中国科学技术大学

# 博士学位论文

# GaN 基激光器的内部参数研究


作者姓名： 程 洋

学科专业： 微电子学与固体电子学

导师姓名： 刘建平 研究员


完成时间： 二零一八年五月

University of Science and Technology of China

A dissertation for doctor's degree

# Research on internal parameters of GaN-based laser diodes


Author: Yang Cheng

Speciality: Microelectronics and Solid State Electronics

Supervisors: Prof. Jianping Liu


Finished time: May, 2018

# 中国科学技术大学学位论文原创性声明

本人声明所呈交的学位论文,是本人在导师指导下进行研究工作所取得的成果。除已特别加以标注和致谢的地方外，论文中不包含任何他人已经发表或撰写过的研究成果。与我一同工作的同志对本研究所做的贡献均已在论文中作了明确的说明。

作者签名：程萍　　签字日期：2018.5.25

# 中国科学技术大学学位论文授权使用声明

作为申请学位的条件之一，学位论文著作权拥有者授权中国科学技术大学拥有学位论文的部分使用权，即：学校有权按有关规定向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版，允许论文被查阅和借阅，可以将学位论文编入《中国学位论文全文数据库》等有关数据库进行检索，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存、汇编学位论文。本人提交的电子文档的内容和纸质论文的内容相一致。

保密的学位论文在解密后也遵守此规定。

☑公开　□保密(____年)

作者签名：程萍　　导师签名：刘建平

签字日期：2018.5.25　　签字日期：2018.5.25

# 摘　要

本论文致力于研究GaN基激光器的光学损耗和载流子注入效率，并取得了如下成果：

1、研究了GaN基激光器外延片和器件的光学损耗。首先，搭建了一套测试GaN基激光器外延片光学损耗的测试系统，通过理论分析发现该系统的测试误差小于1 $cm^{-1}$。利用该测试系统实验研究了GaN基激光器的光学损耗来源，证实了p型层中激活的Mg受主的吸收是激光器光学损耗的主要来源，但未激活的Mg受主的光吸收系数不大。仿真计算及实验结果均表明，降低p型层与光场的交叠可以有效降低GaN基激光器的光学损耗。其次，使用Hakki-Paoli法研究了GaN基激光器器件的光学损耗，发现外延片与器件的光学损耗测量值有一定的差异，并分析了造成这种差异的原因。

2、研究了c面GaN基绿光激光器的空穴输运特性。针对绿光激光器空穴输运特性存在的争议，我们进行了仿真计算与实验研究，研究结果表明，空穴能够从绿光双量子阱中溢出，从而降低绿光激光器的载流子注入效率。在绿光双量子阱的下方掺杂硅可以有效抑制空穴从绿光双量子阱中的溢出，其物理机制为硅掺杂增加了空穴输运的势垒。

3、研究了绿光激光器InGaN波导层中的载流子复合及抑制方法。通过模拟计算发现，在最后一个GaN量子垒层和InGaN上波导层之间存在一个势垒，这个势垒会阻碍载流子的输运，导致载流子在InGaN上波导层中积聚并复合，降低绿光激光器的载流子注入效率。当InGaN上波导层的In组分高于4%时，载流子在上波导层内的复合不可忽略不计。适当降低InGaN上波导层的In组分可以有效抑制上波导层的载流子复合，减小绿光激光器的阈值电流。实验结果同模拟计算结果吻合的很好。

4、研究了GaN基蓝光激光器的波导结构设计。首先，在InGaN上(下)波导层与AlGaN上(下)限制层之间插入额外的GaN上(下)波导层可以有效降低激光器的光学损耗。其次，随着插入波导层厚度的增加、上波导层背景载流子浓度的上升，上波导层的载流子复合以及越过电子阻挡层的电子电流会不断增大，从而降低蓝光激光器的载流子注入效率。最后，采用In组分渐变的InGaN作为上波导层可以有效抑制上波导层的载流子复合以及越过电子阻挡层的电子电流，提升蓝光激光器的载流子注入效率。

5、研究了总气流量、生长温度对MOCVD生长AlGaN的影响。在反应室压力、反应物浓度保持不变的前提下，随着总气流量的增加，反应室内气流速率加快，MOCVD生长的速率增加。在AlGaN生长速率不变的前提下，随着总气流量的增

加、生长温度的降低，气相中由$NH_3$分解产生的H原子浓度减少，AlGaN层中并入的碳浓度增加，最终导致AlGaN带边发光峰的强度降低，黄光发光峰的强度增加。

**关键词：**氮化镓　激光器　光学损耗　载流子注入效率

# ABSTRACT

This dissertation focuses on the optical loss and carrier injection efficiency of GaN-based laser diodes and has achieved the following results:

1. The optical loss of GaN-based laser diode epitaxial wafers and devices were studied. Firstly, a set of test system for measuring the optical loss of GaN-based laser diode epitaxial wafers was built. Through theoretical analysis, the test error of this system is found to be less than 1 $cm^{-1}$. With the help of this test system, we studied the optical loss of epitaxial wafers in detail. It is found that the absorption of activated Mg acceptors is the main source of optical loss in GaN-based laser diode epitaxial wafer. Both simulation and experimental results show that reducing the overlap between the p-type layer and the optical field can effectively reduce the optical loss of the GaN-based laser diode. Secondly, we uesd Hakki-Paoli method to study the optical loss of GaN-based laser diode devices. We found that the optical loss of epitaxial wafer and the device are different. The origins for this difference were analyzed.

2. The hole transport properties of c-plane GaN-based green laser diode were studied. In view of the controversy over hole transport properties of green laser diode, we conducted a series of simulation and experimental studies. The results show that holes can overflow from green double quantum wells, which reduces the carrier injection efficiency of green laser diode. A silicon-doped layer below the green double quantum wells can effectively suppress hole overflow from the green double quantum wells. The physical mechanism is that silicon doping increases the potential barrier for hole transport.

3. The carrier recombination and suppression methods in InGaN waveguide layer of green laser diode were studied. Through simulation calculations, it is found that there is a potential barrier between the last GaN quantum barrier layer and the InGaN upper waveguide layer. This potential barrier impedes carrier transport and carriers are confined in InGaN upper waveguide layer. As a result, carrier recombination occurs in InGaN upper waveguide layer and the carrier injection efficiency of green laser diode is reduced. Carrier recombination in upper waveguide layer is non-negligible when the indium content of InGaN waveguide layer exceeds 4%. A suitable reduction of indium content in InGaN upper waveguide layer can effectively suppress carrier recombination in upper waveguide layer and reduce the threshold current of the green laser diode. The experimental results agree well with the simulation results.

4. The waveguide design of GaN-based blue laser diode was studied. Firstly, it is found that inserting an additional GaN upper (lower) waveguide layer between InGaN upper (lower) waveguide layer and AlGaN upper (lower) cladding layer will reduce the optical loss of blue laser diode. Secondly, as the thickness of inserted waveguide layer increases and the background carrier concentration of upper waveguide layer increases, the carrier recombination in upper waveguide layer and the electron overflow from electron blocking layer is increased, thereby the carrier injection efficiency of blue laser diode is reduced. Finally, the use of InGaN with gradient indium content as upper waveguide layer can effectively suppress carrier recombination in upper waveguide layer and electron overflow from electron blocking layer, thus improve the carrier injection efficiency of blue laser diode.

5. The effects of total gas flow and growth temperature on AlGaN growth by MOCVD were studied. Firstly, under the premise that the pressure of reaction chamber and the reactant concentration remain unchanged, with the increase of total gas flow, the gas flow rate in the reaction chamber and MOCVD growth rate are both accelerated. Secondly, under the premise of unchanged AlGaN growth rate, with the increase of total gas flow and the decrease of growth temperature, the concentration of H atoms produced by the decomposition of $NH_3$ is reduced and the concentration of carbon incorporated in AlGaN layer is increased. As a result, the intensity of AlGaN band edge luminescence is reduced and the intensity of yellow luminescence is increased.

**Key Words:** gallium nitride, laser diode, optical loss, carrier injection efficiency

# 目　录

第一章　绪论.....1
1.1　GaN 基激光器简介.....1
1.2　GaN 基激光器的发展.....4
1.2.1　GaN 基紫光激光器的发展.....5
1.2.2　GaN 基蓝光激光器的发展.....6
1.2.3　GaN 基绿光激光器的发展.....7
1.3　GaN 基激光器的光学损耗研究.....9
1.3.1　GaN 基激光器光学损耗的测量.....10
1.3.2　GaN 基激光器光学损耗的来源.....11
1.3.3　降低 GaN 基激光器光学损耗的方法.....11
1.4　GaN 基激光器的载流子注入效率研究.....12
1.4.1　载流子注入效率的测量.....13
1.4.2　提升载流子注入效率的方法.....13
1.5　本论文的研究内容、研究意义及工作安排.....14
1.5.1　本论文的研究内容.....14
1.5.2　本论文的研究意义.....14
1.5.3　本论文的工作安排.....14
参考文献.....16
第二章　实验测试及模拟计算方法.....25
2.1　实验测试方法.....25
2.1.1　MOCVD 简介.....25
2.1.2　高分辨 X 射线衍射(HRXRD)简介.....29
2.1.3　原子力显微镜(AFM)简介.....31
2.1.4　光致发光(PL)简介.....32

2.1.5 二次离子质谱(SIMS) ..... 33
2.2 激光器光学模拟简介 ..... 33
2.2.1 光学模拟方法 ..... 33
2.2.2 GaN 基材料的折射率 ..... 34
2.2.3 光学损耗的计算 ..... 35
2.3 激光器电学模拟简介 ..... 36
2.3.1 电学模拟方程 ..... 36
2.3.2 电学仿真参数 ..... 37
参考文献 ..... 39
第三章 GaN 基激光器的光学损耗研究 ..... 41
3.1 GaN 基激光器外延片的光学损耗研究 ..... 41
3.1.1 GaN 基激光器外延片光学损耗测试系统的搭建 ..... 41
3.1.2 GaN 基激光器外延片光学损耗测试系统的误差分析 ..... 44
3.1.3 典型的 GaN 基激光器外延片的光学损耗测试结果 ..... 45
3.1.4 GaN 基激光器光学损耗的来源 ..... 46
3.1.5 降低 GaN 基激光器外延片光学损耗的方法 ..... 48
3.2 GaN 基激光器器件的光学损耗研究 ..... 49
3.2.1 激光器放大的自发辐射光谱简介 ..... 49
3.2.2 Hakki-Paoli 法测试 GaN 基激光器器件光学损耗的原理 ..... 53
3.2.3 GaN 基激光器放大的自发辐射光谱的测量及优化 ..... 54
3.2.4 GaN 基激光器器件的光学损耗 ..... 57
3.2.5 脊型散射引起的光学损耗 ..... 59
3.3 本章小结 ..... 61
参考文献 ..... 62
第四章 绿光激光器的载流子注入效率研究 ..... 63
4.1 绿光激光器的空穴输运特性研究 ..... 63

4.1.1 绿光激光器的空穴溢出现象 ..... 63
4.1.2 抑制空穴溢出的新结构 ..... 67
4.1.3 空穴溢出的机制研究 ..... 68
4.2 绿光激光器波导层的载流子复合研究 ..... 70
4.2.1 绿光激光器波导层的载流子复合模拟研究 ..... 70
4.2.2 绿光激光器波导层的载流子复合实验研究 ..... 73
4.2.3 波导层的载流子复合对绿光激光器性能的影响 ..... 75
4.3 本章小结 ..... 76
参考文献 ..... 77
第五章 蓝光激光器的波导设计研究 ..... 81
5.1 插入 GaN 波导层厚度对蓝光激光器光学损耗的影响 ..... 81
5.2 插入 GaN 波导层厚度对蓝光激光器载流子注入效率的影响 ..... 82
5.3 上波导层背景载流子浓度对蓝光激光器载流子注入效率的影响 ..... 85
5.4 提升蓝光激光器载流子注入效率的新结构 ..... 87
5.5 插入波导层厚度对蓝光激光器性能影响的实验研究 ..... 90
5.5 本章小结 ..... 90
参考文献 ..... 92
第六章 AlGaN 的 MOCVD 生长研究 ..... 93
6.1 边界层理论简介 ..... 93
6.2 总气流量、生长温度对 AlGaN 单层 PL 光学性质的影响 ..... 96
6.3 碳浓度对 AlGaN 单层 PL 光学性质的影响 ..... 99
6.4 本章小结 ..... 101
参考文献 ..... 102
第七章 全文总结与展望 ..... 105
7.1 本论文的研究成果 ..... 105
7.2 不足之处与展望 ..... 106

致　　谢.....107
在读期间发表的学术论文与取得的其他研究成果.....109

# 第一章　绪论

氮化镓(GaN)基材料包括氮化镓(GaN)、氮化铝(AlN)、氮化铟(InN)以及其三元固溶体(AlGaN、InGaN、InAlN)和四元固溶体(AlInGaN)材料，其带隙宽度在0.64 eV到6.2 eV之间连续可调，覆盖了近紫外到红外的波段。GaN基材料发光效率高，化学性质稳定，非常适合用来制备光电器件，特别是GaN基激光器。在半导体产业界的大力推动下，当前GaN基紫光、蓝光、绿光激光器均已实现商品化。

## 1.1　GaN 基激光器简介

图1.1是一个典型的GaN基激光器的结构示意图，在z方向从下到上依次为n电极、GaN衬底、n型AlGaN下限制层、n型InGaN下波导层、多量子阱(MQW)有源区、非故意掺杂InGaN上波导层、p型电子阻挡层(EBL)、p型AlGaN上限制层、p型GaN层以及p电极。其中，多量子阱有源区的材料折射率最高，且有源区两侧材料的折射率呈现递减的趋势。通过z方向材料折射率中间高、上下低的分布，可以将z方向的光场限制在上、下波导层之间。在y方向，激光器两侧的部分p型层通过刻蚀去除，并沉积了二氧化硅($SiO_2$)薄层，最终形成了一种脊型结构。二氧化硅和空气的折射率要小于p型层的折射率，因而y方向的折射率呈现中间高、两侧低的分布，光场被限制在脊型中间。由于y方向、z方向对光场的限制作用，yz平面内的光场呈现椭圆形分布。在x方向，通过机械解理或者刻蚀的方法可以形成前、后腔面，且前、后腔面的反射率可以通过蒸镀介质膜来进行调控。通常前腔面的反射率要小于后腔面，以保证激光从前腔面出射。

图1.1中的多量子阱有源区及其两侧材料构成了一个双异质结。当我们给GaN基激光器施加正向偏压时，多量子阱有源区中会逐渐注入载流子。由于异质结的超注入现象，以及有源区两侧宽禁带材料对载流子的限制作用，有源区的载流子浓度很容易超过$10^{19}$ $cm^{-3}$，因而在较小的注入电流下就能够实现粒子数反转并产生增益。当注入电流达到某一特定值时，净模式增益大于等于器件的总光学损耗，则有源区的自发辐射光会通过前、后腔面的反射振荡而不断增强，最终形成激光从前腔面出射。这一特定的注入电流值通常被称为阈值电流。

图1.1中的GaN基激光器采用了分离限制结构，即载流子和光场分别被限制在不同的区域。其中，载流子被限制在多量子阱有源区中，而光场则主要被限制在InGaN上、下波导层之间。通过分离限制结构，可以降低多量子阱有源区的光子密度，进而提升GaN基激光器的光输出功率。

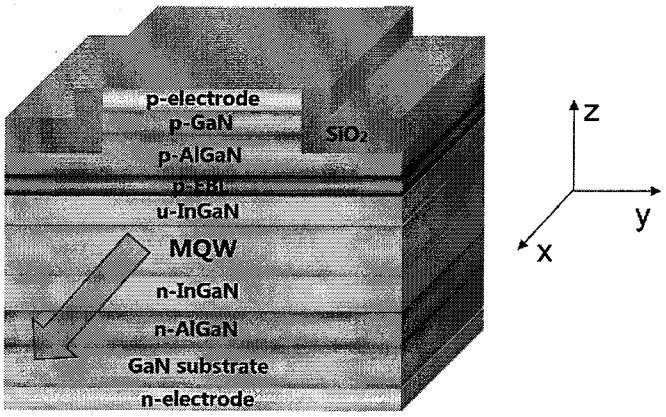



图1.1　GaN基激光器的结构示意图

GaN基激光器的体积小、波长短，非常适合用在激光存储领域。激光存储是一种利用激光照射光盘，改变光盘被照射位置材料的折射率，从而将信息记录到光盘上的技术。激光波长越短，光盘的存储密度越高。自从GaN基蓝紫光激光器问世后，光盘的存储容量突飞猛进，采用780 nm激光的光盘(Compact Disc，简称CD)、650 nm激光的数字通用光盘(Digital Versatile Disc，简称DVD)、405 nm激光器的蓝光光盘(Blu-ray Disc，简称BD)，其五寸光盘的单层存储容量分别在650 M、4.7 G、25 G左右，如图1.2所示。自从2008年东芝公司放弃了HD DVD的相关业务后，索尼公司主导的BD就成为了新一代光盘格式。截至目前为止，BD已经成为了高清电影和正版游戏的重要存储介质。

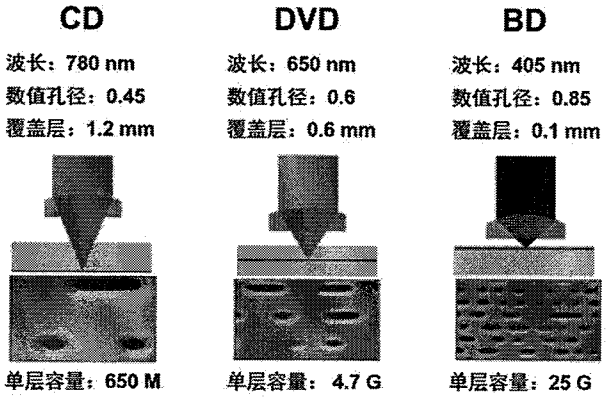



图1.2　CD、DVD、BD的存储容量示意图

GaN基激光器的波长完全覆盖了可见光波段，因而非常适合用在激光照明领域。GaN基激光器可以制成小功率蓝光、绿光激光笔，用于汇报、演讲、教学等特定场景。GaN基激光器结合荧光粉技术，可以将激光转化成白光，用于大功率照明如汽车车灯等领域。同发光二极管相比，激光器的最大光输出功率更高、方

向性更好，因而激光车灯的亮度、照射距离要远胜于发光二极管车灯，如图1.3所示。通过使用激光车灯，车辆在夜间行驶时能够获得更好的视野，从而提高夜间出行的安全性。当前，宝马7系、奥迪A8均采用了激光车灯技术。

图1.3　LED车灯、激光车灯夜间照明效果示意图

GaN基蓝紫光激光器波长短，衍射光斑小，可替代当前激光打印机中的GaAs/AlGaAs激光器(波长为780nm)，提高打印机的分辨率；GaN基蓝光、绿光激光器同AlGaInP红光激光器组合使用，可实现全彩色激光打印。GaN基激光器也可以用于制造激光水准仪，在测绘、基建等领域发挥重要作用。

激光显示的基本原理是利用红、绿、蓝三色激光作为基准色，通过投影或者扫描的方式成像。这种成像方式具有超高的色彩饱和度，如图1.4所示[1-3]。早期全固体激光器通常被用作激光显示的光源，但是全固体激光器体积大、价格昂贵，在一定程度上限制了激光显示的应用场景。近年来，随着可见光半导体激光器的发展，特别是GaN基蓝光、绿光激光器的迅猛发展，激光显示开始逐步采用半导体激光器作为激光光源。同全固体激光器相比，半导体激光器具有体积小、波长可调节范围大、电光转换效率高、易于采用半导体工艺批量制造等优点。早在2005年，索尼就制造了屏幕面积高达500平方米的半导体激光影院。随后的两年里，三菱和索尼分别推出了各自的半导体激光电视样机。与此同时，LDT、松下、东芝、日立、爱普生、三星等企业也都传出了研究激光电视的消息。近年来，国内的激光电视产业也开始迅猛发展，海信、极米、小米、坚果等企业纷纷也推出了自己的激光电视产品，其中海信最新的激光电视尺寸达到了100寸、分辨率达到了4 K。但是高昂的售价阻碍了激光电视进一步的市场化，其中高成本的进口GaN基激光器是导致激光电视售价居高不下的重要原因。相信在不久的将来，随着GaN基激光器成本的进一步下降，激光电视的售价能够得到控制并最终在显示领域占据一席之地。

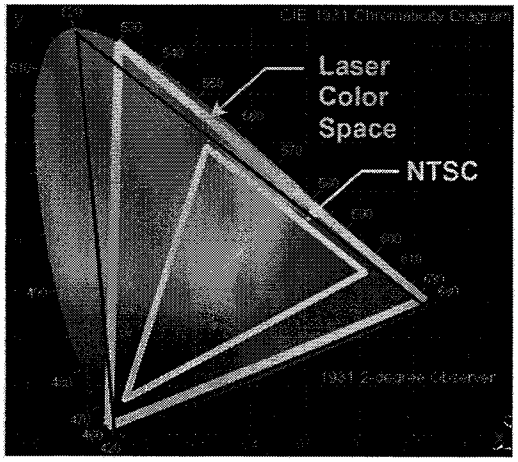



图1.4　激光显示技术的色域范围示意图[1-3]

## 1.2　GaN 基激光器的发展

高质量的GaN基材料是制备高性能GaN基激光器的基础，其中金属有机物化学气相沉积法(Metal Organic Vapor Phase Epitaxy，简称为MOCVD)是生长GaN基材料最常用的方法。MOCVD生长的GaN基材料通常有两种晶体结构，即热力学稳定的六方纤锌矿结构和热力学亚稳定的立方闪锌矿结构。本文仅讨论在实际中应用较为广泛的六方纤锌矿结构的GaN基材料。

早期由于GaN同质衬底的匮乏，GaN基材料只能在异质衬底上生长，其中蓝宝石($Al_2O_3$)是最常用的异质衬底材料。但是蓝宝石衬底同GaN的晶格失配高达16.1%，直接在蓝宝石衬底上生长GaN很容易开裂，严重限制了GaN外延层的质量。直到1986年，名古屋大学的Amano等人[4]开发出了两步生长法：首先在蓝宝石衬底表面沉积一低温AlN缓冲层，随后再生长高温GaN厚层。基于这种独创的方法，Amano等人首次通过MOCVD得到了高质量的GaN外延层。1991年，日亚公司的Nakamura[5]对上述两步生长法做了一定调整，即先沉积一低温GaN缓冲层、再沉积高温GaN厚层。采用这种改进的方法也能得到高质量的GaN外延层。值得一提的是，日亚公司的Nakamura采用的这种方法也是当前最常用的在蓝宝石衬底上生长GaN外延层的方法。

n型GaN的制备较为容易，向GaN中掺入Ge、Si均可以形成n型GaN[6]。其中，Si是当前GaN最常用的施主，其激活能约为20 meV，室温条件下可以近似认为Si已经全部电离。p型GaN的制备则十分困难，直到1989年，名古屋大学的Amano等人[7]采用低能电子辐照(Low Energy Electron Beam Irradiation，简称为LEEBI)对掺杂Mg的GaN进行处理，才首次得到了p型GaN，其空穴浓度、空穴迁移率、电阻率分别为$2\times10^{16}$ $cm^{-3}$、8 $cm^2/(V\cdot s)$、35 Ω•cm。1992年，日亚公司的Nakamura等人

[8]则发现，掺杂Mg的GaN在氮气气氛、700摄氏度的高温下进行退火处理，也能得到p型GaN，其空穴浓度、空穴迁移率、电阻率分别为$3\times10^{17}$ $cm^{-3}$、10 $cm^2/(V\cdot s)$、2 Ω•cm。值得一提的是，日亚公司的Nakamura等人采用的方法也是当前激活Mg受主最常用的方法。随后，日亚公司的Nakamura等人[9]还揭示了H钝化Mg受主形成高阻GaN的机制。由于Akasaki、Amano、Nakamura对GaN基材料发展的杰出贡献，他们三人共享了2014年诺贝尔物理学奖。

随着侧向外延生长(Epitaxial Lateral Overgrowth，简称ELOG)、GaN同质衬底等技术的兴起，GaN的位错密度快速下降、晶体质量迅速提高，GaN基激光器的寿命与可靠性也得到了质的飞跃，并逐步实现了商品化。相信在不久的将来，随着技术的进一步进步，GaN基激光器将在更多的领域取得应用。

### 1.2.1　GaN 基紫光激光器的发展

1995年11月，日亚公司的Nakamura等人[10]制备了第一只脉冲条件下工作的GaN基激光器，其激射波长为417 nm。该激光器包含二十六周期的紫光量子阱，采用30×1500 μm的条形结构，阈值电流、阈值电压分别高达1.7 A、34 V。1995年12月，Nakamura等人[11]制备了包含二十周期紫光量子阱、20×1200 μm条形结构的GaN基紫光激光器，其脉冲工作时的阈值电流、阈值电压分别下降到了1.17 A、26 V。1996年4月，Nakamura等人[12]制备了包含五周期紫光量子阱、10×600 μm脊型结构的GaN基紫光激光器，其脉冲工作时的阈值电流降到了180 mA，小于10×600 μm条形结构紫光激光器的阈值电流。1996年8月，Nakamura等人[13]制备了首个在233 K下连续激射的GaN基紫光激光器。该激光器包含三周期的紫光量子阱，采用4×600 μm的脊型结构，阈值电流、阈值电压分别为210 mA、11 V，在233 K下连续工作的寿命超过了30 min。1996年9月，Nakamura等人[14]实现了室温下连续激射的GaN基紫光激光器。该激光器包含三周期的紫光量子阱，采用2×700 μm的脊型结构，阈值电流、阈值电压分别为130 mA、8 V。但由于热效应的影响，该激光器室温连续工作时的寿命仅为1 s。1996年11月，Nakamura等人[15]在有源区中掺杂硅，将室温连续激射的紫光激光器的阈值电流、阈值电压分别降低到80 mA、5.5 V，且寿命提高到27 h。为了进一步提高GaN基紫光激光器的性能，Nakamura等人[16]在1997年8月对激光器结构进行了两方面的重大改进：一是采用了ELOG技术降低激光器外延层的位错密度，二是采用了$Al_{0.14}Ga_{0.86}N$/GaN超晶格层来调控应力。最终Nakamura等人得到了室温连续激射、寿命超过1150 h的紫光激光器。1999年1月，Nakamura等人[17]制备的室温连续激射的紫光激光器的寿命超过了3000 h，基本达到了商用化应用的要求。

除了日亚公司之外，国际上的其他公司也纷纷跟进GaN基紫光激光器的研究，

并围绕着提高激光器光输出功率的目标而持续推进。2003年，索尼公司的Goto等人[18]报道了室温连续激射、单管光输出功率达到0.94 W的紫光激光器。2006年，三星公司的Ryu等人[19]利用不对称限制层使激光器光场向n型层方向移动，从而将室温连续工作的紫光激光器的最大光输出功率提高到了470 mW。2016年，松下公司的Kawaguchi等人[20]通过在p型层与有源区之间插入非故意掺杂波导层的方式，将紫光激光器单管的最大光输出功率提高到了7.2 W，斜率效率达到了2.5 W/A。

国内的研究团队也在积极跟进GaN基紫光激光器的研究。2004年，中国科学院半导体所杨辉团队[21]首次制备出了室温下脉冲工作的蓝宝石衬底紫光激光器；2007年，中国科学院半导体所杨辉团队[22]再次制备了室温下连续激射的蓝宝石衬底紫光激光器；2010年，我们团队[23]制备了室温下工作寿命达到15.6 h的GaN自支撑衬底紫光激光器；2016年，我们团队[24]则成功制备了室温下连续激射的硅衬底紫光激光器。

### 1.2.2　GaN 基蓝光激光器的发展

1999年9月，日亚公司的Nakamura等人[25]在蓝宝石ELOG GaN衬底上首次制备了室温下连续激射的蓝光激光器，激射波长为450 nm，阈值电流密度、阈值电压分别为4.6 kA/cm$^2$、6.1 V，在光输出功率为5 mW时寿命可以达到200 h。2001年6月，日亚公司的Nagahama等人[26]在GaN自支撑衬底上进行了GaN的ELOG生长，降低了外延层的位错密度，最终得到了室温下连续激射、阈值电流密度和阈值电压分别为2.8 kA/cm$^2$和4.5 V的蓝光激光器。2002年，日亚公司的Nagahama等人[27]报道了室温连续激射、光输出功率为5 mW时寿命超过2000 h的蓝光激光器。2005年，日亚公司的Nagahama等人[28]报道了室温连续激射、光输出功率200 mW时寿命超过10000 h的蓝光激光器，且光输出功率为200 mW时激光器的电流、电压仅分别为274 mA、4.9 V。2006年，日亚公司的Kozaki等人[29]将蓝光激光器的光输出功率提升到了300 mW。同年，日亚公司的Miyoshi等人[30]又报道了光输出功率为500 mW、工作电流为480 mA、工作电压为4.8 V、电光转换效率达到21.7%、寿命超过30000 h的蓝光激光器。2008年，日亚公司的Miyoshi等人[31]报道了光输出功率为1 W、工作电流为920 mA、工作电压为4.5 V、电光转换效率为24.2%、寿命超过30000 h的蓝光激光器。2009年，日亚公司的Michiue等人[32]报道了光输出功率为1.17 W、工作电流为1.0 A、工作电压为4.81 V、电光转换效率为24.3%、寿命超过30000 h的蓝光激光器。2017年，日亚公司的Masui等人[33]报道了光输出功率超过4.7 W、工作电流为3.0 A、工作电压为4.1 V、电光转换效率达到38.2%的蓝光激光器。

除了日亚公司之外，索尼、欧司朗等公司也在积极推进蓝光激光器的研发。2007年，索尼公司的Goto等人[34]报道了室温连续激射、光输出功率为0.75 W、寿命超过10000 h的蓝光激光器。2017年，索尼公司的Murayama等人[35]报道了激射波长为465nm、光输出功率为5.2 W、电光转换效率达到37%、寿命超过20000 h的蓝光激光器。2008年，欧司朗公司的Strauβ等人[36]报道了光输出功率为60 mW、电光转换效率达到了15%的蓝光激光器。2010年，欧司朗公司的Lutgen等人[37]将蓝光激光器的光输出功率提升到超过200 mW，寿命更是提升到了4000 h，其中电光转换效率为15-18%。2011年，Lutgen等人[38]又将蓝光激光器的电光转换效率提升到超过20%。2012年，欧司朗公司的Vierheilig等人[39]将蓝光激光器的光输出功率、电光转换效率分别提升到了2.5 W、29%。2013年，欧司朗公司的Hager等人[40]将蓝光激光器的光输出功率提升到了4 W。2014年，欧司朗公司[41]的蓝光激光器的最大光输出功率达到了5.5 W，其中光输出功率为3.5 W时的电光转换效率达到了32%。2017年，欧司朗公司[42]光输出功率为4 W的蓝光激光器的电光转换效率达到了43%，寿命超过了10000 h。

当前，国内有不少研究机构与公司也都投身到了蓝光激光器的研发之中。研发蓝光激光器的科研机构主要是中国科学院半导体所和苏州纳米所本团队。2012年，我们团队[43]制备了室温连续激射的蓝光激光器。2017年，我们团队[44]制作的蓝光激光器的最大光输出功率达到了2.2 W，电光转换效率达到了20%。

### 1.2.3　GaN 基绿光激光器的发展

同GaN基紫光和蓝光激光器相比，绿光激光器的制备存在诸多问题：

(1)随着激光器波长的增加，InGaN量子阱中所需要的In组分也要相应提高，但是高In组分的InGaN量子阱In并入困难[45]，且容易发生应力弛豫，生长高质量绿光InGaN量子阱的难度很大。

(2)随着波长的增加，波导层与限制层之间的折射率差减小[46, 47]，因而绿光激光器有源区的光限制因子偏小，且容易出现模式泄露。为了解决这个问题，绿光激光器通常都采用InGaN作为波导层[47, 48]，以增加有源区的光学限制。

(3)随着In组分的增加，InGaN量子阱中的In组分起伏也开始增大，导致激光器的增益谱出现展宽，峰值增益逐渐下降[49-52]。

(4)高In组分的量子阱受热容易分解，从而限制了绿光激光器p型层的生长温度[53]，降低了p型层的材料质量，增加了激光器整体的串联电阻。

(5)由于激光器通常生长在c面衬底上，随着In组分的增加，InGaN量子阱与量子垒的界面极化电荷不断增加，InGaN量子阱中的极化电场不断增大，产生严重的QCSE(Quantum-Confined Stark Effect，简称QCSE)效应[54-56]，减小电子-空穴波

函数的重叠，最终导致量子阱的发光波长红移、辐射复合速率减小。在半极性面或者非极性面的衬底上生长激光器可以有效抑制QCSE效应。

由于上述五个问题的存在，绿光激光器的发展极为缓慢，直到2008年2月，日亚公司的Miyoshi等人[57]终于报道了激射波长达到488 nm的c面激光器，阈值电流密度为3.3 kA/cm$^2$，其工作电流、工作电压、光输出功率分别为71 mA、5.3 V、5 mW。2009年，Miyoshi等人[58]将c面激光器的激射波长延伸到515 nm。当激光器激射波长在510-513 nm之间、光输出功率为5 mW时，激光器的寿命超过了5000 h。2010年，Miyoshi等人[59]在环境温度高达80 °C、光输出功率为5 mW的条件下对激射波长为518 nm的c面绿光激光器进行寿命测试，推算出其寿命长达5000 h。2017年，日亚公司的Masui等人[33]将c面激光器的激射波长延伸到了537 nm。同时，日亚公司制备出了激射波长为532 nm的c面绿光激光器，其阈值电流为280 mA，工作电流、工作电压、光输出功率分别为1.6 A、4 V、0.87 W，极限光输出功率则超过了1 W。值得一提的是，激光器在1.6 A时的电光转换效率达到了11.5%，且在电流为1.6 A、环境温度高达60 °C下测试得到的寿命超过了25000 h。

2008年12月，欧司朗公司的Queren等人[60]报道了室温脉冲工作、阈值电流为413 mA、激射波长为500 nm的c面激光器。2009年7月，欧司朗公司的Avramescu等人[61]报道了室温脉冲工作、激射波长为515.9 nm的c面激光器。2010年2月，通过改进绿光量子阱的材料质量，欧司朗公司的Lutgen等人[37]实现了c面绿光激光器的室温连续激射，其中激射波长为516 nm，光输出功率超过50 mW，且光输出功率为50 mW时的电光转换效率达到了2.7%。2011年，欧司朗公司的Lutgen等人[38]报道了室温连续工作、激射波长为522 nm、电光转换效率超过5%的c面绿光激光器。2012年，欧司朗公司的Vierheilig等人[39]制备了激射波长为519 nm的c面绿光激光器，其在工作温度为40 °C、光输出功率为50 mW条件下的寿命超过了10000 h。2013年，欧司朗公司的Hager等人[40]进一步将c面绿光激光器的单模极限光输出功率提高到了200 mW，其中工作电流为215 mA时的光输出功率为100 mW。2014年，欧司朗公司的Strauß等人[41]将c面绿光激光器的单模光输出功率提高到了250 mW。值得一提的是，c面绿光激光器的多模光输出功率提高到了1.25 W，其中电流为0.9 A时的激射波长、电光转换效率分别为517 nm、12.5%。2017年，欧司朗公司的Strauss等人[42]将激射波长为517 nm、532 nm的c面绿光单模激光器的电光转换效率分别提高到了10.8%、6.5%。

同日亚、欧司朗两家公司不同，国际上康宁、住友、索尼等公司致力于半极性面GaN基绿光激光器的研究。2011年，康宁公司的Sizov等人[62]在半极性面（并未报道具体晶面指数）上制备了室温连续工作、激射波长在508-522 nm之间、特征温度在161-246 K之间、光输出功率达到60 mW的绿光激光器。2009年，住友公

司的Enya等人[63]在$(20\bar{2}1)$面上制备了室温脉冲工作的绿光激光器，其激射波长达到了531 nm。同年，住友公司的Yoshizumi等人[64]在$(20\bar{2}1)$面上制备了室温连续工作、激射波长为520 nm的绿光激光器。2010年，住友公司的Adachi等人[65]将$(20\bar{2}1)$面GaN基绿光激光器的阈值电流、阈值电压分别降到了51.1 mA、6.38 V，其中激射波长为525.5 nm。2012年，住友公司的Takagi等人[66]将$(20\bar{2}1)$面绿光激光器的光输出功率提升到超过100 mW (其中激射波长超过530 nm)，电光转换效率提升到了7.0-8.9% (其中激射波长在525-532 nm之间)。2012年，索尼公司的Yanashima等人[67]报道了室温连续工作的$(20\bar{2}1)$面绿光激光器，其激射波长超过525 nm。在55 °C的环境温度下进行的寿命测试表明，激光器在光输出功率为50 mW、70 mW时的寿命分别超过了5000 h、2000 h。2017年，索尼公司的Murayama等人[35]利用ITO光学限制层，进一步提升了$(20\bar{2}1)$面绿光激光器的性能。其激射波长为530.1 nm，阈值电流密度为2.5 kA/cm$^2$，电流为1.2 A时的光输出功率和电光转换效率分别提升到了接近1 W和17.5%，最高光输出功率超过了2 W (这也是当前绿光激光器光输出功率的最高值)。值得一提的是，该绿光激光器在环境温度为60 °C、工作电流为1.2 A时的寿命超过了20000 h，已达到了当前激光显示的寿命要求。美国加州大学圣塔芭芭拉(University of California, Santa Barbara，简称UCSB)分校也致力于研究半极性面GaN基绿光激光器。2013年，UCSB的Hardy等人[68]报道了激射波长为523 nm、阈值电流密度高达12 kA/cm$^2$的$(20\bar{2}1)$面绿光激光器。

国内方面，我们团队在c面GaN基绿光激光器的研究上已有一定积累。2014年，我们团队[69]制备了国内第一只室温脉冲工作的c面绿光激光器，其激射波长为503 nm，阈值电流密度高达25 kA/cm$^2$。2016年，我们团队[70]制备了国内第一只室温连续工作的c面绿光激光器，其激射波长为508 nm，阈值电流密度降到了1.8 kA/cm$^2$，光输出功率达到了58 mW。

## 1.3　GaN 基激光器的光学损耗研究

激光器的光学损耗可以分为内部光学损耗和腔面损耗。腔面损耗可以通过改变腔面反射率和腔长来进行精确控制。内部光学损耗则同激光器的结构设计、材料质量等多种因素有关，是影响激光器性能的一个重要参数。内部光学损耗越大，激光器的阈值电流越高、斜率效率越低。光学损耗的研究对于提升GaN基激光器的性能具有重要的意义。式1.1[20]、式1.2[71]分别是激光器阈值电流密度、斜率效率同光学损耗之间的关系式

$$J_{th} = \frac{J_{tr}}{\eta_i \cdot \eta_{inj}} \cdot \left(\frac{\alpha_i + \alpha_m}{\Gamma_v G_0}\right) \tag{1.1}$$

$$SE = \frac{hc}{q\lambda} \cdot \frac{\alpha_m}{\alpha_m + \alpha_i} \cdot \eta_{inj} \tag{1.2}$$

其中，$J_{th}$、$J_{tr}$分别是阈值电流密度、透明电流密度，$\eta_i$、$\eta_{inj}$分别是内量子效率、载流子注入效率，$\alpha_i$、$\alpha_m$分别是内部光学损耗和腔面损耗，$\Gamma_v$是有源区的光限制因子，$G_0$是材料增益常数，SE是斜率效率，h、c、q、λ分别是普朗克常数、光速、电子电量、激射波长。

### 1.3.1　GaN 基激光器光学损耗的测量

由于激光器内部光学损耗对激光器性能的影响很大，测量激光器内部光学损耗是研制半导体激光器的核心内容之一。Hakki-Paoli法[72, 73]是测量半导体激光器光学损耗的一种常用方法。其基本原理是根据放大的自发辐射光谱计算出激光器的净模式增益光谱，进而推算出激光器器件的光学损耗。2003年，Schwarz等人[74]通过Hakki-Paoli法测出了GaN基紫光激光器的光学损耗，约为40 $cm^{-1}$。

