

**BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM KỸ THUẬT
THÀNH PHỐ HỒ CHÍ MINH**



CÔNG TRÌNH NGHIÊN CỨU KHOA HỌC CẤP TRƯỜNG

**NGHIÊN CỨU THIẾT KẾ CẤU TRÚC LED CÓ BƯỚC SÓNG
PHÁT XẠ KHOẢNG 370nm**

MÃ SỐ: T2016 - 68TĐ



Tp. Hồ Chí Minh, 2016

621.25.152

H98a - 18a1

TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM KỸ THUẬT
THÀNH PHỐ HỒ CHÍ MINH
KHOA KHOA HỌC ỨNG DỤNG

**BÁO CÁO TỔNG KẾT
ĐỀ TÀI KH&CN CẤP TRƯỜNG TRỌNG ĐIỂM**

**NGHIÊN CỨU THIẾT KẾ CẤU TRÚC LED CÓ BƯỚC
SÓNG PHÁT XẠ KHOẢNG 370nm**

Mã số: T2016 - 68TĐ

Chủ nhiệm đề tài: GV. ThS. Huỳnh Hoàng Trung

TP. HCM - 11/2016

THƯ VIỆN TRƯỜNG SƯ PHẠM KỸ THUẬT
SKC 005340

**Danh sách những thành viên tham gia nghiên cứu đề tài
và đơn vị phối hợp chính**

GV.ThS. Huỳnh Hoàng Trung

Chủ nhiệm

MỤC LỤC

Trang phụ bì	
Mục lục	
Thông tin kết quả nghiên cứu	
MỞ ĐẦU	1
CHƯƠNG 1: LÝ THUYẾT VÀ MÔ HÌNH UVLED	6
1.1. Hợp chất bán dẫn Nitride - hợp chất tiềm năng	6
1.2. Tính chất của LED	8
1.3. Công thức liên quan đến tính chất của linh kiện phát quang	12
CHƯƠNG 2: PHẦN MỀM SiLENSe	15
2.1. Giới thiệu phần mềm SiLENSe	15
2.2. Các thông số cần mô phỏng cho cấu trúc LED/UVLED	15
CHƯƠNG 3: THIẾT KẾ CẤU TRÚC LED CÓ BƯỚC SÓNG PHÁT XẠ KHOẢNG 370nm	19
3.1. Cấu trúc LED có bước sóng phát xạ khoảng 370nm	19
3.2. Kết quả tính toán cho cấu trúc LED có bước sóng phát xạ khoảng 370nm	20
3.3. So sánh thực nghiệm	33
3.4. Kết luận	35
CHƯƠNG 4: MÔ PHỎNG CHẾ TẠO CẤU TRÚC LED CÓ BƯỚC SÓNG PHÁT XẠ KHOẢNG 370nm TRÊN THIẾT BỊ MOCVD	36
4.1. Giới thiệu thiết bị MOCVD	36
4.2. Giới thiệu phần mềm Intellisuite	36
4.3. Mô phỏng chế tạo cấu trúc LED có bước sóng phát xạ khoảng 370nm	37
KẾT LUẬN VÀ KIẾN NGHỊ	41
TÀI LIỆU THAM KHẢO	42
PHỤ LỤC	

DANH MỤC BẢNG BIỂU

Bảng 1.1: Phân loại ánh sáng theo bước sóng theo tiêu chuẩn ISO-DIS-21348 ...	10
Bảng 3.1: Mật độ dòng, J (A/cm^2) được xác định theo mức bias mô phỏng từ 0 đến 5V trong cấu trúc MQW 0.5nm và 0.5nm	25

DANH MỤC CÁC CHỮ VIẾT TẮT

UV LED	Ultraviolet Light Emitting Diode
MOCVD	Metal Organic Chemical Vapour Deposition
EQE	External Quantum Efficiency
IQE	Internal Quantum Efficiency
MEH-PPV	Methoxy Ethyl Hexyloxy Phenylene Vinylene
MOVPE	Metal Organic Vapour Phase Epitaxy
HVPE	Hydride Vapour Phase Epitaxy
LPCVD	Low Pressure Chemical Vapor Deposition
TEM	Transmission Electron Microscopy
SiLENSe	Simulator of Light Emitters based on Nitride Semiconductors
PECVD	Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition
MQW	Multi Quantum Well
TMA	Trimethylaluminium
TEG	Triethylgallium
TMG	Trimethylgallium
TES	Tetraethylsilicon
WZ	Wurtzite
RS	Rock Salt
ZB	Zinc Blende
LCD	Liquid Crystal Display
NUV	Near Ultraviolet
TMAH	Tetramethyl Ammonium Hydroxide
UV	UltraViolet
SHTP	Saigon Hi-Tech Park
MBE	Molecular Beam Epitaxy
ISO	International Organization for Standardization

Tp. HCM, ngày 15 tháng 11 năm 2016

THÔNG TIN KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU

1. Thông tin chung

- Tên đề tài: Nghiên cứu thiết kế cấu trúc LED có bước sóng phát xạ khoảng 370nm
- Mã số: T2016 - 68TĐ
- Chủ nhiệm: GV. ThS. Huỳnh Hoàng Trung
- Cơ quan chủ trì: Đại học Sư phạm Kỹ thuật Thành phố Hồ Chí Minh
- Thời gian thực hiện: 12/2015 - 11/2016

2. Mục tiêu

- Cấu trúc LED có bước sóng phát xạ khoảng 370nm.
- Tính toán tối ưu các thông số cho cấu trúc LED có bước sóng phát xạ khoảng 370nm sử dụng phần mềm SiLENSe phục vụ cho việc chế tạo.
- Mô phỏng quy trình chế tạo cấu trúc LED trên thiết bị MOCVD.

