

2-밴드 모델을 이용한 발광다이오드의 발광 재결합계수에 대한 이론적 고찰

A Study on the Radiative Recombination Coefficients based on the two band model in Light Emitting Diodes

김현성, 심종인

한양대학교 전자컴퓨터공학부

aimhigh90@giga.hanyang.ac.kr, jishim@giga.hanyang.ac.kr

ABSTRACT

The spontaneous emission spectrum and the radiative recombination coefficient were analytically derived from the two band model for both the bulk (3-D) and the quantum well(2-D) structures of GaN-based Wurtzite crystal.

서 론

최근 반도체 기반의 발광 소자에 대하여 많은 연구가 진행되어 적색, 청색 및 자외선 영역의 발광소자로 이용되면서 많은 주목을 받고 있다. 발광소자의 효율을 높이는 것은 매우 중요한 연구의 한 분야로서 이를 달성하기 위해 실제 발광과 연관된 상수인 발광 재결합 계수에 대하여 정확한 이해를 위하여 많은 연구가 진행되었다(1)(2). 본 연구에서는 2-밴드 모델을 이용하여 이를 k-공간에서 3-D를 고려한 형태로 발광 재결합 계수를 이론적으로 유도하고 또한 양자우물에 대응되는 2-D형태의 결과를 도출하였다.

본 론

근절된(discrete) 2-밴드 모델에서 단위 에너지 당 단위 체적 당 자연 발광 스펙트럼(r^{spont})은 다음과 같이 표현된다⁽³⁾.

$$r^{spont}(\hbar\omega) = \frac{e^2 n_r}{\pi \hbar^2 c^3 m_0^2} \frac{1}{4\pi^3} |\hat{e} \cdot \bar{\mathbf{P}}_{ab}| \int d^3 \bar{\mathbf{k}} \delta(E_b - E_a - E) f_b (1 - f_a) \quad (1)$$

위 식에서 $E_b > E_a$ 로 가정 하였으며 $n_r, \hbar, c, e, V, f, m_0, \omega$ 는 각각 물질의 굴절률, 플랑크 상수, 자유공간에서 빛의 속도, 전하량, 부피, 점유 확률, 자유전자 질량 및 광학 각주파수이다. 그리고, $|\hat{e} \cdot \bar{\mathbf{P}}_{ab}|$ 는 편광에 종속적인 운동량 행렬요소(momentum matrix element)이다. 식(1)의 적분을 계산하면 다음과 같은 결과를 얻을 수 있다.

$$r^{spont}(\hbar\omega) = \frac{e^2 n_r}{\pi \hbar^2 c^3 m_0^2} \frac{1}{4\pi^3} |\hat{e} \cdot \bar{\mathbf{P}}_{ab}| \left(\frac{2\pi m_r k_B T}{\hbar^2} \right) E_g \left(1 + \frac{3k_B T}{2E_g} \right) \exp\left(\frac{F_c - F_v}{k_B T} \right) \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T} \right) \quad (2)$$

위 식에서 E_g, k_B, T 는 각각 밴드갭 에너지, 볼츠만 상수 및 절대 온도이다. 한편 발광 결합 스펙트럼은

전자 농도와 정공 농도의 곱에 비례한다. 즉, $r^{spont} = BNP$ 이다. 여기서 N 과 P 는 전자 및 정공의 주입 농도이고 이는 다음과 같이 주어진다.

$$N = N_c \exp\left(\frac{F_c - E_{c0}}{k_B T}\right), \quad P = N_v \exp\left(\frac{E_{v0} - F_v}{k_B T}\right) \quad (3)$$

따라서 식 (2),(3) 및 $r^{spont} = BNP$ 로부터 발광 재결합 계수(B) 는 다음과 같이 표현된다.

$$B_{3D} = \sqrt{2\pi} \frac{e^2 n_r}{\hbar^2 c^3 \epsilon_0 m_0^2} \left(\frac{\hbar^2}{k_B T}\right)^{3/2} \frac{1}{(m_e + m_h)^{3/2}} E_g \left(1 + \frac{3k_B T}{2E_g}\right) \quad (4)$$

한편 양자 우물 내에서 전자와 정공사이의 쿨롱 상호 작용에 의한 여기현상 및 산란에 의한 이완을 (scattering relaxation)을 무시하면 자연 발광 스펙트럼은 다음과 같이 주어진다.

$$r^{spont}(\hbar\omega) = \left\{ \frac{2e^2 n_r}{\hbar c^3 \epsilon_0 m_0^2} \sum_{n,m} |I_{nm}^{en}|^2 |\hat{e} \cdot \bar{P}_{cv}|^2 \rho^{2D} \exp\left(\frac{F_c - F_v}{k_B T}\right) H[\hbar\omega - E_{nm}^{en}(\mathbf{k}_t = 0)] \right\} \hbar\omega \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) \quad (5)$$

위식에서 $|I_{nm}^{en}|$ 는 Bloch 함수의 envelope 함수를 전도대역 및 가전자 대역의 겹침 적분(overlap integral) 한 것이다. $\rho^{2D} (= m_r / \pi \hbar^2 d_w)$ 는 축소 상태 밀도 함수이고 m_r 및 d_w 는 축소 유효 질량 및 우물 두께이다. E_{nm}^{en} 은 밴드-에지 천이 에너지이다. 따라서 식(3)(5) $r^{spont} = BNP$ 을 이용하면 2-D 발광재결합 계수는 다음과 같다.

$$B_{2D} = \left(\frac{2e^2 n_r}{\hbar c^3 \epsilon_0 m_0^2} \right) \frac{\sum_n |I_{nn}^{en}|^2 |\hat{e} \cdot \bar{P}_{cv}|^2 [E_{nn}^{en}(0) + 2k_B T] \exp\left(-\frac{E_{nn}^{en}(0)}{k_B T}\right)}{(m_e + m_h) \left[\sum_{n'} \sum_{m'} \exp\left(-\frac{E_{n'm'}^{en}(0)}{k_B T}\right) \right]} \quad (6)$$

결 론

본 논문에서는 근절된 2-밴드 모델을 이용하여 이에 따른 자연 발광 스펙트럼 및 발광 재결합 계수를 각각 bulk (3-D) 및 양자우물 (2-D) 에 대하여 이론적으로 유도하였다. 이를 통하여 발광 다이오드의 성능을 결정하는 중요 물질상수 중 발광 재결합 계수에 대하여 보다 정확히 해석할 수 있을 것으로 기대된다.

감사의글

이 논문은 BK21 사업단 연구의 일환으로 진행되었습니다.

참고문헌

1. R. N. Hall, Recombination process in semiconductors, Proc. Inst. Electr. Eng. 106 B, Suppl. 17, 983 (1960)
2. D. Z. Garbuzov, Radiation effects, lifetimes and probabilities of band-to-band transitions in direct A3B5 compounds of GaAs type, J. Luminescence 27, 109(1982)
3. S. L. Cuang, Physics of optoelectronic devices, chap. 9, John Wiley & Sons, Inc (1995)