

GaN 基激光器电子阻挡层的优化分析^{*}

李 倜 潘华璞 徐 科 胡晓东[†]

(北京大学人工微结构和介观物理国家重点实验室, 北京大学宽禁带半导体研究中心,
北京大学物理学院凝聚态和材料物理研究所, 北京 100871)

摘要: 从载流子运输机制的角度, 分析了影响 GaN 基激光器中有源区电流溢出的因素, 对 AlGa_xN 电子阻挡层中 Al 组分和 p 型掺杂水平进行了优化. 结果表明, 当 p 型掺杂水平增高时, 所需要的势垒高度减小, 即 Al 组分减小.

关键词: 半导体激光器; GaN; AlGa_xN; 电子阻挡层

EEACC: 4320

中图分类号: TN248. 4

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2006)08-1458-05

1 引言

近十年来, III-族氮化物半导体材料由于其蓝光激光器(LD)、发光二极管(LED)和高温场效应管(FETS)等方面的广泛应用而备受关注. 研制技术的不断发展和完善使得大功率、高效率 and 长寿命的蓝光光源成为可能. 世界上第一只室温连续激光的 GaN 基 LD 是 1995 年 12 月由日本日亚 Nichia 公司的 Nakamura 最先研制成功的. 1999 年, 日亚又宣布实现了商品化的 GaN 蓝光激光器, 寿命达到 10,000h. 索尼和 Cree 等公司也相继实现了商品化的产品^[1]. 蓝光半导体激光器由于其广泛的应用前景和巨大的市场潜力, 成为世界光电子领域的研究热点. 据 2003 年一季度统计, 世界范围有近 184 家公司和至少 293 所大学及研究单位正在致力于 GaN 研究和开发工作. 2004 年底中国科学院半导体研究所和北京大学先后实现了电注入 GaN 基激光二极管的受激发射. 但 GaN 基蓝光激光器要真正走向实用化, 面临的问题仍然很多.

GaN 基激光器研究面临的一个很重要的问题, 当激光器处于工作状态下时, 大量的电流会有从有源区溢出, 使得它的发光效率大大降低, 并且溢出的电流产生的热量会使激光器的结温迅速升高, 从而影响它的寿命. 在 III-族氮化物半导体材料激光器中, 这种情况更严重. 因为它们的阈值电流密度一般比较高, 并且对于 InN/GaN 异质结构而言, 导带能带偏移和价带能带偏移之比为 3:7^[2]. 在这种情况下, 量子阱中势垒的高度较小, 电子更容易越过势垒而

溢出有源区. 因此尽量减少电流从有源区溢出, 对提高激光器的性能大有裨益.

为了减少电流的溢出, 提高 GaN 基激光器的性能, 目前常采取的方法是在生长完有源区量子阱之后, 再生长一层 p-AlGa_xN 电子阻挡层^[3~7]. 这层 AlGa_xN 电子阻挡层能够提供额外的势垒, 有效地阻挡电子溢出有源区. Hansen 等人^[4]讨论了电子阻挡层的位置和生长温度对器件性能的影响, 他们从实验上得到低温下(810 K)生长的 p-AlGa_xN 电子阻挡层更有利于降低激光器的阈值电流和提高发光效率, 并且生长完最后一层量子阱后直接生长电子阻挡层, 与生长完垒之后再生长电子阻挡层相比, 前者对电流溢出的抑制效果更好. Tu 等人^[6]对 LED 做了类似的研究, 实验上得到了与上述一致的结论, 并且他们还还对生长过程中的 Mg 流量做了优化. Stephan 等人^[7]进一步优化了电子阻挡层的厚度, 从而防止 p 型层中的 Mg 扩散到有源区, 使得器件的性能大大提高.

但如果 AlGa_xN 电子阻挡层的势垒过高, 它同时会阻挡价带的空穴进入有源区, 减少电子和空穴辐射复合的几率. 因此, AlGa_xN 电子阻挡层中 Al 组分和 p 型掺杂水平的选择是很关键的. Chang 和 Kuo^[8]利用 LASTIP 软件分别对 In_{0.2}Ga_{0.8}N/In_{0.02}Ga_{0.98}N 单量子阱和多量子阱激光器的结构做了数值模拟, 其中考虑了 p-Al_xGa_{1-x}N 电子阻挡层不同 Al 组分 x 和不同 p 型掺杂水平的影响. 他们认为要尽可能提高 p 型掺杂水平, 并且当 Al 组分 $x > 0.1$ 时, 就能有效抑制电流从有源区溢出. 随后 Kuo 和 Chang^[9]又继续对 In_{0.1}Ga_{0.9}N/In_{0.02}Ga_{0.98}N 量