变腔长法也是测量GaN基激光器光学损耗的一种常用方法，其测试过程如下：首先，制备一系列不同腔长的激光器器件，腔面反射率保持不变；其次，测量不同腔长激光器的光输出功率-电流曲线，并从曲线中得到斜率效率；最后，根据斜率效率对腔长的依赖关系，推算出激光器器件的光学损耗。式1.3即为斜率效率同腔长之间的关系式：

$$\frac{1}{SE} = \frac{\alpha_i}{\eta_i \ln(\frac{1}{\sqrt{R_1 R_2}})} L + \frac{1}{\eta_i} \tag{1.3}$$

其中，SE是斜率效率，$\alpha_i$是内部光学损耗，$R_1$、$R_2$是前后腔面反射率，L是激光器腔长，$\eta_i$是载流子注入效率。诸多研究者[75-80]均使用该法测量GaN基激光器器件的光学损耗。

上述两种测试方法均存在各自的局限性，如Hakki-Paoli法需要高分辨率的光谱仪，变腔长法则需要制备多个激光器样品。为了克服这些局限性，研究者们积极探索了测量光学损耗的新方法。

1999年，Thomson等人[81]制备了一种特殊的GaInP基激光器器件，其p电极沿腔长方向被分割成五个长度为300 μm的区域。通过在每个单独的区域注入电流，可以改变从腔面出射的自发辐射光在激光器内部非注入区的传播距离。根据自发辐射光强度同传播距离的依赖关系，即可得到GaInP基激光器器件的光学损耗。2001年，Summers等人[82]利用上述方法测出了InGaN基紫光激光器的光学损耗，为40 $cm^{-1}$左右。

光泵浦注入也可以在有源区中产生荧光。同电流注入相比，采用光泵浦注入

时不需要在外延片上预先沉积金属电极。1997年，Mogensen等人[83]利用He-Ne 633 nm的激光泵浦GaInP基激光器外延片，从而在有源区中产生荧光，荧光向前传播到出光面位置，随后被光谱仪收集；通过移动He-Ne激光器连续改变荧光在GaInP基激光器外延片中传播的距离，可以得到一系列依赖于传播距离的荧光光谱，最终求出GaInP基激光器外延片的光学损耗。2004年，Shakya等人[84]利用近场光学显微镜系统，基于测量荧光随光波导距离的衰减，得到了AlGaN/GaN MQW波导的光学损耗。2006年，Son等人[85]将蓝宝石衬底上的GaN基紫光激光器外延片加工成3×10 $mm^2$的小块，利用$Nd^+$:YAG 355 nm激光作为泵浦源在有源区中激发出荧光，随后通过测量荧光随光波导距离的衰减推算出光学损耗。最终Son等人发现InGaN波导层的光学吸收系数约为40 $cm^{-1}$。2010年，Sizov等人[86]在GaN衬底上生长了绿光激光器样品，并采用解理或者干法刻蚀的方式得到了一个外延片解理面。随后，直接将405 nm激光照射到外延片上产生荧光，并收集到了一系列不同波导距离下从解理面出射的荧光光谱。基于荧光强度随光波导距离的衰减准确测定了外延片的光学损耗，其测试误差小于1 $cm^{-1}$。

### 1.3.2 GaN 基激光器光学损耗的来源

2002年，Kuramoto等人[87]生长了一系列不同掺杂的GaN薄膜，通过测量薄膜的吸收谱发现：掺杂Mg会显著增加GaN薄膜的光学吸收系数。同时，Kuramoto等人发现，掺杂Mg的(Al)GaN层是脊型选区再生长的GaN基激光器光学损耗的主要来源。2003年，Uchida等人[88]估算出紫光激光器中掺杂Mg的p型层的光吸收系数为60-65 $cm^{-1}$。2005年，Schmidt等人[89]发现，同波导层非故意掺杂的样品相比，波导层掺杂Mg的激光器使用光泵浦激发时的阈值功率更高，同时峰值增益更低，表明Mg掺杂层会增大激光器的光学损耗。同时，Schmidt等人还发现，掺杂Mg的GaN层在波长为388 nm位置的光学吸收系数为300 $cm^{-1}$。2010年，Kioupakis等人[90,91]通过第一性原理的计算，发现束缚空穴吸收是GaN基激光器中光学损耗的一个重要来源，其中束缚空穴来自于p型层激活但未电离的Mg受主。同年，Sizov等人[86]通过自行搭建的光学损耗测量装置，准确测定了绿光激光器外延片在p型层退火前、后的光学损耗，证实了激活但未电离的Mg受主是绿光激光器光学损耗的主要来源。Son等人[85,92]发现，在p型层与有源区之间插入InGaN波导层并不能明显降低激光器的光学损耗，并推算出了InGaN层的光学吸收系数，约为40 $cm^{-1}$。

### 1.3.3 降低 GaN 基激光器光学损耗的方法

鉴于p型层的吸收散射是GaN基激光器光学损耗的主要来源，因而优化激光

器结构、减少p型层中的光学损耗是降低激光器整体光学损耗的有效途径。2002年，M. Kuramoto等人[87]通过降低n型AlGaN限制层的Al组分，同时增加n型AlGaN限制层的厚度的方法，使激光器中的光场向n型一侧移动，减少了光场同p型层的重叠，从而降低了光学损耗。2003年，Uchida等人[88]在电子阻挡层与有源区之间插入了一InGaN层、一非故意掺杂的$Al_{0.02}Ga_{0.98}N$层，将p型层与有源区隔开，从而降低了光学损耗。2009年，Zhang等人[47]通过模拟计算发现，增加p-AlGaN层的Al组分、厚度均可以降低GaN基激光器的光学损耗。2010年，Huang等人[48]对GaN基绿光激光器进行了光学模拟，发现了诸多减小光学损耗的方法，如将p型限制层的厚度增加到500 nm以上以减小金属电极的光吸收损耗、采用InGaN量子垒代替GaN量子垒层、降低p型层的Mg掺杂浓度以减小p型层的光吸收系数等。2012年，Chen等人[93]对GaN基蓝光激光器的结构进行了模拟优化：使用非故意掺杂的InGaN波导层替代Mg掺杂的GaN波导层，并将非故意掺杂的InGaN波导层插入到有源区与p型层之间。结果表明优化后的激光器结构的光学损耗出现了明显的下降。2013年，我们团队[94]通过仿真计算发现，在有源区与p型电子阻挡层之间插入非故意掺杂的InGaN层可以提高有源区的光限制因子，降低激光器的光学损耗。2016年，Kawaguchi等人[20]在GaN基紫光激光器两侧插入额外的非故意掺杂GaN层，当插入层的总厚度大于500 nm后，激光器的光学损耗降低至2 $cm^{-1}$以下。2017年，我们[44]通过调节非故意掺杂InGaN层的厚度，优化了Mg浓度分布、降低了光学损耗，最终得到了输出功率为2.2 W、电光转换效率为20%的蓝光激光器。

通过合理设计激光器结构，采用其它材料替代p型层也有可能降低激光器的光学损耗。2009年，Bour等人[95]采用金属银替代了p型AlGaN，实现了紫光激光器的室温脉冲工作，其中激光器内部光学损耗约为30 $cm^{-1}$。2011年，Chua等人[96]将p型AlGaN限制层分别替换成金属银、Ag-Pd-Cu合金、ITO，制备出了三种室温脉冲激射的GaN基紫光激光器。2013年，Hardy等人[97]采用ITO替代p型AlGaN，制备出了在脉冲条件下工作的GaN基蓝光和绿光激光器。2015年，Pourhashemi等人[98]制备出了室温连续工作的ITO限制层蓝光激光器，其最高光输出功率达到了2.52 W。2017年，Murayama等人[35]使用ITO替代了部分p型AlGaN层，将$(20\bar{2}1)$面绿光激光器的光学损耗降低到了1 $cm^{-1}$以下，最终得到了最高光输出功率超过2 W的绿光激光器。

## 1.4　GaN 基激光器的载流子注入效率研究

载流子注入效率是表征激光器性能的一个重要参数，其定义为在有源区复合

的电子-空穴对数同注入的总电子-空穴对数之比。载流子注入效率越高，激光器的阈值电流越小、斜率效率越高。1.3节的式1.1、式1.2分别反映了载流子注入效率对阈值电流密度、斜率效率的影响。研究载流子注入效率对于提升GaN基激光器的性能具有重要的意义。

### 1.4.1 载流子注入效率的测量

当激光器激射时，受激辐射速率会远超过其他复合方式(包括非辐射复合、自发辐射复合、俄歇复合等)速率，有源区的内量子效率接近1，因而根据激光器的斜率效率、内部光学损耗即可推算出载流子注入效率，其中内部光学损耗可以通过Hakki-Paoli法[73]进行测量。GaN基紫光、蓝光、绿光激光器的载流子注入效率均通过该法[71, 99]进行了测量。

使用1.3节的变腔长法对激光器的斜率效率、腔长进行拟合时，除了可以得到内部光学损耗外，也可以得到激光器的载流子注入效率。诸多研究者[75-80]均使用变腔长法测量了GaN基激光器的载流子注入效率。

光泵浦注入时可以近似认为激光器的载流子注入效率等于1。2011年，Nagata等人[100]通过比较电流注入、光泵浦注入两种条件下GaN基紫外激光器的内量子效率差异，推算出了GaN基紫外激光器在电流注入时的载流子注入效率。

### 1.4.2 提升载流子注入效率的方法

同空穴相比，电子的有效质量小、迁移率高[101-104]，非常容易从有源区中溢出，形成电子电流泄露，从而降低GaN基激光器的载流子注入效率。在有源区的上方插入p型AlGaN层[10, 105, 106]可以有效抑制电子从有源区中的溢出，提高载流子注入效率。2004年，Kuo等人[107]使用商用的LASTIP软件仿真发现，当p型AlGaN电子阻挡层的Al组分大于14%时，从GaN基激光器有源区中溢出的电子电流可以被有效抑制。2006年，Lee等人[108]将激光器中普通的p型AlGaN单层替换成了p型AlGaN/GaN多量子垒结构。同常规的p型AlGaN单层相比，p型AlGaN/GaN多量子垒结构抑制电子电流溢出的效果更好，同时空穴浓度更高，因而能够提高器件的载流子注入效率。通过这次改进，激光器的阈值电流由42 mA下降到了32 mA，同时斜率效率由0.90 W/A提高到了1.12 W/A。2008年，Chen等人[109]通过仿真计算发现，InGaN量子垒与AlGaN电子阻挡层界面位置的极化电荷会增加电子电流的泄露、降低载流子注入效率，导致阈值电流上升。采用AlInGaN替代AlGaN作为电子阻挡层可以减少界面位置的极化电荷，减少电子电流的泄露，提升激光器的载流子注入效率。2012年，Yang等人[110]通过仿真计算发现，采用Al组分沿生长方向台阶状递增的p型AlGaN电子阻挡层可以抑制电子电流的溢出，提高激光

器的载流子注入效率。2014年，Le等人[111]通过仿真计算发现，在GaN量子垒层与p型AlGaN电子阻挡层之间插入5 nm非故意掺杂的$In_{0.05}Ga_{0.95}N$层可以有效抑制电子电流的溢出，提升激光器的载流子注入效率。2015年，Le等人[112]通过仿真计算发现，采用极化调制的AlInGaN替代常规的AlGaN作为电子阻挡层、或者减小常规的AlGaN电子阻挡层的厚度，均可以抑制电子电流的溢出，提高激光器的载流子注入效率。

## 1.5 本论文的研究内容、研究意义及工作安排

### 1.5.1 本论文的研究内容

本论文主要研究GaN基激光器的光学损耗与载流子注入效率，致力于寻找降低光学损耗、提升载流子注入效率的方法。

### 1.5.2 本论文的研究意义

光学损耗与载流子注入效率是表征激光器性能的两个重要参数，其大小直接影响了激光器的阈值电流与斜率效率。为了进一步提升GaN基激光器的性能，有必要深入研究激光器的光学损耗与载流子注入效率，寻找进一步优化激光器结构、提升激光器性能的方法。

### 1.5.3 本论文的工作安排

第一章是绪论，首先介绍了GaN基激光器的应用及研究进展，其次介绍了GaN基激光器光学损耗的测量方法、光学损耗的来源以及光学损耗的方法，最后介绍了GaN基激光器载流子注入效率的测量方法以及提升载流子注入效率的途径。

第二章首先介绍了本论文工作中采用的实验测试方法，包括MOCVD、HRXRD、AFM、PL和SIMS，其次介绍了本论文工作中采用的仿真计算方法以及仿真参数。

第三章重点介绍了GaN基激光器光学损耗的研究。首先，我们自主搭建了一套测试GaN基激光器外延片光学损耗的系统，并通过详细的理论分析证明其测试误差小于1 $cm^{-1}$。其次，我们利用该系统详细研究了外延片中Mg、H对光学损耗的影响，并提出了降低外延片光学损耗的方法。再次，我们详细介绍了激光器放大的自发辐射光谱及测试激光器器件光学损耗的Hakki-Paoli法，并利用Hakki-

Paoli法测定了GaN基蓝光、绿光激光器的光学损耗。再次，我们通过模拟研究了脊型散射对激光器光学损耗的影响。最后，我们通过模拟和实验相结合的手段研究了采用ITO作为光学限制层对激光器光学损耗的影响。

第四章重点介绍了GaN基绿光激光器载流子注入效率的研究。首先，我们设计了一种特殊的绿光激光器结构，并利用该结构详细研究了空穴在绿光激光器中的输运特性。我们发现，大量的空穴能够从绿光双量子阱中溢出，从而降低绿光激光器的载流子注入效率。在绿光双量子阱的下方插入重掺杂层可以有效抑制空穴的溢出，从而提升绿光激光器的载流子注入效率。其次，我们研究了载流子在上波导层的复合。通过模拟，我们发现：在GaN最后一个量子垒与InGaN上波导层界面位置存在一个势垒，这个势垒会导致大量的载流子被限制在InGaN上波导层中并在该层复合，从而降低绿光激光器的载流子注入效率。实验结果同模拟结果吻合得很好。

第五章重点介绍了GaN基蓝光激光器的波导结构设计。我们通过模拟计算发现，随着插入GaN波导层厚度的增加，蓝光激光器的光学损耗和载流子注入效率均不断降低。随着上波导层背景载流子浓度的增加，蓝光激光器的载流子注入效率不断下降。使用In组分梯度变化的上波导层替代原有的GaN和InGaN上波导层，可以有效抑制上波导层顶部的载流子积聚，从而提升蓝光激光器的载流子注入效率。

第六章重点介绍了AlGaN的MOCVD生长研究，这主要是因为AlGaN层的质量高低对光学损耗、载流子注入效率有重要影响。通过改变生长温度、总气流量，我们生长了一系列AlGaN样品。我们发现，随着生长温度的降低、总气流量的增加，AlGaN层中并入的C浓度逐渐升高，AlGaN带边发光峰的强度不断下降，同时AlGaN层黄光峰的强度不断增强。$NH_3$分解产生的H原子浓度的下降被认为是造成这种现象的根本原因。

第七章是全文的总结，主要对研究内容进行了回顾，并对未来的工作进行了展望。

# 参考文献

[1] D. Sizov, R. Bhat, and C.-E. Zah, "Gallium Indium Nitride-Based Green Lasers," Journal of Lightwave Technology, 30, 679-699, 2012.

[2] H. Ohta, S. P. DenBaars, and S. Nakamura, "Future of group-III nitride semiconductor green laser diodes," Journal of the Optical Society of America B-Optical Physics, 27, B45-B49, 2010.

[3] M. Jansen, B. D. Cantos, G. P. Carey, et al., "Visible laser and laser array sources for projection displays," Proc. of SPIE, 6135, 61350T, (2006).

[4] H. Amano, N. Sawaki, I. Akasaki, et al., "Metalorganic vapor phase epitaxial growth of a high quality GaN film using an AlN buffer layer," Applied Physics Letters, 48, 353-355, 1986.

[5] S. Nakamura, "GaN growth using GaN buffer layer," Japanese Journal of Applied Physics, 30, L1705, 1991.

[6] S. Nakamura, T. Mukai, and M. Senoh, "Si-and Ge-doped GaN films grown with GaN buffer layers," Japanese journal of applied physics, 31, 2883, 1992.

[7] H. Amano, M. Kito, K. Hiramatsu, et al., "P-type conduction in Mg-doped GaN treated with low-energy electron beam irradiation (LEEBI)," Japanese Journal of Applied Physics, 28, L2112, 1989.

[8] S. Nakamura, T. Mukai, M. Senoh, et al., "Thermal annealing effects on p-type Mg-doped GaN films," Japanese Journal of Applied Physics, 31, L139, 1992.

[9] S. Nakamura, N. Iwasa, M. Senoh, et al., "Hole compensation mechanism of p-type GaN films," Japanese journal of applied physics, 31, 1258, 1992.

[10] N. Shuji, S. Masayuki, N. Shin-ichi, et al., "InGaN-Based Multi-Quantum-Well-Structure Laser Diodes," Japanese Journal of Applied Physics, 35, L74, 1996.

[11] N. Shuji, S. Masayuki, N. Shin-ichi, et al., "InGaN Multi-Quantum-Well-Structure Laser Diodes with Cleaved Mirror Cavity Facets," Japanese Journal of Applied Physics, 35, L217, 1996.

[12] S. Nakamura, M. Senoh, S. i. Nagahama, et al., "Ridge-geometry InGaN multi-quantum-well-structure laser diodes," Applied Physics Letters, 69, 1477-1479, 1996.

[13] S. Nakamura, M. Senoh, S. i. Nagahama, et al., "Continuous-wave operation of InGaN multi-quantum-well-structure laser diodes at 233 K," Applied Physics Letters, 69, 3034-3036, 1996.

[14] S. Nakamura, M. Senoh, S. i. Nagahama, et al., "Room-temperature continuous-wave

operation of InGaN multi-quantum-well structure laser diodes," Applied Physics Letters, 69, 4056-4058, 1996.

[15] S. Nakamura, M. Senoh, S.-i. Nagahama, et al., "Room-temperature continuous-wave operation of InGaN multi-quantum-well structure laser diodes with a lifetime of 27 hours," Applied Physics Letters, 70, 1417-1419, 1997.

[16] S. Nakamura, M. Senoh, S.-i. Nagahama, et al., "InGaN/GaN/AlGaN-based laser diodes with modulation-doped strained-layer superlattices grown on an epitaxially laterally overgrown GaN substrate," Applied Physics Letters, 72, 211-213, 1998.

[17] N. Shuji, S. Masayuki, N. Shin-ichi, et al., "Violet InGaN/GaN/AlGaN-Based Laser Diodes Operable at 50°C with a Fundamental Transverse Mode," Japanese Journal of Applied Physics, 38, L226, 1999.

[18] S. Goto, M. Ohta, Y. Yabuki, et al., "Super high-power AlGaInN-based laser diodes with a single broad-area stripe emitter fabricated on a GaN substrate," physica status solidi (a), 200, 122-125, 2003.

[19] H. Y. Ryu, K. H. Ha, S. N. Lee, et al., "Single-mode blue-violet laser diodes with low beam divergence and high COD level," IEEE Photonics Technology Letters, 18, 1001-1003, 2006.

[20] M. Kawaguchi, O. Imafuji, S. Nozaki, et al., "Optical-loss suppressed InGaN laser diodes using undoped thick waveguide structure," Proc. of SPIE, 9748, 974818, (2016).

[21] 李德尧, "GaN 基蓝紫光激光器研究," 博士论文, 北京, 中国科学院半导体研究所, 2005.

[22] 张立群, "连续激射的 GaN 基激光器研究," 博士论文, 北京, 中国科学院半导体研究所, 2010.

[23] C. Zeng, S.-M. Zhang, L. Ji, et al., "Room-Temperature Continuous-Wave Operation of InGaN-Based Blue-Violet Laser Diodes with a Lifetime of 15.6 Hours," Chinese Physics Letters, 27, 114215, 2010.

[24] Y. Sun, K. Zhou, Q. Sun, et al., "Room-temperature continuous-wave electrically injected InGaN-based laser directly grown on Si," Nat Photon, 10, 595-599, 2016.

[25] S. Nakamura, M. Senoh, S.-i. Nagahama, et al., "Blue InGaN-based laser diodes with an emission wavelength of 450 nm," Applied Physics Letters, 76, 22-24, 2000.

[26] S. Nagahama, N. Iwasa, M. Senoh, et al., "GaN-Based Light-Emitting Diodes and Laser Diodes, and Their Recent Progress," physica status solidi (a), 188, 1-7, 2001.

[27] S. Nagahama, T. Yanamoto, M. Sano, et al., "Blue-Violet Nitride Lasers," physica status solidi (a), 194, 423-427, 2002.

[28] T. Kozaki, T. Yanamoto, T. Miyoshi, et al., "52.3: High-Power InGaN Blue-Laser Diodes

for Displays," SID Symposium Digest of Technical Papers, 36, 1605-1607, 2005.

[29] T. Kozaki, H. Matsumura, Y. Sugimoto, et al., "High-power and wide wavelength range GaN-based laser diodes," Proc. of SPIE, 6133, 613306, (2006).

[30] T. Miyoshi, T. Kozaki, T. Yanamoto, et al., "GaN-based high-output-power blue laser diodes for display applications," Journal of the Society for Information Display, 15, 157-160, 2007.

[31] T. Miyoshi, T. Kozaki, T. Yanamoto, et al., "63.3: GaN-Based 1-W Continuous-Wave Blue-Laser Diodes," SID Symposium Digest of Technical Papers, 39, 966-968, 2008.

[32] A. Michiue, T. Miyoshi, T. Kozaki, et al., "High-Power Pure Blue InGaN Laser Diodes," IEICE Transactions on Electronics, E92.C, 194-197, 2009.

[33] S. Masui, Y. Nakatsu, D. Kasahara, et al., "Recent improvement in nitride lasers," Proc. of SPIE, 10104, 101041H, (2017).

[34] O. Goto, S. Tomiya, Y. Hoshina, et al., "High power pure-blue semiconductor lasers," Proc. of SPIE, 6485, 64850Z, (2007).

[35] M. Murayama, Y. Nakayama, K. Yamazaki, et al., "Watt-Class Green (530 nm) and Blue (465 nm) Laser Diodes," physica status solidi (a), 1700513, 2017.

[36] U. Strauβ, S. Brüninghoff, M. Schillgalies, et al., "True-blue InGaN laser for pico size projectors," Proc. of SPIE, 6894, 689417, (2008).

[37] S. Lutgen, A. Avramescu, T. Lermer, et al., "Progress of blue and green InGaN laser diodes," Proc. of SPIE, 7616, 76160G, (2010).

[38] S. Lutgen, D. Dini, I. Pietzonka, et al., "Recent results of blue and green InGaN laser diodes for laser projection," Proc. of SPIE, 7953, 79530G, (2011).

[39] C. Vierheilig, C. Eichler, S. Tautz, et al., "Beyond blue pico laser: development of high power blue and low power direct green," Proc. of SPIE, 8277, 82770K, (2012).

[40] T. Hager, U. Strauß, C. Eichler, et al., "Power blue and green laser diodes and their applications," Proc. of SPIE, 8640, 86400G, (2013).

[41] U. Strauss, T. Hager, G. Brüderl, et al., "Recent advances in c-plane GaN visible lasers," Proc. of SPIE, 8986, 89861L, (2014).

[42] U. Strauss, A. Somers, U. Heine, et al., "GaInN laser diodes from 440 to 530nm: a performance study on single-mode and multi-mode R&D designs," Proc. of SPIE, 10123, 101230A, (2017).

[43] 曾畅, "GaN 基激光器结构设计与关键工艺研究," 博士论文, 北京, 中国科学院半导体所, 2012.

[44] J. Liu, L. Zhang, D. Li, et al., "GaN-Based Blue Laser Diodes With 2.2 W of Light Output

Power Under Continuous-Wave Operation," IEEE Photonics Technology Letters, 29, 2203-2206, 2017.

[45] F. K. Yam and Z. Hassan, "InGaN: An overview of the growth kinetics, physical properties and emission mechanisms," Superlattices and Microstructures, 43, 1-23, 2008.

[46] T. Lermer, M. Schillgalies, A. Breidenassel, et al., "Waveguide design of green InGaN laser diodes," physica status solidi (a), 207, 1328-1331, 2010.

[47] L. Zhang, D. Jiang, J. Zhu, et al., "Confinement factor and absorption loss of AlInGaN based laser diodes emitting from ultraviolet to green," Journal of Applied Physics, 105, 023104, 2009.

[48] C.-Y. Huang, Y.-D. Lin, A. Tyagi, et al., "Optical waveguide simulations for the optimization of InGaN-based green laser diodes," Journal of Applied Physics, 107, 023101, 2010.

[49] M. Funato, Y. S. Kim, Y. Ochi, et al., "Optical Gain Spectra of a (0001) InGaN Green Laser Diode," Applied Physics Express, 6, 2013.

[50] T. Lermer, A. Gomez-Iglesias, M. Sabathil, et al., "Gain of blue and cyan InGaN laser diodes," Applied Physics Letters, 98, 2011.

[51] K. Kojima, M. Funato, Y. Kawakami, et al., "Inhomogeneously broadened optical gain spectra of InGaN quantum well laser diodes," physica status solidi (c), 5, 2126-2128, 2008.

[52] K. Kojima, U. T. Schwarz, M. Funato, et al., "Optical gain spectra for near UV to aquamarine (Al,In)GaN laser diodes," Optics Express, 15, 7730-7736, 2007.

[53] Z. Li, J. Liu, M. Feng, et al., "Suppression of thermal degradation of InGaN/GaN quantum wells in green laser diode structures during the epitaxial growth," Applied Physics Letters, 103, 152109, 2013.

[54] C. Ren, "Polarisation fields in III-nitrides: effects and control," Materials Science and Technology, 32, 418-433, 2015.

[55] S.-H. Park and S.-L. Chuang, "Piezoelectric effects on electrical and optical properties of wurtzite GaN/AlGaN quantum well lasers," Applied physics letters, 72, 3103-3105, 1998.

[56] M. Leroux, N. Grandjean, M. Laügt, et al., "Quantum confined Stark effect due to built-in internal polarization fields in (Al,Ga)N/GaN quantum wells," Physical Review B, 58, R13371-R13374, 1998.

[57] T. Miyoshi, T. Yanamoto, T. Kozaki, et al., "Recent status of white LEDs and nitride LDs," Proc. of SPIE, 6894, 689414, (2008).

[58] M. Takashi, M. Shingo, O. Takeshi, et al., "510-515 nm InGaN-Based Green Laser Diodes on c-Plane GaN Substrate," Applied Physics Express, 2, 062201, 2009.

[59] T. Miyoshi, S. Masui, T. Okada, et al., "InGaN-based 518 and 488 nm laser diodes on c-plane GaN substrate," physica status solidi (a), 207, 1389-1392, 2010.

[60] D. Queren, A. Avramescu, G. Brüderl, et al., "500 nm electrically driven InGaN based laser diodes," Applied Physics Letters, 94, 081119, 2009.

[61] A. Avramescu, T. Lermer, J. Müller, et al., "InGaN laser diodes with 50 mW output power emitting at 515 nm," Applied Physics Letters, 95, 071103, 2009.

[62] S. Dmitry, B. Rajaram, S. Kechang, et al., "60 mW Pulsed and Continuous Wave Operation of GaN-Based Semipolar Green Laser with Characteristic Temperature of 190 K," Applied Physics Express, 4, 102103, 2011.

[63] Y. Enya, Y. Yoshizumi, T. Kyono, et al., "531 nm green lasing of InGaN based laser diodes on semi-polar {20-21} free-standing GaN substrates," Applied Physics Express, 2, 082101, 2009.

[64] Y. Yusuke, A. Masahiro, E. Yohei, et al., "Continuous-Wave Operation of 520 nm Green InGaN-Based Laser Diodes on Semi-Polar {20-21} GaN Substrates," Applied Physics Express, 2, 092101, 2009.

[65] A. Masahiro, Y. Yusuke, E. Yohei, et al., "Low Threshold Current Density InGaN Based 520-530 nm Green Laser Diodes on Semi-Polar {20-21} Free-Standing GaN Substrates," Applied Physics Express, 3, 121001, 2010.

[66] T. Shimpei, E. Yohei, K. Takashi, et al., "High-Power (over 100 mW) Green Laser Diodes on Semipolar {20-21} GaN Substrates Operating at Wavelengths beyond 530 nm," Applied Physics Express, 5, 082102, 2012.

[67] Y. Katsunori, N. Hiroshi, T. Kunihiko, et al., "Long-Lifetime True Green Laser Diodes with Output Power over 50 mW above 525 nm Grown on Semipolar {20-21} GaN Substrates," Applied Physics Express, 5, 082103, 2012.

[68] M. T. Hardy, F. Wu, P. Shan Hsu, et al., "True green semipolar InGaN-based laser diodes beyond critical thickness limits using limited area epitaxy," Journal of Applied Physics, 114, 183101, 2013.

[69] L. Jianping, L. Zengcheng, Z. Liqun, et al., "Realization of InGaN laser diodes above 500 nm by growth optimization of the InGaN/GaN active region," Applied Physics Express, 7, 111001, 2014.

[70] A. Tian, J. Liu, L. Zhang, et al., "Green laser diodes with low threshold current density via interface engineering of InGaN/GaN quantum well active region," Optics Express, 25, 415-421, 2017.

[71] T. Hager, G. Brüderl, T. Lermer, et al., "Current dependence of electro-optical parameters

in green and blue (AlIn) GaN laser diodes," Applied Physics Letters, 101, 171109, 2012.

[72] B. W. Hakki and T. L. Paoli, "Gain spectra in GaAs double-heterostructure injection lasers," Journal of Applied Physics, 46, 1299-1306, 1975.

[73] B. W. Hakki and T. L. Paoli, "cw degradation at 300°K of GaAs double-heterostructure junction lasers. II. Electronic gain," Journal of Applied Physics, 44, 4113-4119, 1973.

[74] U. T. Schwarz, E. Sturm, W. Wegscheider, et al., "Gain spectra and current-induced change of refractice index in (In/Al)GaN diode lasers," physica status solidi (a), 200, 143-146, 2003.

[75] D. L. Becerra, L. Y. Kuritzky, J. Nedy, et al., "Measurement and analysis of internal loss and injection efficiency for continuous-wave blue semipolar (20-2-1) III-nitride laser diodes with chemically assisted ion beam etched facets," Applied Physics Letters, 108, 091106, 2016.

[76] R. M. Farrell, D. A. Haeger, P. S. Hsu, et al., "Determination of internal parameters for AlGaN-cladding-free m-plane InGaN/GaN laser diodes," Applied Physics Letters, 99, 171115, 2011.

[77] H. Ryu, K. Ha, J. Son, et al., "Determination of internal parameters in blue InGaN laser diodes by the measurement of cavity-length dependent characteristics," Applied Physics Letters, 93, 011105, 2008.

[78] M. Ohta, Y. Ohizumi, Y. Hoshina, et al., "High-power pure blue laser diodes," physica status solidi (a), 204, 2068-2072, 2007.

[79] S. Nakamura, "InGaN-based blue laser diodes," IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 3, 712-718, 1997.

[80] S. Nakamura, M. Senoh, S. i. Nagahama, et al., "Optical gain and carrier lifetime of InGaN multi-quantum well structure laser diodes," Applied Physics Letters, 69, 1568-1570, 1996.

[81] J. Thomson, H. Summers, P. Hulyer, et al., "Determination of single-pass optical gain and internal loss using a multisection device," Applied Physics Letters, 75, 2527-2529, 1999.

[82] H. Summers, P. Smowton, P. Blood, et al., "Spatially and spectrally resolved measurement of optical loss in InGaN laser structures," Journal of crystal growth, 230, 517-521, 2001.

[83] P. Mogensen, P. Smowton, and P. Blood, "Measurement of optical mode loss in visible emitting lasers," Applied physics letters, 71, 1975-1977, 1997.

[84] J. Shakya, J. Lin, and H. Jiang, "Near-field optical study of AlGaN/GaN quantum-well waveguide," Applied physics letters, 84, 1832-1834, 2004.

[85] J. Son, J. Hwang, S. Lee, et al., "Analysis of optical loss on blue-violet laser diodes," physica status solidi (c), 3, 2178-2181, 2006.

[86] D. S. Sizov, R. Bhat, A. Heberle, et al., "Internal optical waveguide loss and p-Type absorption in blue and green InGaN quantum well laser diodes," Applied Physics Express, 3, 122104, 2010.

[87] M. Kuramoto, C. Sasaoka, N. Futagawa, et al., "Reduction of Internal Loss and Threshold Current in a Laser Diode with a Ridge by Selective Re-Growth (RiS-LD)," physica status solidi (a), 192, 329-334, 2002.

[88] S. Uchida, M. Takeya, S. Ikeda, et al., "Recent progress in high-power blue-violet lasers," IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 9, 1252-1259, 2003.

[89] O. Schmidt, O. Wolst, M. Kneissl, et al., "Gain and photoluminescence spectroscopy in violet and ultraviolet InAlGaN laser structures," physica status solidi (c), 2, 2891-2894, 2005.

[90] E. Kioupakis, P. Rinke, A. Schleife, et al., "Free-carrier absorption in nitrides from first principles," Physical Review B, 81, 241201, 2010.

[91] K. Emmanouil, R. Patrick, and G. V. d. W. Chris, "Determination of Internal Loss in Nitride Lasers from First Principles," Applied Physics Express, 3, 082101, 2010.

[92] J. K. Son, S. N. Lee, H. S. Paek, et al., "Measurement of optical loss variation on thickness of InGaN optical confinement layers of blue-violet-emitting laser diodes," Journal of Applied Physics, 103, 103101, 2008.

[93] P. Chen, M. X. Feng, D. S. Jiang, et al., "Improvement of characteristics of InGaN-based laser diodes with undoped InGaN upper waveguide layer," Journal of Applied Physics, 112, 113105, 2012.

[94] M.-X. Feng, J.-P. Liu, S.-M. Zhang, et al., "Design considerations for GaN-based blue laser diodes with InGaN upper waveguide layer," IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 19, 1500705, 2013.

[95] D. Bour, C. Chua, Z. Yang, et al., "Silver-clad nitride semiconductor laser diode," Applied Physics Letters, 94, 041124, 2009.

[96] C. Chua, Z. Yang, C. Knollenberg, et al., "InAlGaN optical emitters: laser diodes with non-epitaxial cladding layers and ultraviolet light-emitting diodes," Proc. of SPIE, 7939, 793918, (2011).

[97] M. T. Hardy, C. O. Holder, D. F. Feezell, et al., "Indium-tin-oxide clad blue and true green semipolar InGaN/GaN laser diodes," Applied Physics Letters, 103, 081103, 2013.

[98] A. Pourhashemi, R. M. Farrell, D. A. Cohen, et al., "High-power blue laser diodes with indium tin oxide cladding on semipolar (20-2-1) GaN substrates," Applied Physics Letters, 106, 111105, 2015.

[99] W. G. Scheibenzuber, U. T. Schwarz, L. Sulmoni, et al., "Recombination coefficients of GaN-based laser diodes," Journal of Applied Physics, 109, 093106, 2011.

[100] K. Nagata, K. Takeda, Y. Oshimura, et al., "Injection efficiency in AlGaN-based UV laser diodes," physica status solidi (c), 8, 2384-2386, 2011.

[101] T. T. Mnatsakanov, M. E. Levinshtein, L. I. Pomortseva, et al., "Carrier mobility model for GaN," Solid-State Electronics, 47, 111-115, 2003.

[102] M. Suzuki, T. Uenoyama, and A. Yanase, "First-principles calculations of effective-mass parameters of AlN and GaN," Physical Review B, 52, 8132-8139, 1995.

[103] D. L. Rode and D. K. Gaskill, "Electron Hall mobility of n-GaN," Applied Physics Letters, 66, 1972-1973, 1995.

[104] T. Tanaka, A. Watanabe, H. Amano, et al., "p-type conduction in Mg-doped GaN and $Al_{0.08}Ga_{0.92}N$ grown by metalorganic vapor phase epitaxy," Applied Physics Letters, 65, 593-594, 1994.

[105] J. Piprek and S. Nakamura, "Physics of high-power InGaN/GaN lasers," IEE Proceedings of Optoelectronics, 149, 145-151, 2002.

[106] K. Domen, R. Soejima, A. Kuramata, et al., "Electron overflow to the AlGaN p-cladding layer in InGaN/GaN/AlGaN MQW laser diodes," MRS Internet Journal of Nitride Semiconductor Research, 3, e2, 1998.

[107] Y.-K. Kuo and Y.-A. Chang, "Effects of electronic current overflow and inhomogeneous carrier distribution on InGaN quantum-well laser performance," IEEE Journal of Quantum Electronics, 40, 437-444, 2004.

[108] S.-N. Lee, S. Cho, H. Ryu, et al., "High-power GaN-based blue-violet laser diodes with AlGaN/GaN multiquantum barriers," Applied physics letters, 88, 1101, 2006.

[109] J.-R. Chen, C.-H. Lee, T.-S. Ko, et al., "Effects of built-in polarization and carrier overflow on InGaN quantum-well lasers with electronic blocking layers," Journal of Lightwave Technology, 26, 329-337, 2008.

[110] W. Yang, D. Li, N. Liu, et al., "Improvement of hole injection and electron overflow by a tapered AlGaN electron blocking layer in InGaN-based blue laser diodes," Applied Physics Letters, 100, 031105, 2012.

[111] L. Le, D. Zhao, D. Jiang, et al., "Suppression of electron leakage by inserting a thin undoped InGaN layer prior to electron blocking layer in InGaN-based blue-violet laser diodes," Optics express, 22, 11392-11398, 2014.

[112] L. Le, D. Zhao, D. Jiang, et al., "Utilization of polarization-inverted AlInGaN or relatively thinner AlGaN electron blocking layer in InGaN-based blue-violet laser diodes," Journal of

Vacuum Science & Technology B, 33, 011209, 2015.

