

InGaN 量子阱激光器增益和 阈值电流的理论计算

刘 斌 邱荣生 方祖捷

(中国科学院上海光机所 上海 201800)

提要 根据现有的材料参数, 计算了 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{In}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$ 量子阱激光器的增益、阈值电流密度以及阈值与温度的关系。理论分析表明氮化物蓝绿光激光器的阈值电流密度是 GaAs 材料的 5 倍以上, 但其特征温度可接近 500 K。

关键词 InGaN 量子阱激光器, 增益计算, 阈值电流

1 引 言

Ⅲ-Ⅴ族 GaN, InN, AlN 及其合金 InGaN, AlGaN 材料近两年已成为半导体乃至整个材料领域研究和开发的热点和新宠, 这一方面是因为其带隙(1.8~ 6.3 eV)可覆盖整个可见光及紫外波段, 在全色显示和高密度数据存储等领域具有巨大的商业前景; 另一方面是因为作为蓝绿光激光器的另一重要材料体系 Ⅱ-Ⅵ族 ZnSe 始终未在解决激光器寿命方面有明显突破(尽管 SONY 公司已实现了室温 100 h, 但距商业化的要求尚具时日), 而且目前也看不到短期内解决这一问题的希望。而 Ⅲ-Ⅴ族氮化物由于其强的原子键结合使其光电子器件从一问世开始就在寿命、稳定性等方面显示出卓越的性能。Shuji Nakamura 在实现高亮度的蓝、绿、黄、红、紫 LED^[1], 并成功地推向市场后, 于 1995 年 12 月宣布实现了 InGaN 量子阱蓝光激光器室温脉冲激射^[2], 其波长为 417 nm, 阈值电流密度为 4 kA/cm², 并确信两年之后将可实现商品化的蓝光 LD。这进一步确立了氮化物在蓝绿光激光器领域的领先地位。

目前有关氮化物的研究仍主要集中在材料的生长, 但随着蓝光 LD 的问世, 器件的研究将日受重视。尤其是激光器的结构设计和理论计算。W. Fang 等人^[3]计算了 GaN LD 的增益、自发辐射谱及温度特性, 但其器件结构是体材料。而量子阱结构是目前 LED 和 LD 的核心。早期的蓝光 LED 为 DH 结构, 其光谱半峰宽达 70 nm, 而采用 QW 结构后, 其半峰宽缩短至 20 nm, 大大提高了色彩纯度。量子阱结构对降低 LD 的阈值电流、提高温度稳定性等方面均有显著作用。本文将根据人们现在已经获得的一些材料参数, 在一定的近似模型下, 从理论上计算 InGaN LD 的增益、阈值电流密度和器件的温度特性, 从而预计氮化物蓝光激光器的可能特性, 企求对材料和器件的设计提供参考。

2 理论模型

本文将基于 K 选择定则计算 InGaN 量子阱激光器的增益、阈值电流密度。量子阱激光器与普通双异质结激光器最主要的不同在于载流子态密度的差别,有关普通双异质结激光器参数的计算在文献[4]中有详细的叙述,因此只要用量子阱载流子的态密度代替体材料的态密度就可计算得到量子阱激光器的增益、阈值电流密度等。计算中主要涉及到:(1)利用有效质量方法解 Schrödinger 方程分别计算导带和价带量子阱的各个子能级,基于抛物线能带确定载流子态密度;(2)通过电中性条件计算电子和空穴的准费米能级;(3)最后基于 K 选择定则计算量子阱激光器的增益、自发辐射率和阈值电流密度。下面列出主要的计算公式。

量子阱结构中无弛豫(无展宽)的增益可表示为^[5]

$$g = \sum_{hh, lh} \sum_i A (f_c + f_{v\beta} - 1) H(E_{tr} - E_{\beta i}) \quad (1)$$

其中 $A = \frac{2\pi e^3 m_c |M_b|^2}{\epsilon_0 m_0^2 c h N_w E_{tr} L_w}$, M_b 为跃迁矩阵元, N_w 为阱区折射率, L_w 为阱宽, $E_n = E_g + E_{c_n} + E_{\beta i}$, E_g 为禁带宽度, E_{c_i} , $E_{\beta i}$ 为电子和空穴的第 i 阶子能级。 $E_{\beta i} = E_g + E_{c_i} + E_{\beta i}$, $E_c = \frac{m_{r\beta}}{m_e} (E_{tr} - E_{c_i})$, $E_{v\beta} = \frac{m_{r\beta}}{m_e} (E_{tr} - E_{\beta i})$, $f_c = \frac{1}{1 + \exp[(E_c - E_{f_e})/kT]}$, $f_{v\beta} = \frac{1}{1 + \exp[(E_{v\beta} - E_{f_h})/kT]}$, $\beta = lh, hh$ 表示轻、重空穴。 E_f 为电子和空穴准费米能级, $m_{r\beta}$ 为约化质量, E_{tr} 为光子能量。式中 H 是 Heaviside 阶跃函数。

