

Точечные дефекты и усиление в активных слоях InGaAs/AlGaAs-гетероструктур

© Т.В. Безъязычная¹, М.В. Богданович², А.В. Григорьев², В.М. Зеленковский¹, В.В. Кабанов², Д.М. Кабанов², Е.В. Лебедев², А.Г. Рябцев³, Г.И. Рябцев², М.А. Щемелев³

¹ Институт физико-органической химии НАН Беларуси, Минск, Белоруссия

² Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, Минск, Белоруссия

³ Белорусский государственный университет, Минск, Белоруссия

E-mail: ryabtsev@dragon.bas-net.by

Определены значения уровней энергии в запрещенной зоне $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ для вакансий галлия и мышьяка, а также для примеси кремния в зависимости от содержания индия. Проведена оценка влияния дефектов на величину мощности генерации и оптимальное значение коэффициента отражения выходного зеркала лазерных диодных линеек (ЛДЛ) на основе $\text{In}_{0,11}\text{Ga}_{0,89}\text{As}/\text{AlGaAs}$ -гетероструктур. Показано, что для ЛДЛ, в активном слое которых присутствуют дефекты с глубоким положением энергетического уровня в запрещенной зоне, мощность генерации существенно ниже (при прочих равных условиях), чем для ЛДЛ, имеющих в активном слое дефекты с мелкими уровнями.

1. Введение

Гетероструктуры InGaAs/AlGaAs широко используются в современных мощных одиночных инжекционных лазерах и лазерных диодных линейках (ЛДЛ). Рост гетероструктуры и ее работа в составе излучателя сопровождается формированием различных дефектов, в том числе точечных. В отличие от арсенида галлия параметры точечных дефектов для соединения $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ изучены в меньшей степени [1–5].

Как показано в [6], введение индия в решетку GaAs оказывает заметное влияние на формирование и свойства точечных дефектов. Изменение энергетических характеристик дефектов в активном слое $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ может приводить не только к изменению срока службы приборов на основе InGaAs/AlGaAs-гетероструктур, но и к изменению спектральных и мощностных характеристик инжекционных лазеров и ЛДЛ.

Концентрация дефектов в слоях InGaAs в зависимости от методов и условий роста кристалла, как правило, составляет 10^{14} cm^{-3} – 10^{19} cm^{-3} [7], поэтому при расчете спектров спонтанного излучения и коэффициента усиления инжекционных лазеров целесообразно использовать модель межзонных оптических переходов без выполнения правил отбора по волновому вектору электрона [8,9]. Как показано в [10,11], данная модель наилучшим образом согласуется с экспериментальными данными для гетероструктур с активными слоями на основе InGaAs. Одним из параметров модели переходов без выполнения правил отбора является боровский радиус a_B дефекта в активном слое.

Целью настоящей работы является определение энергетических и структурных параметров точечных дефектов, таких как вакансии атомов галлия/мышьяка и примесные атомы кремния, и оценка степени влияния указанных дефектов на мощностные характеристики

лазерных диодных линеек на основе InGaAs/AlGaAs-гетероструктуры.

2. Моделирование и анализ результатов

Одними из характерных дефектов в активном слое ЛДЛ на основе InGaAs/AlGaAs-гетероструктур являются вакансии атомов мышьяка и галлия, а также примесные атомы кремния, диффундирующие в активный слой InGaAs из легированного кремнием эмиттера гетероструктуры ЛДЛ. Для определения энергетических характеристик указанных точечных дефектов и примесей в соединении $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ применен метод кластерного приближения [12].

Расчеты проводились с помощью программного пакета молекулярного моделирования GAMESS [13] неэмпирическим методом самосогласованного поля в представлении молекулярных орбиталей в виде линейной комбинации атомных орбиталей. Использовался базисный набор функций MINI, позволяющий достаточно точно рассчитать энергию химических связей и межмолекулярных взаимодействий в кристаллических соединениях [14].

В качестве модельного кластера был выбран 70-атомный фрагмент кристаллической решетки на основе GaAs, содержащий по 35 атомов галлия и мышьяка. Оборванные связи на границах кластера замыкались атомами водорода, что позволило исключить искажения электронной структуры, возникающие под влиянием неспаренных электронов на границе кластера [15]. Влияние содержания индия на характеристики дефектов моделировалось путем замены части атомов галлия на атомы индия в необходимом процентном соотношении (3–30 at.%).

