

行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

氮基藍光雷射二極體之理論研究

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC92-2215-E-009-049-

執行期間：92年08月01日至93年07月31日

執行單位：國立交通大學電子工程學系

計畫主持人：顏順通

報告類型：精簡報告

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 93 年 11 月 2 日

# 行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告

## 氮基藍光雷射二極體之理論研究

計畫編號：NSC92-2215-E009-049

執行期限：92年8月1日至93年7月31日

主持人：顏順通

計畫參與人員：黃士哲、王德賢、鄭璧如、簡立欣、鐘佩鋼、陳俞諶、徐信佑、  
陳正國

### 一、 中文摘要

本研究利用  $6 \times 6$  的  $k \cdot p$  Hamiltonian, 考慮應力效應之下, 計算不同結構 GaN/InGaN 量子井的能態結構以及隨結構變化溢出量子井的載子比例。發現溢出的載子數量與量子井、confining layer 的寬度跟能量深度有很大的相關。同時, 考慮溢出載子的狀況時, 應該注意能量結構中 conduction subband 與 valence subband 分別擁有不同的 effective mass 與 subband 的間距。

**關鍵詞：**over flow、GaN LD、leakage current

#### Abstract

In this research, we investigate the over flow carriers in the confining layer and the guiding layer of a GaN/InGaN LD structure. The calculations are based on the  $6 \times 6$   $k \cdot p$  Hamiltonian with strain effect taken into account. We found that the length and the energy depth of the well and confining layer strongly influence the number of over flow carriers. At the same time, the energy differences among the conduction subbands and the differences among the valence subbands are important effects that influence the over flow carriers.

### 二、 目的

自 Nakamura 發表第一顆 GaN 藍光雷射之

後[1], 世界上很多研究團隊在此領域投注大量人力與物力, 期望製造出合乎量產需要的 LD 結構。但目前為止, 高臨界電流、電壓與其產生的高熱問題仍然無法得到理想的解決。

為了解決此問題, 降低漏電流是一個重要可行的辦法。漏電流主要的兩個來源是高能量載子受到電場推動造成的電流, 以及侷限層跟量子井裡產生的 spontaneous emission current。觀察溢出量子井的載子隨結構的變化將有助於調整結構尺寸以解決漏電流問題。

### 三、 研究報告內容

#### 3-1 理論架構

##### 3-1-1. 塊材結構

假設長晶方向是沿著 c 軸成長。

##### 3-1-1-1. conduction band

conduction band 利用 parabolic band model 來近似。effective-mass Hamiltonian 可以寫成：

$$H^c(\mathbf{k}_t, k_z) = \left(\frac{\hbar^2}{2}\right) \left(\frac{k_t^2}{m_t^*} + \frac{k_z^2}{m_z^*}\right) + E_c^0(z) + P_{ce}(z)$$

其中  $\mathbf{k}_t = -i\nabla_t$ ,  $k_z = -i\frac{\partial}{\partial z}$ 。  $m_t^*$  以及  $m_z^*$  分別是垂直與平行長晶方向的有效質量。 $E_c^0(z)$  是沒有 strain 時的 conduction band edge。  $P_{ce}$  是 hydrostatic energy shift。

### 3-1-1-2. valence band

valence band 的  $6 \times 6$  effective-mass Hamiltonian 如下 [2] :

$$H = \begin{bmatrix} F & -K^* & -H^* & 0 & 0 & 0 \\ -K & G & H & 0 & 0 & \Delta \\ -H & -H^* & \lambda & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & F & -K & H \\ 0 & 0 & \Delta & -K^* & G & -H^* \\ 0 & \Delta & 0 & H^* & -H & \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |u_1\rangle \\ |u_2\rangle \\ |u_3\rangle \\ |u_4\rangle \\ |u_5\rangle \\ |u_6\rangle \end{bmatrix}$$

$$F = \Delta_1 + \Delta_2 + \lambda + \theta, \quad G = \Delta_1 - \Delta_2 + \lambda + \theta, \quad \Delta = \sqrt{2}\Delta_3$$

$$\lambda = \frac{\hbar^2}{2m_0} [A_1 k_z^2 + A_2 (k_x^2 + k_y^2)] + D_1 \varepsilon_{zz} + D_2 (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})$$

$$\theta = \frac{\hbar^2}{2m_0} [A_3 k_z^2 + A_4 (k_x^2 + k_y^2)] + D_3 \varepsilon_{zz} + D_4 (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})$$

$$K = \frac{\hbar^2}{2m_0} A_5 (k_x + ik_y)^2 + D_5 (\varepsilon_{xx} + 2i\varepsilon_{xy} - \varepsilon_{yy})$$

$$H = \frac{\hbar^2}{2m_0} A_6 (k_x + ik_y) k_z + D_6 (\varepsilon_{zx} + i\varepsilon_{yz})$$

其中,  $\Delta_1$  為 crystal-field split energy,  $\Delta_2$  以及  $\Delta_3$  為考慮 spin-orbit interaction 造成的量。  $k_i$  是 wave vector,  $\varepsilon_{ij}$  是 strain tensor 的 element。  $A_i$  是 effective-mass parameter,  $D_i$  是 deformation potential。