3. Tính mới và sáng tạo

UV-LED là một trong những sản phẩm công nghệ cao, đang được chú trọng phát triển ở nhiều nước trên thế giới cho những ứng dụng như khử khuẩn, lọc không khí, các thủ tục y sinh, thông tin bảo mật, ... Đưa ra cấu trúc UVLED tối ưu với hiệu suất cao đã và đang được nhiều nhà khoa học trên thế giới tìm hiểu, nghiên cứu.

Ở Việt Nam việc nghiên cứu và chế tạo UVLED còn rất mới, chỉ có nhóm nghiên cứu của PGS. TS. Nguyễn Văn Hiếu chủ trì nghiên cứu sâu lĩnh vực này.

4. Kết quả nghiên cứu

- Tìm hiểu và đưa ra cấu trúc LED có bước sóng phát xạ khoảng 370nm.

- Sử dụng phần mềm SiLENSe (Package SimuLED của hãng STR, LB Nga) thực hiện tính toán khe năng lượng (E_g), sự liên hệ giữa các thành phần trong các lớp đa giếng lượng tử (MQW), cường độ và bước sóng phát xạ, đặc trưng I-V của UVLED.
- Mô phỏng quy trình chế tạo cấu trúc LED trên thiết bị MOCVD.

5. Sản phẩm

- Quyển báo cáo tổng kết đề tài.
- Bài báo khoa học đăng trên Tạp chí khoa học Giáo dục Kỹ thuật

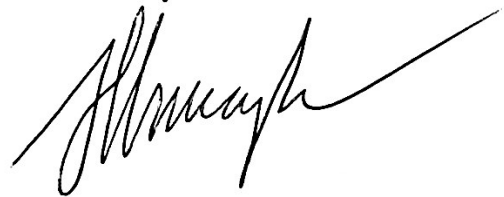
6. Hiệu quả, phương thức chuyển giao kết quả nghiên cứu và khả năng áp dụng:

Sản phẩm của đề tài là tài liệu tham khảo rất hữu ích cho những nghiên cứu chuyên sâu về linh kiện LED, đặc biệt về UVLED.

Trưởng Đơn vị

PGS. TS. Đỗ Quang Bình

Chủ nhiệm đề tài



GV. ThS. Huỳnh Hoàng Trung

INFORMATION ON RESEARCH RESULTS

1. General information:

- Project title: Research and design for structure light-emitting diode structures with emission wavelength around 370nm.
- Code number: T2016 - 68TĐ
- Coordinator: MSc. Huynh Hoang Trung
- Implementing institution: HCMC University Technology and Education
- Duration: from 12/2015 to 11/2016

2. Objective(s):

- Ultraviolet (UV) light-emitting diodes (LEDs) structures with emission wavelength around 370nm.
- The semiconductor software of SiLENSe can change the input parameter of UVLED structure as components of aluminum in $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{AlGa}\text{N}$ layers, the number (n) and thickness (d) of MWQs to study the wavelength, light emission efficiency and IV curves.

3. Products:

- Writing the final report topic
- Scientific paper published in the Journal of Science Education and Technology

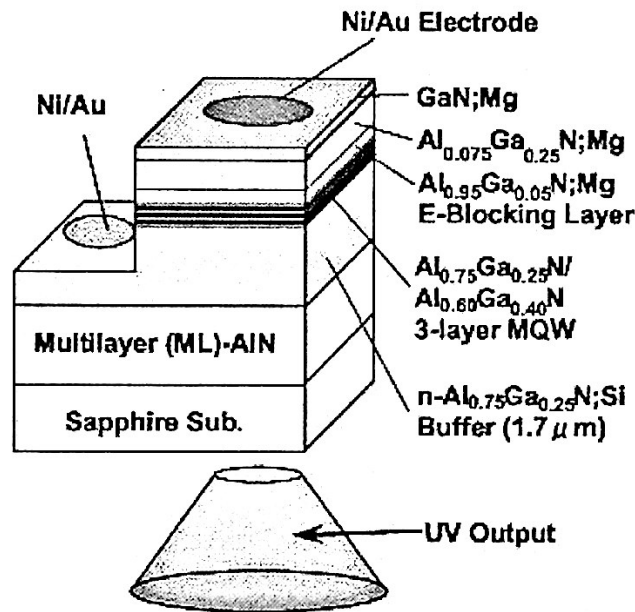
4. Effects, transfer alternatives of research results and applicability:

Products subject is useful reference for in-depth study of LED components, particularly UV-LED.

