

國立彰化師範大學物理研究所

碩士論文

指導教授：郭艷光 教授

氮化銦鎵量子井雷射之電子溢流現象與電洞不均勻性

探討

Electronic Current Overflow and Inhomogeneous Hole

Distribution of the InGaN Quantum Well Structures

研究生：張誌原 撰

中華民國九十一年六月

國立彰化師範大學物理研究所

碩士論文

研究生：張誌原

氮化銦鎵量子井雷射之電子溢流現象與電洞不均勻性

探討

Electronic Current Overflow and Inhomogeneous Hole

Distribution of the InGaN Quantum Well Structures

本論文業經審查及口試合格特此證明

論文考試委員會主席

黃炳芳

委員：郭艷光 吳柏松 林明

指導教授：郭艷光教授

郭艷光

所長：徐力行主任

徐力行

中華民國九十一年六月

授權書

(博碩士論文)

本授權書所授權之論文為本人在 彰化師範大學 物理 研究所 90 學年度第 2 學期取得 碩 士學位之論文。

論文名稱：氮化銦鎵量子井雷射之電子溢流現象與電洞不均勻性探討

同意 不同意

本人具有著作財產權之論文全文資料，授予行政院國家科學委員會科學技術資料中心、國家圖書館及本人畢業學校圖書館，得不限地域、時間與次數以微縮、光碟或數位化等各種方式重製後散布發行或上載網路。本論文為本人向經濟部智慧財產局申請專利的附件之一，請將全文資料延後兩年後再公開。(請註明文號：)

同意 不同意

本人具有著作財產權之論文全文資料，授予教育部指定送繳之圖書館及本人畢業學校圖書館，為學術研究之目的以各種方法重製，或為上述目的再授權他人以各種方法重製，不限地域與時間，惟每人一份為限。

上述授權內容均無須訂立讓與及授權契約書。依本授權之發行權為非專屬性發行權利。依本授權所為之收錄、重製、發行及學術研究利用為無償。上述同意與不同意之欄位若未鉤選，本人同意視同授權。

指導教授姓名： 郭艷光

研究生簽名：
(親筆正楷)

學號：8922208
(務必填寫)

日期：民國 91 年 6 月 15 日

-
1. 本授權書請以黑筆撰寫並影印裝訂於書名頁之次頁。
 2. 授權第一項者，請再交論文一本予畢業學校承辦人員或逕寄 106-36 台北市和平路二段 106 路 1702 室國科會科學技術資料中心王淑貞。(電話 02-27377746)
 3. 本授權書已於民國 85 年 4 月 10 日送請內政部著作權委員會(現為經濟部智慧財產局)修正定稿。
 4. 本案依據教育部國家圖書館 85.4.19 台(85)圖編字第 712 號函辦理。

誌 謝

對於本篇論文的完成，首先要感謝我的指導教授郭艷光老師這五年來（從大二到現在）無私的教誨與指導，使我從當初懵懂無知的小毛頭成長為現今的我。他的一些生活習慣與態度，如：對學生的熱忱、對環保的執著以及生活上的潔癖 等等，雖然在相處的當時會覺得稍許的麻煩與不耐，但是卻在不知不覺間對我們產生了潛移默化的作用，使我們在待人處世以及生活態度上更加的積極與成熟。在此，致上我最深切與誠懇的感謝。

感謝三位口試委員百忙中撥空來參加我的碩士論文口試，並且給予我相當中肯與實用的建議，由於他們的指導與建議，使我對所研究的內容有更深入的瞭解與體會。另外特別要感謝系上的楊淳青老師，他的支持與鼓勵給予我相當多的信心與面對問題時的勇氣。

感謝實驗室的伙伴們：由於國凱學長的指導與協助，使我在剛加入實驗室時能很快的進入狀況，他那開朗的個性與爽朗的笑聲更是枯燥的實驗過程中最佳的調劑；謝謝老同學文偉與郁妮這兩年來的陪伴，這段一同挨罵、一同熬夜的日子將是令人難以忘懷的；也要謝謝實驗室最可愛的學弟們：詒安、志康、鴻銘、嘉慶，因為他們讓我的生活更加的多采多姿且充滿歡笑。

特別要感謝我最親愛的家人：爸爸、媽媽、老姊以及欣玲，由於有他們多年來的付出與支持，使我在求學過程中得以專心致志；在此僅以此論文獻給他們。最後，要感謝所有曾經給予過我幫助的人們。

目 錄

目錄	iv
中文摘要	ix
英文摘要	x
圖表索引	xii
第一章 緒論	1
1.1 藍 綠光發光元件簡介	2
1.1.1 砷化鋁鎵系統與磷化鋁鎵銻系統	3
1.1.2 磷化鎵系統	3
1.1.3 硒化鋅系統	4
1.1.4 碳化矽系統	4
1.1.5 III-V 族氮化物系統	4
1.2 氮化銻鎵發光元件簡介	6
第二章 III-V 族氮化物系統之材料特性簡介	10
2.1 基板	10

2.1.1	藍寶石基板	11
2.1.2	碳化矽基板	11
2.1.3	ELOG 基板	12
2.1.4	其他可用的基板	13
2.2	能帶間隙	14
2.3	能隙補償差	19
2.4	載子有效質量	23
2.5	晶格常數	25
2.6	磊晶法	26
第三章	氮化鎵單一量子井雷射之電子溢流現象	29
3.1	造成電子溢流的原因	30
3.1.1	原因一：臨界電流值較高	30
3.1.2	原因二：量子井寬度較窄	31
3.1.3	原因三：電洞不容易傳輸至活性區中	31
3.1.4	原因四：導電帶的能隙補償差較低	32
3.2	模擬結構與參數設定	33

3.3	模擬結果與分析	34
3.3.1	氮化銦鎵單一量子井雷射之電子溢流現象 ..	34
3.3.2	改善方法一:提升 p 態摻雜濃度	37
3.3.3	改善方法二:使用 p 態阻礙層	41
3.3.4	較佳結構設計:同時使用方法一與方法二 ...	46
3.3.5	較佳結構與初始結構之比較	50
3.4	結論	52
第四章	氮化銦鎵量子井雷射之電洞不均勻現象.....	54
4.1	前言	54
4.2	模擬結構與參數設定	56
4.3	模擬結果與分析	56
4.3.1	量子井個數與雷射性能之關係	56
4.3.2	各量子井間的電洞分佈不均勻現象	58
4.3.3	活性區的吸收效應	61
4.3.4	披覆層 p 態摻雜	64
4.4	結論	70

第五章	結論	71
參考文獻	73
附錄A	模擬軟體 (LASTIP) 之使用說明	I
	A.1 材料系統與參數設定	I
	A.2 程式所能模擬的系統、結構	II
	A.3 理論計算與原理	II
	A.4 模擬所能獲得的結果與資料.....	III
	A.5 主要操作程序與流程	IV
	A.5.1 步驟一:建立.layer 檔	VI
	A.5.1.1 直接撰寫.layer 檔	VI
	A.5.1.2 圖形操作介面	VIII
	A.5.2 步驟二: Process .layer file	VIII
	A.5.3 步驟三: Generate Mesh	IX
	A.5.4 步驟四: Setup .sol file	IX
	A.5.5 步驟五: Start the simulation	XI
	A.5.6 步驟六: Setup .plt file	XI

	A.5.7 步驟七: View results	XI
附錄B	模擬中所使用的完整程式內容	XII
	B.1 .layer 檔	XII
	B.2 .gain 檔	XIII
	B.3 .sol 檔	XIV
	B.4 .plt 檔	XIV
附錄C	論文發表清單	XVII
	C.1 SCI 認定英文雜誌論文:5 篇	XVII
	C.2 中文雜誌論文:3 篇	XVIII
	C.3 研討會論文:15 篇	XVIII

中文摘要

本論文主要在探討氮化鎵藍光雷射之電子溢流效應與活性區的電洞分佈不均勻現象。在文章的一開始首先簡介氮化鎵相關系統的材料特性及其發展歷程，並對此一材料發展過程中所遭遇過的已解決以及尚未解決的重大問題作一些概略性的說明。

在文章的主體部分，我利用模擬軟體 *Lastip* 來探討氮化鎵單一量子井雷射與多量子井雷射之各項光學特性與雷射效應，並將研究重點放在電子溢流與電洞分佈不均勻現象對發光效率的影響，及其可能的解決方法。由於氮化鎵異質界面之導電帶能隙補償差較小，再加上電洞之有效質量較大，因此可以預期其電子溢流現象應該相當嚴重，模擬結果證實了此項推論。此外，過大的有效質量也會進一步影響電洞的移動速率，並造成各量子井間不均勻的電洞濃度分佈，嚴重地影響元件的效能，尤其是多量子井元件。

為了改善電子溢流的現象，我試著去增加 p 態薄膜的摻雜濃度以及在活性區之上使用氮化鋁鎵阻礙層，結果成功地抑制溢電流的產生，並大幅地提升系統的效能及其對溫度的穩定性。此外，經由對活性層旁的披覆層進行適度的 p 態摻雜，也有效地改善了活性區內的電洞不均勻現象，並且同樣的造成系統效能的大幅提升。

ABSTRACT

In this thesis, I mainly study the effect of electronic current overflow and the phenomenon of inhomogeneous hole distribution in active region of InGaN blue laser diodes. First of all, I briefly introduce the material characteristics and the development history of the InGaN semiconductor materials. A brief overview of the solved and unsolved problems related to the InGaN materials is also provided.

For the main portion of this thesis, I use the LASTIP simulation software to explore the optical properties and the laser effects of the InGaN single quantum well and multi-quantum well lasers. Special attention is paid to the effects of electronic current overflow and inhomogeneous hole distribution on light emitting efficiency and the possible solutions of its related problems. Because of the small conduction band-offset of the InGaN heterojunction and the large hole effective mass, according to the theory, there must exist series electronic current overflow. My simulation results justify this theoretical expectation. In addition, a large hole effective mass can further affect the hole mobility, and thus causes the inhomogeneous hole distribution among the quantum wells. As a result, this effect will seriously deteriorate the performance of the devices, especially for the multi-quantum well lasers.

In order to improve the overflow phenomenon, the increase of the p-doping concentration and the use of an AlGaN blocking layer beside the

active region have been attempted. Simulation results show that these two methods can effectively restrain the overflow current. In the mean time, it can greatly enhance the performance of the laser device and the stability with respect to the temperature. Furthermore, simulation results also suggest that p-doping of the barriers beside the quantum wells can help improve the phenomenon of the inhomogeneous hole distribution and enhance the system efficiency.