將此 Hamiltonian 用 unitary transformation 做 block diagonalization 之後可得到 :

$$H = \begin{bmatrix} F & K_t & -iH_t & 0 & 0 & 0 \\ K_t & G & \Delta - iH_t & 0 & 0 & 0 \\ iH_t & \Delta + iH_t & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & F & K_t & iH_t \\ 0 & 0 & 0 & K_t & G & \Delta + iH_t \\ 0 & 0 & 0 & -iH_t & \Delta - iH_t & \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \\ |3\rangle \\ |4\rangle \\ |5\rangle \\ |6\rangle \end{bmatrix}$$

$$F = \Delta_1 + \Delta_2 + \lambda + \theta, \quad G = \Delta_1 - \Delta_2 + \lambda + \theta, \quad \Delta = \sqrt{2}\Delta_3$$

$$\lambda = \frac{\hbar^2}{2m_0} [A_1 k_z^2 + A_2 (k_x^2 + k_y^2)] + D_1 \varepsilon_{zz} + D_2 (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})$$

$$\theta = \frac{\hbar^2}{2m_0} [A_3 k_z^2 + A_4 (k_x^2 + k_y^2)] + D_3 \varepsilon_{zz} + D_4 (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})$$

$$K_t = \frac{\hbar^2}{2m_0} A_5 (k_x^2 + k_y^2)$$

$$H_t = \frac{\hbar^2}{2m_0} A_6 \sqrt{(k_x^2 + k_y^2)} k_z$$

### 3-1-2. 多層結構

將電子的波函數表示如下 :

$$\Psi = \sum_j^6 F_j |j\rangle$$

其中  $F_j$  為 envelop 函數,  $|j\rangle$  為 basis 函數。原 schodinger 方程式可進一步推導成一矩陣函數 :

$$\sum_j^6 H_{ij} F_j = E F_i$$

利用  $M$  組 sin 函數為基底, 將 envelope 展開 :

$$F_j(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2}{V}} e^{ik_x x + ik_y y} \sum_{m=1}^M c_m \sin\left(\frac{m\pi}{L} z\right)$$

$j$  代表對應的塊材 basis 函數  $|j\rangle$ ,  $L$  為邊界寬度,  $\sqrt{2/V}$  為歸一化係數。schodinger 方程式最後變成 :

$$\sum_{j,m}^{6,M} \left[ \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi}{L} z\right) H_{i,j} \sin\left(\frac{m\pi}{L} z\right) dz \right] c_m^j = E c_n^j$$

$$\Rightarrow \sum_{j,m}^{6,M} H_{(i-1)M+n, (j-1)M+m}^F c_m^j = E c_n^j$$

$H^F$  是一個  $6M \times 6M$  的矩陣。將此矩陣作對角化, 即可求得系統的 eigen energy 跟 eigen function。能帶結構和波函數機率密度分佈即可得知。

### 3-1-3. 電子電洞濃度

sheet concentration 由下列算式決定 :

$$n = 2 \sum_n \int \frac{k_t dk_t}{2\pi} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_n^c(k_t) - F_c}{k_B T}\right)}$$

$$p = \sum_{\sigma=U,L} \sum_m \int \frac{k_t dk_t}{2\pi} \left( 1 - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_{\sigma,m}^v(k_t) - F_v}{k_B T}\right)} \right)$$

### 3-2 結果與討論

#### 3-2-1 能帶結構計算結果

對一 GaN/InGaN 量子井主動層示意圖如下：

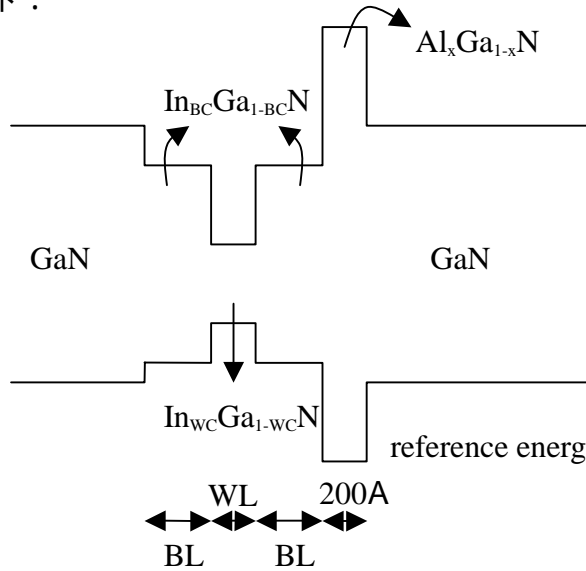


圖 1. GaN/InGaN LD band edge 示意圖，圖為 band edge 能量隨位置的變化情形。圖的底部標示各主要層的厚度。

圖形兩端的 GaN 層為 guiding layer， $Al_xGa_{1-x}N$  為 capping layer，厚度 200Å。 $In_{BC}Ga_{1-BC}N$  為 confining layer 厚度 BL， $In_{WC}Ga_{1-WC}N$  為 quantum well，厚度 WL。此選取 GaN 的 valence band edge 為參考電位。

將 BL、WL 分別設定為 60Å、30Å，BC、WC 分別設定為 0.04、0.18 代入上述結構，可計算出 valence band structure 如圖：