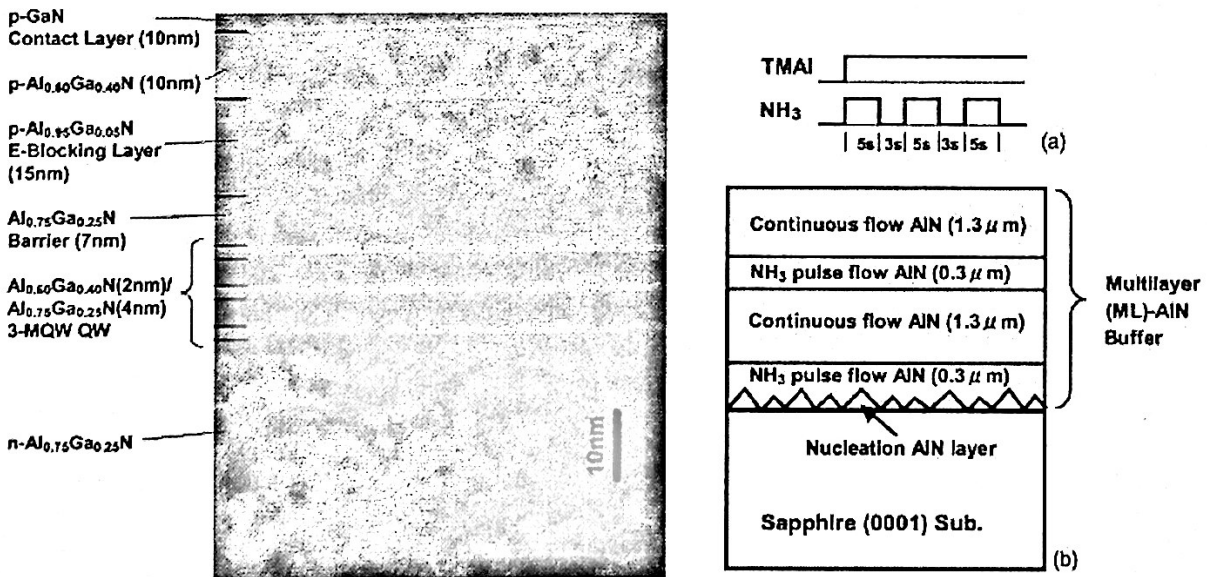
MỞ ĐẦU

Tình hình nghiên cứu trong và ngoài nước

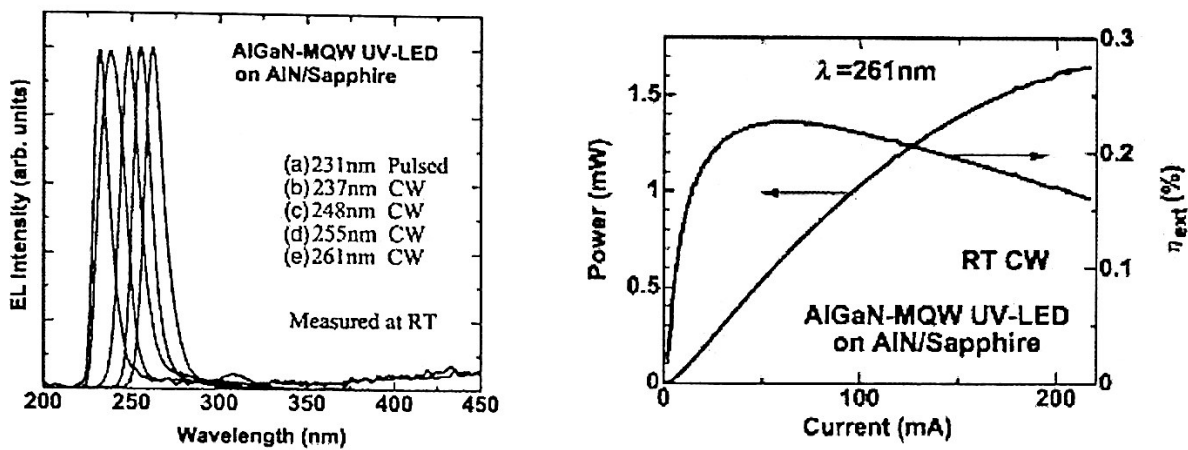
Năm 1995, lần đầu tiên diode phát xạ tại bước sóng ngắn 395nm với cấu trúc đơn giếng lượng tử (SQW) từ vật liệu AlGaIn/GaN/GaInN được chế tạo.



Hình 1: Cấu trúc của UV-LED với giếng đa lượng tử của AlGaIn-MQW cho phát xạ 231-261nm.



Hình 2: Ảnh chụp mặt cắt của LED theo phương pháp TEM cho thấy sự hình thành vùng đệm đa lớp AlN (Multilayer-AlN Buffer) trên đế sapphire của nhóm nghiên cứu H. Hirayama, Nhật bản. Thời gian thổi NH₃ so với kim loại hữu cơ (TMAI) trong qui trình tạo màng mỏng.



Hình 3: (a) Phổ điện tử phát xạ (EL) của AlGaIn-MQW LEDs với bước sóng 231nm, 237nm, 248nm, 255nm, và 261nm đo tại nhiệt độ phòng và dòng kích thích 50mA và (b) công suất đầu ra và hiệu suất lượng tử theo cường độ dòng kích thích đối với LED phát xạ 261nm [2].

Hideki Hirayama và cộng sự (RIKEN, Nhật bản) [1, 2] đã chế tạo thành công cấu trúc UV-LED cho phát xạ 231-261nm sử dụng AlGaIn với vùng đệm đa lớp trên đế sapphire. Công suất tối đa (output power) là 1,65mW và hiệu suất lượng tử (external quantum efficiency: EQE) là 0,23% đối với LED phát xạ 261nm.

Wang và cộng sự [2] đã chế tạo thành công UVLED sử dụng InGaIn trên đế Si có cường độ dòng điện qua LED 20mA và công suất 2,5mW, bước sóng phát xạ tử ngoại 370nm. Cải thiện công suất đầu ra 4mW và cường độ dòng điện qua tương ứng từ 20mA đến 100mA đối với LED có bước sóng phát xạ 370nm, do nhóm nghiên cứu Yi An Chang [3] thực hiện.