圖表索引

圖1.1	各種使用於可見光發光二極體之材料系統的發光效能與發展年份之關係圖	5
圖2.1	ELOG 基板示意圖	13
圖2.2	III-V 族氮化物及部份可用基板之能帶間隙（特性波長）與晶格常數之分佈圖	14
圖2.3	利用理論模擬（Lastip 模擬）與實驗結果（光激螢光法）相對照，以獲得氮化銦鎵三元化合物之彎曲參數。其中所獲得之彎曲參數值為 3.35 eV。	18
圖2.4	兩種不同形式之能帶組合示意圖。其中 ΔE_c 與 ΔE_v 分別代表導電帶以及價電帶之能隙補償差	20
圖2.5	(a)沒有任何壓電場以及(b)具有應力所造成的壓電場兩種情況下之能帶結構圖	22
圖2.6	雙流法 MOCVD 之(a)反應爐以及(b)原理示意圖	27
圖3.1	在能帶間隙相同的情況下，兩種不同能隙補償差比例之能帶結構圖；其中導電帶能隙補償差較小的結構之溢流程度較嚴重	32
圖3.2	模擬中所使用的氮化銦鎵單一量子井雷射之初始結構圖 ...	34
圖3.3	初始結構之(a)溢電流密度與活性區電流密度在不同輸入電流密度下之變化圖；(b)雷射輸出功率對電流之變化圖	35
圖3.4	初始結構在輸入電流為 200 mA 時之能帶結構圖（虛線為準費米能階），其中圖(b)為圖(a)在活性區附近之放大圖	36

圖3.5	p 態濃度增加為 $3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (其他參數均維持不變) 後之(a)溢電流密度與活性區電流密度在不同輸入電流密度下之變化圖;(b)雷射輸出功率對電流之變化圖	38
圖3.6	不同 p 態摻雜濃度下之(a)溢電流密度對總電流密度之變化圖;(b)雷射輸出功率對輸入電流之變化圖	39
圖3.7	三種不同結構之氮化銦鎵單一量子井雷射。(甲)未加入阻礙層之原始結構;(乙)在 p 態氮化鎵薄膜之後加入一氮化鋁鎵阻礙層;(丙)直接將氮化鋁鎵阻礙層加在活性區之後	42
圖3.8	(a)結構乙與(b)結構丙在不同輸入電流下之溢電流分佈	43
圖3.9	(a)結構乙與(b)結構丙之輸出功率對輸入電流之變化圖	44
圖3.10	氮化鋁鎵阻礙層之鋁的濃度為(a)10 %與(b)30 %時之能帶結構圖(電流為 200 mA)	47
圖3.11	較佳結構(阻礙層之鋁濃度為 10 %、p 態濃度為 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$)之(a)溢電流密度與活性區電流密度在不同輸入電流密度下之變化圖;(b)雷射輸出功率對電流之變化圖	48
圖3.12	較佳結構(阻礙層之鋁濃度為 10 %、p 態濃度為 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$)在不同溫度下之溢電流分佈圖	49
圖3.13	氮化銦鎵單一量子井雷射之功率轉換效率圖;圖中三角形實線所示為原始結構(圖 3.2 之結構)之特性,正方形虛線則為較佳結構(阻礙層之鋁濃度為 10 %、p 態濃度為 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$)之特性	50
圖3.14	氮化銦鎵單一量子井雷射在不同操作溫度下之臨界電流分佈圖;圖中三角形實線所示為原始結構(圖 3.2 之結構)之特性,正方形虛線則為較佳結構(阻礙層之鋁濃度為 10 %、p 態濃度為 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$)之特性	51

圖4.1	Nakamura 等人所發表的量子井個數與臨界電流之關係。其中圖(a)與圖(b)個別摘自參考文獻[50] [51]	55
圖4.2	不同量子井個數之氮化銦鎵半導體雷射的輸出功率與電流之關係圖	57
圖4.3	氮化銦鎵(a)單一量子井雷射(b)雙量子井雷射(c)三量子井雷射在輸入電流為 200 mA 時之能帶結構圖；其中右圖為左圖在活性區附近之放大圖	59
圖4.4	氮化銦鎵(a)單一量子井雷射(b)雙量子井雷射(c)三量子井雷射在輸入電流為 200 mA 時之載子濃度分佈圖；其中左圖為電子濃度,右圖則為電洞濃度	60
圖4.5	氮化銦鎵雙量子井雷射與三量子井雷射之自發輻射率圖以及受激放射率圖(輸入電流為 200 mA)	62
圖4.6	氮化銦鎵雙量子井雷射與三量子井雷射在披覆層摻雜濃度為 $2.3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 時活性區附近之載子濃度圖以及受激放射率圖(輸入電流為 200 mA)	66
圖4.7	氮化銦鎵(a)雙量子井雷射與(b)三量子井雷射在不同披覆層摻雜濃度下之輸出功率與電流之關係圖	67
圖4.8	氮化銦鎵單一量子井雷射與披覆層濃度為 $3.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 之雙量子井雷射與三量子井雷射之輸出功率與電流之關係圖	69
表2.1	氮化鎵之能帶間隙及其溫度相關的各項參數。其中(a)代表使用 optical absorption 法來量測, (p)則是使用光激螢光法來量測	16
表2.2	氮化鋁與氮化銦之能帶間隙及其溫度相關的各項參數	16
表2.3	二元氮化物(wurtzite 結構)異質界面之價電帶能隙補償差(單位為 eV)	21

表2.4	經過修正後(去除掉壓電效應之影響)之價電帶能隙補償差(單位為 eV)	23
表2.5	各文獻中氮化鋁(wurtzite 結構)之有效質量的整理資料。	24
表2.6	各文獻中氮化鎵(wurtzite 結構)之有效質量的整理資料。	24
表2.7	各文獻中氮化銦(wurtzite 結構)之有效質量的整理資料。	24
表2.8	各文獻中氮化鋁、氮化鎵與氮化銦 (wurtzite 結構) 之晶格常數的整理資料	25
表3.1	不同 p 態濃度之氮化銦鎵單一量子井雷射的各項模擬結果整理。其中斜率效率之選取範圍為臨界電流至臨界電流以上 5 ~ 10 mA。	40
表3.2	具有不同鋁濃度氮化鋁鎵阻礙層之氮化銦鎵單一量子井雷射 (結構(乙)) 的各項模擬結果整理。其中斜率效率之選取範圍為臨界電流至臨界電流以上 5 ~ 10 mA。	45
表3.3	具有不同鋁濃度氮化鋁鎵阻礙層之氮化銦鎵單一量子井雷射 (結構(丙)) 的各項模擬結果整理。其中斜率效率之選取範圍為臨界電流至臨界電流以上 5 ~ 10 mA。	45

第一章 緒論

在邁入二十一世紀的今天，影響我們日常生活最大的光源似乎仍然是一般傳統的燈泡，如日光燈、鎢絲燈泡等等，但是光電半導體如發光二極體(LED)以及雷射二極體(LD)卻在不知不覺間悄悄的侵入了我們的生活，譬如說一般家用電器的電源顯示大都使用紅光或黃光的LED，汽機車的煞車燈、尾燈也慢慢變成LED燈組，此外紅色的雷射光筆也被廣泛地運用在演講、教學中，光碟機中更藏著我們看不到的雷射讀寫頭。因此，隨著成本的降低、更多光源的開發(如藍綠光元件)，光電半導體正一步一步的影響我們的生活，甚至有一天可望取代傳統光源，而成為照明的主力。

目前在可見光區域的光電半導體中，以磷化鋁鎵銦(AlGaInP)的紅黃光材料以及氮化銦鎵(InGaN)的藍綠光材料居於主導的地位；其中氮化銦鎵材料系統因為晶格不匹配等問題^{[1]-[4]}，嚴重影響其發展進程。直到80年代末期高品質的p態氮化鎵薄膜研發成功後^[1]，各種突破性的進展在往後的數年間紛紛被研究出來；其中日本的日亞公司在這一波的研發浪潮中佔了舉足輕重的地位，除了提出許多爆炸性的技術改進外，更首次將氮化銦鎵藍綠光發光二極體、藍光雷射推上商業化量產的里程碑。

即使氮化銦鎵材料在過去十多年間已經被廣泛的研究與討論，但

是由於許多的現象與理論仍然未能被合理、有系統的解釋，再加上其市場價值高、發展潛力大，因此直至今日，此一材料系統仍然是眾多廠商、研究單位的發展重心與主力。本章接下來的部份將針對藍、綠光發光元件以及 III-V 族氮化物系統作一些基本的發展簡介，至於氮化物系統的一些材料以及元件特性，則將在之後的章節中有更為詳細的說明。

1.1 藍、綠光發光元件簡介

發光二極體與雷射二極體由於具有體積小、重量輕、高亮度、高效率、高反應速度，以及使用壽命長等多項優點^[3]，因此逐漸有取傳統光源而代之的趨勢；但是在其整體的發展歷程中，卻存在著一項嚴重的問題，因而影響其推廣與普及化：缺少高效率、高亮度的短波長元件，例如藍光與綠光發光二極體。由於藍光與綠光均屬於三原色（紅、藍、綠）之一，因此在全彩顯示器、白光光源等應用上是不可或缺的，是以他們的缺席確實阻礙了半導體發光元件在實際上的應用與普及。因此，許多研究人員紛紛投入短波長發光元件的研發與改良，包括：第 IV 族的碳化矽（SiC）、II-VI 族的硒化鋅（ZnMgSSe）及 III-V 族氮化物等材料都已經被廣泛的研究^{[1],[3]}，本節接下來的部份將就可能應用在藍、綠光波段的半導體材料做一概略性簡介，並說明其優缺點。

1.1.1 砷化鋁鎵系統與磷化鋁鎵銻系統

在可見光的長波長（紅、黃光）部分，由於發展較早再加上具有晶格匹配又可導電的砷化鎵基板，因此整體的發展技術已達成熟的階段，其中最具代表性的材料系統有兩個：砷化鋁鎵系統與磷化鋁鎵銻系統。砷化鋁鎵紅外線與紅光元件在 90 年代以前就已經發展的相當完善，但是若要往更短波長發展（增加鋁的含量），則會遭遇到間接能隙（indirect bandgap）特性愈趨明顯^[3]，以及高鋁含量所衍生的缺陷問題，因而嚴重影響系統的效能。

相較於砷化鋁鎵，磷化鋁鎵銻系統因為具有較大的能帶間隙（energy bandgap），因此已經被廣泛的使用在紅、黃、綠光發光二極體與紅光雷射上，其中綠光發光二極體之發光波長為 570 nm（屬於黃綠光，而非純的綠光），外部量子效率約為 1 %；一旦其發光波長要再往更短波長發展，則會遭遇到與砷化鋁鎵系統類似的問題，使得整體的效能大幅的往下降^[1]，並因此而無法達到商業化的性能要求。

綜合以上的結論，我們可以知道要獲得高亮度、高效率的純粹綠光（510 ~ 530 nm）發光二極體，使用這兩種在長波長區域已然高度發展的材料是不可行的。

1.1.2 磷化鎵系統

另一個常用的綠光發光二極體為磷化鎵發光二極體，其發光波長為 555 nm（依舊是黃綠光），外部量子效率則僅約為 0.1 %；這麼小的

效率是由於磷化鎵是屬於間接能隙的材料^{[1],[3]}，因此磷化鎵仍然不是高效率藍、綠光元件的適當材料。

1.1.3 硒化鋅系統

在 II-VI 族的材料中，硒化鋅系統由於具有夠大的能帶間隙，且屬於直接能隙的材料，再加上具有晶格匹配的砷化鎵基板（需適當的調整材料的成份比例），因此曾引起眾多學者的注意並投入研發工作；但是由於其元件之使用壽命過短（綠光發光二極體約 100 小時、綠光雷射則僅約 1 小時），因此嚴重影響其商業化的可能性。至於其過短的生命週期則是來自於晶體本身的缺陷^{[1],[3],[4]}。

1.1.4 碳化矽系統

第 IV 族的碳化矽材料則是另一個能帶間隙較高的材料，並且具有熱導率高、摻雜容易等優點，因此成為最早商業化的藍光發光二極體。但是由於其能隙結構屬於間接能隙，再加上不易形成異質接面結構（heterostructure），故發光效率不高；只是在沒有其他高亮度、高效率的藍光元件大量供應下，碳化矽材料仍然存在其市場價值^{[1],[3]}。

1.1.5 III-V 族氮化物系統

本篇論文所指的 III-V 族氮化物主要為氮化鋁鎵銻（AlGaInN）系列材料，未包含硼（B）與銻（Tl）兩種原子的原因主要是因為它們的原子大小較為極端（太小或太大），再加上其化合物之發光波長不在可

見光範圍內，因此目前大多數的研究人員均只將研究重點放在氮化鋁鎵銻系列上。

III-V 族氮化物系統由於能帶結構屬於直接能隙，且能帶範圍很廣（1.95 ~ 6.2 eV），因此相當適合於短波長區域的應用。但是由於缺乏晶格匹配的基板（以最常被使用的藍寶石基板為例，其晶格不匹配度高達 16.3 %），所以一直不被科學界所重視，直到最近十多年間長晶技術有了大幅度的突破，才引起眾人的注意，並成為目前藍、綠光發光元件的發展主流。

