

DOI:10.16136/j.joel.2023.06.0403

# 基于 p-型氮化硼材料的深紫外 LED 设计

王莉莉<sup>1</sup>, 符彬啸<sup>1</sup>, 张旭<sup>1,2\*</sup>, 薛琦<sup>1</sup>, 刘玉怀<sup>1,2</sup>

(1. 郑州大学 电气信息学院 河南省激光与光电信息技术重点实验室, 河南 郑州 450001; 2. 郑州大学 电子信息学院 电子材料与系统国际联合研究中心, 河南 郑州 450001)

**摘要:** 本文通过在发光二极管(light emitting diode, LED)的 p 掺杂区域引入六方氮化硼(hexagonal boron nitride, h-BN)结构, 以提升深紫外(deep ultraviolet, DUV)LED的空穴浓度。通过 COMSOL 有限元软件对 LED 器件量子阱区域建模, 结果表明: 1) 掺入 h-BN 后, p 区域空穴浓度提升了约一个数量级, 发射率和内量子效率(internal quantum efficiency, IQE)得到了显著提升; 2) 随着 h-BN 厚度的增加, p 区空穴浓度显著提升; 3) h-BN 相对于 AlGaIn 材料带隙上移的特性, 有效地阻挡了电子泄露, 使量子阱区域电子和空穴复合进一步增强, 有效改善了 DUV LED 的发光效率。本文提出的设计结构为实验制备高量子效率的 DUV LED 器件提供了解决方案。

**关键词:** 量子阱; 六方氮化硼(h-BN)材料; 空穴浓度; AlGaIn 材料

**中图分类号:** O471 **文献标识码:** A **文章编号:** 1005-0086(2023)06-0569-07

## Design of deep ultraviolet LED based on p-type boron nitride material

WANG Lili<sup>1</sup>, FU Binxiao<sup>1</sup>, ZHANG Xu<sup>1,2\*</sup>, XUE Qi<sup>1</sup>, LIU Yuhuai<sup>1,2</sup>

(1. Henan Key Laboratory of Laser and Opto-Electronic Information Technology, School of Electrical Information, Zhengzhou University, Zhengzhou, Henan 450001, China; 2. National Center for International Joint Research of Electronic Materials and Systems, School of Electrical Information, Zhengzhou University, Zhengzhou, Henan 450001, China)

**Abstract:** In this paper, the hole concentration in deep ultraviolet (DUV) light emitting diode (LED) is effectively improved by introducing hexagonal boron nitride (h-BN) structure in p-type region of LED. The quantum well region is calculated by COMSOL software. The simulation results show that: 1) the hole concentration in the p-type region is increased by about an order of magnitude, and the emissivity and internal quantum efficiency (IQE) are also significantly improved after h-BN doping; 2) the hole concentration in the p-type region increases significantly with the increment of h-BN thickness; 3) as the band edge of h-BN moves upwards with respect to that of AlGaIn material, this unique band gap arrangement effectively blocks electron leakage, hence, further enhances the recombination of electrons and holes in the quantum well region, and effectively improves the luminous efficiency of DVU LED. The proposed structure may shed light on the improvement of hole concentration and quantum efficiency of DVU LED.

**Key words:** quantum well; h-BN material; hole concentration; AlGaIn material

## 0 引言

作为固态照明和显示的基本设备, 发光二极管(light emitting diode, LED)以惊人的速度蓬勃

发展<sup>[1]</sup>。目前, LED 发光器件的波长正向着更短的方向发展, 并逐渐发展到深紫外(deep ultraviolet, DUV)波段<sup>[2]</sup>。特别在新冠肺炎病毒不断蔓延的情况下, 全球对于杀菌消毒产品的需求不断增

\* E-mail: iexuzhang@zzu.edu.cn

收稿日期: 2022-05-29 修订日期: 2022-09-19

基金项目: 国家自然科学基金(62174148)和郑州大学科研项目(JC202033045, 2018ZDGGJS035)资助项目

长,促进了 DUV LED 的发展<sup>[3]</sup>。与目前应用广泛的基于汞的 DUV 光源相比,基于 AlGaIn 的半导体 DUV LED 更环保、紧凑、持久<sup>[4]</sup>。

氮化物紫外 LED 研究最早始于 20 世纪 90 年代,如今已经实现了 210—400 nm 的全波段紫外 LED<sup>[5]</sup>。国内外对紫外 LED 进行了多年研究,目前发光波长在 280 nm 以下的 DUV LED 的外量子效率已突破 5%<sup>[6]</sup>。HUANG 等<sup>[7]</sup>提出了一种渐进式 Al 成分的 p-AlGaIn 导电层,提高了多量子阱中的载流子浓度,增强了辐射复合率,提升了 AlGaIn 基 DUV LED 的发光特性。国内对于 GaN 基 LED 的研究大致分为以南昌大学为代表的硅基 LED 以及大多数研究机构以蓝宝石为衬底的 LED。国内关于此方面的研究开始得比较晚,但成绩显著。南昌大学江风益等制备了硅衬底 In-GaN 基 LED,电光转换效率高达 21.5%,处于国际领先水平<sup>[8]</sup>。AlGaIn 基 DUV LED 有广泛的应用前景,但较低的内量子效率(internal quantum efficiency, IQE)、低 p 型浓度、深能级和非辐射复合中心增加等制约了 AlGaIn 基 LED 的发展<sup>[9]</sup>。AlGaIn 基 DUV LED 的器件特性与 p-AlGaIn 的特性密切相关,为了获得显著的自由空穴密度,必须