Một nhóm nghiên cứu tại Viện nghiên cứu Vật lý và Hóa học Nhật bản (RIKEN) và Đại học Saitama [4, 5] đã chế tạo thành công LED có bước sóng phát xạ 227,5nm và công suất đạt 0,15mW. Và một nhóm nghiên cứu khác đã báo cáo về sự phát xạ của LED với bước sóng phát xạ đạt 210nm, nhưng công suất chỉ đạt 0,02 μ W.

Gần đây, nhóm Sung Bum Bae [6] đã nghiên cứu cấu trúc LED có bước sóng phát xạ khoảng 380nm sử dụng công nghệ PSS và MQWs dựa trên vật liệu InGaIn hệ thống MOCVD. Bước sóng phát xạ của LED là 383,3nm và công suất đầu ra là 118,4mW ứng cường độ dòng điện qua LED là 35mA.

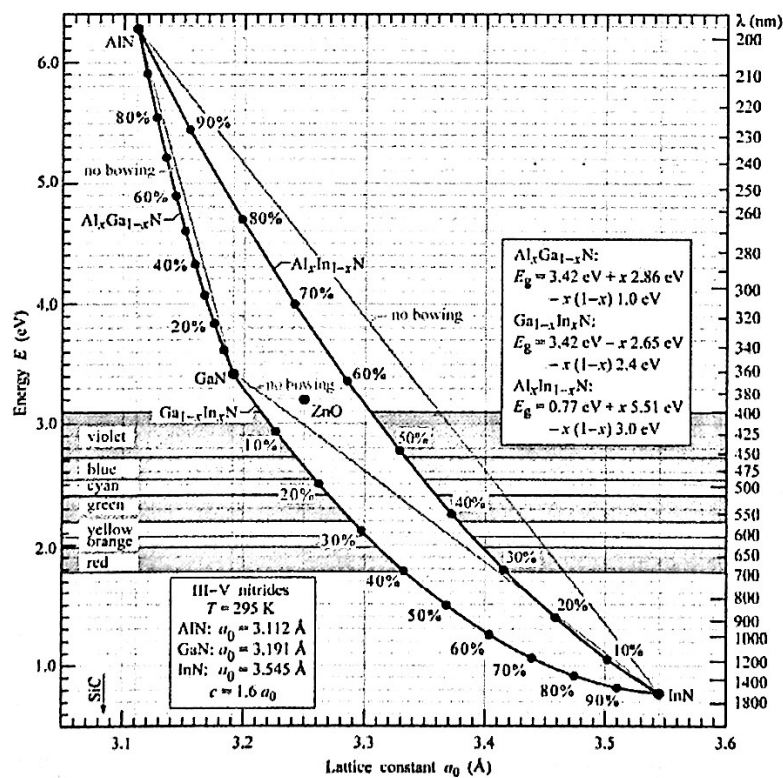
Tính cấp thiết của đề tài

LED phát xạ tử ngoại (Ultraviolet Light Emitting Diodes - UVLED) 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:

- Vùng UV-A có bước sóng phát xạ từ 320nm đến 400nm: Hữu ích để phát hiện tiền giấy giả, thuộc da, làm sạch không khí, xúc tác quang, và các ứng dụng chiếu sáng.
- Vùng UV-B có bước sóng phát xạ từ 280nm đến 320nm: Hữu ích cho đèn chiếu điều trị các bệnh về da, phân tích DNA, và các ứng dụng cảm biến sinh hóa.
- Vùng UV-C có bước sóng dưới 280nm: Hữu ích cho dao laser, máy khử trùng nước và lọc không khí, ...

Phạm vi ứng dụng rộng lớn như hàm của bước sóng phát xạ của cấu trúc UVLED được chế tạo [7, 8, 9].

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 [10].



Hình 4: Sự liên hệ giữa năng lượng vùng cấm và bước sóng phát xạ của hợp chất kim loại hữu cơ (MO).

Vật liệu bán dẫn III-V Nitride, AlN (6,2eV), GaN (3,4eV), và InN (0,8 eV) đã và 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 [11].

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 các thông số của cấu trúc LED phục vụ công việc chế tạo.

Mục tiêu và nội dung nghiên cứu

- Cấu trúc LED có bước sóng phát xạ khoảng 370nm.
- Tính toán tối ưu các thông số cho cấu trúc LED có bước sóng phát xạ khoảng 370nm sử dụng phần mềm SiLENSe phục vụ cho việc chế tạo.
- Mô phỏng quy trình chế tạo cấu trúc LED trên hệ thiết bị MOCVD thực tế dựa vào phần mềm Intellisuite.

Cách tiếp cận

- Nghiên cứu cơ bản: Tham khảo tài liệu, xây dựng mô hình, tính toán và tối ưu thông số.

Phương pháp nghiên cứu

- Tham khảo các kết quả nghiên cứu trên thế giới về LED và UVLED.
- Sử dụng các công cụ toán và phần mềm SiLENSe để khảo sát các cấu trúc vùng hoạt động đa giếng lượng tử MQW của LED. Hiểu được cơ chế hoạt động của các hạt tải và bức xạ.
- Mô phỏng quy trình chế tạo cấu trúc LED trên hệ thiết bị MOCVD.