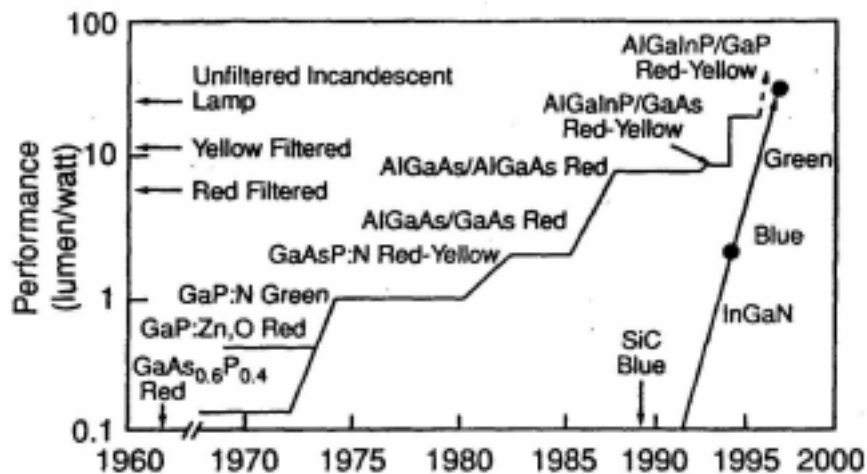


圖 1.1 各種使用於可見光發光二極體之材料系統的發光效能與發展年份之關係圖。

圖 1.1 是歷年來各種可見光發光二極體材料系統之發光效能與發展年份之關係圖^[3]。從圖中可以看出隨著年份的增加以及材料系統的開

發，發光二極體的效能成倍數的增加（從 60 年代末期到 90 年代中期，系統的效能整整增加了數百倍之多）。此外，圖 1.1 也顯示出大多數高效能的發光二極體均屬於紅、黃光波段，藍、綠光元件的系統效能並不佳，唯一的例外是氮化鎵發光二極體；氮化鎵材料自 90 年代初期竄起後，其系統效能在短短的數年間急劇的增加，直逼磷化鋁鎵鎵紅、黃光發光二極體，並因而成為當前藍、綠光發光二極體的主流材料。氮化物相關的特性與發展將在下一節中有更詳細的說明。

1.2 氮化鎵發光元件簡介

如同前面所提到的，III-V 族氮化物在短波長區域具有相當大的潛力，因此在沒有合適的短波長光源的情況下，應當是可以用有很大的發展空間。可是事實卻不然，氮化物元件直到 80 年代末期才開始引起眾多學者的注意，並投入大量的研究人力與資源；其主要的的原因有兩點：一是找不到晶格相匹配的基板，另外一個原因則是不容易獲得高品質的 p 態薄膜^{[1],[3]}。

在 80 年代，光電半導體相關元件由於技術與理論漸趨成熟，因此開始蓬勃發展。但是大部分學者在開發新的元件時往往將晶格匹配列為最優先的條件之一^[1]，這是因為就當時的技術而言，要將與基板晶格不匹配的材料成長成高品質的晶片是相當不容易的，並且所形成元件的生命週期也比較短。這也是為什麼當時的研究人員不看好氮化物系統，而將大部分的時間花在探討其他晶格匹配的材料上（例如：長在

砷化鎵基板上的硒化鋅材料) 的原因。

另外一個阻礙氮化物發展的原因則是 p 態薄膜的成長較為困難^{[1]-[4]}。早期的氮化鎵薄膜往往在未經摻雜的情況下呈現出 n 態的特性，這種現象被認為是來自於氮原子的空缺 (nitrogen vacancy)，或是氧原子取代部分氮原子所造成的^[1]。不論是上述哪一種情況，對晶體而言都是缺陷的表現，因此在當時高品質的氮化鎵薄膜不易獲得。而就 p 態的氮化鎵薄膜而言，這種長晶困難的問題更為明顯，其主要的原因是來自於受子 (acceptor) 原子與氫原子的化合，而造成晶體鈍化 (passivation) 的現象^[1]。由於缺乏高品質的 p 態薄膜，因此嚴重的阻礙氮化物進一步形成有用的二極體元件，如發光二極體與雷射二極體。

隨著長晶技術的進步，上述的現象也都漸漸獲得解決，但是就元件的運用來說仍然存在一個嚴重的問題：晶體的缺陷密度太高。在運用 ELOG (epitaxially laterally overgrown GaN) 基板^{[4],[5]}來降低缺陷的情況下，缺陷密度仍然高達 10^7 cm^{-2} 左右^[5]，這樣的結果雖然已經遠較直接長在藍寶石基板上的缺陷密度 (約 10^{10} cm^{-2}) 來得低^[5]，但是仍然比晶格匹配的系統明顯的大了許多。

Nakamura 等人的研究指出成長在 ELOG 基板 (缺陷密度較低) 與藍寶石基板 (缺陷密度較高) 上的藍光發光二極體之輸出功率及量子效率均雷同^[5]，顯示出在氮化物元件中大部分的缺陷並不會形成非放光性再結合中心 (nonradiative recombination center)，而影響元件的發光效能。此外，氮化鎵相關材料的長晶溫度常常高達 1000°C 左右^{[1]-[3]}，

再加上高溫退火的處理過程，使得原子彼此間具有充分的能量進行適當且緊密的排列，是故其元件雖然缺陷密度高但結構卻相當穩固，不容易損壞。

另外一個對氮化物有利的條件則是易於形成異質界面結構；經由適當調整第 III 族元素的成份比例，就可以獲得異質界面甚至雙異質界面之結構，這種結構的形成對元件效率的提昇有相當大的幫助。在之前曾經提到其他材料的發展過程中，間接能隙的能帶結構影響了許多元件的發光效率，並因而阻礙其發展與應用；在氮化物系統中則沒有這一方面的顧慮，因為氮化鋁 (AlN)、氮化鎵 (GaN)、氮化銦 (InN) 皆屬於直接能隙材料，因此其合成的三元或四元化合物也就都屬於直接能隙的特性，發光效率都很高。

此外，上述三種二元化合物的能帶間隙分別為 6.2 eV、3.4 eV 與 1.95 eV (此為概略數值，在第二章中將有詳細的文獻探討)，如果適當的調整其成份，三元或四元化合物的波長範圍將可涵蓋整個可見光範圍與部份紫外光區域；這種寬廣的能帶間隙範圍正是 III-V 族氮化物發光元件的發展潛力之一。

如同前面所敘述的，氮化物雖然具有許多研究人員所不欲見到的問題，但卻也有不少的優點存在；科學家們就針對這些優點去加以突破、發展，終於得到了耀眼的成果。西元 1993 年，日本的日亞公司成功地製造出商業化的氮化鎵藍光發光二極體^[1]；1996 年，綠光發光二極體也進入商業化階段^[1]；隨後在 1999 年更進一步達到了紫外光雷射

二極體量產的目的^[6]。

以上這些發展歷程不只代表了 III-V 族氮化物在短波長區域建立了穩固的地位，同時也宣示著全彩時代的來臨。經由氮化物的參予，從此以後，更多樣的產品與應用，如：戶外大型全彩顯示器、高亮度白光光源、高密度 DVD 等，將大舉入侵我們的生活，並進一步的提升生活水準與品質。但是這些成果並不代表著 III-V 族氮化物的發展終點，相反的許多原理探討與系統最佳化工作仍有待我們進一步的努力，例如：壓電效應的探討、缺陷的排除、晶格匹配基板的研發 等，以求進一步提升元件的效能。此外，除了深度的探討之外，更多方面的推廣與應用也應同時被注重，如：面射型半導體雷射的研發、被動 Q 開關半導體雷射的可能性 等。藉由深度與廣度同時的探討，才能將氮化物的應用發揮的淋漓盡致，推向另一個歷史的里程碑。

第二章 III-V 族氮化物系統之材料特性簡介

III-V 族氮化鋁鎵銻系統（簡稱為氮化物系統）是由三個二元的化合物：氮化鋁、氮化鎵、氮化銻所混合而成的三元或四元化合物。其材料特性會隨著第三族元素所佔的比例之不同而有所不同。此外，隨著基板材料的不同，所成長出來的氮化物也可以大致被區分為六方晶系的 wurtzite 結構以及立方晶系的 zinc-blende 結構這兩種晶體結構^[1]，這兩種結構的各項材料特性也各不相同。由於最近十多年來 wurtzite 氮化物的發展有許多的突破與斬獲，因此成為目前各方面發展的主流；接下來的材料特性探討將以此一結構為主。

2.1 基板

要獲得高品質的半導體元件，基板的選擇是相當基本與重要的一環。因為基板的品質會直接影響到形成元件後的各項特性，例如：基板與磊晶材料之間的晶格匹配程度會直接關係到元件內部缺陷的多寡，進而影響到元件的發光效率與使用壽命。一個會吸收發光元件之特性波長的基板對元件的發光效率有相當負面的影響，因此具有合適的基板可以說是形成高品質光學元件的必備要素之一。

在光電半導體材料中，氮化物是相當罕見沒有合適的基板而又能高度發展的材料，這主要是因為沒有其他適當的短波長材料與之競爭，另一方面則歸功於氮化物本身穩固的材料特性與夠強的發光能

力。接下來將針對數個常作為氮化物基板材料加以介紹；由於目前被廣泛討論的氮化物元件大部份是屬於六方晶系中的 wurtzite 結構，因此接下來所要介紹的藍寶石基板、碳化矽基板、ELOG 基板均屬於這個結構。

2.1.1 藍寶石基板

藍寶石 (Al_2O_3 ，英文名稱為 sapphire) 基板是目前最常用於氮化物磊晶的基板^{[1]-[4]}，具有價格便宜、硬度高、耐高溫等優點；且在藍綠光區域，藍寶石是透明不吸光的。但是藍寶石與氮化鎵具有相當高的晶格不匹配度 (約 16.3%)，即使是在以氮化鋁為緩衝層的情況下，其臨界厚度 (critical thickness) 仍然只有 3 nm 左右^[4]，因此形成元件後往往具有相當高的缺陷密度。此外，因為藍寶石本身是絕緣體且屬於六方晶系，因此無論是 n 型電極的製作或共振晶面的形成都需要用到離子蝕刻的技術，不只大幅增加製作成本，且蝕刻面的粗糙度也會對元件的品質造成影響。儘管藍寶石基板具有上述不可避免的缺點，但是由於在市面上以低價就可以獲得大面積且高品質的晶體，再加上沒有其他更好的基板可以加以利用，因此目前藍寶石基板仍然被廣泛使用於氮化物元件^[4]。

2.1.2 碳化矽基板

六方晶系的碳化矽 (6H-SiC) 基板是另一個常用的基板；其與氮化鎵的晶格不匹配度 (只有 3.5%，若是跟氮化鋁相比則更小) 比藍寶

石基板來的小，且又具有高熱導率、熱膨脹係數與氮化鎵相近、可直接斷裂形成共振面等優點^[6]；再加上碳化矽可以導電又能 n、p 態摻雜，因此電極可以製作在基板上，而不必再經過蝕刻等額外處理過程，除了可以簡化結構外，也節省了一些製程上的額外花費。但是由於碳化矽基板造價較昂貴，在較短波長處又會吸收（碳化矽的能帶間隙約為 2.90 eV）^[7]，因此目前主流的基板材料仍然是藍寶石基板。

2.1.3 ELOG 基板

另外一種值得一提的基板是 ELOG (epitaxially laterally overgrown GaN) 基板^{[4],[5]}。它的主要目的是利用在氮化鎵緩衝層中埋入週期性排列的長條狀二氧化矽，以降低由於晶格不匹配所產生的晶格錯位延伸到晶體內部。ELOG 基板的製作方式是先在藍寶石或碳化矽基板上長一層 0.2 μm 厚的氮化鎵緩衝層，接著再將厚 0.1 μm、寬 7 ~ 8 μm 的二氧化矽長條以約 4 μm 的間隔寬度週期性的長在氮化鎵緩衝層上，接著再繼續成長氮化鎵薄膜。氮化鎵會先在二氧化矽長條間的空隙中沉積，接著再橫跨二氧化矽長條與另一邊的氮化鎵會合，最後形成連續且平坦的氮化鎵薄膜。圖 2.1^[4]所示即為 ELOG 基板之結構示意圖。上述 ELOG 基板的各項維度在不同的研究群中或許會有不同的設定，但基本的構造大致不變。