引入较大的 Mg 浓度,但 Mg 在 GaN 中的溶解度有限,从而降低了 p 型掺杂效率。

如何有效提升 p 型空穴浓度至今仍是一个需要突破的科研难点。本文在 p-AlGaIn 中掺入二维材料六方氮化硼(hexagonal boron nitride, h-BN),发现能将 p 型空穴浓度进一步提升一个数量级。研究了掺入 h-BN 厚度、层数对空穴浓度的影响,分析了由此引起的量子阱区域发射率的变化以及对于 IQE 的影响。

## 1 模型设计

### 1.1 基本原理

在 h-BN 和 AlN 上采用多步生长工艺得到的扫描电子显微镜(scanning electron microscope, SEM)图如图 1 所示<sup>[10]</sup>。图 1(a)和(b)分别是蓝宝石衬底和 h-BN 上生长出来的整层平面 AlN 薄膜。图 1(a)和(b)右下方虚线框选出来的是图形的部分放大图。通过先进的外延生长技术可以在 h-BN 上生长 AlGaIn/GaN<sup>[11]</sup>以及在 AlGaIn 材料上生长 h-BN 外延层<sup>[12]</sup>。因此,本文提出在 p-AlGaIn 中掺入 h-BN,发现可以有效提高 p 型空穴浓度,提高量子阱区域的

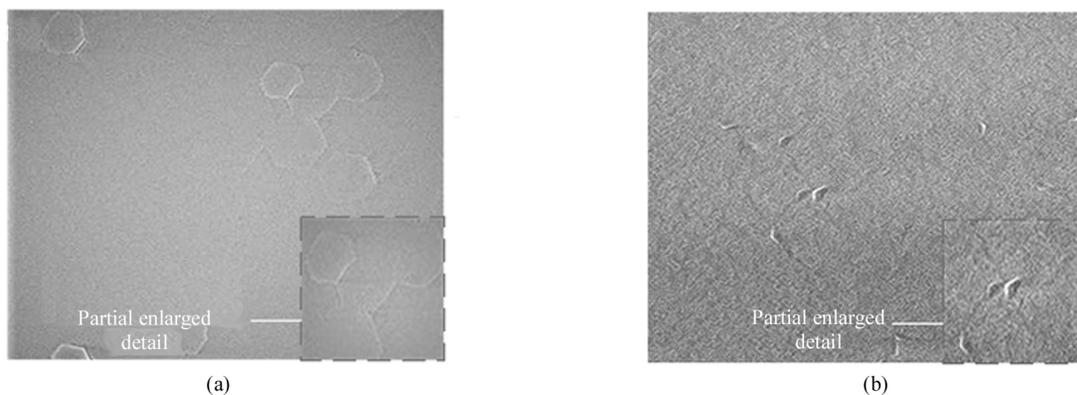


图 1 在蓝宝石和 h-BN 上生长的多步 AlN 的 SEM 图像<sup>[10]</sup>: (a) 蓝宝石上生长的 AlN; (b) h-BN 上生长的 AlN

Fig. 1 SEM images of multistep AlN grown on sapphire and h-BN<sup>[10]</sup>: (a) AlN grown on sapphire; (b) AlN grown on h-BN

IQE,改善发光效率。

h-BN 表面缺乏悬空键,通过在其上面沉积厚的 AlN 层,生长出来的 GaN 会更加光滑<sup>[13]</sup>。虽然 h-BN 是一种间接带隙半导体材料,但可以像直接带隙材料一样有效地发光,室温下数层 h-BN 的发光强度比 4 μm 厚的直接带隙 AlN 的发光强度高近 100 倍<sup>[14]</sup>。

Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N 中 Mg 的电离能随着 x 的增加而增大,范围大约为 170—510 meV,较高的受主电离能一直是制约高空穴浓度的成因。受主电离能可表示为:

$$E_A = \frac{m_p^* E_0}{m_0 \epsilon_r^2}, \quad (1)$$

式中,  $m_p^*$  是空穴有效质量,  $m_0$  是电子惯性质量,  $E_0$  是真空电子静止能量,  $\epsilon_r$  是相对介电常数。h-BN 有效空穴质量比 AlN 小,同等条件下,可以计算得到, h-BN 的  $E_A$  值比 AlN 低。实验中也得到证实, h-BN : Mg 中的  $E_A$  数值较小约为 30—300 meV<sup>[15]</sup>。

在几乎所有的 DUV 发射体中,富 Al 的 AlGaIn 外延层通常用来作为电子阻挡层,但高阻挡层会严重影响有源区的空穴注入效率。电阻率可表示为<sup>[16]</sup>:

$$\rho(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) \approx \rho(\text{GaN}) \exp\left(\frac{\Delta E_A}{kT}\right), \quad (2)$$