^{*}国家自然科学基金(批准号: 60477011, 60476028, 60406007, 60276010)和国家高技术研究发展计划(批准号 2001AA313110, 2001AA313060, 2001AA313140, 2005AA31G020)资助项目

[†]通信作者. Email: huxd@pku.edu.cn

2006-01-12 收到, 2006-03-19 定稿

子阱激光器进行了数值模拟,认为 Al 组分 x 在 0.14~0.2 之间比较合适.

2 理论

本文将从载流子输运机制的角度,对 AlGaIn 电子阻挡层中 Al 组分和 p 型掺杂水平进行讨论.从电子和空穴的运动来看,造成电流溢出有源区的主要原因是:p 型层空穴浓度相对较低,量子阱中的大量电子无法与空穴复合从而溢出有源区.从这个角度出发,通过分析电子溢出有源区的可能机制,优化激光器的相关参数,减少电子溢出的几率.本文模拟采用的激光器结构包括 n 型 GaN 层、AlGaIn/GaN 超晶格波导层、In_{0.1}Ga_{0.9}N/In_{0.02}Ga_{0.98}N 单量子阱有源层、20nm 的 AlGaIn 电子阻挡层和 p 型 GaN 层.为了计算的方便,本文的计算只涉及到有源区和电子阻挡层.

下面是计算中所用到的参数:

GaN 中电子的迁移率为 $200\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ ^[9]; InN 中电子的迁移率为 $600\sim 1070\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ ^[10]; 导带和价带能带偏移比为 3/7.

InGaIn 和 AlGaIn 带隙由下列公式计算^[11,12]:

$$E_{g,\text{InGaIn}}(x) = xE_{g,\text{InN}} + (1-x)E_{g,\text{GaN}} - 1.43x(1-x)$$

$$E_{g,\text{AlGaIn}}(y) = yE_{g,\text{AlN}} + (1-y)E_{g,\text{GaN}} - 1.3y(1-y)$$

价带有效态密度分别为: $N_v(\text{AlN}) = 4.8 \times 10^{20}$, $N_v(\text{GaN}) = 2.5 \times 10^{19}$ ^[10].

下面将从电子和空穴两方面的运动来考虑,由于有源区中电子的浓度往往高出空穴浓度几个数量级,因此有源区中电子溢出产生的影响最为显著.故首先考虑电子阻挡层对电子溢出的影响.

2.1 电子运动

电子越过电子阻挡层势垒的可能机制有如下三种:

(1) 电子经过电场加速而有足够的能量直接越过势垒

n 型层中电子通过有源区能够获得的最大能量是

$$E = eV, \quad V \text{ 为降落在量子阱上的电压}$$

$$V = RI = \frac{JL}{en\mu} = \frac{JL}{en\mu}$$

其中 J 为有源区的电流密度; L 为有源区的厚度; n 为有源区的电导率; n 为有源区的电子浓度; μ 为有源区的电子迁移率.

对于 GaN 基激光器,正常工作时的电流密度 J 约为 $10\text{kA}/\text{cm}^2$ 量级.对于 InGaIn/GaN 量子阱,迁

移率约为 $100\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ 量级,有源区电子的浓度约为 10^{19}cm^{-3} 量级.因此,电子通过有源区能够获得的最大能量约为 10^{-6}eV ,远远小于电子阻挡层的势垒高度($x=0.01$ 时,Al _{x} Ga _{$1-x$} N 电子阻挡层的势垒高度为 0.067eV).即由于降落在有源区上的电压很小,电子从电场获得的能量也很小,因此电子能够通过电场加速而直接越过势垒的几率很小,故这种情况的影响可以忽略.

(2) 电子受热激发而越过势垒

电子受热激发越过势垒,类似于 TE(thermionic emission) 机制.从有源区溢出的电流 $I \propto \exp(-V_{\text{bar}}/kT)$,其中 V_{bar} 为阻挡层势垒的高度.图 1 给出了电子越过势垒的比例随 Al 组分 x 的变化关系.在图 1 的计算中,考虑到结温的影响,所取的温度 $T=450\text{K}$.如图 1 所示,为避免电子受热激发直接越过势垒,Al _{x} Ga _{$1-x$} N 电子阻挡层中 Al 组分必须满足 $x > 0.1$,此时电子溢出的比例 $< 1\%$.