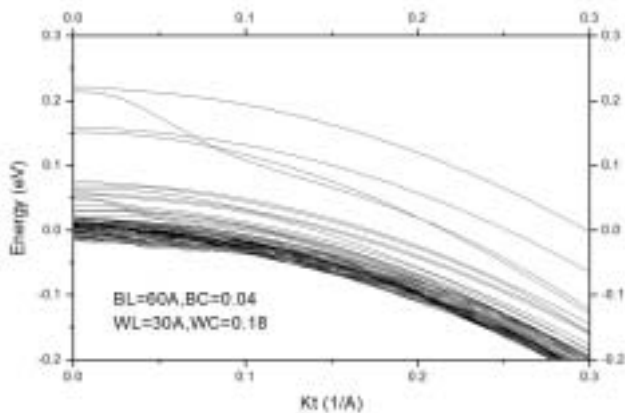


圖 2 . 系統的 valence band 能帶結構。BL、WL 分別設定為 60Å、30Å，BC、WC 分別設定為 0.04、0.18。此圖選取能量較低的 50 條 subband 作圖。

相同結構的 conduction band structure 如下：

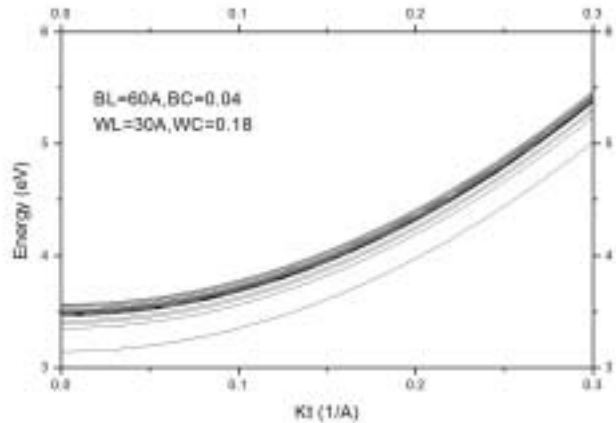


圖 3. 系統的 conduction band 能帶結構。BL、WL 分別設定為 60Å、30Å，BC、WC 分別設定為 0.04、0.18。此圖選取能量較低的 30 條 subband 作圖。

由圖 2 與圖 3 可發現 band structure 分成三層不同疏密的區域。這是因為最疏的 subband 區域由量子井所侷限，次疏的區域由 confining layer 所侷限，最密的區域為 unbound region 可視為 continuous band。另外可以注意到，conduction subbands 之間的能量差比 valence subbands 之間的能量差大很多。由 Fermi-Dirac distribution 可得知，電洞在不同 subband 之間佔據的數目差距較小，而電子在不同 subband 之間佔據的數量差距會較大。另外可以發現，在 well 裡面 conduction subbands 與 valence subbands 的數目差異很大。雖然計算過程中，設定 conduction band offset 為 valence band offset 的兩倍大，可是在此結構中，conduction subbands 的數目為 1，而 valence subbands 的數目為 6。即使調整不同結構尺寸，conduction subbands 的數目都小於 valence subbands 的數目。

### 3-2-2 改變 BL

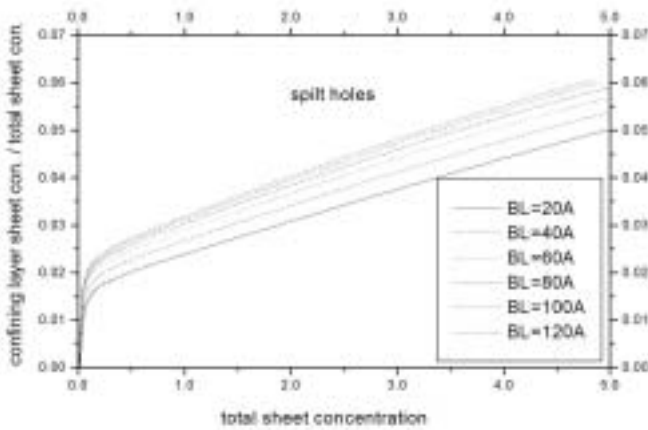


圖 4. 溢到 confining layer 的電洞 sheet concentration 與 total sheet concentration 的比例。結構固定在 BC=0.02、WL=30A、WC=0.18，改變 BL。

由圖 4 可觀察到，當 BL 增加，溢到 confining layer 的電洞濃度隨著增加。這是因為當 BL 增加的時候 confining layer 被加長，此區的 subbands 會集體往低能量的方向移動，由 Fermi-Dirac distribution 可得知，佔據 confining layer 的電洞濃度會增加。

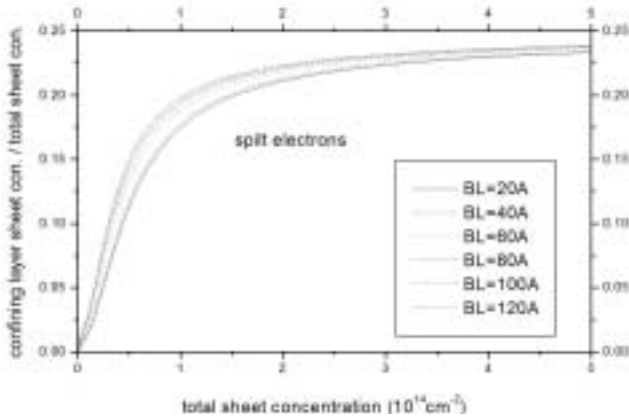


圖 5. 溢到 confining layer 的電子 sheet concentration 與 total sheet concentration 的比例。結構固定在 BC=0.02、WL=30A、WC=0.18，改變 BL。

觀察圖 5，溢出濃度的變化趨勢與圖 4 相同。但可以注意到的是，溢出濃度比圖 4 幾乎大 10 倍。這是因為 conduction subbands 在 well 裡的數目不夠多，無法提供足夠的 states 讓電子佔據，所以電子就大量溢到 confining layer 作補償。另一個因素是因為電子的 effective mass 比電洞的小很多，quasi-Fermi level 移動得比較高，使得