声子与载流子之间以及载流子之间的散射,以及阱宽宽度的起伏会引起载流子在带内的弛豫,从而产生增益的展宽。展宽的增益

$$g_b = \sum_{lh, hh} \sum_i \int_{E_g + E_{c_i} + E_{v_i}}^{\infty} A (f_c + f_{v\beta} - 1) L(E) dE \quad (2)$$

其中 $L(E) = \frac{2h/\tau_{in}}{4\pi^2 (E_{tr} - E)^2 + (h/\tau_{in})^2}$ 为洛仑兹分布, τ_{in} 是弛豫时间。

半导体激光器的阈值增益可表示为

$$g_{th} = \frac{1}{\Gamma} \left[\alpha_i + \frac{1}{L} \ln \frac{1}{R} \right] \quad (3)$$

其中 α_i 为内损耗, L 为腔长, R 为功率反射率, Γ 为限制因子。由此可计算阈值载流子密度,进而确定准费米能级和自发辐射率 R_{spon} ^[4]

$$R_{spon} = \frac{16\pi^2 e^2 N_w |M_b|^2}{m_0^2 \epsilon_0 h^4 c^3 L_w} (m_{rlh} I_{lh} + m_{rhh} I_{hh})$$

其中 $I_\beta = \sum_i \int_{E_{\beta i}}^{\infty} E f_c (E_{c\beta} + E_{c_i}) f_\beta (E_{v\beta} + E_{\beta i}) dE$, $\beta = lh, hh$ 。

由此可以计算出名义载流子密度

$$J_{nom} = e L_w R_{spon} \quad (4)$$

假设注入量子效率为 η , 则 $J_{th} = J_{nom}/\eta$ 。

目前材料质量最好、器件性能最佳的氮化物 LED 和 LD 均为生长在蓝宝石上的纤锌矿结构。两种结构的氮化物材料的特性还正在研究之中,许多参数有待进一步测量确定。因此本文的计算模型还只能是基于闪锌矿结构的 GaAs 材料和器件的理论。假设用于闪锌矿结构的 Kane 理论仍适用于纤锌矿结构,那么跃迁矩阵元

$$|M_b|^2 = \frac{m_0^2 E_g (E_g + \Delta)}{6m_e \left[E_g + \frac{2}{3} \Delta \right]}$$

在这样一个较大的近似条件下, 鉴于氮化物材料的不少特性参数尚未能获得, 因此本文忽略了能带的非抛物线形状的影响; 晶格失配引起的应变量子阱效应也暂时不予考虑。另外由于目前材料生长是在高失配下进行的, 应变的引入、高密度的位错和缺陷是客观存在的。非辐射复合、光吸收损耗、漏电流等因素是不可避免的。这些因素现在也还难以考虑。本文只从一些最基本的原理和特性出发, 进行计算分析, 以得到一些有意义的结果。

3 计算参数的选取

本文的计算中氮化物的能带近似为两带: 载流子的辐射跃迁只发生在导带(电子)和价带(空穴)之间, 而不同于在 GaAs 和 InP 计算中将分别考虑重轻空穴。这一方面是因为 GaN 的轻空穴有效质量目前尚无报道; 另一方面相对重空穴, 轻空穴对自发辐射率和阈值电流密度的影响很小, 可以忽略。

相对于 GaN, InN, AlN 来说, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的材料参数, 尚未见完整详细的实验报道。本文假设 InGaN, AlGaIn 的材料参数(有效质量、折射率等)均符合 Vegard 定律。如以 P 代表材料的某一参数, 对 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, $P_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = xP_{\text{InN}} + (1-x)P_{\text{GaN}}$; 带隙 $E_g = xE_{\text{InN}} + (1-x)E_{\text{GaN}} - bx(1-x)$ 。对 InGaIn, $b = 1$ 。计算中的主要参数^[5,6]见表 1。

