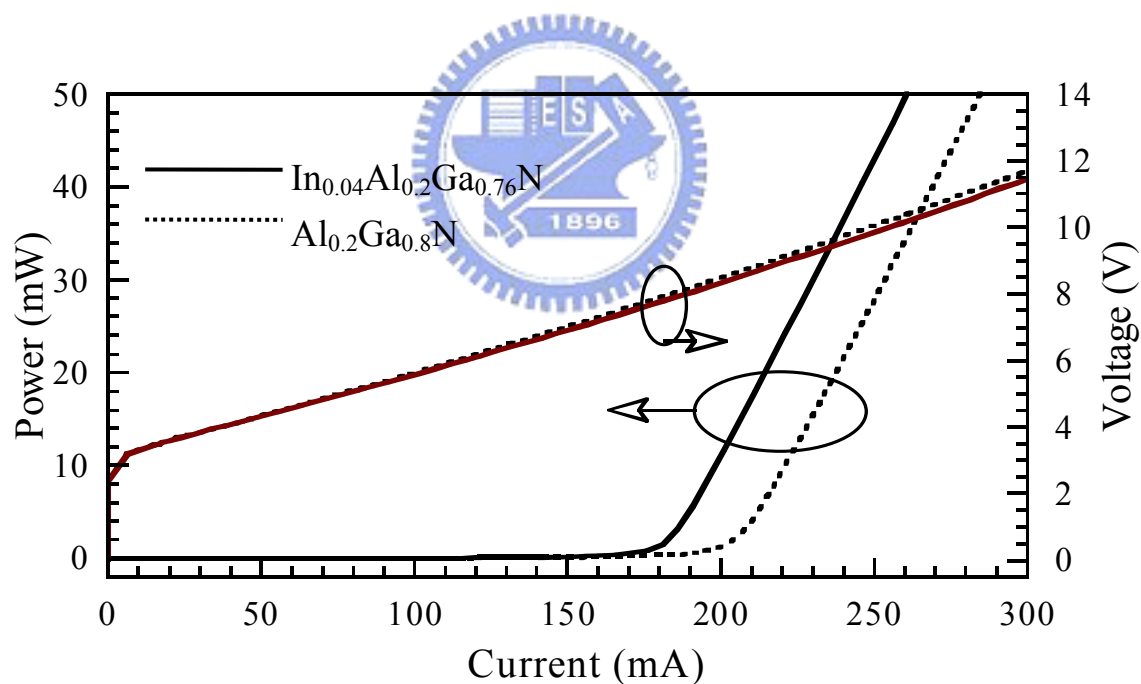


圖 3.2.6-1 兩種材料當作電子阻擋層的特性比較

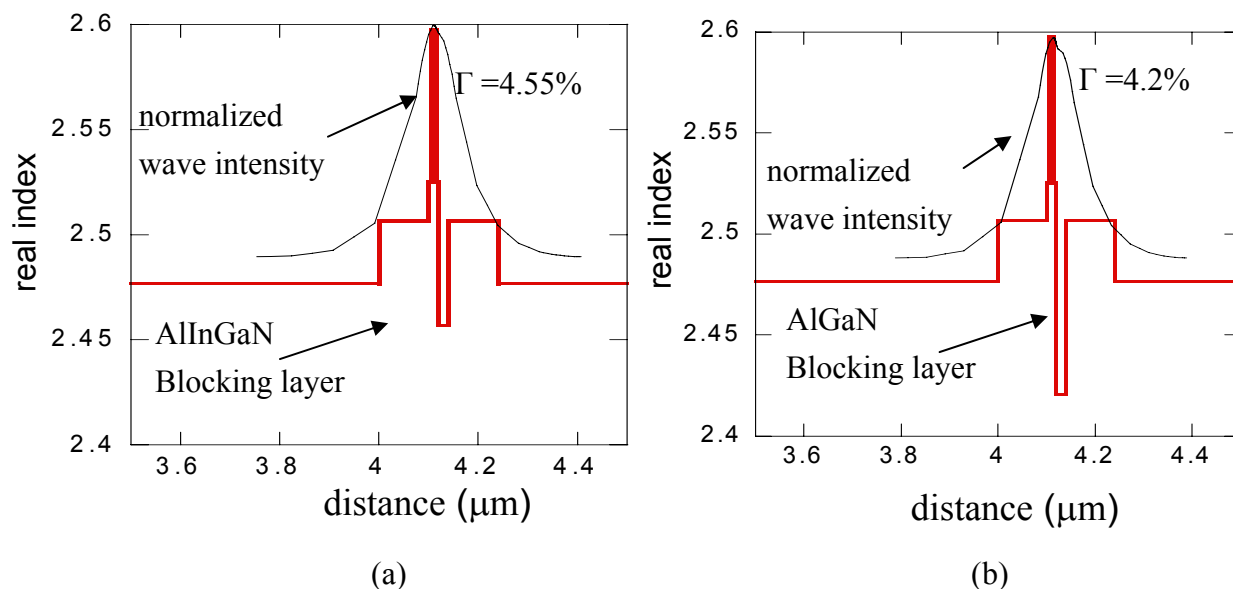


圖 3.2.6-2 (a) $\text{In}_{0.04}\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.76}\text{N}$ (b) $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 光場分佈和結構折射率的比較圖

光侷限係數(optical confinement factor, Γ)我們定義為：

$$\Gamma = \frac{\text{active region optical field}}{\text{full region optical field}} \times 100\%$$

因此使用 $\text{In}_{0.04}\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.76}\text{N}$ 當作電子阻擋層，在分析資料時得到的光侷限係數為 4.4%，比起使用 $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 得到的係數 4.2% 來的高，由於 InN 的折射率較高，提高了光侷限係數，因此得到較好的特性。

得到了這樣的結果後，我們分析四元的電子阻擋層，把 Al 的含量從 10% 增加到 35%，並且 Al 與 In 的含量維持比例 5:1。

圖 3.2.6-3 顯示，雙量子井結構 $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{N}/\text{In}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{N}$ 半導體雷射，使用一般三元化合物 $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 和使用四元化合物 $\text{In}_y\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ 變化 Al 和 In 含量並維持比例 5:1 當做電子阻擋層，在常溫 300K 下的 L-I 特性曲線。

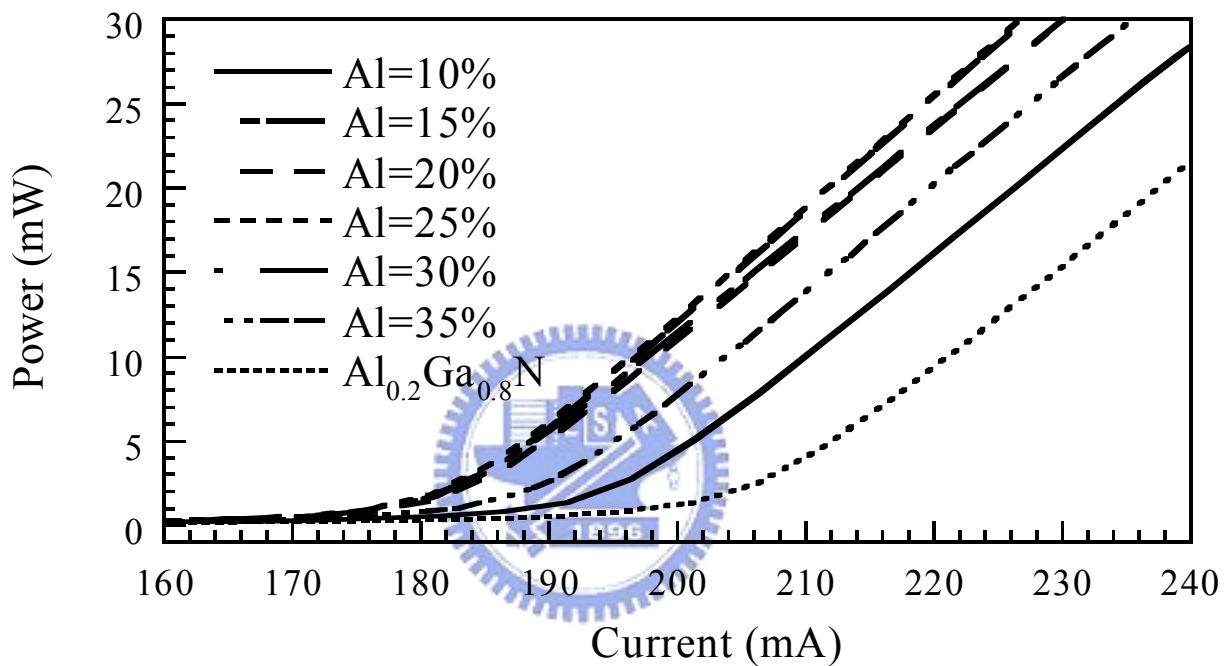


圖 3.2.6-3 常溫下使用四元和三元材料當作電子阻擋層，L-I特性曲線圖

在模擬的結果中，我們可以發現在常溫 300 K 下，使用四元的電子阻擋層，可以提供比使用一般 $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 電子阻擋層更好的雷射特性，而 Al 含量在 20-35%時，臨界電流幾乎一致。

當 $\text{In}_y\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ 鋁的含量從 10% 增加到 35% 的時候，光侷限係數 Γ 從 4.8% 減少到 4.2%。此時 $\text{Al}_{0.35}\text{In}_{0.07}\text{Ga}_{0.58}\text{N}$ 和 $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 的光侷限係數是相同的。

Material	Confinement factor
$\text{Al}_{0.10}\text{In}_{0.02}\text{Ga}_{0.88}\text{N}$	4.805%
$\text{Al}_{0.15}\text{In}_{0.03}\text{Ga}_{0.82}\text{N}$	4.679%
$\text{Al}_{0.20}\text{In}_{0.04}\text{Ga}_{0.76}\text{N}$	4.554%
$\text{Al}_{0.25}\text{In}_{0.05}\text{Ga}_{0.70}\text{N}$	4.431%
$\text{Al}_{0.30}\text{In}_{0.06}\text{Ga}_{0.64}\text{N}$	4.310%
$\text{Al}_{0.35}\text{In}_{0.07}\text{Ga}_{0.58}\text{N}$	4.190%

表 3.2.6-1 常溫300K下使用不同材料得到的光侷限係數

表 3.2.6-1 觀察出雖然 $\text{Al}_{0.10}\text{In}_{0.02}\text{Ga}_{0.88}\text{N}$ 光侷限係數最高，但由於導電帶能隙補償差(conduction band offset)較低，所以載子容易越過電子阻擋層，形成洩漏電流，因此造成臨界電流值上升到 194 mA 左右。

所以我們可以知道在以四元材料設計電子阻擋層的時候，光侷限和載子侷限會互相影響雷射的特性，當載子侷限高的時候，光侷限因素可能會被拉低，反之亦然。因此要從中找出一最佳化的設計參數。

接下來我們對不同材料的洩漏電流(leakage current)分析，可以找出在高溫的環境下，擁有較好的雷射輸出特性。

圖 3.2.6-4 表示我們分別對每一種不同的電子阻擋層，模擬溫度上升時，得到的臨界電流。並由臨界電流值，求得其特性溫度(characteristic temperature, T_0)。

特性溫度 (characteristic temperature, T_0) 定義為

$$J_{th}(T) = J_{th}(0)e^{+\frac{T}{T_0}}$$

$J_{th}(0)$ 表示在絕對溫度 0 K 時的臨界電流密度， $J_{th}(T)$ 就代表在溫度上升至 T 時的臨界電流密度，而此時的 T_0 若是數值越大，表示 $J_{th}(T)$ 隨溫度變化的程度越小，特性越好。