# 第二章　实验测试及模拟计算方法

## 2.1　实验测试方法

### 2.1.1　MOCVD 简介

GaN基激光器一般通过商用的金属有机物化学气相沉积(Metal Organic Chemical Vapor Deposition，简称MOCVD)设备进行外延生长。截止目前为止，市场上商用化的MOCVD设备主要来自德国Aixtron、美国Veeco、日本Taiyo Nippon Sanso以及中国Imicro四家公司。本论文中使用的MOCVD设备来自德国Aixtron，其反应腔室采用近耦合喷淋头(Close Coupled Showerhead，简称CCS)结构，内部的石墨托盘可以盛放6×2 inch的外延片。图2.1是MOCVD生长系统的结构示意图，其中包括有气体原材料输运系统、反应室系统、尾气处理系统、原位监测系统以及控制系统[1]。

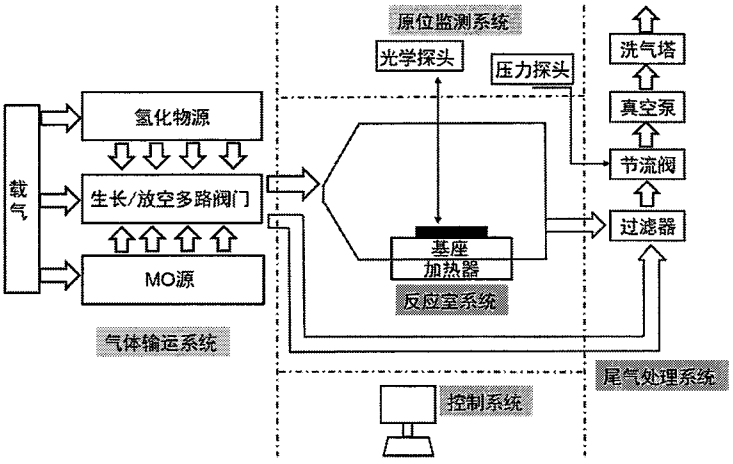



图2.1　MOCVD生长系统的结构示意图

载气通常使用$H_2$或者$N_2$，且在进入气体管路之前需要进行提纯。其中，$H_2$通常需要通过温度为300-400 °C的钯合金膜以完成提纯，$N_2$则采用物理或者化学吸附的方式来完成提纯。氢化物源为氨气($NH_3$)和硅烷($SiH_4$)，其中$NH_3$通常存储在液化气钢瓶中，$SiH_4$则通常以气态氢化物混合气的形式存储在高压气钢瓶中。MO源则主要包括三甲基镓(分子式为$Ga(CH_3)_3$，简称为TMGa)、三乙基镓(分子式为$Ga(C_2H_5)_3$，简称为TEGa)、三甲基铟(分子式为$In(CH_3)_3$，简称为TMIn)、三甲基铝(分子式为$Al(CH_3)_3$，简称为TMAl)、二茂镁(分子式为$Mg(C_5H_5)_2$，简称为$Cp_2Mg$)等。MO源通常存储在钢制的源瓶之中。为了保证MO源饱和蒸气压的稳定，源瓶

通常被放置在恒温水浴槽中。表2.1列出了常用的氢化物/MO源的相对分子质量、密度、熔点、沸点以及饱和蒸气压。值得一提的是，表中TMGa、TEGa、TMIn、TMAl的饱和蒸气压由式2.1决定，即

$$P_{MO} = 10^{B-\frac{A}{T}} \tag{2.1}$$

其中，$P_{MO}$是源瓶中MO源的饱和蒸气压(单位是Torr)，B、A分别是表2.1中列举的计算饱和蒸气压的参数，T是源瓶的温度(单位是K)。$Cp_2Mg$的饱和蒸气压同温度有关，且同B、A两个参数无关。

表2.1　常用的氢化物/MO源的相对分子质量、密度、熔点、沸点以及饱和蒸气压

| 源 | 分子量 | 密度 /(g/ml) | 熔点 /(°C) | 沸点 /(°C) | 饱和蒸气压P $\lg(P(Torr)) = B - A/T(K)$ | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | | B | A |
| $NH_3$ | 17.03 | 0.674 | - | -33.35 | - | - |
| $SiH_4$ | 32.11 | 0.68 | - | -111.5 | - | - |
| TMGa | 114.82 | 1.15 | -15.8 | 55.7 | 8.07 | 1703 |
| TEGa | 156.91 | 1.06 | -82.5 | 143 | 8.083 | 2162 |
| TMIn | 159.93 | 1.568 | 88.4 | 133.8 | 11.09 | 3246 |
| TMAl | 72.09 | 0.752 | 15.4 | 127 | 8.22 | 2134 |
| $Cp_2Mg$ | 154.49 | 1.1 | 176 | 150/13.33Pa | $25.14 - \frac{4198}{T} - 2.18\ln(T)$ | |

载气首先进入到MO源瓶中，然后携带MO源气体从源瓶出口出来，进入到气体管路中。假设通入MO源瓶的载气总量为F(单位是$cm^3$/min，简称为sccm)，则从源瓶出来的MO源摩尔流量(单位为mol/min)为

$$n_{MO} = \frac{F \times P_{MO}}{V_m \times (P_{bub} - P_{MO})} \tag{2.2}$$

其中，$V_m$是气体摩尔体积，其大小为22414 $cm^3$/mol。$P_{bub}$是源瓶内的气体压力，在本论文的实验中通常设置为1300 mbar (977 Torr)。特别值得说明的是，TMAl在气相中通常以二聚体的形态存在，所以计算TMAl的摩尔流量时需要在式2.2的右边乘以二。

$NH_3$通常不需要载气运输即可进入气体管路中，其摩尔流量的计算公式为

$$n_{NH_3} = \frac{F}{V_m} \tag{2.3}$$

$SiH_4$在其存储钢瓶中进行了稀释，其浓度通常在100 ppm左右，且$SiH_4$还需要通过双稀释管路进行进一步稀释，因而其摩尔流量的计算公式为

$$n_{SiH_4} = \frac{\alpha \cdot F_1 \cdot F_3}{V_m(F_1 + F_2)} \tag{2.4}$$

其中，α是钢瓶中$SiH_4$的稀释分数，$F_1$为来自于$SiH_4$存储钢瓶的气体流量，$F_2$为稀释气体流量，$F_3$为最终进入反应室的气体流量。

载气携带氢化物源和MO源通过气体管道，随后会进入到MOCVD反应室中，并在衬底表面发生反应，生成一沿衬底晶向向外延伸的薄层，这就是外延层。以GaN外延层的生长为例，如图2.1所示，载气(可以选择$H_2$或者$N_2$，这里我们选择$H_2$)分别携带着TMGa、$NH_3$从喷淋头的不同管路中喷出，然后迅速混合，随后输运到衬底表面进行反应。当TMGa、$NH_3$在气相中通过扩散的方式到达衬底表面后，会经过吸附、表面扩散、表面反应三个过程最终并入到衬底晶格中生成GaN，反应完成后的副产物如$CH_4$等则会通过解吸附、扩散两个过程重新进入到气相中，最后以尾气的方式排出反应室。TMGa与$NH_3$也能够在气相中相互反应生成加和物，并经过消去反应丢掉数个$CH_4$分子，从而在气相中生成GaN核[2]。

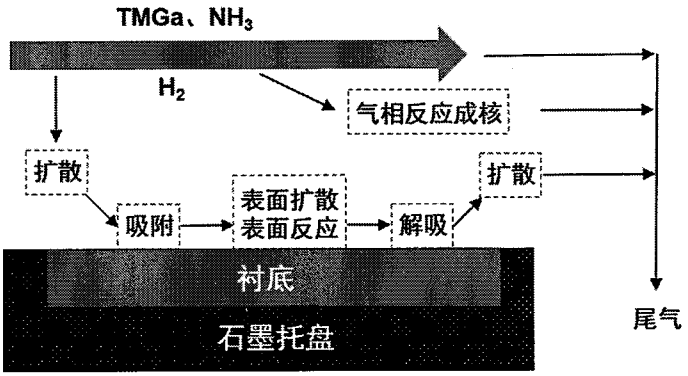



图2.2　GaN的MOCVD生长过程示意图

MOCVD生长是一个复杂的过程，反应室压力、V/III比、生长温度、气流速率等因素都可能对生长过程造成影响。反应室压力主要通过蝶阀进行调控，其中AIXTRON反应室的实际压力通常小于一个大气压。V/III比的定义是V族源的摩尔流量同III族源的摩尔流量之比，不同材料的最优V/III也不相同，InGaN、GaN、AlGaN生长时的最优V/III比呈现逐渐减小的趋势。生长温度通常指的是生长过程中外延片表面的实际温度，不同材料的最优生长温度也不相同，其中InGaN、GaN、AlGaN的最优生长温度呈现逐渐上升的趋势。气流速度是一个较为复杂的变量，总气流量、反应室压力、喷淋头到石墨盘的距离都会影响到气流速率，我们将在第六章对此做进一步的介绍。

在MOCVD生长的过程中，我们可以通过原位监测系统对其生长速率、曲率和实际生长温度进行实时监控。本论文工作中采用的监测系统是来自于LayTec公司的EpiCurveTwinTT。

使用一束波长为950 nm的激光垂直照射到在蓝宝石衬底生长的GaN外延片上，则一部分激光会直接在外延片-空气界面发生反射，另一部分激光会进入到GaN外延片中，并在GaN/蓝宝石界面发生发射，最后从GaN外延片表面出射。两部分反射光会发生干涉，并最终被探测器收集，如图2.3.(a)所示。随着生长时间的增加，GaN外延层的厚度不断增大，两部分反射光的相位差开始呈现周期性的变化，因而被探测器收集到的光强也会随着生长时间而呈现周期性的变化，如图2.3.(b)所示。一个振荡周期对应的GaN厚度h为

$$h = \frac{\lambda}{2n} \tag{2.5}$$

其中，λ是激光器的波长，n是GaN在激光波长位置的折射率。因而GaN的生长速率为

$$GR = \frac{h}{\Delta t} = \frac{\lambda}{2n\Delta t} \tag{2.6}$$

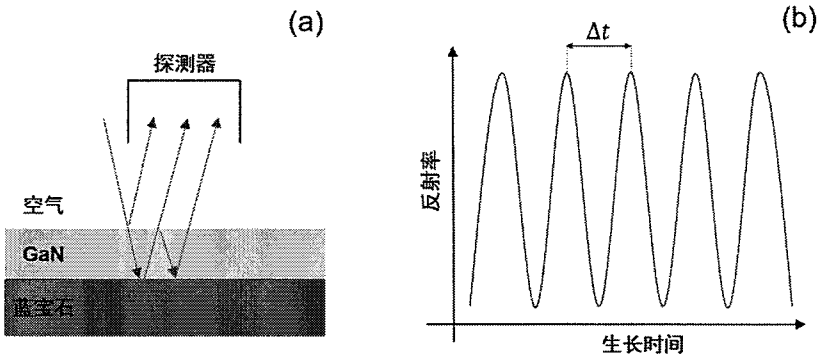



图2.3　(a) 950 nm激光照射到外延片表面发生干涉的示意图；(b)反射率随生长时间周期性变化的示意图。

图2.4是外延片生长过程中曲率监测的示意图。两束平行的激光照射到外延片上，在外延片表面发生反射，最后反射光照射到CCD上形成激光光斑。激光光斑之间的距离可以反映外延片曲率的大小。如果外延片受到压应力，外延片会凸起，此时曲率为负值，激光光斑之间的距离增大；如果外延片受到张应力，外延片会凹下去，此时曲率为正值，激光光斑之间的距离减小。假设两束入射激光之间的距离为为$x_0$，激光光斑之间的距离为x，外延片和CCD之间的距离为z，则曲率的计算公式为

$$\frac{1}{R} = -\frac{x - x_0}{2x_0 z} \tag{2.7}$$

外延片的翘曲会影响外延片同石墨盘的接触，导致生长过程中温度均匀性下降，最终影响外延片组分、厚度的均匀性。当外延片翘曲超过一定量级时，外延层甚至会发生开裂。

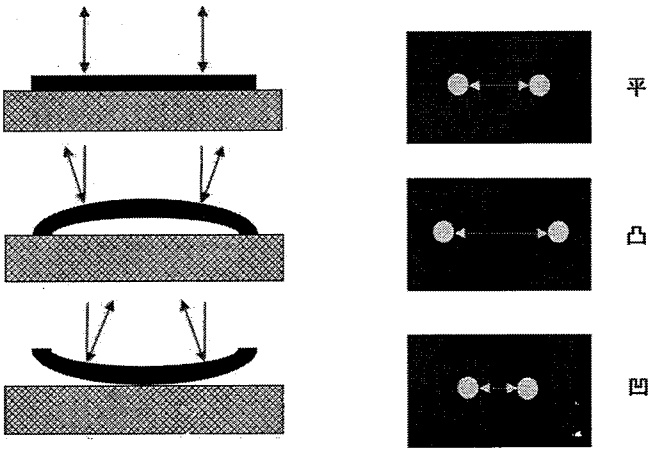



图2.4　MOCVD外延生长过程中曲率监测示意图

外延片表面的实际温度由辐射高温计进行测量，其基本原理是普朗克黑体辐射效应。式2.8是普朗克黑体辐射方程

$$E(\lambda,T)=\frac{\varepsilon\cdot C_1\cdot\lambda^{-5}}{e^{\frac{C_2}{\lambda T}}-1} \tag{2.8}$$

其中，$E(\lambda,T)$是发射的能量，其单位为$W/m^3$。$\lambda$是辐射的波长，T是材料的热力学温度，$\varepsilon$是材料发射率(黑体的发射率是1)。$C_1$、$C_2$分别是第一、第二辐射常数，其大小分别为为$3.742\times10^{-16}$ $W\cdot m^2$、$1.4388\times10^{-2}$ $m\cdot K$。

在实际探测过程中，材料的发射率并不等于1。同时，随着外延层厚度的增加，外延层中会出现法布里-珀罗干涉，导致探测到的光强会随着外延层厚度的增加而呈现周期性调制的特性。这两方面都限制了通过式2.8计算出的实际温度的准确性。为了解决这个问题，通常我们会取950 nm位置的波长进行计算。这是因为950 nm位置的反射率已经测定完毕，根据基尔霍夫热辐射定律，我们可以从反射率推导出发射率，最后将发射率代入到式2.8中即可计算出准确的实际温度。

### 2.1.2　高分辨 X 射线衍射(HRXRD)简介

X射线是一种特殊的电磁波，其特征在于它的波长范围是$10^{-2}$-$10^3$ Å。这个波长范围同大多数晶体的晶面间距非常相近，因而X射线照射到晶体结构上会发生衍射。根据晶体结构的X射线衍射光谱，我们即可反推出晶体结构的特征。

布拉格(Bragg)方程是描述晶体衍射的一个重要方程。假定X射线照射到一组晶面上，如图2.5所示，其中X射线的波长为$\lambda$，在晶面的入射光、反射光与晶面的夹角均为$\theta$，晶面之间的距离为d。两束X射线在没有入射到晶面之前，其光程差为零；入射到相邻两晶面并反射后，两束X射线的光程差为$\Delta=2d\sin\theta$。要使两束反射的X射线发生干涉，则其光程差必须满足以下条件，即

$$2d\sin\theta = n\lambda \tag{2.9}$$

式2.9即为Bragg方程，其中n为衍射级数。基于Bragg方程，通过衍射峰的角度θ即可计算出晶面间距d。

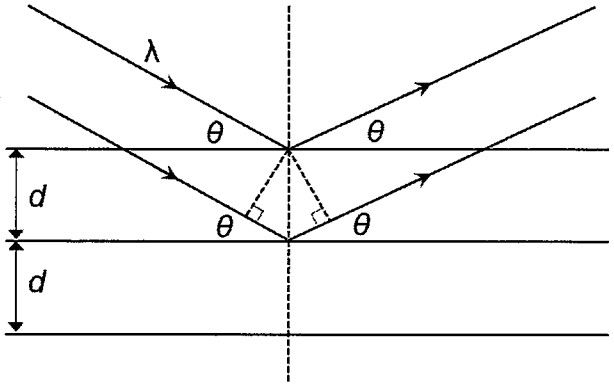



图2.5　X射线照射到晶面时发生衍射的示意图

图2.6是X射线双晶衍射(Double-Crystal X-ray diffraction，简称为DCXRD)摇摆曲线的实验光路图[3]。一束X射线经过限束装置成为近平行光，然后照射到样品表面，其中入射束与样品(hkl)晶面的夹角为$\theta_B$，且$\theta_B$是样品(hkl)晶面的衍射角。反射束的探测器则固定在样品(hkl)晶面的$2\theta_B$位置。测试过程中，保持入射束和探测器位置不变，仅在图2.6所在平面内转动样品(ω扫描)，最终得到强度I与ω的关系曲线，即摇摆曲线。摇摆曲线的半高宽可以用来评估晶体的质量。通常晶体中缺陷越多，摇摆曲线的半高宽越大。

当我们在c面蓝宝石衬底上采用两步法生长GaN模板层时，由于晶格失配，GaN外延层中会产生许多失配位错，这些位错会沿着生长方向向上延伸，即大部分位错的位错线沿(0001)方向。根据位错的伯格斯矢量与位错线方向的关系，可以将位错大致分为三类，即伯格斯矢量同位错线方向平行的螺位错、伯格斯矢量同位错线方向垂直的刃位错、伯格斯矢量同位错线方向既不平行也不垂直的混合位错。在对位错进行粗略分析时，可以用(0002)面摇摆曲线的半高宽估算螺位错密度，用$(10\bar{1}2)$面摇摆曲线的半高宽估算刃位错的密度。

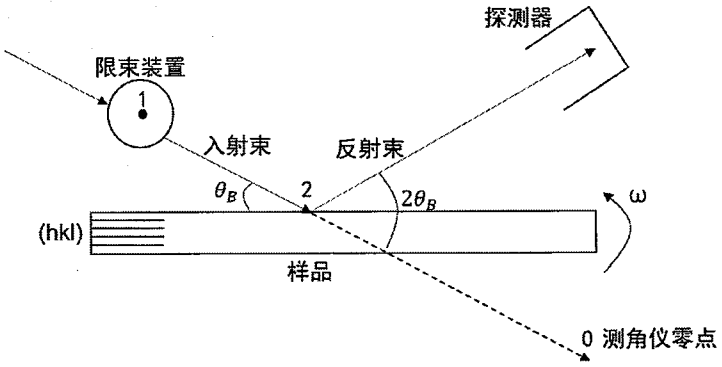



图2.6　X射线双晶衍射摇摆曲线的实验光路图

在双晶衍射摇摆曲线的测试过程中，探测器始终固定在样品(hkl)晶面的$2\theta_B$位置，因而只能得出$2\theta_B$位置附近的衍射信息。对于包含多层外延膜的样品，要想得出不同外延层晶面$2\theta_B$位置的衍射信息，就必须进行ω/2θ联动扫描。在双晶衍射ω/2θ联动扫描过程中，反射束并没有进行限束，衍射光谱的分辨率往往较低，无法区分不同外延层的衍射峰。为了提高衍射光谱的分辨率，我们需要采用三轴衍射的方式，如图2.7所示[3]，即使用分析晶体对反射束进行限束，从而提高衍射光谱的分辨率。在测试过程中，入射束保持不变，转动样品和探测器以保证入射束与所测晶面、反射束与所测晶面的夹角大小始终相等。利用三轴ω/2θ联动扫描得到的衍射光谱，我们可以推算出样品外延层的厚度、组分、弛豫度等信息。

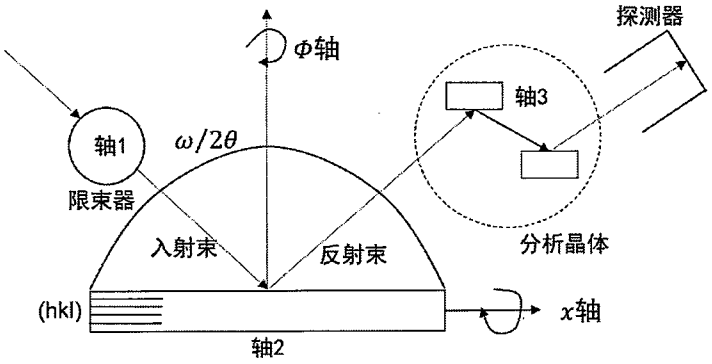



图2.7　X射线三轴衍射ω/2θ联动扫描的实验光路图

本论文中，我们采用的是Bruker D8 Dicover高分辨X射线衍射仪，产自于德国BRUKER公司。衍射仪采用的密封X光管功率达到了2 kW，波长为0.154056 nm (Cu Kα1)。衍射仪拥有ω、2θ、φ、χ四个转动轴，X、Y、Z三个平动轴，可以进行ω扫描、2θ扫描、ω/2θ扫描、φ扫描以及χ扫描等。

### 2.1.3　原子力显微镜(AFM)简介

原子力显微镜(Atomic Force Microscope，简称AFM)是表征样品形貌的一种常用测试手段，其基本原理是利用探针针尖与样品表面的原子间相互作用力来还原样品表面的形貌特征。在实际测量过程中，探针针尖通常轻敲样品表面，并在样品表面进行xy二维阵列扫描。针尖的高度会随着样品形貌的不同而不断变化，与此同时悬臂也会上下起伏，如图2.8所示。由于悬臂的背面被制成了激光反射镜面，悬臂的上下起伏最终会引起激光光斑的上下移动并被探测器探测到。通过分析激光器光斑位置的上下移动，即可获得样品表面的形貌信息。

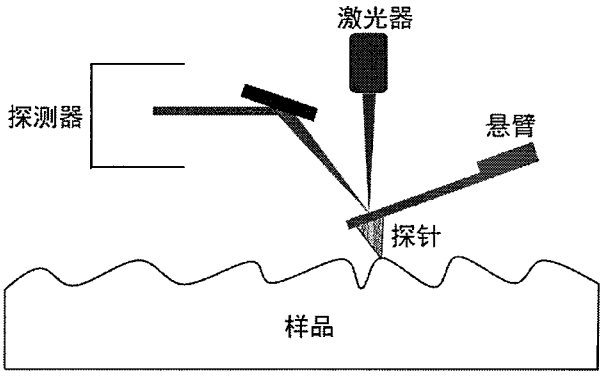



图2.8　AFM测试时的原理图

本论文中使用的是Dimension 3100型原子力显微镜，来自VEECO公司。测试过程中采用硅针尖，其中针尖的曲率半径为6 nm。

### 2.1.4　光致发光(PL)简介

光致发光(Photoluminescence，简称PL)是检测半导体材料发光性能的一个重要表征手段，其基本原理如下：使用光子能量超过半导体材料带隙宽度的激光照射半导体材料，半导体材料会吸收激光并产生电子-空穴对，电子-空穴对能够通过辐射复合将能量以光子的形式重新释放出来，这就是PL。半导体材料PL发光波长λ同带隙宽度$E_g$之间的关系为：

$$\lambda = \frac{hc}{E_g} = \frac{1239.8}{E_g} \tag{2.10}$$

其中，h是普朗克常数，c是光速，λ的单位是nm，$E_g$的单位是eV。

PL强度是样品中辐射复合与非辐射复合竞争的结果，通过分析样品PL强度，可以评估样品的材料质量，但样品的PL强度同材料质量并不完全是正相关的关系。以GaN材料为例，低V/III比条件下生长的非故意掺杂GaN样品中存在大量N

空位。这些N空位会产生高浓度的背景电子，增加辐射复合的速率，进而增强样品的PL强度。为了屏蔽背景载流子对样品PL强度的影响，可以在GaN材料中重掺杂硅以钉扎材料的费米能级。

### 2.1.5　二次离子质谱(SIMS)

当我们使用一束离子束照射到固体表面时，固体表面一部分原子能够获得足够的能量，并以离子的形式从固体表面发射出来，这就是二次离子。利用质量接收器接收二次离子，并通过离子的质量-电荷比判断出离子的种类，最终可以得到一个二次离子质谱(Secondary Ion Mass Spectroscopy, 简称为SIMS)。利用SIMS测试可以得到样品的材料组分、材料结构、掺杂等信息。以GaN基激光器为例，利用SIMS可以准确测定GaN基激光器每一层材料的厚度(可以精确到5 nm)、Si、C、H、O、Mg等杂质的含量、以及Al、In的组分。本论文工作中的SIMS实验结果均来自于埃文思材料科技(上海)有限公司。

## 2.2　激光器光学模拟简介

### 2.2.1　光学模拟方法

在本论文的研究工作中，我们使用商用的RSOFT BEAMPROP软件来研究GaN基激光器的光学特性。RSOFT BEAMPROP是一种基于光束传输法(Beam Propagation Method，简称为BPM)的软件，其核心在于通过有限差分法(Finite Difference Method)计算抛物线近似(Parabolic approximation)或者近轴近似(Paraxial approximation)的亥姆霍兹方程(Helmholtz Equation)。计算过程中采用透明边界条件。

接下来我们简要介绍一下BPM法。基于标量场假设，波动方程(Wave Equation)可以转化成亥姆霍兹方程，即

$$\frac{\partial^2 \emptyset}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 \emptyset}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 \emptyset}{\partial z^2}+k(x,y,z)^2\emptyset=0 \tag{2.11}$$

标量电场可以写作

$$E(x,y,z,t)=\emptyset(x,y,z)e^{-i\omega t} \tag{2.12}$$

在式2.11中，$k(x,y,z)=k_0 n(x,y,z)$是空间依赖波数，$k_0=2\pi/\lambda$是自由空间的波数，$\lambda$是波长，$n(x,y,z)$是折射率。

假定光束沿z轴方向传播。由于光场$\emptyset$沿传播方向的相位远快于其他方向，因

而光场$\emptyset$可以简化为

$$\emptyset(x,y,z) = u(x,y,z)e^{i\bar{k}z} \tag{2.13}$$

其中，$u(x,y,z)$表示光场$\emptyset$与相位无关或变化缓慢的部分。$e^{i\bar{k}z}$则表示光场$\emptyset$由相位引起快速变化的部分。$\bar{k}$是常数，代表参考波数。将式2.13带入到式2.11中，即可得到

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + 2i\bar{k}\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + (k^2 - \bar{k}^2)u = 0 \tag{2.14}$$

接下来，我们对式2.14进行抛物线近似或者近轴近似，即认为u相对于z的变化足够慢，因而式2.14可以变化为

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{i}{2\bar{k}}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + (k^2 - \bar{k}^2)u\right] \tag{2.15}$$

式2.15即为基本的三维BPM方程。利用该方程，在给定传播光束的初始分布$u(x,y,z=0)$和光波导折射率分布$n(x,y,z)$的前提下，即可算出任意$z > 0$位置的光场分布。

在实际使用RSOFT BEAMPROP软件计算激光器光场分布的过程中，我们可以对激光器结构每一层均添加一个监视器，从而获得激光器结构每一层的光限制因子。其中，光限制因子的定义为光场被限制在该层中的能量与光场的总能量之比。

### 2.2.2　GaN 基材料的折射率

在本论文的研究工作中，我们主要关注蓝光(450 nm)和绿光(520 nm)激光器的光场特性。结合文献已有的折射率数值[4-10]，我们最终使用的GaN基材料折射率计算公式如下：

当波长为450 nm时，$Al_xGa_{1-x}N(x<0.21)$、$In_xGa_{1-x}N(x<0.17)$的折射率分别为

$$n(Al_xGa_{1-x}N) = 2.47 - 0.450x \tag{2.16}$$

$$n(In_xGa_{1-x}N) = 2.47 + 1.267x \tag{2.17}$$

当波长为520 nm时，$Al_xGa_{1-x}N(x<0.21)$、$In_xGa_{1-x}N(x<0.30)$的折射率分别为

$$n(Al_xGa_{1-x}N) = 2.41 - 0.350x \tag{2.18}$$

$$n(In_xGa_{1-x}N) = 2.41 + 0.933x \tag{2.19}$$

金属电极如Pd、Pt、Au在波长为450 nm时的折射率分别为1.4、1.8、1.6，在波长为520 nm时的折射率则分别为1.55、2.05、0.55。

### 2.2.3　光学损耗的计算

半导体激光器的光学损耗可以分为腔面损耗和内部光学损耗，其中腔面损耗$\alpha_m$由腔长L，前、后腔面反射率$R_1$、$R_2$决定，其计算公式为

$$\alpha_m = \frac{1}{2L}\ln\left(\frac{1}{R_1R_2}\right) \tag{2.20}$$

内部光学损耗则有两方面的来源：一是激光器外延片本身的光学损耗，包括杂质吸收散射、模式泄露等引起的损耗；二是外延片加工成激光器器件引入的光学损耗，包括刻蚀脊型引入的损耗、金属电极引起的吸收损耗、激光器工作时有源区自由载流子的吸收损耗等。在本论文中计算内部光学损耗时，我们通常仅考虑外延层和金属电极的吸收损耗。如2.2.1节所示，使用RSOFT BEAMPROP软件求解出激光器结构每一层的光限制因子$\Gamma_i$后，同每一层的光吸收系数$\alpha_i$相乘即可得到每一层的光学损耗。将每一层的光学损耗相加，即可得到激光器总的内部光学损耗，如式2.21所示

$$\alpha(\text{Total}) = \sum_i \Gamma_i\,\alpha_i \tag{2.21}$$

表2.2列出了模拟过程中常用材料的光吸收系数。其中，n型层的光吸收系数计算公式为

$$\alpha_n = \frac{\text{掺杂浓度}(\text{cm}^{-3})}{1\times10^{18}(\text{cm}^{-3})}\times 3\ \ (\text{cm}^{-1}) \tag{2.22}$$

p型层的光吸收系数计算公式为

$$\alpha_p = \frac{\text{掺杂浓度}(\text{cm}^{-3})}{1\times10^{19}(\text{cm}^{-3})}\times 50\ \ (\text{cm}^{-1}) \tag{2.23}$$

表2.2　模拟过程中常用材料的光吸收系数

| 材料 | 掺杂($cm^{-3}$) | 吸收系数(450 nm) ($cm^{-1}$) | 吸收系数(520 nm) ($cm^{-1}$) |
|---|---|---|---|
| n型层 | - | $\frac{\text{掺杂浓度}}{1\times10^{18}}\times 3$ | $\frac{\text{掺杂浓度}}{1\times10^{18}}\times 3$ |
| p型层 | - | $\frac{\text{掺杂浓度}}{1\times10^{19}}\times 50$ | $\frac{\text{掺杂浓度}}{1\times10^{19}}\times 50$ |
| 非故意掺杂层 | $5\times10^{16}$ | 1 | 1 |
| Pd | - | $9.1\times10^{5}$ | $8.9\times10^{5}$ |

| | | | |
|---|---|---|---|
| Pt | - | $8.5\times10^5$ | $8.5\times10^5$ |
| Au | - | $5.6\times10^5$ | $5.3\times10^5$ |

## 2.3　激光器电学模拟简介

### 2.3.1　电学模拟方程

#### 泊松方程

泊松方程描述了电场与电荷的关系，其表达式如下

$$\nabla\frac{\psi}{\varepsilon}=\rho(x,y,z) \tag{2.24}$$

其中，∇是哈密顿算子，其表达式为

$$\nabla=\frac{\partial}{\partial x}\vec{i}+\frac{\partial}{\partial y}\vec{j}+\frac{\partial}{\partial z}\vec{k} \tag{2.25}$$

ψ是静电势，ε是材料介电常数，ρ为空间电荷密度。电场同电势的关系为

$$\vec{E}=-\nabla\psi \tag{2.26}$$

#### 连续性方程

$$\frac{\partial n}{\partial t}=G_n-U_n+\frac{1}{q}\nabla J_n \tag{2.27}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t}=G_p-U_p+\frac{1}{q}\nabla J_p \tag{2.28}$$

其中，$G_n$、$G_p$是电子、空穴的产生率，$U_n$、$U_p$是电子、空穴的复合率。

#### 电流密度方程

器件中电流密度的计算公式为

$$J_n=n\mu_n\nabla E_{fn} \tag{2.29}$$

$$J_p=p\mu_p\nabla E_{fp} \tag{2.30}$$

其中，$J_n$、$J_p$分别是电子电流密度、空穴电流密度，$\mu_n$、$\mu_p$分别是电子迁移率、空穴迁移率，$E_{fn}$、$E_{fp}$分别是电子、空穴的准费米能级。

当我们使用玻尔兹曼近似时，电子、空穴浓度可以写为如下形式

$$n=N_C\exp\left(\frac{E_{fn}-E_C}{kT}\right) \tag{2.31}$$

$$p = N_V \exp\left(\frac{E_V - E_{fp}}{kT}\right) \tag{2.32}$$

则$E_{fn}$、$E_{fp}$可以分别写作

$$E_{fn} = kT \cdot \ln\left(\frac{n}{N_C}\right) + E_C \tag{2.33}$$

$$E_{fp} = -kT \cdot \ln\left(\frac{p}{N_V}\right) + E_V \tag{2.34}$$

在本论文中，我们使用Crosslight公司制作的商用化APSYS、LASTIP软件来对激光器的电学性能进行求解。

### 2.3.2　电学仿真参数

#### 极化电荷

本论文中提及的GaN基材料均为六方纤锌矿结构，且表面为Ga面。GaN基材料异质界面(包括GaN基材料与空气的界面)会出现大量极化电荷，包括自发极化电荷和压电极化电荷。这里我们采用Fiorentini等人[11]提出的方法来计算极化电荷的大小

$Al_xGa_{1-x}N$、$In_xGa_{1-x}N$、$Al_xIn_{1-x}N$自发极化的大小为：

$$P_{sp}(Al_xGa_{1-x}N) = -0.090x - 0.034(1-x) + 0.019x(1-x) \tag{2.35}$$

$$P_{sp}(In_xGa_{1-x}N) = -0.042x - 0.034(1-x) + 0.038x(1-x) \tag{2.36}$$

$$P_{sp}(Al_xIn_{1-x}N) = -0.090x - 0.042(1-x) + 0.071x(1-x) \tag{2.37}$$

$Al_xGa_{1-x}N$、$In_xGa_{1-x}N$、$Al_xIn_{1-x}N$压电极化的大小为：

$$P_{pz}(Al_xGa_{1-x}N) = xP_{pz}(AlN) + (1-x)P_{pz}(GaN) \tag{2.38}$$

$$P_{pz}(In_xGa_{1-x}N) = xP_{pz}(InN) + (1-x)P_{pz}(GaN) \tag{2.39}$$

$$P_{pz}(Al_xIn_{1-x}N) = xP_{pz}(AlN) + (1-x)P_{pz}(InN) \tag{2.40}$$

AlN、GaN、InN压电极化的大小为：

$$\begin{aligned} P_{pz}(AlN) &= -1.808\varepsilon - 7.888\varepsilon^2 \qquad \varepsilon > 0 \\ &= -1.808\varepsilon + 5.624\varepsilon^2 \qquad \varepsilon < 0 \end{aligned} \tag{2.41}$$

$$P_{pz}(GaN) = -0.918\varepsilon + 9.541\varepsilon^2 \tag{2.42}$$

$$P_{pz}(InN) = -1.373\varepsilon + 7.559\varepsilon^2 \tag{2.43}$$

其中，$\varepsilon = (a_{sub} - a)/a$，$a_{sub}$、a分别是衬底、外延层在垂直于外延生长方向

的晶格常数。外延层材料的晶格常数可以通过Vagard's Law进行描述，如下[11, 12]

$$a(Al_xGa_{1-x}N) = 0.31986 - 0.00981x \tag{2.44}$$

$$a(In_xGa_{1-x}N) = 0.31986 + 0.03862x \tag{2.45}$$

$$a(Al_xIn_{1-x}N) = 0.35848 - 0.04753x \tag{2.46}$$

考虑到异质界面位置缺陷、自由载流子等对极化电荷的屏蔽作用，实际模拟过程中我们采用的极化电荷量为理论极化电荷量的50%。

### 禁带宽度

在室温(300K)时，GaN、InN、AlN的禁带宽度[13]分别为3.43 eV、0.64 eV、6.2 eV。室温下$Al_xGa_{1-x}N$、$In_xGa_{1-x}N$、$Al_xIn_{1-x}N$的禁带宽度则通过如下公式进行计算

$$\begin{aligned} E_g(Al_xGa_{1-x}N) &= xE_g(AlN) + (1-x)E_g(GaN) - b\cdot x(1-x) \\ &= 6.2x + 3.43(1-x) - x(1-x) \end{aligned} \tag{2.47}$$

$$\begin{aligned} E_g(In_xGa_{1-x}N) &= xE_g(InN) + (1-x)E_g(GaN) - b\cdot x(1-x) \\ &= 0.64x + 3.43(1-x) - 1.43x(1-x) \end{aligned} \tag{2.48}$$

$$\begin{aligned} E_g(Al_xIn_{1-x}N) &= xE_g(AlN) + (1-x)E_g(InN) - b\cdot x(1-x) \\ &= 6.2x + 0.64(1-x) - 2.5x(1-x) \end{aligned} \tag{2.49}$$

其中，b又被称为弯曲因子，$Al_xGa_{1-x}N$、$In_xGa_{1-x}N$、$Al_xIn_{1-x}N$的弯曲因子[14]分别取1、1.43、2.5。

### 杂质激活能

n型GaN采用Si掺杂，其中Si在室温下的激活能设置为20 meV[15]。n型InGaN、n型AlGaN也采用Si掺杂。假定在In、Al组分小于0.2的前提下，Si在室温下的激活能不随In组分、Al组分而变化。

p型GaN采用Mg掺杂，其中Mg在室温下的激活能设置为160 meV[16-23]。p型AlGaN中Mg的激活能会随着Al组分的增加而逐渐上升，其中Al组分每增加1%，Mg的激活能上升3 meV[24, 25]。p型InGaN中Mg的激活能会随着In组分的增加而逐渐下降，其中In组分每增加1%，Mg的激活能下降4 meV[26, 27]。

# 参考文献


[1] 陆大成，段树坤，金属有机物气相外延基础及应用. 北京：科学出版社, 2009.

[2] R. P. Parikh and R. A. Adomaitis, "An overview of gallium nitride growth chemistry and its effect on reactor design: Application to a planetary radial-flow CVD system," Journal of Crystal Growth, 286, 259-278, 2006.

[3] 王玉田, "半导体晶体的高分辨 X 射线衍射," in 半导体监测与分析, ed 北京：科学出版社, 2007.

[4] M. T. Hardy, C. O. Holder, D. F. Feezell, et al., "Indium-tin-oxide clad blue and true green semipolar InGaN/GaN laser diodes," Applied Physics Letters, 103, 081103, 2013.

[5] T. Lermer, M. Schillgalies, A. Breidenassel, et al., "Waveguide design of green InGaN laser diodes," physica status solidi (a), 207, 1328-1331, 2010.

[6] C.-Y. Huang, Y.-D. Lin, A. Tyagi, et al., "Optical waveguide simulations for the optimization of InGaN-based green laser diodes," Journal of Applied Physics, 107, 023101, 2010.

[7] L. Zhang, D. Jiang, J. Zhu, et al., "Confinement factor and absorption loss of AlInGaN based laser diodes emitting from ultraviolet to green," Journal of Applied Physics, 105, 023104, 2009.

[8] U. Tisch, B. Meyler, O. Katz, et al., "Dependence of the refractive index of $Al_xGa_{1-x}N$ on temperature and composition at elevated temperatures," Journal of Applied Physics, 89, 2676-2685, 2001.

[9] G. M. Laws, E. C. Larkins, I. Harrison, et al., "Improved refractive index formulas for the $Al_xGa_{1-x}N$ and $In_yGa_{1-y}N$ alloys," Journal of Applied Physics, 89, 1108-1115, 2001.

[10] M. J. Bergmann and H. C. Casey, "Optical-field calculations for lossy multiple-layer $Al_xGa_{1-x}N/In_xGa_{1-x}N$ laser diodes," Journal of Applied Physics, 84, 1196-1203, 1998.

[11] V. Fiorentini, F. Bernardini, and O. Ambacher, "Evidence for nonlinear macroscopic polarization in III-V nitride alloy heterostructures," Applied Physics Letters, 80, 1204-1206, 2002.

[12] F. Bernardini and V. Fiorentini, "Nonlinear macroscopic polarization in III-V nitride alloys," Physical Review B, 64, 085207, 2001.

[13] J. Wu, "When group-III nitrides go infrared: New properties and perspectives," Journal of Applied Physics, 106, 011101, 2009.

[14] I. Vurgaftman and J. R. Meyer, "Band parameters for nitrogen-containing semiconductors," Journal of Applied Physics, 94, 3675-3696, 2003.

[15] W. Götz, N. M. Johnson, C. Chen, et al., "Activation energies of Si donors in GaN," Applied Physics Letters, 68, 3144-3146, 1996.

[16] W.-C. Ke, S.-J. Lee, S.-L. Chen, et al., "Effects of growth conditions on the acceptor activation of Mg-doped p-GaN," Materials Chemistry and Physics, 133, 1029-1033, 2012.

[17] Y. Nakano, O. Fujishima, and T. Kachi, "High-temperature annealing behavior of p-type doping characteristics in Mg-doped GaN," Journal of The Electrochemical Society, 151, G574-G577, 2004.

[18] Y. Nakano, O. Fujishima, and T. Kachi, "Effect of p-type activation ambient on acceptor levels in Mg-doped GaN," Journal of Applied Physics, 96, 415-419, 2004.

[19] Y. Nakano and T. Jimbo, "Electrical characterization of acceptor levels in Mg-doped GaN," Journal of Applied Physics, 92, 5590-5592, 2002.

[20] K. Cheng Huang, C. Shoou Jinn, S. Yan Kuin, et al., "Low Temperature Activation of Mg-Doped GaN in $O_2$ Ambient," Japanese Journal of Applied Physics, 41, L112, 2002.

[21] D. J. Kim, D. Y. Ryu, N. A. Bojarczuk, et al., "Thermal activation energies of Mg in GaN:Mg measured by the Hall effect and admittance spectroscopy," Journal of Applied Physics, 88, 2564-2569, 2000.

[22] W. Götz, N. M. Johnson, J. Walker, et al., "Activation of acceptors in Mg-doped GaN grown by metalorganic chemical vapor deposition," Applied Physics Letters, 68, 667-669, 1996.

[23] T. Tanaka, A. Watanabe, H. Amano, et al., "p-type conduction in Mg-doped GaN and $Al_{0.08}Ga_{0.92}N$ grown by metalorganic vapor phase epitaxy," Applied Physics Letters, 65, 593-594, 1994.

[24] J. Piprek and S. Nakamura, "Physics of high-power InGaN/GaN lasers," IEE Proceedings of Optoelectronics, 149, 145-151, 2002.

