Оптимизация асимметричных барьерных слоев в лазерных гетероструктурах InAIGaAs/AIGaAs на подложках GaAs

© А.Е. Жуков*+¶, Л.В. Асрян•, Е.С. Семенова♦, Ф.И. Зубов*+, Н.В. Крыжановская*, М.В. Максимов■*+

* Санкт-Петербургский Академический университет —

научно-образовательный центр нанотехнологий Российской академии наук,

194021 Санкт-Петербург, Россия

⁺ Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,

195251 Санкт-Петербург, Россия

Virginia Polytechnic Institute and State University,

Blacksburg, Virginia 24061, USA

DTU Fotonik, Technical University of Denmark,

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,

194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 29 декабря 2014 г. Принята к печати 30 декабря 2014 г.)

Выполнены расчеты разрывов зон на гетерогранице для различных комбинаций гетеропар InAlGaAs/AlGaAs, которые могут быть синтезированы на подложках GaAs в режиме послойного псевдоморфного роста. Найдены закономерности, позволяющие реализовать асимметричный барьерный слой, обеспечивающий почти свободное прохождение дырок и наибольшую возможную высоту барьера для электронов. С учетом критической толщины индийсодержащего четверного твердого раствора определены оптимальные составы обоих соединений (In_{0.232}Al_{0.594}Ga_{0.174}As/Al_{0.355}Ga_{0.645}As), при которых поток электронов через барьер минимален.

1. Введение

Лазеры, содержащие асимметричные барьерные слои (АБС), были предложены [1] для улучшения пороговых и температурных характеристик полупроводниковых лазеров с квантово-размерной активной областью за счет подавления рекомбинации носителей заряда в волноводном слое. Такие АБС должны создавать препятствие для протекания носителей заряда одного типа (например, для электронов), тогда как носители заряда другого типа (дырки) должны проходить почти свободно. Если по обеим сторонам активной области сформированы АБС, один из которых формирует барьер только для электронов, а другой только для дырок, то область сосуществования электронов и дырок ограничена пространством между двумя АБС, тогда как в волноводном слое в прилегающей к р-эмиттеру области присутствуют только дырки, а в прилегающей к п-эмиттеру области — только электроны. В лазерах на подложках GaAs, использующих асимметричные барьеры, было продемонстрировано [2] увеличение характеристической температуры, снижение внутренних потерь и их температурной чувствительности. Недавно было показано, что применение АБС приводит также к уменьшению нелинейности ватт-амперной характеристики лазера в режимы больших токов накачки [3]. Подобные гетероструктуры с асимметричными барьерами могут представлять интерес и для других приборных применений, например для создания эмиттеров поляризованных электронов [4,5].

В структурах, которые могут быть эпитаксиально синтезированы на подложках GaAs, наибольшую сложность представляет формирование асимметричного барьера со

В настоящей работе нами были рассмотрены различные комбинации гетеропар InAlGaAs/AlGaAs, которые могут быть сформированы в режиме псевдоморфного двумерного роста, с точки зрения оптимизации их характеристик при использовании в качестве асимметричного барьерного слоя. Критерием оптимизации было выбрано достижение минимального потока электронов через АБС с учетом как возможности туннелирования, так и надбарьерного прохождения.

Kgs. Lyngby, DK-2800, Denmark

стороны эмиттера р-типа, который должен создавать одновременно высокий барьер для электронов и близкий к нулю барьер для дырок. В работах [2,3] в качестве такого АБС был использован упругонапряженный слой Al_{0.42}Ga_{0.36}In_{0.22}As толщиной 5 нм, помещенный в волновод Al_{0.2}Ga_{0.8}As, для которого расчетные значения высот барьеров для электронов ($\Delta E_{\rm c}$) и для дырок (ΔE_v) составляют 69 и 25 мэВ соответственно. Малая толщина такого барьера в сочетании с его недостаточной высотой не позволяют в полной мере реализовать ожидаемые характеристики лазера с асимметричными барьерными слоями [6]. Ранее нами были выполнены расчеты [7], показавшие, что на гетерогранице $Al_{0.2}Ga_{0.8}As_{0.93}Sb_{0.07}/GaAs$ происходит формирование асимметричного барьера, высота которого для электронов составляет около 100 мэВ, тогда как для дырок барьер практически отсутствует. Однако использование двух летучих соединений (As и Sb), а также малая распространенность установок, позволяющих синтезировать Sb-содержащие соединения, требует поиска альтернативных решений.