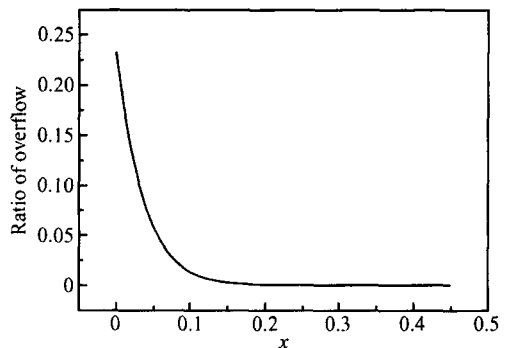


图 1 电子越过势垒的比例随 Al 组分 x 的变化

Fig. 1 Ratio of the overflow electron versus Al mole fraction x

(3) 电子隧穿势垒

如果阻挡层很薄,电子有可能从势垒隧穿.以一维方势垒的穿透模型计算,电子的透射系数 $T = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp[-\frac{2a}{h} \sqrt{2m(V_0 - E)}]$ ^[13],很明显上式中起主要作用的是指数项.其中 a 为电子阻挡层的厚度, V_0 为势垒高度, E 为电子的能量.这里取 $E=0$,当 $x=0.1$, $a=20\text{nm}$ 时,得到 $T \sim 10^{-37}$.说明 $a=20\text{nm}$ 时,电子隧穿势垒的几率很小,因此可以适当减小阻挡层的厚度,这也有助于增强空穴注入有源区和减小串联电阻.

取 $a=5\text{nm}$, $T \sim 10^{-10}$; $a=2.5\text{nm}$, $T \sim 10^{-5}$.但同时考虑到阻挡层的厚度减小,会增强 Mg 杂质向有源区的扩散,在有源区中形成非辐射复合中心,从而减小辐射复合的效率^[7].

综上所述,为了遏制电子的溢出,Al _{x} Ga _{$1-x$} N 电子阻挡层中 Al 组分必须满足 $x > 0.1$.

2.2 空穴运动

随着 AlGa_xN 层中 Al 组分的增加, Mg 受主的激活能也增加, 电子阻挡层中空穴的浓度减少; 同时空穴要进入有源区需克服的势垒高度也增加, 因此电子阻挡层中 Al 组分有一个上限. 如果超过这个上限, 虽然电子得到有效的抑制不能溢出有源区, 但进入有源区的空穴浓度也会大大减小, 激光器的发光效率也会下降.

由于 Mg 在 AlGa_xN 中的激活能还没有明确的报道, 这里采用实验值的线性拟合:

$$E_A = 170 + 704x \text{ (meV)}^{[14]}$$

在没有电注入的条件下, 考虑只有少数受主电离的弱电离情况, 有自由空穴的浓度为

$$p = \sqrt{\frac{N_A N_V}{2}} \exp\left(-\frac{E_A}{2kT}\right)^{[15]}$$

其中 N_A 为 p 型掺杂浓度; N_V 为价带有效态密度; k 为玻尔兹曼常数; T 为温度; $N_V = 2 \times \frac{(2 m_p kT)^{3/2}}{h^3}$, m_p 为空穴的有效质量, h 为普朗克常数.

在 Al_xGa_{1-x}N 中有

$$m_{p, Al_x Ga_{1-x} N} = m_{p, GaN} + x(m_{p, AlN} - m_{p, GaN})^{[19]}$$

其中价带有效态密度分别为 $N_V(\text{AlN}) = 4.8 \times 10^{20}$, $N_V(\text{GaN}) = 2.5 \times 10^{19}$.

图 2 是当 $N_A = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 时采用上述方法计算的空穴浓度. 显然, 随着 Al 组分的增加, 电子阻挡层中的空穴浓度在减少.