因此我們使用下列公式來求得特性溫度 T_0

$$T_0 = \frac{T_2 - T_1}{\ln(I_{th2}) - \ln(I_{th1})}$$

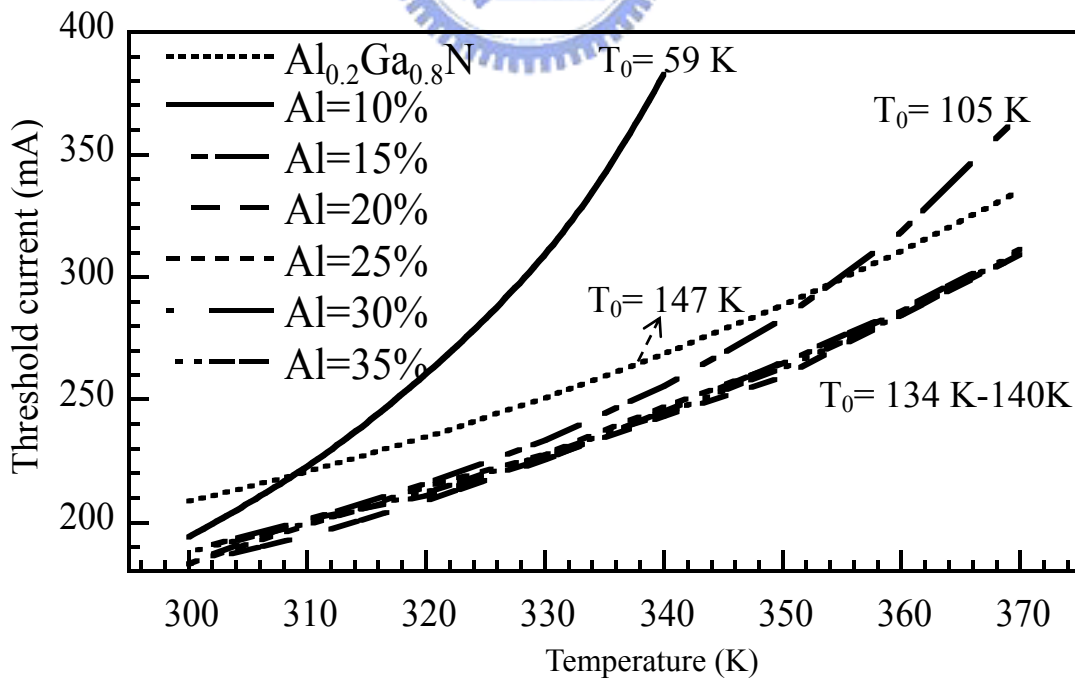


圖 3.2.6-4 四元材料固定鋁銦比5：1和三元材料，溫度對臨界電流值特性比較

從圖 3.2.6-4 可以再次觀察到 $\text{Al}_{0.10}\text{In}_{0.02}\text{Ga}_{0.88}\text{N}$ 導電帶能隙補償差 (conduction band offset)較低，因此特性溫度 T_0 也是最小的，表示這樣的結構在高溫的特性非常的不好；在模擬的過程中溫度超過 340K 的時候，已經觀察不到有受激發輻射(stimulated emission)的現象了，也就是超過 340 K 後，就沒有 lasing 的現象。從洩漏電流(圖 3.2.6-5)來看，當溫度增加的時候，溫度特性較差的元件，洩漏電流的情形也就越嚴重；也可以觀察到 Al 含量在 10-15%的設計，並不能得到很好的載子拘限作用，雖然他們的光侷限因素很高，但由於載子拘限作用太弱，導致操作溫度稍高時，半導體雷射的特性就會不好。

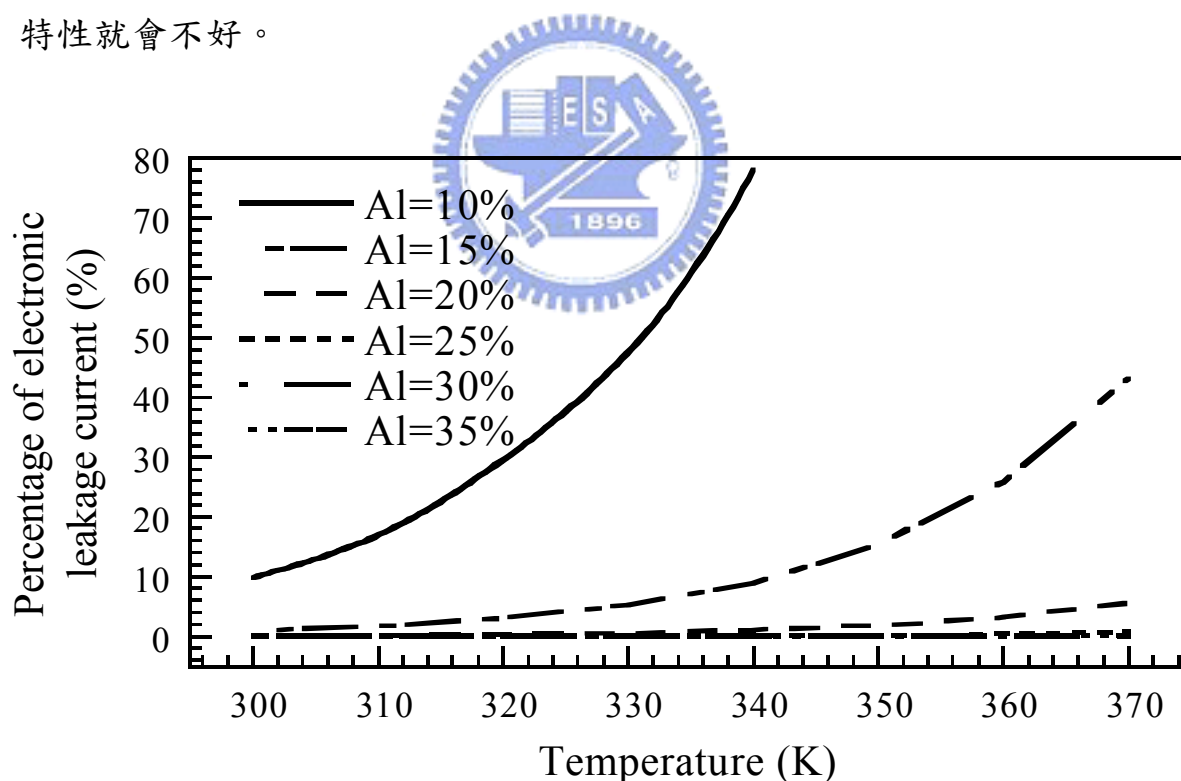


圖 3.2.6-5 四元材料固定鋁銦比5：1和三元材料，溫度對洩漏電流百分比的比較圖

我們由圖 3.2.6-6 來說明這樣的現象，當載子獲得熱能時，容易往高能階跳躍，所以當溫度上升的時候，載子就容易跑脫，離開量子井的侷限，一旦離開了量子井束縛的載子由於無法參與復合發光(recombination radiation)機制，我們就稱為是洩漏電流(leakage current)。在圖(a)中由於使用的是能隙較高的 $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 當作電子阻擋層，因此即使獲得熱能電子也不容易跑脫，而圖(b)中使用的是能隙較低的 $\text{Al}_{0.1}\text{In}_{0.02}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 當作電子阻擋層，電子很容易就躍遷過電子阻擋層，形成大量的洩漏電流，對雷射特性造成不好的影響。

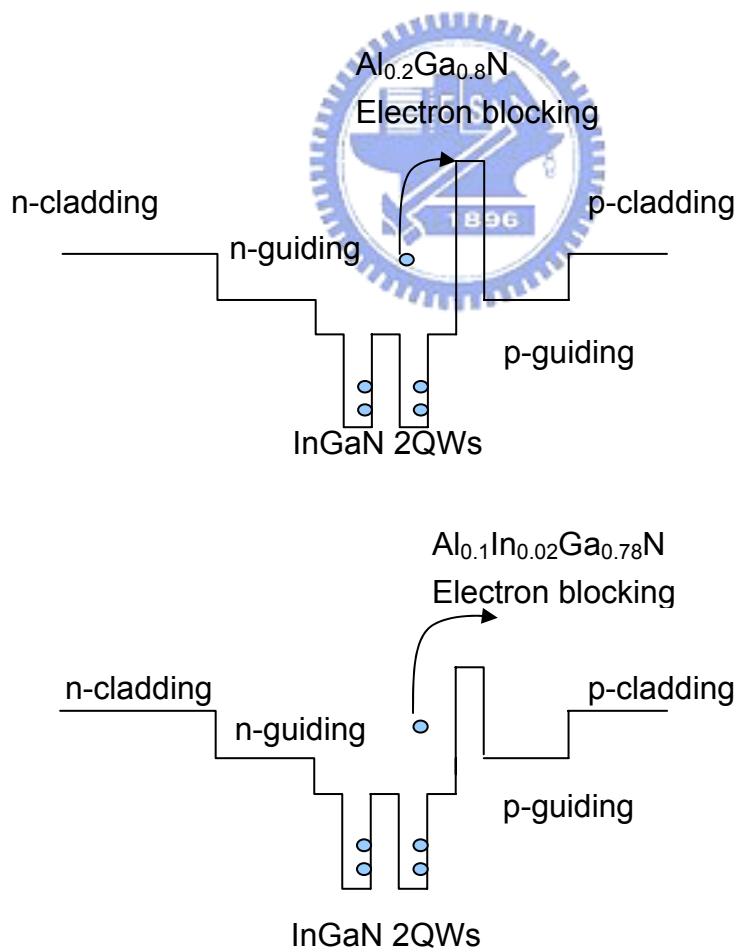


圖 3.2.6-6 (a)以能隙較高的 $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 當作電子阻擋層
(b)以能隙較低的 $\text{Al}_{0.1}\text{In}_{0.02}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 當作電子阻擋層

由上述的模擬，我們可以觀察到，使用四元的材料 InAlGa_{0.75-x}N 當作電子阻擋層的時候，當 Al 的含量在 20-35%，Al:In 比例為 5:1 時，可以擁有較低的臨界電流值，以及不錯的特性溫度。

另外我們也使用 In_xAl_{0.25}Ga_{0.75-x}N，來討論 strain 對元件的影響，如圖 3.2.6-7 所示，固定 Al 的含量在 25%，並且變動 In 的成分從 1%變化到 7%，此時 strain 的大小從 0.49%變化到-0.17%其中 Al_{0.25}In_{0.05}Ga_{0.7}N 的 strain 最小，約為 0.04%。而當 In 的含量增加的時候，光侷限因素也慢慢的從 4.08%增加到 4.61%，但同時載子侷限能力也會隨之下降(能隙越小)，導致導致洩漏電流(current leakage)情形嚴重。表 3.2.6-2 為 strain、光侷限因素和材料能隙的列表。

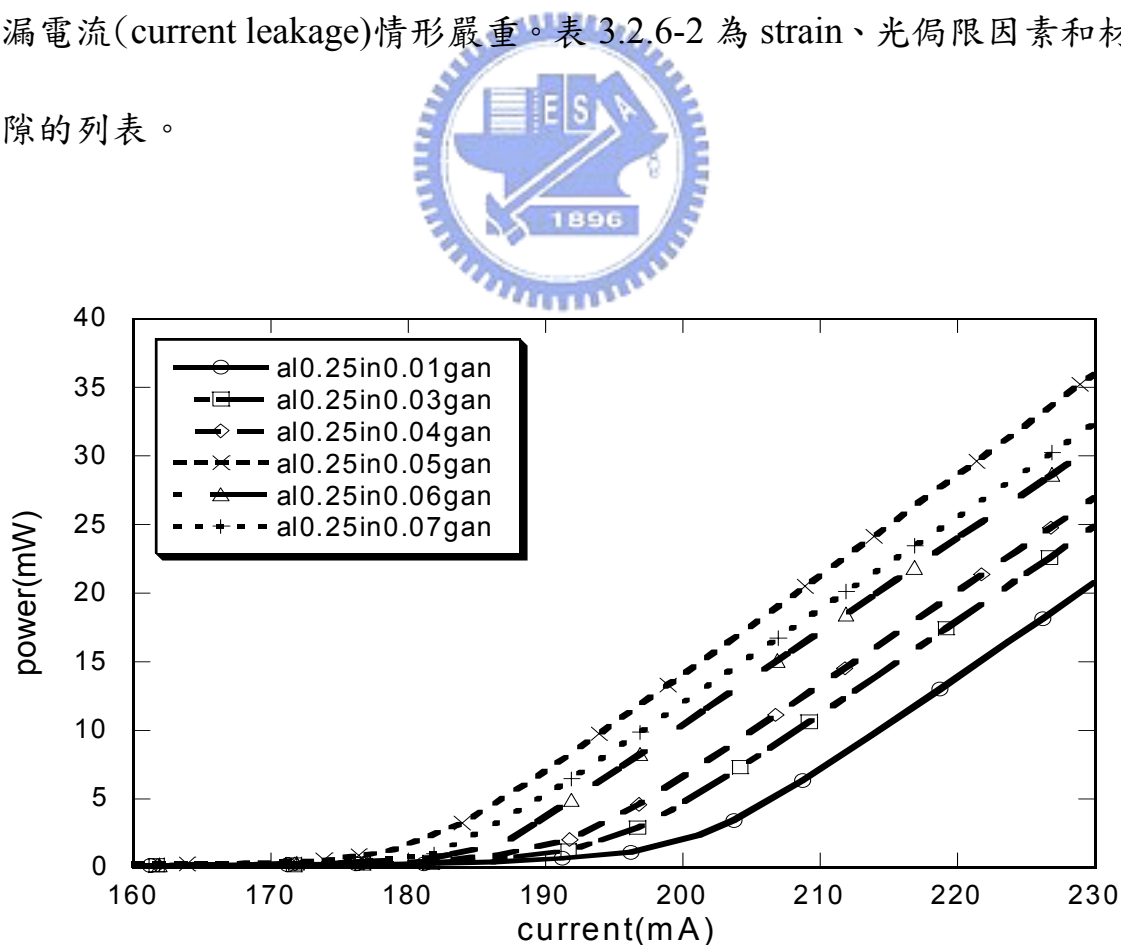


圖 3.2.6-7 固定Al的含量，變化In的成分所做的L-I特性曲線圖

從圖 3.2.6-8 可以看出由於 $\text{Al}_{0.25}\text{In}_{0.07}\text{Ga}_{0.68}\text{N}$ 的導電帶能隙補償差 (conduction band offset) 較低，所以洩漏電流情況較為嚴重，但也還不算太過於嚴重，在 370K 時只有 4% 的洩漏電流。其餘的當 In 的含量在 1-3% 的時候洩漏電流百分率幾乎是重疊的，並且控制在 1% 以內。