[¶] E-mail: zhukale@gmail.com



Рис. 1. Зависимость ΔE_c и ΔE_v на гетерогранице In_x(Al_yGa_{1-y})_{1-x}As/Al_zGa_{1-z}As от у для x = 0.2 и 0.3 при z = 0.2.

2. Расчет барьеров на гетерогранице InAIGaAs/AIGaAs

Влияние химического состава и упругих напряжений на положение краев зоны проводимости и валентной зоны материала АБС относительно материала волновода было рассчитано с использованием методики, приведенной в работе [8]. При расчетах мы полагали, что структура является псевдоморфной по отношению к подложке GaAs. Так как барьерный слой является упругосжатым, подзона тяжелых дырок лежит выше подзоны легких дырок, и именно положение края подзоны тяжелых дырок определяет высоту барьера в валентной зоне $\Delta E_{\rm v}$. Так как рассогласование постоянной решетки слоя InAlGaAs по отношению к подложке GaAs почти полностью зависит от мольной доли InAs, химический состав четверного твердого раствора, используемого в качестве АБС, удобно представить формулой $In_x(Al_yGa_{1-y})_{1-x}$ As. Состав тройного твердого раствора, используемого в качестве волноводного слоя, будем обозначать $Al_z Ga_{1-z} As$.

На рис. 1 приведена зависимость высоты барьеров для электронов ΔE_c и для дырок ΔE_v от параметра *y*, описывающего содержание алюминия в четверном слое. При этом содержание индия (*x*) фиксировано и составляет 0.2 или 0.3, а окружающий слой имеет z = 0.2. Как видно, для некоторых составов, в которых *y* составляет примерно 0.45–0.5 (для x = 0.2) или 0.6–0.7 (для x = 0.3), высота барьера в валентной зоне близка к нулю, тогда как высота барьера в зоне проводимости составляет несколько десятков мэВ. Таким образом, такие материалы могут представлять интерес для формирования АБС.

Высота барьера для электронов, в зависимости от использованной комбинации материалов, находится в определенном соотношении с высотой барьера для ды-

рок. В качестве примера на рис. 2 представлена зависимость ΔE_c от содержания индия (x) в материале барьера для случая z = 0.2. При этом высота барьера для дырок составляет 0, 25 или 50 мэВ. То обстоятельство, что барьер ΔE_v фиксирован, в неявном виде задает требуемое содержание алюминия (y) в четверном твердом растворе, зависящее от x. Как и следовало ожидать, увеличение ΔE_v приводит к росту электронного барьера, формируемого на гетерогранице. Однако, поскольку асимметричный барьер не должен создавать препятствий для протекания дырок, разумным компромиссом для приборов, предназначенных для работы при комнатной температуре, представляется выбор $\Delta E_v = 25$ мэВ.

В лазерных структурах на подложках GaAs в качестве волноводного слоя обычно используется GaAs либо тройной твердый раствор AlGaAs с небольшим содержанием алюминия, так что *z* является еще одним варьируемым параметром. Зависимость разрыва зоны



Рис. 2. Зависимость ΔE_x от *x* при z = 0.2. При этом *y* выбирается таким образом, что $\Delta E_v = 0$, 25 или 50 мэВ.



Рис. 3. Зависимость ΔE_c от *z* при различном *x*. При этом *y* выбирается таким образом, что $\Delta E_v = 25$ мэВ.

