

## Al 组分对 AlGaIn/GaN 量子级联激光器性能的影响

陈贵楚<sup>1,2</sup>, 范广涵<sup>1\*</sup>

(1. 华南师范大学 光电子材料与技术研究, 广东 广州 510631; 2. 肇庆学院 物理系, 广东 肇庆 526061)

**摘要:** 通过对激光器一个周期单元的一维薛定谔方程与泊松方程进行自洽求解, 得到了能带与电子波函数的分布情况, 并且计算了在近共振条件下偶极跃迁元与垒层 Al 组分的关系, 得到了 Al 组分的优化结果。结果表明, 垒层材料的 Al 组分大约等于 0.15 时激光器的偶极跃迁元最大, 此时激光器处于垂直跃迁工作状态。

**关键词:** 量子级联激光器; Al 组分; 偶极跃迁元

**中图分类号:** O471.5; TN248.4 **PACS:** 42.55.Px; 78.55.Cr **PACC:** 7855E **文献标识码:** A

## 1 引 言

量子级联激光器 (Quantum cascade laser) 是量子剪裁和量子物理用于设计新型半导体子带跃迁激光器的典范, 由于现代材料生长技术如 MBE 可以在原子尺度上控制材料层的生长, 到目前为止已有多种材料系统实现了量子级联激光器器件的生长<sup>[1,2]</sup>, 如 InGaAs/AlGaAs 与 GaAs/AlGaAs, 但这两种材料体系制备的量子级联激光器有自身的缺点, 对于三阱式结构而言, 一般设计使激发低能态与基态间的带隙略大于 LO 声子能量 (36 meV), 但与室温下的热激发能 (26 meV) 相差不多, 容易造成电子从低能态向基态的反向跃迁。GaN 基材料体系的 LO 声子能量是 90 meV, 远大于热激发能, 以这种材料制备的量子级联激光器有良好的高温特性, 其次 AlGaIn/GaN 量子阱中超快的 LO 声子散射<sup>[3,4]</sup> 能快速转移激发低能态上的电子, 这对提高激光器的性能有利。

以 AlGaIn/GaN 材料体系制备的三阱量子级联激光器为研究对象, 通过自洽求解泊松方程与薛定谔方程来确定各子带能级位置与波函数分布, 求解中必须要考虑 GaN 基材料所特有的自发极化与压电极化。主要讨论了子带间的跃迁矩阵元、能级差与 Al 组分、外加电场之间的关系, 得到的结果有利于优化激光器的结构参数。

## 2 理论模型

六方结构的 III 族氮化物半导体的一个显著特征是有很强的极化效应, 包括自发极化 PSP 与压电极化 PPE。自发极化是由晶格常数比的非理想性引起的<sup>[5]</sup>, 方向与材料生长方向相反, 纤锌矿结构的 AlN 与 GaN 的自发极化强度均为负值, AlGaIn 合金的自发强度与 Al 组分有关, 可表示为前面两者的线性组合。压电效应是由 AlGaIn 与 GaN 两种材料的晶格常数不匹配引起的, 压电极化强度可表示为<sup>[6]</sup>:

$$P_{PE} = 2 \frac{a - a_0}{a_0} (e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}}) \quad (1)$$

其中  $a_0$  和  $a$  分别是平衡晶格常数与应变晶格常数,  $e_{31}$  和  $e_{33}$  是压电系数,  $C_{13}$  和  $C_{33}$  是弹性系数。上式中认为应变弛豫度  $R$  为零, 对于量子级联结构中的较薄的阱垒层是合适的。

依据有效质量理论, 设  $c$  轴生长的 GaIn/AlGaIn 量子级联结构中的电子子能带满足导带电子在  $\Gamma$  点附近的薛定谔方程, 其表达式如下:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \Psi_i(z) + V_C(z) \Psi_i(z) = E_i \Psi_i(z) \quad (2)$$