[25] M. Katsuragawa, S. Sota, M. Komori, et al., "Thermal ionization energy of Si and Mg in AlGaN," Journal of Crystal Growth, 189-190, 528-531, 1998.

[26] B. N. Pantha, A. Sedhain, J. Li, et al., "Electrical and optical properties of p-type InGaN," Applied Physics Letters, 95, 261904, 2009.

[27] K. Kazuhide, M. Toshiki, and K. Naoki, "Activation Energy and Electrical Activity of Mg in Mg-Doped $In_xGa_{1-x}N$ ( $x < 0.2$)," Japanese Journal of Applied Physics, 39, L337, 2000.

# 第三章　GaN 基激光器的光学损耗研究

光学损耗是GaN基激光器的一个重要参数，对GaN基激光器的阈值电流、斜率效率有直接的影响。GaN基激光器的光学损耗可以分为内部光学损耗和腔面损耗。腔面损耗可以通过改变腔面反射率和腔长来进行精确控制。内部光学损耗则同GaN基激光器的结构设计、掺杂、材料质量等因素相关，精确测定激光器内部光学损耗对于优化激光器结构设计、提升激光器性能具有重要的意义。

在本章中，我们搭建了一套测试GaN基激光器外延片光学损耗的测试系统，通过理论分析发现测试系统的精度为±1.0 $cm^{-1}$。基于这套测试系统，我们详细研究了GaN基激光器外延片中Mg、H对光学损耗的影响，并提出了降低激光器外延片光学损耗的方法。随后我们利用Hakki-Paoli法，详细研究了GaN基激光器器件的光学损耗。两种测试方法得到的光学损耗值基本吻合。

## 3.1　GaN 基激光器外延片的光学损耗研究

### 3.1.1　GaN 基激光器外延片光学损耗测试系统的搭建

为了合理表征GaN基激光器外延片的内部光学损耗，我们搭建了一套内部光学损耗测试系统，如图3.1所示。实验中，405 nm半导体激光聚焦到在GaN自支撑衬底上生长的蓝光激光器外延片的表面，在激光器有源区激发出荧光。荧光光斑的尺寸约为10 μm。一部分荧光被限制在激光器外延片的波导层中，沿图3.1中的y方向在波导层内传播，并受到外延片内部损耗α的影响而发生衰减，直到从外延片解理面发射出来。荧光在波导层内传播的距离为R。从解理面发射出的荧光会被一个靠近外延片的透镜所收集，最终进入到光谱仪中。光谱仪的前端放置了一个线性偏振片来选择进入光谱仪的收集光模式，通过旋转偏振片，TE模式、TM模式的荧光能够被光谱仪分别收集。鉴于GaN基激光器激射时的模式主要为TE模式，在实际测试过程中我们仅收集TE模式的光。沿y方向移动微动平台，可以改变荧光在波导层内传播的距离R，从而收集到一系列依赖于传播距离R的荧光光谱。值得一提的是，使用405 nm激光照射在蓝宝石衬底上生长的激光器外延片时，从解理面很难收集到理想的荧光光谱。这主要有两方面的原因：一是蓝宝石衬底与GaN没有共同的解理面，因而很难得到光滑、平坦的荧光出光面；二是蓝宝石衬底同GaN基材料具有较大的折射率差，因而从GaN/蓝宝石衬底界面反射回来的

荧光会干扰在波导中向前传播的荧光，影响荧光强度的判断。

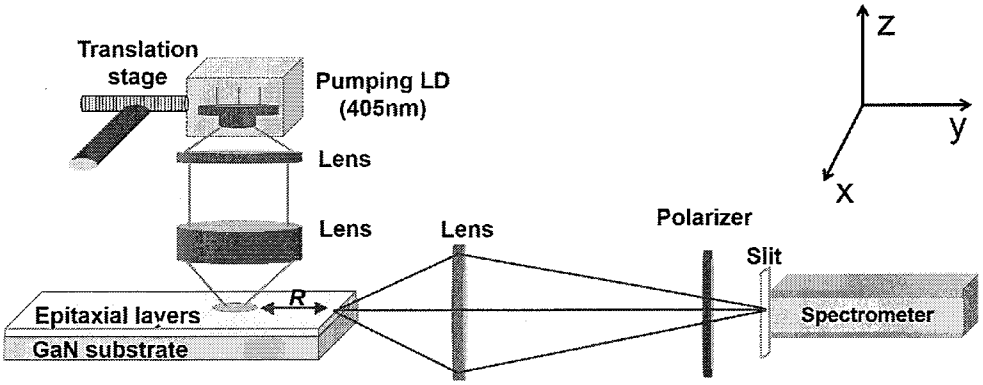



图3.1　GaN基激光器外延片内部光学损耗测试系统示意图

除了被限制在波导层内沿y方向传播的荧光外，另有一部分荧光被限制在外延片-空气界面之间，如图3.2.(a)所示。在这种情况下，收集到的荧光光谱存在两个发光峰，如图3.2.(b)所示，其中峰值波长在448 nm附近的发光峰即为被限制在外延片-空气界面之间的荧光。为了消除这一部分限制在外延片-空气界面之间的荧光，可以在外延片底部涂满湿黑墨水，如图3.2.(c)所示，当荧光传播到外延片底部-湿黑墨水界面时，这部分荧光会被湿黑墨水吸收，如图3.2.(d)所示，此时峰值波长在448 nm位置的发光峰已经被消除。

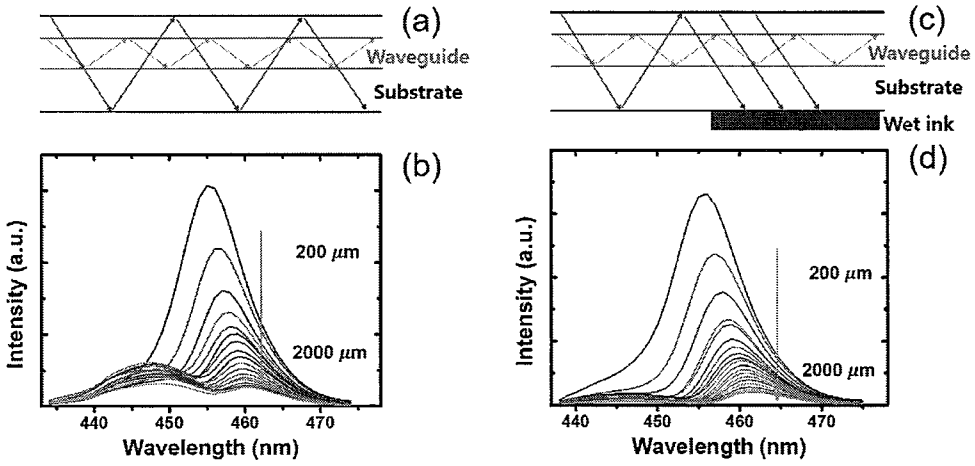



图3.2　(a)外延片底部没有涂抹湿黑墨水时的光传播示意图；(b)外延片底部没有涂抹湿黑墨水时收集到的荧光光谱；(c)外延片底部涂抹湿黑墨水时的光传播示意图；(d)外延片底部涂抹湿黑墨水时收集到的荧光光谱。

图3.3是图3.1的xy平面图。这里将有源区产生的荧光假定为一个点光源，即忽略荧光光斑的尺寸。由于z方向波导结构强烈的限制作用，被限制在波导层中的荧光会在xy平面360度范围内自由传播，xy平面内只有特定角度的荧光能够最

终被透镜所收集。θ是被收集荧光的圆心角，$\theta_1$、$\theta_2$分别是被透镜收集的荧光在解理面-空气界面的最大入射角、最大折射角，l是解理面上出射荧光的宽度，R是荧光光斑到外延片解理面的距离(即荧光在波导层中传播的距离)，S是外延片解理面到透镜收集表面的距离，L是透镜的收集宽度(实验选用的收集透镜直径为25.4 mm)。外延片、空气的折射率分别为$n_1$、$n_2$。

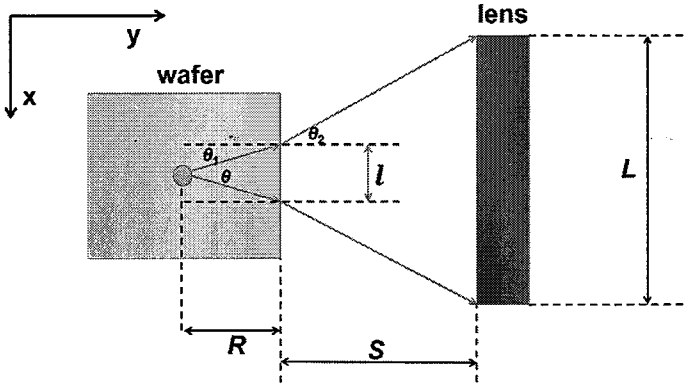



图3.3　外延片光学损耗测试系统的xy平面图

随后我们尝试找出θ随R的变化关系。根据光的折射率定律，可以得到方程3.1，即

$$n_1\sin\theta_1 = n_2\sin\theta_2 \tag{3.1}$$

外延片、空气的折射率显然有下列关系

$$n_1 > n_2 \tag{3.2}$$

于是可以得到

$$\sin\theta_1 < \sin\theta_2 \tag{3.3}$$

$$\tan\theta_1 < \tan\theta_2 \tag{3.4}$$

将方程3.4化为具体形式

$$\frac{l}{2R} < \frac{L-l}{2S} \tag{3.5}$$

在实际测试过程中，收集透镜到解理面的距离S约为数厘米，而荧光波导距离R约为数毫米，因而有如下关系

$$R \ll S \tag{3.6}$$

结合关系式3.5、3.6可以得到

$$l \ll L-l \tag{3.7}$$

$$\tan\theta_2 = \frac{L-l}{2S} \approx \frac{L}{2S} = \text{constant} \tag{3.8}$$

$$\theta = \text{constant} \tag{3.9}$$

这表明在我们实际的测试过程中，被透镜收集的荧光角度θ基本不会随着波导传播距离R而改变，因而我们可以得到如下计算光学损耗的公式，即

$$\alpha(\lambda) = \frac{\ln[I_1(\lambda)] - \ln[I_2(\lambda)]}{R_2 - R_1} \tag{3.10}$$

### 3.1.2　GaN 基激光器外延片光学损耗测试系统的误差分析

式3.10可以变形为另一种形式，即

$$\alpha = \frac{C - \ln[I]}{R} \tag{3.11}$$

对式3.11取微分，可以得到如下关系式

$$\Delta\alpha = \frac{\delta\alpha}{\delta I}\Delta I + \frac{\delta\alpha}{\delta R}\Delta R \tag{3.12}$$

其中，

$$\frac{\delta\alpha}{\delta I} = -\frac{1}{R}\frac{1}{I} \tag{3.13}$$

$$\frac{\delta\alpha}{\delta R} = -\frac{C - \ln[I]}{R^2} \tag{3.14}$$

于是式3.12可以进一步转化为

$$\Delta\alpha = -\frac{1}{R}\frac{\Delta I}{I} - \alpha\frac{\Delta R}{R} \tag{3.15}$$

图3.4是测试过程中被收集荧光随光波导距离R变化的光路示意图，$R_1$、$R_2$分别对应光波导距离的最小值、最大值。随着光波导距离R的增加，被收集荧光的圆心角θ不断减小。

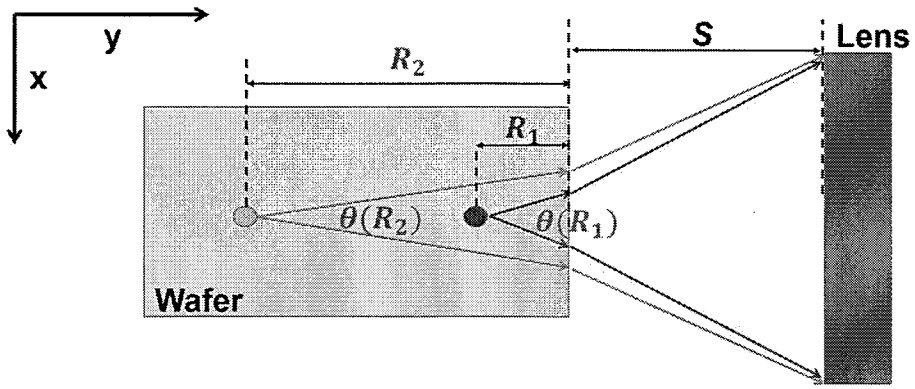



图3.4　测试过程中被收集荧光随光波导距离R变化的光路示意图

鉴于有源区产生的荧光在xy平面内360度均匀扩散，光强最大相对误差值可以表示为如下形式，即

$$\max\left(\frac{\Delta I}{I}\right) = \frac{\theta(R_1) - \theta(R_2)}{\theta(R_2)} \tag{3.16}$$

光波导距离的最大相对误差值则可以表示

$$\max\left(\frac{\Delta R}{R}\right)=\frac{1}{\cos\left(\frac{\theta(R_1)}{2}\right)}-1 \tag{3.17}$$

因而光学损耗测试的最大误差值可以表示为

$$\max(\Delta\alpha)=\frac{1}{R_1}\frac{\theta(R_1)-\theta(R_2)}{\theta(R_2)}+\alpha\left(\frac{1}{\cos\left(\frac{\theta(R_1)}{2}\right)}-1\right) \tag{3.18}$$

接下来我们尝试根据式3.18求解光学损耗测试的最大误差值，计算的初始参数$R_1$、$R_2$、S、α分别设为500 μm、2000 μm、25 mm、8 $cm^{-1}$. 通过改变$R_1$、S、α，找出损耗测试的最大误差值。

如图3.5.(a)所示，随着$R_1$的增加，光学损耗测试的最大误差值、最大相对误差值不断减小。实际中综合考虑采样点的数量以及误差值的大小，$R_1$通常取500 μm。

如图3.5.(b)所示，随着透镜与外延片解理面距离S的不断增加，光学损耗测试的最大误差值、最大相对误差值不断减小。理论上为了减小测试误差，S应当尽可能大。但在实际测量过程中，由于激光器z方向垂直波导结构对光场的强烈限制作用，从解理面出射的荧光在z方向会有较大的衍射角。增加S会降低透镜对出射荧光的收集效率，导致探测到的荧光强度减弱，实际测试中S约为25 mm。

如图3.5.(c)所示，随着真实光学损耗值α的不断增加，光学损耗测试的最大误差值增加，同时最大相对误差值不断减小。其中，激光器外延片的真实损耗值小于20 $cm^{-1}$。

综合以上图3.5.(a)-(c)，我们不难看出，在当前测试条件下，外延片光学损耗测试系统的最大测试误差值始终小于1.0 $cm^{-1}$。

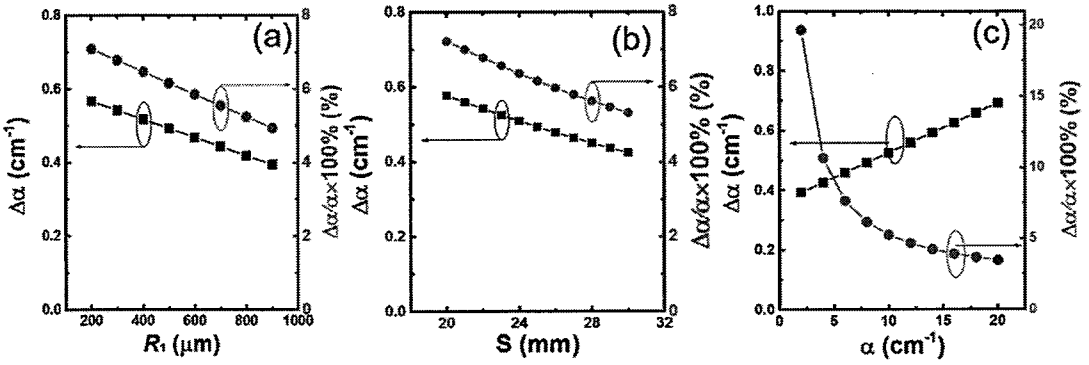



图3.5　外延片光学损耗测试系统的最大误差值、最大相对误差值随$R_1$、S、α的变化关系

### 3.1.3　典型的 GaN 基激光器外延片的光学损耗测试结果

基于搭建的光学损耗测试系统，我们对蓝光激光器外延片进行了光学损耗测试，图3.6是典型的外延片光学损耗测试结果。如图3.6.(a)所示，随着光波导距离R的增加，收集到的荧光光谱的强度在不断下降，同时光谱的峰位在不断红移。对每一个波长所对应的强度值，我们可以对其做一个ln(I)-R的线性拟合，如图3.6.(b)所示，拟合对任意波长均具有良好的线性，这也证实了公式3.10的正确性。最终我们可以得到一个光学损耗光谱，如图3.6.(c)所示，光学损耗随着波长的增加而不断减小，这表明有源区对荧光的再吸收作用在不断减小。当波长大于472 nm时，有源区对荧光的再吸收作用完全消失，因而光学损耗收敛到一常数7±0.3 $cm^{-1}$，即激光器外延片的内部光学损耗数值。

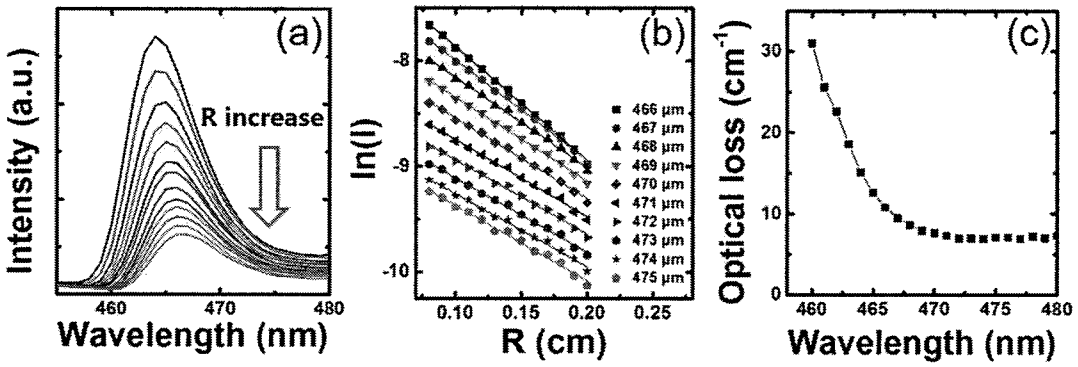



图3.6　(a)典型的依赖于波导距离R的荧光光谱；(b)典型的ln(I)-R线性拟合结果示意图；(c)典型的GaN基蓝光激光器外延片的光学损耗光谱。

### 3.1.4　GaN 基激光器光学损耗的来源

为了研究GaN基激光器外延片中光学损耗的来源，我们在相同条件下生长了三个激光器外延片样品，分别是Sample $A_1$、Sample $B_1$及Sample $C_1$。生长完成后，三个样品在$N_2$气氛下进行了退火。退火完成后，三个样品均呈现明显的PN结IV特性。我们将Sample $B_1$在空气气氛中进行了一次额外的退火，然后对Sample $A_1$、Sample $B_1$进行了光学损耗测试，测试结果如图3.7.(a)所示。从图中可以看出，Sample $A_1$、Sample $B_1$的光学损耗数值在波长大于450 nm的位置分别收敛于3.6 $cm^{-1}$、8.2 $cm^{-1}$，即Sample $B_1$的光学损耗是Sample $A_1$的2.3倍。

为了找出Sample $A_1$、Sample $B_1$光学损耗差异的原因，我们对Sample $A_1$、Sample $B_1$进行了SIMS测试，这里仅展示了样品p型AlGaN上限制层的测试结果，如图3.7.(b)、3.7.(c)所示。Sample $A_1$的p型AlGaN上限制层中的Mg、H浓度均接近$1\times10^{19}$ $cm^{-3}$。Sample $B_1$的p型AlGaN限制层中的Mg浓度约为$1\times10^{19}$ $cm^{-3}$，而H浓度则约为$3\times10^{17}$ $cm^{-3}$。Sample $B_1$上限制层的H浓度要显著低于Sample $A_1$上限制层的H浓度。由于H能够钝化Mg受主，因而我们可以做出如下推测：(1) Sample $A_1$的

上限制层中仅有部分Mg受主完成了激活，另一部分Mg受主仍处于被H钝化的状态；(2) Sample $B_1$上限制层中H浓度远小于Mg浓度，可以认为Mg受主已经完全激活；(3)鉴于Sample $B_1$的光学损耗相比Sample $A_1$的光学损耗增加了130%，这表明激活的Mg受主是GaN基激光器光学损耗的主要来源。

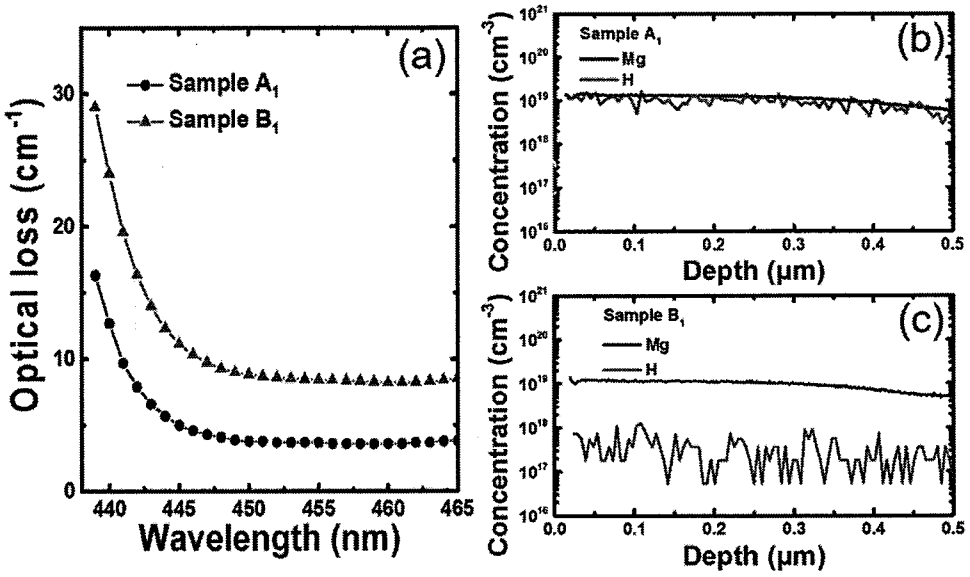



图3.7　(a) Sample $A_1$、Sample $B_1$的光学损耗光谱；(b) Sample $A_1$的p型AlGaN上限制层的SIMS测试结果；(c) Sample $B_1$的p型AlGaN上限制层的SIMS测试结果。

Miyachi等人[1, 2]发现，在温度高于300摄氏度时，向掺杂Mg的GaN中注入电流，可以激活其中的Mg受主。Takeya等人[3]发明了射频输入的新方法，可以在常温下激活Mg受主。Castiglia等人[4]发现，GaN基发光二极管在室温下工作700小时后，p型层中的残余H杂质浓度会下降。为了验证上述的三个推测，我们尝试向Sample $C_1$中注入电流以激活上限制层的Mg受主，其中电流密度约为30 A/cm$^2$，注入时间为30分钟，温度为300 K。

图3.8为Sample $C_1$在电流注入前、后的光学损耗光谱。电流注入前，Sample $C_1$的光学损耗为4.0 cm$^{-1}$，同Sample $A_1$的光学损耗很接近。这是因为Sample $C_1$的生长和退火条件同Sample $A_1$的完全相同，因而两者上限制层Mg受主的激活状态也相同。电流注入后，Sample $C_1$的光学损耗上升到7.5 cm$^{-1}$，这表明：电流注入后，上限制层更多的Mg受主得到了激活，因而Sample $C_1$的光学损耗增加。

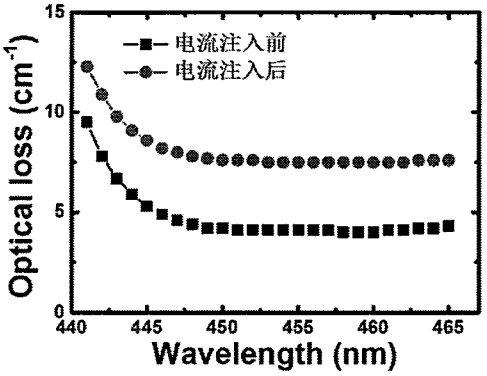



图3.8　Sample $C_1$在电流注入前、后的光学损耗光谱

综合以上分析，我们可以得到结论，激光器结构p型层中激活的Mg受主是GaN基激光器光学损耗的主要来源，但未激活的Mg杂质光吸收系数不大。

### 3.1.5　降低 GaN 基激光器外延片光学损耗的方法

前面我们已经得出结论，即p型层激活的Mg受主引起的吸收、散射是激光器外延片光学损耗的主要来源。要降低激光器外延片的光学损耗，最直接的方法便是降低p型层的光学损耗，这可以通过两个途径来实现：(1)降低p型层的光吸收系数，这可以通过降低Mg掺杂浓度来实现。但降低p型层的Mg掺杂浓度会增加激光器整体的串联电阻，使激光器发热量增大、电光转换效率降低，实际操作中Mg掺杂浓度可降低空间有限；(2)降低p型层与光场的交叠，这可以通过在有源区与p型层之间插入非故意掺杂层来实现。在合理设计激光器结构的前提下，途径(2)并不会明显增大激光器整体的串联电阻。

这里我们尝试采用途径(2)来降低激光器外延片的光学损耗。我们使用MOCVD生长了三个GaN基激光器外延片样品，即Sample $A_2$、Sample $B_2$和Sample $C_2$，其p型层同有源区之间的距离分别为8 nm、88 nm、238 nm。生长完成后，三个样品在相同的条件下退火，从而激活p型层中的Mg受主。

图3.9为三个样品的光学损耗光谱，为了方便比较，我们将三个样品的光谱在454 nm处对齐。当波长在454-458 nm之间时，三个样品的光谱几乎完全重合。当波长超过458 nm后，三个样品的光谱开始出现差异：Sample $B_2$、Sample $C_2$的光学损耗随着波长的增加而逐渐减小，并在波长大于468 nm后分别收敛到7.8±0.2 $cm^{-1}$、4.8±0.3 $cm^{-1}$。；Sample $A_2$的光学损耗首先随着波长的增加而逐渐减小，并在464 nm位置达到最小值15.8 $cm^{-1}$，随后会随着波长的增加而逐渐增大。我们取光谱大于468 nm部分的平均值作为样品的光学损耗，则Sample $A_2$、Sample $B_2$、Sample $C_2$的光学损耗数值分别为19.5 $cm^{-1}$、7.8 $cm^{-1}$、4.8 $cm^{-1}$。样品的光学损耗

随着插入非故意掺杂层厚度的增加呈现逐渐减小的趋势，这也证明了利用途径(2)能够有效降低激光器的光学损耗。

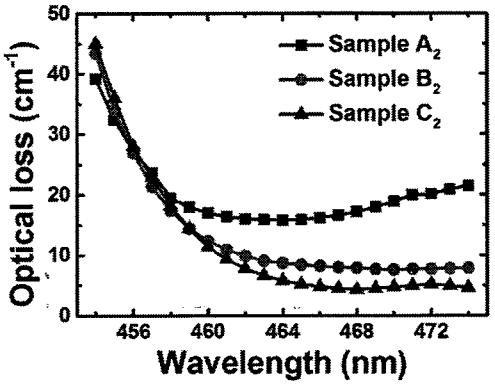



图3.9　Sample $A_2$、Sample $B_2$、Sample $C_2$的光学损耗光谱

我们随后对光学损耗同非故意掺杂层厚度的关系进行了模拟计算，模拟计算结果同实验结果吻合得很好，如图3.10所示。随着非故意掺杂层厚度的增加，激光器外延片的光学损耗逐渐减小，并最终收敛到约2.6 $cm^{-1}$。

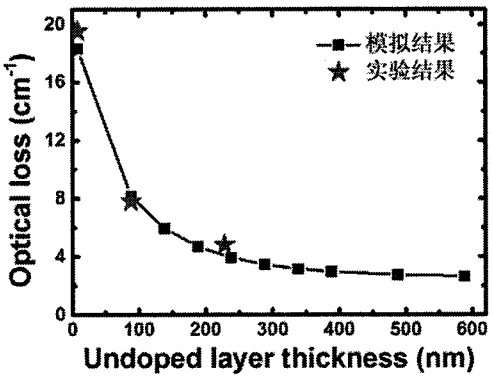



图3.10　激光器外延片光学损耗同非故意掺杂插入层厚度的关系

## 3.2　GaN 基激光器器件的光学损耗研究

### 3.2.1　激光器放大的自发辐射光谱简介

激光器腔面的光输出功率随着注入电流的变化大致可以分为三个区域，即自发辐射区、放大的自发辐射区和激射区，如图3.11所示。当注入电流较小时，有源区内部没有达到粒子数反转，材料增益为零，此时腔面的出射光为纯自发辐射光；当注入电流继续增大但仍小于阈值电流时，有源区内部实现了粒子数反转，开始出现材料增益，此时有源区的净模式增益仍小于器件的腔面损耗，激光器尚

未激射，腔面的出射光为放大的自发辐射光；当电流继续增加超过阈值电流后，有源区的净模式增益大于等于器件腔面损耗，腔面的出射光为激光。

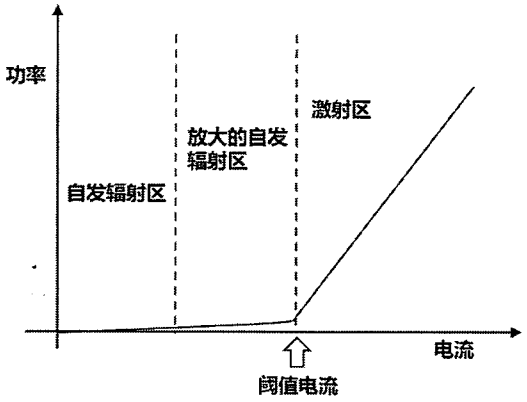



图3.11　激光器腔面的光输出功率随着注入电流变化的示意图

放大的自发辐射光谱是自发辐射经有源区的净模式增益有效放大，并被激光器前、后腔面形成的法布里-珀罗腔调制后形成的。基于该特性，我们尝试推导放大的自发辐射光谱同激光器净模式增益g、腔长L、前后腔面反射率$R_1$和$R_2$、自发辐射光谱之间的关系。放大的自发辐射光谱的推导计算过程如图3.12所示[5-7]。在图3.12中，x=0与x=L的位置分别对应激光器的前、后腔面。激光器前腔面反射率通常小于后腔面反射率，这样可以促使光从前腔面出射。这里我们仅计算从前腔面(右侧，反射率为$R_1$)出射的光强度。

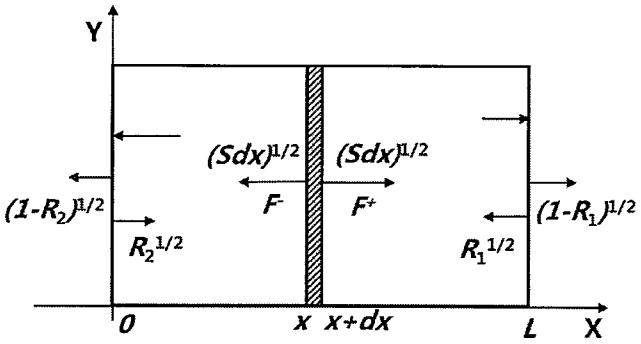



图3.12　放大的自发辐射光谱的推导计算示意图

我们首先选定腔长方向任一特定位置x处厚度为dx的薄层，并假定自发辐射耦合到波导向前传播的部分为Sdx。这一部分自发辐射可以直接透过前腔面出射，也可以经过若干周期前、后腔面的反射后才从前腔面出射。因而向前传播的部分在前腔面的振幅输出为

$$F^{+}=\sqrt{Sdx}\cdot\exp\left[-ink(L-x)+\frac{g}{2}(L-x)\right]\cdot\sqrt{1-R_1}\cdot\sum_{m=0}^{\infty}\left[\exp(-i\cdot 2nkL+gL)\cdot\sqrt{R_1R_2}\right]^{m}$$
$$=\sqrt{Sdx}\cdot\exp\left[-ink(L-x)+\frac{g}{2}(L-x)\right]\cdot\sqrt{1-R_1}\frac{1}{1-\exp(-i\cdot 2nkL+gL)\cdot\sqrt{R_1R_2}}$$
(3.19)

鉴于前、后方向的对称性，该薄层的自发辐射耦合到波导向后传播的部分也应该为Sdx。这一部分自发辐射可以被后腔面反射一次后，再从前腔面出射；也可以被后腔面反射后，再经过若干周期前、后腔面的反射，最终才从前腔面出射。因而向后传播的部分在前腔面的振幅输出为

$$F^{-}=\sqrt{Sdx}\cdot\exp\left[-ink(L+x)+\frac{g}{2}(L+x)\right]\cdot\sqrt{R_2}\sqrt{1-R_1}\cdot\sum_{m=0}^{\infty}\left[\exp(-i\cdot 2nkL+gL)\cdot\sqrt{R_1R_2}\right]^{m}$$
$$=\sqrt{Sdx}\cdot\exp\left[-ink(L+x)+\frac{g}{2}(L+x)\right]\cdot\sqrt{R_2}\sqrt{1-R_1}\frac{1}{1-\exp(-i\cdot 2nkL+gL)\cdot\sqrt{R_1R_2}}$$
(3.20)

这里我们不考虑相位问题，只计算该薄层在前腔面的输出光强度，即

$$|F^{+}|^2+|F^{-}|^2$$
$$=Sdx\cdot\exp(gL)\cdot[\exp(-gx)+R_2\exp(gx)](1-R_1)[\frac{1}{1-\exp(-i\cdot 2nkL+gL)\cdot\sqrt{R_1R_2}}]^2$$
(3.21)

对式3.21进行积分，即可求出激光器整体从前腔面出射的光强。其中积分变量为x，积分范围为整个腔长0-L

$$I=\int_0^L(|F^{+}|^2+|F^{-}|^2)dx$$
$$=\frac{S[\exp(gL)-1]}{g}\cdot\frac{(1-R_1)\cdot[1+\exp(gL)\cdot R_2]}{\left|1-\exp(-i\cdot 2nkL+gL)\cdot\sqrt{R_1R_2}\right|^2}$$
$$=\frac{S[\exp(gL)-1]}{g}\cdot\frac{(1-R_1)\cdot[1+\exp(gL)\cdot R_2]}{1+\exp(2gL)\cdot R_1R_2-2\cdot\exp(gL)\sqrt{R_1R_2}\cdot\cos(2nkL)}$$
$$=\frac{I_{sp}(1-R_1)[1+\exp(gL)\cdot R_2]}{1+b^2-2b\cdot\cos(\emptyset)}$$
(3.22)

在式3.22中

$$I_{sp}=\frac{S[\exp(gL)-1]}{g}\tag{3.23}$$

$$b=\exp(gL)\sqrt{R_1R_2}\tag{3.24}$$

$$\emptyset = 2nkL = \frac{4\pi nL}{\lambda} \tag{3.25}$$

这里n是模式折射率，λ是波长，$k = 2\pi/\lambda$是波数。在式3.23-3.25中，S、g均随波长缓慢变化，因而在一个较短的波长范围内，$I_{sp}$和b都可以看做一个常数。由于法布里-珀罗腔激光器的腔长通常为数百微米，远大于波长，因而∅在一个较短的波长范围内仍有较大的起伏，cos(∅)会周期性变化，从而导致光谱强度随着波长呈现周期性的调制特性。

这里我们根据式3.22计算了四组放大的自发辐射光谱，如图3.13.(a)-(d)所示。假定激光器腔长为400 μm，模式折射率为2.5，并忽略折射率色散效应。两组光谱的计算区间均为449.8-450.2 nm，且假定在该区间中$I_{sp}$和b是常数。计算出的光谱以峰值强度进行归一化。图3.13.(a)-(d)中的b分别为0.9、0.7、0.4、0.1，根据式3.24可以得知，随着b逐渐减小，激光器的净模式增益g也在逐渐减小。图3.13.(a)-(d)四组光谱均由一系列的尖峰、谷底构成，其中尖峰、谷底对应的相位分别为$\emptyset = 2m\pi$、$\emptyset = 2m\pi \pm \pi$。当$b = 0.9$时，峰值谷值强度比为361，尖峰的半高宽远小于两峰之间的间隔，谷底则很平坦；随着b的减小，峰值谷值强度比逐渐减小，尖峰的半高宽逐渐增加，同时谷底也逐渐开始起伏；当b=0.1时，峰值谷值强度比仅为1.5，同时尖峰的半高宽已经接近两峰之间间隔的一半。

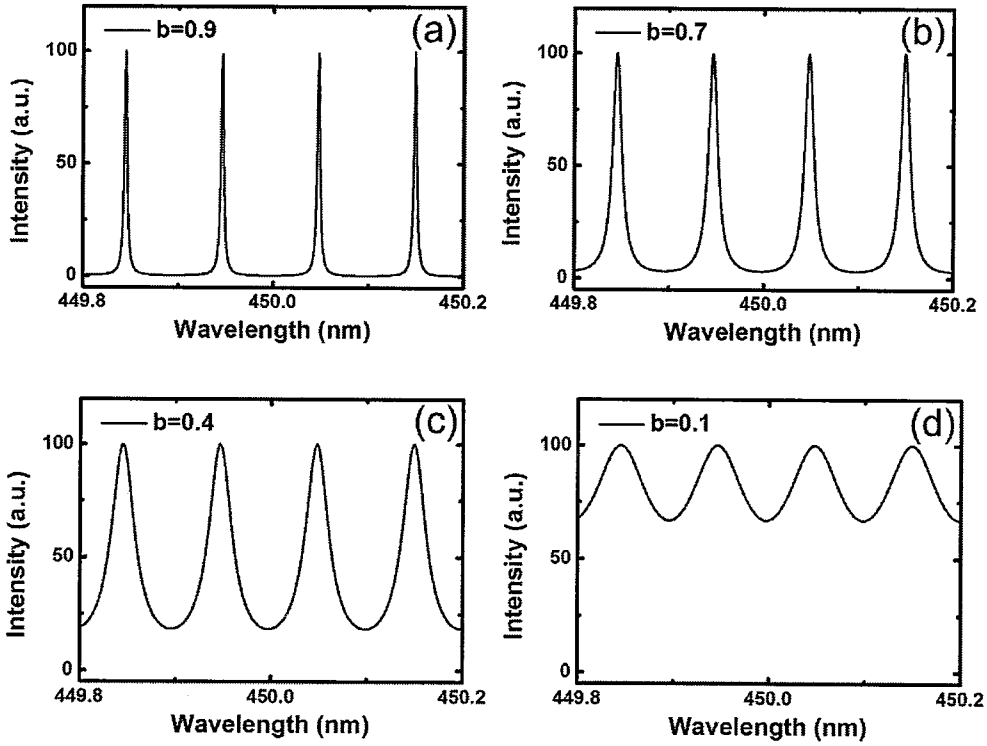



图3.13　根据式3.22计算的四组放大的自发辐射光谱，其中激光器腔长为400 μm。(a) b=0.9；(b) b=0.7；(c) b=0.4；(d) b=0.1。

接下来我们尝试求出光谱中尖峰之间的间隔，即纵模之间的间隔。两个纵模

之间的相位差为2π。以GaN基蓝光激光器为例，腔长为400 μm，波长为450 nm，模式折射率为2.5。对式3.25取微分，则有

$$d\phi = -\frac{4\pi L}{\lambda^2}\left(n - \lambda\frac{dn}{d\lambda}\right)d\lambda \tag{3.26}$$

这里忽略折射率色散效应，即认为$dn/d\lambda = 0$，则上式可进一步简化为

$$d\phi = -\frac{4\pi L}{\lambda^2}nd\lambda \tag{3.27}$$

则相位变化2π所需的波长差为

$$\Delta\lambda = \frac{\lambda^2}{2nL} \tag{3.28}$$

利用式3.28计算出的纵模间隔为0.10 nm。实际测试中，由于GaN基材料强烈的折射率色散效应[8, 9]，纵模间隔会小于0.10 nm。

### 3.2.2　Hakki-Paoli 法测试 GaN 基激光器器件光学损耗的原理

Hakki-Paoli法是一种测试激光器器件光学损耗的方法。其基本原理是通过放大的自发辐射谱计算出激光器的净模式增益谱，然后从净模式增益谱中推算出激光器器件的光学损耗。下面对其基本原理进行说明。