проводимости на гетерогранице от *z* представлена на рис. З для нескольких характерных значений доли индия (x) в твердом растворе. Во всех случаях содержание алюминия (y) подбирается таким образом, чтобы ΔE_v оставался равным 25 мэВ. Как видно, зависимость ΔE_c от *z* имеет излом, который связан с переходом четверного твердого раствора InAlGaAs от прямой к непрямой зоне, поскольку с ростом содержания алюминия (z) в волноводе, в барьерном слое требуется все большее содержание алюминия (y) для сохранения фиксированного значения ΔE_v . Точка излома соответствует наибольшей высоте барьера для электронов (ΔE_c^{max}), которая может быть достигнута на гетерогранице InAlGaAs/AlGaAs при заданной высоте барьера для дырок.

3. Оптимальный химический состав барьера

На рис. 4 показана зависимость $\Delta E_{\rm c}^{\rm max}$ от содержания индия (x) в четверном слое, формирующем барьер. При этом, как обсуждалось выше, у выбирается таким образом, что высота дырочного барьера составляла 25 мэВ, а z — таким образом, что разрыв зоны проводимости максимален. Как видно, $\Delta E_{\rm c}^{\rm max}$ увеличивается с ростом доли индия, достигая при x = 0.3 и 0.4 значения около 150 и 200 мэВ соответственно. Однако увеличение мольной доли InAs вызывает пропорциональный рост рассогласования кристаллических решеток слоя и подложки. Предельная толщина решеточно-рассогласованного слоя ограничена началом образования дислокаций несоответствия (при малых значениях рассогласования) и переходом к островковому режиму роста (при больших рассогласованиях). На рис. 4 приведена критическая толщина $h_{\rm cr}$ эпитаксиального слоя InGaAs, осаждаемого на поверхности GaAs(100) (см. [9] и ссылки в ней). Так как изменение содержания алюминия в твердом растворе почти не вызывает изменения постоянной кристаллической решетки, мы будем полагать в дальнейших расчетах, что $h_{\rm cr}$ зависит только от x содержания индия.

Таким образом, увеличение мольной доли InAs в составе четверного твердого раствора, который может быть использован для формирования АБС, приводит, с одной стороны, к увеличению высоты барьера для электронов, а с другой — снижает предельную толщину барьера. С помощью формулы Тсу-Есаки [10] нами была оценена плотность потока прохождения электронов через потенциальный барьер:

 \propto

$$R = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{E_c} n_{2D} D dE, \qquad (1)$$

где

$$n_{2D} = \frac{mkT}{\pi\hbar^2} \ln \left[1 + \exp\left(\frac{E_{\rm F} - E}{kT}\right) \right]$$

— двумерная концентрация электронов в плоскости слоев; *Е* — кинетическая энергия движения электрона в



Рис. 4. Зависимость высоты максимального барьера для электронов $\Delta E_{\rm c}^{\rm max}$ при $\Delta E_{\rm v} = 25$ мэВ и критической толщины от *x*.

направлении, перпендикулярном слоям; E_c и E_F — край зоны проводимости и уровень Ферми соответственно в области, откуда происходит туннелирование; m — эффективная масса электрона; k — постоянная Больцмана; T — температура; D — коэффициент туннельного прохождения через барьер.

Для потенциального барьера прямоугольной формы высоты U и толщины a коэффициент прохождения частицы [11] для E < U

$$D = \frac{1}{1 + \frac{(k_1^2 + k_2^2)^2}{4k_1^2 k_2^2}} \operatorname{sh}^2 k_2 a$$
(2a)

и для E > U

$$D = \frac{1}{1 + \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2}{4k_1^2 k_2^2} \sin^2 k_2 a}.$$
 (26)

Здесь $k_1 = \sqrt{2mE/\hbar^2}, k_2 = \sqrt{2m|U-E|/\hbar^2}.$

Вообще говоря, форма барьера зависит от падения напряжения между областями слева и справа от барьера, которое определяет изгиб зон и взаимное расположение краев зоны проводимости в разных частях структуры. Однако для простоты будем полагать, что барьер имеет прямоугольную форму, и для оценок положим, что $U = \Delta E_c^{max}$, $E_F = E_c$, $m = 0.07m_0$, где m_0 — масса свободного электрона, T = 300 К.