實驗結果顯示出這種利用 ELOG 基板所成長的氮化鎵晶片能夠有效的將缺陷集中在二氧化矽長條與長條之間 window 區的中間上方區

域，因此而降低二氧化矽長條與 window 區上方區域之缺陷密度；主要的發光結構就是成長在這些缺陷密度較少的區域上。由於元件必須要形成在缺陷密度較少的區域上方，因此元件的大小就會受到限制；此外，要讓元件完整的位於缺陷少的區域也需要相當程度的技術支援；因此如何將低缺陷區域之面積擴大就顯得相當重要。目前許多研究人員都已經開始朝這一方向努力，相信不久的將來就可以獲得豐碩的成果。

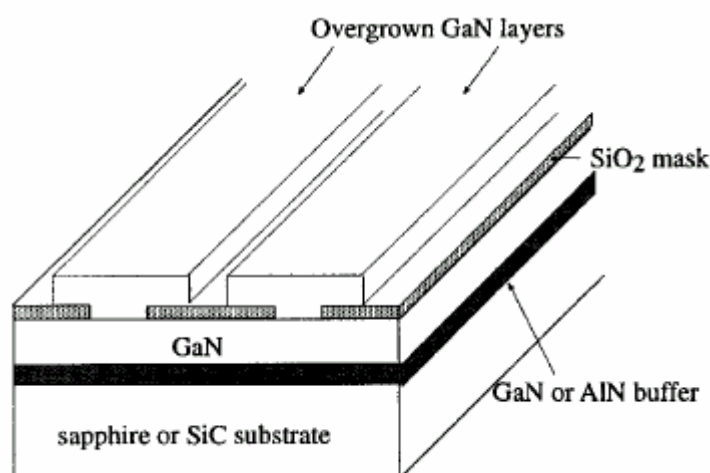


圖 2.1 ELOG 基板示意圖。

2.1.4 其他可用的基板

除了上述所描述的基板之外，科學家們也嘗試要開發新的基板材料，期望能藉此而改善氮化物元件的各項特性與效能，包括：砷化鎵、矽、 $MgAl_2O_4$ 、玻璃、石英玻璃與氧化鋅等都曾被討論過。圖 2.2^[2]所

示為除了藍寶石基板外，一些晶格常數與熱膨脹率跟氮化物較匹配的基板；其中氧化鋅($a=3.32 \text{ \AA}$ $c=5.213 \text{ \AA}$)基板屬於 wurtzite 結構, 3C-SiC ($a=4.36 \text{ \AA}$) 與氧化鎂 ($a=4.22 \text{ \AA}$) 基板則屬於立方晶系的 zinc-blende 結構^[2]。

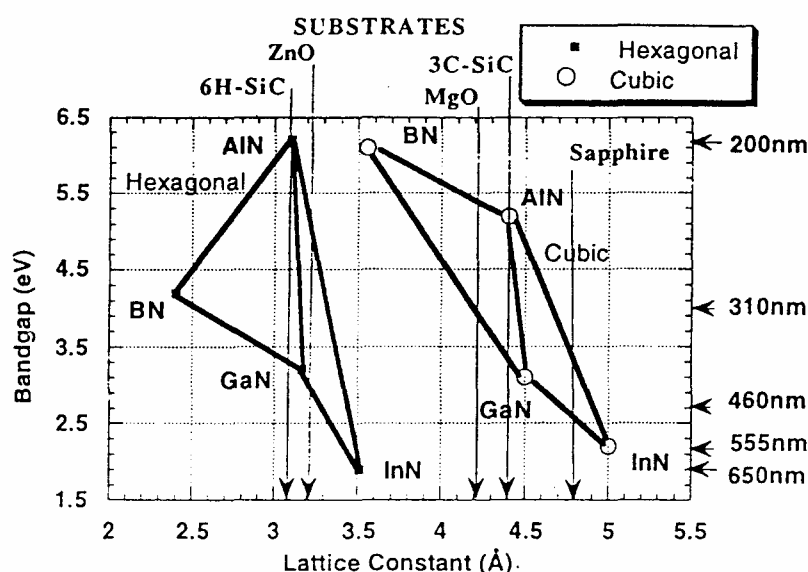


圖 2.2 III-V 族氮化物及部份可用基板之能帶間隙（特性波長）與晶格常數之分佈圖。

2.2 能帶間隙

在光電半導體材料的各項性質中，能帶結構以及能帶間隙（有時被簡稱為能隙）值是相當重要的一項性質。因為材料屬於直接能隙或間接能隙會對元件的發光效率產生相當程度的影響，因此如果能提早知道這項特性，將有助於結構設計及材料選擇的進行，這在能帶範圍

涵蓋直接與間接能隙兩種能帶結構的多元化合物系統（如磷化鋁鎵銻系統）尤其重要。此外，能帶間隙的大小一旦確定，對元件設計以及發光波長的預測也將有相當大的幫助。

III-V 族氮化物系統是由氮化鋁、氮化鎵和氮化銻三種二元化合物混合而成，其中三者的能帶結構皆屬於直接能隙，因此其化合而成的三元或四元的化合物（氮化銻鎵、氮化鋁鎵、氮化鋁銻以及氮化鋁鎵銻）也都具有直接能隙的特性；這代表著無論我們如何調整其成份及濃度都不會造成發光效率的大幅降低，此一特性正是氮化物會被看好能成為高效率藍綠光元件的原因之一。

如同前面所提到的，氮化物主要是由上述三種二元化合物混合而成，因此其能帶間隙值也是這些二元化合物的能帶間隙值之組合而成。接下來將先探討這三個二元化合物在各個溫度下之能帶間隙值，接著再延伸至氮化銻鎵三元化合物。這裡特別探討氮化銻鎵的原因是因為 III-V 族氮化物元件通常以其為活性層之材料（因為其能帶間隙最小），因此它的能帶間隙大小將直接關係到元件的發光波長，是故特別重要。

在能帶間隙隨溫度而變化的特性方面，許多半導體材料（包括氮化物）常使用 *Varshni* 公式來描述此一特性^[8]：

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (2.1)a$$

其中 $E_g(T)$ 為溫度 T K 時之能帶間隙， $E_g(0)$ 則為溫度 0 K 時之能帶間隙；

α 值為經驗常數， β 值亦為常數，且約略等於 0 K 時之 *Debye* 溫度。而這些常數的求法則是利用各種的量測方法（例如：光激螢光法、optical absorption、photoreflectance 等方法）求出不同溫度下之能帶間隙值，再利用 2.1 式去作迴歸分析。

表 2.1 氮化鎵之能帶間隙及其溫度相關的各項參數。其中(a)代表使用 optical absorption 法來量測，(p)則是使用光激螢光法來來量測。

參考文獻	$E_g(0)$ (eV)	α (meV/K)	β (K)	附註
[9]	3.48	0.939	772	MBE、epitaxial layer (a)
[9]	3.57	1.08	745	MBE、bulk (a)
[10]	3.512	0.566	737.9	MOCVD (a)
[10]	3.458	1.156	1187.4	MBE (a)
[11]	3.503	0.508	996	VPE (p)
[12]	3.510	0.856	700	MBE (p)

表 2.2 氮化鋁與氮化銻之能帶間隙及其溫度相關的各項參數。

	$E_g(300)$ (eV)	α (meV/K)	β (K)	附註
AlN ^[13]	6.026	1.799	1462	~
InN ^[13]	1.970	0.245	624	~

表 2.1 與表 2.2 所列的是各種不同的文獻對這三個二元化合物（wurtzite 結構）之能帶間隙與其溫度相關的各項參數之記載。其中氮化鎵因為在較早的時候就已經被廣泛研究，所以在許多文獻中都可以找到其相關資料；而氮化鋁與氮化銦則因為在近期才開始有較多的論文被發表，因此比較少有系統的大溫度範圍之能帶間隙探討。在這之後第三、四章的理論模擬中，我們所使用的能帶間隙值就是使用表 2.1 中參考文獻[10]以及表 2.2 內所列之參數。

在某些文獻中使用另外一個公式來探討能帶間隙隨溫度而變化的特性，且其相關的趨勢亦描述的相當不錯^[14]。

$$E_g(T) = E_g(T) - \frac{2a_B}{\exp(\Theta/T) - 1} \quad (2.2)a$$

其中 H 代表平均的聲子頻率（average phonon frequency）， a_B 則為交互作用的強度（interaction strength），由於目前的學者在分析 III-V 半導體時大多數仍然使用 2.1 式，因此在我們的模擬上亦選擇其作為能帶間隙的設定。

氮化銦鎵是由氮化銦和氮化鎵混合而成的三元化合物，一般表示為 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ，其中 x 代表銦的含量， $1-x$ 代表鎵的含量。氮化銦鎵材料的能帶間隙值一般以氮化銦和氮化鎵之能帶間隙的線性疊加再加上一個二次的修正項來加以表示：

$$E_{\text{InGaN}}(x) = x \cdot E_{\text{InN}}(x) + (1-x) \cdot E_{\text{GaN}}(x) - b \cdot x \cdot (1-x) \quad (2.3)a$$

其中 E_{InGaN} 代表氮化銦鎵的能帶間隙， E_{InN} 與 E_{GaN} 則分別代表氮化銦與

氮化鎵的能帶間隙； b 值為彎曲參數 (bowing parameter , 有些論文稱之為 bowing vector。), 顧名思義是用來描述能帶間隙隨成份比例而成非線性變化的特性。由於氮化銮與氮化鎵的能帶間隙皆為已知 , 因此在確定成份的情況下 , 如果能知道 b 值的大小 , 則材料的能帶間隙值就可以由 2.3 式推知。

許多文獻對 b 值大小的描述相當分歧 , 從 Nakamura 等人所提出的 1.0 eV^[1]到更大的值^{[15]-[23]}都被發表過 , 這主要是因為量測方法的不同與成份比例的不同所造成的差異。此外 , 氮化銮與氮化鎵之能帶間隙值的不一致也會對其造成影響。舉個例來說 , 不同的量測方法對能帶間隙的判斷不見得一樣 , 因此同樣的試片在不同的量測方法下所獲得的 b 值也就可能不同 ; 此外 , 應力 (strain) 效應也會造成能帶間隙值的變化 , 而不同的成份比例又會造成程度不一的應力效應 , 這也是造成 b 值大小無法統一的重要因素之一。

而在我們的模擬設定中 , 則是利用理論模擬與實驗結果相對照的方式來確定 b 值的大小。首先利用光激螢光法量測變溫的氮化銮鎵晶片 , 以求出等效的能帶間隙值 , 再利用 *Lastip* 模擬相同成份材料之發光頻譜 , 其中 b 值設定為可調變數 ; 藉由這兩種方法的互相對照 , 就可以求出與實驗值最相近的 b 值 , 詳細的資料分析如圖 2.3 所示。經由這樣的方式所求出的 b 值大小為 3.35 eV , 與不少研究人員的結果相當接近^{[17]-[19],[21]}。

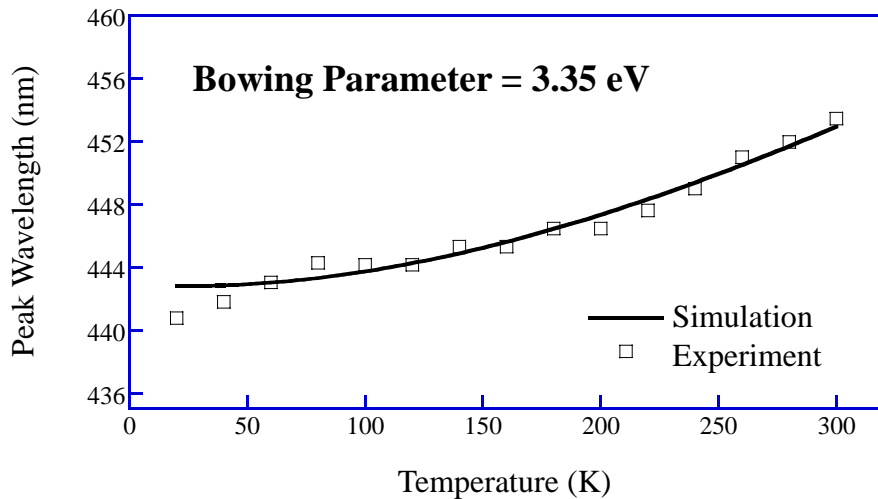


圖 2.3 利用理論模擬 (Lastip 模擬) 與實驗結果 (光激螢光法) 相對照, 以獲得氮化銦鎵三元化合物之彎曲參數。其中所獲得之彎曲參數值為 3.35 eV。