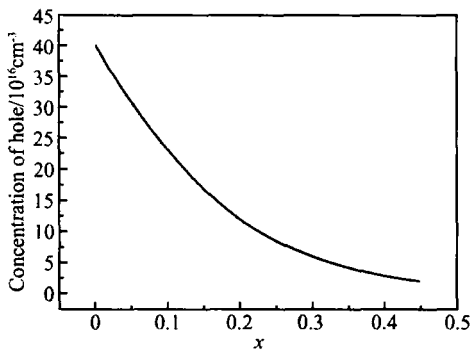


图 2 $N_A = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 时的空穴浓度随 Al 组分 x 的变化

Fig. 2 Concentration of hole in electron blocking layer versus Al mole fraction x when $N_A = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

同时随着 Al 组分的增加, 价带中空穴的势垒高度也在增加. 当 $x = 0.2$ 时, 价带的势垒高度为 0.128 eV . 通过本文前面对电子的讨论, 可同样估计降落在电子阻挡层上的电压. AlGa_xN 层中空穴的迁

移率为 $6 \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})^{[18]}$, 空穴浓度 $p = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, 阻挡层的厚度为 20 nm , 则降落在阻挡层上的电压约为 0.2 eV , 大于价带的势垒高度 (满足 $x < 0.3$ 时). 因此可以认为由于 p 型层的电阻率高, 大部分的电压降落在 p 型层上, 空穴能从电场获得足够的能量直接越过势垒. 故下面只考虑由于 Al 组分的增加, 电子阻挡层中空穴浓度的减小所造成的影响.

图 3, 4 分别是在 $N_A = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 和 $N_A = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 的情况下, 空穴浓度和溢出电子浓度的减少随 Al 组分 x 增加的变化. 根据上文的计算, 只有当 Al 组分高于 0.1 时才能有效阻止电子的溢出. 在此前提下, 曲线 a 表示相对于 $x = 0.1$ 时, 溢出电子浓度的减少随 x 增加的变化 (以有源区电子浓度为 10^{19} cm^{-3} 计算). 曲线 b 表示相对于 $x = 0.1$ 时, 空穴浓度的减少随 x 增加的变化.

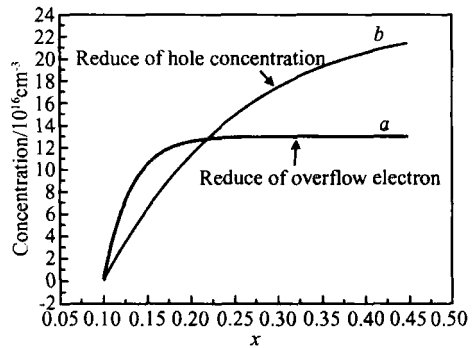


图 3 $N_A = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 时空穴浓度和溢出电子浓度的减少随 Al 组分 x 的变化

Fig. 3 Reduce of the hole concentration in the active layer and the reduced concentration of the overflow electron versus Al mole fraction x when $N_A = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

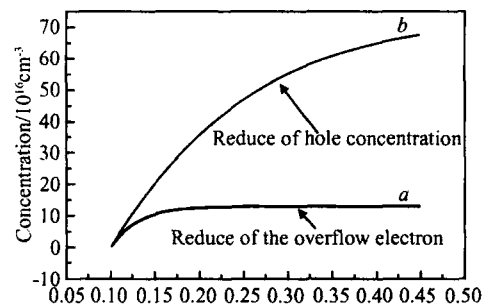


图 4 $N_A = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 时空穴浓度和溢出电子浓度的减少随 Al 组分 x 的变化

Fig. 4 Reduce of the hole concentration in the active layer and the reduced concentration of the overflow electron versus Al mole fraction x when $N_A = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

从图 3 可以看出, 当 $N_A = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $x > 0.23$

时,溢出的电子浓度的减少会小于 p 型中空穴浓度的减少,此时激光器的发光效率会下降.因此在这种情况下, x 值的范围应选择在 0.1 ~ 0.23 之间.而当 $N_A = 10^{19} \text{cm}^{-3}$ 时,溢出的电子浓度的减少一直小于 p 型中空穴浓度的减少,因此电子阻挡层中 Al 组分 x 应选择在 0.1 左右比较适合.上述可以说明,电子阻挡层势垒高度的选择与其中 Mg 的掺杂水平有关, Mg 掺杂水平高时,所需要的势垒高度减小,即 Al 组分 x 减小.

3 结论

综上所述,合适的 Al 组分和 p 型掺杂水平的 AlGa_{1-x}N 电子阻挡层能有效地抑制电子溢出有源层,改善器件的性能.当 p 型掺杂水平增高时,所需要的势垒高度减小,即 Al 组分 x 减小.对于文中讨论的 In_{0.1}Ga_{0.9}N/In_{0.02}Ga_{0.98} 单量子阱激光器,当 $N_A = 10^{18} \text{cm}^{-3}$ 时,Al 组分 x 的范围应选择在 0.1 ~ 0.23 之间.当 $N_A = 10^{19} \text{cm}^{-3}$ 时,Al 组分 x 应选择在 0.1 左右.