На рис. 5 представлены результаты расчета плотности потока прохождения электронов через прямоугольный потенциальный барьер на гетерогранице. При этом толщина барьера *а* выбрана равной критической толщине слоя ($a = h_{\rm cr}$), ограниченной, в зависимости от содержания индия в слое, формированием дислокаций, либо переходом к островковому росту. Как видно, минимальный поток прохождения электронов через барьер достигается при $x \approx 0.232$. Соответствующая найденному оптимальному содержанию индия высота барьера составляет 117 мэВ, степень асимметрии барьера



Рис. 5. Зависимость от *x* плотности потока прохождения электронов через прямоугольный потенциальный барьер высотой $\Delta E_{\rm c}^{\rm max}$ и толщиной *a*: $1 - h_{\rm cr}$, $\Delta E_{\rm v} = 25$ мэВ; $2 - a = 0.8h_{\rm cr}$, $\Delta E_{\rm v} = 25$ мэВ; $3 - a = h_{\rm cr}$, $\Delta E_{\rm v} = 0$ мэВ.

 $\Delta E_c/\Delta E_v = 4.68$ (в работах [2,3] степень асимметрии составляла около 2.8). При этом предельная толщина слоя около 11.2 нм (см. рис. 4), содержание алюминия в волноводе 0.355, а параметр y = 0.774. Оптимальный химический состав слоя барьера таким образом записывается формулой In_{0.232}(Al_{0.774}Ga_{0.226})_{0.768}As, или в альтернативной записи In_{0.232}Al_{0.594}Ga_{0.174}As.

Уменьшение толщины барьерного слоя позволяет снизить вероятность нарушения планарного псевдоморфного роста вследствие неконтролируемых флуктуаций условий осаждения. На рис. 5 также приведены результаты расчета, выполненного для $a = 0.8h_{\rm cr}$. Как видно, и в этом случае поток достигает минимального значения приблизительно при таком же содержании индия (0.231) в материале АБС, а минимальное значение *R* оказывается лишь на 30% выше, чем для $a = h_{\rm cr}$.

В том случае, если ΔE_v фиксирован на нулевом уровне, минимальный поток прохождения электронов достигается для x = 0.236 (для $a = h_{\rm cr}$). При этом предельная толщина слоя составляет 10.3 нм, высота барьера для электронов 82 мэВ, а поток прохождения электронов через барьер — более чем в 4 раза выше по сравнению со случаем $\Delta E_v = 25$ мэВ.

4. Заключение

Таким образом, нами рассмотрены различные составы двумерных псевдоморфных слоев InAlGaAs, которые могут быть использованы для формирования асимметричного потенциального барьера в лазерном волноводе высота барьера для дырок может составлять 25 мэВ и менее, тогда как высота барьера для электронов должна превышать 100 мэВ. При заданном содержании индия наибольшая высота барьера в зоне проводимости достигается при определенном составе AlGaAs волновода, таком, при котором что зонная структура четверного твердого раствора материала барьера переходит от прямой зоны к непрямой. С ростом содержания индия максимальный барьер для электронов растет, однако снижается предельная толщина барьерного слоя вследствие роста рассогласования. Имеется такая комбинация составов, при которой поток прохождения электронов через асимметричный барьерный слой минимален. Для комнатной температуры и высоты дырочного барьера 25 мэВ оптимальная комбинация барьера и волновода определены как In_{0.232}Al_{0.594}Ga_{0.174}As и Al_{0.355}Ga_{0.645}As соответственно. Степень асимметрии высоты барьеров для носителей заряда различного знака составляет около 4.7.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 14-42-00006 "Новый тип полупроводниковых лазеров с характеристиками, улучшенными за счет использования асимметричных барьеров").