表 1 计算所用主要材料参数

Table 1 The main parameters used in calculation

| Parameter | GaN | InN | AlN |
|---------------------------|-------|-------|------|
| E_g / eV (300 K) | 3.39 | 1.89 | 6.2 |
| m_e^* / m_0 | 0.2 | 0.11 | |
| m_h^* / m_0 | 0.8 | 1.6 | |
| Δ / eV | 0.011 | 0.011 | |
| n | 2.67 | 2.9 | 2.15 |

4 计算结果

计算的材料和器件结构为 2.5 nm $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{In}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$ 量子阱, 波导层为 1 μm 的 GaN, 限制层为 $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ 。该结构与 Nichia 报道的第一支蓝光激光器相似。在计算中, 导带和价带的阶跃比(off-set)借用 AlGaAs/GaAs 的数据, 取为 6.5:3.5。

图 1 为 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{In}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$ 量子阱的电子和空穴第一子能级间跃迁波长与阱宽的关系。图中实线对应于电子和空穴有效质量由 Vegard 定律确定的计算结果, 虚线为采用 InN 数据的计算结果。可见 2.5 nm $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{In}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$ 量子阱对应的跃迁波长为 407 nm, 与实验结果接近。

图 2 为 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{In}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$ 量子阱的增益谱。图中实线的弛豫时间 $\tau_m = 0.2$ ps; 虚线的弛豫时间 $\tau_m = 0.1$ ps。载流子密度为 $20 \times 10^{18} / \text{cm}^3$ 。图 3 为峰值增益与注入载流子密度的关系。图中左边两曲线为 10nm GaAs 量子阱的增益, 右边为 InGaIn 量子阱的增益, 实线和虚

线分别对应不考虑和考虑弛豫效应 ($\tau_m = 0.1$ ps) 两种情况。图 4 为峰值增益与注入电流密度的关系。曲线拟合发现, 与其它材料体系一样, InGaN 量子阱的增益与载流子密度和电流密度

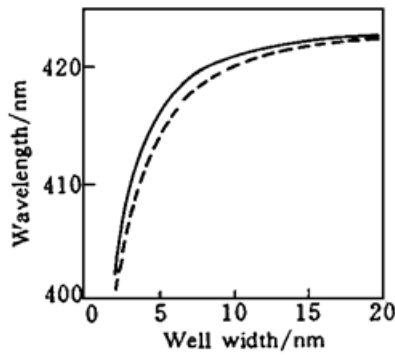


图 1 In_{0.2}Ga_{0.8}N/In_{0.05}Ga_{0.95}N 量子阱导带和价带第一子能级对应的跃迁波长与阱宽的关系

Fig. 1 Relation of the wavelength corresponding to the transition between the first sub-levels in In_{0.2}Ga_{0.8}N/In_{0.05}Ga_{0.95}N quantum well conduction and valence bands with the well width

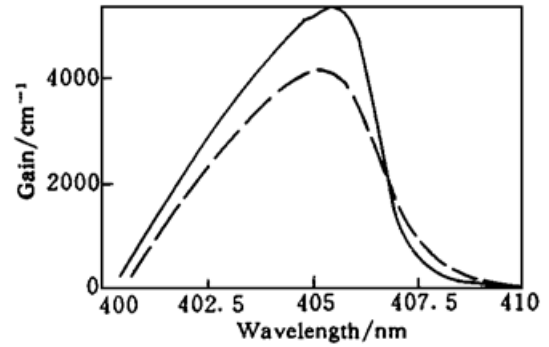


图 2 InGaN 量子阱的增益谱

Fig. 2 Gain spectrum of InGaN quantum well

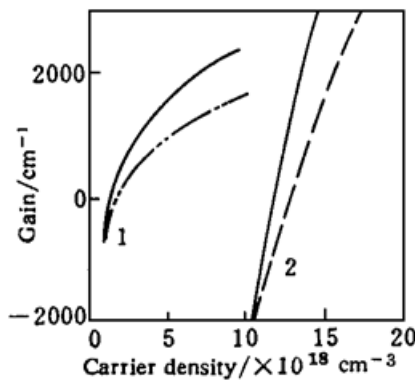


图 3 量子阱材料峰值增益与载流子浓度的关系

1: GaAs; 2: InGaN

Fig. 3 Relation of the peak gain in the quantum well with carrier density. 1: GaAs; 2: InGaN

