

NGHIÊN CỨU CẤU TRÚC DIODE PHÁT XẠ TỬ NGOẠI 312nm MODELLING STUDY OF 312nm ULTRAVIOLET LIGHT-EMITTING DIODES

Huỳnh Hoàng Trung¹, Nguyễn Văn Hiếu²

¹ Trường Đại học Sư phạm Kỹ thuật Tp. Hồ Chí Minh,

² Trường Đại học Khoa học Tự nhiên Tp. Hồ Chí Minh

Ngày tòa soạn nhận bài 17/9/2015, ngày phản biện đánh giá 01/11/2015, ngày chấp nhận đăng 16/11/2015

TÓM TẮT

Cấu trúc LED phát xạ tử ngoại với ba giếng lượng tử $iAlGa_{1-y}N$ barrier - $iAl_{0,20}Ga_{0,80}N$ well - $iAlGa_{1-y}N$ barrier với nồng độ pha tạp Mg trong lớp $iAlGa_{1-y}N$ barrier khác nhau được nghiên cứu dựa vào phần mềm SiLENSe chuyên dụng. Hiệu suất phát xạ IQE của cấu trúc UV-LED được tìm thấy ổn định với nồng độ pha tạp $[Mg] = 5 \times 10^{18} cm^{-3}$. Cấu trúc UVLED này có đỉnh phổ phát xạ dao động khoảng 312nm được ứng dụng trong khử trùng. Thành phần Al trong lớp $AlGa_{1-y}N$ barrier được khảo sát với $y = 0,45(45\%)$ và $y = 0,55(55\%)$, UVLED cho bước sóng phát xạ được dự đoán giảm và dưới 314nm, điều đó phù hợp với những công bố gần đây.

Từ khóa: tia tử ngoại, LED, AlGa_N, đa giếng lượng tử, khử trùng

ABSTRACT

The structure of Ultraviolet (UV) light-emitting diodes (LEDs) with three multi-quantum wells (MQW) of $iAlGa_{1-y}N$ barrier - $iAl_{0,20}Ga_{0,80}N$ well - $iAlGa_{1-y}N$ barrier are studied by the SiLENSe software with various doping concentration of Mg in the $iAlGa_{1-y}N$ barrier layer. The IQE values was found to be stable with $[Mg] = 5 \times 10^{18} cm^{-3}$. The emitting wavelength of this structure of UVLED is around 312nm for sterilization. The components of Aluminum material in the block of $AlGa_{1-y}N$ barrier layer are tested at 45% and 55% to predict the decreasing of radiating wavelength below 314nm, which are in good agreement with the recent publication.

Key words: ultraviolet, LED, AlGa_N, MQW, sterilization

1. GIỚI THIỆU

LED phát xạ tử ngoại (Ultraviolet Light Emitting Diodes - UVLED) giành được sự quan tâm đáng kể của những nhà khoa học và công nghệ thế giới do nhiều ứng dụng của UVLED ví dụ như thanh lọc không khí, khử trùng nước, ứng dụng trong lĩnh vực y tế và sinh hóa, cảm biến đo nồng độ ozon trong không khí, ... phạm vi ứng dụng rộng lớn như hàm của bước sóng phát xạ của cấu trúc UV-LED được chế tạo [1 - 3]. Gần đây, N.V.Hiếu và cộng sự đã nghiên cứu ứng dụng UVLED với bước sóng phát xạ 365nm diệt khuẩn E. coli và Coliform trong nước máy đầu tiên tại Việt Nam [4].

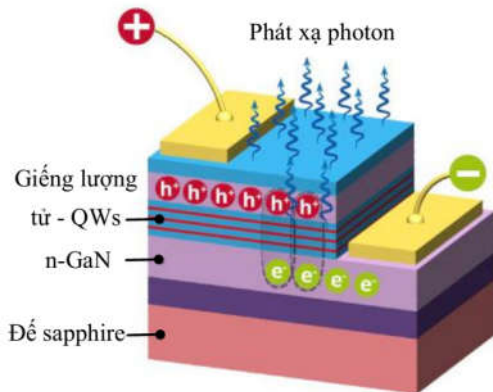
Vật liệu bán dẫn III-V Nitride, AlN (6,2eV), GaN (3,4eV), và InN (0,8 eV) đang thu hút nhiều quan tâm của các nhà khoa học

và các công ty chế tạo LED vì cấu trúc bandgap trực tiếp cho phổ phát xạ có phạm vi bước sóng rộng từ vùng tử ngoại (UV) đến ánh sáng đỏ, vùng ánh sáng nhìn thấy [5].