其中  $m^*$  是电子有效质量,  $E_i$  与  $\Psi_i$  分别是第  $i$  个子带的能量和波函数,  $V_C(z)$  是导带底能量。

收稿日期: 2008-12-23; 修订日期: 2009-02-18

基金项目: 国家自然科学基金 (50602018); 广州市 LED 工业化研究基地项目 (2004U13D0021); 粤港关键领域重点突破项目 (2007A010501008) 资助

作者简介: 陈贵楚 (1973 -), 男, 湖南岳阳人, 主要从事光电子器件的研究。

E-mail: gchenbox@163.com

\*: 通讯联系人; E-mail: gfan@senu.edu.cn

一维泊松方程为:

$$\frac{d^2}{dz^2} V_c(z) = \frac{\rho(z)}{\varepsilon(z)} \quad (3)$$

其中  $\rho$  为总电荷密度,  $\varepsilon$  为介电常数, 总电荷密度由下式给出:

$$\rho(z) = q \left[ \sum_i (P_{z+} - P_{z-}) \delta(z - z_i) + N_D^+(z) - \sum_i n_i |\Psi_i(z)|^2 \right] \quad (4)$$

其中等号右边第一项表示界面处的极化电荷面密度, 等号右边第三项表示对子带填充电子求和,  $P_{z+}$  与  $P_{z-}$  分别是  $z$  处右侧与左侧的极化强度,  $z_i$  是界面,  $N_D^+$  是电离施主浓度,  $n_i$  是能级为  $E_i$  的第  $i$  个子带的二维电子密度, 它们的表达式如下:

$$N_D^+(z) = \frac{N_D}{1 + \exp\left[\frac{E_F - E_D(z)}{k_B T}\right]} \quad (5)$$

$$n_i = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[ 1 + \exp\left(\frac{E_F - E_i}{k_B T}\right) \right] \quad (6)$$

其中  $E_F$  是费米能级,  $N_D$  是掺杂施主浓度,  $E_D$  是电离施主能级, 它的取值低于导带底 0.2 eV。费米能级由电中性条件决定:

$$\int_0^{d_i} \left[ N_D^+(z) - \sum_i n_i |\Psi_i(z)|^2 \right] dz = 0 \quad (7)$$

其中  $d_i$  是每层厚度。

### 3 结果与讨论

我们以 Sun 等<sup>[7]</sup> 与 Huang 等<sup>[8]</sup> 所报道的 AlGaIn/GaN 三阱式量子级联激光器为例进行研究, 其结构如图 1 所示。他们所报道的级联结构的阱垒层的厚度是一样的, 不同的是 Sun 等制备的激光器的垒层是  $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$  合金, 而 Huang 等报道的是  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 。

计算用的各个物理参数, 包括 AlN 和 GaN 材料的自发极化强度、晶格常数、压电常数、弹性常数、介电常数以及电子有效质量等等, 都来自于文献<sup>[6,9,10]</sup>, 而 AlGaIn 合金的参数为 AlN 和 GaN 二者的线性组合。

首先计算 Sun 等的  $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}/\text{GaN}$  量子级联激光器的一个周期单元的电子能带与波函数分布, 导带带阶以垒阱材料各自的禁带宽度之差的 70% 计算, 大约等于 0.2 eV<sup>[11]</sup>, 图 2 是在外电场为  $7 \times 10^4$  V/cm 下得到的子带能谱与电子包络函数, 由于极化强度的影响在垒层与阱层产生方向