式中,  $\Delta E_A = E_A(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}:\text{Mg}) - E_A(\text{GaN}:\text{Mg})$ ,  $\rho$  表示电阻率,  $k$  是常量,  $T$  是温度。h-BN:Mg 中  $\Delta E_A$  数值低, 根据式(2)可以计算得到电阻率显著低于 AlN:Mg。电阻可表示为:

$$R = \rho \frac{l}{A_{\text{LED}}}, \quad (3)$$

式中,  $l$  是掺 Mg 的  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  层厚度,  $A_{\text{LED}}$  是 LED 尺寸, 在本文中是  $200 \mu\text{m} \times 200 \mu\text{m}$ , 可知同等条件下, h-BN 和金属的接触电阻较小。实验中 h-BN:Mg 中的电阻率约为  $12 \Omega \cdot \text{cm}$ , 在 AlN:Mg 中  $\rho > 10^4 \Omega \cdot \text{cm}$ , 甚至可以将 p-hBN 作为电子阻挡层或者 p 接触层能得到一种不同的 DUV 发射体结构, 可以有效阻挡电子泄露, 为克服富 Al 的 AlGaN 中 p 型掺杂问题提供了潜在的解决方案<sup>[12]</sup>。至今为止, 如何有效提高 p 型 DUV LED 的空穴浓度仍是尚未解决的难题, 本文在 p-AlGaN 材料当中一层一层掺入 h-BN, 通过仿真证实了 p-AlGaN 中的空穴浓度有了显著提高, 提升了器件性能。

### 1.2 模型介绍

图 2 是 LED 器件的几何结构图。图 2(a) 中, 最下方是蓝宝石衬底, 上方是 GaN 缓冲层, 缓冲层上方生长 n-GaN, 在 n-GaN 设置了 n 接触层, 上方建模部分用红色条突出显示, 只对发射所需波长光的有源双异质结区域进行建模, 其中  $0.05 \mu\text{m}$  厚的  $\text{In}_{0.06}\text{Ga}_{0.94}\text{N}$  层夹在  $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$  层之间, 下层 AlGaN 为 n 掺杂、厚度为  $0.15 \mu\text{m}$ , 上层 AlGaN 为 p 掺杂, In-GaN 层未掺杂, 建立了一个 PIN 二极管结构, 发光 InGaN 层在中心本征(未掺杂)区域, 在 p-AlGaN 中掺入 h-BN, 该区域上方是 p-GaN, 最上方是 p 接触层, 有源区域横向尺寸设置为  $200 \mu\text{m} \times 200 \mu\text{m}$ 。图 2(b) 是在 p-AlGaN 区域掺杂 h-BN 之后的仿真模型, 在此模型中掺杂 2 层 h-BN, h-BN 厚度设置为 2 nm, 初始掺杂位置  $0.2365 \mu\text{m}$ , 位移  $0.075 \mu\text{m}$ 。图 2(c) 是未进行掺杂的模型。在掺杂模型中, h-BN 的相对介电常数设置为  $4^{[17]}$ , 电子迁移率和空穴迁移率分别为  $48 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ 、 $26 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})^{[18]}$ , 其余参数设置参考文献<sup>[19]</sup>。

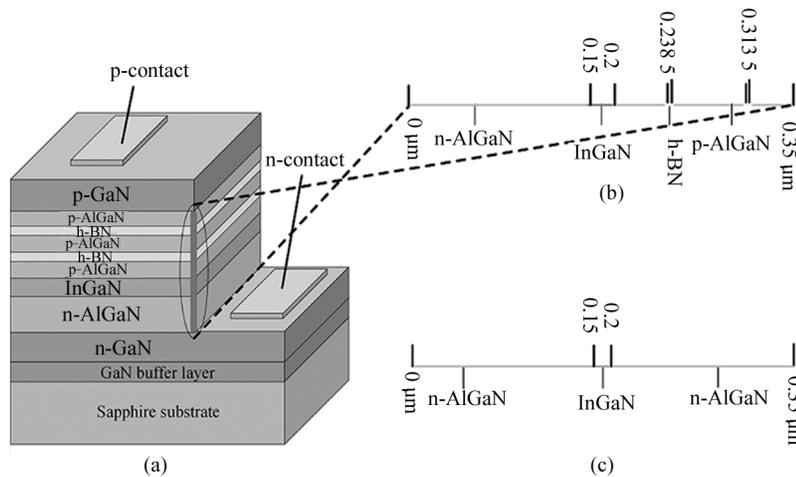


图 2 LED 器件的几何结构图和建立的掺杂模型: (a) LED 器件的几何结构图; (b) 掺杂 h-BN 的模型; (c) 未进行掺杂的模型

Fig. 2 The geometrical structure diagram of the LED device and the established doping model:

(a) Geometrical structure diagram of the LED; (b) Model of doped h-BN; (c) Undoped model