Fermi-Dirac distribution 可以深入 confining layer 的 subbands 範圍，造成高電子濃度的佔據。

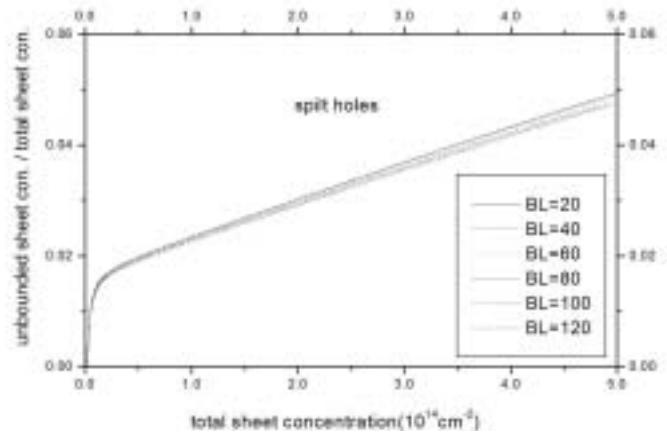


圖 6. 溢到 unbound region 的電洞 sheet concentration 與 total sheet concentration 的比例。結構固定在 BC=0.02、WL=30A、WC=0.18，改變 BL。

圖 6 隨 BL 的變化較小。這是因為 BL 的變化所造成的影響已經由 confining layer 裡的 state 做了大部分的補償。另外可以發現的是，溢到 unbound state 的電洞濃度跟溢到 confining layer 的電洞濃度大小差不多。這是因為 valence subbands 之間間距很小，Fermi-Dirac distribution 的變化不大，所以溢到 unbound state 與溢到 confining layer 的電洞濃度差不多。

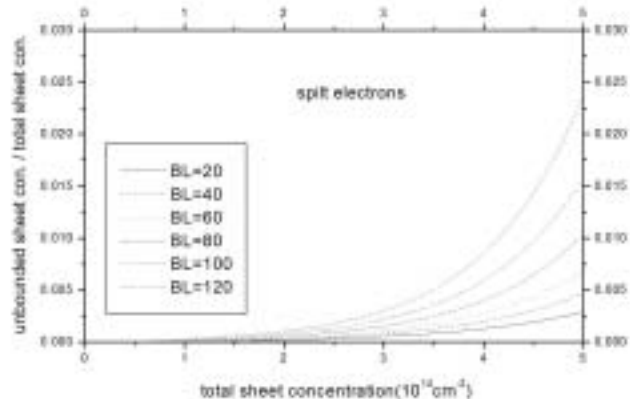


圖 7. 溢到 unbound region 的電子 sheet concentration 與 total sheet concentration 的比例。結構固定在 BC=0.02、WL=30A、WC=0.18，改變 BL。

圖 7 的現象明顯跟圖 6 有極大差異。在低濃度的時候，幾乎沒有電子溢到此區域。只有在總濃度很高的時候才會溢出。這是因為

conduction subbands 之間の間距比較大，Fermi-Dirac distribution 在低濃度的時候分佈到 unbound region 接近 0。

### 3-2-3. 改變 BC

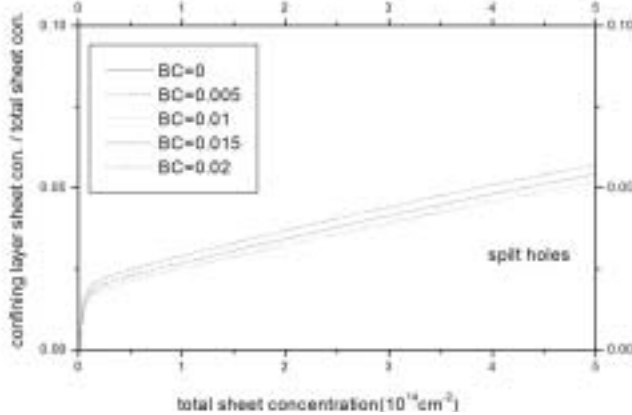


圖 8. 溢到 confining layer 的電洞 sheet concentration 與 total sheet concentration 的比例。結構固定在 BL=60、WL=30、WC=0.2，改變 BC。

由圖 8 可以觀察到，當 BC=0 與 0.05 的時候，溢到 confining layer 的電洞為 0。這是因為此時還未有 subbands 在 confining layer，無法提供 states 讓電洞佔據。當 subband 出現之後，BC 的增加會讓 barrier 下降，使得 confining layer 裡的 subbands 更靠近 well 裡的 subbands，造成 Fermi-Dirac distribution 在 confining layer 的分佈升高，所以溢出的電洞隨 BC 而增加。

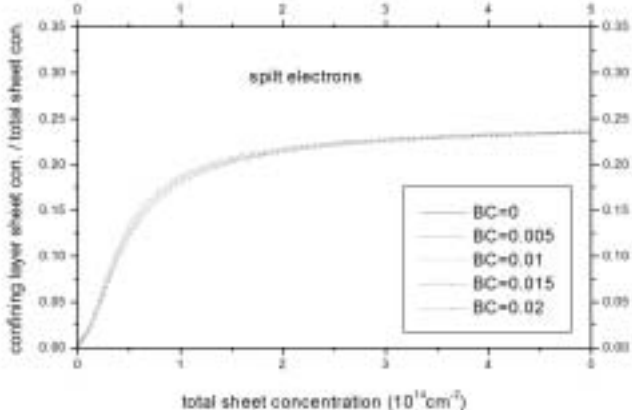


圖 9. 溢到 confining layer 的電子 sheet concentration 與 total sheet concentration 的比例。結構固定在 BL=60、