Cấu trúc và công nghệ chế tạo UVLED rất phức tạp vì hoạt động của UVLED bị ảnh hưởng bởi rất nhiều thông số chế tạo khác nhau. Hơn nữa, nguyên vật liệu cho việc chế tạo UVLED rất hiếm và đắt tiền dựa trên hệ thiết bị lắng đọng hoá học kim cơ (Metal Organic Chemical Vapor Deposition - MOCVD). Do đó, để giảm chi phí chế tạo và thời gian, chúng tôi sử dụng phần mềm SiLENSe chuyên dụng để thiết kế, mô phỏng tính toán cho cấu trúc đa giếng lượng tử (Multi Quantum Well - MQW) của UVLED để xác định bước sóng phát xạ và tối ưu hóa cấu trúc.

2. CẤU TRÚC UVLED

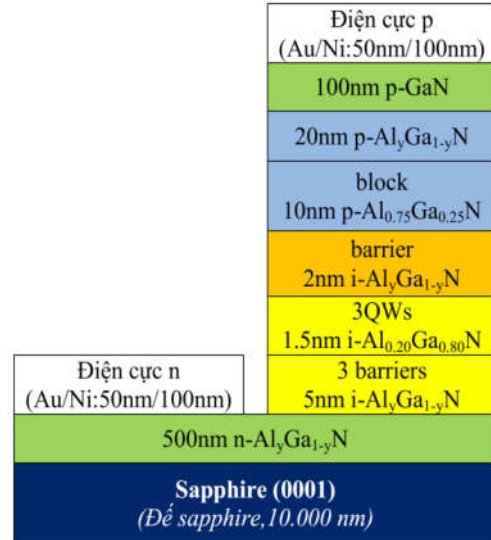
Ngoài cấu trúc chuyển tiếp p - n, UV-LED còn có một vùng đặc biệt hơn so với các LED thông thường, vùng kích hoạt khi phát xạ cho bước sóng UV có cấu trúc đa giếng lượng tử MQW. Khi được kích hoạt, các điện tử trong lớp bán dẫn loại n di chuyển xuyên qua MQW, tái hợp với các lỗ trống trong lớp bán dẫn loại p và phát xạ photon như hình 1.



Hình 1. Mô tả nguyên lý phát xạ bước sóng cực tím của UVLED.

Lớp vật liệu AlGa_xN của UVLED được xem xét trong nghiên cứu này được phát triển trên lớp đế sapphire với hướng tinh thể (0001) được làm sạch với H₂ tại nhiệt độ 1020°C dựa trên hệ thiết bị MOCVD. Trong quá trình chế tạo, việc điều khiển số chu kỳ MQW được thực hiện dễ dàng qua qui trình tạo xung

điều khiển các pha: NH₃, AlN và GaN của hệ MOCVD để có được những màng mỏng khác nhau với thành phần Al, Ga và N khác nhau, MQW được hình thành.



Hình 2. Mô hình của cấu trúc UVLED phát xạ với bước sóng khoảng 312nm.