Đối tượng và phạm vi nghiên cứu

- Đối tượng nghiên cứu: LED phát xạ cực tím với bước sóng khoảng 370nm dựa trên vật liệu bán dẫn Nitride.
- Phạm vi nghiên cứu: Lĩnh vực nghiên cứu cơ bản

- + Tính toán định hướng cho chế tạo LED phát xạ cực tím với bước sóng khoảng 370nm, tối ưu các thông số phục vụ cho chế tạo LED.
- + Xây dựng quy trình chế tạo LED trên hệ thiết bị MOCVD tại Trung tâm R&D, SHTP.

CHƯƠNG 1

LÝ THUYẾT VÀ MÔ HÌNH UVLED

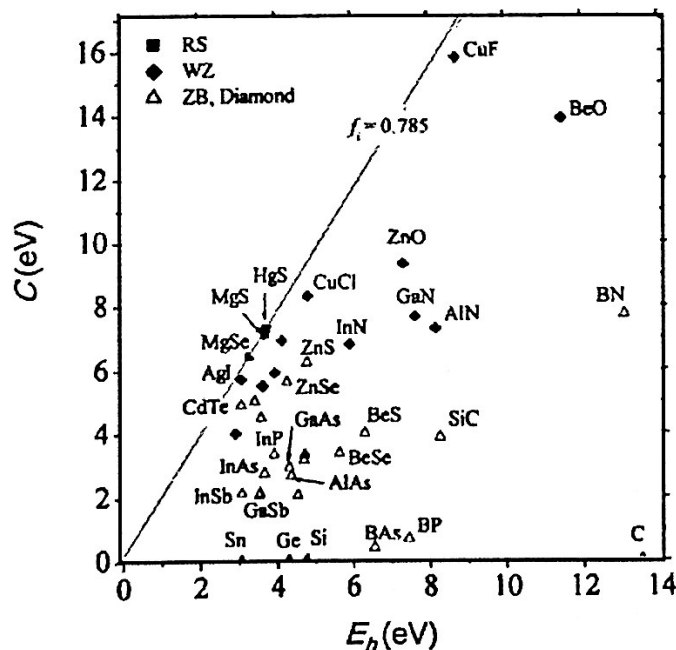
1.1. Hợp chất bán dẫn Nitride - Hợp chất tiềm năng

Hợp chất Nitride được tạo thành từ các nguyên tố nhóm III như B, Al, Ga và In với N₂ như BN, AlN, GaN, và InN cấu trúc tinh thể phụ thuộc vào góc ion.

Thế năng liên quan đến khe năng lượng (bandgap) được chia ra hai thành phần là liên kết hóa trị và liên kết ion. Khảo sát sự khác nhau 90° của góc pha giữa hai liên kết này, chúng ta thấy rằng bình phương năng lượng vùng cấm trung bình, E_{ga} , bằng tổng các bình phương của năng lượng liên kết cộng hóa trị (E_h) và liên kết ion (C).

$$E_{ga}^2 = E_h^2 + C^2 \quad [1.1]$$

Chỉ số ion được xác định: $f_i = E_h^2/C^2$.

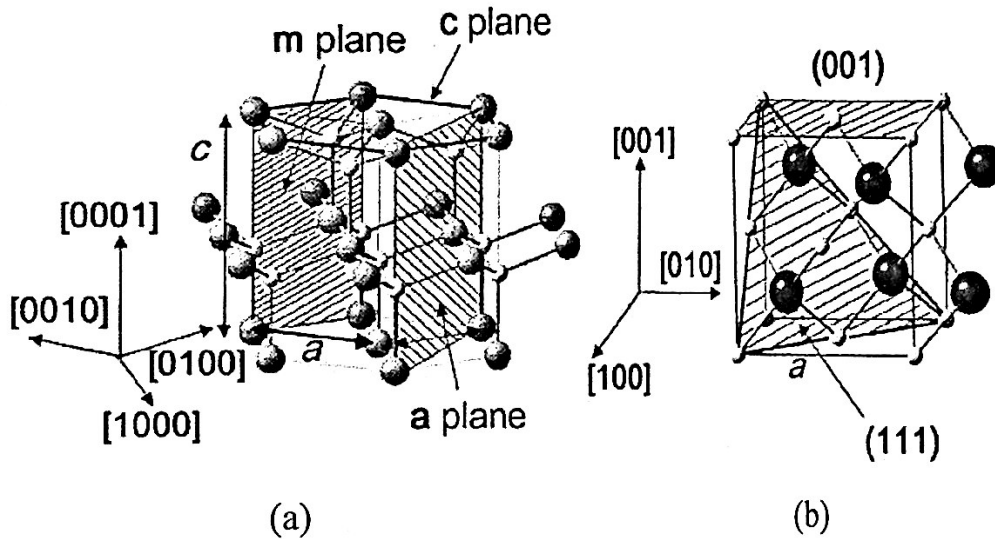


Hình 1.1: Sự liên hệ giữa năng lượng liên kết hóa trị và liên kết ion đối với các cấu trúc tinh thể khác nhau.