Кластер	Тип дефекта							
	Кремний (донор)		Кремний (акцептор)		Вакансия галлия		Вакансия мышьяка	
	E_{Si_d}, meV	$(a_B)_{Si_d}, \text{nm}$	E_{Si_a}, meV	$(a_B)_{Si_a}, \text{nm}$	$E_{V_{Ga}}, \text{meV}$	$(a_B)_{V_{Ga}}, \text{nm}$	$E_{V_{As}}, \text{meV}$	$(a_B)_{V_{As}}, \text{nm}$
GaAs	5.5	10.2	32.0	1.74	140	0.40	692	0.080
In _{0.03} Ga _{0.97} As	5.4	10.3	31.8	1.75	140	0.40	681	0.082
In _{0.1} Ga _{0.9} As	5.2	10.6	29.6	1.86	122	0.46	643	0.086
In _{0.2} Ga _{0.8} As	4.8	11.3	27.5	1.98	101	0.54	615	0.089
In _{0.3} Ga _{0.7} As	4.3	12.5	26.1	2.06	89	0.60	589	0.091

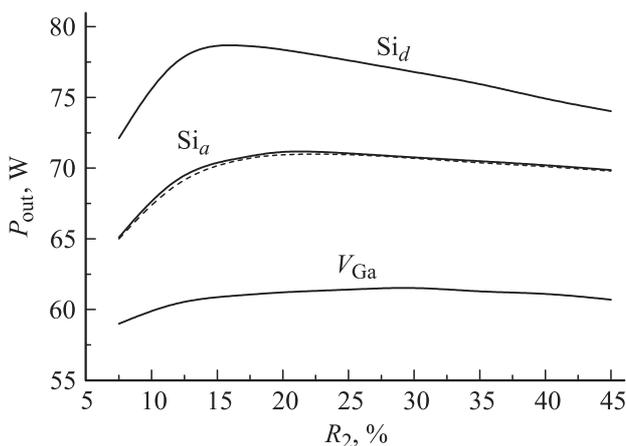
Для расчета характеристик вакансии галлия V_{Ga} и вакансии мышьяка V_{As} соответствующий атом удалялся из узла кристаллической решетки. Моделирование примеси атома кремния, как донора и акцептора, состояло в замене атома галлия и мышьяка соответственно атомом кремния. Структура и энергетические характеристики дефектов определялись после проведения полной градиентной оптимизации геометрических характеристик кластера с дефектом — длин связей, валентных и торсионных углов. Данный подход позволяет определить релаксацию кристаллической решетки в области дефекта с учетом влияния кристаллического поля окружения.

Результаты расчетов энергетических уровней дефектов в запрещенной зоне InGaAs приведены в таблице. Для вакансий галлия ($E_{V_{Ga}}$) и мышьяка ($E_{V_{As}}$), а также для примесного акцепторного атома кремния (E_{Si_a}) уровень энергии приведен относительно потолка валентной зоны. Для примесного донорного атома кремния уровень энергии (E_{Si_d}) приведен относительно дна зоны проводимости. Также в таблице приведены значения боровского радиуса для вакансий и примеси кремния, рассчитанные

на основании соотношения: $a_B = e^2/8\pi\epsilon\epsilon_0 E$ [16], где e — заряд электрона, ϵ — диэлектрическая проницаемость, ϵ_0 — электрическая постоянная, E — уровень энергии соответствующего дефекта. Диэлектрическая постоянная для кластеров с различным содержанием индия взята из [17]. Полученные значения уровней энергии $E_{V_{Ga}}$, $E_{V_{As}}$, E_{Si_a} , E_{Si_d} , рассчитанные для GaAs, хорошо согласуются с результатами, полученными в работах [5,7].

Оценка влияния дефектов на мощностные характеристики проводилась применительно к ЛДЛ на основе In_{0.11}Ga_{0.89}As/AlGaAs-гетероструктуры с двумя квантовыми ямами InGaAs, разделенными слоем GaAs, и параметрами, аналогичными таковым в работе [18].

