

# Modelling nano-LEDs

**Doctoral Thesis**

**Author(s):**

Steiger, Sebastian

**Publication date:**

2009

**Permanent link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-005834599>

**Rights / license:**

In Copyright - Non-Commercial Use Permitted

Diss. ETH No. 18399

# Modelling Nano-LEDs

A dissertation submitted to the  
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY  
ZURICH

for the degree of  
Doctor of Sciences

presented by

SEBASTIAN STEIGER

Dipl. Phys. ETH

born 16 11 1981

citizen of Switzerland and Austria

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. B. Witzigmann, examiner

Prof. Dr. A. Imamoglu, co-examiner

2009

# Abstract

Light-emitting diodes (LEDs) have become one of the great hopes of the beginning 21st century. With their longevity, superior energy efficiency and impeccable color characteristics, LEDs have replaced conventional light sources in many applications ranging from displays to automotive forward lighting and are also starting to penetrate the general lighting market. They are expected to make a substantial contribution to the reduction of the worldwide consumption of electrical energy.

This thesis deals with the modelling and simulation of nanostructured semiconductor LEDs. A microscopic analysis of their operation requires the understanding of a plethora of physical processes. One of the most challenging issues therein is the spatially dependent loss of coherence in the carrier system. Two electroluminescence models are presented which tackle this phenomenon from different points of view. Both are illustrated with examples.

The first, semiclassical model is based on a partitioning of carriers into bound and unbound populations and assumes that bound carriers retain their coherence in the quantized directions, whereas unbound carriers are completely incoherent. Transport is possible in the unquantized directions and governed by classical drift and diffusion. Luminescence is calculated in a semiclassical treatment. The resulting implementation, named *tdkp/AQUA*, has the capability to investigate nanostructures of any dimensionality. Two examples are considered: an AlGaAs-based quantum wire LED and an InGaN-based nanocolumn LED.

The second model employs the quantum-statistical nonequilibrium Green's functions formalism to investigate planar optoelectronic struc-

tures. This approach permits deep physical insight into energy-resolved carrier distributions, scattering, carrier capture and coherence loss mechanisms. However, enormous computational costs put restrictions on the application examples. The model is applied to a unipolar resistive structure for a detailed validation and analysis of scattering effects, and to an AlGaAs-based single quantum well structure, therein highlighting differences and similarities to the semiclassical model of *tdkp/AQUA*.

# Zusammenfassung

Leuchtdioden (LEDs) sind eine der grossen Hoffnungen des beginnenden 21. Jahrhunderts. Dank ihrer langen Lebensdauer, hoher Energieeffizienz und brillianter Farben ersetzen LEDs herkömmliche Lichtquellen in vielen Bereichen wie etwa bei Displays, Autoscheinwerfern oder Verkehrssignalen und werden in naher Zukunft auch in der normalen Raumbeleuchtung Verwendung finden. Ferner verspricht der Einsatz von LEDs eine markante Reduktion des weltweiten Energieverbrauchs.

Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Modellierung und Simulation von nanostrukturierten LEDs aus Halbleitermaterialien. Eine mikroskopische Betrachtung der Funktionsweise erfordert das Verständnis mannigfaltiger physikalischer Prozesse. Einer der herausforderndsten Aspekte ist dabei der ortsabhängige teilweise Verlust der Kohärenz im Elektronensystem. Zwei Modelle für Elektrolumineszenz werden zusammen mit Beispielen vorgestellt, welche dieses Phänomen in unterschiedlicher Weise berücksichtigen.

Das erste, semiklassische Modell beruht auf einer Unterteilung des Teilchensystems in an die emittierende Region gebundene und ungebundene Populationen und nimmt an, dass gebundene Träger ihre Kohärenz in der Quantisierungsrichtung behalten, währenddem ungebundene Teilchen völlig inkohärent behandelt werden. Transport in den unquantisierten Richtungen erfolgt in einem Drift-Diffusionsbild. Lumineszenz wird in einem semiklassischen Bild berechnet. Die numerische Implementation dieses Modells, *tdkp/AQUA*, eröffnet die Möglichkeit, Nanostrukturen jeglicher Dimensionalität zu untersuchen. Als Beispiele werden eine AlGaAs-basierte Quantendraht-LED und eine

InGaN-basierte Nanosäulen-LED untersucht.

Das zweite Modell benützt den quantenstatistischen Nichtgleichgewichts-Greensfunktions-Formalismus zur Untersuchung von planaren optoelektronischen Strukturen. Dieser Ansatz erlaubt grundlegende physikalische Einsichten in die Energieverteilung der Teilchen, Streumechanismen, Einfangmechanismen und den Kohärenzverlust. Der immense numerische Aufwand beschränkt die Anwendungen jedoch auf vergleichsweise kleine eindimensionale Strukturen. Als Beispiele dienen ein unipolarer Resistor für eine detaillierte Untersuchung einzelner Streumechanismen und eine AlGaAs-basierte Quantentopf-Struktur, wobei sowohl auf Ähnlichkeiten als auch auf Unterschiede zum semiklassischen Modell von *tdkp/AQUA* eingegangen wird.