或許沒有直接的證據，確定當 strain 最小的時候，擁有最佳的特性，因為又會牽扯到光侷限因素和導電帶能隙補償差的問題，但我們已經由模擬的結果當中，找到一組最佳的電子阻擋層 (electron blocking layer)，也就是 $\text{Al}_{0.25}\text{In}_{0.05}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ 。

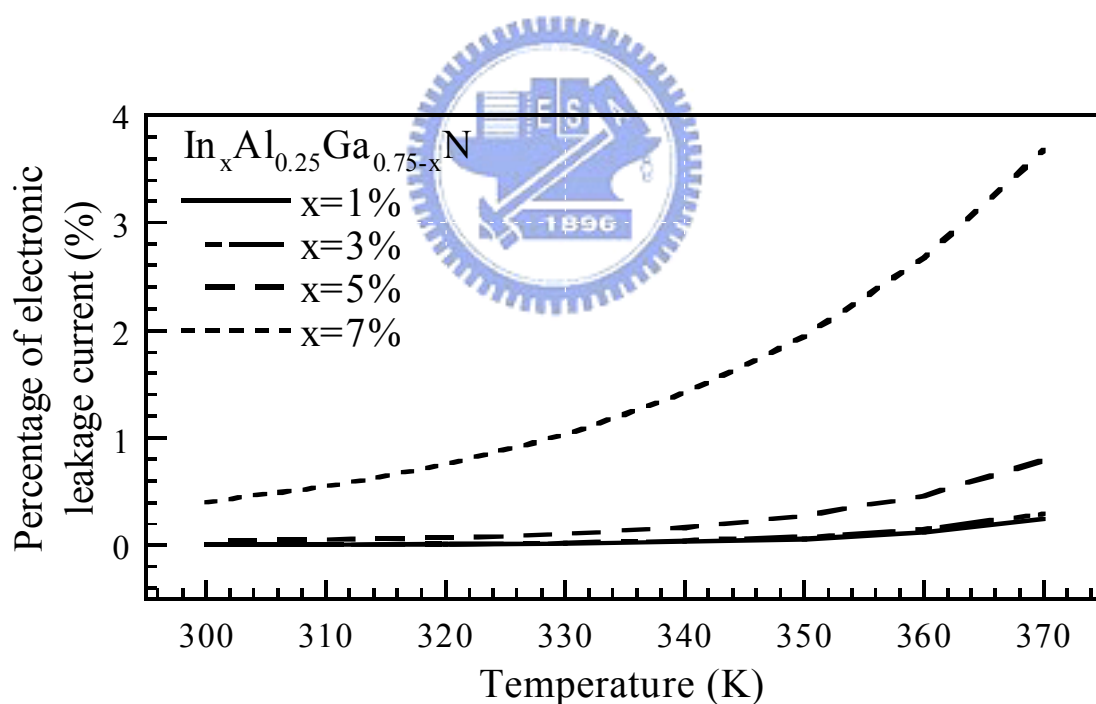


圖 3.2.6-8 $\text{In}_x\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75-x}\text{N}$ 溫度對洩漏電流

Material	Strain	Confinement factor Γ	Energy bandgap(eV)
Al _{0.25} In _{0.01} GaN	0.49%	4.08%	3.884
Al _{0.25} In _{0.03} GaN	0.27%	4.26%	3.825
Al _{0.25} In _{0.04} GaN	0.16%	4.34%	3.794
Al _{0.25} In _{0.05} GaN	0.04%	4.43%	3.763
Al _{0.25} In _{0.06} GaN	-0.06%	4.52%	3.731
Al _{0.25} In _{0.07} GaN	-0.17%	4.61%	3.698

表 3.2.6-2 固定Al的含量，變化In成分的strain、光侷限因素和材料能隙表

3.2.7 結論

模擬的結果指出使用四元的 AlInGaN 電子阻擋層，相較之下可以提供比三元材料 Al_{0.2}Ga_{0.8}N 更低的臨界電流，以及不錯的特性溫度。對於四元材料來說，當 Al 的含量大於 20%，且 Al:In 的比例為 5:1 時，特性溫度可以到達 134K。而當 Al 含量為 25%，In 含量為 5%時，可以得到一組最佳的電子阻擋層。

對此模擬的結果我們建議，主動層為 In_{0.1}Ga_{0.9}N/In_{0.02}Ga_{0.98}N 的半導體雷射結構，使用四元的材料 AlInGaN 作為電子阻擋層，Al 含量落在 20-35% 以及 In 的含量在 3-7%的時後，能夠為半導體雷射提供較好的特性和較高的特性溫度值。

3.3 365nm LED structure using AlInGaN alloys

在本節中我們使用四元化合物 AlInGaN 為主要結構，以 APSYS 軟體模擬 LED 元件的 L-I 特性圖，並且變動一些物理參數以符合實際的元件特性曲線，LED 元件是由工研院光電所奈米光電半導體中心提供，一些量測的數據是由本實驗室的量測系統取得。

3.3.1 元件結構

如圖 3.3.1 所示為本論文所模擬的結構，最底層是厚度 $3\mu\text{m}$ 的 n-GaN，並且在元件右方區塊設定一個 n-contact 的金屬電極，並且將此電極設定為 Ohmic contact，在 n-GaN 的上方為一層漸變式(graded layer)的結構，以 AlGaIn 所構成，其中的 Al 含量從 10% 漸變到 14%，厚度 50nm 的包覆層 (cladding layer)。

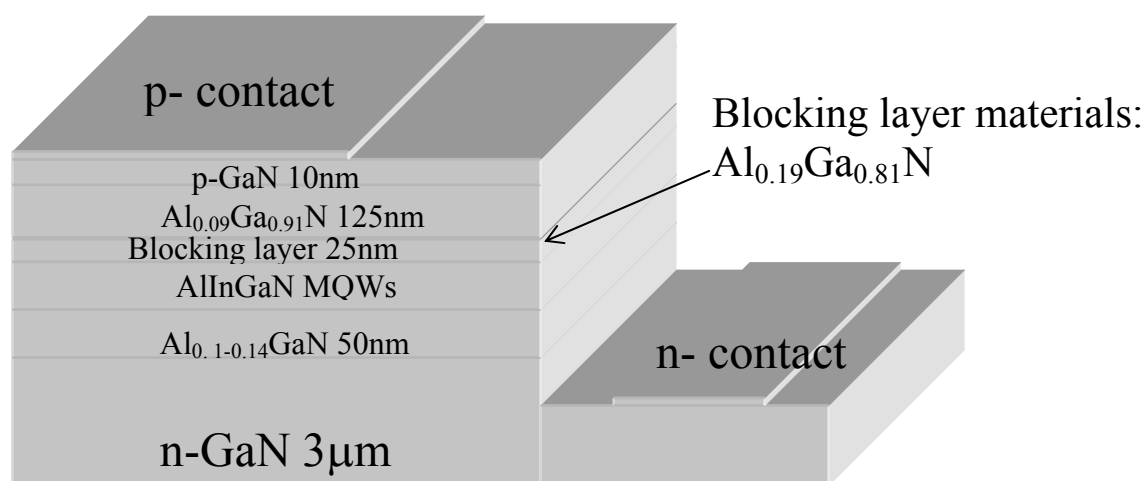


圖 3.3.1 發光二極體立體結構圖

緊靠著這一漸變層就是主動區的結構，由四元的材料 AlInGa_{0.99}N 所構成，是以 Al_{0.06}In_{0.075}Ga_{0.865}N 當作 quantum well，厚度為 2.5 nm；以 Al_{0.05}In_{0.01}Ga_{0.94}N 當作 quantum barrier，厚度為 3 nm。

和氮化材料系半導體雷射相同的是，擁有一層為 Al_{0.19}Ga_{0.81}N 電子阻擋層，厚度為 25 nm，這也是氮化系發光元件的特色之一。然後再往上一層為 p-Al_{0.09}Ga_{0.91}N，厚度 125 nm 的 cladding layer，最後一層則是 10 nm 的 p-GaN，當作 contact layer，其上的金屬也是設定為 Ohmic contact。模擬的參數設定同前面所述，參見 3.2.3 節-3.2.5 節。



3.3.2 模擬與結果分析

實際元件發光的波長，目前我們得知中心波長約在 368nm 左右。圖

3.3.2-1(a)是實際元件在室溫（300K）不同的電流值下，量測發光波長對發光強度的圖，從這張圖中我們可以觀察到波長位移的情況，從 10 mA 到 100 mA，波長總共位移了 3.6nm。

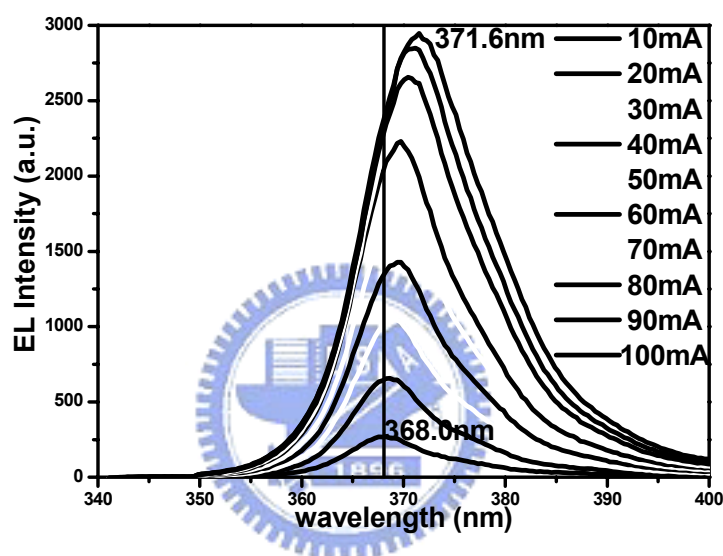


圖 3.3.2-1 (a)量測不同電流下，發光波長對強度光譜圖

圖 3.3.2-1 (b)是我們用模擬的方式，在不同電流下，發光波長對強度來作圖。由圖 3.3.2-2 可以觀察到，電流從 10 mA 增加到 100 mA 時波長位移了 4nm，顯示了這樣的模擬條件和實際的結果符合，結構所表現出來的特性相當的接近。