正如我们在3.1节所讨论的，蓝光激光器(腔长400 μm，波长450 nm)在波长450 nm附近纵模之间的间隔小于0.10 nm。在一个如此小的纵模间隔内，可以近似认为$I_{sp}$、b都不随波长而变化。这里，我们取峰值波长对应的相位为零，则其左、右谷值的相位分别为+π、−π。由此可分别得到峰值波长和谷值波长位置的光强度，即

$$I(\emptyset = 0) = \frac{I_{sp}(1 - R_1)[1 + \exp(gL)\cdot R_2]}{(1 - b)^2} \tag{3.29}$$

$$I(\emptyset = \pm\pi) = \frac{I_{sp}(1 - R_1)[1 + \exp(gL)\cdot R_2]}{(1 + b)^2} \tag{3.30}$$

结合式3.29、3.30可以求出该峰值波长位置对应的参数b，即为

$$b = \frac{\sqrt{I(\emptyset = 0)} - \sqrt{I(\emptyset = \pm\pi)}}{\sqrt{I(\emptyset = 0)} + \sqrt{I(\emptyset = \pm\pi)}} \tag{3.31}$$

结合式3.24、3.31即可求出该峰值波长位置对应的净模式增益g

$$g = \frac{1}{L}\ln\left(\frac{\sqrt{I(\emptyset = 0)} - \sqrt{I(\emptyset = \pm\pi)}}{\sqrt{I(\emptyset = 0)} + \sqrt{I(\emptyset = \pm\pi)}}\right) + \frac{1}{2L}\ln\left(\frac{1}{R_1R_2}\right) \tag{3.32}$$

式3.32右侧的第一项始终为负数，且在峰谷强度比无限大时趋近于零。第二项则为腔面损耗。利用式3.32求出每个峰值波长位置对应的净模式增益，即可得到一个净模式增益光谱。图3.14即为典型的通过Hakki-Paoli法计算得到的激光器

净模式增益光谱示意图。随着激光器注入电流的增加，净模式增益谱的峰值强度在不断增加；当净模式增益谱的峰值强度等于腔面损耗时，激光器激射。

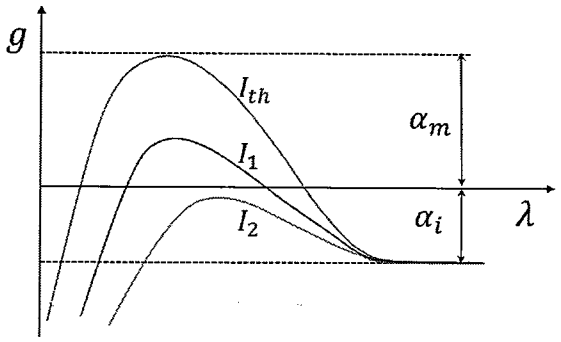



图3.14　典型的通过Hakki-Paoli法计算得到的激光器净模式增益光谱示意图

激光器器件净模式增益同内部光学损耗的关系如下，即

$$g = \Gamma G - \alpha_i \tag{3.33}$$

其中，Γ是激光器有源区的光限制因子，G是有源区的材料增益，$\alpha_i$是激光器器件的内部光学损耗。在长波端，有源区的材料增益近似为零，因此有

$$g = -\alpha_i \tag{3.34}$$

从式3.34我们不难推断出：在长波端，不同电流下测得的净模式增益曲线均会收敛到$-\alpha_i$，因此激光器器件内部光学损耗的大小等于长波端净模式增益的绝对值。

### 3.2.3　GaN 基激光器放大的自发辐射光谱的测量及优化

图3.15是常规的放大的自发辐射光谱测试光路。测试光路包括激光器二极管、收集透镜、线性偏振片和一个高分辨光谱仪(极限分辨率为6 pm)。激光二极管需固定在升降台上，并需要保证两点：(1)腔长方向同y方向平行，即保证腔面的光平行于y方向出射；(2)激光二极管PN结平面同z方向垂直。收集透镜用于将激光二极管腔面的出射光聚焦到高分辨光谱仪前端的狭缝中。线性偏振片用于选择进入光谱仪的光波导模式，即TM模式或TE模式。由于GaN基激光器工作时以TE模式为主，这里仅选择TE模式进行测试。高分辨光谱仪前端的狭缝同z方向平行，为了保证光谱仪的分辨率，实际测量过程中狭缝宽度取10 μm。

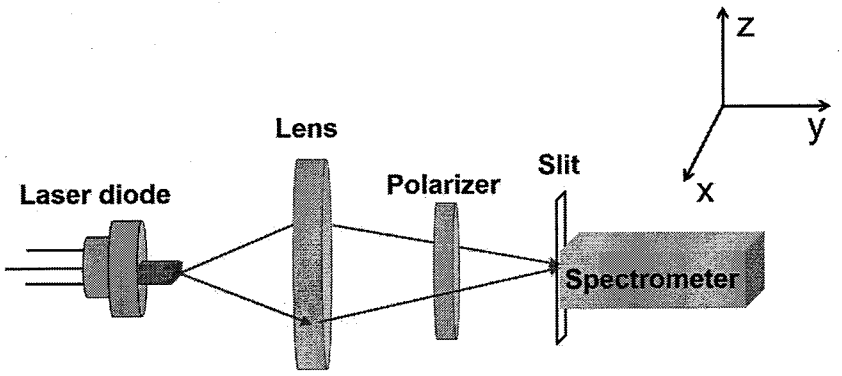



图3.15　常规的放大的自发辐射光谱测试光路

我们选取了一个腔长为400 μm的蓝光激光器进行放大的自发辐射光谱测试，其中测试电流为60 mA。图3.16.(a)是波长范围为440-485 nm的放大的自发辐射光谱，其外部轮廓同普通自发辐射光谱的外部轮廓并无明显差别。图3.16.(b)、3.16.(c)则为图3.16.(a)的局部放大图，其波长范围分别为450-450.5 nm、475-475.5 nm。从图3.16.(b)中可以看到强度不同的两套纵模[10]，且两套纵模的模式间隔均为0.09 nm。这一数值明显小于通过式3.28计算的结果0.10 nm。这表明，由于折射率色散效应，纵模间隔收缩了约10%。在图3.16.(b)中，强度较弱的一套纵模会干扰我们对强度较强的一套纵模谷值强度的判断。在图3.16.(c)中，两套纵模不能完全区分开来，这表明，强度较弱的纵模对强度较强的纵模的干扰在长波端尤为明显。

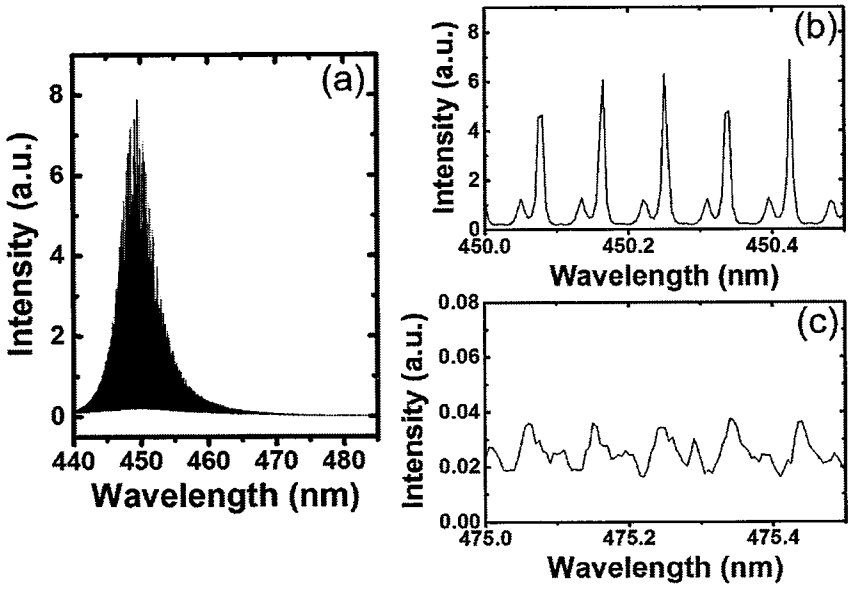



图3.16　通过常规的测试光路得到的GaN基蓝光激光器放大的自发辐射光谱范例，其中(b)、(c)是(a)的局部放大图

这里我们提出了一种简易的抑制强度较弱的纵模的方法，即去掉光路中的收

集透镜，此时的测试光路如图3.17所示。从激光器腔面的出射光仅有很小一部分能够进入到光谱仪前端的狭缝中。狭缝起到了选择模式的作用。

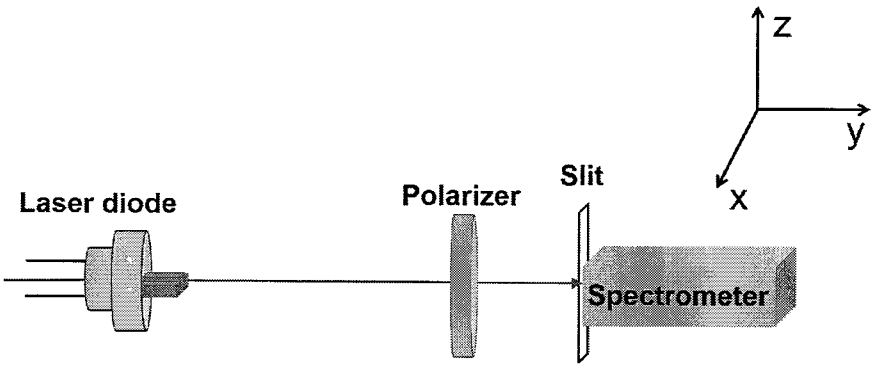



图3.17　改进的放大的自发辐射光谱测试光路

我们对蓝光激光器重新进行了放大的自发辐射光谱测试，测试电流仍为60 mA。图3.18.(a)是重新测量的、波长范围在440-485 nm之间的放大的自发辐射光谱，同图3.16.(a)相比，并无明显的差别。图3.18.(b)、3.18.(c)是图3.18.(a)的局部放大图，其波长范围分别为450-450.5 nm、475-475.5 nm。同图3.16.(b)相比，图3.18.(b)中仅有一套纵模。同图3.16.(c)相比，图3.18.(c)中纵模的峰值/谷值强度比明显增加，光谱的形状也更加接近理论计算的结果。结合图3.18.(b)、3.18.(c)，我们可以得出结论：即通过使用改进的测试光路，杂散纵模的强度得到了明显的抑制。

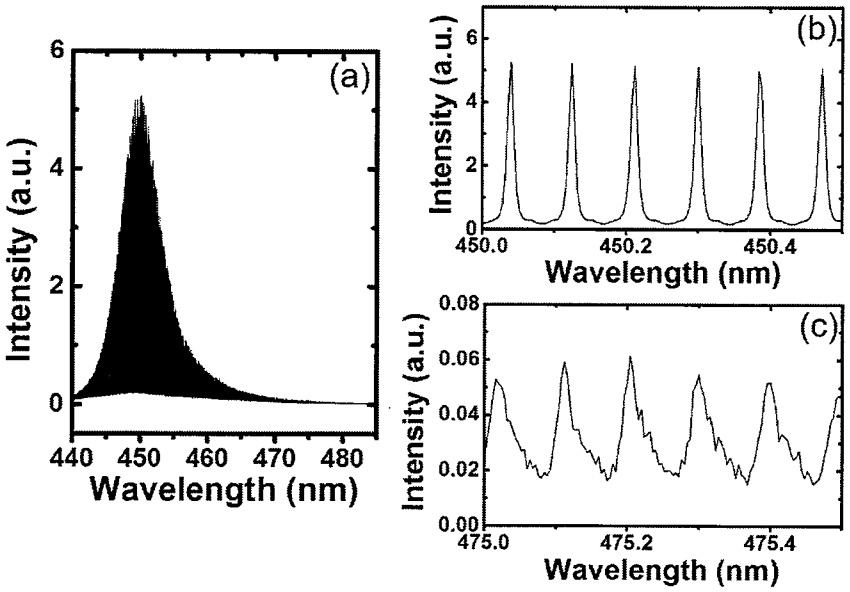



图3.18　利用改进的测试光路得到的GaN基蓝光激光器放大的自发辐射光谱范例，其中(b)、(c)是(a)的局部放大图。

接下来我们尝试使用Hakki-Paoli法对图3.16.(a)、3.18.(a)进行计算，求出其相应的净模式增益光谱。计算的关键在于准确找出纵模的峰值强度和谷值强度，然后利用式3.32计算出净模式增益。

当我们采用常规的测试光路时，得到的放大的自发辐射光谱存在两套纵模，如图3.16.(b)、3.16.(c)所示。假设我们计算强度较强的纵模对应的净模式增益光谱，其峰值强度基本不受强度较弱的纵模的干扰，而其谷值强度则受到强度较弱的纵模的干扰而偏大，且偏大的幅度在长波端尤为明显。根据式3.32可知，此时计算得到的净模式增益比实际值小。

当我们采用改进的测试光路时，强度较弱的纵模得到了明显的抑制，如图3.18.(b)、3.18.(c)所示，因而强度较强的纵模的峰值强度和谷值强度能够被准确读取出来，最终计算得到的净模式增益接近真实值。

图3.19是使用Hakki-Paoli法对图3.16.(a)、3.18.(a)进行计算得到的两个净模式增益光谱。当波长小于455 nm时，通过两种测试光路最终得到的净模式增益非常相近；当波长大于455 nm后，通用改进的测试光路得到的净模式增益要明显高于使用常规的测试光路得到的净模式增益。两条净模式增益谱线在波长大于478 nm后分别收敛于-26±5 $cm^{-1}$、-17±5 $cm^{-1}$。

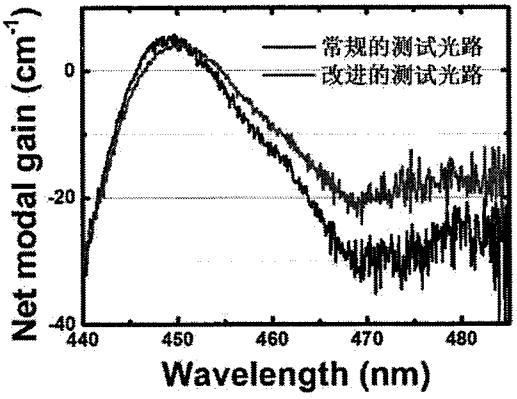



图3.19　利用常规的测试光路、改进的测试光路最终得到的净模式增益光谱

### 3.2.4　GaN 基激光器器件的光学损耗

我们使用MOCVD生长了蓝光激光器外延片$D_2$，其生长条件同3.1节的激光器外延片样品$A_2$、$B_2$、$C_2$的生长条件完全相同。外延片$D_2$随后进行了退火以激活p型层中的Mg受主，其中退火条件同外延片$A_2$相同。接下来，我们将外延片$D_2$加工成激光器器件，其中器件的腔长为400 μm、脊型宽度为10 μm，前、后腔面的反射率分别为34%、95%。随后我们通过Hakki-Paoli法得到了该器件在70 mA、90 mA时的净模式增益光谱，如图3.20所示。在波长大于475 nm后，两个电流下的净

模式增益曲线均收敛到同一数值-13±2 $cm^{-1}$，于是得到该器件内部光学损耗的数值为13±2 $cm^{-1}$。如我们在3.1节所描述，外延片的光学损耗为7.5 $cm^{-1}$，即激光器器件的光学损耗比外延片光学损耗高约5.5 $cm^{-1}$。

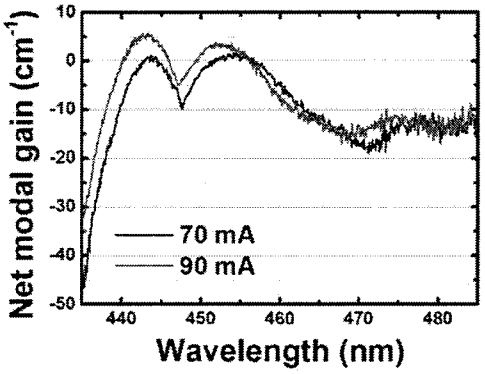



图3.20　外延片$D_2$加工得到的蓝光激光器器件在不同电流下的净模式增益光谱

我们随后制备了腔长为800 μm、脊型宽度为10 μm，前、后腔面反射率分别为70%、95%的绿光激光器器件，其净模式增益光谱如图3.21所示。这里我们测试了三个工作电流(130 mA、140 mA、150 mA)下的净模式增益光谱，且三个光谱曲线在波长大于530 nm后均收敛到-16±3 $cm^{-1}$。同相同结构的蓝光激光器相比，绿光激光器通常具有更高的光学损耗。这主要是因为波导层与限制层的折射率差随着波长的增加而不断减小，更多的光场会渗透到p型层中，从而导致激光器整体的光学损耗增大。

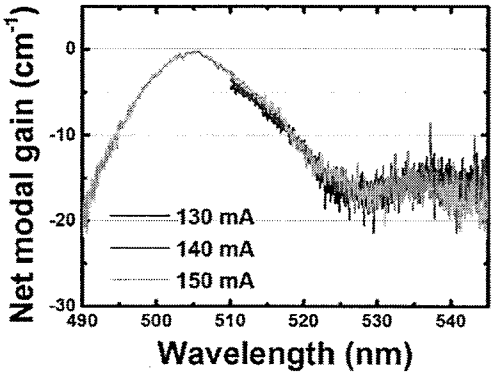



图3.21　绿光激光器器件在不同电流下的净模式增益光谱

当激光器激射时，有源区内部的受激辐射速率远大于非辐射复合速率和俄歇复合速率，激光器有源区的内量子效率接近于100%，斜率效率同光学损耗的关系如式3.35所示

$$SE = \frac{hc}{q\lambda} \cdot \frac{\alpha_m}{\alpha_m + \alpha_i} \cdot \eta_{inj} \tag{3.35}$$

其中，SE是斜率效率，h是普朗克常数，c是光速，q是电子电量，λ是激射波长，$\alpha_m$、$\alpha_i$分别是激光器的腔面损耗、激光器的内部光学损耗，$\eta_{inj}$是载流子注入效率。根据式3.35可知，由于$\alpha_m$、$\alpha_i$均为已知数，因而只要测量出激光器的斜率效率SE，我们就能推算出载流子注入效率$\eta_{inj}$。图3.20、图3.21器件的斜率效率分别为1.02 W/A、0.218 W/A，据此可以计算出二者的载流子注入效率分别为0.71±0.06、0.65±0.10。

基于上述光学损耗的研究，我们课题组对激光器的结构和制备工艺进行了优化设计，制备出了性能更加优异的蓝光激光器。其中，蓝光激光器器件的腔长为1200 μm，脊型宽度为15 μm，前、后腔面反射率分别为10%、95%。图3.22.(a)是该激光器的电流-光输出功率示意图。从图中可以看出，激光器的阈值电流为180 mA，斜率效率达到1.6 W/A。图3.22.(b)是该激光器的净模式增益光谱，从图中可以得出激光器的内部光学损耗为8±2.5 $cm^{-1}$。

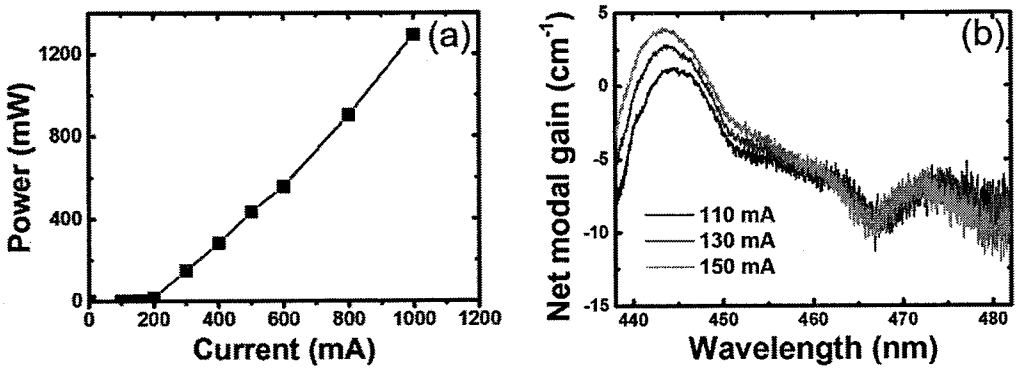



图3.22　(a)改进结构后的蓝光激光器的电流-光输出功率曲线；(b)改进结构后的蓝光激光器的净模式增益光谱。

### 3.2.5　脊型散射引起的光学损耗

如我们在3.2.4节所述，激光器器件的光学损耗比外延片的光学损耗高约5.5 $cm^{-1}$。其中，刻蚀脊型有可能会在激光器器件中引入额外的光学损耗。这是因为刻蚀脊型通常采用干法刻蚀，但是干法刻蚀得到的脊型侧壁往往并不是一条直线，而是存在很大的起伏[11, 12]，粗糙的侧壁会对激光器的光场造成散射，从而增加激光器器件的光学损耗。

我们尝试使用商用化的Lumerical FDTD软件来模拟蓝光(450 nm)激光器脊型侧壁粗糙度与散射损耗的关系，其中脊型刻蚀深度约为400 nm(刻蚀停止位置距上波导层的距离约100 nm)。图3.23.(a)是蓝光激光器脊型侧壁的散射损耗同侧壁粗糙度的关系，其中脊型宽度为2 μm，模拟的光场为基模。可以看出，基模的散射损耗随着侧壁粗糙度近似线性增加，其中粗糙度为10 nm、100 nm时的散射损

耗分别为0.12 $cm^{-1}$、4.9 $cm^{-1}$。图3.23.(b)是蓝光激光器脊型散射损耗同脊型宽度的关系，其中脊型侧壁粗糙度始终为100 nm，模拟的光场为基模。基模的散射损耗随着脊型宽度的增加呈现指数下降的趋势，当脊型宽度为10 μm时散射损耗接近于零。当脊型宽度为2 μm时，激光器的模式以基模为主；随着脊型宽度的增加，激光器光场中高阶模所占比例会逐渐增大。图3.23.(c)是蓝光激光器的脊型散射损耗同模式阶数的关系，其中脊型宽度为10 μm，脊型侧壁粗糙度为100 nm。虽然脊型散射损耗随着模式阶数的上升而不断增大，但是三阶模的散射损耗仍小于1.5 $cm^{-1}$。

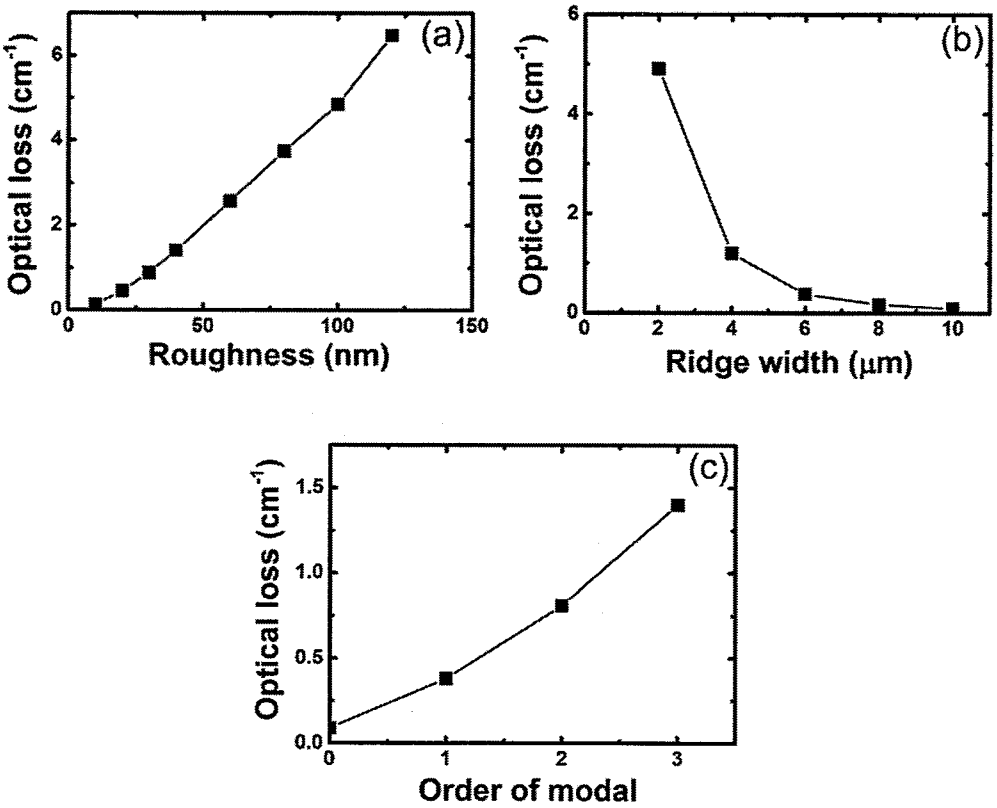



图3.23　(a)蓝光激光器脊型侧壁的散射损耗同侧壁粗糙度的关系，其中脊型宽度为2 μm，模拟的光场为基模；(b)蓝光激光器脊型散射损耗同脊型宽度的关系，其中脊型侧壁粗糙度始终为100 nm，模拟的光场为基模；(c)蓝光激光器脊型散射损耗同模式阶数的关系，其中脊型宽度为10 μm，脊型侧壁粗糙度为100 nm。

除了脊型散射引入的额外光学损耗外，器件相对于外延片额外的光学损耗来源还包括：金属电极的吸收损耗、激光器工作时自由载流子的吸收损耗等。除此之外，多横模对所测纵模谷值强度的干扰、腔面受损导致腔面反射率比实际值偏小等因素都可能造成激光器器件的光学损耗测量值偏大，因而对激光器器件的光学损耗做进一步的测量是很有必要的。

## 3.3　本章小结

本章研究了GaN基激光器的光学损耗，并取得了如下成果：

1、搭建了一套外延片光学损耗测试系统，通过理论分析发现其系统测试误差小于1 $cm^{-1}$。

2、激光器结构p型层中激活的Mg受主是GaN基激光器光学损耗的主要来源，但未激活的Mg受主光吸收系数不大。

3、仿真计算及实验结果均证实，降低p型层与光场的交叠可以有效降低GaN基激光器的光学损耗。

4、优化了Hakki-Paoli法测量激光器光增益谱的测试系统，测量了我们研制的GaN基激光器器件的光损耗，其中蓝光激光器器件的光学损耗为8±2.5 $cm^{-1}$。发现激光器器件的光损耗大于外延片的光损耗，分析了造成差异的原因。

# 参考文献


[1] M. Mamoru, O. Hiroyuki, K. Yoshinori, et al., "GaN-Based Laser Diodes Processed by Annealing with Minority-Carrier Injection," Japanese Journal of Applied Physics, 38, L1237, 1999.

[2] M. Miyachi, T. Tanaka, Y. Kimura, et al., "The activation of Mg in GaN by annealing with minority-carrier injection," Applied Physics Letters, 72, 1101-1103, 1998.

[3] T. Motonobu and I. Masao, "Novel Methods of p-type Activation in Mg-doped GaN," Japanese Journal of Applied Physics, 40, 6260, 2001.

[4] A. Castiglia, M. Rossetti, N. Matuschek, et al., "GaN-based superluminescent diodes with long lifetime," Proc. of SPIE, 9748, 97481V, (2016).

[5] B. W. Hakki and T. L. Paoli, "cw degradation at 300°K of GaAs double-heterostructure junction lasers. II. Electronic gain," Journal of Applied Physics, 44, 4113-4119, 1973.

[6] C. Chih-Sheng, C. Shun Lien, J. R. Minch, et al., "Amplified spontaneous emission spectroscopy in strained quantum-well lasers," IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 1, 1100-1107, 1995.

[7] 国伟华, "光学微腔及半导体激光器增益谱测量的研究," 博士论文, 北京, 中国科学院半导体研究所, 2004.

[8] U. T. Schwarz, E. Sturm, W. Wegscheider, et al., "Optical gain, carrier-induced phase shift, and linewidth enhancement factor in InGaN quantum well lasers," Applied Physics Letters, 83, 4095-4097, 2003.

[9] U. T. Schwarz, E. Sturm, W. Wegscheider, et al., "Gain spectra and current-induced change of refractice index in (In/Al)GaN diode lasers," physica status solidi (a), 200, 143-146, 2003.

[10] U. T. Schwarz, M. Pindl, E. Sturm, et al., "Influence of ridge geometry on lateral mode stability of (Al,In)GaN laser diodes," physica status solidi (a), 202, 261-270, 2005.

[11] D. S. Rawal, H. Arora, V. R. Agarwal, et al., "GaN etch rate and surface roughness evolution in Cl2/Ar based inductively coupled plasma etching," Thin Solid Films, 520, 7212-7218, 2012.

[12] F. Ren, S. J. Pearton, R. J. Shul, et al., "Improved sidewall morphology on dry-etched $SiO_2$ masked GaN features," Journal of Electronic Materials, 27, 175-178, 1998.

# 第四章　绿光激光器的载流子注入效率研究

载流子注入效率的定义是在有源区复合的载流子对数与注入的载流子总对数之比。载流子注入效率是表征激光器性能的一个重要参数，对激光器的阈值电流和斜率效率有直接的影响。在实际的激光器器件中，有源区对载流子的限制作用弱、电子空穴输运的不对称性、激光器结构设计的不合理等都可能造成大量载流子在有源区外复合，造成载流子注入效率的下降、阈值电流的上升及斜率效率的下降。

本章致力于研究绿光激光器的载流子注入效率。我们首先研究了绿光激光器的空穴输运特性，通过模拟和实验证实了大量的空穴从绿光有源区中溢出，降低了载流子注入效率；在绿光有源区的下方插入重掺杂层可以有效抑制空穴从绿光有源区的溢出，提升绿光激光器的载流子注入效率。随后我们研究了绿光激光器波导层的载流子复合特性。我们发现，当InGaN上波导层的In组分大于4%时，InGaN上波导层中发生了强烈的载流子复合；适当降低InGaN上波导层的In组分可以有效抑制InGaN上波导层中的载流子复合，提升绿光激光器性能。

## 4.1　绿光激光器的空穴输运特性研究

### 4.1.1　绿光激光器的空穴溢出现象

载流子注入效率是影响绿光激光器性能的一个重要因素。同电子相比，空穴的有效质量更大、迁移率更低[1-4]。电子和空穴的输运具有显著的不对称性。GaN基发光二极管在小电流密度下工作时，空穴主要被限制在靠近p型层的一个量子阱中[5,6]，电子则能够轻易从量子阱有源区中溢出造成电子泄露[7-12]。采用电子阻挡层可以有效减少GaN基激光器的电子泄露[13-21]。另一方面，关于GaN基激光器在高电流密度(>1000 A/cm$^2$)下的空穴输运特性的研究则很少，并且仅有的一些研究结果还存在争议。Sizov等人[22, 23]报道，极化电场会阻碍空穴的输运，并导致空穴被限制在c面InGaN基绿光激光器靠近p型一侧的量子阱中。Hager等人[24, 25]则报道，大量的空穴能够从c面InGaN基绿光激光器的有源区中溢出，并在下方的n-InGaN层中复合。Zhang等人[26]报道，在高电流密度下，借助极化电场的帮助，大量的空穴能够穿过七周期$In_{0.4}Ga_{0.6}N$/GaN多量子阱。为了进一步提高InGaN基绿光激光器的性能，研究空穴输运特性是很有必要的。

为了研究c面InGaN基绿光激光器的空穴输运特性，我们生长了一个特殊的激光器结构A，如图4.1所示。结构A包括一个GaN:Si($1\times10^{18}$ $cm^{-3}$)模板层、一个AlGaN:Si($1\times10^{18}$ $cm^{-3}$)下限制层、一个InGaN:Si($3\times10^{18}$ $cm^{-3}$)下波导层、一个包含四个蓝光InGaN/GaN量子阱的监测层、一个包含两个绿光InGaN/GaN量子阱的有源区、一个非故意掺杂的InGaN上波导层、一个AlGaN:Mg($2\times10^{19}$ $cm^{-3}$)电子阻挡层、一个AlGaN:Mg($1\times10^{19}$ $cm^{-3}$)上限制层、一个GaN:Mg($1\times10^{20}$ $cm^{-3}$)接触层。在该结构中，当空穴从绿光有源区中溢出后，会被蓝光量子阱捕获，从而发出蓝光，空穴溢出的数量可以通过蓝光发光峰的强度进行判断。

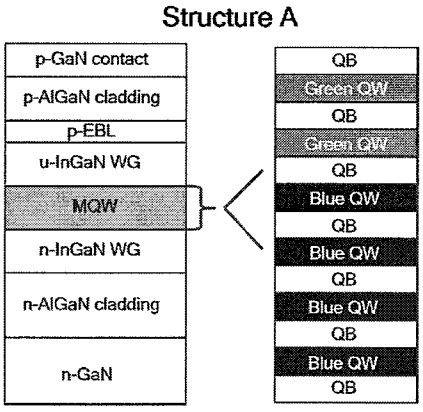



图4.1　激光器结构A示意图

我们使用商用的APSYS软件对结构A的载流子分布、电致发光特性进行了研究。这里使用的载流子输运模型包括漂移扩散模型、双费米能级俘获模型[27]、非局部平均自由程输运模型[28, 29]。模拟时的器件温度设置为300 K。考虑到缺陷、其他界面电荷的屏蔽作用，异质界面之间的极化电荷量设为理论极化电荷量的50%，即绿光双量子阱界面、蓝光监测量子阱界面的极化电荷量分别设置为$1.37\times10^{13}$ $cm^{-2}$、$0.72\times10^{13}$ $cm^{-2}$。

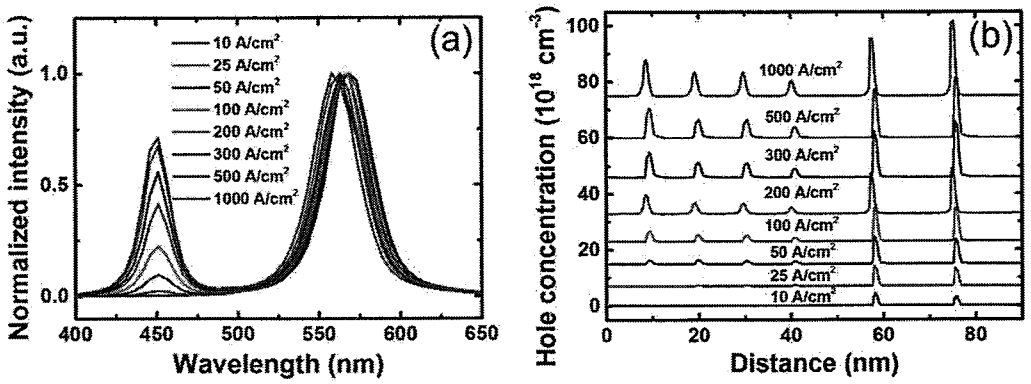
图4.2.(a)是模拟的结构A在不同电流密度下的电致发光光谱(自发辐射谱)，其中光谱强度以绿光发光峰的峰值强度进行了归一化。光谱中存在两个发光峰，分别来自于蓝光监测量子阱和绿光双量子阱。随着注入电流密度的不断增加，蓝光发光峰相对绿光发光峰的积分强度不断增大，在200 A/$cm^2$、1000 A/$cm^2$时分别为0.251、0.442。

图4.2.(b)是模拟的结构A在不同电流密度下的空穴浓度分布。图中可以看到六个空穴浓度峰值。其中，左边的四个浓度峰值来自于蓝光监测量子阱，右边的两个浓度峰值则来自于绿光双量子阱。随着电流密度的不断增大，蓝光监测量子阱中的空穴数量迅速增加。当电流密度为25 A/$cm^2$时，蓝光监测量子阱中的空穴数量约为绿光双量子阱空穴数量的9%；当电流密度为1000 A/$cm^2$时，蓝光监测量

子阱中的空穴数量约为绿光双量子阱空穴数量的74%。结合图4.2.(a)和图4.2.(b)，我们不难发现蓝光发光峰积分强度的增加趋势同空穴浓度的增加趋势基本吻合，这表明蓝光发光峰是由于空穴从绿光双量子阱中溢出造成的。我们也计算了常规绿光激光器(无蓝光监测量子阱)的空穴输运特性。在这种情况下，溢出绿光量子阱的空穴数量、积累在InGaN上波导层中的空穴数量同图4.2.(b)所示的结果非常相似(这里没有给出具体的数据)。这表明，插入蓝光监测量子阱对空穴从绿光双量子阱中的溢出并没有明显的影响。

为了验证上面的模拟结果，我们使用MOCVD生长了结构A。图4.2.(c)是激光器结构A在不同电流密度下的实验电致发光光谱。光谱强度以绿光发光峰的峰值强度进行了归一化。在电流密度为200 A/cm$^2$时，蓝光发光峰的相对积分强度为0.229。实验结果同图4.2.(a)的模拟结果吻合得很好，证实了空穴能从绿光双量子阱中溢出。根据模拟结果，当电流密度为1000 A/cm$^2$时，蓝光发光峰的相对积分强度为0.442，这意味着约31%的空穴在绿光双量子阱外复合。由于c面InGaN基绿光激光器的阈值电流通常超过1000 A/cm$^2$，这也意味着，由于空穴溢出的影响，c面InGaN基绿光激光器的载流子注入效率会降低超过31%。这里我们应该提到，当激光器的工作电流超过阈值电流以后，有源区的载流子密度会钉扎[30]，不会再随着电流的注入而显著增加。

在上文的模拟和实验中，绿光量子阱的数目是两个。这是因为随着绿光量子阱数量的增加，实现粒子数反转所需要的电流密度也会相应的增大。然而，有源区体积过小也可能是造成空穴溢出的原因。我们随后模拟研究了绿光量子阱数目对空穴输运的影响，在模拟过程中蓝光量子阱的个数始终保持为四个。图4.1.(d)是包含两个、三个、五个绿光量子阱的激光器在1000 A/cm$^2$时的模拟电致发光光谱，其中光谱强度以绿光发光峰的峰值强度进行归一化。随着绿光量子阱数量的增加，蓝光发光峰的相对峰值强度逐渐下降。这证实了过小的有源区体积是空穴从绿光有源区溢出的原因之一。



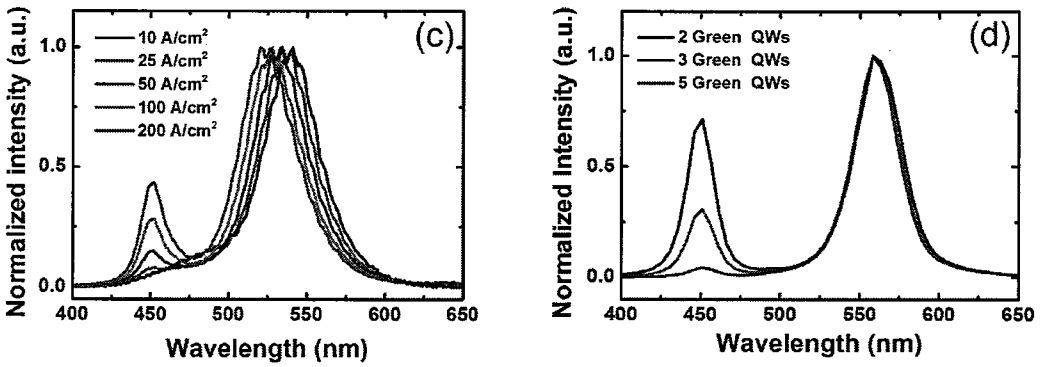



图4.2　(a)结构A在不同电流密度下的模拟电致发光光谱；(b)结构A在不同电流密度下的模拟空穴浓度分布；(c)结构A在不同电流密度下的实验电致发光光谱；(d)拥有两个、三个、五个绿光量子阱的绿光激光器在电流密度为1000 A/cm²时的模拟电致发光光谱。其中蓝光量子阱的个数始终为4个。