Hình 1.1 thể hiện sự tương quan giữa các cấu trúc tinh thể khác nhau, E_h và C . Các cấu trúc RS được phân bố tại vùng cao hơn của biên được biểu thị bởi đường thẳng $f_i = 0,785$. Mặc dù một đường thẳng không thể đại diện cho biên của

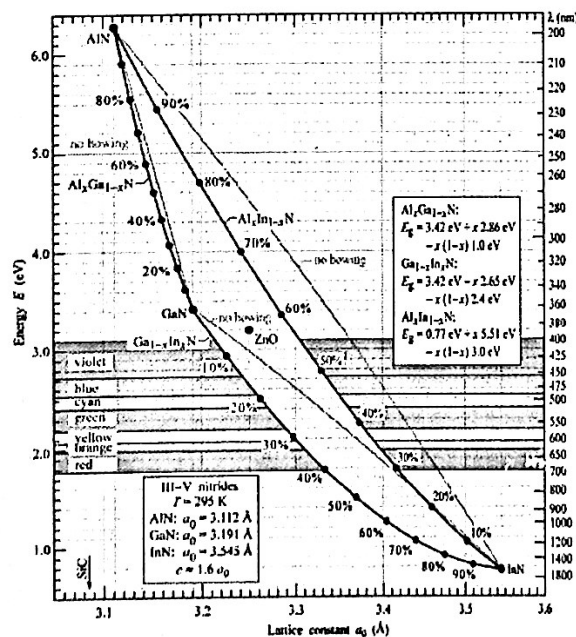
vùng đối với cấu trúc ZB và WZ, nhưng các tinh thể với chỉ số ion cao có xu hướng biểu thị cấu trúc WZ.

Như hình 1.2 cho thấy tính đối xứng của các cấu trúc tinh thể WZ và ZB có thể được chia thành các nhóm không gian C_{6v}^4 và T_d^2 , tương ứng. Các biểu tượng hình cầu lớn là các nguyên tố nhóm III, các hình cầu nhỏ hơn là các nguyên tố nhóm V.



Hình 1.2: Mô hình cấu trúc tinh thể: (a) WZ và (b) ZB.

Những hợp kim AlGa_xN và InAlGa_{1-x}N đã và đang thu hút sự quan tâm của nhiều phòng thí nghiệm trên thế giới vì chúng được coi là những vật liệu tiêu biểu để đạt được UV-LED sâu hoặc diode laser (LD).



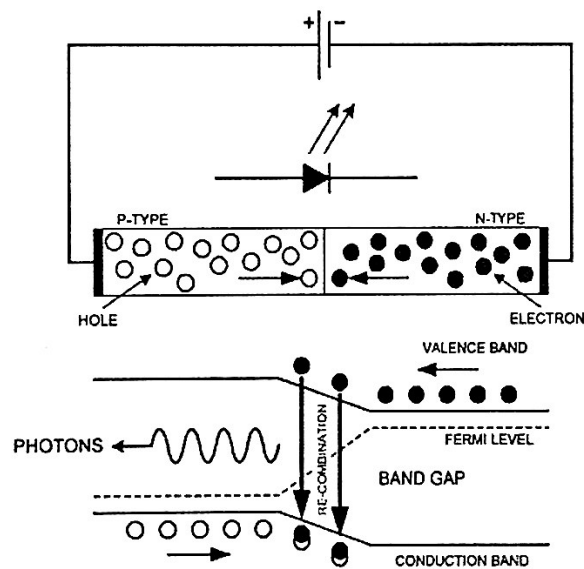
Hình 1.3: Sự liên hệ giữa năng lượng chuyển trạng thái trực tiếp của vùng cấm (band gap) với hằng số mạng (lattice constant) của cấu trúc wurtzite (WZ).

Hình 1.3 thể hiện mối quan hệ giữa năng lượng vùng cấm chuyển trạng thái trực tiếp và hằng số mạng của hệ thống vật liệu InAlGaN có cấu trúc tinh thể wurtzite và những bước sóng. Sự phát photon chuyển tiếp - trực tiếp của vật liệu nền AlGaN có thể được điều chỉnh giữa 3,4 eV (GaN) và 6,2 eV (AlN).

1.2. Tính chất của LED

1.2.1. Nguyên lý phát quang nối p - n

Một trong những thành phần quan trọng trong cấu tạo của các thiết bị điện tử nói chung và cấu trúc của LED nói riêng đó là chuyển tiếp p - n. Chuyển tiếp p - n được hình thành khi cho bán dẫn loại p tiếp xúc với bán dẫn loại n.



Hình 1.6: Mô tả nguyên lý phát quang nối p - n.

Bán dẫn loại p chứa nhiều lỗ trống tự do mang điện tích dương, bán dẫn loại n chứa nhiều điện tử tự do mang điện tích âm. Khi cho hai loại bán dẫn này tiếp xúc nhau, các lỗ trống có xu hướng chuyển động khuếch tán sang bán dẫn loại n, cùng lúc khối bán dẫn loại p nhận thêm điện tử (điện tích âm) từ khối bán dẫn n chuyển sang. Kết quả là khối bán dẫn p tích điện âm (thiếu lỗ trống, dư thừa điện tử) và khối bán dẫn n tích điện dương (thiếu điện tử, dư thừa lỗ trống). Ở vùng tiếp xúc hình thành điện trường làm cho một số điện tử bị lỗ trống hút, và khi chúng tiến lại gần nhau, chúng có xu hướng kết hợp lại với nhau tạo thành nguyên tử trung hòa điện. Quá trình này giải phóng ra năng lượng dưới dạng photon làm LED phát sáng.

1.2.2. Đặc tuyến Volt - Ampe

Khi LED được áp điện thế thấp, dòng điện đi qua chủ yếu là do dòng bức xạ không tái hợp và một phần tái hợp ở bề mặt. Khi điện thế tăng, dòng chủ yếu là dòng bức xạ khuếch tán.