Qua những thông số đầu vào mô phỏng tính toán bởi phần mềm SiLENSe, nhóm nghiên cứu đã thu được mô hình cấu trúc đa giếng lượng tử MQW của LED cho đỉnh phổ phát xạ khoảng 312nm. Cấu trúc UVLED được mô tả hình 2 với đỉnh phổ phát xạ khoảng 312nm với những thông số được trình bày trong bảng 1 như sau:

Vật liệu	Độ dày màng d (nm)	Nồng độ pha tạp N_{dop} (cm^{-3})	Độ linh động điện tử μ_n (cm^2/Vs)	Độ linh động lỗ trống μ_p (cm^2/Vs)
n-Al _y Ga _{1-y} N	500	2×10^{18}	70	3
i-Al _y Ga _{1-y} N barriers	5,0x3	$1 \times 10^{17} - 1 \times 10^{19}$	70	3
i-Al _{0,20} Ga _{0,80} N wells	1,5x3	0	70	3
Al _x Ga _{1-x} N barrier cuối	2.0	$1 \times 10^{17} - 1 \times 10^{19}$	70	3
p-Al _{0,75} Ga _{0,25} N block	10	5×10^{16}	10	1
p-Al _y Ga _{1-y} N	20	1×10^{17}	10	1
p-GaN	100	7×10^{17}	10	10

Vùng kích hoạt MQW là vùng chuyển động của các hạt tải gồm ba lớp MQW có cấu trúc với 5nm $i\text{-Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ barriers và 1,5nm $i\text{-Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{N}$ wells, và $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ barrier cuối dày 2nm. Tổng kích thước vùng MQW là 21,5nm. Kích thước của cấu trúc UVLED không tính kích thước đế sapphire và điện cực Au/Ni là 651,5nm.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Sử dụng phần mềm SiLENSe chuyên dụng để mô phỏng tính toán cho cấu trúc MQWs của UVLED. Phần mềm SiLENSe sử dụng thống kê Fermi Dirac để đếm mật độ không cân bằng của điện tử và lỗ trống trong vùng kích hoạt MQWs. Phương trình Poisson và Schrodinger được giải cho hàm sóng hạt tải trong mỗi giếng lượng tử để xác định phổ phát xạ của UVLED.

Giếng lượng tử đơn (Single Quantum Well - SQW) được tổng hợp từ hai loại bán dẫn khác nhau với năng lượng vùng cấm $E_{g\text{-barrier}}$ và $E_{g\text{-well}}$. Khi được kích hoạt bởi điện thế áp tại hai điện cực của LED, các điện tử trong lớp bán dẫn loại n di chuyển qua các giếng lượng tử và tái hợp các lỗ trống trong lớp bán dẫn loại p, điện tử và lỗ trống tái hợp và phát xạ photon.

Năng lượng vùng cấm của giếng lượng tử được xác định bởi phương trình (1):

$$E_{g\text{-QW}} = E_{g\text{-well}} + E_{O\text{-e}} + E_{O\text{-h}} \quad (1)$$

với $E_{O\text{-e}}$ và $E_{O\text{-h}}$: năng lượng lượng tử hoá điện tử và lỗ trống.

Năng lượng photon phát xạ của LED là năng lượng vùng cấm của giếng lượng tử:

$$E_{g\text{-QW}} = h \frac{c}{\lambda} \quad (2)$$

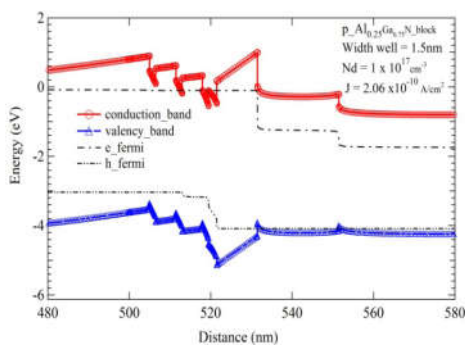
Vậy năng lượng vùng cấm của giếng lượng tử càng lớn thì bước sóng photon phát xạ càng ngắn. Việc sử dụng đa giếng lượng tử MQW để tăng cường sự giam giữ các hạt tải, một cấu trúc có nhiều hơn một giếng lượng tử nên có thể giam giữ nhiều hạt tải hơn. Do đó, năng lượng photon phát xạ cao hơn, bước sóng phát xạ càng ngắn. Năng lượng vùng cấm của lớp vật liệu $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ được tính toán như [6]:

$$E_g = 6,13y + 3,42(1 - y) - y(1 - y) \text{ eV} \quad (3)$$

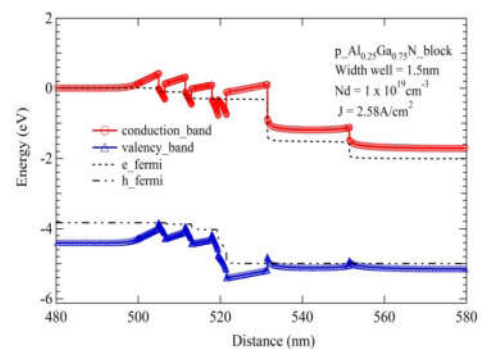
với y là thành phần Al trong lớp $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$.

Trong nghiên cứu này, tác giả tiến hành thay đổi nồng độ chất cho điện tử N_d và thành phần Al trong lớp vật liệu $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$. Nhờ đó, tác giả đã xác định sự ảnh hưởng của N_d và y đến bước sóng phát xạ của cấu trúc UVLED, xác định thông số tối ưu cấu trúc để hiệu suất phát xạ và năng lượng phát xạ đạt giá trị cao nhất.

Hình 3, khi nồng độ pha tạp N_d tăng, tuy năng lượng vùng dẫn và năng lượng vùng hóa trị tại vùng tiếp giáp giữa lớp n và lớp đa giếng lượng tử (0 - 505nm) đều giảm nhưng năng lượng vùng dẫn và vùng hóa trị trong các giếng (hình cài răng lược) thay đổi rất ít. Do đó, khoảng cách năng lượng vùng dẫn và vùng hóa trị tăng không nhiều khi tăng N_d , điều này dẫn tới bước sóng giảm nhưng không đáng kể, phù hợp với sự phân bố hạt tải trong cấu trúc MQW thể hiện như hình 4.

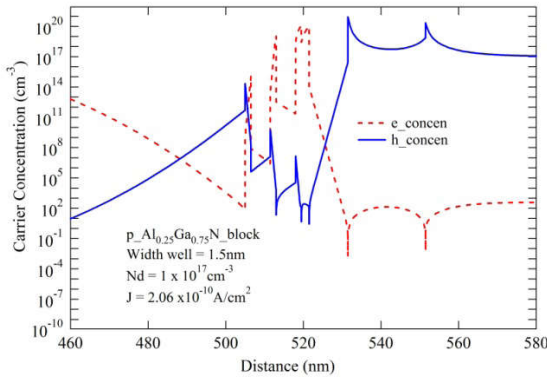


(a)

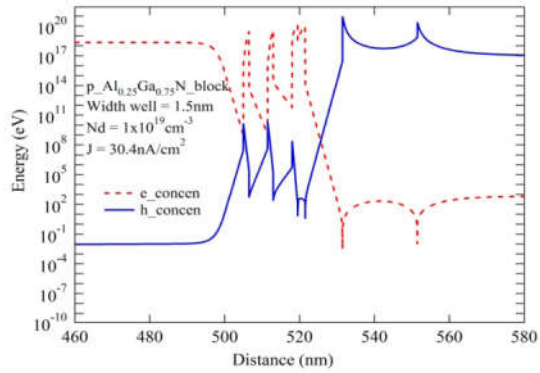


(b)

Hình 3. Giản đồ năng lượng trong đa giếng lượng tử MQW của cấu trúc (a) với $N_d = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $J = 20,6 \text{ nA/cm}^2$ và (b) $N_d = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, $J = 2,58 \text{ A/cm}^2$.