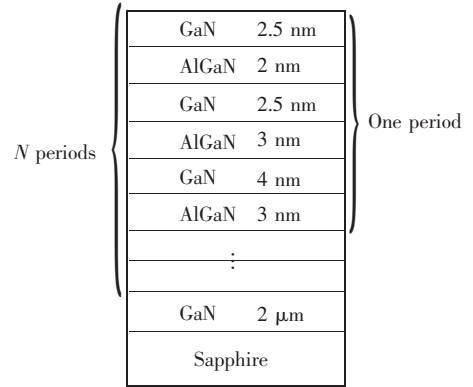


图 1 QCL 有源区的结构示意图

Fig. 1 The schematic diagram of active layer structure in QCL

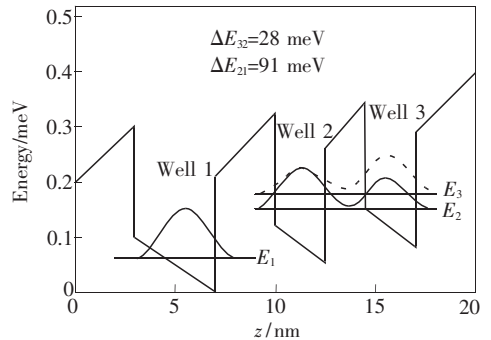


图 2 一个周期单元在外加电场  $E = 7 \times 10^4$  V/cm 作用下的能带结构与电子波函数示意图

Fig. 2 Band structure, subband energy separations and wavefunctions of the active region under the external bias  $E = 7 \times 10^4$  V/cm

相反的内建场, 使垒层与阱层的势能向相反方向倾斜。能级  $E_3$  是激光上能级, 能级  $E_2$  是激光下能级, 能级  $E_1$  是基态低能级。以第一个阱中三角势的底部为能量零点, 计算可得到能级  $E_3$  与  $E_2$  之差  $\Delta E_{32} = 28$  meV, 此为激光器激发的光子能量, 能级  $E_2$  与  $E_1$  之差  $\Delta E_{21} = 91$  meV, 这正好与 GaN 材料的 LO 声子能量 (90 meV) 接近, 因此能级  $E_2$  上的电子能以近共振 LO 声子散射的形式快速向能级  $E_1$  转移, 这样能维持激光器的粒子数反转。阱 3 与阱 2 由很薄的垒层 (2 nm) 隔开, 两阱中的电子波函数有明显的耦合, 从而造成两者重叠较多, 计算能级  $E_3$  与  $E_2$  之间的偶极跃迁元  $z_{32} = 2.60$  nm, 在这种情况下激光器应是垂直跃迁工作。用前面的方法我们计算了同样的量子级联结构的有源区在外场为  $1 \times 10^5$  V/cm 下的子带能谱与电子包络函数, 如图 3 所示, 计算可得

$\Delta E_{32} = 45 \text{ meV}$ ,  $\Delta E_{21} = 112 \text{ meV}$ , 与 GaN 材料的 LO 声子能量比较,  $\Delta E_{21}$  大了很多, 这使得能级  $E_2$  与  $E_1$  之间的电子转移不符合近共振条件, 对激光器的粒子数反转不利。其次, 随着外场的增大, 阱 3 与阱 2 的电子波函数相互耦合减弱, 重叠部分变小, 计算两能级间的偶极跃迁元  $z_{32} = 1.1 \text{ nm}$ , 据此可以判断激光器应是工作在斜跃迁状态。

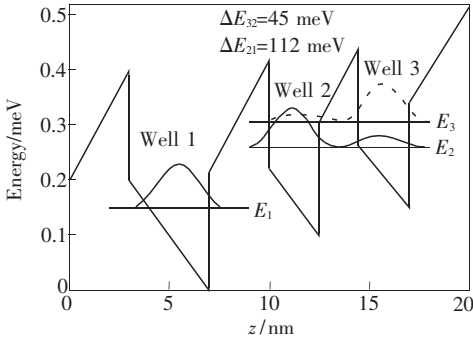


图3 一个周期单元在外加电场  $E = 1.0 \times 10^5 \text{ V/cm}$  作用下的能带结构与电子波函数示意图

Fig. 3 Band structure, subband energy separations and wavefunctions of the active region under the external bias  $E = 1.0 \times 10^5 \text{ V/cm}$