Мощностные характеристики ЛДЛ с учетом процессов разогрева активного слоя рассчитывались на основе системы скоростных уравнений, дополненной уравнением, определяющим величину перегрева ΔT активного слоя ЛДЛ относительно комнатной температуры окружающей среды [18]:



Расчетные зависимости мощности генерируемого излучения ЛДЛ P_{out} на основе In_{0.11}Ga_{0.89}As/AlGaAs-гетероструктуры от коэффициента отражения R_2 выходного зеркала для боровского радиуса, соответствующего донорному примесному атому кремния (Si_d), акцепторному примесному атому кремния (Si_a) и вакансии атома галлия (V_{Ga}). Пунктирной линией приведена кривая. Штриховая линия — рассчитанная в работе [18] зависимость $P_{out}(R_2)$ для величины боровского радиуса 1.7 nm.

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{dS_v^{las}}{dt} &= \frac{c}{n} [(\Gamma g_v - \alpha_{las})S_v^{las} + \gamma_{las}W_{spv}], \\ \frac{dS_{xv}^{lum}}{dt} &= \frac{c}{n} [(\Gamma g_v - \alpha_{xv}^{lum})S_{xv}^{lum} + \gamma_{lum}W_{spv}], \\ \frac{dS_{yv}^{lum}}{dt} &= \frac{c}{n} [(\Gamma g_v - \alpha_{yv}^{lum})S_{yv}^{lum} + \gamma_{lum}W_{spv}], \\ \frac{dN}{dt} &= \frac{\sigma j}{2de} - BN^2 - CN^3 - R^{lum} - R^{las}, \\ \Delta T &= R_T \cdot V \cdot \left(\int_{\nu_1}^{\nu_N} \Gamma g_v [R_3 S_{xv}^{lum} + R_2 S_{yv}^{lum}] d(h\nu) \right. \\ &\quad \left. + \int_{\nu_1}^{\nu_N} \Gamma g_v R_2 S_v^{las} d(h\nu) + E_g CN^3 \right), \end{aligned} \right. \quad (1)$$

где S_v^{las} — плотность потока лазерного излучения, S_{xv}^{lum} и S_{yv}^{lum} — спектральные плотности потоков усиленной люминесценции (УЛ), распространяющихся вдоль (ось 0y) и перпендикулярно (ось 0x) оси резонатора ЛДЛ соответственно, $R^{lum} = \int_{\nu_1}^{\nu_N} \frac{1}{h\nu} \Gamma g_v [S_{xv}^{lum} + S_{yv}^{lum}] d(h\nu)$ и $R^{las} = \int_{\nu_1}^{\nu_N} \frac{1}{h\nu} \Gamma g_v S_v^{las} d(h\nu)$ — скорости рекомбинации,

индуцируемой потоками УЛ и лазерного излучения соответственно, R_2 — коэффициент отражения выходного зеркала, $R_3 = 0.32$ — коэффициент отражения боковых граней ЛДЛ, c — скорость света в вакууме, n — показатель преломления InGaAs, α_{las} — коэффициент полных потерь для лазерного излучения, W_{spv} — объемная спектральная мощность спонтанного излучения, ν_1 и ν_N — граничные частоты спектрального интервала, в котором коэффициент усиления больше нуля для заданного уровня инжекции, N — концентрация инжектируемых неравновесных носителей заряда, B и C — коэффициенты спонтанной рекомбинации и безызлучательной оже-рекомбинации для InGaAs, V — объем активного слоя ЛДЛ, γ_{las} — вклад спонтанного излучения в поток лазерного излучения, γ_{lum} — вклад спонтанного излучения в УЛ, α_{xv}^{lum} и α_{yv}^{lum} представляют зависящие от частоты ν и тока накачки коэффициенты потерь для потоков УЛ, распространяющихся вдоль осей Ox и Oy соответственно. Все приведенные выше параметры взяты из [18]. В качестве плотности тока инжекции j использовалось значение плотности тока для области активного слоя под полосковым контактом, с помощью коэффициента $\sigma = 0.8$ учитывалось растекание тока в объеме гетероструктуры [19].