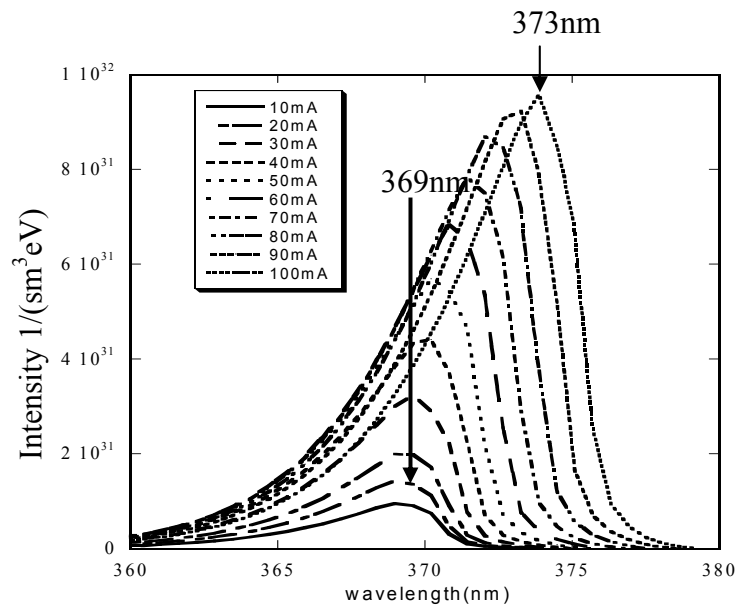


圖 3.3.2-1 (b)模擬不同電流下，發光波長對強度光譜圖

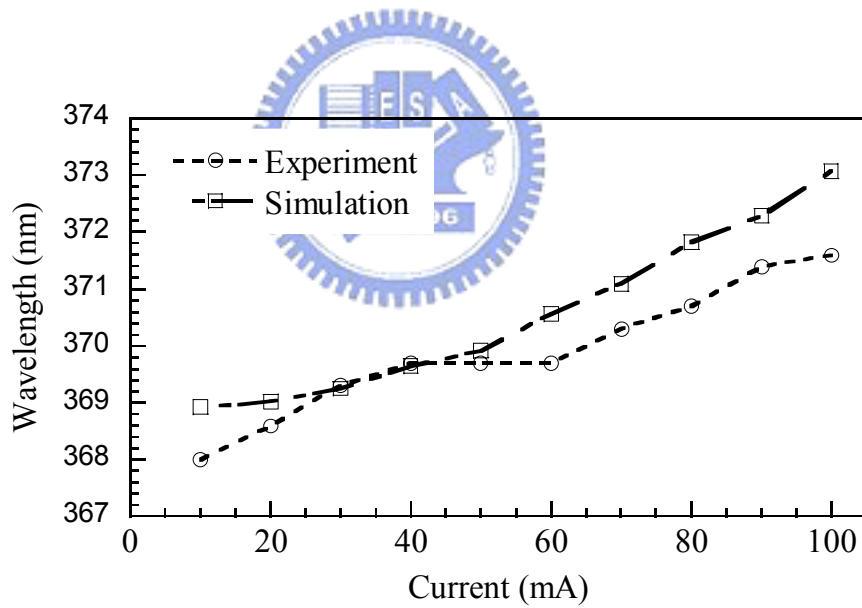


圖 3.3.2-2 量測值與模擬數據，波長分佈比較圖

3.3.2.1 模擬變溫量測輸出功率

圖 3.3.2-3 (a)、(b)為變溫下，所得得到的 L-I 特性曲線圖。圖(a)為實際量測的結果；圖(b)為我們使用軟體所模擬出來的結果。由於熱效應的關係，當電流加大時，產生 power 曲線向下彎曲，我們稱為 rollover 的現象。也可以觀察到，當溫度提高到 380 K 時，rollover 由 125 mA 提早到 100 mA 產生。在圖 3.3.2-3 中，也可以看到模擬的結果與實際量測的數值一致。

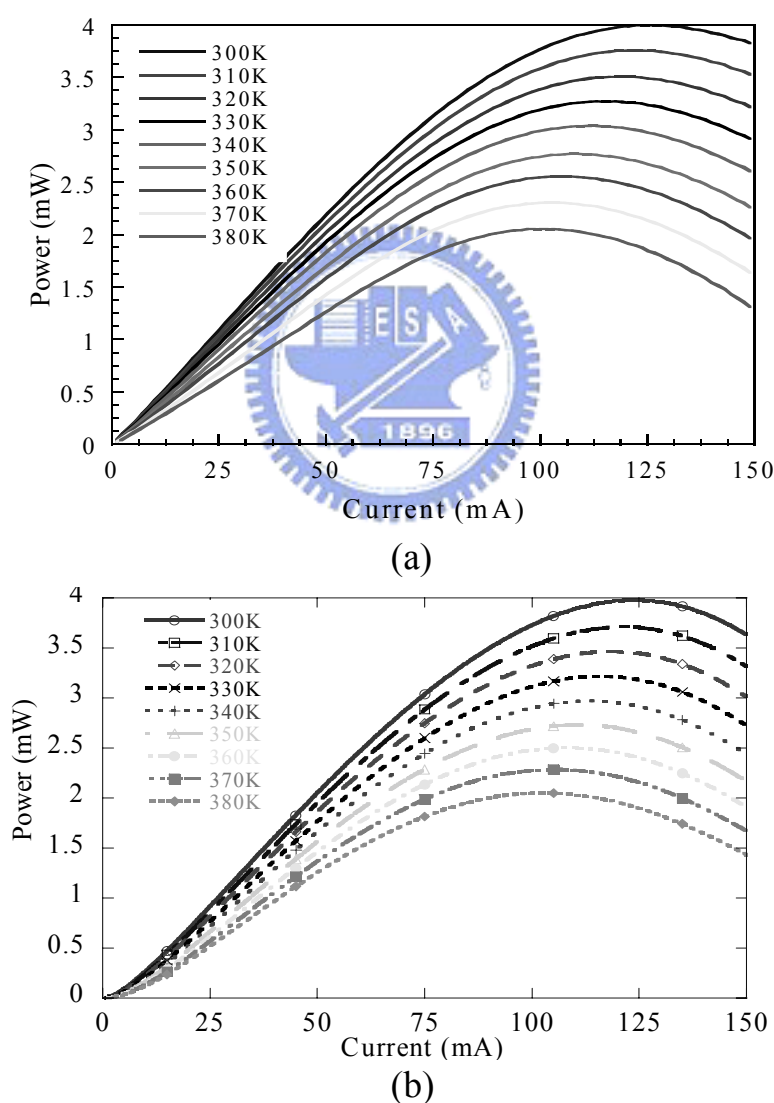


圖 3.3.2-3 不同溫度下的 L-I 曲線圖(a)實際量測結果
(b)使用 APSYS 軟體模擬結果

3.3.2.2 改變量子井數目的分析

在取得與實際元件相似的特性後，接下來我們改變量子井的數目，來探討不同的量子井數目，對於元件特性的影響。由圖 3.3.2-4 我們可以觀察到，在電流較低時，3 個量子井相對於其他的量子井數擁有較好的特性，但當電流超過 60 mA 時，由於電流注入較多，使得洩漏電流的機會增加，造成輸出功率慢慢的飽和，以致於逐漸下降的趨勢。

當量子井數目較多時，在高電流的侷限情況良好，擁有較好的特性，rollover 的現象，也延後發生。從圖 3.3.2-5 中，可以觀察到，當量子井的數量從 1 個增加到 5 個的時候，洩漏電流百分率也已經由 11.25% 降至 0.6% 左右了。我們把溫度提高至 380 K 時發現這樣的現象更為明顯了，只有 1 個量子井的結構，洩漏電流百分率增加到 18.7%，而擁有 5 個量子井以上結構的設計，即使溫度到達 380 K，仍然把洩漏電流壓低在 2% 以內(圖 3.3.2-6)。

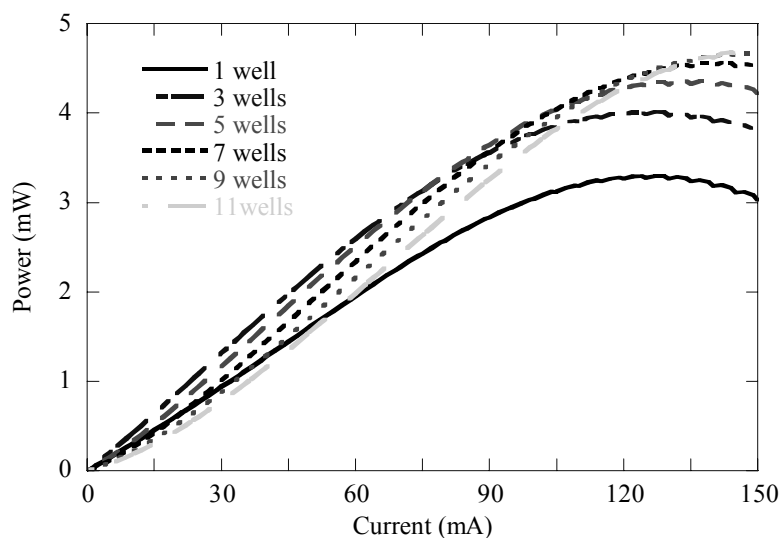


圖 3.3.2-4 在 300K 時不同量子井數的 L-I 曲線圖

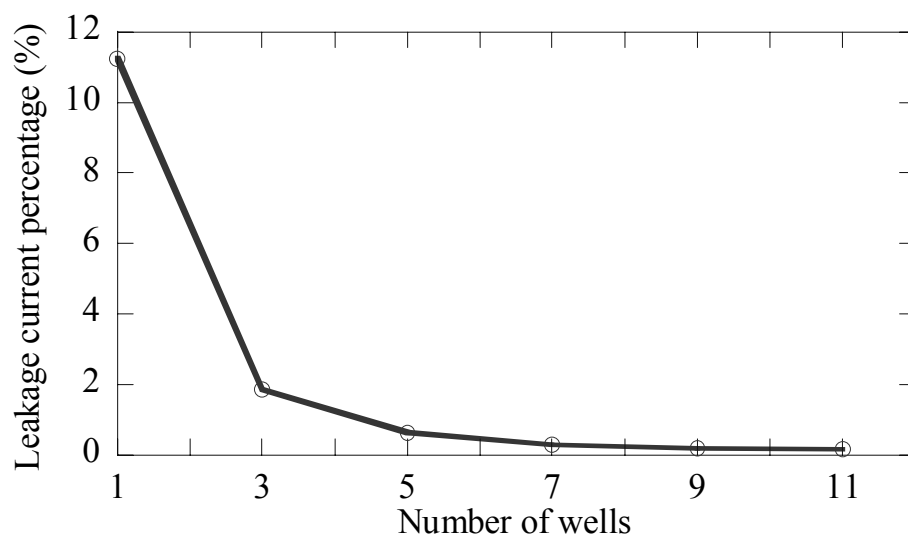


圖 3.3.2-5 在 300K 時量子井數量與洩漏電流百分率分佈圖

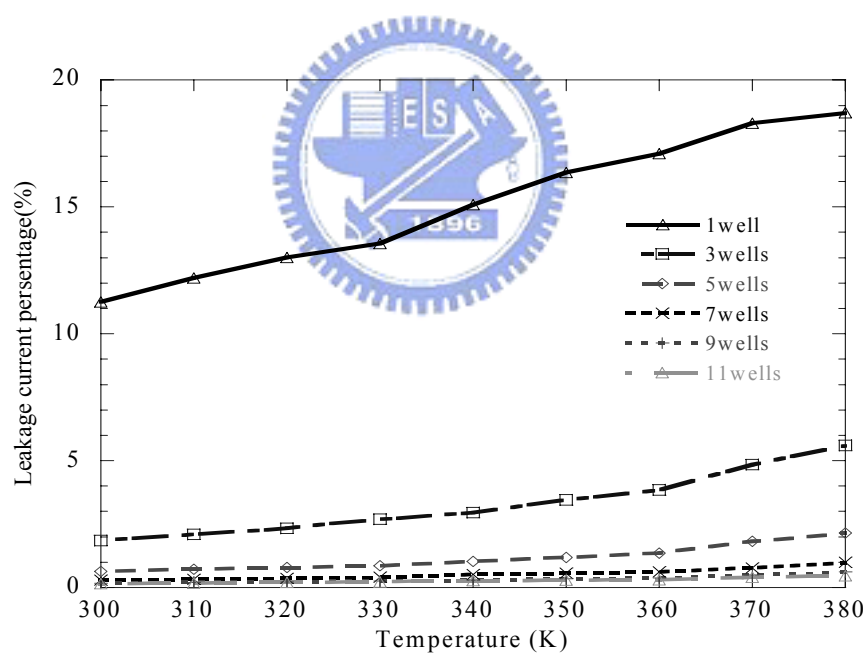


圖 3.3.2-6 不同溫度下，量子井數目與洩漏電流趨勢圖

3.3.2.3 改變阻擋層的分析

在這一節中我們對阻擋層(blocking layer)的厚度，以及阻擋層材料 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 中，鋁成分的含量做變化，來討論阻擋層對於 LED 輸出功率的影響。

首先我們固定阻擋層中 Al 的含量在 19%，模擬的溫度設定在 300 K 並選用 3 個量子井，作為活性層的結構，然後變化阻擋層的厚度，我們從 13nm 變化到 34 nm，從模擬的結果顯示，較厚的阻擋層的確會使得輸出功率略微上升，但實質上對於輸出功率的提升並不會有太大的幫助。而且要考慮到實際上越厚的阻擋層，要得到好的磊晶的品質並不容易，且由於是 p-type 的結構，摻雜濃度不易提高，也會造成電阻值的上升，對於元件的特性並不會有太大幫助。