WL=30、WC=0.2，改變 BC。

上圖在 BC=0 的時候由於等於沒有 confining layer，所以電子無法溢到次層。但當 BC=0.05 的時候，就開始有 conduction subbands 在 confining layer 出現。

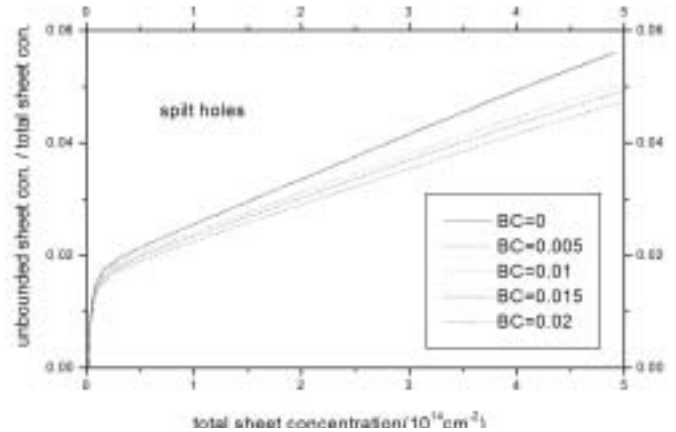


圖 10. 溢到 unbound region 的電洞 sheet concentration 與 total sheet concentration 的比例。結構固定在 BL=60、WL=30、WC=0.2，改變 BC。

上圖可以觀察出，當 BC=0 與 0.05 時，由於 confining layer 未有 subbands 出現，所以溢到 unbound region 的狀況幾乎一樣。直到 BC=0.01 之後，由於有 subbands 在 confining layer，所以溢出的現象開始變少。而且隨著 BC 的增加，溢出 confining layer 的數量增加（觀察圖 8），所以 unbound region 需要補償的量就減少。

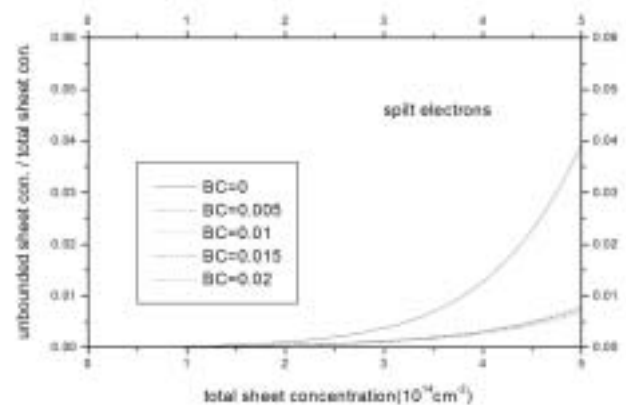


圖 11. 溢到 unbound region 的電子 sheet concentration 與 total sheet concentration 的比例。結構固定在 BL=60、WL=30、WC=0.2，改變 BC。

圖 11 中由於 BC=0 時，沒有 confining layer 來提供 states 讓電子佔據，所以溢出

unbound region 的電子明顯比其他 BC 值大許多。但在濃度很小的時候，溢出 unbound region 的電子依然不多。

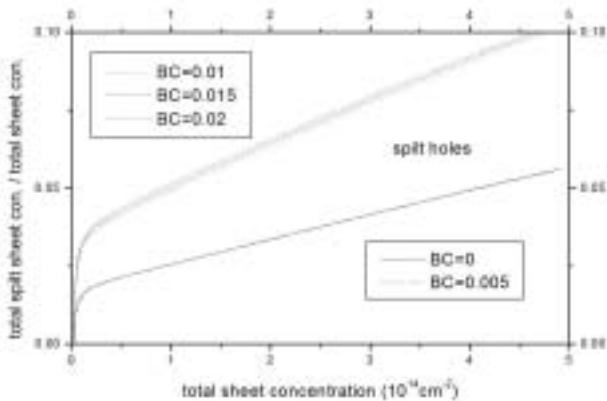


圖 12. 溢出電洞的 sheet concentration 與 total sheet concentration 的比例。結構固定在 BL=60、WL=30、WC=0.2，改變 BC。

圖 12 中 BC=0 與 0.005 的段幾乎重合，因為在這兩個值的時候，confining layer 並沒有 subband 出現，所有溢出電子均由 continuous band 所提供。而且由於沒有 confining layer 提供 states，所以溢出電子的總數較 BC 大於 0.005 的還要少。

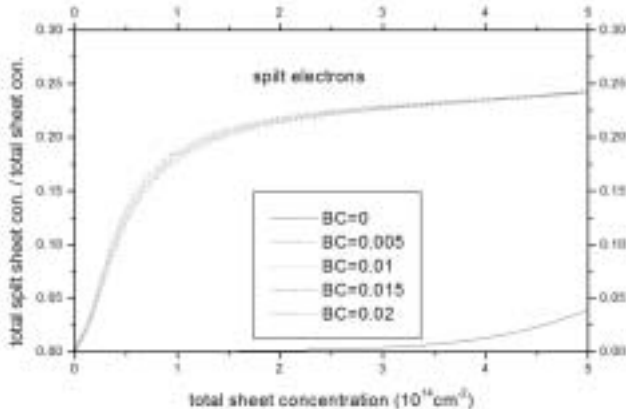


圖 13. 溢出電子的 sheet concentration 與 total sheet concentration 的比例。結構固定在 BL=60、WL=30、WC=0.2，改變 BC。