В модели межзонных оптических переходов без выполнения правил отбора по волновому вектору коэффициент усиления задается соотношением [20]:

$$g_{\nu} = \frac{32e^2 a_B^2 \pi^3 m_c m_h k T |M|^2}{\epsilon_0 m_0^2 h^3 c n d h \nu} \sum_i H(h\nu - (E_g + E_{ci} + E_{hi})) \times \ln \left[\frac{1 + \exp\left(\frac{F_e - E_g - E_{ci}}{kT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{h\nu + F_h - E_g - E_{ci}}{kT}\right)} \times \frac{1 + \exp\left(\frac{-E_{hi} - F_h}{kT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{h\nu - E_{hi} - F_e}{kT}\right)} \exp\left(\frac{h\nu - \Delta F}{kT}\right) \right], \quad (2)$$

где m_c и m_h — эффективные массы электронов и дырок в InGaAs, m_0 — масса свободного электрона, H — функция Хэвисайда, i — число уровней энергии в квантовой яме, $F_e - F_h = \Delta F$ — разность квазиуровней Ферми. Уровни Ферми для электронов F_e и дырок F_h находятся с учетом уравнения квазинейтральности. Для расчетов мощности генерации ЛДЛ при различных концентрациях индия в активном слое значения эффективных масс электронов и дырок, ширины запрещенной зоны InGaAs E_g были взяты из [17]. Величина квадрата матричного элемента межзонных оптических переходов в InGaAs активном слое $|M|^2$ взята из [21]. Уровни энергии электронов E_{ci} и дырок E_{hi} в квантовой яме при различных концентрациях индия определялись по методике, описанной в [22]. Все расчеты проведены для температуры 293 К.

На рисунке приведены рассчитанные по (1)–(2) зависимости мощности генерируемого излучения ЛДЛ P_{out}

на основе $\text{In}_{0.11}\text{Ga}_{0.89}\text{As}/\text{AlGaAs}$ -гетероструктуры от коэффициента отражения выходного зеркала для значений боровского радиуса, соответствующих различным типам дефектов (таблица). Как следует из рисунка, величина боровского радиуса (при прочих равных условиях) оказывает заметное влияние на мощность генерации, а также на оптимальное (с точки зрения получения максимальной мощности при прочих равных условиях) значение коэффициента отражения выходного зеркала ЛДЛ. Так, для дефектов, характеризующихся глубоким положением энергетического уровня в запрещенной зоне (вакансии галлия и мышьяка) и, следовательно, меньшим значением боровского радиуса (таблица), мощность генерации существенно ниже, чем для мелких уровней (донорные и акцепторные примеси кремния).

В работе [18] для расчетов было принято значение $a_B = 1.7 \text{ nm}$ без привязки к определенному типу дефекта. На основании рисунка можно сделать предположение (считая все прочие условия равными), что в активном слое ЛДЛ на основе $\text{In}_{0.11}\text{Ga}_{0.89}\text{As}/\text{AlGaAs}$ -гетероструктуры присутствует дефект, представляющий собой примесный атом кремния, замещающий атом мышьяка, либо иной дефект с положением энергетического уровня в запрещенной зоне 0.032 eV относительно потолка валентной зоны или дна зоны проводимости.

3. Заключение

Расчитаны значения уровней энергии в запрещенной зоне InGaAs для вакансий галлия и мышьяка, а также для примеси кремния в зависимости от содержания индия. Для указанных дефектов характерно уменьшение значения энергетического уровня относительно соответствующей зоны с увеличением содержания индия в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Проведена оценка влияния дефектов на величину мощности генерации и оптимальное значение коэффициента отражения выходного зеркала лазерных диодных линеек на основе $\text{In}_{0.11}\text{Ga}_{0.89}\text{As}/\text{AlGaAs}$ -гетероструктур. Показано, что для дефектов, характеризующихся глубоким положением энергетического уровня в запрещенной зоне и, следовательно, меньшим значением боровского радиуса, мощность генерации существенно ниже, чем для мелких уровней. При этом, все прочие величины (внутренние оптические потери, коэффициент безызлучательной рекомбинации и др.) при расчетах принимались равными.

Наиболее вероятным дефектом, влияющим на мощность генерации лазерных диодных линеек на основе $\text{In}_{0.11}\text{Ga}_{0.89}\text{As}/\text{AlGaAs}$ -гетероструктур (с параметрами из [18]), является примесный атом кремния, замещающий атом мышьяка, либо дефект другого типа с положением энергетического уровня в запрещенной зоне 0.032 eV относительно потолка валентной зоны или дна зоны проводимости.