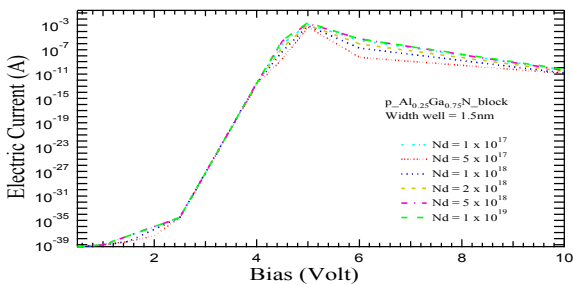


(a)



(b)

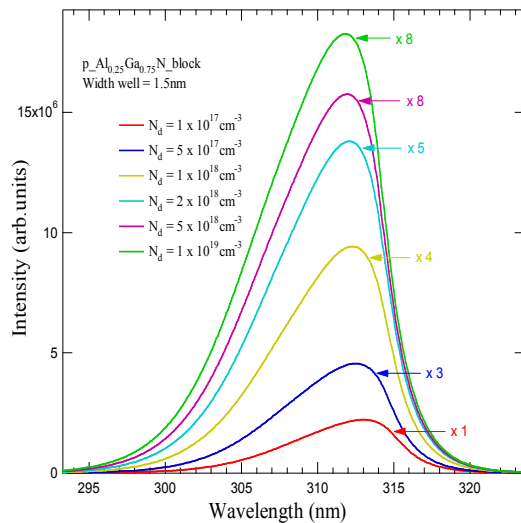
Hình 4. Mật độ phân bố hạt tải trong MQW LED với $N_d = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ và $N_d = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.



Hình 5. Đặc tuyến I-V của MQW LED được tính toán với N_d khác nhau trong rào.

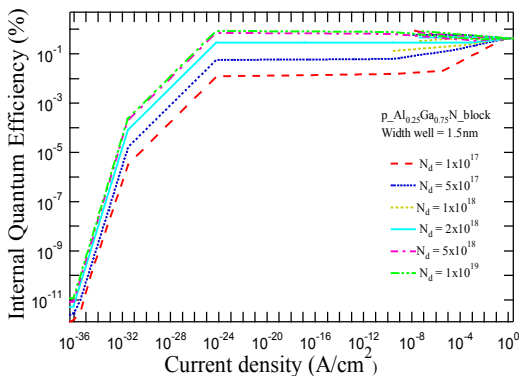
Hình 5 thể hiện đặc tuyến bán dẫn I-V của MQW LED khi điện áp phân cực tăng từ 0V đến 10V. Điện áp phân cực LED tăng từ 2,3V thì LED bắt đầu phát xạ và dòng đạt giá trị bão hòa tại điện áp phân cực lớn hơn 5V. Dòng có giảm khi điện thế phân cực LED từ 5V đến 10V nhưng không ảnh hưởng nhiều đến hiệu suất phát xạ của LED. Dòng tăng khi nồng độ N_d tăng từ $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ đến $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

Hình 6, hiệu suất phát xạ nội IQE tăng theo việc tăng nồng độ N_d : nồng độ N_d càng cao, hiệu suất phát xạ nội IQE càng tăng. Hiệu suất phát xạ nội IQE đạt giá trị ổn định và cao nhất là 90% tương ứng với nồng độ pha tạp N_d là $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, $2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ và $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.



Hình 7. Phổ phát xạ từ cấu trúc LED với nồng độ [Mg] từ 10^{17} cm^{-3} đến 10^{19} cm^{-3} trong các lớp rào của MQW.

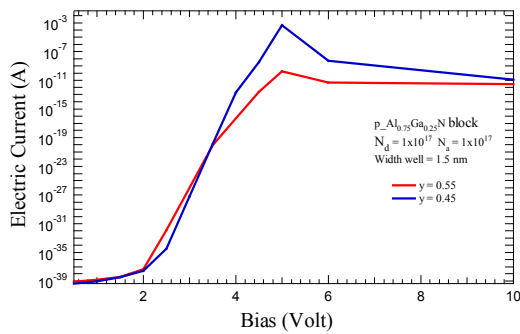
Xét tại giá trị điện thế 4V, khi cho thay đổi nồng độ N_d tăng từ $[Mg] = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ đến $[Mg] = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, cường độ phát xạ tăng, bước sóng phát xạ giảm vài nanomet từ 314nm, 313nm và ổn định 312nm như thể hiện trong hình 7. Điều này được giải thích: Khi tăng nồng độ N_d tức là tăng nồng độ hạt tải dẫn điện, mật độ dòng tăng, khả năng tái