Zhang等人[26]报道，极化电场会降低量子阱的载流子俘获速率，增加载流子的寿命，因而有助于空穴从量子阱中的溢出。为了深入理解极化电场对于空穴输运的作用，我们对结构A在有极化电场、无极化电场的条件下分别进行了模拟，模拟时的电流密度为1000 A/cm²。图4.3.(a)是结构A在有极化电场、无极化电场模拟得到的电致发光光谱，其中光谱的强度以绿光发光峰的峰值强度进行了归一化。图中蓝光发光峰的相对峰值强度在有极化电场、无极化电场时并没有明显的差别。图4.3.(b)是结构A在有极化电场、无极化电场时的空穴浓度分布。其中，左边的四个浓度峰代表蓝光监测量子阱中的空穴浓度，右边的两个浓度峰代表绿光双量子阱中的空穴浓度。结构A的蓝光监测量子阱、绿光双量子阱在有极化电场时的空穴浓度均高于无极化电场时的空穴浓度，但是这个差别并不是很明显。因此，我们认为，极化电场对c面InGaN基绿光激光器的空穴输运并没有明显的影响，不是造成空穴从绿光双量子阱中溢出的主要原因。

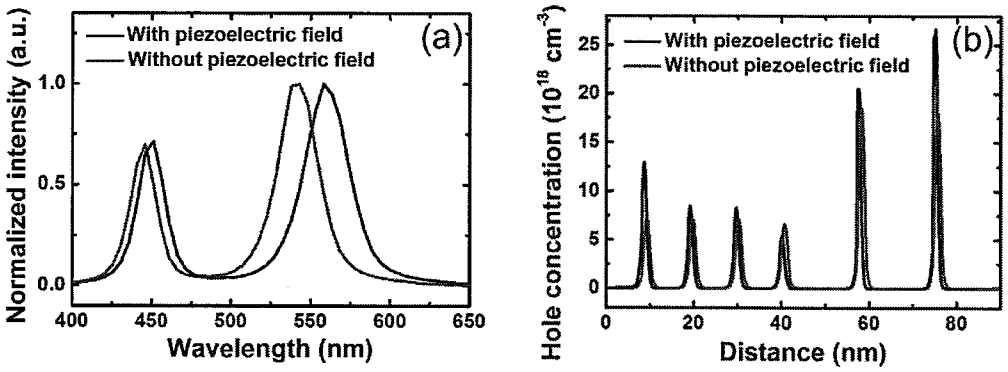



图4.3　结构A在有极化电场、无极化电场时的(a)模拟电致发光光谱；(b)模拟空穴浓度分布。模拟时的电流密度为1000 A/cm²。

### 4.1.2　抑制空穴溢出的新结构

我们注意到图4.2.(b)蓝光监测量子阱中的空穴浓度分布不均匀，且靠近n型层的蓝光量子阱中的空穴浓度是最高的。我们推测空穴被掺杂硅的InGaN下波导层所阻挡，从而积累在最靠近InGaN下波导层的蓝光量子阱中。因此，为了抑制空穴从绿光双量子阱中的溢出，我们将结构A中的蓝光监测量子阱掺杂硅，这个新结构我们命名为结构B，如图4.4所示。其中，蓝光监测量子阱中的硅掺杂浓度为$3\times10^{18}$ $cm^{-3}$。最后一个蓝光量子阱与第一个绿光量子阱之间的量子垒采用非故意掺杂。

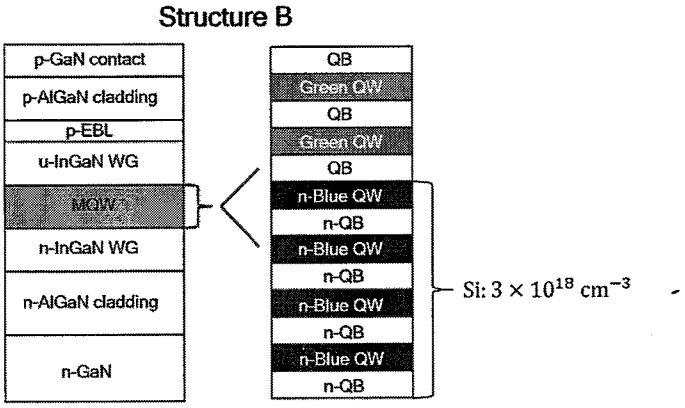



图4.4　激光器结构B的示意图

图4.5.(a)是结构B在不同电流密度下的模拟电致发光光谱，其中光谱的强度以绿光发光峰的峰值强度进行了归一化。蓝光发光峰的相对积分强度在电流密度为200 A/cm$^2$、1000 A/cm$^2$时分别为0.059、0.303。同图4.3.(a)相比，蓝光发光峰在200 A/cm$^2$、1000 A/cm$^2$时的相对积分强度分别下降了76.5%、31.4%。这表明在蓝光监测量子阱中掺杂硅可以有效抑制空穴从绿光双量子阱中的溢出，尽管在电流密度>200 A/cm$^2$时抑制空穴溢出的效果有所减弱。

图4.5.(b)是结构B在不同电流密度下的空穴浓度分布，其中左边的四个浓度峰代表蓝光监测量子阱中的空穴浓度，右边的两个浓度峰代表绿光双量子阱中的空穴浓度。同图4.3.(b)相比，不难看出，结构B蓝光监测量子阱中的空穴浓度要明显低于结构A蓝光监测量子阱中的空穴浓度，同时结构B绿光双量子阱中的空穴浓度要明显高于结构A绿光双量子阱中的空穴浓度。这表明，在蓝光监测量子阱中掺杂硅有效抑制了空穴向蓝光监测量子阱中的输运，从而增加了绿光双量子阱中积累的空穴浓度。

为了验证图4.5.(a)和图4.5.(b)中的模拟结果，我们使用MOCVD生长了结构B。图4.5.(c)是结构B在不同电流密度下的实验电致发光光谱，图中的光谱强度以绿

光发光峰的峰值强度进行了归一化。蓝光发光峰在电流密度为200 A/cm$^2$时的相对积分强度是0.047，这个数值同图4.3.(a)的模拟结果吻合得很好。

图4.5.(d)是结构A、结构B绿光发光峰的绝对积分强度随电流密度的变化。在电流密度为200 A/cm$^2$时，结构B绿光发光峰的绝对积分强度要比结构A绿光发光峰的绝对强度高39.6%。这表明，在绿光双量子阱的下方插入一层高硅掺杂层可以有效抑制空穴从绿光双量子阱中的溢出，从而提升c面InGaN基绿光激光器的发光效率。

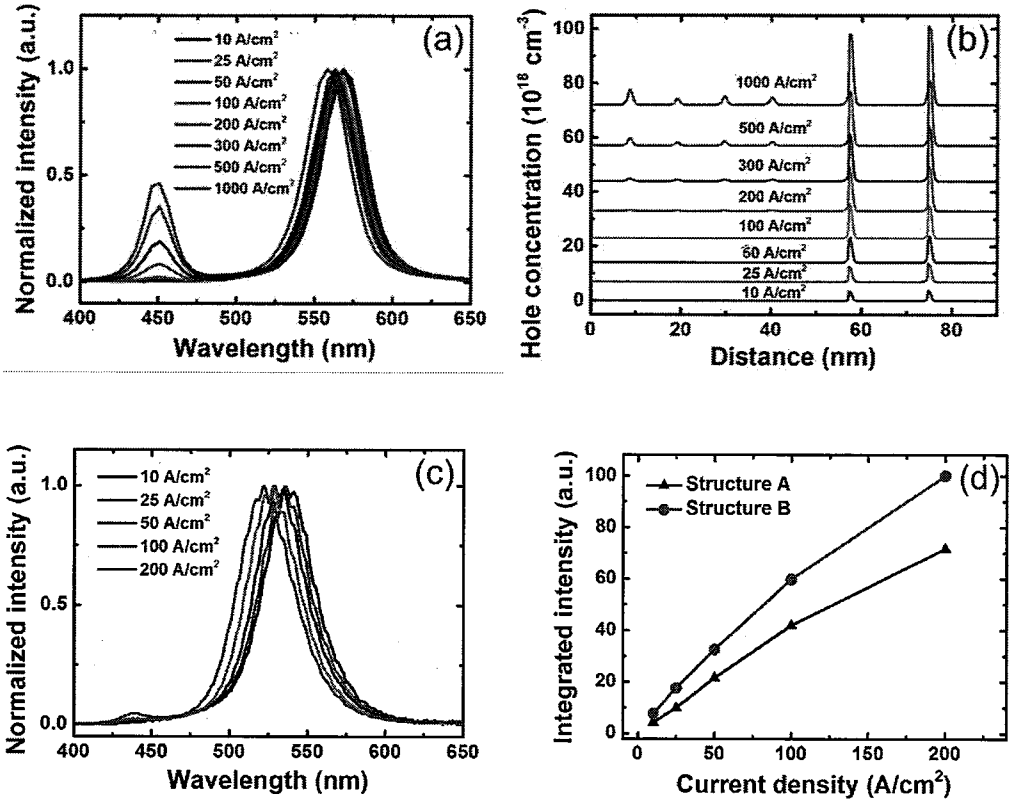



图4.5　(a)结构B在不同电流密度下的模拟电致发光光谱；(b)结构B在不同电流密度下的模拟空穴浓度分布；(c)结构B在不同电流密度下的实验电致发光光谱；(d)结构A、结构B绿光发光峰的绝对积分强度随着注入电流密度的变化。

### 4.1.3　空穴溢出的机制研究

沿生长方向向上，我们将蓝光量子阱的序号分别设为一号、二号、三号、四号，绿光量子阱的序号分别设为五号、六号。图4.6.(a)、(b)、(c)是结构A和结构B在电流密度分别为0 A/cm$^2$、10 A/cm$^2$、1000 A/cm$^2$下的价带能带图，其中能带图在六号绿光量子阱的位置进行对准。

如图4.6.(a)所示，当电流密度为0 A/cm$^2$时，结构A的蓝光监测量子阱位于耗尽区中，而结构B的蓝光监测量子阱位于耗尽区外，此时结构B中蓝光监测量子

阱区域的能带相比结构A明显下拉。我们取结构A和结构B的一号与二号蓝光监测量子阱之间量子垒的高度差作为阻挡空穴注入的势垒差值，则结构B的势垒比结构A的势垒高67 meV。如图4.6.(b)所示，当电流密度为10 A/cm$^2$时，结构A原有耗尽区的能带开始被拉平，结构A中的空穴容易从绿光双量子阱中溢出并注入到蓝光监测量子阱中；结构B原有耗尽区的能带也被拉平，但此时结构B阻挡空穴输运的势垒比结构A的高73 meV，因而结构B中的硅掺杂层抑制空穴溢出的效果很好。如图4.6.(c)所示，当电流密度为1000 A/cm$^2$时，结构A和结构B原有耗尽区的能带被进一步拉平，此时结构B阻挡空穴输运的势垒比结构A的仅高37 meV，因而结构B中的硅掺杂层抑制空穴溢出的效果减弱了。

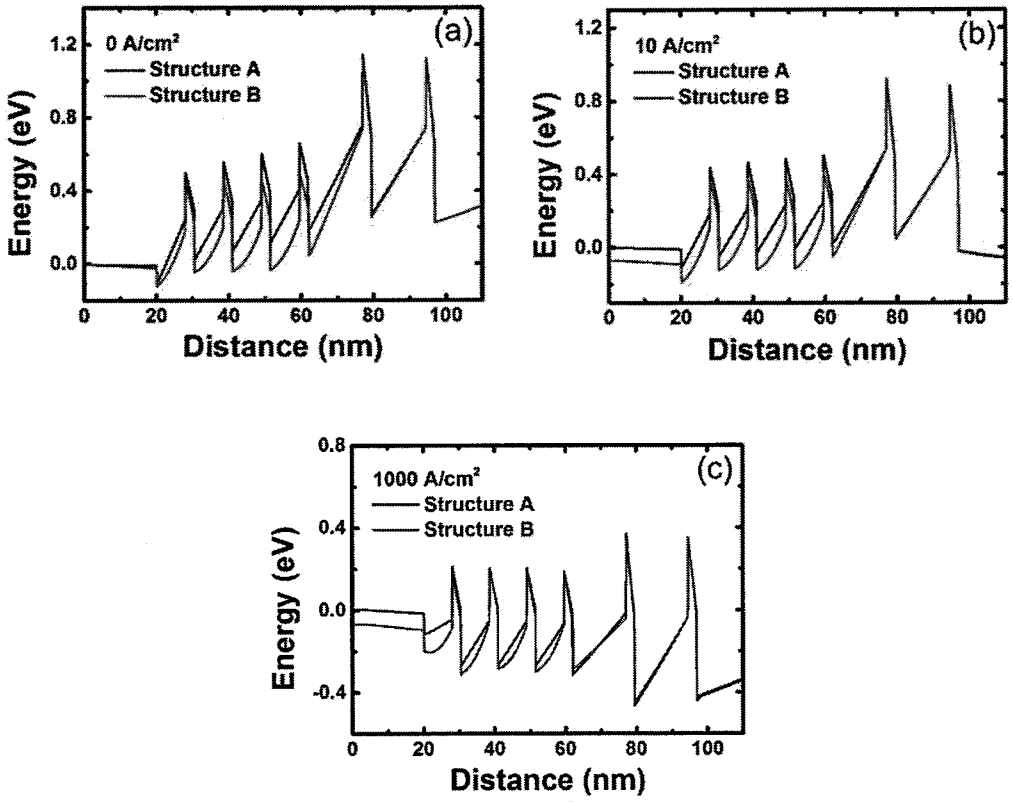



图4.6　结构A、结构B在不同电流密度下的价带能带图 (a) 0 A/cm$^2$；(b) 10 A/cm$^2$；(c) 1000 A/cm$^2$。

正如图4.5.(a)所示，当电流密度为1000 A/cm$^2$时，结构B蓝光发光峰的相对积分强度仍高达0.303，我们认为这是由于蓝光监测量子阱中的硅掺杂浓度不够高造成的。图4.7.(a)是当结构B蓝光监测量子阱中的硅掺杂浓度变化时，结构B的价带能带图。其中能带图在六号绿光量子阱位置对齐，模拟电流密度为1000 A/cm$^2$。随着硅掺杂浓度的不断增加，结构B蓝光监测量子阱区域的能带不断下拉，阻挡空穴注入的势垒差值（取蓝光监测量子阱非故意掺杂时的势垒高度为基准值）呈现上升的趋势。当硅掺杂浓度分别为1×10$^{18}$ cm$^{-3}$、3×10$^{18}$ cm$^{-3}$、5×10$^{18}$ cm$^{-3}$、8×10$^{18}$

$cm^{-3}$、$1\times10^{19}$ $cm^{-3}$、$2\times10^{19}$ $cm^{-3}$时，空穴注入的势垒差值分别为18 meV、37 meV、31 meV、57 meV、98 meV、214 meV。

图4.7.(b)是当结构B蓝光监测量子阱硅掺杂浓度变化时，结构B的模拟电致发光光谱，此时模拟电流密度为1000 A/$cm^2$，且光谱的强度以绿光发光峰的峰值强度进行了归一化。随着蓝光监测量子阱硅掺杂浓度的增加，蓝光发光峰的相对积分强度不断减小，并在硅掺杂浓度为$8\times10^{18}$ $cm^{-3}$时相对积分强度变得可以忽略不计(<0.05)。我们认为最佳的硅掺杂浓度就是$8\times10^{18}$ $cm^{-3}$。

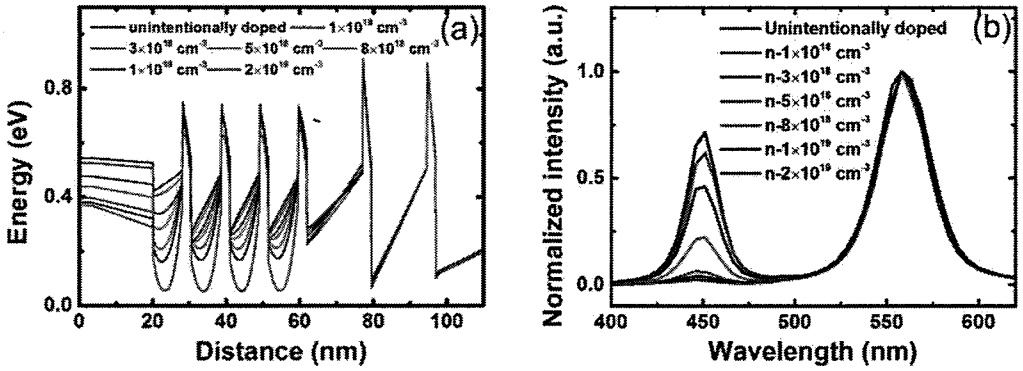



图4.7　当蓝光监测量子阱的硅掺杂浓度变化时，(a)结构B的模拟价带能带图；(b)结构B的模拟电致发光光谱。其中模拟电流密度为1000 A/$cm^2$。

## 4.2　绿光激光器波导层的载流子复合研究

### 4.2.1　绿光激光器波导层的载流子复合模拟研究

截至目前为止，已经有数个小组关注了载流子在绿光有源区下方的复合[24,31]，但是仍没有关于载流子在绿光有源区上方复合的报道。由于折射率色散效应，波导层与限制层之间的折射率差随着波长的增加逐渐减小。为了增强有源区的光限制作用，InGaN取代了GaN作为绿光激光器的波导层[32-34]；为了降低激光器整体的光学损耗，上波导层采用非故意掺杂，并被插入到有源区和p型层之间[35-38]；为了抑制高In组分InGaN表面的In偏析，GaN通常被用作量子垒层[39]。在有源区的最后一个GaN量子阱垒层与InGaN上波导层之间存在一个势垒，可能会影响载流子的输运及激光器的载流子注入效率。在本节中，我们尝试通过模拟和实验来研究绿光激光器上波导层中的载流子复合。

我们尝试用商用的APSYS软件对绿光激光器结构C进行模拟，其中结构C如图4.8.(a)所示，包括一个GaN:Si($1\times10^{18}$ $cm^{-3}$)模板层、一个AlGaN:Si($1\times10^{18}$ $cm^{-3}$)下限制层、一个InGaN:Si($3\times10^{18}$ $cm^{-3}$)下波导层、一个包含两个绿光InGaN/GaN量

子阱的有源区、一个非故意掺杂的InGaN上波导层、一个AlGaN:Mg($2\times10^{19}$ $cm^{-3}$)电子阻挡层、一个AlGaN:Mg($1\times10^{19}$ $cm^{-3}$)上限制层、一个GaN:Mg($1\times10^{20}$ $cm^{-3}$)接触层。考虑到自由载流子、缺陷、其它界面电荷的屏蔽作用，模拟中异质界面极化电荷总量为理论总量的50%。器件的温度设置为300 K，电流密度设置为2000 A/$cm^2$。我们定义在上波导层中复合的电流比例为R，

$$R = \frac{I_{WG}}{I_{Total}} \tag{4.1}$$

其中，$I_{WG}$是在InGaN上波导层中复合的电流密度，$I_{Total}$是整个绿光激光器的电流密度。在模拟过程中，InGaN上波导层的In组分由2%增加到6%，InGaN下波导层的In组分则始终保持不变。

图4.8.(b)是InGaN上波导层In组分由2%增加到6%时，结构C的价带能带示意图。此时的电流密度为2000 A/$cm^2$。图中的虚线代表空穴准费米能级。从图4.8.(b)不难看出，在最后的GaN量子垒层与InGaN上波导层之间存在一个势垒，并且势垒的高度随着InGaN上波导层In组分的增加而增大。

随着InGaN上波导层中In组分的增加，InGaN上波导层中的空穴输运到绿光双量子阱中所需要克服的总势垒高度也在不断增加，同时InGaN上波导层中积累的空穴浓度(取最后一个GaN量子垒与InGaN上波导层界面位置的最大空穴浓度)也在不断增加，如图4.8.(c)所示。当In组分由2%增加到6%时，空穴需要克服的总势垒高度由119 meV增加到214 meV，InGaN上波导层中积累的空穴浓度由$0.2\times10^{18}$ $cm^{-3}$增加到$5.1\times10^{18}$ $cm^{-3}$。

图4.8.(d)是当InGaN上波导层In组分变化时，结构C在垂直于PN结方向的空穴电流密度分布。随着InGaN上波导层中In组分的增加，上波导层中复合的电流密度逐渐增大，同时绿光双量子阱中复合的电流密度逐渐减小。这表明，结构C的载流子注入效率随着InGaN上波导层中In组分的增加逐渐减小。

根据图4.8.(d)，我们可以计算出在上波导层中复合的电流比例、激光器的载流子注入效率随着InGaN上波导层In组分的变化，结果如图4.8.(e)所示。InGaN上波导层中In组分由2%增加到6%时，上波导层中复合的电流比例R由0.005增加到0.446，载流子注入效率则由0.94减小为0.53。值得一提的是，当In组分小于等于3%时，在InGaN上波导层中复合的电流比例可以忽略不计($R < 0.05$)。

基于以上的模拟结果，我们发现：当InGaN上波导层In组分大于3%时，上波导层中会产生强烈的载流子复合，导致绿光激光器的载流子注入效率降低。为了提升激光器的载流子注入效率，有必要适当降低InGaN上波导层的In组分。另一方面，降低InGaN上波导层的In组分也会导致有源区的光限制因子下降。如图4.8.(f)所示，随着InGaN上波导层中In组分由6%降低到0%，有源区的光限制因子由1.62%降低到1.43%。鉴于当In组分小于等于3%时，在InGaN上波导层中复合的

电流比例已经可以忽略不计，我们认为，InGaN上波导层最佳的In组分在3%左右。

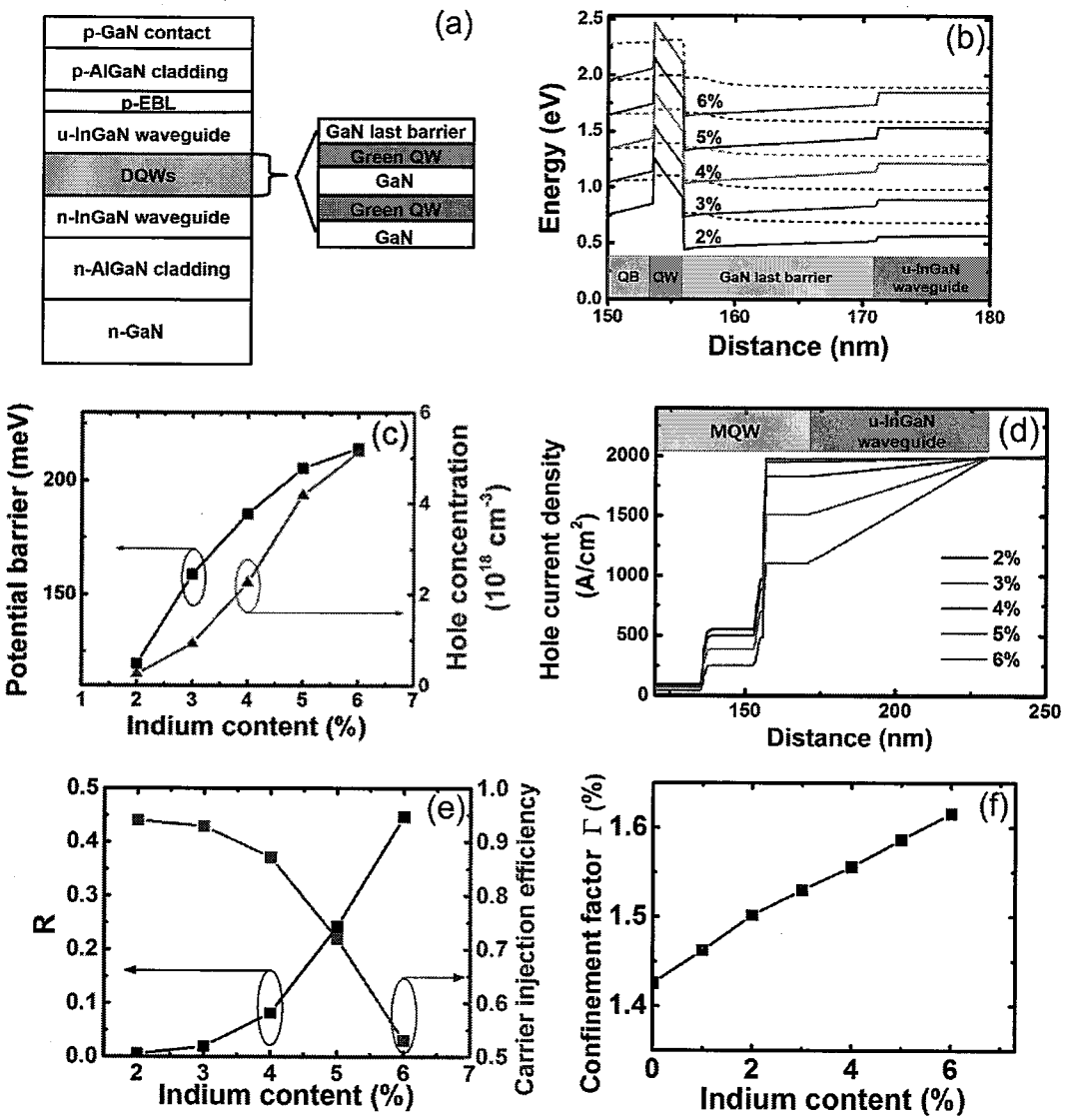



图4.8　(a)绿光激光器结构C的示意图；(b)当InGaN上波导层In组分变化时，结构C的模拟价带能带图；(c)InGaN上波导层中的空穴输运到绿光双量子阱中需要克服的最大势垒高度、InGaN上波导层中积累的空穴浓度(取最后一个GaN量子垒与InGaN上波导层界面位置的最大空穴浓度)随InGaN上波导层In组分的变化；(d)当InGaN上波导层In组分变化时，在垂直于PN结方向的空穴电流密度分布；(e)在上波导层中复合的电流比例、激光器的载流子注入效率随着InGaN上波导层In组分的变化；(f)结构C绿光有源区的光限制因子随着InGaN上波导层中In组分的变化。进行模拟时，图4.8.(b)-(e)中的总电流密度均为2000 A/cm$^2$。

接下来，我们将激光器结构C的InGaN上波导层的In组分固定为5%，然后模拟了不同电流密度下，结构C的InGaN上波导层的载流子复合特性，结果如图4.9所示。随着注入电流密度的增加，InGaN上波导层中积累的空穴浓度不断增加，并在电流密度为1000 A/cm$^2$时超过$1\times10^{18}$ cm$^{-3}$。与此同时，在InGaN上波导层中复合的电流比例随注入电流不断增加，并在电流密度超过1000 A/cm$^2$时变得不可忽

略(R>0.05)。当电流密度小于等于500 A/cm$^2$时，结构C的载流子注入效率基本是一个常数；当电流密度大于500 A/cm$^2$后，结构C的载流子注入效率随着电流密度快速下降。载流子注入效率下降的趋势同波导层载流子复合增强的趋势吻合得很好。激光器的工作电流密度通常高于1500 A/cm$^2$，这意味着由于波导层强烈的载流子复合，激光器将在较低的载流子注入效率下工作。

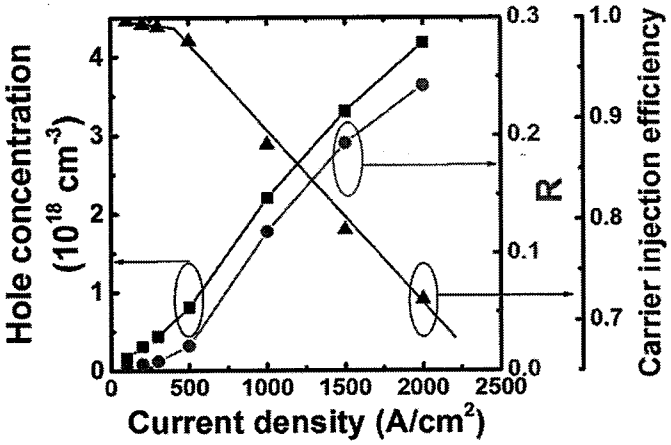



图4.9　激光器结构C的InGaN上波导层中积累的空穴浓度、上波导层复合的电流比例、载流子注入效率随着注入电流密度的变化。此时结构C的InGaN上波导层的In组分固定为5%。

### 4.2.2　绿光激光器波导层的载流子复合实验研究

为了验证4.2.1节的模拟结果，我们在结构C的基础上使用MOCVD生长了两个绿光激光器外延片样品，分别是样品D和样品E。其中，样品D、样品E的InGaN上波导层的In组分分别为5.2%、3.7%。从图4.9我们不难看出，只有当电流密度高于500 A/cm$^2$时，InGaN上波导层中才会出现比较明显的载流子复合。当我们使用简易的铟电极向外延片注入电流时，由于铟电极面积较大、且电流易在外延片上横向扩展，外延片上的最高注入电流密度往往受到限制。而对于激光器器件，由于脊型对电流的强烈限制作用，激光器器件的最高注入电流密度能轻易突破数个kA/cm$^2$。

我们使用传统的光刻及自对准工艺将样品D和样品E加工成激光器bar条。激光器bar条的结构如图4.10所示。每一根bar条都包含50个平行排列的激光器管芯(这里仅画出了3个管芯)，其中激光器管芯的n电极相互连接，p电极则彼此互不相连。激光器管芯的脊型宽度为10 μm，腔长为800 μm，前、后腔面的反射率分别为70%、95%。

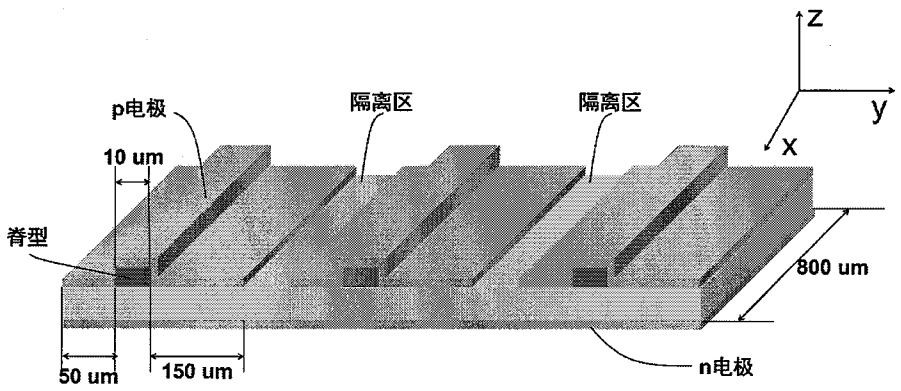



图4.10　激光器bar条的结构示意图

由于InGaN上波导层的组分在2-6%之间，波导层载流子复合发光的光为近紫外光。当我们从腔面采集激光器光谱时，波导层中载流子复合发出的光需要在波导层中横向传播直至从腔面发射出来。由于绿光量子阱对近紫外光强烈的吸收(吸收系数约$10^5$ $cm^{-1}$)，从腔面位置收集的光谱很难检测到近紫外发光峰，因而无法判断波导层载流子复合的强弱。为了准确检测波导层载流子复合的发光峰，我们必须从激光器管芯的上、下表面收集光谱，这意味我们必须去掉一部分厚金电极。

这里我们采用的方法如下：将一个激光器bar条p电极朝下，用一个硅片遮住bar条正面的部分n电极，随后使用离子束刻蚀(IBE)去掉未遮掩的部分n电极。此时的bar条的结构如图4.11所示。左边的激光器管芯的n电极均已被除掉，右边的激光器管芯的n电极则仍保留着。由于激光器管芯底部的n型层具有良好的导电性，因而电子能够横向扩展到相邻的激光器管芯中。光谱仪可以放置在激光器管芯的下方。在这种情况下，上波导层复合发出的近紫外光穿过绿光双量子阱后即可被光谱仪收集到。以绿光量子阱的总厚度为5 nm进行估算，则近紫外发光峰的强度在穿过绿光双量子阱后仅衰减了5%。

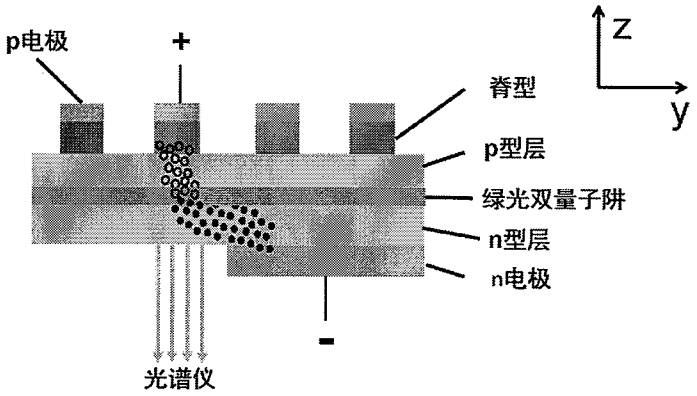


图4.11　去掉了部分n电极的激光器bar条结构示意图

图4.12.(a)、4.12.(b)是使用样品D、样品E制作的激光器管芯在不同电流密度下的自发辐射光谱。可以看出图中的光谱有两个发光峰，一个是近紫外发光峰(发光峰的峰位分别为388 nm和380 nm)，另一个是绿光发光峰(发光峰的峰值均接近520 nm)。这两个发光峰分别来自于InGaN上波导层和绿光双量子阱。由于下InGaN波导层采用了硅重掺杂，有效抑制了空穴从绿光双量子阱中的溢出，因而下InGaN波导层对于近紫外发光峰的贡献可以忽略不计。值得一提的是，图中近紫外发光峰的波长间隔比绿光发光峰的波长间隔小，近紫外发光峰的半高宽比绿光发光峰的半高宽小。图4.12.(c)是近紫外发光峰相对于绿光发光峰的积分强度(绿光发光峰的积分强度取1)随着注入电流密度的变化。对于样品D，近紫外发光峰的相对积分强度在1000 A/cm$^2$时是10.3%，在2500 A/cm$^2$时则增加到了48.9%；对于样品E，近紫外发光峰的相对积分强度非常小，即使在2500 A/cm$^2$时也只有4.1%。这表明，同样品D相比，样品E的InGaN上波导层的载流子复合得到了明显的抑制。实验结果同4.2.1节的模拟结果吻合得很好。

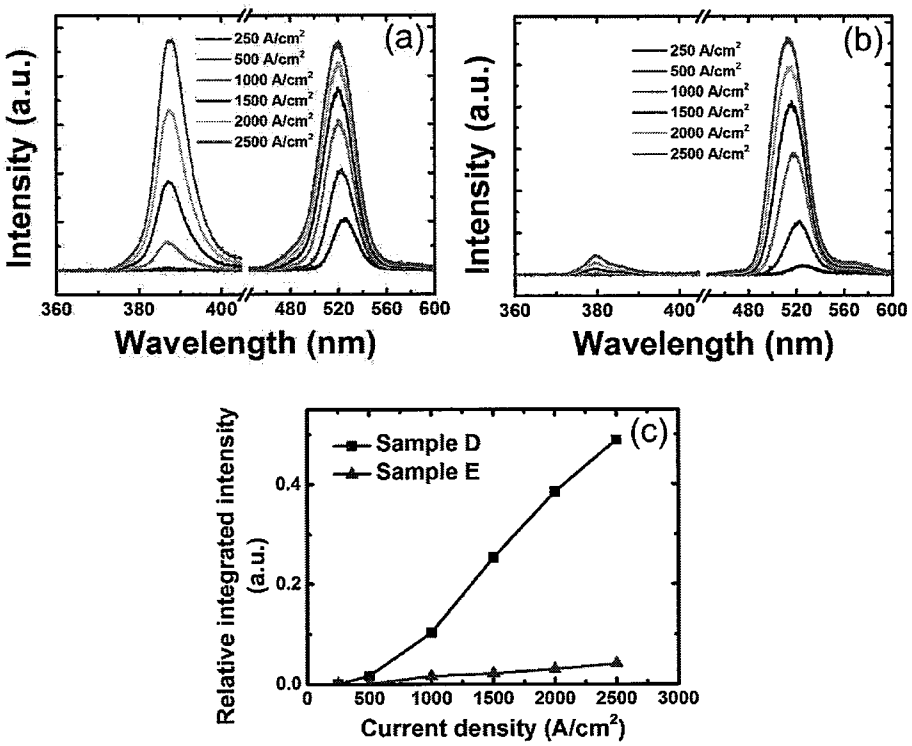



图4.12　(a)使用样品D制作的激光器管芯在不同电流密度下的自发辐射光谱；(b)使用样品E制作的激光器管芯在不同电流密度下的自发辐射光谱；(c)近紫外发光峰的相对积分强度随着电流密度的变化。

### 4.2.3　波导层的载流子复合对绿光激光器性能的影响

图4.13是使用样品D和样品E制作的激光器管芯的光输出功率-电流密度图。测试在室温下进行。为了消除热效应的影响，管芯在脉冲条件下工作，其中脉冲宽度为400 ns，脉冲频率为10 kHz。从图中可以看出，使用样品D、样品E制作的激光器管芯的阈值电流密度分别为3.8 kA/cm$^2$、3.0 kA/cm$^2$，斜率效率则分别为0.09 W/A、0.23 W/A。同样品D制作的激光器管芯相比，样品E制作的管芯具有更低的阈值电流密度、更高的斜率效率，这主要归功于样品E的InGaN上波导层具有较低的In组分，有效抑制了InGaN上波导层的载流子复合，提高了激光器管芯的载流子注入效率。

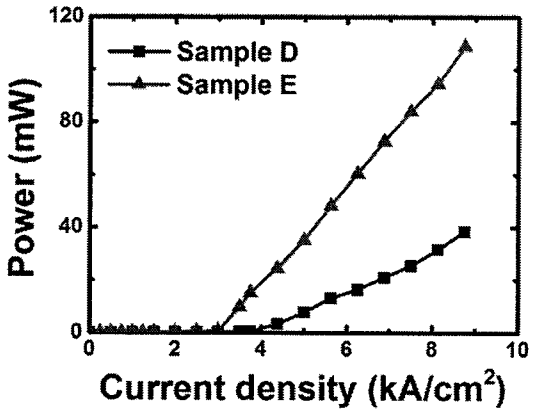



图4.13　使用样品D、样品E制作的激光器管芯的光输出功率-电流密度曲线图

## 4.3　本章小结

本章我们主要研究了GaN基绿光激光器的载流子注入效率，并取得了如下成果：

(1)大量的空穴能够从绿光双量子阱中溢出，并在绿光双量子阱下方的蓝光监测量子阱中复合，从而降低绿光激光器的载流子注入效率；

(2)在绿光双量子阱下方插入重硅掺杂层可以有效抑制空穴从绿光双量子阱中的溢出，从而提升绿光激光器的载流子注入效率；

(3)在最后的GaN量子垒层与InGaN上波导层的界面位置存在一个势垒，这个势垒会导致大量的载流子被限制在InGaN上波导层中，并在InGaN上波导层中复合发射出近紫外光，从而降低绿光激光器的载流子注入效率；

(4)适当降低InGaN上波导层的In组分(建议不超过3%)可以有效抑制InGaN上波导层中的载流子复合，提升绿光激光器的载流子注入效率。

# 参考文献


[1] T. T. Mnatsakanov, M. E. Levinshtein, L. I. Pomortseva, et al., "Carrier mobility model for GaN," Solid-State Electronics, 47, 111-115, 2003.

[2] M. Suzuki, T. Uenoyama, and A. Yanase, "First-principles calculations of effective-mass parameters of AlN and GaN," Physical Review B, 52, 8132-8139, 1995.

[3] D. L. Rode and D. K. Gaskill, "Electron Hall mobility of n-GaN," Applied Physics Letters, 66, 1972-1973, 1995.

[4] T. Tanaka, A. Watanabe, H. Amano, et al., "p-type conduction in Mg-doped GaN and $Al_{0.08}Ga_{0.92}N$ grown by metalorganic vapor phase epitaxy," Applied Physics Letters, 65, 593-594, 1994.

[5] J. P. Liu, J.-H. Ryou, R. D. Dupuis, et al., "Barrier effect on hole transport and carrier distribution in InGaN/GaN multiple quantum well visible light-emitting diodes," Applied Physics Letters, 93, 021102, 2008.

[6] A. David, M. J. Grundmann, J. F. Kaeding, et al., "Carrier distribution in (0001)InGaN/GaN multiple quantum well light-emitting diodes," Applied Physics Letters, 92, 053502, 2008.

[7] E. Jung, G. Hwang, J. Chung, et al., "Investigating the origin of efficiency droop by profiling the temperature across the multi-quantum well of an operating light-emitting diode," Applied Physics Letters, 106, 041114, 2015.