Список литературы

- [1] R.F. Kirkman, R.A. Stradling, P.J. Lin-Chungl. *J. Phys. C: Solid State Phys.* **11**, 419 (1977).
- [2] R.A. Cooke, R.A. Houl, R.F. Kirkman, R.A. Stradlin. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **11**, 945 (1978).
- [3] K. Saarinen, P. Hautojarvi, P. Lanki, C. Corbel. *Phys. Rev. B* **44**, 10 585 (1991).
- [4] Y.Q. Jia, H.J. von Bardeleben, D. Stievenard, C. Delerue. *Phys. Rev. B* **45**, 1645 (1992).
- [5] H.P. Komsa, A. Pasquarello. *J. Phys.: Cond. Matter.* **24**, 045 801 (2012).
- [6] Т.В. Безъязычная, В.М. Зеленковский, Г.И. Рябцев, М.М. Соболев. *ФТП* **38**, 213 (2004).
- [7] D.A. Murdick, X.W. Zhou, H.N.G. Wadley. *J. Cryst. Grow.* **286**, 197 (2006).
- [8] P.T. Landsberg, M.S. Abrahams, M. Osinski. *IEEE J. Quantum Electron.* **21**, 24 (1985).
- [9] А.А. Афоненко, В.К. Кононенко, И.С. Манак, В.А. Шевцов. *ФТП* **31**, 1087 (1997).
- [10] М.В. Богданович, В.В. Кабанов, Е.В. Лебедок, А.А. Романенко, А.Г. Рябцев, Г.И. Рябцев, М.А. Щемелёв, С.К. Мехта. *ЖПС* **78**, 868 (2011).
- [11] В.В. Кабанов, Е.В. Лебедок, Г.И. Рябцев, А.С. Смаль, М.А. Щемелёв, Д.А. Винокуров, С.О. Слипченко, З.Н. Соколова, И.С. Тарасов. *ФТП* **46**, 1339 (2012).
- [12] S. Yip. *Handbook of materials modelling* Springer, Dordrecht (2005) 3004 p.
- [13] <http://www.msg.ameslab.gov/gamess/>
- [14] S. Huzinaga, J. Andzelm, M. Klobukowski, E. Radzio-Andzelm, Y. Sakai, H. Tatewaki. *Gaussian basis sets for molecular calculations*. Elsevier, Amsterdam (1984) 426 p.
- [15] M. Seel. *Int. J. Quant. Chem.* **34**, 265 (1988).
- [16] W.S. Lau, T. Han. *Appl. Phys. Lett.* **86**, 152 107 (2005).
- [17] M.E. Levinshtein, S.L. Rumyantsev, M. Shur. *Handbook series on semiconductor parameters V. 2*. World Scientific Publishing Co, London (1999) 300 p.
- [18] M.V. Bogdanovich, V.V. Kabanov, Y.V. Lebiadok, A.G. Ryabtsev, G.I. Ryabtsev, M.A. Shchemelev, S.S. Kurlenkov, S.M. Sapozhnikov, S.K. Mehta. *Opt. Las. Tech.* **45**, 177 (2013).
- [19] М.В. Богданович, В.В. Кабанов, Е.В. Лебедок, А.А. Романенко, А.Г. Рябцев, Г.И. Рябцев, М.А. Щемелёв, С.К. Мехта. *ЖПС* **78**, 868 (2011).
- [20] Т.В. Безъязычная, М.В. Богданович, А.В. Григорьев, В.В. Кабанов, Y.V. Lebiadok, A.G. Ryabtsev, G.I. Ryabtsev, M.A. Shchemelev, S.K. Mehta. *Opt. Comm.* **285**, 2397 (2012).
- [21] L.A. Coldren, S.W. Corzine. *Diode lasers and photonic integrated circuits*. John Wiley & Sons Inc, N.Y. (1995) 594 p.
- [22] Г.Б. Галиев, М.В. Карачевцева, В.Г. Мокеров, В.А. Страхов, Г.Н. Шкердин, Н.Г. Яременко, *ФТП* **37**, 599 (2003).