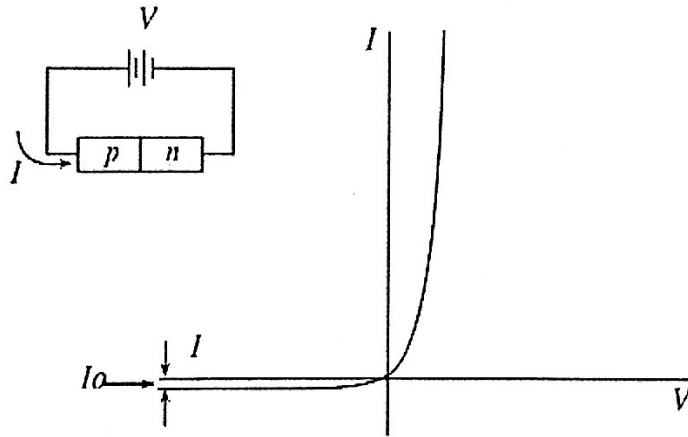
Với điện áp thuận V_F , dòng điện thuận:

$$I_F = I_0(e^{\frac{eV}{k_B T}} - 1) \quad [1.2]$$

Với dòng áp ngược V_R , dòng điện ngược:

$$I_F = I_0 = eA \left[\frac{D_p p_n}{L_p} + \frac{D_n n_p}{L_n} \right] \quad [1.3]$$

Trong đó n_p và p_n là mật độ electron và lỗ trống trong vùng p và n; A là diện tích mặt cắt ngang lớp p - n; L_p , L_n , D_p , D_n là độ dài khuếch tán và hệ số khuếch tán của electron và lỗ trống.



Hình 1.7: Đặc tuyến I - V của chuyển tiếp p - n khi phân cực thuận.

1.2.3. LED bước sóng cực tím

Phân loại ánh sáng theo bước sóng

Sóng điện từ được miêu tả bởi ba đại lượng vật lý tiêu biểu: tần số, bước sóng và năng lượng photon. Tần số, bước sóng và năng lượng photon có mối liên hệ với nhau và tuân theo thuyết lượng tử ánh sáng của Mark Planck. Mối liên hệ đó được miêu tả như sau:

$$E = h \cdot f \quad [1.4]$$

Mà

$$f = \frac{c}{\lambda} \quad [1.5]$$

Từ [1.4] và [1.5] ta có biểu thức liên hệ giữa năng lượng photon với bước sóng:

$$E = h \frac{c}{\lambda}$$

Hay
$$\lambda = \frac{hc}{E} = \frac{1,24}{E(\text{eV})} \quad [1.6]$$

Trong đó:

E: năng lượng photon (eV)

$h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{Js} = 4,14 \cdot 10^{-15} \text{eVs}$: hằng số Planck

$c = 3 \cdot 10^8 \text{m/s}$: vận tốc ánh sáng

λ : bước sóng ánh sáng (m), f: tần số ánh sáng (Hz)

Từ biểu thức (1.6) ta có bảng phân loại bức xạ theo bước sóng trong vùng tử ngoại.

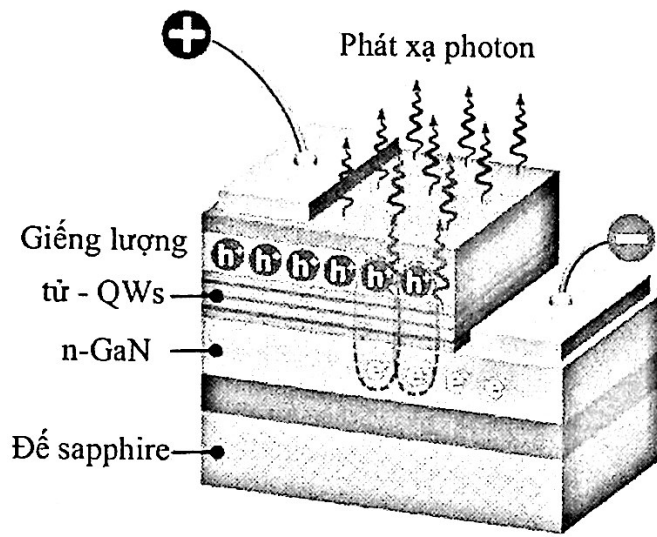
Bảng 1.1: Phân loại ánh sáng theo bước sóng theo tiêu chuẩn ISO-DIS-21348.

Tên	Viết tắt	Bước sóng	Năng lượng photon
Ultraviolet A	UVA	400 nm - 320 nm	3,10 - 3,94 eV
Vùng cận	NUV	400 nm - 300 nm	3,10 - 4,13 eV
Ultraviolet B	UVB	320 nm - 280 nm	3,94 - 4,43 eV
Vùng giữa	MUV	300 nm - 200 nm	4,13 - 6,20 eV
Ultraviolet C	UVC	280 nm - 100 nm	4,43 - 12,4 eV
Vùng viễn	FUV	200 nm - 122 nm	6,20 - 10,2 eV
Chân không	VUV	200 nm - 10 nm	6,20 - 124 eV
Vùng cực	EUV	121 nm - 10 nm	10,2 - 124 eV

Từ mối liên hệ giữa các đại lượng vật lý bước sóng, tần số và năng lượng cho thấy rằng những vùng ánh sáng có bước sóng càng dài thì năng lượng photon càng nhỏ, ngược lại, bước sóng càng ngắn thì năng lượng photon càng lớn.