[8] D. S. Meyaard, Q. Shan, Q. Dai, et al., "On the temperature dependence of electron leakage from the active region of GaInN/GaN light-emitting diodes," Applied Physics Letters, 99, 041112, 2011.

[9] D. S. Meyaard, G.-B. Lin, Q. Shan, et al., "Asymmetry of carrier transport leading to efficiency droop in GaInN based light-emitting diodes," Applied Physics Letters, 99, 251115, 2011.

[10] J. Wang, L. Wang, W. Zhao, et al., "Understanding efficiency droop effect in InGaN/GaN multiple-quantum-well blue light-emitting diodes with different degree of carrier localization," Applied Physics Letters, 97, 201112, 2010.

[11] K. J. Vampola, M. Iza, S. Keller, et al., "Measurement of electron overflow in 450 nm InGaN light-emitting diode structures," Applied Physics Letters, 94, 061116, 2009.

[12] M.-H. Kim, M. F. Schubert, Q. Dai, et al., "Origin of efficiency droop in GaN-based light-emitting diodes," Applied Physics Letters, 91, 183507, 2007.

[13] L. Le, D. Zhao, D. Jiang, et al., "Utilization of polarization-inverted AlInGaN or relatively thinner AlGaN electron blocking layer in InGaN-based blue-violet laser diodes," Journal of

Vacuum Science & Technology B, 33, 011209, 2015.

[14] L. Le, D. Zhao, D. Jiang, et al., "Suppression of electron leakage by inserting a thin undoped InGaN layer prior to electron blocking layer in InGaN-based blue-violet laser diodes," Optics express, 22, 11392-11398, 2014.

[15] W. Yang, D. Li, N. Liu, et al., "Improvement of hole injection and electron overflow by a tapered AlGaN electron blocking layer in InGaN-based blue laser diodes," Applied Physics Letters, 100, 031105, 2012.

[16] D. Zhang, Z. C. Liu, and X. D. Hu, "An improved multi-layer stopper in a GaN-based laser diode," Semiconductor Science and Technology, 24, 045003, 2009.

[17] J.-R. Chen, C.-H. Lee, T.-S. Ko, et al., "Effects of built-in polarization and carrier overflow on InGaN quantum-well lasers with electronic blocking layers," Lightwave Technology, Journal of, 26, 329-337, 2008.

[18] S.-N. Lee, S. Y. Cho, H. Y. Ryu, et al., "High-power GaN-based blue-violet laser diodes with AlGaN/GaN multiquantum barriers," Applied Physics Letters, 88, 111101, 2006.

[19] Y.-K. Kuo and Y.-A. Chang, "Effects of electronic current overflow and inhomogeneous carrier distribution on InGaN quantum-well laser performance," IEEE Journal of Quantum Electronics, 40, 437-444, 2004.

[20] J. Piprek and S. Nakamura, "Physics of high-power InGaN/GaN lasers," IEE Proceedings of Optoelectronics, 149, 145-151, 2002.

[21] K. Domen, R. Soejima, A. Kuramata, et al., "Electron overflow to the AlGaN p-cladding layer in InGaN/GaN/AlGaN MQW laser diodes," MRS Internet Journal of Nitride Semiconductor Research, 3, e2, 1998.

[22] D. S. Sizov, R. Bhat, A. Zakharian, et al., "Carrier transport in InGaN MQWs of aquamarine-and green-laser diodes," IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 17, 1390-1401, 2011.

[23] D. S. Sizov, R. Bhat, A. Zakharian, et al., "Impact of carrier transport on aquamarine-green laser performance," Applied Physics Express, 3, 122101, 2010.

[24] T. Hager, M. Binder, G. Brüderl, et al., "Carrier transport in green AlInGaN based structures on c-plane substrates," Applied Physics Letters, 102, 231102, 2013.

[25] T. Hager, G. Brüderl, T. Lermer, et al., "Current dependence of electro-optical parameters in green and blue (AlIn) GaN laser diodes," Applied Physics Letters, 101, 171109, 2012.

[26] S. Zhang, E. Xie, T. Yan, et al., "Hole transport assisted by the piezoelectric field in $In_{0.4}Ga_{0.6}N$/GaN quantum wells under electrical injection," Journal of Applied Physics, 118, 125709, 2015.

[27] M. A. Alam, M. S. Hybertsen, R. K. Smith, et al., "Simulation of semiconductor quantum well lasers," IEEE Transactions on Electron Devices, 47, 1917-1925, 2000.

[28] C. Xia, W. Hu, C. Wang, et al., "Simulation of InGaN/GaN multiple quantum well light-emitting diodes with quantum dot model for electrical and optical effects," Optical and quantum electronics, 38, 1077-1089, 2006.

[29] E. M. Azoff, "Energy transport numerical simulation of graded AlGaAs/GaAs heterojunction bipolar transistors," IEEE Transactions on Electron Devices, 36, 609-616, 1989.

[30] S. L. Chuang, J. O'Gorman, and A. Levi, "Amplified spontaneous emission and carrier pinning in laser diodes," IEEE Journal of Quantum Electronics, 29, 1631-1639, 1993.

[31] Y. Cheng, J. Liu, A. Tian, et al., "Hole transport in c-plane InGaN-based green laser diodes," Applied Physics Letters, 109, 092104, 2016.

[32] T. Lermer, M. Schillgalies, A. Breidenassel, et al., "Waveguide design of green InGaN laser diodes," physica status solidi (a), 207, 1328-1331, 2010.

[33] C.-Y. Huang, Y.-D. Lin, A. Tyagi, et al., "Optical waveguide simulations for the optimization of InGaN-based green laser diodes," Journal of Applied Physics, 107, 023101, 2010.

[34] L. Zhang, D. Jiang, J. Zhu, et al., "Confinement factor and absorption loss of AlInGaN based laser diodes emitting from ultraviolet to green," Journal of Applied Physics, 105, 023104, 2009.

[35] M. Kawaguchi, O. Imafuji, S. Nozaki, et al., "Optical-loss suppressed InGaN laser diodes using undoped thick waveguide structure," Proc. of SPIE, 9748, 974818, (2016).

[36] M.-X. Feng, J.-P. Liu, S.-M. Zhang, et al., "Design considerations for GaN-based blue laser diodes with InGaN upper waveguide layer," IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 19, 1500705, 2013.

[37] P. Chen, M. X. Feng, D. S. Jiang, et al., "Improvement of characteristics of InGaN-based laser diodes with undoped InGaN upper waveguide layer," Journal of Applied Physics, 112, 113105, 2012.

[38] S. Uchida, M. Takeya, S. Ikeda, et al., "Recent progress in high-power blue-violet lasers," IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 9, 1252-1259, 2003.

[39] A. Tian, J. Liu, L. Zhang, et al., "Green laser diodes with low threshold current density via interface engineering of InGaN/GaN quantum well active region," Optics Express, 25, 415-421, 2017.

# 第五章　蓝光激光器的波导设计研究

为了提高有源区的光限制因子、抑制模式泄露，GaN基蓝光激光器通常采用InGaN作为波导层[1]。为了降低蓝光激光器的光学损耗，InGaN上波导层通常采用非故意掺杂，并插入到量子阱有源区与p型层之间[2,3]。为了进一步降低蓝光激光器的光学损耗，有必要继续增加上波导层的厚度。这里我们尝试在InGaN上(下)波导层与AlGaN上(下)限制层之间插入额外的GaN波导层。由于高质量的GaN能以较高的速率(约0.1 nm/s)进行生长，且外延生长GaN的过程不会引入额外的应力，因而在蓝光激光器结构中很容易插入相对较厚(>200 nm)的GaN波导层。在本章中，我们发现，插入额外的GaN波导层可以有效降低激光器的光学损耗，同时也会降低激光器的载流子注入效率。使用In组分梯度变化的InGaN作为上波导层可以有效提升GaN基蓝光激光器的载流子注入效率。

## 5.1　插入 GaN 波导层厚度对蓝光激光器光学损耗的影响

常规的蓝光激光器结构包括一个GaN:Si($1\times10^{18}$ $cm^{-3}$)模板层、一个AlGaN:Si($1\times10^{18}$ $cm^{-3}$)下限制层、一个InGaN:Si($2\times10^{18}$ $cm^{-3}$)下波导层、一个包含两个蓝光InGaN/GaN量子阱的有源区、一个非故意掺杂的InGaN上波导层、一个AlGaN:Mg($2\times10^{19}$ $cm^{-3}$)电子阻挡层、一个AlGaN:Mg($1\times10^{19}$ $cm^{-3}$)上限制层、一个GaN:Mg($1\times10^{20}$ $cm^{-3}$)接触层。

为了降低常规蓝光激光器的光学损耗，这里我们在AlGaN下限制层与InGaN下波导层之间、p型AlGaN电子阻挡层与InGaN上波导层之间分别插入GaN:Si($1\times10^{18}$ $cm^{-3}$)下波导层、非故意掺杂的GaN上波导层，如图5.1.(a)所示。其中，两插入层的厚度保持一致。图5.1.(b)是蓝光激光器的光学损耗、有源区的光学限制因子随着插入GaN波导层厚度(上、下插入层加起来的总厚度)的变化。随着插入GaN波导层厚度的增加，蓝光激光器的光学损耗、有源区的光限制因子均逐渐下降。光限制因子随着插入GaN波导层厚度的变化速率较为缓慢，当插入GaN波导层的厚度由0 nm增加到1000 nm时，光限制因子减小了约21%。光学损耗随插入GaN波导层厚度的变化曲线则明显可以分成两段：当插入GaN波导层厚度由0 nm增加到500 nm时，光学损耗减小了约70%；而当插入GaN波导层厚度由500 nm增加到1000 nm时，光学损耗只减小了22%。这表明，当插入GaN波导层厚度大于500 nm后，继续增加其厚度并不能有效降低光学损耗。

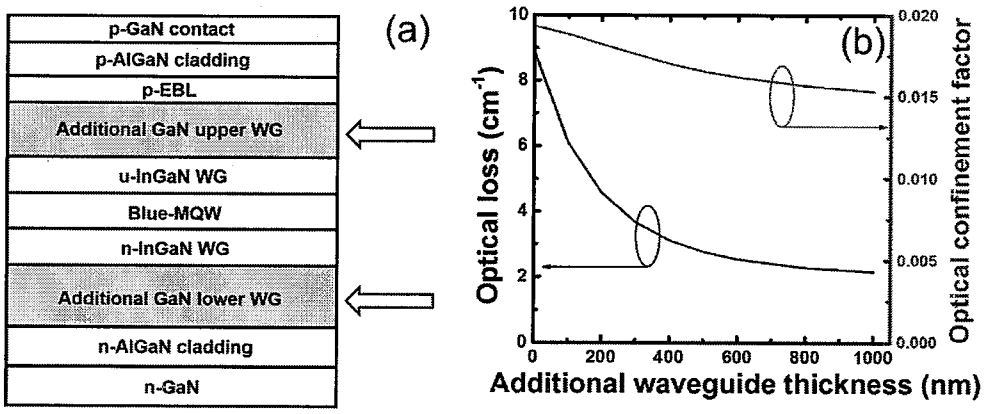



图5.1　(a)插入GaN波导层的蓝光激光器的结构示意图；(b)蓝光激光器的光学损耗、有源区光限制因子随着插入GaN波导层厚度的变化。

## 5.2　插入 GaN 波导层厚度对蓝光激光器载流子注入效率的影响

我们尝试使用LASTIP对蓝光激光器进行仿真分析，其中激光器腔长设置为600 μm，前、后腔面反射率分别设置为34%、95%，器件温度设置为300 K。在仿真过程中，我们改变插入GaN波导层的总厚度，分别为0 nm、250 nm、500 nm、750 nm、1000 nm，然后研究插入GaN波导层厚度对蓝光激光器载流子注入效率的影响。

图5.2.(a)是当插入GaN波导层厚度变化时，蓝光激光器的模拟电子浓度分布。其中浓度分布曲线在p型电子阻挡层位置对准，模拟时的电流密度设置为10 kA/cm$^2$。InGaN上波导层底部的电子浓度小于$1\times10^{15}$ cm$^{-3}$，且基本不随插入GaN波导层厚度而变化。从InGaN上波导层的底部沿生长方向向上，电子浓度迅速增加，直到出现一个电子浓度的小尖峰。该尖峰所在的位置是InGaN上波导层与GaN上波导层的界面。从图中可以看出，整个InGaN上波导层中的电子浓度都与插入GaN波导层厚度无关。GaN上波导层底部的电子浓度也基本同插入GaN波导层厚度无关，但从GaN上波导层底部沿生长方向向上，电子浓度在不断增加，因而GaN上波导层顶部的最高电子浓度在插入GaN波导层厚度为0 nm、250 nm、500 nm、750 nm、1000 nm时分别为$6.9\times10^{17}$ cm$^{-3}$、$1.6\times10^{18}$ cm$^{-3}$、$2.3\times10^{18}$ cm$^{-3}$、$2.8\times10^{18}$ cm$^{-3}$、$3.2\times10^{18}$ cm$^{-3}$。与此同时，p型层中的电子浓度也随着插入GaN波导层厚度的增加而升高。

图5.2.(b)是当插入GaN波导层厚度变化时，蓝光激光器的模拟空穴浓度分布，其中模拟时的电流密度设置为10 kA/cm$^2$。同电子浓度分布类似，InGaN上波导层和GaN上波导层底部的空穴分布基本不随插入GaN波导层厚度而变化，但GaN上波导层顶部的空穴浓度随着插入GaN波导层厚度的增加而不断增大。

结合图5.2.(a)、图5.2.(b)可以看出，随着插入GaN波导层厚度的增加，GaN上波导层顶部的载流子浓度在不断增大，有可能会导致上波导层的载流子复合增强、越过电子阻挡层的电子电流比例增大。

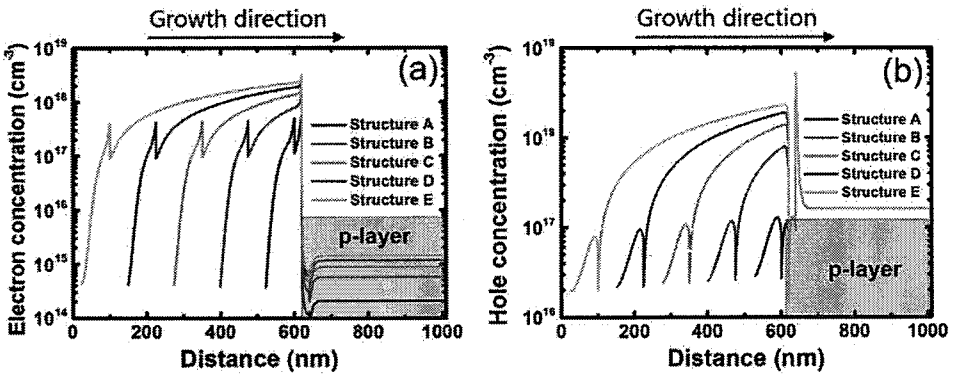



图5.2　当插入GaN波导层厚度(包括上、下两插入层的厚度)变化时，蓝光激光器的模拟(a)电子浓度分布；(b)空穴浓度分布。其中模拟时的电流密度设置为10 kA/cm$^2$。

图5.3.(a)是当插入GaN波导层厚度变化时，在上波导层中复合的电流比例随注入电流密度的关系曲线。随着插入GaN波导层厚度的增加，在上波导层中复合的电流比例呈现逐渐上升的趋势。尽管如此，但当插入GaN波导层厚度不超过750 nm时，在上波导层中复合的电流比例均可以忽略不计(<0.05)。当插入GaN波导层厚度为1000 nm、且电流密度超过2 kA/cm$^2$时，在上波导层中复合的电流比例不可忽略不计(>0.05)。

图5.3.(b)是当插入GaN波导层厚度变化时，越过电子阻挡层的电子电流比例随着注入电流密度的关系曲线。越过电子阻挡层的电子电流比例均随着注入电流密度近似线性增加，且在电流密度超过7 kA/cm$^2$后均不可忽略不计(>0.05)。随着插入GaN波导层厚度的增加，越过电子阻挡层的电子电流比例不断增大。结合图5.2不难看出，上波导层顶部聚集的大量载流子是导致越过电子阻挡层的电子电流比例增加的主要原因。

图5.3.(c)是当插入GaN波导层厚度变化时，蓝光激光器的载流子注入效率随着电流密度的变化。蓝光激光器的载流子注入效率随着注入电流密度的增加呈现线性下降的趋势，其中下降的速率随着插入GaN波导层厚度的增加而逐渐增大。结合图5.3.(a)、5.3.(b)和5.3.(c)，可以看出：当电流密度低于2 kA/cm$^2$时，上波导层的载流子复合是载流子注入效率下降的主要原因；当电流密度高于3 kA/cm$^2$时，越过电子阻挡层的电子电流是载流子注入效率下降的主要原因；当电流密度高于7 kA/cm$^2$时，越过电子阻挡层的电子电流的比例不可忽略不计(>0.05)。

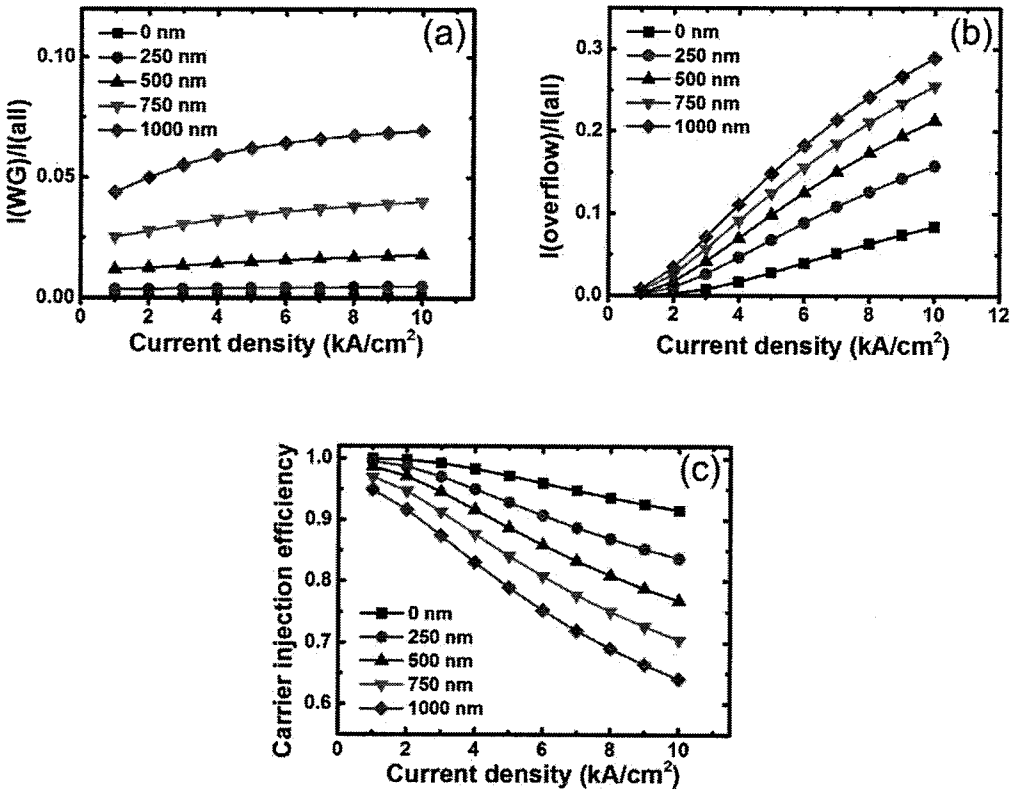



图5.3　当插入GaN波导层厚度变化时，蓝光激光器(a)在上波导层复合的电流比例随着注入电流密度的变化；(b)越过电子阻挡层的电子电流比例随着注入电流密度的变化；(c)载流子注入效率随着注入电流密度的变化。

图5.4是当插入GaN波导层厚度变化时，蓝光激光器的模拟光功率-电流曲线。阈值电流随插入GaN波导层厚度的变化不明显，这主要是因为随着插入GaN波导层厚度的增加，有源区的光限制因子减小，同时激光器的光学损耗降低，这两个因素对阈值电流的影响会在一定程度上相互抵消。激光器的最大光输出功率则有明显差别，插入GaN波导层厚度为0 nm、250 nm、500 nm、750 nm、1000 nm时的最大光输出功率分别为620 mW、757 mW、756 mW、716 mW、642 mW，即激光器的光输出功率随着插入GaN波导层厚度呈现先增加后减小的趋势。这主要是因为随着插入GaN波导层厚度的增加，激光器的光学损耗逐渐减小，同时载流子注入效率逐渐下降。当插入GaN波导层层厚度小于500 nm时，此时光学损耗对最大光输出功率的影响占主导地位，因而光输出功率随着插入GaN波导层厚度的增加而增加；当插入GaN波导层厚度超过500 nm后，此时载流子注入效率对光输出功率的影响占主导地位，因而光输出功率随着插入GaN波导层厚度的增加而减小。

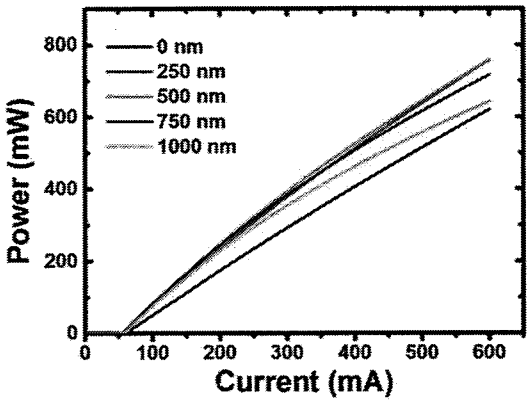



图5.4　当插入GaN波导层厚度变化时，蓝光激光器的模拟光输出功率-电流曲线

## 5.3　上波导层背景载流子浓度对蓝光激光器载流子注入效率的影响

随后，我们将插入GaN波导层的厚度固定为500 nm，并尝试模拟上波导层(包括上InGaN波导层和上GaN波导层)的背景载流子浓度对蓝光激光器载流子注入效率的影响。模拟过程中，背景载流子均为电子，浓度分别为$5\times10^{16}$ $cm^{-3}$、$2\times10^{17}$ $cm^{-3}$、$5\times10^{17}$ $cm^{-3}$、$1\times10^{18}$ $cm^{-3}$。

图5.5.(a)、5.5.(b)是模拟电子、空穴浓度分布，此时的模拟电流密度设置为10 $kA/cm^2$。随着背景载流子浓度的增加，上波导层整体的电子、空穴浓度均有一定增加，其中电子浓度的增幅较为明显。

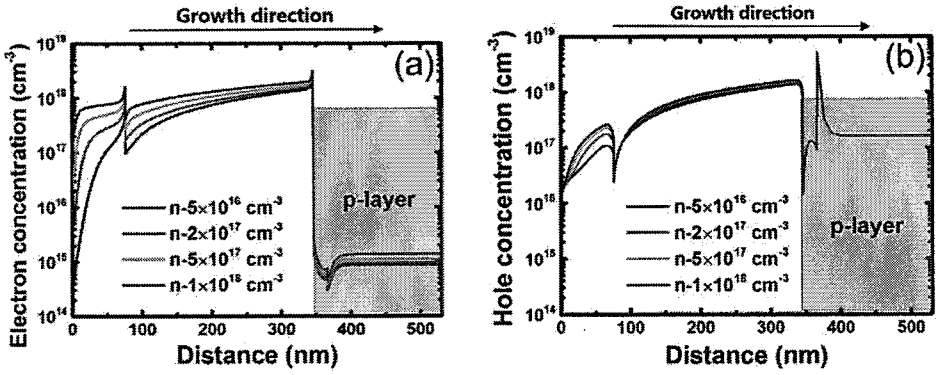



图5.5　当上波导层(包括InGaN上波导层和GaN上波导层)背景载流子浓度变化时，蓝光激光器的模拟(a)电子浓度分布；(b)空穴浓度分布。此时的模拟电流密度设置为10 $kA/cm^2$。

图5.6.(a)是当上波导层背景载流子浓度变化时，在上波导层复合的电流比例随注入电流密度的变化。可以看出，当背景载流子浓度为$5\times10^{16}$ $cm^{-3}$时，在上波导层中复合的电流比例随着注入电流密度不断增加；随着背景载流子浓度的增加，在上波导层中复合的电流比例随注入电流密度变化的趋势逐渐反转；当背景载流

子浓度为$1\times10^{18}$ $cm^{-3}$时，在波导层中复合的电流比例随着注入电流密度不断减小。值得一提的是，背景载流子浓度越高，在上波导层中复合的电流比例越大。

图5.6.(b)是当上波导层背景载流子浓度变化时，越过电子阻挡层的电子电流比例随着注入电流密度的变化。越过电子阻挡层的电子电流比例随注入电流密度不断增大，这一趋势同背景载流子的浓度无关。另一方面，背景载流子浓度越高，越过电子阻挡层的电子电流比例越大。

图5.6.(c)是当上波导层背景载流子浓度变化时，蓝光激光器的载流子注入效率随着注入电流密度的变化。载流子注入效率随着注入电流密度的增加而不断减小。其中上波导层的背景载流子浓度越高，载流子注入效率越小。结合图5.6.(a)、5.6.(b)、5.6.(c)可以看出，越过电子阻挡层的电子电流才是高电流密度(>3 kA/$cm^2$)下蓝光激光器载流子注入效率下降的主要原因。

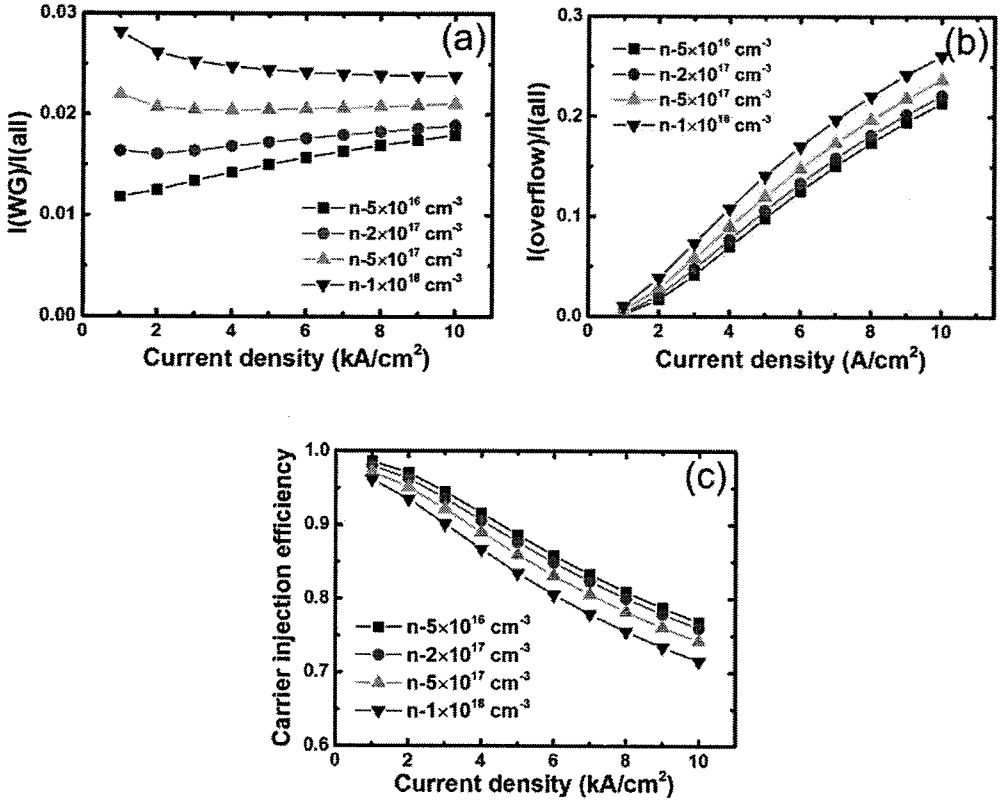



图5.6　当上波导层背景载流子浓度变化时，蓝光激光器 (a)在上波导层复合的电流比例随着注入电流密度的变化；(b)越过电子阻挡层的电子电流比例随着注入电流密度的变化；(c)载流子注入效率随着注入电流密度的变化。

图5.7是当上波导层背景载流子浓度变化时，蓝光激光器的模拟光输出功率-电流曲线。阈值电流基本不随背景载流子浓度而变化，光输出功率则随背景载流子浓度的增加而减小。当背景载流子浓度分别为$5\times10^{16}$ $cm^{-3}$、$2\times10^{17}$ $cm^{-3}$、$5\times10^{17}$ $cm^{-3}$、$1\times10^{18}$ $cm^{-3}$时，蓝光激光器在电流为600 mA时的光输出功率分别为756 mW、

745 mW、724 mW、694 mW。载流子注入效率随背景载流子浓度的上升而下降是最大光输出功率下降的根本原因。

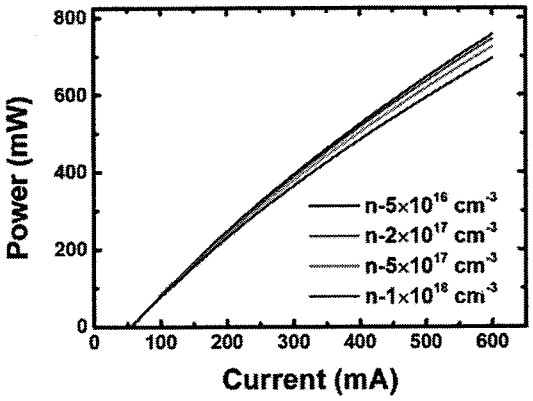



图5.7　当上波导层的背景载流子浓度变化时，蓝光激光器的模拟的光输出功率-电流曲线

## 5.4　提升蓝光激光器载流子注入效率的新结构

如我们在5.2、5.3节所述，上波导层顶部聚集的载流子会诱发上波导层的载流子复合以及电子电流的溢出，从而降低蓝光激光器的载流子注入效率。为了进一步提升蓝光激光器的性能，我们需要优化上波导层结构设计、降低上波导层顶部的载流子浓度。我们将插入GaN波导层厚度为500 nm的蓝光激光器命名为结构A，在此基础上，我们设计了结构B，如图5.8所示。同结构A相比，结构B的特点在于原有的InGaN上波导层和GaN上波导层被替换成了In组分线性梯度变化的InGaN层，其中上波导层的总厚度保持不变，且底部和顶部的In组分分别为2%和0%。图5.8的右侧为结构B的导带能带示意图，此时上波导层的禁带宽度沿生长方向近似线性增加。在电场的驱使作用下，聚集在上波导层顶部的载流子会向上波导层底部移动，最终上波导层顶部的载流子浓度有可能会降低。

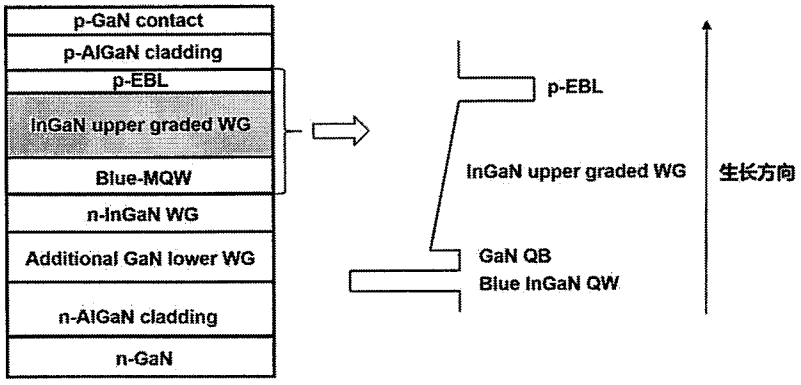



图5.8　蓝光激光器结构B的示意图

图5.9.(a)是结构A、结构B的模拟电子浓度分布，此时的模拟电流密度为10 kA/cm$^2$。同结构A相比，结构B上波导层底部的电子浓度要高于结构A，而上波导层顶部的电子浓度要低于结构A。结构A、结构B的空穴浓度也有类似的分布，如图5.9.(b)所示。综合图5.9.(a)和5.9.(b)，可以看出同结构A相比，结构B有效降低了上波导层顶部的载流子浓度。

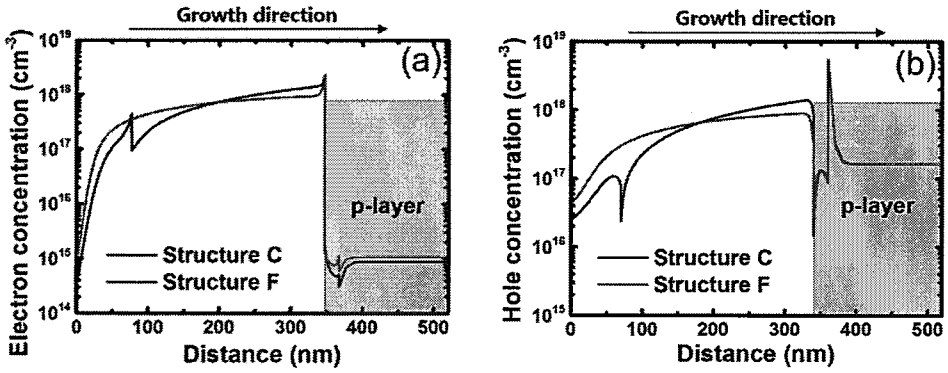



图5.9　结构A、结构B的模拟(a)电子浓度分布；(b)空穴浓度分布。此时的模拟电流密度设置为10 kA/cm$^2$。

图5.10.(a)是结构A、结构B在上波导层复合的电流比例随着注入电流密度的变化。结构A在上波导层复合的电流比例随着注入电流密度的增加而增大，且始终大于0.02；结构B在上波导层复合的电流比例基本不随注入电流密度而变化，且始终小于0.01。图5.10.(b)是结构A、结构B越过电子阻挡层的电子电流比例随着注入电流密度的变化。两种结构越过电子阻挡层的电子电流比例均随着注入电流密度近似线性增加，但结构B越过电子阻挡层的电子电流比例仅有结构A的50%左右。图5.10.(c)是结构A、结构B的载流子注入效率随着注入电流密度的变化。两种结构的载流子注入效率均近似随着注入电流密度的增加而线性下降，但结构B的载流子注入效率下降速度要明显小于结构A的载流子注入效率下降速度。当注入电流密度为1 kA/cm$^2$时，结构A、结构B的载流子注入效率分别是0.99、1.0；当注入电流密度增加到10 kA/cm$^2$时，结构A、结构B的注入效率分别为0.77、0.89，即两者的载流子注入效率分别下降了0.22、0.11。这表明，同常规的上波导结构相比，In组分线性梯度变化的InGaN上波导层能够有效抑制上波导层顶端的载流子积聚，减小在上波导层中复合的电流比例及越过电子阻挡层的电子电流比例，从而提升蓝光激光器的载流子注入效率。

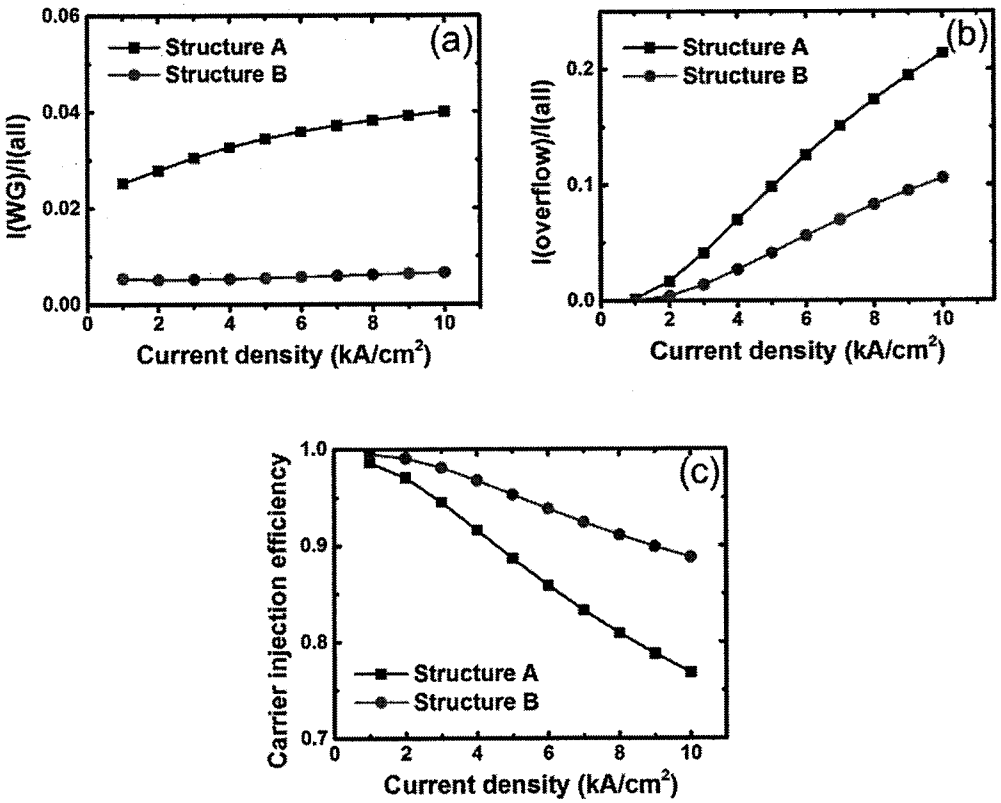



图5.10　(a)结构A、结构B在上波导层复合的电流比例随着注入电流密度的变化；(b)结构A、结构B越过电子阻挡层的电子电流比例随着注入电流密度的变化；(c)结构A、结构B的载流子注入效率随着注入电流密度的变化。

图5.11是结构A、结构B的模拟光输出功率-电流曲线。当电流小于200 mA时，结构A和结构B的光输出功率基本一致；随着电流的继续增加，结构B的光输出功率开始超过结构A的光输出功率；当电流为600 mA时，结构B的光输出功率比结构A的光输出功率高16%。

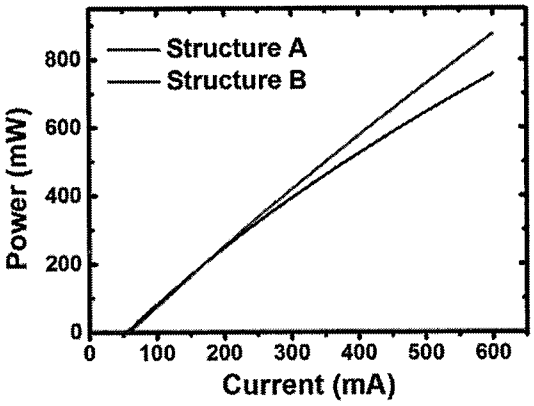



图5.11　结构A、结构B的模拟光输出功率-电流曲线

## 5.5　插入波导层厚度对蓝光激光器性能影响的实验研究

我们使用MOCVD生长了插入GaN波导层厚度分别为0 nm、500 nm、1000 nm的三个蓝光激光器样品，并利用光刻及自对准技术将其制成了激光器芯片。其中，芯片的脊型宽度为10 μm，腔长为600 μm，前、后腔面的反射率分别为34%、95%。

图5.12是三个激光器样品的实验光输出功率-电流曲线图。测试在脉冲条件下进行，其中脉冲频率为10 kHz，脉冲宽度为1 μs。从图中可以看出，三个激光器样品的阈值电流分别为150 mA、200 mA、380 mA，斜率效率则分别为0.65 W/A、0.86 W/A、0.68 W/A，即阈值电流随着插入GaN波导层厚度呈现逐渐增大的趋势，而斜率效率则随着插入GaN波导层厚度呈现先增大后减小的趋势。图5.12中激光器斜率效率随插入波导层厚度的变化趋势同5.2节的模拟结果基本吻合，在一定程度上证实了5.2节模拟结果的准确性。图5.12中阈值电流随插入波导层厚度的变化趋势则同5.2节的模拟结果有一定出入，表明模拟参数仍有待进一步优化。

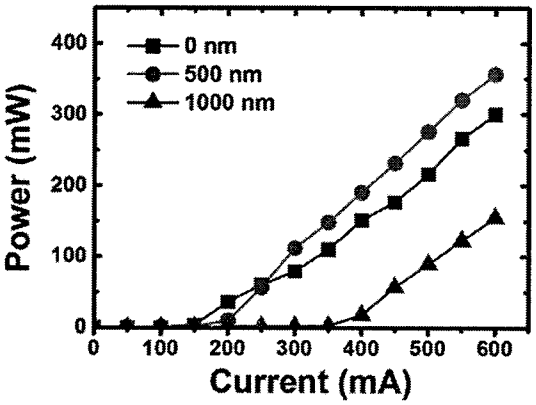



图5.12　插入GaN波导层厚度分别为0 nm、500 nm、1000 nm的蓝光激光器的实验光输出功率-电流曲线图

## 5.5　本章小结

本章我们致力于研究蓝光激光器的波导结构设计，并取得了如下成果：

(1)在GaN基蓝光激光器的InGaN上波导层与p型AlGaN电子阻挡层之间、InGaN下波导层和n型AlGaN下限制层之间插入额外的GaN波导层可以有效降低蓝光激光器的光学损耗，同时也会降低蓝光激光器的载流子注入效率。

(2)随着插入GaN波导层厚度的增加，在上波导层顶部积聚的载流子浓度会不断升高，进而诱发上波导层中载流子的复合以及电子电流的溢出，降低蓝光激光器的载流子注入效率。

(3)随着上波导层背景载流子浓度的增加，上波导层中电子、空穴的整体浓度

会有一定增加，从而增强了上波导层中载流子的复合以及电子电流的溢出，降低了蓝光激光器的载流子注入效率。

(4)采用In组分渐变的InGaN作为上波导层，可以有效降低上波导层顶部的载流子浓度，抑制上波导层中的载流子复合以及电子电流的溢出，提升蓝光激光器的载流子注入效率。

# 参考文献

[1] L. Zhang, D. Jiang, J. Zhu, et al., "Confinement factor and absorption loss of AlInGaN based laser diodes emitting from ultraviolet to green," Journal of Applied Physics, 105, 023104, 2009.