Sun 等与 Huang 等报道的 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/GaN 量子级联激光器的 Al 组分不同, 下面的计算可以获得垒层 Al 组分的优化。我们计算了在垒层 Al 组分分别等于 0.10, 0.15 和 0.20 时偶极跃迁元  $z_{32}$  与外加电场  $F$  之间的关系, 如图 4 所示, 从图中可以发现, 在相同的外场下, 低 Al 组分的激光器的偶极跃迁元  $z_{32}$  相对要大些, 原因在于在低 Al 组分情况下, 能级  $E_3$  与  $E_2$  间隔相对要窄, 从而使两能级上的电子波函数耦合更强。考虑到电子从能级  $E_2$  转移到  $E_1$  要满足近共振条件, 即  $\Delta E_{21} = 91 \text{ meV}$ , 在此条件下计算了当 Al 组分等于 0.10, 满足近共振条件所需的外场为  $7.65 \times 10^4 \text{ V/cm}$ , 此时  $z_{32} = 2.52 \text{ nm}$ 。当 Al 组分等于 0.20 时, 相应地外场为  $6.2 \times 10^4 \text{ V/cm}$ ,  $z_{32} = 2.48 \text{ nm}$ 。经过比较发现, 在满足近共振条件下 Al 组分接近 0.15 时  $z_{32}$  是最大的, 原因在于当垒层的 Al 组分增大时, 由于阱的限制增强造成  $\Delta E_{21}$  增大, 因此使激光器满足近共振条件所需要的外场相对要小, 这对提高  $z_{32}$  有利, 但同时高的 Al 组分加大阱深从而对阱中电子波函数的约束更强, 这会削弱  $z_{32}$ 。图 5 是在固定  $\Delta E_{21}$  ( $\sim 91 \text{ meV}$ ) 的情况下 Al 组分与  $z_{32}$  的关系, 可以看出当 Al 组分等于 0.15 时的

$z_{32}$  基本上是在最大值处, 并且发现在高 Al 组分端对应的  $z_{32}$  下降很快, 另外从材料生长方面考虑, 外延高 Al 组分的 AlGa<sub>N</sub> 材料更难获得高质量的晶体。

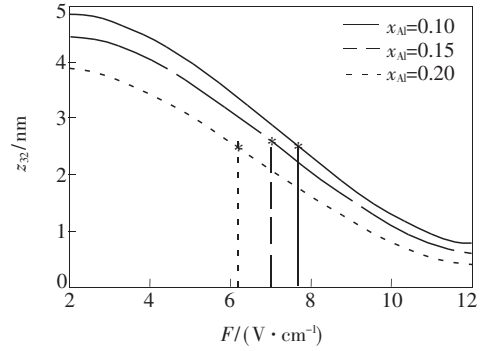


图4 不同 Al 组分下偶极矩阵元  $z_{32}$  与外加电场  $F$  的关系  
Fig. 4 Dipole matrix element  $z_{32}$  versus the external bias  $F$  with different Al compositions

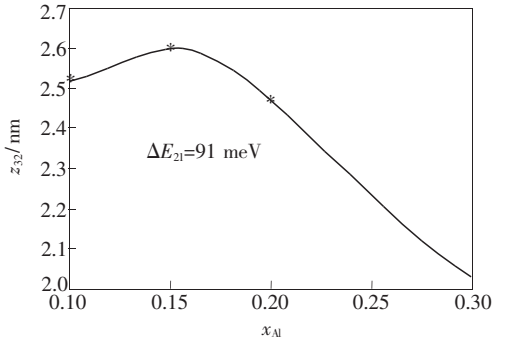


图5 在能级差  $\Delta E_{21}$  不变的情况下偶极矩阵元  $z_{32}$  与 Al 组分的关系  
Fig. 5 Dipole matrix element  $z_{32}$  versus Al composition with the fixed  $\Delta E_{21}$