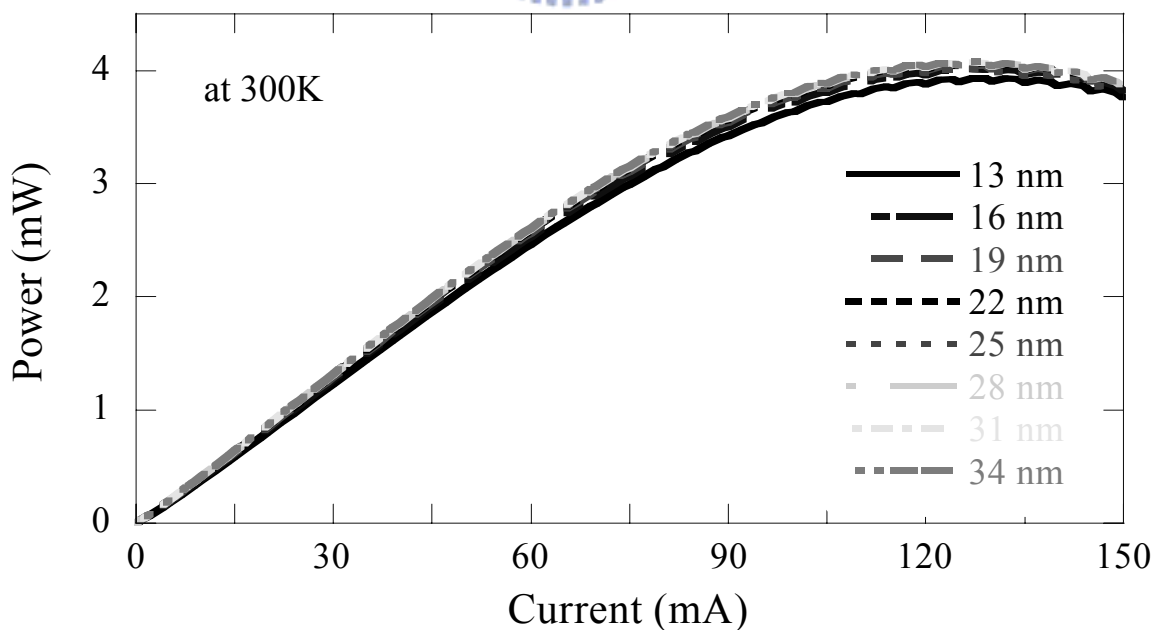
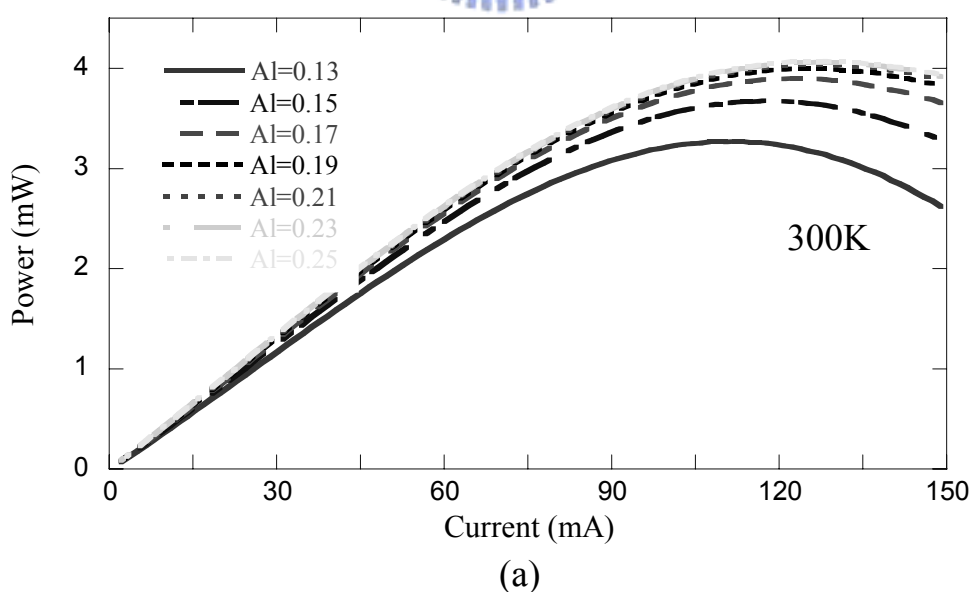


圖 3.3.2-7 改變阻擋層的厚度所得到的 L-I 特性曲線

接下來我們固定阻擋層的厚度在 25 nm，在溫度 300K 下，變化阻擋層中 Al 的含量，來討論阻擋層中因為 Al 含量的不同，是否會對輸出功率造成影響。我們將阻擋層 Al 的含量從 13%變化到 25%，得到圖 3.3.2-8(a)的結果。從圖中我們可以觀察到，在 Al 的含量超過 19%時，得到的 L-I 特性曲線幾乎一致，代表 Al 的含量在 19%時已經足夠，即使把 Al 的含量增加上去，對輸出功率的增加也沒有太大的影響。圖 3.3.2-9(a)從 leakage current 的角度來看，當 Al 的含量在 19%以上時，洩漏電流百分率，也在 2%以下，已經有效的將洩漏電流抑制。試著將溫度提高到 380 K，可以觀察到輸出功率，在高電流下，大幅的下降，尤其是 Al 含量較少的部分，rollover 的情況特別明顯，圖 3.3.2-8(b)。



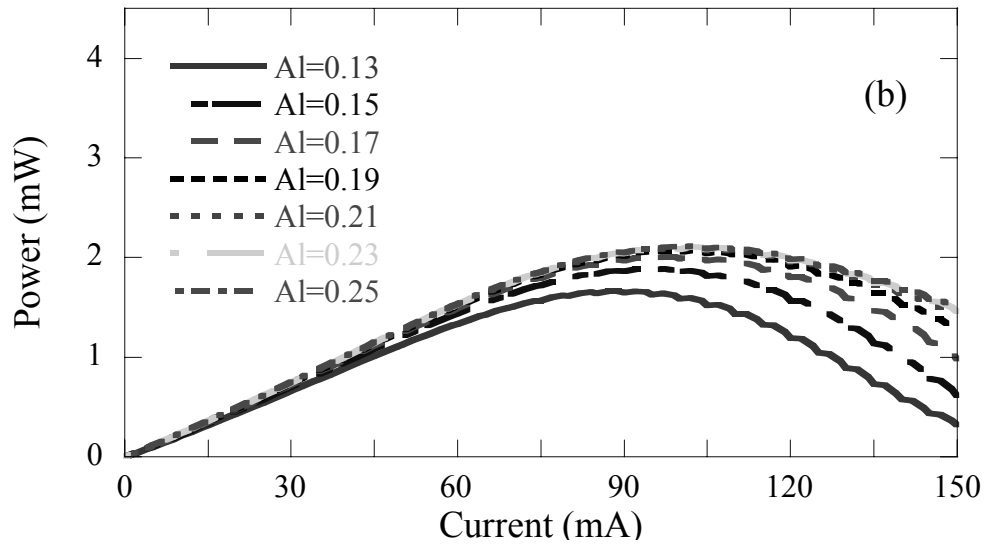


圖 3.3.2-8 (a)300K(b)380K 改變阻擋層 Al 含量
所得到的 L-I 特性曲線

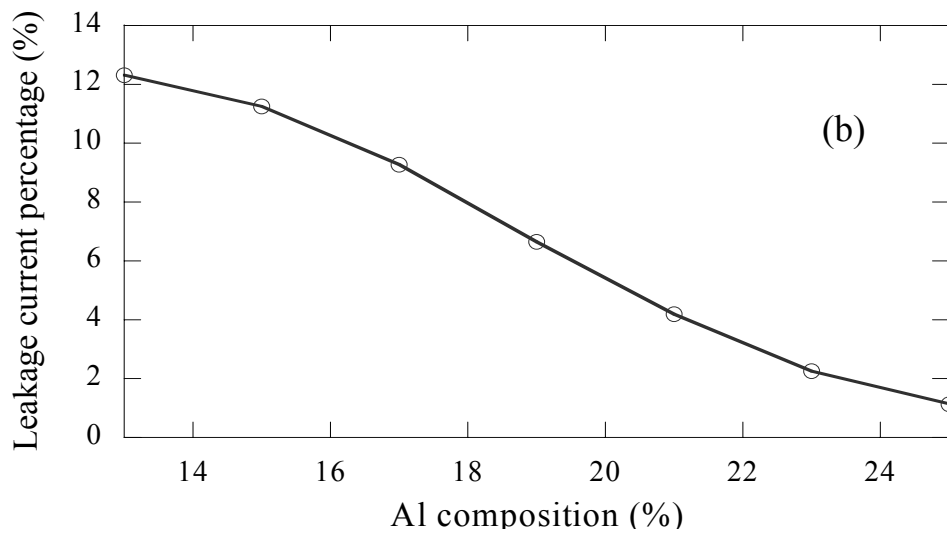
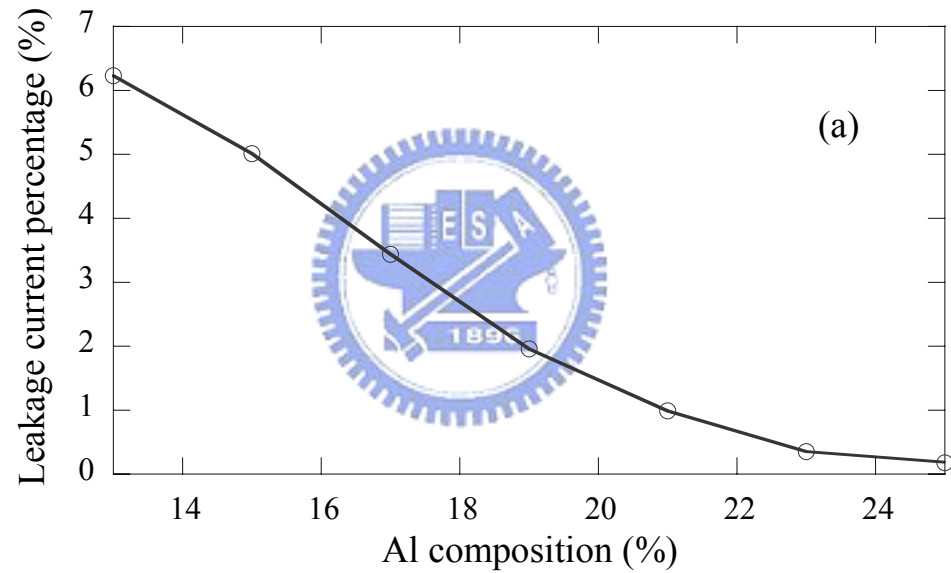


圖 3.3.2-9 (a)300K (b)380K 下不同 Al 含量之下的
洩漏電流百分率

接著在定電流下，討論不同的 Al 含量，隨著溫度上升，輸出功率的下降幅度，下降的幅度如圖 3.3.2-10 所示。在 120 mA 底下，溫度從 300 K 上升到 380 K，Al 含量只有 13% 的電阻阻擋層，下降的幅度達 65.47%。使用 Al 含量高於 19% 以上的電子阻擋層，降幅則為 52%。

若是操作電流在 150 mA 時，下降的幅度更大，使用 Al 含量為 13% 的電子阻擋層，下降的幅度高達 87.83%，而 Al 含量為 19% 和 25% 的電子阻擋層，下降的幅度分別為 67.4% 和 62.5%。

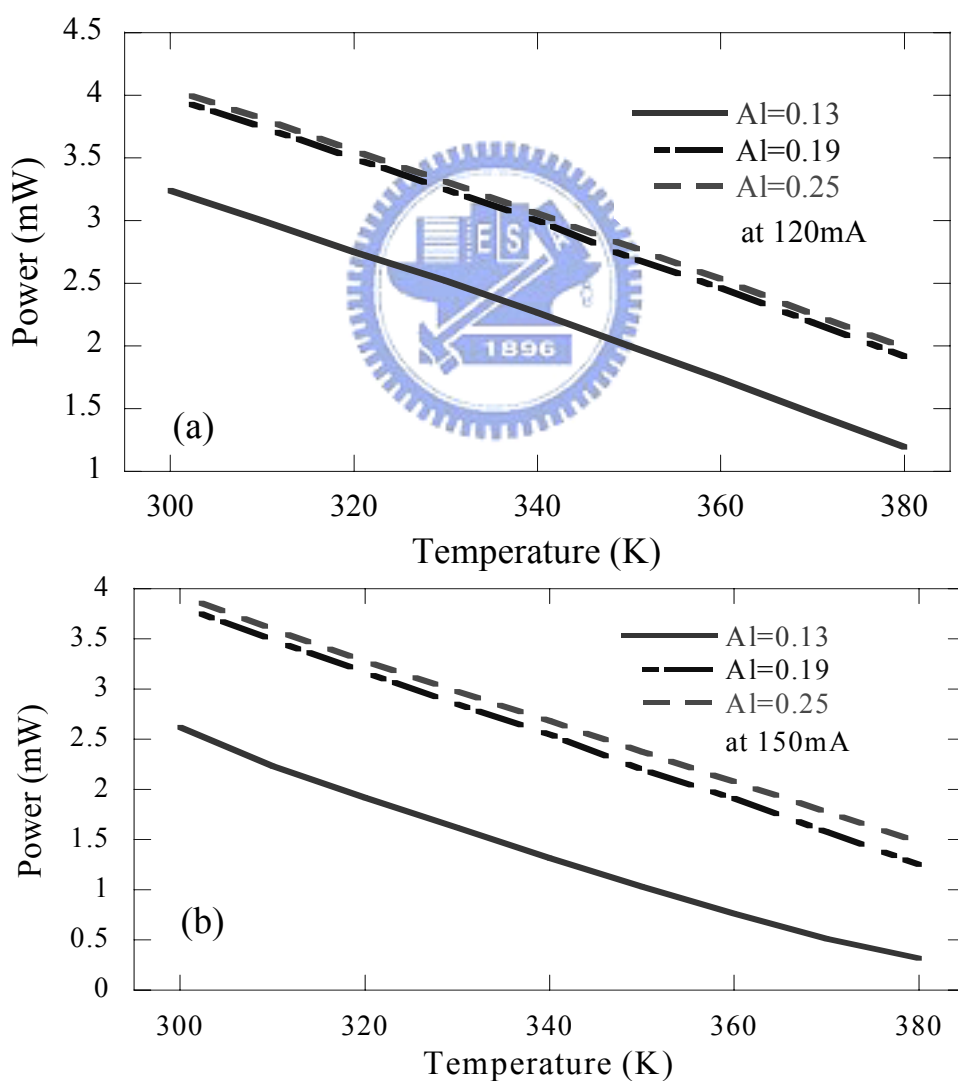


圖 3.3.2-10 (a)在 120 mA (b)在 150 mA 隨著溫度上升，輸出功率也隨之下降

3.3.3 結論

較多的量子井數目，的確可以為輸出功率，帶來好處，但實際上磊晶的時候必須要考慮到過多的量子井，也意味著更多的缺陷(defect)，以及載子要越過這麼多重量子井的難度也會提高，造成載子在量子井中分佈不均勻的情形，影響到電子電洞對復合的機率。