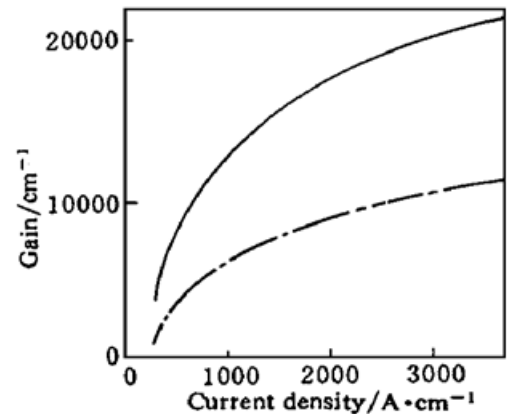


图 4 InGaN 量子阱材料峰值增益与注入电流密度的关系

Fig. 4 Relation of the peak gain in InGaN quantum well with injection current density

的关系符合对数关系 $g = g_0 \ln(N/N_0)$ 或 $g = g_0 \ln(J/J_0)$ ^[7]。这里我们给出由弛豫模型拟合所得的常数: 对 GaAs, $g_0 = 1000 \text{ cm}^{-1}$, $N_0 = 1.8 \times 10^{18} / \text{cm}^3$; 对 InGaN, $g_0 = 8700 \text{ cm}^{-1}$, $N_0 = 12 \times 10^{18} / \text{cm}^3$ 。可见 InGaN 的增益常数是 GaAs 的 8 倍以上, 但其透明载流子密度则是 GaAs 的 7 倍。这意味着 InGaN 材料较之 GaAs 材料将有高得多的阈值电流密度, 但其增益饱和效应将小得多。这主要是因为氮化物具有大得多的电子和空穴有效质量, 尤其是电子的有效质量。对 In_{0.2}Ga_{0.8}N, 其电子有效质量近似为 GaAs 的 16 倍, 空穴的有效质量近似为 GaAs 重空穴的 2 倍。因此氮化物具有很大的载流子态密度, 需要极高的注入才能实现粒子数反转。对图 4 拟合可得到 $g_0 = 4000 \text{ cm}^{-1}$ 。该值近似为增益的载流子密度关系式的两倍。这表明复合电流 $J \propto N^2$, 这是非辐射复合可以忽略情况下的合理的结果。拟合还得到 $J_0 = 200 \text{ A/cm}^2$ 。该透明

电流密度近似为 GaAs 情况的 4 倍。由于 InGaN 材料的增益常数较之 GaAs 大数倍, 而要获得最低阈值电流密度的最佳量子阱数 M_{opt} 反比于 g_0 , 即 $M_{opt} = \text{Int}[1/(\Gamma \tau_p g_0)]^{1/81}$, 其中 τ_p 为光子寿命, 因此对 InGaN 蓝光激光器, 单量子阱激光器将具有最低的阈值。

温度特性是影响半导体激光器性能的重要因素, 尤其对阈值电流密度。图 5 为计算得到的阈值电流密度随温度变化的情况。带隙随温度的变化为 $E_g(T) = E_g(0) - 5.08 \times 10^{-4} \frac{T^2}{996 - T}$ 。计算中分别取阈值增益为 750 cm^{-1} , 1500 cm^{-1} , 3000 cm^{-1} 。如果取内损耗 α 为 10 cm^{-1} , 限制因子 $\Gamma = 0.02$, $R = 0.3$, 则对应的激光器腔长分别为 $2400 \mu\text{m}$, $600 \mu\text{m}$, $240 \mu\text{m}$ 。对 $600 \mu\text{m}$ 腔长, 其阈值电流密度大于 700 A/cm^2 , 与对应的 GaAs 材料小于 100 A/cm^2 相比, 阈值增大 7 倍。从图中可以发现阈值电流密度随温度近似成线性关系, 损耗越大其线性斜率越大。如果用传统的阈值与温度的指数关系拟合可得到对应 $2400 \mu\text{m}$, $600 \mu\text{m}$, $240 \mu\text{m}$ 腔长的特征温度 T_0 分别为 430 K , 460 K , 480 K , 该值是 GaAs 材料的两倍。因此氮化物激光器的温度特性将远远优于其它 III-V 族材料, 有利于在高温电子和光子器件方面得到广泛的应用。必须说明的是这里的计算忽略了许多与温度有关的其它因素, 实际的特征温度计算将有待进一步的实验和理论。