## 2 分析与讨论

### 2.1 h-BN 厚度对 p 型空穴浓度的影响

在 p-AlGaN 中掺入两层 h-BN, h-BN 初始掺杂位置为  $0.2365 \mu\text{m}$ , 位移设置为  $0.075 \mu\text{m}$ , 逐渐增大 h-BN 的厚度, 仿真结果如图 3 所示, 图 3 中最下方划线代表未掺杂得到的仿真结果, 因为  $y$  轴数量级跨度太大, 对其进行了取对数处理后, 效果仍不理想, 因此对其进行部分放大处理, 图 3(b) 即为图 3(a) 中

方形虚线框选部分的放大图。从图 3(b) 可以看到空穴浓度和未掺杂相比有了明显提升, 掺入 h-BN 的厚度分别为 2 nm、3 nm、4 nm, 空穴浓度也依次增高。

为了使结果更加直观, 采用无限细分的方法计算了 p 区  $0.2-0.35 \mu\text{m}$  的空穴浓度, 自由空穴浓度计算式为:

$$P = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \sum_{i=1}^m y(\xi_i) \Delta x_i, \quad (4)$$

式中,  $m$  表示  $0.2-0.35 \mu\text{m}$  内划分的区间数,  $\Delta x_i$

$= x_i - x_{i-1}$ ,  $\lambda = \max_{1 \leq i \leq m} \{\Delta x_i\}$ ,  $\xi_i$  是区间  $[x_{i-1}, x_i]$  上的任意一点,  $y(\xi_i)$  为  $\xi_i$  点对应的高度。通过计算得到未掺杂、掺杂 2 nm、3 nm、4 nm 的 h-BN 空穴浓度分别为  $1.23819 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 、 $2.44213 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 、 $1.55541 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 、 $2.35137 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 。当掺杂的 h-BN 厚度设置为 4 nm 时计算得到的空穴浓度最高, 和未掺杂相比, 提升了约一个数量级。

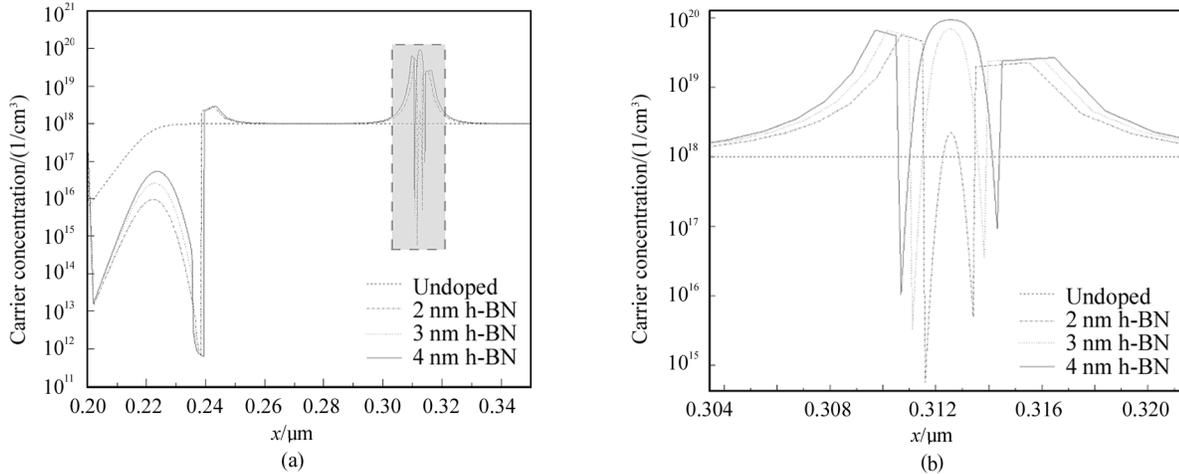


图 3 空穴浓度图: (a) 未掺杂以及掺杂 h-BN 厚度不同的空穴浓度图; (b) 方形虚线框选部分的放大图

Fig. 3 Hole concentration diagram: (a) Hole concentration diagram of undoped and doped h-BN with different thickness; (b) Enlarged view of the selected part of the square dotted line

BN 的厚度越厚, 激活释放出来的空穴也会更多。

由图 4 可以看到, 在掺入 h-BN 之后, 来自 InGaN 层总的发射速率不断升高, 并且随着 h-BN 的厚度不断增加, 总的发射速率也在明显上升。通过计算得到未掺杂、掺杂 2 nm、3 nm、4 nm 的 h-BN 发射率最大值分别为  $9.2303 \times 10^{17} \text{ s}^{-1}$ 、 $1.0268 \times 10^{18} \text{ s}^{-1}$ 、 $1.1801 \times 10^{18} \text{ s}^{-1}$ 、 $1.3703 \times 10^{18} \text{ s}^{-1}$ 。总的来说, 掺入 h-BN 和未掺杂相比, 发射率提升了大约一个数量级。