2.3 能隙補償差

能隙補償差 (band offset), 也有人稱之為能隙分裂值 (band discontinuity), 指的是相鄰兩半導體材料在接面處之能隙差值。此一差值的確定對於位能井結構之載子侷限程度的估計以及異質接面元件之結構設計有相當重要的影響。如同前面所提到的, III-V 族氮化物具有三個二元的化合物, 因此總共有六組可能的異質接面組合, 分別為 AlN/GaN、GaN/AlN、GaN/InN、InN/GaN、AlN/InN、InN/AlN (甲/乙代表甲薄膜長在乙層之上), 其相關的能隙補償差在這一節中將會有詳細的探討。

相鄰兩不同能帶間隙之半導體材料（異質界面結構），其能帶組合可能有數種不同的形式，圖 2.4 所示為最常見的兩種形式^[2]。在形式 I（type I）中，其中一個半導體材料的能帶範圍完全位於另一個材料的能帶範圍中，這種能帶組合相當適合於發光元件的設計，尤其是在位能井或量子井元件中。形式 II（type II）的情形則是其中一個材料的能帶範圍並未完全在另一個材料的範圍內，這樣的組合在 II-VI 族的 ZnSe/ZnTe 異質界面中已被發現過，並且被用於克服 p 態電極製作困難的問題^[2]。上述的六種氮化物之異質界面組合皆屬於形式 I 的情況，因此均適合作為發光元件的材料^[2]。

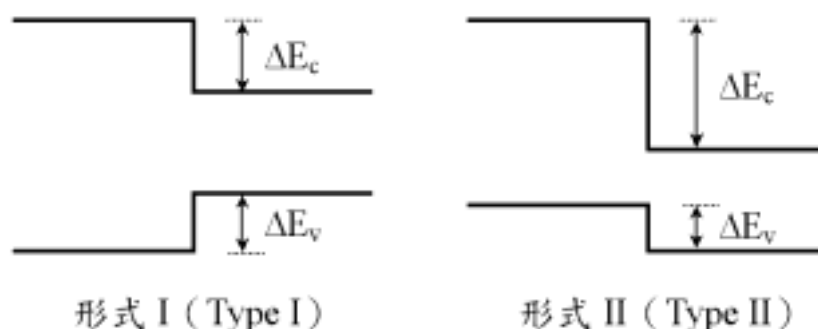


圖 2.4 兩種不同形式之能帶組合示意圖。其中 ΔE_c 與 ΔE_v 分別代表導電帶以及價電帶之能隙補償差。

表 2.3 所示為六種不同文獻所記載的二元氮化物異質界面之價電帶能隙補償差（ ΔE_v ）^{[24]-[29]}，至於導電帶之能隙補償差（ ΔE_c ）則可以利用已知的能帶間隙值以及表 2.4 之數值來推得。從表中我們可以發現

Martin 等人對這六種組合作了詳細的實驗分析（編號 1、2）^{[24]-[25]}，而編號 5、6^{[28]-[29]}中的模擬結果由於並未特別強調甲/乙與乙/甲這兩種組合之差別，所以並不代表他們也完整的分析了這六種組合，相反的，他們只探討了三種組合方式。

表 2.3 二元氮化物（wurtzite 結構）異質接面之價電帶能隙補償差（單位為 eV）

編號	GaN/AlN	AlN/GaN	InN/GaN	GaN/InN	InN/AlN	AlN/InN
1 ^[24]	0.8±0.3	0.8±0.3	~	~	~	~
2 ^[25]	0.60±0.24	0.57±0.22	0.93±0.25	0.59±0.24	1.71±0.20	1.32±0.14
3 ^[26]	0.5±0.5	~	~	~	~	~
4 ^[27]	~	1.36±0.07	~	~	~	~
5 ^[28]	0.81	0.81	0.48	0.48	1.25	1.25
6 ^[29]	0.84	0.84	0.26	0.26	1.04	1.04

從編號 1、2 的實驗數據中我們可以發現到一個有趣的現象：在 GaN/AlN-AlN/GaN 這兩種材料組合中，其 ΔE_v 的數值相當接近；而在 InN/GaN-GaN/InN 與 InN/AlN-AlN/InN 的組合中卻顯示出甲/乙與乙/甲之 ΔE_v 有相當顯著的不同；也就是說只要含有 InN 的異質接面就會有這種 ΔE_v 不對稱的情況產生。在這裡要再次強調一下，所謂的甲/乙指的是甲長在乙之上，且甲層通常很薄，約 5 ~ 20 Å，乙層則較厚，能夠

緩和掉 (relax) 大部份由基板處產生的應力。上述的這種能隙補償差不對稱的情況被認為是來自於氮化物中的壓電場所造成的能帶彎曲 (band bending) 現象^{[2],[4],[25]}。至於壓電場的成因則是由於兩材料的晶格常數不同，於是在介面處就有應力的產生，因此在壓電係數較大的氮化物中產生了不可忽略的壓電場。

圖 2.5 所示為不具有應力與具有應力兩種異質界面下之能帶結構圖 (band diagram) ^{[2],[4],[25]}，從圖中可以明顯的看出在具有應力的情況中，由於能帶的彎曲使得等效的 ΔE_v 值變小了。相對的，如果壓電場的方向相反，則能帶的彎曲將使得 ΔE_v 值變大。在氮化物系統中，因為氮化鋁與氮化鎵的晶格常數較為接近，氮化銮則具有較上述兩者大的晶格常數，因此在含有氮化銮的異質界面中，應力的效應將特別明顯，並因而具有較明顯的 ΔE_v 不對稱性。

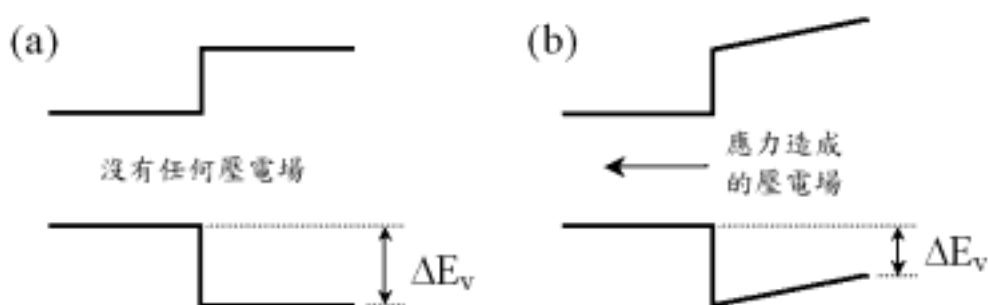


圖 2.5 (a)沒有任何壓電場以及(b)具有應力所造成的壓電場兩種情況下之能帶結構圖。

在 GaN-InN 以及 AlN-InN 的異質介面中，由於晶格不匹配度相當大，因此其臨界厚度（critical thickness）也就非常小（約為 6 Å），所以上層的薄膜往往會由於缺陷的產生而緩和掉部份的應力，因此實際上的壓電效應將較我們所預期的^{[2],[25]}。如果將這些經過緩和後的壓電效應去掉，則可以得到較大的 ΔE_v 數值，如表 2.4 所示。在表 2.4 中我們用甲-乙取代原本的甲/乙之形式，這是因為經過修正後的 ΔE_v 已經不會再有不對稱的情形產生。

表 2.4 經過修正後（去除掉壓電效應之影響）之價電帶能隙補償差（單位為 eV）。

異質介面組合	InN-GaN	GaN-AlN	InN-AlN
ΔE_v	1.05±0.25	0.70±0.24	1.81±0.20

利用上述的數據可以推算出 $\Delta E_c : \Delta E_v$ 之數值，依次為 30 : 70、75 : 25 以及 60 : 40^{[2],[4],[25]}。我們在 *Lastip* 的模擬中就是使用這一組數據來作為氮化物的設定。

2.4 載子有效質量

載子有效質量因為跟材料的能帶結構與載子移動能力有相當密切的關係，因此是半導體材料中相當重要的一項材料特性。表 2.5 ~ 2.7 所列表為各文獻中所記載氮化鋁、氮化鎵以及氮化銻之有效質量的整理

資料，其中 m_e 、 m_{HH} 、 m_{LH} 分別代表電子、重電洞(heavy hole)與輕電洞(light hole)之有效質量，上標之 \perp 符號則代表沿著長晶方向 (k_z 方向) 與垂直於長晶方向之方向。至於三元化合物的有效質量則可以利用 *Vegard* 定理，從二元化合物有效質量之線性組合來加以推算^[1]。

表 2.5 各文獻中氮化鋁 (wurtzite 結構) 之有效質量的整理資料。

參考文獻	m_e	m_e^\perp	m_{HH}	M_{HH}^\perp	M_{LH}	m_{LH}^\perp
[30]	0.33	0.25	3.70	6.25	3.70	0.25

表 2.6 各文獻中氮化鎵 (wurtzite 結構) 之有效質量的整理資料。

參考文獻	m_e	m_e^\perp	m_{HH}	m_{HH}^\perp	m_{LH}	m_{LH}^\perp
[31]	0.20±0.06		0.20±0.02			
[1]	0.2		0.8			
[30],[32]	0.20	0.18	1.10	1.64	1.10	0.15
[33]	0.19	0.17	1.76 1.96	1.69 1.87	1.76 1.96	0.14 0.14

表 2.7 各文獻中氮化銻 (wurtzite 結構) 之有效質量的整理資料。

參考文獻	m_e	m_e^\perp	m_{HH}	m_{HH}^\perp	m_{LH}	m_{LH}^\perp
[1]	0.11		0.16			
[34]	0.12		0.5		0.17	
[33]	0.11	0.10	1.56 1.67	1.68 1.67	1.56 1.61	0.11 0.11

2.5 晶格常數

在元件設計的過程中，晶格常數的確定是相當重要的。因為不同的晶格常數可能會導致不同的應力類型，而對元件的效能造成重大的影響，這種現象在 III-V 族氮化物系統中尤其明顯。

表 2.8 各文獻中氮化鋁、氮化鎵與氮化銦 (wurtzite 結構) 之晶格常數的整理資料。

參考 文獻	<i>a</i> -lattice constant (Å)			<i>c</i> -lattice constant (Å)		
	AlN	GaN	InN	AlN	GaN	InN
[2]	3.112	3.188	3.533 3.548	4.982	5.185	5.963 5.760
[35]	3.112 ^a	3.188 ^a	3.542	4.982 ^a	5.185 ^a	5.72
[3]	3.112 ^a	3.189	3.54	4.982 ^a	5.185 ^a	5.70
[36]	3.091	3.174	3.538	4.954	5.169	5.707
[37]	3.111	3.189	3.544	4.978	5.185	5.718
[38]	3.112	3.210	~	4.995	5.237	~
[39]	3.112	3.188	~	4.982	5.185	~
[40]	3.06	3.17	3.53	4.91	5.13	5.54
[41]	~	3.162	~	~	5.142	~
[42]	3.10	3.22	3.59	4.97	5.26	5.81
[43]	3.144	3.146	~	5.046	5.125	~

^a該數據的最初來源為參考文獻[39]，是以其數值完全相同。

表 2.8 所示即是在不同文獻中所整理出來的氮化鋁 氮化鎵與氮化

銦之晶格常數大小；一旦這三個二元化合物的晶格常數確定，就可以利用線性組合的方式來獲得三元化合物之值。以氮化銦鎵 ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, x 代表銦的濃度) 為例，其晶格常數為：

$$a_{\text{InGaN}}(x) = a_{\text{GaN}} \cdot (1-x) + a_{\text{InN}} \cdot x \quad (2.4)\text{a}$$

$$c_{\text{InGaN}}(x) = c_{\text{GaN}} \cdot (1-x) + c_{\text{InN}} \cdot x \quad (2.5)\text{a}$$