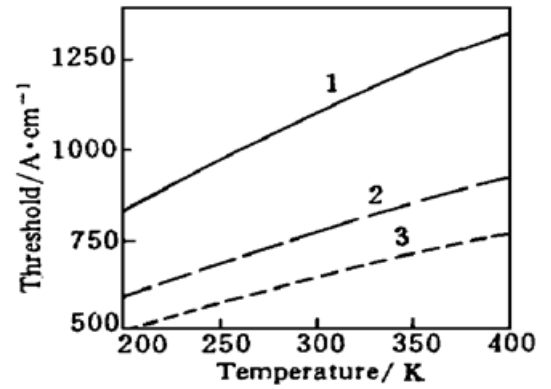


图 5 阈值电流密度随温度的变化

Fig. 5 Variation of the threshold current density with temperature

1: $L = 0.24 \text{ mm}$; 2: $L = 0.6 \text{ mm}$; 3: $L = 2.4 \text{ mm}$

5 结束语

本文计算了 InGaN 蓝光量子阱激光器的材料增益、阈值电流及其温度特性。计算表明, 与 GaAs 量子阱激光器相比, 由于氮化物大的电子和空穴有效质量, 使 InGaN 激光器的阈值大大上升(是 GaAs 的 5 倍以上)。但其增益饱和效应将有明显的改善。氮化物蓝绿光激光器的另一特点是将有好的温度稳定性, 其特征温度可接近 500 K 。这对器件的实用化将有重要意义。

如上所述, 目前材料制备和研究工作还在发展之中, 实验数据还未充分掌握, 因此本文的计算是较粗糙的。但是, 由此对材料和器件的发展趋势作一预计, 对材料和器件的设计提供参考, 还是有意义的。Nichia 的第一支蓝光 InGaN 激光器的阈值电流密度为 4 kA/cm^2 , 虽然远低于文献[3]的对 InGaN 体材料的计算值 25 kA/cm^2 , 但是仍然远大于本文对量子阱的计算值。目前材料生长和器件结构远未达到最佳状况, 材料的缺陷密度高达 $10^{10}/\text{cm}^2$, 这或许不会影响 LED 的性能, 但将大大增加激光器的内损耗和非辐射复合率, 使阈值电流密度上升。考虑到这一点, 本文的计算值可能为发展前景提供了一个参考数据。随着材料质量的提高, 氮化物激光器的极大的潜力将会充分体现出来。第一支 GaAs 激光器在 77 K 下的阈值电流密度近 20 kA/cm^2 , 经过 20 余年的努力, 今天的 GaAs 量子阱激光器室温阈值电流密度已低至 100 A/cm^2 以下。我们相信, 氮化物激光器的发展步伐将远远快于 GaAs, 在数年内将会实现阈值电流密度 1 kA/cm^2 左右的实用化激光器。

参 考 文 献

- 1 Shuji Nakamura. A bright future for blue/green LEDs. *IEEE Circuits & Devices*, May 1995, 19
- 2 Rpbert A. Metzger. Nicha demonstrates the first nitride laser. *Compound Semiconductor*, 1996, **2**(1) : 7~ 8
- 3 W. Fang, S. L. Chuang. Theoretical prediction of GaN lasing and temperature sensitivity. *Appl. Phys. Lett.*, 1995, **67**(6) : 751~ 753
- 4 H. C. Casey, M. B. Panish. *Heterostructure Lasers*. Academic press, 1978, 149
- 5 James H. Edgar. *Properties of Group III-Nitrides*. London : INSPEC, IEE, 1994, 117, 231
- 6 Shuji Nakamura, Takashi Mukai, Masayuki Senoh *et al.*. $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{(1-y)}\text{N}$ superlattices grown on GaN films. *J. Appl. Phys.*, 1993, **74**(6) : 3911~ 3915
- 7 P. W. A. Mc Ilroy, Atsushi Kurobe, Yutaka Uematsu. Analysis and application of theoretical gain curves to the design of multi-quantum-well lasers. *IEEE J. Quant. Electr.*, 1985, **QE-21**(12) : 1958~ 1963
- 8 Liu Bin, Fang Zujie. Modified rate equations for quantum well lasers. *Acta Optica Sinica* (光学学报), 1996, **16**(3) : 274~ 277 (in Chinese)

Theoretical Calculation of Gain and Threshold Current Density for InGaN Quantum Well Lasers

Liu Bin Qiu Rongsheng Fang Zujie

(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800)

Abstract The calculated results of the gain, threshold current density and its temperature dependence of InGaN QW lasers based on the available parameters are presented in this paper. The threshold current density of nitride blue and green QW lasers is more than five times higher than that of GaAs QW lasers, but their characteristic temperature can be raised up to 500 K.

Key words InGaN quantum well laser, gain calculation, threshold current