随着正向偏压的增加, n 区和 p 区之间的势垒高度会降低, 有更多的载流子流过器件, 电子和空穴的浓度在 InGaN 中达到了峰值, 使得辐射复合局限在了此区域。AlN 平面内晶格常数的 4 倍  $4a_{\text{AlN}} = 4 \times 3.112 \text{ \AA} = 12.448 \text{ \AA}$  ( $1 \text{ \AA} = 0.1 \text{ nm}$ ) 大致等同于 h-BN 晶格常数的 5 倍  $5a_{\text{h-BN}} = 5 \times 2.504 \text{ \AA} = 12.52 \text{ \AA}$ , 意味着每 5 个 h-BN 原子将会沿 a 方向与 4 个 AlN 原子对齐, 在 h-BN/w-AlN 异质结界界面处 5/4 的重合使生长在 c 面 AlN 外延层上的 h-BN 有效晶格失配率从 19.54% 降低到约 0.58%<sup>[15]</sup>。类似的,  $4a_{\text{GaN}} = 4 \times 3.189 \text{ \AA} = 12.756 \text{ \AA}$ , 5 个 h-BN 原子和 4 个 GaN 原子也有此类对齐特性。同时也意味着 h-BN

在传统 LED 中, AlGaIn 用 Mg 进行激活, 激活之后热退火会产生空穴。制约传统空穴浓度的原因是 Mg 的激活能太高, 激活能过高, 加电压进行激活以后释放出来的空穴浓度较低。P 数值和受主能级之间呈现指数增长的关系,  $P \sim \exp(-E_A/kT)$ , 可知 P 随着激活能的降低而逐渐增大。在掺入 h-BN 的条件下, 激活能很低, 可知同等条件下施加电压, h-

与 AlGaIn 材料的晶格匹配度较高, 产生的位错和裂纹较少。电子迁移率可表示为:

$$\mu(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) \approx \mu(\text{GaN}) \exp\left(\frac{-\Delta E_A}{kT}\right) \quad (5)$$

在 h-BN : Mg 中激活能较低, 接触电阻较小, 由式(5)可知得到的迁移率较高, LED 的发光效率提升。且 p 区空穴浓度的提高促进了 InGaIn 层电子和空穴的复合, 随着掺杂 h-BN 厚度的增加, 总的发射速率不断上升。

仿真研究了 p 区空穴浓度的提高对于 IQE 的影响, 通过图 5 的仿真结果可以看到, 与未掺杂相比, 掺入 h-BN 之后 IQE 有了显著提升。计算得到了未掺杂、掺杂 2 nm、3 nm、4 nm 的 h-BN 其 IQE 最大值分别为 0.26084、0.28748、0.32193、0.36339, 掺入 4 nm 的 h-BN 和未掺杂相比, IQE 提升了大约 39.32%。

如图 6 所示, h-BN 带隙相对于 AlN 上移, 图 6 中  $\Delta E_c$  和  $\Delta E_v$  分别表示导带偏移以及价带偏移,  $E_g$  表示带隙,  $E_c$  和  $E_v$  分别表示导带和价带。通过第一性原理计算得到 h-BN 和 AlN 之间的带偏移是一种 II 型(交错间隙)带对准<sup>[20]</sup>。此种特性有助于阻挡

电子泄露,提高空穴注入,增加了量子阱区域电子和空穴的复合,提升了 IQE。而随着掺入 h-BN 厚度的增加,电子泄露的更少,空穴注入的更多,电子空穴复合速率加快,IQE 进一步提高。

IQE 是注入的载流子在器件内辐射复合效率的度量标准,可以表示为:

$$\eta_{IQE} = \frac{Bn^2}{An + Bn^2 + Cn^3} \quad (6)$$

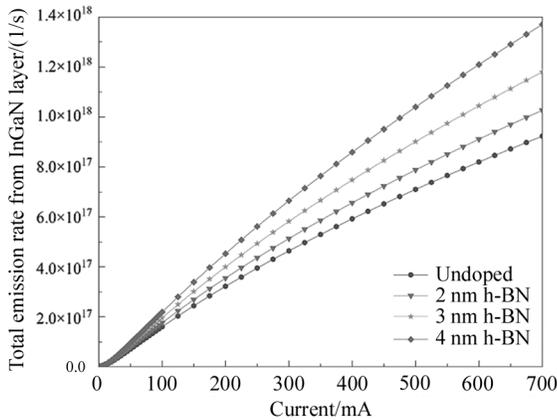


图 4 未掺杂以及掺杂 h-BN 厚度不同的总发射率  
Fig. 4 Total emissivity of undoped and doped h-BN with different thicknesses

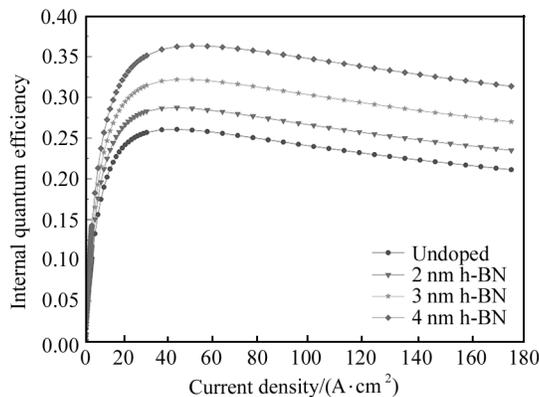


图 5 未掺杂以及掺杂 h-BN 厚度不同的 IQE  
Fig. 5 IQE of undoped and doped h-BN with different thicknesses