其中 a (或 c) $_{\text{InGaN}}(x)$ 代表銦濃度為 x 之氮化銦鎵材料的晶格常數， a (或 c) $_{\text{GaN}}$ 與 a (或 c) $_{\text{InN}}$ 則分別代表氮化鎵與氮化銦之晶格常數。其他三元化合物的晶格常數可以利用相同的原理來獲得。在 *Lastip* 軟體中，上述三個二元化合物的設定分別為：3.11、3.146 以及 3.5446 (Å)。

2.6 磊晶法

在氮化銦鎵材料系統中，目前常用的磊晶法有兩種：有機金屬氣相磊晶法^{[1]-[4],[44]} (metalorganic vapor-phase epitaxy, 簡稱 MOVPE) 和分子束磊晶法^{[3]-[4],[44]} (molecular beam epitaxy, 簡稱 MBE)。

MOVPE 磊晶法在許多文章中又被稱之為 MOCVD (metalorganic chemical vapor deposition); 其主要原理是利用在反應爐中通入欲化合元素與有機根所形成的氣體，使其在基板產生化學反應並形成想得到的材料薄膜。目前常用來提供第三族元素來源的有機化合物為三甲基鋁 (trimethylaluminum, 簡稱 TMAI 或 TMA)、三甲基鎵 (trimethylgallium, 簡稱 TMGa 或 TMG)、三甲基銦 (trimethylindium, 簡稱 TMIIn 或 TMI), 分別作為第三族鋁、鎵和銦元素的來源。氨氣(NH_3)則提供第五族氮元

素的來源。除此之外，n 態摻雜常用的摻雜元素為矽 (Si)，由 methyl silane (MeSiH_3) 化合物提供；p 態摻雜常用的鎂元素 (Mg)，則由 biscyclopentadienyl (Cp_2Mg) 化合物提供。

關於 MOCVD 反應爐的設計，許多研究團隊或公司都提出各自不同的設計，在此特別提出 Nakamura 等人所引進的雙流法^{[1],[4]} (two-flow method) 來加以說明。在這個方法中，平行於基板的主要氣流 (main flow) 攜帶的是欲化合的反應物，從基板正上方垂直進入的次要氣流 (subflow) 則攜帶氫氣 (H_2) 氮氣 (N_2) 等不易產生反應的氣體；次要氣流的引入能改變主要氣流的方向，使反應物與基板接觸，進而增加系統的反應效率。此外，這種雙流長晶法也能有效壓抑三維島狀物的形成，因而大幅提升氮化鎵薄膜的晶體品質^[4]。

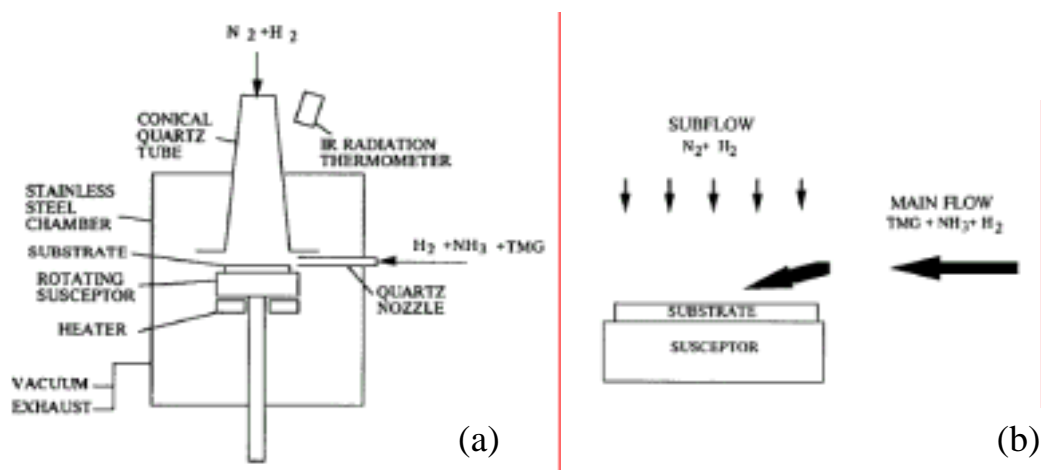


圖 2.6 雙流法 MOCVD 之(a)反應爐以及(b)原理示意圖。

MBE 磊晶法的原理是在高真空下 (小於 10^{-10} torr) 利用加熱的原

子束或分子束直接射在基板上，形成磊晶層。由於具有高度真空的成長環境，因此可以在較低溫的情況下形成高純度、高品質的磊晶薄膜。但是在氮化物的磊晶過程中，由於常作為氮來源的氨氣在低溫時呈現穩定不易分解的狀況，使得磊晶速度緩慢，因而影響研究人員利用 MBE 來成長氮化物之意願^[4]。隨著技術的進步，高溫(750 ~ 800°C)的 MBE 磊晶法已經實現，其成長速度可以到達 1 ~ 2 $\mu\text{m}/\text{h}$ ，與 MOCVD 之速度相當。但是在氮化物的磊晶中，緩衝層的成長往往需要在較低溫的情況下進行，以獲得近乎非晶質 (amorphous) 的薄膜；因此其成長速度也就相對較慢，並因而影響元件整體的長晶速度。

雖然 MBE 磊晶法可以在較低溫的情況下進行，但是由於其磊晶速度較 MOCVD 慢許多，再加上 MOCVD 經過多方面改良後，已經可以成長出包括量子井結構在內的高品質薄膜，因此目前大部份商業上的應用都以 MOCVD 磊晶為主。

第三章 氮化銦鎵單一量子井雷射之電子溢流現象

最近幾年來，III-V 族氮化物以其夠寬的能帶間隙以及高效率的發光現象，在短波長部分的應用上一直扮演著重要的地位與角色^{[1],[3]}。但是由於氮化物的發光理論並未臻於成熟，許多的現象與效應仍待進一步的探討與確認，因此無論是在材料特性或結構設計上都具有相當大發展與改善的空間。本章節將利用理論模擬的方式有系統的探討電子溢流現象對氮化物元件所造成的影響，並利用各種可能的方法改善此一現象，期能藉此提升元件的效能，達到系統最佳化的目的。

本章節所使用的模擬軟體為加拿大 Crosslight 公司所出版的套裝軟體 *Lastip*，全名為 LAsEr Technology Integrated Program，是一套可以模擬二維半導體發光元件的程式。*Lastip* 所能模擬的材料包括 AlGaInAs、GaInAsP、AlGaInP、InGaN、AlGaN 等材料系統，必要的話也可以經由自行輸入參數來設定新的材料系統；至於它能模擬的元件結構包括 Fabry-Perot (FP) 雷射、Distributed Feedback (DFB) 雷射、Gain-Coupled DFB 雷射、Distributed Bragg Reflector (DBR) 雷射、Multielectrode Distributed Feedback (MEDFB) 雷射、Semiconductor Optical Amplifiers、Light Emitting Diodes (LEDs) 等。在輸入所要模擬的材料系統與結構後，我們可以經由圖形的呈現瞭解元件的各項光學與電子性質。

3.1 造成電子溢流的原因

在半導體元件中產生電子溢流現象的成因可能有很多種，其中造成 III-V 族氮化物容易電子溢流的可能原因主要為：

- (1) 臨界電流值較高^[45]
- (2) 量子井寬度較窄
- (3) 電洞不容易傳輸至活性區中^[45]
- (4) 導電帶的能隙補償差較低^[45]

這四種可能原因對電子溢流的程度都具有相當重要的影響。在本節中將詳細說明上述四種現象可能的成因，及其如何影響氮化物元件。

3.1.1 原因一：臨界電流值較高

在氮化物元件中，由於存在有許多材料與結構上的問題（例如：高缺陷密度、高電阻值、蝕刻所形成的反射鏡不夠平整 等。），使得雷射系統往往要在高電流操作下才能產生雷射輸出，也就是具有較高的雷射臨界電流（threshold current）。而在較高的電流操作下常常會造成元件溫度的上升，使得活性區中的電子有足夠的能量（熱能）溢流至 p 態薄膜中；此外，較高的電流輸入也會大幅的提升活性區中所累積的電子密度，這也會增加電子溢流的機會。總而言之，臨界電流值過高會增加電子溢流的程度，而電子溢流的產生又會造成活性區中電子密度的下降，因而造成臨界電流的提升；因此這兩者是一種相互影響的惡性循環過程。

3.1.2 原因二：量子井寬度較窄

在氮化物元件中，由於晶格不匹配所產生的應力問題非常的嚴重（包括基板與磊晶層間之應力以及磊晶層彼此間之應力），因此活性區中的各結構層往往設計成相當薄的超晶格結構，以減輕由於應力所造成的晶格斷裂之缺陷。由於量子井寬度較窄，因此所形成的第一量子能階也就較高（距離導電帶底部較遠），是故量子井中的電子就較容易越過披覆層所形成的位能障而溢流至 p 態薄膜中；此外，在井寬較窄的情況下，電子不落入井中而直接溢流至 p 態薄膜的機率也相對較高。

3.1.3 原因三：電洞不容易傳輸至活性區中

在上一章中曾經提到過 III-V 族氮化物在 p 態摻雜上所遭遇到的困難，而這種 p 態摻雜困難的現象一直是成長氮化物元件相當大的一個問題所在^{[1]-[4]}。隨著長晶技術的進步，現在雖然已經可以獲得高品質、高濃度的 p 態薄膜^{[46]-[48]}，但是仍然存在有電阻值過高的現象^{[1],[45]}。這種過高的電阻值將不利於電洞往量子井方向移動。除此之外，由於氮化物材料之電洞的有效質量較大，以至於電洞移動速率（hole mobility）較小，這也是阻礙電洞往量子井方向移動的因素之一^[45]。在這樣的情況下，大部分的電洞仍然傾向於存在 p 態薄膜上，並因此而吸引 n 態薄膜或活性區之電子往 p 態薄膜移動，形成電子溢流的現象。另外，由於只有少量的電洞移動至量子井中，使得粒子反轉現象不易形成，因此需要在較大的電流輸入下才能獲得雷射輸出，而這種較高的臨界

電流正是在 3.1.1 小節中被認為是造成電子溢流現象的原因之一。

3.1.4 原因四：導電帶的能隙補償差較低

除了上述的原因之外，元件的活性層與披覆層之間導電帶與價電帶的能隙補償差比例（ $\Delta E_c : \Delta E_v$ ）也會對電子的溢流程度造成相當大的影響^[45]。在兩者的能帶間隙固定的情況下，如果導電帶的能隙補償差較大，則量子井中的電子侷限性較佳，比較不容易產生溢流的情況；相反的，如果導電帶的能隙補償差較小，則量子井的電子侷限性差，因此電子較容易溢流至 p 態薄膜中。而在氮化物系統中，直到目前為止仍然沒有一個公認的能隙補償差比例被提出，如果以較常被引用的 3 : 7 之值來看^{[2],[4],[25]}，其導電帶的能隙補償差之比例較小，因此在能帶間隙亦較小的情況下將容易產生嚴重的電子溢流現象。