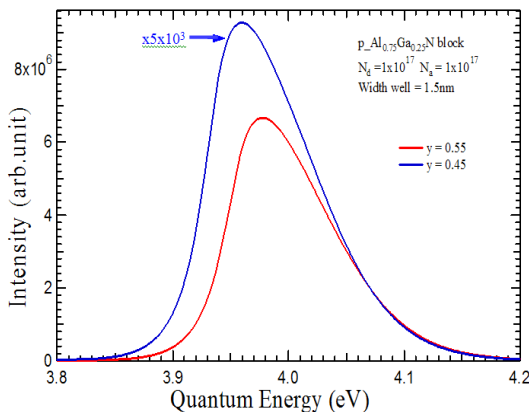
Hình 6. Hiệu suất phát xạ IQE so với mật độ dòng của MQW LED.

hợp của lỗ trống và điện tử tăng, hiệu suất phát xạ tăng, năng lượng phát xạ lớn, bước sóng phát xạ giảm.

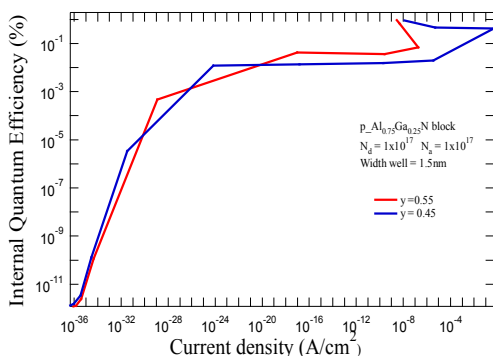
Tiến hành thay đổi thành phần Al trong trong lớp vật liệu $Al_yGa_{1-y}N$ barrier với $y = 0,45$ và $0,55$. So sánh hai giá trị của thành phần Al, bước sóng giảm từ 313nm đến 311nm, cường độ phát xạ giảm khi tăng thành phần Al trong hợp chất. Hay nói cách khác năng lượng phát xạ tăng khi thành phần Al tăng, hình 8. Điều này cũng được hiểu rằng khi tăng thành phần Al trong hợp chất AlGaN là tăng độ rộng vùng cấm.



Hình 8. Phổ phát xạ của cấu trúc UVLED theo thành phần Al.



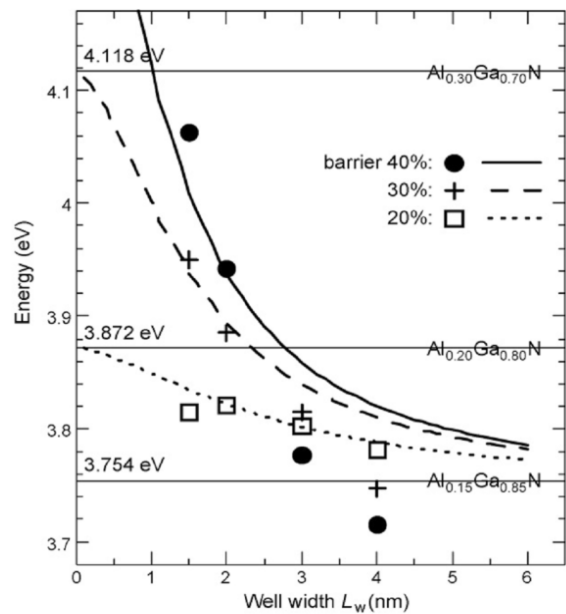
Hình 9. Đặc tuyến I-V của UVLED theo thành phần Al.



Hình 10. Hiệu suất phát xạ nội (IQE) của cấu trúc UVLED theo thành phần Al.

Xem xét tại mức điện áp 4,5V, tăng thành phần Al, cường độ dòng điện có giảm. Mức điện áp từ 5V trở lên, cường độ dòng điện qua UVLED có giảm nhưng không ảnh hưởng tới hiệu suất phát xạ của UVLED, hình 9.

Theo hình 10, hiệu suất phát xạ nội (Internal Quantum Efficiency - IQE) của cấu trúc UVLED đạt 88% khi $y = 0,55$, đạt 81% khi $y = 0,45$. Như vậy, khi tăng thành phần Al thì hiệu suất phát xạ nội IQE, năng lượng phát xạ tăng nhưng bước sóng phát xạ giảm.