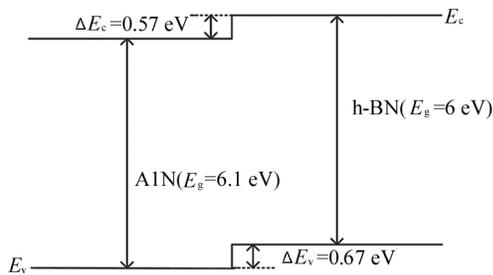


图 6 h-BN 和 AlN 之间的带隙排列图<sup>[20]</sup>  
Fig. 6 Band gap alignment diagram between h-BN and AlN<sup>[20]</sup>

式中,  $A$ 、 $B$  和  $C$  系数分别表示通过 SRH 过程的非辐射复合、双分子辐射复合和俄歇复合,  $n$  表示载流子密度。随着 p 区空穴浓度的提高, IQE 也在不断增加。根据式(6)可知  $A$ 、 $B$ 、 $C$  系数对于 IQE 有很大影响。减小  $A$  和  $C$  以及增大  $B$  都能有效提升 IQE, 但并不建议减小  $A$  系数,  $A$  系数的减小会造成功率最大值的减小。

SRH 复合很大程度上影响载流子寿命, 而非平衡载流子的寿命对于半导体器件有很大影响。在间接复合条件下, 过剩载流子寿命可以表示为:

$$\tau = \frac{\delta_p}{R} \quad (7)$$

式中,  $\delta_p$  是过剩的载流子浓度,  $R$  是复合速率。在本文中, p 区空穴浓度的提高促进了电子和空穴的进一步复合, 过剩载流子浓度减小,  $R$  增大, 过剩载流子寿命减小,  $B$  系数增大, IQE 提升。

本文得到的空穴浓度数量级在  $10^{18}$ , 由式(6)可知  $C$  系数是重要的影响因素, 而在重掺杂半导体中, 俄歇复合亦是主要的复合机制。在本模型中, 俄歇复合是效率下降的重要影响因素, 其发生率和载流子密度的立方成正比。而在 InGaN 层中, 载流子密度随着电流密度的增加而增大, 经历俄歇复合的载流子比例增加, 致使效率下降。

## 2.2 h-BN 层数对 p 型空穴浓度的影响

h-BN 厚度设置为 4 nm, 对  $y$  轴进行了取对数处理, 掺杂 2 层、4 层、8 层 h-BN 初始掺杂位置分别设置为  $0.2355 \mu\text{m}$ 、 $0.21675 \mu\text{m}$ 、 $0.207375 \mu\text{m}$ , 位移分别设置为  $0.075 \mu\text{m}$ 、 $0.0375 \mu\text{m}$ 、 $0.01875 \mu\text{m}$ , 从图 7 可以看出: 和未掺杂相比, 随着掺杂层数的增加, 图 7(b) 中峰值高度在不断上升, 空穴浓度在不断上升。计算了未掺杂、掺杂 2 层、4 层、8 层 h-BN 的空穴浓度分别为  $1.23819 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 、 $2.35137 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 、 $2.63886 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 、 $2.81341 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 。

如图 8 所示, 仿真了来自 InGaN 层总的发射率与电流之间的关系, 和未掺杂相比, 随着掺杂层数的增加, 发射率也在不断增加。分别计算了未掺杂、掺杂 2 层、4 层、8 层 h-BN 的发射率最大值分别为  $9.2303 \times 10^{17} \text{ s}^{-1}$ 、 $1.3703 \times 10^{18} \text{ s}^{-1}$ 、 $1.4114 \times 10^{18} \text{ s}^{-1}$ 、 $1.5895 \times 10^{18} \text{ s}^{-1}$ 。