[2] M.-X. Feng, J.-P. Liu, S.-M. Zhang, et al., "Design considerations for GaN-based blue laser diodes with InGaN upper waveguide layer," IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 19, 1500705, 2013.

[3] P. Chen, M. X. Feng, D. S. Jiang, et al., "Improvement of characteristics of InGaN-based laser diodes with undoped InGaN upper waveguide layer," Journal of Applied Physics, 112, 113105, 2012.

# 第六章　AlGaN 的 MOCVD 生长研究

AlGaN通常用作GaN基激光器的光学限制层和电子阻挡层，其质量对GaN基激光器的光学损耗及载流子注入效率有重要影响。本章我们研究了总气流量、生长温度对MOCVD生长AlGaN的影响，阐明了总气流量、生长温度影响AlGaN材料质量的机理，并提出了提升AlGaN材料质量的生长方法。

## 6.1　边界层理论简介

我们在实验过程中使用的AIXTRON设备是一种卧式反应室。生长过程中，气流从反应室顶部的喷淋头喷出，垂直输运到反应室底部托盘，随后沿水平方向排出反应室，如图6.1所示[1]。外延片放置在反应室底部托盘上。反应室底部托盘表面存在一气体薄层，在该薄层中气流速度沿y方向迅速变化，该薄层即为速度边界层。在该边界层以外的气流区域，气流速度沿y方向变化速率较小。基于边界层理论，研究者们可以估算出外延生长速率[2, 3]。

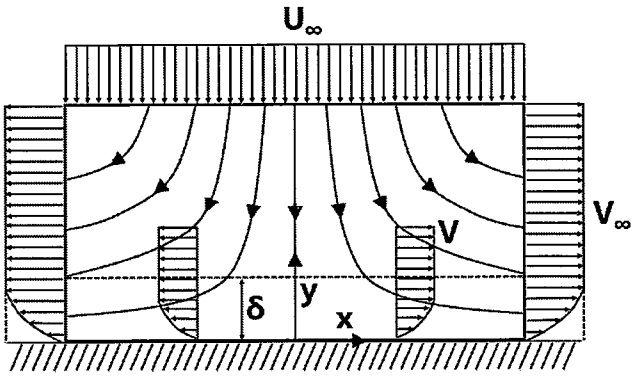



图6.1　卧式反应室的气流示意图[1]

为了提高反应的均匀性，AIXTRON反应室顶部喷淋头到底部托盘的距离通常在11 mm左右，远小于反应室托盘的大小(盛放6×2 inch样品的托盘直径为213 mm)。受限于顶部喷淋头与底部托盘的距离，从喷淋头喷出的垂直气流会迅速转向变成水平气流。假设从喷淋头喷出的气流总量为F，反应室顶部喷淋头到底部托盘之间的距离为h，托盘的直径为d，则反应室水平方向的平均气流速率$v_x$为

$$v_x = \frac{F}{\pi dh} \tag{6.1}$$

反应室垂直方向的平均气流速率$v_y$为

$$v_y = \frac{4F}{\pi d^2} \tag{6.2}$$

结合h和d的大小数值，我们很容易得出以下关系，即

$$v_x > v_y \tag{6.3}$$

接下来我们尝试使用边界层理论对MOCVD的生长速率进行分析。为了简化处理，我们仅考虑反应室底部托盘表面的水平气流，如图6.2所示[1]。在这种情况下，我们可以得到速度边界层厚度δ的与气流速率$v_x$的关系，即

$$\delta \propto [Re]^{-\frac{1}{2}} = \left[\frac{\rho v_x l}{\mu}\right]^{-\frac{1}{2}} \tag{6.4}$$

其中，Re是雷诺数，ρ是气体的密度，l是特征长度，μ是动力黏度系数。

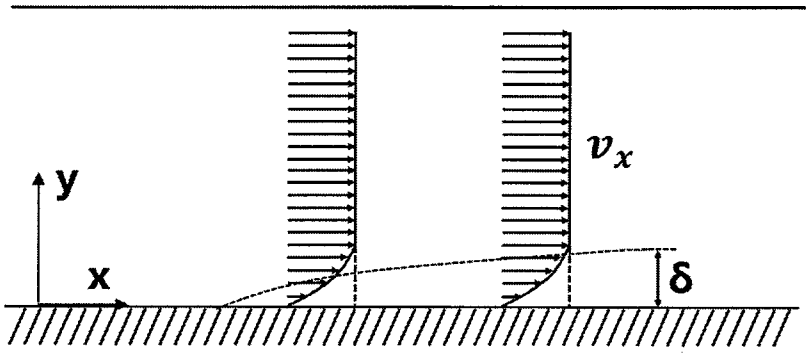



图6.2　反应室底部表面水平气流的示意图[1]

除了速度边界层外，在反应室底部托盘表面另有一层浓度边界层，如图6.3所示。在浓度边界层中，反应物浓度沿y方向迅速变化；在浓度边界层以外，反应物浓度则基本不沿y方向变化。浓度边界层厚度$\delta_c$同速度边界层厚度δ的关系为

$$\frac{\delta_c}{\delta} = \frac{1}{\sqrt[3]{Sc}} = \frac{1}{\sqrt[3]{\frac{\mu}{\rho D}}} \tag{6.5}$$

其中，Sc是施密特准数，D为分子扩散系数。分子扩散系数D与气体压力p、气体密度ρ的关系为

$$D \propto \frac{1}{p} \propto \frac{1}{\rho} \tag{6.6}$$

结合式6.4、6.5、6.6，我们可以得到浓度边界层$\delta_c$的表达式，即

$$\delta_c \propto \frac{1}{\sqrt[3]{\frac{\mu}{\rho D}}} \cdot \left[\frac{\rho v_x l}{\mu}\right]^{-\frac{1}{2}} \propto [\rho v_x]^{-\frac{1}{2}} \propto [p v_x]^{-\frac{1}{2}} \tag{6.7}$$

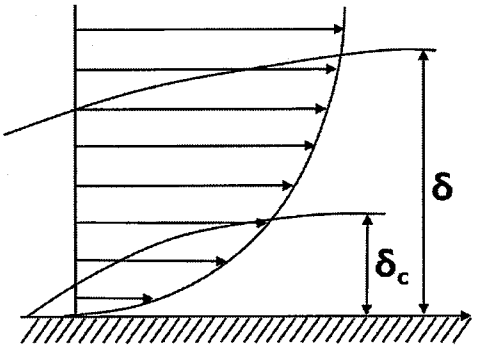



图6.3　浓度边界层的示意图

质量输运区间的特点在于样品表面的反应速率相比于质量输运速率足够快，生长速率同生长温度几乎无关。GaN基材料的MOCVD生长通常在质量输运区间进行。这里我们尝试分析质量输运区间GaN基材料的MOCVD生长速率与气流速率的关系。由于样品表面的反应速率极快，样品表面的反应物浓度接近于零。我们假定浓度边界层中的浓度为线性梯度分布，如图6.4所示，其中y=0位置对应的就是样品表面，$0 < y < \delta_c$区间对应的就是浓度边界层，$y > \delta_c$区间对应的是浓度边界层外的气体空间。浓度边界层外的反应物浓度为$C_0$。

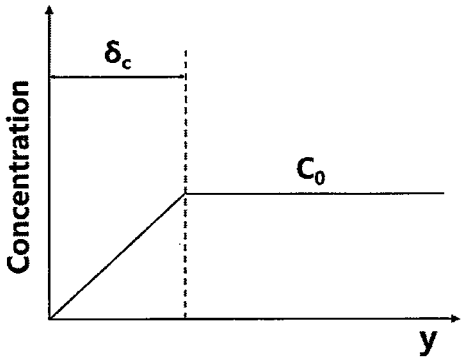



图6.4　反应室底部托盘表面反应物浓度沿y方向的分布

根据芬克第一定律，扩散到托盘外延片表面的反应物通量为

$$J = -D\frac{dc}{dy} = -D\frac{C_0}{\delta_c} \tag{6.8}$$

式6.8中的负号代表反应物沿y轴负方向传播，即反应物从浓度高的区域扩散到浓度低的区域。外延片表面的生长速率同反应物扩散通量的绝对值成正比

$$GR \propto |J| \tag{6.9}$$

结合式6.6、6.7、6.8、6.9我们可以得到

$$GR \propto C_0 \cdot [\frac{v_x}{p}]^{\frac{1}{2}} \tag{6.10}$$

根据式6.10我们不难看出，在反应室压力、反应物浓度保持不变的前提下，增加气体流速会导致外延片表面的生长速率增加。

为了验证式6.10的结果，我们生长了两个GaN样品，其生长条件如表6.1所示。同GaN-1相比，GaN-2生长时反应室的总气流量增加到原有的三倍，同时反应物的流量增加到原有的$\sqrt{3}$倍。这意味着，GaN-2生长时托盘表面气体流速$v_x$增加到原有的3倍，同时反应物浓度减小到原有的$1/\sqrt{3}$倍。根据式6.10，两个样品的生长速率应当相同。

表6.1　两个GaN样品的生长条件

| 样品 | 反应室压力 (mbar) | 总气流量 (L/min) | TMGa (μmol/min) | $NH_3$ (μmol/min) |
|---|---|---|---|---|
| GaN-1 | 266 | 20 | 231.4 | 258759 |
| GaN-2 | 266 | 20×3 | 231.4×$\sqrt{3}$ | 258759×$\sqrt{3}$ |

图6.5.(a)和6.5.(b)分别是GaN-1、GaN-2的AFM形貌图。可以看出两个样品的表面均呈现清晰的台阶形貌，其表面粗糙度分别为0.176 nm、0.168 nm，表明在不同总气流量下均能生长出高质量的GaN样品。根据MOCVD的生长速率监控系统得知两个样品的生长速率分别为0.6362 nm/s、0.7458 nm/s，即GaN-2的生长速率比GaN-1的生长速率高17%。尽管有一定偏差，但实验生长速率同式6.10的计算结果基本吻合，表明了边界层理论在外延生长方面的适用性。

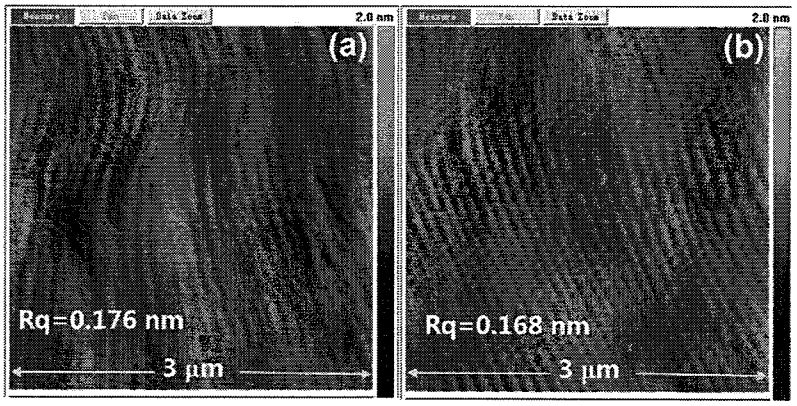



图6.5　(a) GaN-1；(b) GaN-2的AFM形貌图

## 6.2　总气流量、生长温度对 AlGaN 单层 PL 光学性质的影响

为了研究总气流量、生长温度对AlGaN单层PL光学性质的影响，我们使用MOCVD生长了两组样品，分别为Group A和Group B。两组样品均生长在蓝宝石

衬底上，其结构包括4 μm掺杂硅的GaN层、1 μm非故意掺杂的GaN层以及掺杂硅的$Al_yGa_{1-y}N/Al_xGa_{1-x}N/Al_yGa_{1-y}N$异质结。其中，AlGaN层的生长速率均为0.1 nm/s，x、y的大小分别为0.07±0.01、0.32±0.03(基于XRD的测试结果)。在生长过程中，Group A、Group B的载气均为$H_2$，V/III比均保持一致，总气流量则分别为20 L/min、60 L/min。Group B的TMGa、TMAl、$NH_3$流量在Group A的流量基础上根据式6.10进行微调。Group A、Group B的GaN层、$Al_yGa_{1-y}N$层的生长温度始终保持恒定，而$Al_xGa_{1-x}N$层的生长温度则在不断变化。典型的Group A、Group B的$Al_xGa_{1-x}N$层的生长条件及测试结果如表6.2所示。为了屏蔽背景载流子对PL强度的影响，$Al_xGa_{1-x}N$和$Al_yGa_{1-y}N$层均采用硅掺杂以钉扎费米能级，其中硅掺杂浓度为$1\times10^{18}$ $cm^{-3}$。

表6.2　典型的Group A、Group B的$Al_xGa_{1-x}N$层的生长条件及测试结果

| $Al_xGa_{1-x}N$ | 总气流量 (L/min) | 生长温度 (°C) | $NH_3$ (μmol/min) | TMAl (μmol /min) | TMGa (μmol /min) | Al 组分 (%) | 生长速率 (nm/s) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **Group A** | 20 | 958 | 89227 | 3.9 | 53.1 | 6.3 | 0.10 |
| **Group B** | 60 | 954 | 199646 | 5.5 | 100 | 7.1 | 0.11 |

图6.6是Group A、Group B的$Al_xGa_{1-x}N$层的Al并入效率同生长温度的关系。Al并入效率的计算公式为$x/[2F_{TMAl}/(2F_{TMAl}+F_{TMGa})]$，其中x是$Al_xGa_{1-x}N$单层中的Al组分，$F_{TMAl}$、$F_{TMGa}$分别是TMAl、TMGa的摩尔流量。可以看出，两组样品的Al并入效率均随着生长温度的增加呈现指数上升的趋势，这是因为在高温时Al原子相对于Ga原子具有优先并入的趋势[4-6]。相比于Group A，Group B具有更高的Al并入效率，这表明增加总气流量有效抑制了TMAl与$NH_3$之间的预反应[7-13]，其原因主要有两个方面：一是随着总气流量的增加，气体流速加快，TMAl和$NH_3$由喷淋头输运到托盘外延片表面所需的时间减少，因而TMAl和$NH_3$之间发生预反应的时间减少；二是随着总气流量的增加，TMAl和$NH_3$的浓度降低，在输运过程中相互碰撞的概率减小，因而TMAl与$NH_3$之间预反应的速率减小。

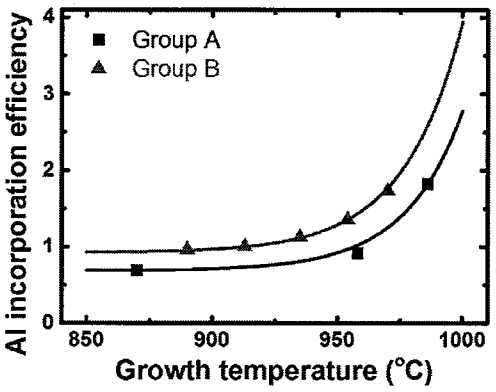



图6.6　$Al_xGa_{1-x}N$层的Al并入效率同生长温度的关系

我们使用波长为325 nm的He-Cd激光来激发两组样品，其中$Al_yGa_{1-y}N$层不会吸收波长为325 nm的激光。$Al_xGa_{1-x}N$层则能够吸收波长为325 nm的激光并产生电子-空穴对。由于$Al_yGa_{1-y}N$层对电子-空穴对的限制作用，绝大多数电子-空穴对均只能在$Al_xGa_{1-x}N$层重新复合发光。一部分325 nm的激光能够穿过$Al_yGa_{1-y}N/Al_xGa_{1-x}N/Al_yGa_{1-y}N$异质结，并被下方的GaN层吸收，从而诱导GaN层内的复合发光。为了抑制GaN层中的复合发光，异质结下方1 μm厚度的GaN采用了非故意掺杂以降低GaN层内的载流子浓度。

图6.7.(a)是当$Al_xGa_{1-x}N$生长温度变化时，Group A的PL光谱。当$Al_xGa_{1-x}N$生长温度为870 °C时，Group A的PL光谱中能明显看到三个峰，从左至右分别对应$Al_xGa_{1-x}N$带边发光峰、GaN带边发光峰以及黄光峰[14-20]。随着$Al_xGa_{1-x}N$生长温度的增加，$Al_xGa_{1-x}N$带边发光峰的强度增加，黄光发光峰的强度逐渐降低。当Group A生长温度由870 °C增加到958 °C时，黄光发光峰的强度降低了约一个数量级，这表明黄光峰主要来自于$Al_xGa_{1-x}N$层。值得一提的是，当$Al_xGa_{1-x}N$生长温度高于958 °C时，GaN带边发光峰消失了。这是因为当$Al_xGa_{1-x}N$生长温度高于958 °C后，GaN带边发光峰的强度远小于$Al_xGa_{1-x}N$带边发光峰的强度，因而GaN带边发光峰融入到了$Al_xGa_{1-x}N$带边发光峰之中。

图6.7.(b)是当$Al_xGa_{1-x}N$生长温度变化时，Group B的PL光谱。同Group A的PL结果类似，当$Al_xGa_{1-x}N$生长温度不超过913 °C时，光谱中能明显看到三个发光峰，即$Al_xGa_{1-x}N$带边发光峰、GaN带边发光峰以及黄光峰；当$Al_xGa_{1-x}N$生长温度高于913 °C后，光谱中仅能看到两个发光峰，即$Al_xGa_{1-x}N$带边发光峰和黄光峰。其中，$Al_xGa_{1-x}N$带边发光峰的强度随着生长温度的增加而增强，而黄光峰的强度随着生长温度的增加而减小。

图6.7.(c)是Group A、Group B的$Al_xGa_{1-x}N$带边发光峰的积分强度随着生长温度的变化关系。值得一提的是，这里的积分强度按照325 nm激光在$Al_xGa_{1-x}N$层中吸收的比例进行了归一化，其中$Al_xGa_{1-x}N$层对325 nm激光的吸收系数[21-23]设置为

$10^5$ $cm^{-1}$。归一化的积分强度随着$Al_xGa_{1-x}N$生长温度的变化曲线明显可以分成两段，其中Group A、Group B的曲线拐点位置对应的$Al_xGa_{1-x}N$生长温度分别为929 °C、935 °C。同Group A相比，Group B归一化的积分强度要低一些，尤其是当$Al_xGa_{1-x}N$生长温度低于929 °C时。

图6.7.(d)是Group A、Group B的黄光峰的积分强度随着$Al_xGa_{1-x}N$生长温度的变化关系，这里的积分强度也按照325 nm激光在$Al_xGa_{1-x}N$层中吸收的比例进行了归一化。Group A、Group B的黄光峰的积分强度均随着$Al_xGa_{1-x}N$生长温度线性下降，且Group B归一化的黄光峰积分强度要明显高于Group A的黄光峰积分强度。

结合图6.7.(c)和6.7.(d)，我们不难看出，降低$Al_xGa_{1-x}N$生长温度、增加反应室总气流量，会减弱$Al_xGa_{1-x}N$带边发光峰的积分强度，同时增强$Al_xGa_{1-x}N$层中黄光峰的积分强度。

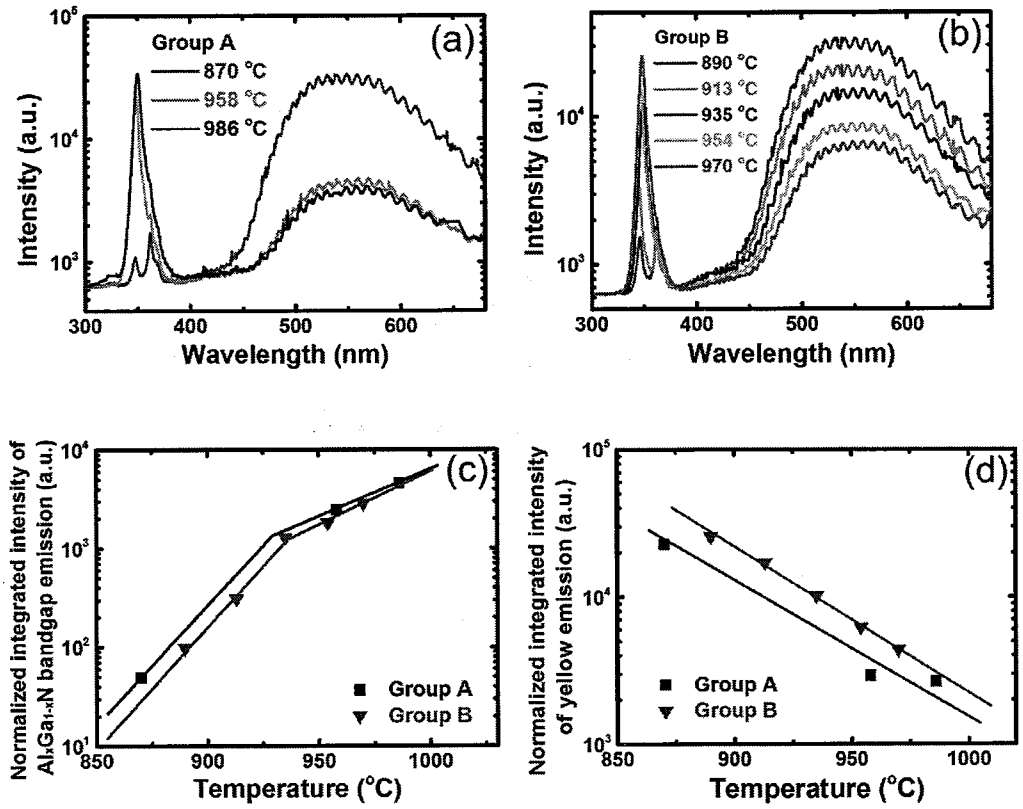



图6.7　(a) $Al_xGa_{1-x}N$生长温度变化时，Group A的的PL光谱；(b) $Al_xGa_{1-x}N$生长温度变化时，Group B的的PL光谱；(c) Group A、Group B的$Al_xGa_{1-x}N$带边发光峰的积分强度随着$Al_xGa_{1-x}N$生长温度的变化关系；(d) Group A、Group B的黄光峰的积分强度随着$Al_xGa_{1-x}N$生长温度的变化关系。

## 6.3　碳浓度对 AlGaN 单层 PL 光学性质的影响

为了找出$Al_xGa_{1-x}N$层的光学质量依赖于生长温度、总气流量的原因，我们对

不同生长温度、总气流量下得到的$Al_xGa_{1-x}N$样品进行了SIMS测试。图6.8.(a)是Group A、Group B的$Al_xGa_{1-x}N$样品中的碳浓度同生长温度的关系。可以看出两组样品的碳浓度同生长温度的曲线均可以分成两段，其中Group A、Group B的两段曲线拐点位置对应的生长温度分别为934 °C、935 °C。这两个拐点对应的生长温度同图6.7.(c)拐点对应的生长温度基本吻合。这里我们推测碳浓度直接影响$Al_xGa_{1-x}N$带边发光峰的积分强度。

图6.8.(b)是Group A、Group B所有样品$Al_xGa_{1-x}N$带边发光峰的积分强度同碳浓度的关系。可以看出，$Al_xGa_{1-x}N$带边发光峰的积分强度随着碳浓度的增加呈现线性下降的趋势。这一趋势同总气流量、生长温度无关。这表明，不断增加的碳浓度才是导致$Al_xGa_{1-x}N$带边发光峰的积分强度下降的根本原因。

图6.8.(c)是Group A、Group B所有样品黄光峰的积分强度同碳浓度的关系。可以看出，黄光峰的积分强度随着碳浓度的变化曲线可以分成两段，其中拐点位置对应的碳浓度为$1.7\times10^{17}$ $cm^{-3}$。结合图6.8.(a)可知，该拐点碳浓度对应的Group A、Group B的生长温度分别为906 °C、926 °C。

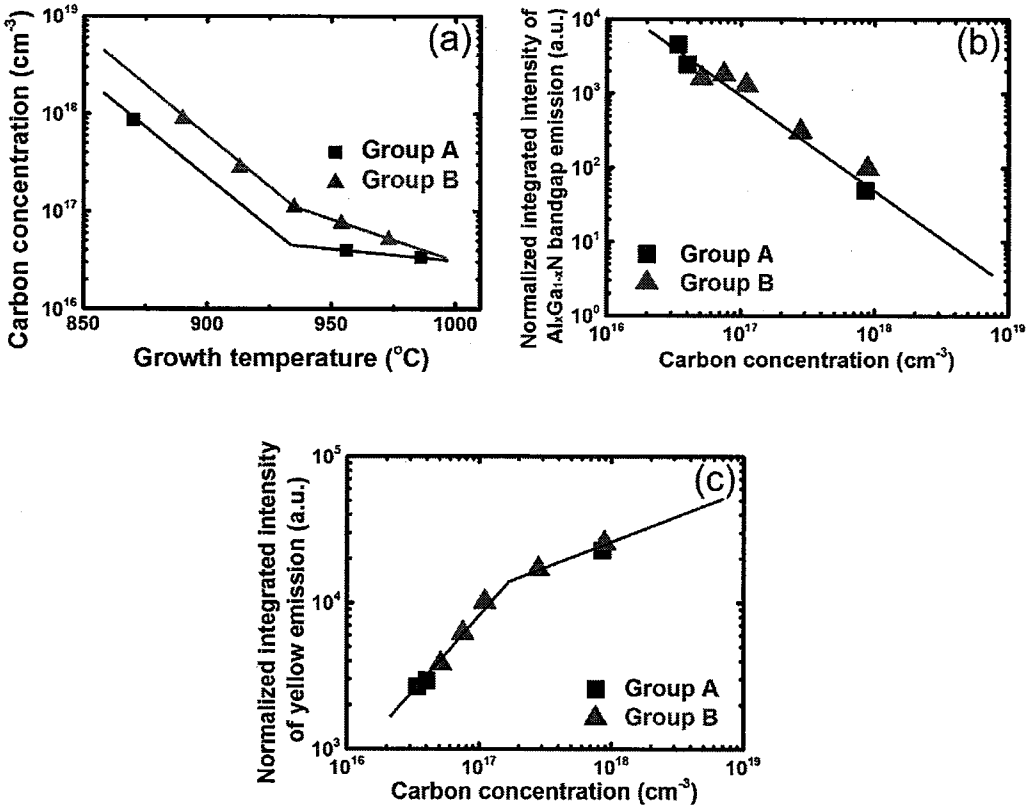



图6.8　(a) Group A、Group B中$Al_xGa_{1-x}N$层的碳浓度随着生长温度的变化关系；(b) Group A、Group B所有样品$Al_xGa_{1-x}N$带边发光峰的积分强度同碳浓度的关系；(c) Group A、Group B所有样品黄光峰的积分强度同碳浓度的关系。

有报道表明，从$NH_3$和$AsH_3$热分解产生的H原子[24-26]可以同外延片表面吸附

的$CH_3$反应生成易于从表面脱附的$CH_4$，从而降低外延层的碳浓度。其中，生长温度越高，$NH_3$分解产生H的比例越大，外延层碳浓度越低[24]。

从表6.2中我们可以看出，为了保持$Al_xGa_{1-x}N$的生长速率不变，Group B的$NH_3$流量增加到Group A的$NH_3$流量的2.2倍，同时总气流量增加到Group B总气流量的3倍。这表明，Group B生长时的$NH_3$浓度相对于Group A的$NH_3$浓度降低了26%。随着总气流量的增加，为了保持$Al_xGa_{1-x}N$的生长速率不变，$NH_3$浓度不断降低，从而降低了外延层表面可用的H原子浓度，增加了$Al_xGa_{1-x}N$中并入的碳浓度。

增加反应室压力可以有效提高反应物浓度，抑制AlGaN生长时碳的并入，但是增加反应室压力会导致TMAl与$NH_3$之间的预反应增强[27]。这里我们提出一种改进的MOCVD生长AlGaN的方案：在原有的生长条件下，将总气流量增加到原有的M倍(M>1)，同时反应物流量、反应室压力均增加到原有的$\sqrt{M}$倍。在这种情况下，材料生长速率保持不变，而反应室内部的气流速率增加到原有的M倍且反应物浓度保持不变，因而能够在不增加碳并入的前提下抑制TMAl与$NH_3$的预反应。

## 6.4　本章小结

本章我们主要研究了总气流量、生长温度对MOCVD生长AlGaN的影响，并取得了以下成果：

(1)在反应室压力、反应物浓度保持不变的前提下，随着总气流量的增加，反应室内气流速率加快，MOCVD生长的速率增加；

(2)在$Al_xGa_{1-x}N$生长速率不变的前提下，随着生长温度的降低，$NH_3$分解产生H的比例减小，$Al_xGa_{1-x}N$中并入的碳浓度增加；

(3)在$Al_xGa_{1-x}N$生长速率不变的前提下，随着总气流量的增加，$NH_3$的浓度会逐渐下降，由$NH_3$分解产生的H原子浓度减小，最终导致$Al_xGa_{1-x}N$中并入的碳浓度增加；

(4)随着$Al_xGa_{1-x}N$层中的碳浓度增加，$Al_xGa_{1-x}N$带边发光峰的强度降低、黄光发光峰的强度增加。

# 参考文献


[1] G. B. Stringfellow, Organometallic Vapor-Phase Epitaxy: Theory and Practice. New York: Academic Press, 1999.

[2] H. Heinecke, E. Veuhoff, N. Pütz, et al., "Kinetics of GaAs growth by low pressure MO-CVD," Journal of electronic materials, 13, 815-830, 1984.

[3] S. K. Ghandhi and R. J. Field, "A re-examination of boundary layer theory for a horizontal CVD reactor," Journal of Crystal Growth, 69, 619-622, 1984.

[4] F. Zhang, M. Ikeda, S. Zhang, et al., "Thermal etching rate of GaN during MOCVD growth interruption in hydrogen and ammonia ambient determined by AlGaN/GaN superlattice structures," Journal of Crystal Growth, 475, 93-96, 2017.

[5] M. Dauelsberg, D. Brien, H. Rauf, et al., "On mechanisms governing AlN and AlGaN growth rate and composition in large substrate size planetary MOVPE reactors," Journal of Crystal Growth, 393, 103-107, 2014.

[6] D.-C. Lu and S. Duan, "Quasi-thermodynamic analysis of MOVPE of AlGaN," Journal of Crystal Growth, 208, 73-78, 2000.

[7] U. Rossow, D. Fuhrmann, T. Litte, et al., "Aluminum incorporation in $Al_xGa_{1-x}N$-layers and implications for growth optimization," Journal of Crystal Growth, 298, 361-366, 2007.

[8] D.-B. Li, M. Aoki, T. Katsuno, et al., "Influence of growth conditions on Al incorporation to $Al_xGa_{1-x}N$ (x>0.4) grown by MOVPE," Journal of Crystal Growth, 298, 372-374, 2007.

[9] D. G. Zhao, J. J. Zhu, D. S. Jiang, et al., "Parasitic reaction and its effect on the growth rate of AlN by metalorganic chemical vapor deposition," Journal of Crystal Growth, 289, 72-75, 2006.

[10] K. Matsumoto and A. Tachibana, "Growth mechanism of atmospheric pressure MOVPE of GaN and its alloys: gas phase chemistry and its impact on reactor design," Journal of Crystal Growth, 272, 360-369, 2004.

[11] F. Nakamura, S. Hashimoto, M. Hara, et al., "AlN and AlGaN growth using low-pressure metalorganic chemical vapor deposition," Journal of crystal growth, 195, 280-285, 1998.

[12] O. Yasuo, Y. Hiroaki, and S. Rie, "Growth of High-Quality AlN, GaN and AlGaN with Atomically Smooth Surfaces on Sapphire Substrates," Japanese Journal of Applied Physics, 36, L1565, 1997.

[13] C. H. Chen, H. Liu, D. Steigerwald, et al., "A study of parasitic reactions between $NH_3$ and TMGa or TMAI," Journal of Electronic Materials, 25, 1004-1008, 1996.

[14] M. A. Reshchikov, D. O. Demchenko, A. Usikov, et al., "Carbon defects as sources of the

green and yellow luminescence bands in undoped GaN," Physical Review B, 90, 2014.

[15] S. Ito, T. Nakagita, N. Sawaki, et al., "Nature of yellow luminescence band in GaN grown on Si substrate," Japanese Journal of Applied Physics, 53, 2014.

[16] D. Demchenko, I. Diallo, and M. Reshchikov, "Yellow Luminescence of Gallium Nitride Generated by Carbon Defect Complexes," Physical review letters, 110, 087404, 2013.

[17] J. L. Lyons, A. Janotti, and C. G. Van de Walle, "Carbon impurities and the yellow luminescence in GaN," Applied Physics Letters, 97, 152108, 2010.

[18] X.-L. Hu, J.-Q. Li, Y.-F. Zhang, et al., "Theoretical analysis on yellow emission of gallium nitride with vacancy defects or impurities," Theoretical Chemistry Accounts, 123, 521-525, 2009.

[19] M. A. Reshchikov and H. Morkoç, "Luminescence properties of defects in GaN," Journal of Applied Physics, 97, 061301, 2005.

[20] A. Castaldini, A. Cavallini, and L. Polenta, "Yellow and green bands in GaN by resolved spectral photoconductivity," Applied Physics Letters, 87, 122105, 2005.

[21] J. Muth, J. D. Brown, M. Johnson, et al., "Absorption coefficient and refractive index of GaN, AlN and AlGaN alloys," in MRS Proceedings Cambridge Univ Press, 537, G5. 2, (1998).

[22] G. Yu, G. Wang, H. Ishikawa, et al., "Optical properties of wurtzite structure GaN on sapphire around fundamental absorption edge (0.78-4.77 eV) by spectroscopic ellipsometry and the optical transmission method," Applied Physics Letters, 70, 3209-3211, 1997.

[23] J. F. Muth, J. H. Lee, I. K. Shmagin, et al., "Absorption coefficient, energy gap, exciton binding energy, and recombination lifetime of GaN obtained from transmission measurements," Applied Physics Letters, 71, 2572-2574, 1997.

[24] D. D. Koleske, A. E. Wickenden, R. L. Henry, et al., "Influence of MOVPE growth conditions on carbon and silicon concentrations in GaN," Journal of Crystal Growth, 242, 55-69, 2002.

[25] T. F. Kuech and J. M. Redwing, "Carbon doping in metalorganic vapor phase epitaxy," Journal of Crystal Growth, 145, 382-389, 1994.

[26] T. F. Kuech and E. Veuhoff, "Mechanism of carbon incorporation in MOCVD GaAs," Journal of Crystal Growth, 68, 148-156, 1984.

[27] T. Aiqin, L. Jianping, I. Masao, et al., "Conductivity enhancement in AlGaN:Mg by suppressing the incorporation of carbon impurity," Applied Physics Express, 8, 051001, 2015.

# 第七章　全文总结与展望

## 7.1　本论文的研究成果

本论文致力于研究GaN基激光器的光学损耗和载流子注入效率，并取得了如下成果：

1、研究了GaN基激光器外延片和器件的光学损耗。首先，搭建了一套测试GaN基激光器外延片光学损耗的测试系统，通过理论分析发现该系统的测试误差小于1 $cm^{-1}$。利用该测试系统实验研究了GaN基激光器的光学损耗来源，证实了p型层中激活的Mg受主的吸收是激光器光学损耗的主要来源，但未激活的Mg受主的光吸收系数不大。仿真计算及实验结果均表明，降低p型层与光场的交叠可以有效降低GaN基激光器的光学损耗。其次，使用Hakki-Paoli法研究了GaN基激光器器件的光学损耗，发现外延片与器件的光学损耗测量值有一定的差异，并分析了造成这种差异的原因。

2、研究了c面GaN基绿光激光器的空穴输运特性。针对绿光激光器空穴输运特性存在的争议，我们进行了仿真计算与实验研究，研究结果表明，空穴能够从绿光双量子阱中溢出，从而降低绿光激光器的载流子注入效率。在绿光双量子阱的下方掺杂硅可以有效抑制空穴从绿光双量子阱中的溢出，其物理机制为硅掺杂增加了空穴输运的势垒。

3、研究了绿光激光器InGaN波导层中的载流子复合及抑制方法。通过模拟计算发现，在最后一个GaN量子垒层和InGaN上波导层之间存在一个势垒，这个势垒会阻碍载流子的输运，导致载流子在InGaN上波导层中积聚并复合，降低绿光激光器的载流子注入效率。当InGaN上波导层的In组分高于4%时，载流子在上波导层内的复合不可忽略不计。适当降低InGaN上波导层的In组分可以有效抑制上波导层的载流子复合，减小绿光激光器的阈值电流。实验结果同模拟计算结果吻合的很好。

4、研究了GaN基蓝光激光器的波导结构设计。首先，在InGaN上(下)波导层与AlGaN上(下)限制层之间插入额外的GaN上(下)波导层可以有效降低激光器的光学损耗。其次，随着插入波导层厚度的增加、上波导层背景载流子浓度的上升，上波导层的载流子复合以及越过电子阻挡层的电子电流会不断增大，从而降低蓝光激光器的载流子注入效率。最后，采用

In组分渐变的InGaN作为上波导层可以有效抑制上波导层的载流子复合以及越过电子阻挡层的电子电流，提升蓝光激光器的载流子注入效率。

5、研究了总气流量、生长温度对MOCVD生长AlGaN的影响。在反应室压力、反应物浓度保持不变的前提下，随着总气流量的增加，反应室内气流速率加快，MOCVD生长的速率增加。在AlGaN生长速率不变的前提下，随着总气流量的增加、生长温度的降低，气相中由$NH_3$分解产生的H原子浓度减少，AlGaN层中并入的碳浓度增加，最终导致AlGaN带边发光峰的强度降低，黄光发光峰的强度增加。

## 7.2　不足之处与展望

基于本论文的研究，我们对GaN基激光器的光学损耗及载流子注入效率有了比较深入的了解，但仍然存在一些不足和需要改进的地方：

1、自主搭建的光学损耗测量系统仍有一定限制，即只有在GaN自支撑衬底上生长的GaN基激光器外延片才能使用该系统进行损耗测试。但是GaN自支撑衬底的价格高，这在一定程度上限制了该测试系统的应用。有必要对该测试系统做进一步的调节，使其能够测量在蓝宝石衬底上生长的GaN基激光器外延片的光学损耗。

2、GaN基激光器的多横模干扰很难完全消除，因而使用Hakki-Paoli法计算的光学损耗同实际值始终有一定偏差。有必要使用其他的光学损耗测试方法，如变腔长法，对GaN基激光器器件的光学损耗做进一步的验证。

3、在绿光激光器有源区的下方插入重硅掺杂层可以有效抑制空穴从有源区中的溢出，提高载流子注入效率。但是插入重硅掺杂层也可能会引入缺陷，影响上方绿光量子阱的质量。为了进一步优化绿光激光器的性能，重硅掺杂层的组分、掺杂浓度、厚度以及插入的具体位置仍有待系统性的实验研究。