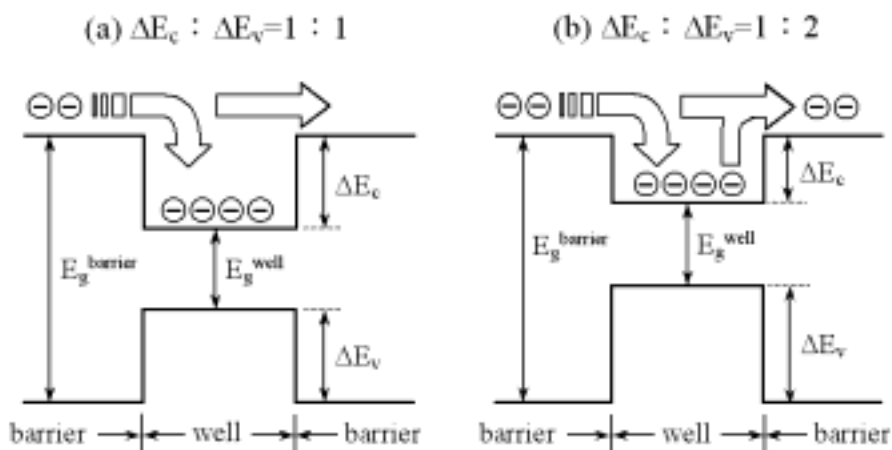


圖 3.1 在能帶間隙相同的情況下，兩種不同能隙補償差比例之能帶結構圖；其中導電帶能隙補償差較小的結構之溢流程度較嚴重。

3.2 模擬結構與參數設定

本小節將介紹模擬上所使用的元件結構以及一些重要的參數設定。在模擬結構的設定上，首先假設一 n 態的氮化鎵薄膜為整個元件的緩衝層，接著再長一層同樣是 n 態的氮化鎵薄膜，其厚度為 $0.1\ \mu\text{m}$ ，摻雜濃度假設為 $1 \times 10^{18}\ \text{cm}^{-3}$ ；活性區為一個量子井 (well) 與兩個披覆層 (barrier) 所組成的單一量子井結構，其成份為氮化銻鎵材料，其中量子井中銻的濃度為 20%，厚度為 2 nm，披覆層中銻的濃度為 2%，厚度為 5 nm；活性區之上則是一層 p 態的氮化鎵薄膜，厚度為 $0.1\ \mu\text{m}$ ，摻雜濃度為 $1 \times 10^{17}\ \text{cm}^{-3}$ ；最後是 p 態的氮化鎵帽子層 (cap layer)，其厚度及摻雜濃度與上一層薄膜相同。此外，元件的寬度為 $20\ \mu\text{m}$ ，長度（共振腔長度）為 $500\ \mu\text{m}$ ，前後鏡面反射率分別為 85% 以及 90%。整體的結構如圖 3.2 所示。

上述的結構設計中並沒有包含基板的設定，這是因為在程式的資料庫中沒有藍寶石的材料參數，再加上藍寶石基板不能導電，因此在實際元件上必須作成特殊的脊狀結構；為了簡化結構並避免過多的變因存在，因此才以上述的結構作為初步的模擬結構。另外，在摻雜濃度的設定上，p 態遠低於 n 態的濃度（低了 10 倍），這是為了模擬前面兩章中所提到的 p 態摻雜困難之現象^{[1]-[4]}。

而在材料參數的設定上，部份的參數在第二章中已經介紹過，其餘的一些重要參數設定如下：p 態氮化鎵薄膜的電洞移動率設定為 8

cm^2/Vs [45]，p 態氮化鋁鎵薄膜的電洞移動率則為 $6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [45]，至於電子移動率 (electron mobility) 則假設各層皆一樣，均為 $200 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [45]；此外，活性區中的氮化銦鎵薄膜之載子非放光性生命期 (nonradiative lifetime) 為 1 ns [45]，在氮化鋁鎵薄膜中則定為 0.1 ns [45]。

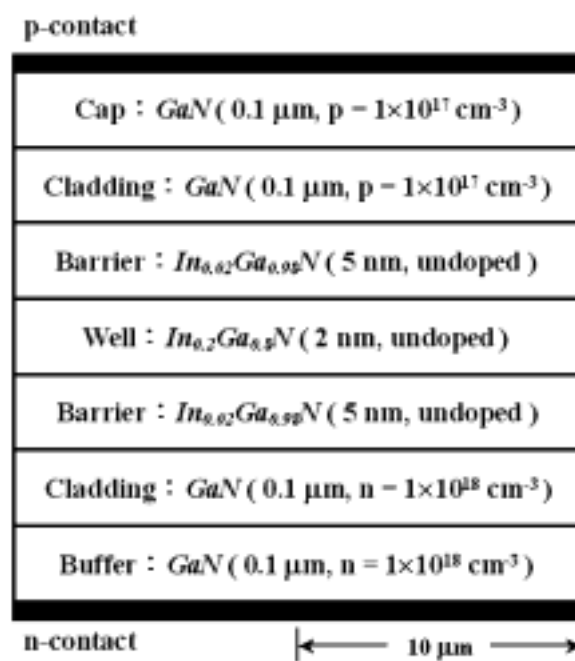


圖 3.2 模擬中所使用的氮化銦鎵單一量子井雷射之初始結構圖。

3.3 模擬結果與分析

3.3.1 氮化銦鎵單一量子井雷射之電子溢流現象

首先我們就以圖 3.2 的結構為初始結構來進行模擬。由於此一結構的 p 態濃度遠低於 n 態濃度 (以符合實際上 p 態摻雜困難之假設)，再

加上電洞移動速率亦低於電子移動速率（電洞之有效質量較大），因此注入量子井中的電子數目勢必遠高於電洞總數；即使經過受激放射的過程，仍然會有大量的電子存在於量子井的導電帶中，並因此而越過披覆層到達 p 態氮化鎵薄膜，形成電子溢流的現象。基於上述的理由，我們可以預測此一模擬結果應該會具有嚴重的電子溢流問題。

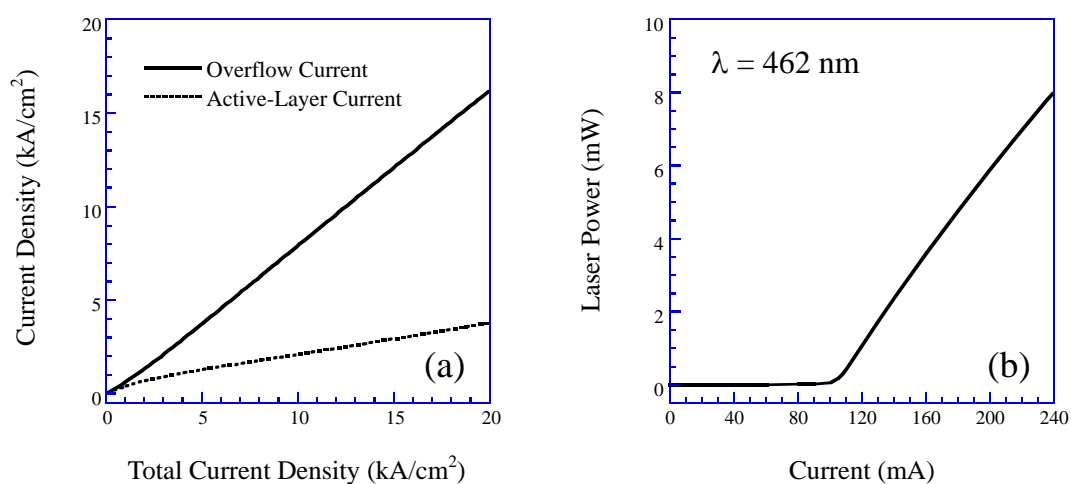


圖 3.3 初始結構之(a)溢電流密度與活性區電流密度在不同輸入電流密度下之變化圖；(b)雷射輸出功率對電流之變化圖。

圖 3.3 即是利用圖 3.2 之結構所模擬出來的溢電流密度與活性區電流密度對輸入電流密度之變化圖，以及雷射輸出功率對電流之變化圖（L-I Curve）。從圖 3.3(a)中可以明顯的看出溢電流在整個電流範圍幾乎都佔有相當重要的地位，而且在輸入電流密度為 0.3 kA/cm² 以後即超越活性區電流而成為主要的電流分佈。在高電流輸入的情況下，由

於有大量的自由電子注入活性層中，因此比較容易產生嚴重的電子溢流現象；可是從圖 3.3(a)中可以發現，當輸入電流為 30 mA 時，溢電流就超越了活性區電流而成為主要的電流分佈，也就是說在不到臨界電流（103.4 mA）的三分之一倍時，電子溢流的程度就如此嚴重，更不用說更高電流輸入時的情況了。

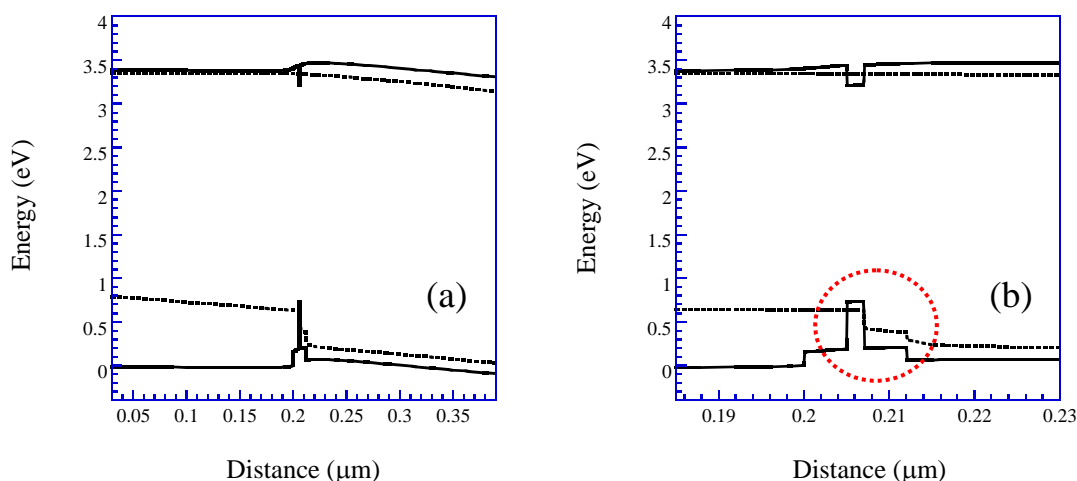


圖 3.4 初始結構在輸入電流為 200 mA 時之能帶結構圖(虛線為準費米能階)。其中圖(b)為圖(a)在活性區附近之放大圖。

圖 3.4 則是上述的初始結構之能帶結構圖。從圖中可以看出價電帶的準費米能階(quasi Fermi-level)在活性區附近有明顯的不連續分佈，顯示出活性區的電洞注入量甚差；而這種電洞傳輸困難的現象將容易引起電子溢流的產生。

綜合以上的結果，我們可以知道在初始結構中存在著嚴重的電子

溢流現象。如果能設法降低此一溢流現象，使其在一般操作電流（甚至更高）的情況下只有少量的溢電流產生，則將可以有效的提升元件的雷射效能與發光特性。接下來我們就來探討如何改善此一嚴重的電子溢流現象。

3.3.2 改善方法一：提升 p 態摻雜濃度

在 3.1 節中曾經提到 p 態薄膜的摻雜不易以及較高的電阻值是造成氮化物元件溢流嚴重的原因之一^[45]，因此如果能成功的長出高濃度、低電阻值的 p 態薄膜，應該就能提升活性區中的電洞注入量，因而有效減輕電子溢流的程度。此外，增加 p 態的摻雜濃度將使得 p 層薄膜整體的能帶結構受準費米能階之影響而往上提升，因而增加活性區與 p 態薄膜之間導電帶的位能障礙，使得導電帶上的電子更不易穿越此一位能障礙而往 p 態薄膜溢流，因而達到降低電子溢流的目的^[49]。

關於氮化物系統的 p 態摻雜濃度，在幾篇 2000 年以後所發表的論文中，都成功的長出了 10^{19} cm^{-3} 甚至於 10^{20} cm^{-3} 電洞濃度的氮化鎵與氮化銦鎵薄膜^{[46]-[48]}，但是他們的電阻值跟 n 態氮化鎵薄膜比較起來仍然偏高（在 10^{19} cm^{-3} 之濃度下，p 態的電阻值約為 n 態的 100 倍^[47]）。但是即使如此，我們仍不應對高濃度、低電阻值之 p 態氮化鎵薄膜的獲得感到悲觀，畢竟在數年以前要獲得高濃度的 p 態氮化鎵薄膜也被認為是不太可能的，但是如今不也都一一實現；因此，隨著長晶方法的進步以及新技術的開發，說不定在不久的將來此一理想即可達成。