掺杂不同层数的 IQE 仿真结果如图 9 所示, 和未掺杂相比, 随着掺杂层数的增加, IQE 也在不断增

加。分别计算了未掺杂、掺杂 2 层、4 层、8 层 h-BN 的 IQE 最大值分别为 0.260 84、0.363 39、0.473 97、

0.512 17。其中掺杂 8 层 h-BN 得到的效果最好,与未进行掺杂相比,IQE 提升了大约 96.35%。

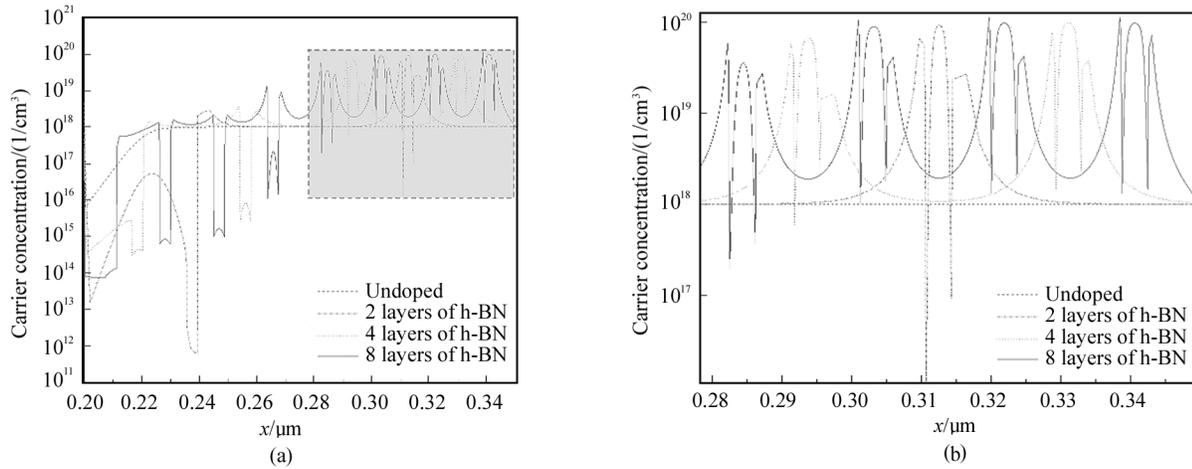


图 7 空穴浓度图:(a) 未掺杂以及掺杂 h-BN 层数不同的空穴浓度图;(b) 方形虚线框选部分的放大图

Fig. 7 Hole concentration diagram:(a) Hole concentration diagram of undoped and doped h-BN with different layers;(b) Enlarged view of the selected part of the square dotted line

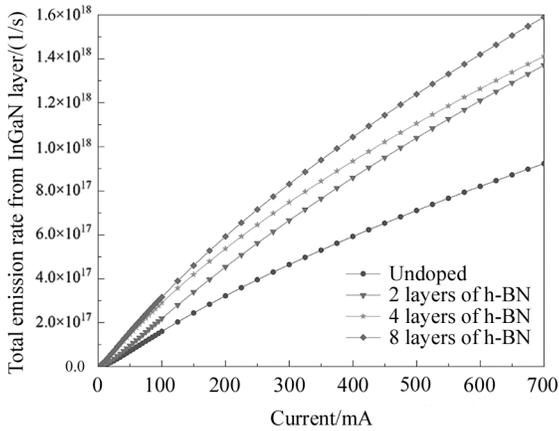


图 8 未掺杂以及掺杂 h-BN 层数不同的总发射率

Fig. 8 Total emissivity of undoped and doped h-BN with different layers

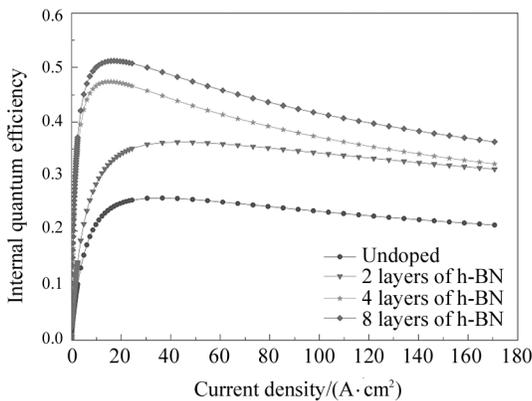


图 9 未掺杂以及掺杂不同层数 h-BN 的 IQE

Fig. 9 IQE of undoped and doped h-BN with different layers

### 3 结 论

同等条件下,随着  $x$  的增加,  $Al_xGa_{1-x}N$  中的受主能级会不断加深,自由空穴浓度不断减小,探索新的 p 型层器件结构以显著提高 DUV LED 发射极的自由空穴注入效率至关重要。本文仿真结果表明,在 DUV LED 的 p-AlGa<sub>x</sub>N 材料中掺杂 h-BN 能有效提升空穴浓度,仿真了掺杂 h-BN 的厚度、层数带来的影响,结果表明,掺杂 h-BN 后,p 型空穴浓度提升约一个数量级,和掺杂前相比,IQE 大约提升 96.35%。AlGa<sub>x</sub>N 和 h-BN 材料之间较高的晶格匹配度、h-BN 中较低的激活能以及 h-BN 相对 AlGa<sub>x</sub>N 材料带隙上移的特性有效阻挡了电子泄露,提高了空穴注入,促进了量子阱区域电子与空穴的复合,有效提高了发射速率和 IQE。在本文仿真结果中,掺杂 h-BN 厚度为 4 nm、层数为 8 层时,得到的效果较好。相对于 AlN,h-BN 的价带上移了大约 0.67 eV、导带上移了大约 0.57 eV,将 h-BN 作为电子阻挡层或者空穴注入层将会优于 AlGa<sub>x</sub>N,并且为克服富 Al 的 AlGa<sub>x</sub>N 低 p 型空穴浓度等提供了全新的解决方案。

### 参考文献:

[1] YU J,WEI Z,GUAN X,et al. High-speed real-time visible light communication system based on InGaN/GaN-base multi-quantum well blue micro-LED [J]. Optoelectronics Letters,2021,17(12):741-745.