参考文献

- [1] Chen Lianghui, Ye Xiaojun, Chong Ming. Gallium nitride based blue laser diodes. *Physics*, 2003, 32(5):302(in Chinese) [陈良惠,叶晓军,种明. GaN 基蓝光半导体激光器的发展. *物理*, 2003, 32(5):302]
- [2] Martin G, Botchkarev A, Rockett A, et al. Valence-band discontinuities of wurtzite GaN, AlN, and InN heterojunctions measured by X-ray photoemission spectroscopy. *Appl Phys Lett*, 1996, 68:2541
- [3] Bour D P, Kneissl M, Van de Walle C G, et al. Design and performance of asymmetric waveguide nitride laser diodes. *IEEE J Quantum Electron*, 2000, 36:184
- [4] Hansen M, Piprek J, Pattison P M, et al. Higher efficiency InGa_{1-x}N laser diodes with an improved quantum well capping configuration. *Appl Phys Lett*, 2002, 81:4275
- [5] Asano T, Takeya M, Tojyo T, et al. Near-field second-harmonic generation at a metal tip apex. *Appl Phys Lett*, 2002, 80:3497
- [6] Tu R C, Tun C J, Pan S M, et al. Improvement of near-ultraviolet InGa_{1-x}N-GaN light-emitting diodes with an AlGa_{1-x}N electron-blocking layer grown at low temperature. *IEEE Photonics Technol Lett*, 2003, 15:1342
- [7] Stephan T, Köhler K, Kunzer M, et al. Electroluminescence efficiency of InGa_{1-x}N light emitting diodes: dependence on AlGa_{1-x}N:Mg electron blocking layer width and Mg doping profile. *Phys Status Solidi C*, 2003, 0(7):2198
- [8] Chang J Y, Kuo Y K. Simulation of blue InGa_{1-x}N quantum-well lasers. *J Appl Phys*, 2003, 93:4992
- [9] Kuo Y K, Chang Y A. Effects of electronic current overflow and inhomogeneous carrier distribution on InGa_{1-x}N quantum-well laser performance. *IEEE J Quantum Electron*, 2004, 40:437
- [10] Wu J, Walikiewicz W, Shan W, et al. Effects of the narrow band gap on the properties of InN. *Phys Rev, B*, 2002, 66:201403
- [11] Wu J, Walikiewicz W, Yu K M, et al. Small band gap bowing in In_{1-x}Ga_xN alloys. *Appl Phys Lett*, 2002, 80:4741
- [12] Nakamura S, Fasol G. *The blue laser diode*. Berlin: Springer-Verlag, 1997, chapter 3
- [13] Zeng Jinyan. *Introduction to quantum mechanics*. Beijing: Peking University Press, 2001 (in Chinese) [曾谨言. *量子力学导论*. 北京: 北京大学出版社, 2001]
- [14] Waldron E L, Graff J W, Schubert E F. Improved mobilities and resistivities in modulation-doped p-type AlGa_{1-x}N/GaN superlattices. *Appl Phys Lett*, 2001, 79:2737
- [15] Schubert E F, Grieshaber W, Goepfert I D. Enhancement of deep acceptor activation in semiconductors by superlattice doping. *Appl Phys Lett*, 1996, 69:3737

Optimization of the Electron Blocking Layer in GaN Laser Diodes^{*}

Li Ti, Pan Huapu, Xu Ke, and Hu Xiaodong[†]

(*State Key Laboratory for Microscopic Physics, Research Center for Wide Gap Semiconductors,
School of Physics, Peking University, Beijing 100084, China*)

Abstract: In view of the transport mechanism of electrical carriers, the factors involved in the current overflow in GaN-based laser diodes are analyzed, and the aluminum mole fraction as well as the p-doping concentration of the AlGaIn electron blocking layer are optimized. The results indicate that the appropriate barrier height (the Al mole fraction) is lower when the p-doping concentration is higher.

Key words: semiconductor laser diode; GaN; AlGaIn; electron blocking layer

EEACC: 4320

Article ID: 0253-4177(2006)08-1458-05

^{*}Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Nos. 60477011, 60476028, 60406007, 60276010) and the National High Technology Research and Development Program of China (Nos. 2001AA313110, 2001AA313060, 2001AA313140, 2005AA31G020)

[†]Corresponding author. Email: huxd@pku.edu.cn

Received 12 January 2006, revised manuscript received 19 March 2006

©2006 Chinese Institute of Electronics