Список литературы

- [1] L.V. Asryan, S. Luryi. Sol. St. Electron., 47 (2), 205 (2003).
- [2] A.E. Zhukov, N.V. Kryzhanovskaya, F.I. Zubov, Y.M. Shernyakov, M.V. Maximov, E.S. Semenova, K. Yvind, L.V. Asryan. Appl. Phys. Lett., **100** (2), 021 107 (2012).
- [3] Ф.И. Зубов, А.Е. Жуков, Ю.М. Шерняков, М.В. Максимов, Н.В. Крыжановская, К. Yvind, Е.С. Семенова, Л.В. Асрян. Направлено в ПЖТФ.
- [4] A.N. Ambrajei, J.E. Clendenin, A.Y. Egorov, Y.A. Mamaev, T. Maruyama, G.A. Mulhollan, A.V. Subashiev, Y.P. Yashin, V.M. Ustinov, A.E. Zhukov. Appl. Surf. Sci., 166 (1–4), 40 (2000).
- [5] Yu.A. Mamaev, L.G. Gerchikov, Yu.P. Yashin, D.A. Vasiliev, V.V. Kuzmichev, V.M. Ustinov, A.E. Zhukov, V.S. Mikhrin, A.P. Vasiliev. Appl. Phys. Lett., 93 (8), 081 114 (2008).
- [6] L.V. Asryan, N.V. Kryzhanovskaya, M.V. Maximov, A.Yu. Egorov, A.E. Zhukov. Semicond. Sci. Technol., 26 (5), 055 025 (2011).
- [7] А.Е. Жуков, Н.В. Крыжановская, М.В. Максимов, А.Ю. Егоров, М.М. Павлов, Ф.И. Зубов, Л.В. Асрян. ФТП, 45 (4), 540 (2011).
- [8] M.P.C.M. Krijn. Semicond. Sci. Technol., 6, 27 (1991).
- [9] V.M. Ustinov, A.E. Zhukov, A.Yu. Egorov, N.A. Maleev. *Quantum dot lasers* (N.Y., Oxford University Press, 2003) p. 64.
- [10] R. Tsu, L. Esaki. Appl. Phys. Lett., 22 (11), 562 (1973).
- [11] Л.Д. Ландау, Е.М. Лившиц. Квантовая механика. Нерелятивистская теория (М., Физматлит, 2008) с. 108.

Редактор А.Н. Смирнов

Optimization of asymmetric barrier layers in InAIGaAs/AIGaAs laser heterostructures on GaAs substrates

A.E. Zhukov^{*+}, L.V. Asryan[●], E.S. Semenova[♦], F.I. Zubov^{*+}, N.V. Kryzhanovskaya^{*}, M.V. Maximov^{■*+}

* St. Petersburg Academic University and Nanotechnology Research and Education Centre, Russian Academy of Sciences, 194021 St. Petersburg, Russia
+ St. Petersburg State Polytechnical University, 195251 St. Petersburg, Russia
• Virginia Polytechnic Institute and State University, Blacksburg, Virginia 24061, USA
• DTU Fotonik, Technical University of Denmark, Kgs. Lyngby, DK-2800, Denmark
I loffe Physicotechnical Institute, Russian Academy of Sciences, 194021 St. Petersburg, Russia

Abstract Heterojunction band edge offsets have been calculated for various combination of InAlGaAs/AlGaAs pairs, which can be epitaxially grown on a GaAs substrate under pseudomorphic growth regime. Relations have been revealed that can be used to realize an asymmetric barrier layer, which provide nearly unobstructed hole transport, whereas the electron barrier has a maximal possible height. Taking into account a critical layer thickness limitation for indium content in the quaternary alloy, optimal chemical compositions have been found ($In_{0.232}Al_{0.594}Ga_{0.174}As/Al_{0.355}Ga_{0.645}As$) that results in the minimal electron flux through the barrier.