### 4 结 论

通过对 AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> 量子级联激光器一个周期单元的一维薛定谔方程与泊松方程进行自洽求解, 得到了能级结构与电子波函数在各个阱中的分布, 讨论了在近共振条件下偶极跃迁元与垒层 Al 组分的关系, 结果表明, 垒层材料的低 Al 组分大约为 0.15 时对激光器的性能更有利, 并且低 Al 组分的 AlGa<sub>N</sub> 材料对结构繁杂的量子级联激光器的材料外延也非常有利。当然, 除了 Al 组分, 量子级联结构中的阱宽与垒宽对激光器的性能也是有很大的影响, 这可作为我们以后的研究方向。

## 参 考 文 献:

- [ 1 ] Faist J, Capasso F, Sivco D, *et al.* Quantum cascade laser [J]. *Science*, 1994, **264**(5158):553-556.
- [ 2 ] Strasser G, Gianoradoli S, Hvozda L, *et al.* GaAs/AlGaAs superlattice quantum cascade lasers at  $\lambda \approx 13 \mu\text{m}$  [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1999, **75**(10):1345-1347.
- [ 3 ] Iizuka N, Kaneko K, Suzuki N, *et al.* Ultrafast intersubband relaxation ( $\leq 150$  fs) in AlGaIn/GaN multiple quantum wells [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2000, **77**(5):648-650.
- [ 4 ] Heber J D, Gmachl C, Ng H M, *et al.* Comparative study of ultrafast intersubband electron scattering times at  $1.55 \mu\text{m}$  wave length in GaN/AlGaIn heterostructures [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2002, **81**(7):1237-1239.
- [ 5 ] Bernardini F, Fiorentini V, Vanderbilt D. Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides [J]. *Phys. Rev. B*, 1997, **56**(16):R10024-R10027.
- [ 6 ] Ambacher O, Foutz B, Smart J, *et al.* Two dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization in undoped and doped AlGaIn/GaN heterostructures [J]. *J. Appl. Phys.*, 2000, **87**(1):334-344.
- [ 7 ] Sun G, Soref R A, Khurgin J B. Active region design of a terahertz GaN/Al<sub>0.15</sub>Ga<sub>0.85</sub>N quantum cascade laser [J]. *Superlattices and Microstructures*, 2005, **37**(2):107-113.
- [ 8 ] Huang G S, Lua T C, Yao H H, *et al.* GaN/AlGaIn active regions for terahertz quantum cascade lasers grown by low-pressure metal organic vapor deposition [J]. *J. Cryst. Grow.*, 2007, **298**:687-690.
- [ 9 ] Ambacher O, Smart J, Shealy J R, *et al.* Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N- and Ga-face AlGaIn/GaN heterostructures [J]. *J. Appl. Phys.*, 1999, **85**(6):3222-3233.
- [ 10 ] Chin V W, Tansley T L, Osotchan T. Electron mobilities in gallium, indium, and aluminum nitrides [J]. *J. Appl. Phys.*, 1994, **75**(11):7365-7372.
- [ 11 ] Brunner D, Angerer H, Bustarret E, *et al.* Optical constants of epitaxial AlGaIn films and their temperature dependence [J]. *J. Appl. Phys.*, 1997, **82**(10):5090-5096.

## Effect of Al Composition on the Properties of GaN-based Quantum Cascade Laser

CHEN Gui-chu<sup>1,2</sup>, FAN Guang-han<sup>1</sup>

(1. Institute of Optoelectronic Material and Technology, South China Normal University, Guangzhou 5106312, China;

2. Department of Physics, Zhaoqing University, Zhaoqing 526061, China)

**Abstract:** In order to optimize the Al composition of the barrier in GaN-based quantum cascade laser, we made a self-consistent calculation to the Schrödinger and Poisson equations of one period of barrier in QCL. The band structure and the electron envelope function were obtained. The relation between dipole matrix element and Al composition of the barrier was illuminated. The results showed that the dipole matrix element is the largest for the optimized Al composition to be 0.15.

**Key words:** QCL; Al composition; dipole matrix element

**CLC number:** O471.5; TN248.4

**PACS:** 42.55.Px; 78.55.Cr

**PACC:** 7855E

**Document code:** A