對 electron 而言，BC=0 由於沒有 confining layer，所以溢出的電子均分佈在 continuous band，而其數量總數比有 confining layer 的結構溢出的數量總數小很多。這是因為 continuous band 距離 well 裡的 subband 比 confining layer 裡的 subband

距離 well 裡的 subband 還要遠很多。由 Fermi-Dirac distribution 來看，電子分佈在 continuous band 的數量因此會很少。當 BC 大於 0.005 時，由於有 confining layer 裡的 subband 提供 electron states，而這些 states 距離 well 裡的 subband 很近，所以會有相當多量的電子溢到這些 states。

### 3-2-4. 改變 WC

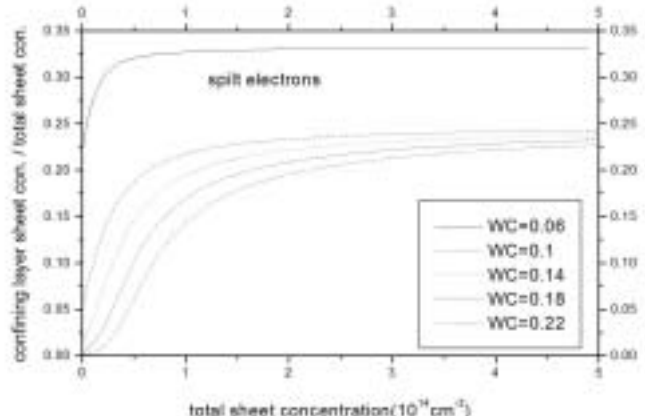


圖 14. 溢到 confining layer 的電子 sheet concentration 與 total sheet concentration 的比例。結構固定在 BL=60、WL=40、BC=0.02，改變 WC。

對 electron 而言，WC=0.06 時，只有一條 subband 在 well 裡面，而 WC=0.1~0.22 有兩條 subband 在 well 裡。如果 well 裡面提供的電子 state 不夠多，confining layer 的 subband 就會有補償的現象，此補償現象即與 well 裡面 subband 個數相關。所以可以觀察到五條線段共分成兩個 group，WC=0.06 與 WC=0.1~0.22 各自群聚一個 group。除此之外，當 well 深度越深，well 裡的 subband 就會往低能量降，這樣的趨勢使得 confining layer 的 subband 隨 well 深度加深，而距離 well 裡的 subband 越遠，電子越不容易溢到 confining layer。所以當 WC 越大，溢到 confining layer 的電子數目越少。

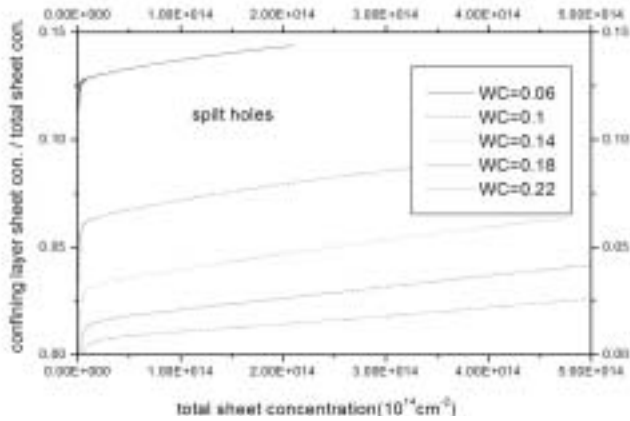


圖 15. 溢到 confining layer 的電洞 sheet concentration 與 total sheet concentration 的比例 結構固定在 BL=6Q WL=40、BC=0.02，改變 WC。

上圖中對電洞而言，WC=0.06、0.1、0.14、0.18、0.22 時，well 裡的 subband 數目分別為 4、6、7、8、9，所以五條線段並沒有像 electron 的群聚現象。值得注意的是，電洞溢到 confining layer 的數量顯然比電子溢出的數量還少，這是因為 well 裡面的 valence subband 數目比 conduction subband 多許多，WC=0.06、0.1、0.14、0.18、0.22 時，分別為 4、6、7、8、9。由於 well 裡面的 valence subband 已經提供相當多的 state，所以電洞溢出 confining layer 的數量比 electron 溢出的還要少。

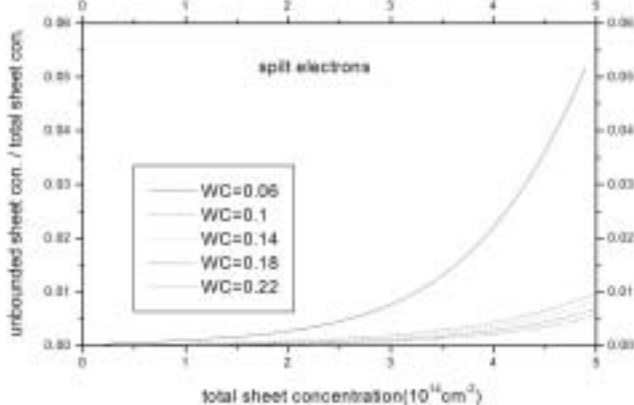


圖 16. 溢到 unbound region 的電子 sheet concentration 與 total sheet concentration 的比例 結構固定在 BL=6Q WL=40、BC=0.02，改變 WC。