而從改變電子阻擋層條件的結果，我們可以知道，Al 含量不足的電子阻擋層，使得導電帶能隙補償差(conduction band offset)較小，洩漏電流的情形也就越嚴重，因此元件在設計的時候，電子阻擋層的導電帶能隙補償差要夠大，也就是 Al 的含量要達到一定的比例。另外在此一模擬的結構中，是使用 3 個量子井結構，這樣的量子井數目，對於抑制洩漏電流已經有不錯的效果，因此 Al 含量增加到 25% 的時候，輸出功率上升的幅度已經不明顯，呈現飽和的趨勢。

在溫度控制方面，對於元件本身的特性，一直都被當作是重要課題，從模擬的結果當中，也可以觀察到，雖然已經使用高鋁含量的電子阻擋層，但隨著溫度的上升，輸出功率的下降幅度仍高達 50% 以上，顯示良好的散熱，不讓元件周邊的溫度上升太高，對於元件本身輸出功率的特性，擁有相當大的影響。

參考文獻

1. Asano T, Tojyo T, Mizuno T, *et al.*” 100-mW kink-free blue-violet laser diodes with low aspect ratio”, *IEEE J. Quantum Electronics* **39**, 135 (2003)
2. V. Yu. Davydov *et al.*, “Absorption and Emission of Hexagonal InN. Evidence of Narrow Fundamental Band Gap”, *Phys. Status Solidi B* **229**, R1–R3 (2002)
3. V. Yu. Davydov *et al.*, “Band Gap of InN and In-Rich $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alloys ($0.36 < x < 1$)”, *Phys. Status Solidi B* **230**, R4–R6 (2002)
4. V. Yu. Davydov *et al.*, “Band Gap of Hexagonal InN and InGaN Alloys”, *Phys. Status Solidi B* **234**, 787 (2002)
5. Vurgaftman and J. R. Meyer,” Band parameters for nitrogen-containing semiconductors”, *J. Appl. Phys.* **94**, 615 (2003)
6. F. Bernardini and V. Fiorentini, “Nonlinear Behavior of Spontaneous and Piezoelectric Polarization in III–V Nitride Alloys”, *Phys. Stat. Sol. (a)* **190**, 65 (2002)
7. 薛道鴻, ”熱處理對氮化銦鎵量子井雷射結構之影響與壓電效應分析”, 國立中央大學物理研究所碩士論文 (2001)
8. 徐崑庭, “極化場對氮化鎵多重量子井光學特性之研究”, 國立台灣大學光電工程研究所碩士論文 (2001)
9. M. Asif Khan, *et al.*” Piezoelectric doping in AlInGaN/GaN eterostructures”, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 2806 (1999)



第四章 總結與未來展望

在 AlInGa_N as electron blocking layer for 405nm LD 的研究中，我們使用 In_{0.1}Ga_{0.9}N/In_{0.02}Ga_{0.98}N 當作二極體雷射(Laser Diode, LD)的主動層結構，發光波長約為 405nm。

在此結構下，根據模擬的結果，我們建議使用四元化合物 InAlGa_N 當作電子阻擋層，並且在鋁的含量在 20%-35%以及 Al:In=5:1 的條件下，可以得到比使用三元化合物 AlGa_N 還低的臨界電流值，以及一個不錯的特性溫度值(characteristic temperature, T_0)，特性溫度值大約維持在 134K-140K 左右。三元化合物 AlGa_N 其特性溫度值大約為 147K，此值略好於以四元化合物，臨界電流值對溫度的變化較不敏感。但使用四元化合物 InAlGa_N 當作電子阻擋層，其特性曲線卻是明顯提升，輸出功率也是明顯的高於三元化合物當作電子阻擋層的結構。目前在模擬的部分已經有了初步結果，未來希望以實際的磊晶技術，以及相關製程，來實際驗證理論的模擬。

在另一個主題為 365nm LED structure using AlInGa_N alloys 的研究中，由於是較為新穎的材料，發光機制尚未有明確的定論，一些相關的研究許多的實驗室仍在進行中。

對於材料的參數大致上已經收集完全，我們也已經初步建立四元化合物的模型，並且用 InAlGa_N 當作主動層和實際元件所量測的特

性符合，接下來的工作，會嘗試將四元材料的結構，往更短波長做設計，也希望能夠將結構實現，並且結合磊晶的技術，來改善功率太小的問題。或是朝向 365nm 的半導體雷射做設計，都是未來可以繼續的課題。



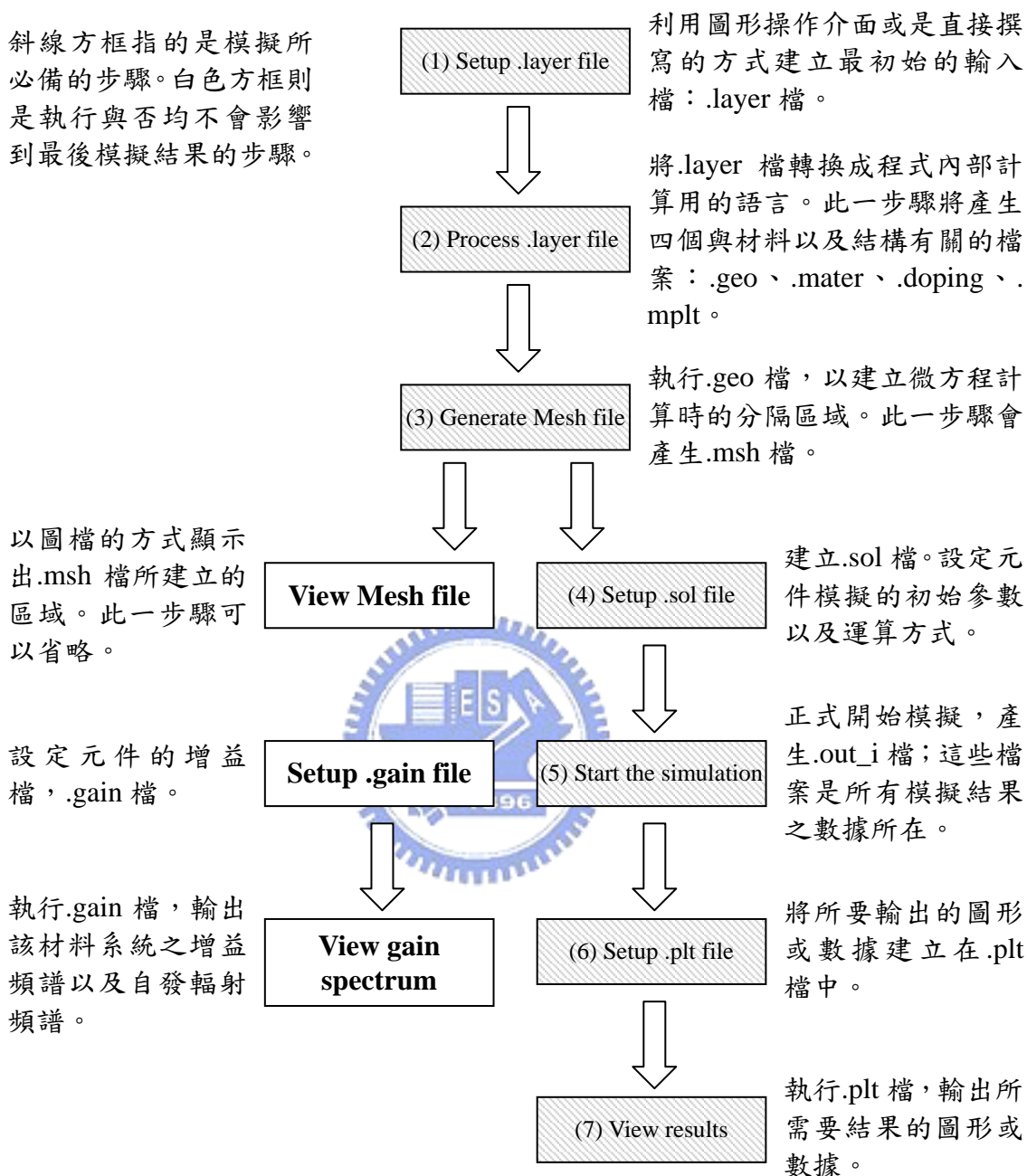
Appendix A. Basic software user guides

LASTIP 軟體主要的操作程序是利用輸入元件的材料系統、結構設定以及一些初始參數，再經過檔案轉換的過程將原始的輸入檔轉成程式內部計算用的語言後，便可以執行模擬。詳細的操作流程如下圖所示，其中方框內的文字敘述與軟體面板上操作按鈕的文字均一致。值得注意的是，在操作 *LASTIP* 軟體模擬元件之主要發光波長時，.gain 檔是可先行獨立被操作，亦即使用者可執行有關於.gain 檔的步驟，來決定元件在此發光波長下活性層該如何設計，而後再將此一活性層設計(包含量子井寬度與材料各成分比濃度)輸入至.layer 檔內，再依如下所示步驟進行模擬，即可得到模擬結果。



附註：

斜線方框指的是模擬所必備的步驟。白色方框則是執行與否均不會影響到最後模擬結果的步驟。



A.1 步驟一：建立.layer 檔

利用簡單的程式語言架構起元件的結構、材料成份，是最初始的輸入檔。建立.layer 檔的方法常用的有兩種，一種是先利用程式內建的圖形操作介面（直接執行“Draw GUI”，就會開啟此一介面。）架構起整個結構，再轉換檔案成.layer 檔；另外一種方式則是直接撰寫.layer 檔。一般而言，如果是要建立新的結構，往往會使用前者的方式；如果只是要對舊結構作稍許的修改或調變材料成份，則直接修改.layer 檔會比較方便（在 *LASTIP* 軟體中，所有參數的單位均設定為 MKS 制）。

A1.1 直接撰寫.layer 檔

程式中以 column 代表元件的縱向橫截面特性；大部份的光電半導體元件只需要一個 column 即足以描述其系統結構，但是在某些特殊結構的情況下（如氮化物元件的脊狀結構）則需要用到兩個或以上的 column。其中 w 指的是 column 的寬度， $mesh_num$ 與 r 則是指電腦在進行差分計算時所區分的網目數目以及網目分佈的等比級數，網目的數目越多則模擬結果越準確，但所需要的計算時間也就越多，而且有時設定過大的網目數目時，在執行程式時有時會因為記憶體不足而無法進行模擬，一般而言網目數目大多設定在 10 以下。在.layer 檔第一行指令內 column 這一段中所輸入的網目數值代表整個 column 橫向的網目分佈，而在元件中各結構層中所輸入的數值（如 $n = 3$ ）則代表各層縱向的網目分佈。程式會依據我們所輸入的 $mesh_num$ 與 r 值來對網目進行等比分佈（由下到上、由左至右），因此若輸入的 r 值為 1，則代表網目均勻分佈，若 r 值小於 1，則表示網目分佈越來越密。一般來說，我們常將活性區下方薄膜的 r 值設定為小於 1，活性區上方薄膜的 r 值則設為大於 1，以增加活性區邊界區域的計算（其他區域，包括活性區，都將 r 值設定為 1。）。