- [2] YU H, MEMON M H, WANG D, et al. AlGaIn-based deep ultraviolet micro-LED emitting at 275 nm[J]. *Optics Letters*, 2021, 46(13): 3271-3274.
- [3] WU F, DAI J N, CHEN C Q. Research progress of AlGaIn based deep ultraviolet light emitting diodes[J]. *Journal of Synthetic Crystals*, 2020, 49(11): 2079.  
吴峰, 戴江南, 陈长清. AlGaIn 基深紫外发光二极管研究进展[J]. *人工晶体学报*, 2020, 49(11): 2079.
- [4] REN Z, LU Y, YAO H H, et al. Illnitride deep UV LED without electron blocking layer[J]. *IEEE Photonics Journal*, 2019, 11(2): 1-11.
- [5] LI J M, YAN J C, GUO Y N, et al. Research progress of UV LED[J]. *Science & Technology Review*, 2021, 39(14): 30-41.  
李晋闽, 闫建昌, 郭亚楠, 等. 紫外 LED 研究进展[J]. *科技导报*, 2021, 39(14): 30-41.
- [6] WU R Q, LIN J B, GUO Z N. Photometric, chromatic, electric characteristics of UV LED[J]. *Journal of Changchun Normal University*, 2022, 41(4): 22-25.  
吴荣琴, 林介本, 郭震宁. 紫外 LED 的光电特性研究[J]. *长春师范大学学报*, 2022, 41(4): 22-25.
- [7] HUANG P, XIAO L, CHEN X, et al. Efficiency improvement of AlGaIn-based deep ultraviolet LEDs with gradual Al-composition AlGaIn conduction layer[J]. *Optoelectronics Letters*, 2020, 16(4): 279-283.
- [8] LIU J L, MO C L, ZHANG J L, et al. Progress of five primary colours LED lighting source technology [J]. *China Illuminating Engineering Journal*, 2017, 28(1): 1-4.  
刘军林, 莫春兰, 张建立, 等. 五基色 LED 照明光源技术进展[J]. *照明工程学报*, 2017, 28(1): 1-4.
- [9] ZHUANG Q Y, PAN S W, CHEN S Y, et al. Degradation mechanisms of GaN-based green LED after accelerated DC current aging[J]. *Journal of Optoelectronics • Laser*, 2019, 30(6): 588-592.  
庄琼云, 潘书万, 陈松岩, 等. GaN 基绿光 LED 芯片电流加速失效机理研究[J]. *光电子 • 激光*, 2019, 30(6): 588-592.
- [10] CHUGH D, ADHIKARI S, WONG-LEUNG J, et al. Improving the morphology and crystal quality of AlN grown on two-dimensional hBN [J]. *Crystal Growth & Design*, 2020, 20(3): 1811-1819.
- [11] KOBAYASHI Y, KUMAKURA K, AKASAKA T, et al. Layered boron nitride as a release layer for mechanical transfer of GaN-based devices [J]. *Nature*, 2012, 484(7393): 223-227.
- [12] MAJETY S, LI J, CAO X K, et al. Epitaxial growth and demonstration of hexagonal BN/AlGaIn p-n junctions for deep ultraviolet photonics[J]. *Applied Physics Letters*, 2012, 100(6): 061121.
- [13] WU J, LI P, XU S, et al. Epitaxial growth of GaN on magnetron sputtered AlN/hexagonal BN/sapphire substrates [J]. *Materials*, 2020, 13(22): 5118.
- [14] LALEYAN D. Molecular beam epitaxy of wide bandgap Al (Ga)N and h-BN for deep-ultraviolet optoelectronics[D]. State of Michigan: University of Michigan, 2020: 107-108.
- [15] JIANG H X, LIN J Y. Hexagonal boron nitride for deep ultraviolet photonic devices [J]. *Semiconductor Science and Technology*, 2014, 29(8): 084003.
- [16] NAKARMI M L, KIM K H, KHIZAR M, et al. Electrical and optical properties of Mg-doped Al<sub>0.7</sub>Ga<sub>0.3</sub>N alloys [J]. *Applied Physics Letters*, 2005, 86(9): 092108.
- [17] WANG J, MA F, SUN M. Graphene, hexagonal boron nitride, and their heterostructures: properties and applications [J]. *RSC Advances*, 2017, 7(27): 16801-16822.
- [18] CHEN X. Structural design of 265 nm deep ultraviolet laser [D]. Zhengzhou: Zhengzhou University, 2019: 52.  
陈雪. 265 nm 深紫外激光器结构设计研究 [D]. 郑州: 郑州大学, 2019: 52.
- [19] OLIVIER F, DAAMI A, LICITRA C, et al. Shockley-Read-Hall and Auger non-radiative recombination in GaN based LEDs: A size effect study [J]. *Applied Physics Letters*, 2017, 111(2): 022104.
- [20] MAJETY S, LI J, ZHAO W P, et al. Hexagonal boron nitride and 6H-SiC heterostructures [J]. *Applied Physics Letters*, 2013, 102(21): 213505.

#### 作者简介:

张旭 (1982—), 男, 博士, 副教授, 硕士生导师, 主要从事半导体纳米结构的制备与应用以及太阳能电池仿真与设计方面的研究。