上圖中對 electron 而言，由於 conduction subband 的間距非常大，所以電子不容易佔據到 continuous band，除非 total

concentration 很高。當 WC 由 0.06 變到 0.22，well 的深度變深，所以溢到 continuous band 的電子變少。

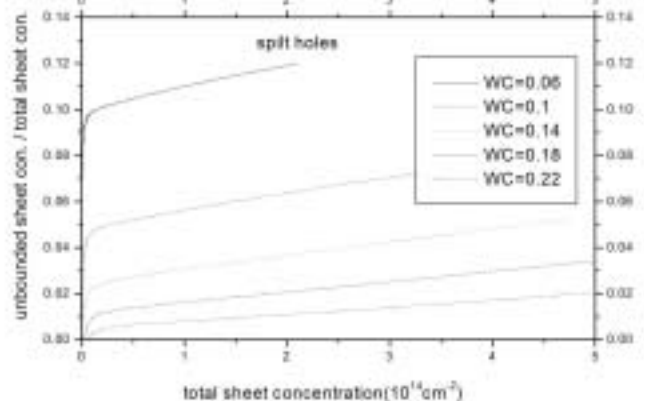


圖 17. 溢到 unbound region 的電洞 sheet concentration 與 total sheet concentration 的比例 結構固定在 BL=6Q WL=40、BC=0.02，改變 WC。

上圖中對 hole 而言，由於 valence subband 的間距非常小，所以電洞很容易佔據到 continuous band，數量比電子溢到 confining layer 的數量少一點而已。

### 3-2-5. 改變 WL

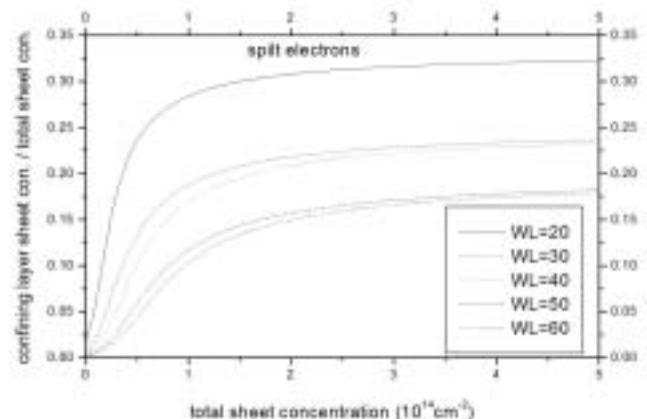


圖 18. 溢到 confining layer 的電子 sheet concentration 與 total sheet concentration 的比例 結構固定在 BL=6Q、BC=0.02、WC=0.18，改變 WL。

上圖可以與 WC 的圖作比對。在 WC 改變的圖中，線段分成兩個 group，在此圖中，線段分成三個 group。這是因為 WL=20 時，只有一個 subband 在 well 裡面，WL=30、40 時有兩條 subband 在 well 裡面，WL=50、60 時有三條 subband 在 well 裡。由此圖的討論可以得



知,well 裡頭 subband 的個數強烈影響著 well 可以提供的 state 數量,也因此影響著溢出載子的數量。subband 個數相同的結構,就會群聚成一個 group。另外,當 WL 增加的時候,well 裡的 subband 會下降,增加 well subband 與 confining layer subband 的距離,所以隨著 WL 增加,溢到 confining layer 的電子數量會減少。

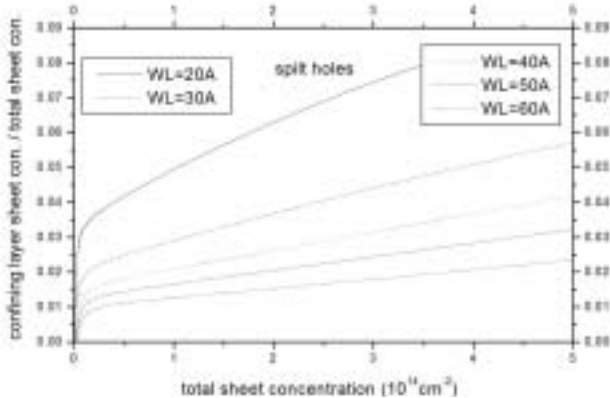


圖 19. 溢到 confining layer 的電洞 sheet concentration 與 total sheet concentration 的比例。結構固定在 BL=60、BC=0.02、WC=0.18, 改變 WL。

對 hole 而言,線段並沒有群聚的現象,因為 WL=20、30、40、50、60 時,subband 個數分別是 5、7、8、9、11。valence subband 個數變化對不同 WL 比較敏銳。另外可以注意的是,由於 well 裡 valence subband 個數比 conduction subband 還要多許多,足以提供大部分的 state,所以電洞溢到 confining layer 的數量比電子的還要少。當 WL 由 20 變到 60 時,well 裡的 subband 會往 well 底部移動,即遠離 confining layer 的 subband,因此隨著 WL 增加溢到 confining layer 的電洞數量會減少。