程式中的電極設定以 $bottom_contact$ 以及 $top_contact$ 表示；我們可以在

這裡設定電極的橫向範圍 (from、to)，邊界參數 (contact_num) 以及電極型式 (contact_type) 等等，其中電極型式可以設定為 ohmic 以及 schottky 兩種。

LASTIP 程式在設定結構時主要是依據由下到上、由左至右的原則，將整體結構分成各層 (layer) 來加以個別設定。在各層中可以輸入材料名稱 (macro_name)、成份比例 (var1、var2...) 以及該層厚度 (d)、摻雜濃度 (n_doping1 或 p_doping1) 等參數；由於程式會依據所輸入的材料名稱自動至 crosslight.mac 檔案中載入所有的材料參數，因此這裡所輸入的材料名稱必須跟巨集檔內該檔案中的名稱設定一致，如以巨集檔名稱 ingaasp_xy 為例，於 .layer 中使用此一結構層時，就必須輸入 var1 =, var2 =，其中 var1 與 var2 分別表示 ga 與 as 的成分比濃度，否則在執行程式轉檔時就會出現錯誤訊息，使用者必須熟練程式，當程式出現各種錯誤訊息時要有能力找出錯誤所在加以修正。

此外，在某些層中會特別設定 xp1 以及 xp2 兩個參數，其所代表意義是指對邊界進行額外更詳細的計算 (extr_mesh_point)；其中 xp1 代表的是此一層的下邊界，xp2 則為上邊界。將此一數值設定為 1 則代表開啟此一額外計算功能，設定為 0 或者根本不設定此一參數則代表不使用額外計算功能。在正常的情況下，我們只在活性區以及最靠近活性區的邊界使用此一功能。

活性層的設定跟上述各層的設定極為相似，只是要多設定活性材料 (active_macro) 及其成份比例 (avar1、avar2...)。其中活性材料若為塊材，則直接輸入其材料名稱；活性材料若為量子井結構，則需以 A/B 的形式輸入，A 為活性層材料(well)，B 為披覆層材料(barrier)。相關的材料名稱可參考 crosslight.mac 檔或使用手冊之說明。

A.1.2 步驟二：Process .layer file

此一步驟是將初始的輸入檔 (.layer 檔) 轉換成 *LASTIP* 內部所使用的語

言，經由此一步驟會產生.geo 檔、.mater 檔、.doping 檔以及.mplt 檔四個檔案。這些檔案個別描述元件的結構、材料、摻雜濃度...等特性，並且會被使用在之後的正式模擬中。

A.1.3 步驟三：Generate Mesh file

此一步驟是將上述的.geo 檔轉換成.msh 檔，也就是將網目分佈的資料轉換成電腦所能運算的檔案。完成後還可以利用“View Mesh file”的步驟來觀看元件的網目分佈（此一步驟的完成與否並不會影響到模擬結果，因此往往被省略掉）。

A.1.4 步驟四：Setup .sol file

此一檔案是模擬過程中最主要的輸入檔，大部份的計算時間都會花費在這裡。.sol 檔的建立可以利用程式內建的交談式介面（直接執行“Setup .sol file”即可開啟此一介面），依其指示一步一步輸入，或者是直接撰寫的方式。由於.sol 檔的內容比較簡單且沒有變化，因此我們大部份都利用舊有的檔案來直接加以修改，再變更檔案名稱即可。

檔案的一開始是在載入之前已經設定好的結構與參數，如.msh 檔、.mater 檔以及.doping 檔，並將模擬結果資料設定為以.out 檔的型式輸出。接著再設定牛頓法的非線性參數（newton_par），如 damping_step、max_iter 等；除非特殊需要，否則這些參數不會被改變。

init_wave 的設定則是在輸入解波方程時的一些初始值，其中 point_ll 與 point_ur 代表解波方程時所要計算的方形區域（point_ll 為下方、左邊的邊界點，point_ur 則為上方、右邊的邊界點），此一區域必須小於或等於之前所輸入的元件大小；fld_center 則是預計的光學模式中心（optical mode center），此一數值僅僅只是一個初始值，程式在執行的過程中會自動調整至之正確的數值；length 指的是雷射腔長度，由於之前的結構設計與參數設

定均是二維的，因此加上此一參數後，就能夠架構成完整的三度空間元件；backg_loss 則為系統的背景損失參數（background loss coefficient），各層的吸收...等效應都包含在此一參數內；init_wavel 與 wavel_range 分別代表預估的雷射輸出波長以及可能的雷射波長範圍，程式會從 init_wavel 的數值開始計算波方程，並在 wavel_range 的範圍中尋找真正的增益波峰；front_back 則是在設定雷射前後反射鏡的反射率，如果此一參數改成 mirror_ref，則表示前後反射鏡的反射率均一致。

接下來所要設定的則是程式作運算時之電壓或電流條件（scan）。如果我們選擇的是電壓，則程式會從初始電壓依不定的間隔（bias step 或 bias interval）增加至最終電壓，並在每一個指定間隔均輸出模擬資料。value_to 指的是計算過程中的運算終點；print_step 則是上述所謂的指定間隔（電壓間隔或電流間隔...等），程式會在每個指定間隔將模擬所得的資料輸出至電腦中（以.out 檔的型式輸出）；min_step 以及 max_step 則是模擬所允許的最小與最大的條件間隔。

跟 A.1 小節一樣，本小節的內容是選擇較常用在.sol 檔中的參數來加以說明，如果需要用到其他的參數或指令，可以在使用手冊中找到相關的說明。

A.1.5 步驟五：Start the simulation

在執行此一步驟後，*LASTIP* 程式開始正式進行模擬，並將模擬所得的結果以.out 檔的型式紀錄在硬碟中。當程式進行運算的時候，所有的運算進度會以及時顯示或存成 report 檔的方式顯示出來，因此如果程式執行的過程中有任何的錯誤、問題都可以從其中看出端倪，再依 report 黨所告知之錯誤或原因對.layer 或.sol 檔進行修改即可。Crossligh 公司也額外提供當使用者遇到模擬上的困難而無法解決時的線上詢問功能，不過只要使用者熟悉此一軟體，任何問題必可自行解決。

A.1.6 步驟六：Setup .plt file

此一步驟是在設定欲輸出模擬結果的輸入檔。在上一步驟中我們已經獲得全部的模擬結果資料（.out 檔），而在這裡則是要設定哪些資訊是我們所想要的，然後在下一個步驟將這些選定的資訊從.out 檔中解析出來，並以圖形或資料點的方式呈現在我們面前。

要設定.plt 檔仍然有兩種主要方式，一種就是直接執行程式中的 Setup .plt file 以開啟程式內建的交談式介面，並依其指示一步步輸入；另外一種方式則是手動撰寫.plt 檔。跟.layer 檔一樣，如果是要建立新的.plt 檔，則建議使用前者的方式；相反的，如果所要取得的資訊都一樣，則建議以直接修改.plt 檔的方式會比較方便。

A.1.7 步驟七：View results

執行上述的.plt 檔以取得.out 檔中所紀錄的資料。



Appendix B. code for AlInGaN as electron blocking layer for 405nm LD

*.layer

```
begin_layer
$
column column_num=1 w=2. mesh_num=5 r=1.
column column_num=2 w=2 mesh_num=10 r=1
column column_num=3 w=2. mesh_num=5 r=1.
column column_num=4 w=2 mesh_num=2 r=1.
column column_num=5 w=2 mesh_num=5 r=1.
top_contact column_num=2 from=0 to=2 contact_num=1 contact_type=ohmic
top_contact column_num=5 from=0 to=2 contact_num=2 contact_type=ohmic
$
layer_mater macro_name=gan.temp column_num=1 var1=300
layer_mater macro_name=gan.temp column_num=2 var1=300
layer_mater macro_name=gan.temp column_num=3 var1=300
layer_mater macro_name=gan.temp column_num=4 var1=300
layer_mater macro_name=gan.temp column_num=5 var1=300
layer d=2.5 n=5 r=1 n_doping1=2.00e+024 n_doping2=2.e+24 n_doping3=2.e+24 &&
  n_doping4=2.e+24 n_doping5=2e+24
$
layer_mater macro_name=gan.temp column_num=1 var1=300
layer_mater macro_name=gan.temp column_num=2 var1=300
layer_mater macro_name=gan.temp column_num=3 var1=300
layer_mater macro_name=air column_num=4
layer_mater macro_name=void column_num=5
layer d=0.5 n=5 r=1. n_doping1=2.e+24 n_doping2=2.e+24 n_doping3=2.e+24
$
layer_mater macro_name=alga.temp var1=0.07 var2=300 column_num=1
layer_mater macro_name=alga.temp var1=0.07 var2=300 column_num=2
layer_mater macro_name=alga.temp var1=0.07 var2=300 column_num=3
layer_mater macro_name=air column_num=4
layer_mater macro_name=void column_num=5
layer d=1.0 n=5 r=1 n_doping1=2.e+24 n_doping2=2.e+24 n_doping3=2.e+24
$
```



```

layer_mater macro_name=gan.temp column_num=1 var1=300.
layer_mater macro_name=gan.temp column_num=2 var1=300.
layer_mater macro_name=gan.temp column_num=3 var1=300.
layer_mater macro_name=air column_num=4
layer_mater macro_name=void column_num=5
layer d=0.1 n=5 r=1.00 xp2=1 n_doping1=2.e+24 n_doping2=2.e+24 &&
    n_doping3=2.e+24
$
layer_mater macro_name=ingan.temp column_num=1 var1=0.02 var2=300
layer_mater macro_name=ingan.temp column_num=2 var1=0.02 var2=300
layer_mater macro_name=ingan.temp column_num=3 var1=0.02 var2=300
layer_mater macro_name=air column_num=4
layer_mater macro_name=void column_num=5
layer d=0.005 n=10 r=1 xp1=1 xp2=1 n_doping1=2.e+23 n_doping2=2.e+23 &&
    n_doping3=2.e+23
$
layer_mater macro_name=ingan.temp column_num=1 var1=0.1 var2=300. &&
    active_macro=InGaN/InGaN avar1=0.1 avar2=0.02 avar3=300.
layer_mater macro_name=ingan.temp column_num=2 var1=0.1 var2=300. &&
    active_macro=InGaN/InGaN avar1=0.1 avar2=0.02 avar3=300.
layer_mater macro_name=ingan.temp column_num=3 var1=0.1 var2=300. &&
    active_macro=InGaN/InGaN avar1=0.1 avar2=0.02 avar3=300.
layer_mater macro_name=air column_num=4
layer_mater macro_name=void column_num=5
layer d=0.0025 n=10 r=1.00 xp1=1 xp2=1 n_doping1=2.e+23 n_doping2=2.e+23 &&
    n_doping3=2.e+23
$
layer_mater macro_name=ingan.temp column_num=1 var1=0.02 var2=300
layer_mater macro_name=ingan.temp column_num=2 var1=0.02 var2=300
layer_mater macro_name=ingan.temp column_num=3 var1=0.02 var2=300
layer_mater macro_name=air column_num=4
layer_mater macro_name=void column_num=5
layer d=0.005 n=10 r=1 xp1=1 xp2=1 n_doping1=2.e+23 n_doping2=2.e+23 &&
    n_doping3=2.e+23
$
layer_mater macro_name=ingan.temp column_num=1 var1=0.1 var2=300. &&
    active_macro=InGaN/InGaN avar1=0.1 avar2=0.02 avar3=300.
layer_mater macro_name=ingan.temp column_num=2 var1=0.1 var2=300. &&

```

```

    active_macro=InGaN/InGaN avar1=0.1 avar2=0.02 avar3=300.
layer_mater macro_name=ingan.temp column_num=3 var1=0.1 var2=300. &&
    active_macro=InGaN/InGaN avar1=0.1 avar2=0.02 avar3=300.
layer_mater macro_name=air column_num=4
layer_mater macro_name=void column_num=5
layer d=0.0025 n=10 r=1.00 xp1=1 xp2=1 n_doping1=2.e+23 n_doping2=2.e+23 &&
    n_doping3=2.e+23
$
$
layer_mater macro_name=ingan.temp column_num=1 var1=0.02 var2=300
layer_mater macro_name=ingan.temp column_num=2 var1=0.02 var2=300.
layer_mater macro_name=ingan.temp column_num=3 var1=0.02 var2=300.
layer_mater macro_name=air column_num=4
layer_mater macro_name=void column_num=5
layer d=0.005 n=10 r=1 xp1=1 xp2=1 n_doping1=2.e+23 n_doping2=2.e+23 &&
    n_doping3=2.e+23
$
layer_mater macro_name=algaN.temp column_num=1 var1=0.2 var2=300.
layer_mater macro_name=algaN.temp column_num=2 var1=0.2 var2=300.
layer_mater macro_name=algaN.temp column_num=3 var1=0.2 var2=300.
layer_mater macro_name=air column_num=4
layer_mater macro_name=void column_num=5
layer d=0.02 n=5 r=1. p_doping1=1.e+23 p_doping2=1e+23 p_doping3=1.e+23
$
layer_mater macro_name=gan.temp column_num=1 var1=300.
layer_mater macro_name=gan.temp column_num=2 var1=300.
layer_mater macro_name=gan.temp column_num=3 var1=300.
layer_mater macro_name=air column_num=4
layer_mater macro_name=void column_num=5
layer d=0.1 n=5 r=1 p_doping1=1.e+23 p_doping2=1.e+23 p_doping3=1.e+23
$
layer_mater macro_name=algaN.temp var1=0.07 var2=300 column_num=1
layer_mater macro_name=algaN.temp var1=0.07 var2=300 column_num=2
layer_mater macro_name=algaN.temp var1=0.07 var2=300 column_num=3
layer_mater macro_name=air column_num=4
layer_mater macro_name=void column_num=5
layer d=0.5 n=5 r=1.00 p_doping1=1.e+23 p_doping2=1.e+23 &&
    p_doping3=1.e+23