Hình 11. Sự phụ thuộc của năng lượng đỉnh PL vào độ rộng của giếng với 3 thành phần $y = 0,2, 0,3$ và $0,4$ của Al trong $Al_yGa_{1-y}N$ barrier [7].

Trong mô phỏng tính toán của nghiên cứu này, khi thành phần Al trong lớp $Al_yGa_{1-y}N$ barrier tăng, năng lượng phát xạ tăng, bước sóng giảm. Kết quả, thành phần Al thay đổi 45% và 55% thì bước sóng phát xạ dao động trong khoảng 313nm - 312nm tương ứng với năng lượng từ 3,96 – 3,98eV, hình 8. Kết quả tính toán và mô phỏng cấu trúc UVLED trong nghiên cứu này phù hợp với thực nghiệm của Takeuchi, thành phần Al là 40%, năng lượng phát xạ là 4,06eV, hình 11. Sự sai lệch không nhiều do bề dày của $Al_yGa_{1-y}N$ barrier cấu trúc mô phỏng là 5nm, trong khi bề dày thực nghiệm là 7nm.

4. KẾT LUẬN

Trong bài báo này, tác giả báo cáo nghiên cứu mô hình MQW của UVLED dị cấu trúc có bước sóng phát xạ dao động trong khoảng 312nm - 313nm với thành phần Al trong các lớp $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ barrier của MQW là $y = 0,45$ (45%), là phù hợp với thực nghiệm của Tekeuchi và cộng sự [7].

Cường độ phát xạ của cấu trúc UVLED tỷ lệ thuận với nồng độ pha tạp Mg trong các

lớp $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ barrier của MQW. Hiệu suất phát xạ nội IQE ứng với mật độ dòng J đạt giá trị ổn định và có giá trị cao gần 90% khi nồng độ pha tạp Mg trong các lớp $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ barrier của MQW là $[\text{Mg}] = 5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$. Bước sóng phát xạ từ cấu trúc MQW của UVLED là 313nm. Dựa trên những kết quả đạt được, thực nghiệm chế tạo cấu trúc sẽ được thực hiện trong thời gian tiếp theo cho UVLED sâu ứng dụng trong lĩnh vực khử trùng.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] M.A. Khan et al., “*III-Nitride UV Devices*”, Jpn. J. Appl. Phys., vol. 44, no. 10, 2005, pp. 7191-7206.
- [2] W.H. Sun et al., “*Continuous Wave Milliwatt Power AlGaIn Light Emitting Diodes at 280 nm*”, Jpn. J. Appl. Phys., vol. 43, no. 11A, 2004, pp. L1419-L1421.
- [3] C.G. Moe et al., “*Milliwatt Power Deep Ultraviolet Light Emitting Diodes Grown on Silicon Carbide*”, Jpn. J. Appl. Phys., vol. 44, no. 17, 2005, pp. L502-L504.
- [4] Nguyen Van Hieu and Vu The Dang, “*A study of lamp with 365nm radiation UVLED for the sterilization of bacteria*”, Journal of Technical Education Science, Univ. of Technical Education HCMC, Vietnam, ISSN 1859-1272, vol. 18, 2011, pp. 46-52.
- [5] S. Nakamura, T. Mukai, and M. Senoh, “*Candela-Class HighBrightness InGaIn/AlGaIn Double-Heterostructure Blue Light-Emitting Diodes*”, Appl. Phys. Lett., vol. 64, no. 13, 1994, pp. 1687-1689.
- [6] S. J. Lee, S. H. Han, D. Y. Noh, H. W. Shim, S. J. Park, *Improvement of GaIn-based LEDs using p-type AlGaIn/GaIn superlattices with a graded Al composition*, J. Phys. D: Appl. Phys. 44 (2011) 105101.
- [7] M. Takeuchi, H. Shimizu and Y. Aoyagi et al., J. Crystal Growth 305 (2007) 360.