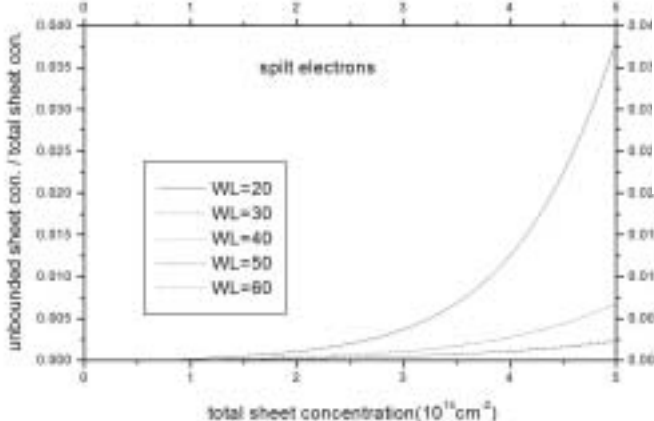


圖 20. 溢到 unbounded region 的電子 sheet concentration 與 total sheet concentration 的比例。結構固定在 BL=60、BC=0.02、WC=0.18, 改變 WL。

由於 conduction subband 的間距較大,所以溢到 unbound 的電子很小,只有在濃度很大的時候才會突然增加。跟 WL confining layer 一樣,線段會群聚成三個 group,原因跟 WL confining layer 相同。

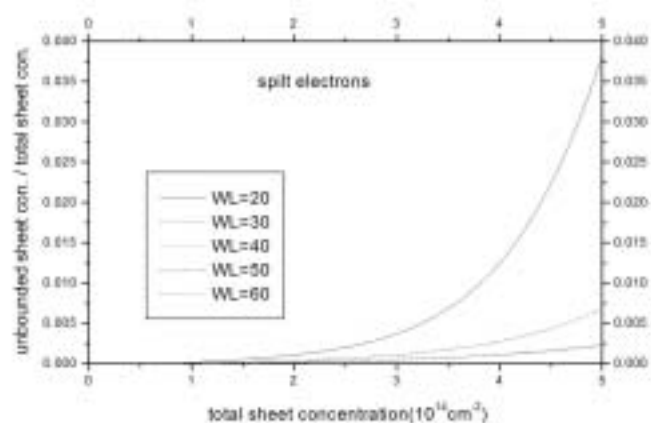


圖 21. 溢到 unbounded region 的電洞 sheet concentration 與 total sheet concentration 的比例。結構固定在 BL=60、BC=0.02、WC=0.18, 改變 WL。

由於 valence subband 的間距很小,所以溢到 unbound 的電洞比溢到 confining layer 略小而已。當 WL 增加,subband 會往 well 底部移動,所以跟 confining layer 一樣,溢到 unbounded 的電洞會隨著 WL 增加而減少。

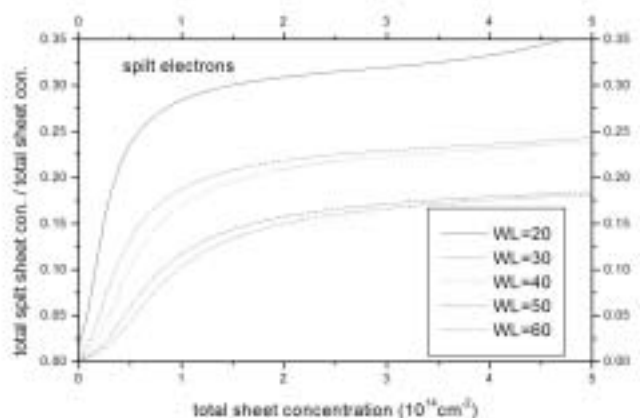


圖 22. 溢出電子的 sheet concentration 與 total sheet concentration 的比例。結構固定在 BL=60、BC=0.02、WC=0.18, 改變 WL。

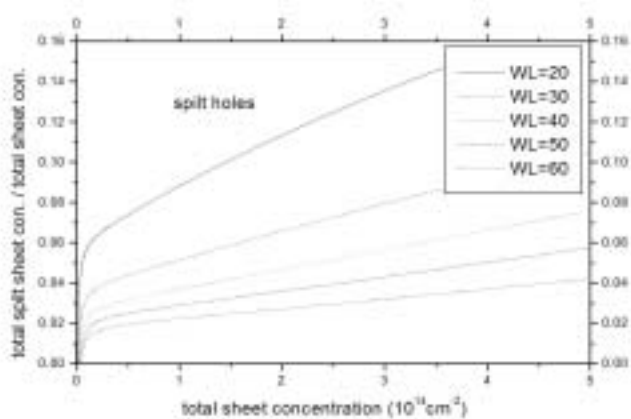


圖 21. 溢出電洞的 sheet concentration 與 total sheet concentration 的比例。結構固定在 BL=60、BC=0.02、WC=0.18，改變 WL。

由上面兩圖可得知，整體而言，electron 溢出的總量比電洞溢出的總量多很多倍。主要原因是 well 裡的 conduction subband 數量比 valence subband 數量少很多。若比較 WL total 與 WC total 的電洞溢出量，可以發現 WC 的電洞溢出量較多，這是因為 WL well 裡面 subband 的數量比 WC well 裡面 subband 的數量多，提供電洞 state 的能力較強，電洞較不容易溢出 well。

#### 四、 文獻

1. S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, H. Kiyoku and Y. Sugimoto, Jpn. J. Appl. Phys. 35, L74 (1996).
2. S. L. Chuang and C. S. Chang, Phys. Rev. B 54, 2491 (1996).
3. *Physics of Optoelectronic Devices*, edited by S. L. Chuang, (Wiley-Interscience, New York, 1995).