```

```

layer_mater macro_name=void column_num=1
layer_mater macro_name=algan.temp var1=0.07 var2=300 column_num=2
layer_mater macro_name=void column_num=3
layer_mater macro_name=void column_num=4
layer_mater macro_name=void column_num=5
layer d=0.2 n=5 r=1.00 p_doping2=1.e+23
$
layer_mater macro_name=void column_num=1
layer_mater macro_name=gan.temp column_num=2 var1=300.
layer_mater macro_name=void column_num=3
layer_mater macro_name=void column_num=4
layer_mater macro_name=void column_num=5
layer d=0.1 n=5 r=1. p_doping2=0.5e+24
$
end_layer

```

***.sol**

```

begin
self_consistent wave_range=0.001
$
interface model=charge fix_charge=-3e15 y=4.1
interface model=charge fix_charge=-1.2e16 y=4.105
interface model=charge fix_charge=+1.2e16 y=4.1075
interface model=charge fix_charge=-1.2e16 y=4.1125
interface model=charge fix_charge=+1.2e16 y=4.115
interface model=charge fix_charge=+1.26e+16 y=4.12
interface model=charge fix_charge=-9.5e15 y=4.14
temperature temp=300
active_temper ref_temper=300 delta_active_loss=4500
contact num= 1 type=ohmic thermal_type=1 lattice_temp=300
contact num= 2 type=ohmic thermal_type=1 lattice_temp=300
set_active_reg active_loss=4500 thickness=0.0025
$
load_mesh mesh_inf=a0526a.msh
include file=a0526a.mater
include file=a0526a.doping
output sol_outf=a0526a.out

```

```

newton_par damping_step=5 max_iter=100 print_flag=3
optical_field profile=effective_index
sor_par max_iter=3000 print_sor=noprint
equilibrium
wave_boundary point_ll=[ 0 3 ] &&
point_ur=[ 6 5.04 ]
init_wave length=500 backg_loss=4500 &&
boundary_type=[1 1 1 1] init_wavel= 0.41 front_back=[0.18 0.5] &&
wavel_range=[ 0.38 0.43 ]
direct_eigen
multimode mode_num=3
newton_par damping_step=5 &&
max_iter=150 opt_iter =75 stop_iter=20 print_flag=3
scan var=voltage_2 value_to= -0.35E+01 print_step= 0.35E+01 &&
init_step= 0.4E+00 min_step=1.e-3 max_step=0.8
scan var=current_2 value_to=350 print_step=35 &&
init_step=0.5 min_step=1.e-4 max_step=10
end

```

***.plt**

```

begin_pstprc
plot_data plot_device=postscript
get_data main_input=A0526a.sol &&
sol_inf=A0526a.out xy_data=[12 12] scan_data=[1 12]
plot_1d variable=band from=[ 3 0.] to=[ 3 5.341] &&
data_file=band.txt
plot_1d variable=band from=[ 3 4] to=[ 3 4.41] &&
data_file=band-ex.txt
plot_1d variable=real_index from=[ 3 0] to=[ 3 5.341] &&
data_file=real_index.txt
plot_1d variable=wave_intensity from=[ 3 0] to=[ 3 5.341] &&
data_file=wave_intensity.txt
plot_1d variable=elec_conc from=[ 3 0] to=[ 3 5.341] &&
data_file=elec_conc.txt
plot_1d variable=hole_conc from=[ 3 0] to=[ 3 5.341] &&
data_file=hole_conc.txt
plot_1d variable=elec_curr_y from=[ 3 0] to=[ 3 5.341] &&

```



```

    data_file=elec_curr_y.txt
plot_1d variable=joule_heat from=[ 3 0] to=[ 3 5.341] &&
    data_file=joule_heat.txt
plot_1d variable=recomb_heat from=[ 3 0.] to=[ 3 5.341] &&
    data_file=recom_heat.txt
plot_1d variable=recomb_rad from=[ 3 0.] to=[ 3 5.341] &&
    data_file=recom_rad.txt
plot_1d variable=recomb_st from=[ 3 0.] to=[ 3 5.341] &&
    data_file=recom_st.txt
plot_1d variable=local_gain from=[ 3 0.] to=[ 3 5.341] &&
    data_file=local_gain.txt
plot_1d variable=optic_heat from=[ 3 0.] to=[ 3 5.341] &&
    data_file=optic_heat.txt
plot_1d variable=thomson_heat from=[ 3 0.] to=[ 3 5.341] &&
    data_file=thomson_heat.txt
plot_1d variable=peltier_heat from=[ 3 0.] to=[ 3 5.341] &&
    data_file=peltier_heat.txt
$
plot_2d variable=wave_intensity &&
    point_ll=[ 0 0 ] &&
    point_ur=[ 10 5.341 ] data_file=wave_2d.txt
plot_scan scan_var=current_2 scale_curr=2 &&
    variable=laser_power facet=front data_file=L_I.txt
plot_scan scan_var=voltage_2 &&
    variable=total_curr_2 data_file=I_V.txt
get_data main_input=A0526a.sol &&
    sol_inf=A0526a.out &&
    xy_data=[ 1 12] convert_data=yes
end_pstprc

```

Appendix C. code for 365nm LED structure using AlInGaN alloys

*.layer

```
$ ----  
begin_layer  
$  
independent_mqw  
column column_num=1 w=200 mesh_num=10 r=0.85  
column column_num=2 w=100 mesh_num=8 r=1.15  
top_contact column_num=1 from=0.0 to=50 contact_num=2  
top_contact column_num=2 from=0 to=100 contact_num=1  
  
layer_mater macro_name=algan.temp var1=0 var2=300 column_num=1  
layer_mater macro_name=algan.temp var1=0 var2=300 column_num=2  
layer d=2 n=4 r=1  
$  
layer_mater macro_name=algan.temp var1=0 var2=300 column_num=1  
layer_mater macro_name=algan.temp var1=0 var2=300 column_num=2  
layer d=0.5 n=4 r=0.8 n_doping1=5e24 n_doping2=5e24  
$  
layer_mater macro_name=algan.temp var1=0 var2=300 column_num=1  
layer_mater macro_name=void column_num=2  
layer d=0.5 n=4 r=0.9 n_doping1=5e24  
$ cladding layer  
$  
layer_mater macro_name=algan.temp grade_var=1 &&  
grade_from=0.1 grade_to=0.14 var2=300 column_num=1  
layer_mater macro_name=void column_num=2  
layer d=0.05 n=5 r=1 n_doping1=5e24  
  
$ ----first barrier  
layer_mater macro_name=gaalinn.temp var1=0.05 var2=0.01 var3=300 &&  
column_num=1  
layer_mater macro_name=void column_num=2  
layer d=0.003 n=8 r=1 xp1=1 xp2=1 n_doping1=8e22
```

```

$
include file=ganled.qw
include file=ganled.qw
include file=ganled.qw
$ ----
$blocking layer
layer_mater macro_name=algan.temp var1=0.19 var2=300 column_num=1
layer_mater macro_name=void column_num=2
layer d=0.025 n=4 r=1.0 p_doping1=8e23
$p-
layer_mater macro_name=algan.temp var1=0.09 var2=300 column_num=1
layer_mater macro_name=void column_num=2
layer d=0.125 n=4 r=1.0 p_doping1=2e23
$p+
layer_mater macro_name=algan.temp var1=0 var2=300 column_num=1
layer_mater macro_name=void column_num=2
layer d=0.01 n=4 r=1.0 p_doping1=5e23
$
end_layer

```

ganled.qw

```

layer_mater macro_name=gaalinn.temp var1=0.06 var2=0.075 var3=300 &&
column_num=1 active_macro=GaAlInN/GaAlInN &&
avar1=0.06 avar2=0.075 avar3=0.05 avar4=0.01 avar5=300
layer_mater macro_name=void column_num=2 active_macro=void
layer d=0.0025 n=8 r=1 xp1=1 xp2=1
$
layer_mater macro_name=gaalinn.temp var1=0.05 var2=0.01 var3=300 column_num=1
layer_mater macro_name=void column_num=2
layer d=0.003 n=8 r=1 xp1=1 xp2=1

```



***.sol**

\$file:ganled.sol

\$ *****

begin

self_consistent wave_range=0.003

\$10% polarization charge

interface model=charge fix_charge=-5.4e+15 y=3.05

interface model=charge fix_charge= -1.086e+16 y=3.053

interface model=charge fix_charge= +1.086e+16 y=3.0555

interface model=charge fix_charge= -1.086e+16 y=3.0585

interface model=charge fix_charge= +1.086e+16 y=3.061

interface model=charge fix_charge= -1.086e+16 y=3.064

interface model=charge fix_charge= +1.086e+16 y=3.0665

interface model=charge fix_charge= +9.53e+15 y=3.0695

interface model=charge fix_charge=-5.8e+15 y=3.0945

temperature temp=300

\$new added

active_temper ref_temper=300 delta_active_loss=1000

heat_flow damping_step=1

contact num=2 type=ohmic thermal_type=3 &&

thermal_cond=10. extern_temp=300

contact num=1 type=ohmic thermal_type=1 lattice_temp=300

set_active_reg active_loss=1000 thickness=0.0025 dip_factor=1

load_mesh mesh_inf=ganled.msh

output sol_outf=ganled.out

\$ *****

include file=ganled.doping

include file=ganled.mater

led_control wavelength=0.37 efficiency_model=uniform &&

refl_y1=0.18 refl_y2=0.18 delta_wavel=0.02 &&

led_xrange=(0 200) group_index=2.34

\$

\$

sor_par max_iter=0 print_sor=noprint

wave_boundary point_ll=(0, 0) point_ur=(200, 3.2295)

init_wave length=300 backg_loss=1000 &&

boundary_type=(1 1 1 1) init_wavel=0.37 mirror_ref=0.18 &&


```

wavel_range=(0.36, 0.39)
optical_field profile=gaussian &&
  x_prof=(0 200 0.1 0.1) y_prof=(3 3.2295 0.1 0.1)
$multimode mode_num=1
$
$ start solvinge
$
newton_par damping_step=5. max_iter=150 print_flag=3
equilibrium
newton_par damping_step=1. print_flag=3 var_tol=1.e-4
scan var=voltage_1 value_to=-2.5 print_step=1.5 &&
  init_step=0.1 min_step=1e-3 max_step=1
scan var=current_1 value_to=150. print_step=5 &&
  init_step=0.1 min_step=1e-3 max_step=2
end

```

***.plt**

```

$file:ganled.plt
$ *****
begin_pstprc
plot_data plot_device=postscript
$plot_data plot_device=data_file
get_data main_input=ganled.sol sol_inf=ganled.out &&
  scan_data=(1 13]

plot_scan scan_var=voltage_1 variable=total_curr_1 scale_horizontal=-1 &&
data_file=total_curr_1.txt
plot_scan scan_var=total_curr_1 variable=led_power &&
  data_file=led_power.txt
plot_scan scan_var=total_curr_1 variable=led_effi &&
data_file=led_effi.txt
get_data main_input=ganled.sol sol_inf=ganled.out &&
  xy_data=(13 13]
plot_1d variable=band from=(100. 1.04) to=(100. 1.08) &&
data_file=band.txt
plot_1d variable=band from=(100. 1) to=(100. 1.2) &&
data_file=band2.txt
$-----

```



```
plot_1d variable=real_index from=[ 100  0]      to=[ 100  2.4] &&  
    data_file=real_index.txt  
plot_1d variable=wave_intensity from=[ 100  0]      to=[ 100  2.4] &&  
    data_file=wave_intensity2.txt  
plot_1d variable=elec_curr_y from=[ 100  0]      to=[ 100  2.4] &&  
    data_file=elec_curr_y.txt  
  
led_spectrum data_file=spectrum.txt  
gain_spectrum variable=gain data_file=gain.txt  
  
end_pstprc
```