Nguyên lý phát xạ bước sóng cực tím của UV-LED

Ngoài cấu trúc chuyển tiếp p - n, UVLED còn có một vùng đặc biệt hơn so với các LED thông thường, vùng này có nhiệm vụ phát xạ ánh sáng có bước sóng tử ngoại, cấu trúc giếng lượng tử (QW - Quantum Well).



Hình 1.8: Mô tả nguyên lý phát xạ bước sóng cực tím của UV LED.

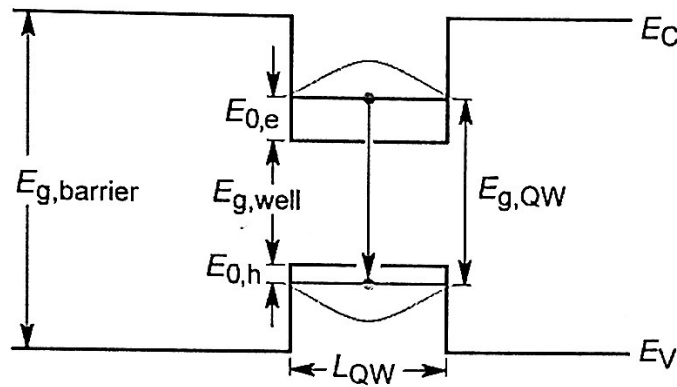
Khi được kích hoạt, các lỗ trống trong lớp bán dẫn loại p di chuyển xuống các lớp giếng lượng tử, đồng thời các điện tử trong lớp bán dẫn loại n cũng di chuyển vào cấu trúc đa giếng lượng tử. Tại đây chúng bị giam giữ trong các lớp giếng và bị kích thích lên các mức năng lượng cao hơn. Sau đó chuyển về trạng thái các mức năng lượng thấp và phát xạ ra photon có bước sóng tử ngoại.

Cơ sở lý thuyết của cấu trúc giếng lượng tử

Khi chiều dày lớp kích hoạt trở nên gần với bước sóng De-Broglie, các hiệu ứng lượng tử trở nên rõ ràng hơn. Hệ quả của việc giam giữ điện tử và lỗ trống trong lớp rất mỏng là những phân tử đó sẽ hoạt động như các hạt trong giếng thế. Do đó, thay vì ở trạng thái liên tục trong vùng dẫn, những điện tử đó bị giam giữ ở trạng thái lượng tử gián đoạn trong vùng cấm của vật liệu. Tương tự như vậy, các trạng thái trong vùng hóa trị của lỗ trống bị hạn chế đối với những mức gián đoạn trong giếng lượng tử. Sự hình thành của các trạng thái lượng tử gián đoạn trong vùng cấm hẹp có hiệu quả làm thay đổi khe năng lượng vật liệu, và cung cấp một cách làm thay đổi năng lượng photon phát ra bằng cách kiểm soát độ dày của khe năng lượng hẹp trong vật liệu.

Một giếng lượng tử đủ lớn, có thể giam giữ những hạt tải bên trong chính nó khi phân cực thuận. Vì thế, có thể sử dụng các giếng lượng tử để hạn chế sự phát xạ để chỉ xảy ra trong vùng kích hoạt, do đó nhận được bức xạ tối đa tại bước sóng phù hợp. Việc sử dụng đa giếng lượng tử để tăng cường sự giam giữ các hạt tải.

Một cấu trúc giếng lượng tử có nhiều hơn 1 giếng lượng tử, do đó nó có thể chứa nhiều hạt tải hơn và do đó năng lượng phát xạ cao hơn.



Hình 1.9: Mô tả sơ đồ vùng của giếng lượng tử.

Năng lượng vùng cấm của lớp vật liệu $Al_xGa_{1-x}N$ và $In_yGa_{1-y}N$ được tính toán như [14, 16]:

$$E_g(Al_xGa_{1-x}N) = 3,42eV + x \cdot 2,86eV - x(1-x) \cdot 1eV$$

với x là thành phần Al trong AlGaN

$$E_g(In_yGa_{1-y}N) = 3,42eV - y \cdot 2,65eV - y(1-y) \cdot 2,40eV$$

với y là thành phần In trong InGaN

1.3. Công thức liên quan đến tính chất của linh kiện phát quang [12]

1.3.1. Thống kê Fermi-Dirac

Điện tử và lỗ trống tuân theo thống kê Fermi-Dirac. Nồng độ hạt tải (carrier concentration) của điện tử (n) và lỗ trống (p) liên hệ với điện thế ϕ là:

$$n = N_C \cdot F_{\frac{1}{2}} \left(\frac{F_n - E_C + q\phi}{kT} \right), \quad p = N_V \cdot F_{\frac{1}{2}} \left(\frac{F_p - E_V - q\phi}{kT} \right) \quad [1.7]$$

Trong đó:

- F_n, F_p : mức Fermi của điện tử, lỗ trống.
- E_C, E_V : mức năng lượng bên dưới vùng dẫn, trên vùng hóa trị.
- q : điện tích của điện tử
- N_C, N_V : mật độ trạng thái trong vùng dẫn, vùng hóa trị:

$$N_C = 2 \left(\frac{m_n^{av} kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}, \quad N_V = 2 \left(\frac{m_p^{av} kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \quad [1.8]$$

m_n^{av}, m_p^{av} là khối lượng hiệu dụng trung bình của điện tử và lỗ trống.