基於上述的假設，我將試著去模擬理想的 p 態氮化鎵薄膜（高濃度、低電阻值），以探討高濃度之 p 態薄膜對溢電流以及雷射效能的影響。

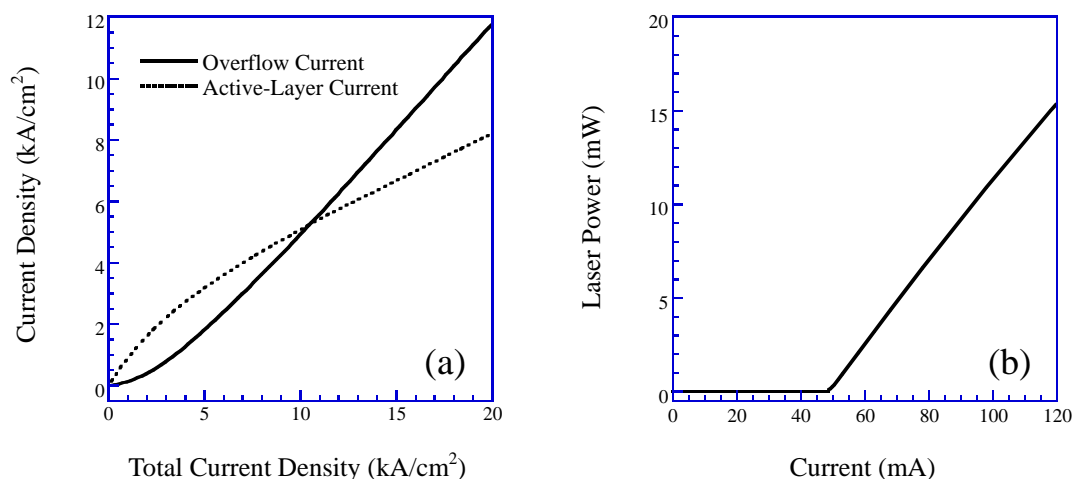


圖 3.5 p 態濃度增加為 $3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ （其他參數均維持不變）後之(a)溢電流密度與活性區電流密度在不同輸入電流密度下之變化圖；(b)雷射輸出功率對電流之變化圖。

圖 3.5 是 p 態濃度增加三倍（ $3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ）後之模擬結果。從圖中可以清楚的看出在輸入電流較小的情況下，活性區之電流密度佔總電流密度較高的比例，但是隨著輸入電流的增加，溢電流的比重也大幅的增加，並在總電流密度為 10.5 kA/cm^2 時超越活性區電流密度而成為主要的電流分佈。相較於初始結構之結果（圖 3.3(a)），這種 p 態濃度較高結構之溢電流比例明顯的較低，顯示出 p 態濃度的增加確實能改善電子溢流的情形。此外，此一結構之臨界電流與斜率效率（slope efficiency）也都較初始結構之結果來的佳，表示出溢電流程度的改善

確實有助於元件性能的提升。

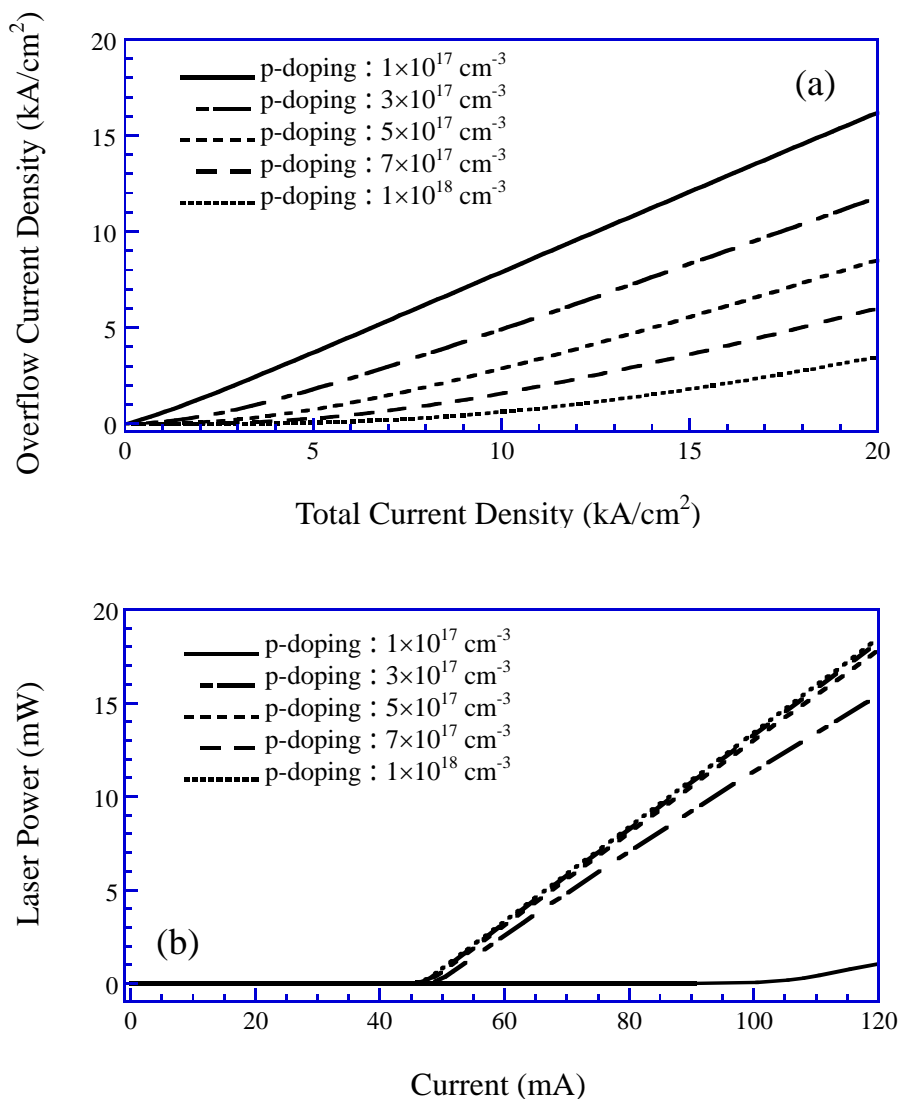


圖 3.6 不同 p 態摻雜濃度下之(a)溢電流密度對總電流密度之變化圖；
(b)雷射輸出功率對輸入電流之變化圖。

圖 3.6(a)則是在不同的 p 態摻雜濃度下，氮化銻鎵單一量子井雷射

之電子溢流程度。從圖中可以清楚的看出隨著摻雜濃度的增加，電子溢流現象獲得大幅的改善，而且這種改善現象在高電流輸入下更是明顯，詳細的溢流比例值列在表 3.1 中。溢電流比例的降低相對的就是增加活性區部份之電流，因此隨著溢流程度的降低，包括雷射臨界電流以及斜率效率等各項系統性能也都隨之獲得提升，此一現象可以從圖 3.6(b)以及表 3.1 中觀察到。

表 3.1 不同 p 態濃度之氮化銦鎵單一量子井雷射的各項模擬結果整理。其中斜率效率之選取範圍為臨界電流至臨界電流以上 5 ~ 10 mA。

P 態濃度 (cm^{-3})	1×10^{17}	3×10^{17}	5×10^{17}	7×10^{17}	1×10^{18}
溢電流比例 (%) (總電流: 1 kA/cm^2)	60.71	13.41	2.23	0.49	0.09
溢電流比例 (%) (總電流: 20 kA/cm^2)	81.01	58.95	42.68	30.18	17.52
臨界電流 (mA)	103.63	48.84	47.34	46.97	46.64
斜率效率 (%)	6.52	22.98	24.54	24.76	24.88

從圖 3.6(b)中可以發現隨著 p 態濃度的增加，雷射的臨界電流隨之變小，斜率效率則隨之上升，也就是說系統的整體性能隨著 p 態濃度的增加而獲得改善。但是圖 3.6(b)也顯示出除了 p 態濃度最低的兩個結構 ($1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 與 $3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) 外，其餘結構的 L-I 圖形均相差不大；

這是由於在臨界電流附近，其相對應之總電流密度約在 $0.5 \sim 1.0$ kA/cm^2 之間，大部份結構（除了摻雜濃度最低的兩個結構外）在這個電流範圍間之溢電流比例相差並不明顯（如圖 3.6(a)及表 3.1 所示），因此才會顯現出極為類似的雷射性能。如果將圖 3.6(b)之電流範圍擴大，將可以發現到 p 態濃度越高的結構具有明顯較高的斜率效率。

3.3.3 改善方法二：使用 p 態阻礙層

要降低氮化物元件的溢電流比例，除了上述的提升 p 態濃度的方法之外，另一個更直接的想法就是在 p 態形成一個能隙較大的位能障礙（potential barrier），使電子欲往 p 態薄膜移動時會受到此一位能障礙的阻擋，而無法輕易通過。由於這種位能障礙可以利用能帶間隙較大的材料來加以形成，因此在氮化鎵系列中，氮化鋁鎵材料將是一個很好的選擇。在接下來的模擬中，我們就是以氮化鋁鎵材料當作阻止電子溢流的阻礙層（blocking layer），探討此一方法對溢流程度的改善以及對系統效能的影響。

氮化鋁鎵阻礙層在空間上的位置分佈可能有兩種，一種是在活性區之上先長一層 P 態的氮化鎵薄膜，之後才再成長此一氮化鋁鎵阻礙層，如圖五(乙)所示。另一種方式則是在長完活性區之後就直接成長氮化鋁鎵薄膜，如圖五(丙)所示。日本 Nakamura 等人所發表的論文中^{[1]-[3],[5]}，有許多結構都是屬於後面的這一種形式（圖五(丙)），其主要的目的是利用低溫成長（相較於氮化鎵薄膜而言）的氮化鋁鎵薄膜取代

需要較高溫度成長的氮化鎵薄膜，以降低活性區中的氮化鋁鎵材料由於高溫所產生鎵溢走的比例^{[1],[3]}。

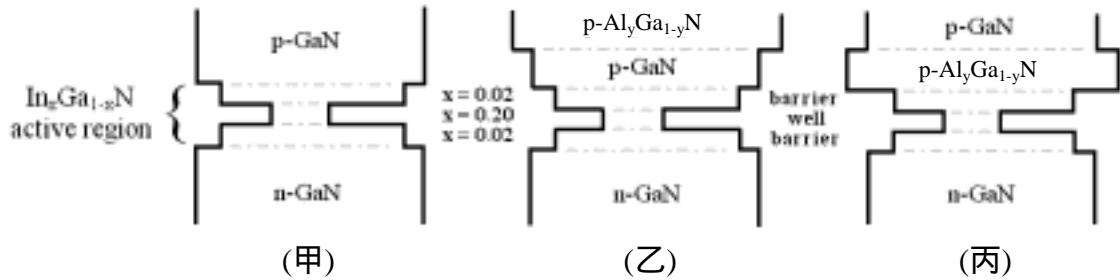


圖 3.7 三種不同結構之氮化鋁鎵單一量子井雷射。(甲)未加入阻礙層之原始結構；(乙)在 p 態氮化鎵薄膜之後加入一氮化鋁鎵阻礙層；(丙)直接將氮化鋁鎵阻礙層加在活性區之後。

為了進一步瞭解上圖之結構乙跟結構丙兩種結構對電子溢流現象之改善程度，以及對元件效能的影響，我們分別對其作理論模擬與分析，以分辨孰優孰劣。在模擬的參數設定中，除了氮化鋁鎵阻礙層外，其餘的結構與參數均和初始結構一樣（p 態濃度為 $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ），而氮化鋁鎵阻礙層的鋁濃度從 5 ~ 30 % 不等。

圖 3.8 即是模擬所得之兩種結構個別的溢電流分佈圖。從圖中可以清楚看出隨著鋁濃度的增加，兩種結構之溢電流比例均跟著下降，但是結構丙之下降程度明顯的較結構乙來的大：當鋁的濃度為 5 % 且總電流密度為 20 kA/cm^2 時，結構乙的溢電流大小約佔總電流密度的 74.72 %，此時結構丙的溢電流比例則只有約 47.19 %；而且當鋁的濃度在 15 % 以上時，結構丙的溢電流分佈在圖 3.8(b) 上已經幾乎無法用

肉眼分辨出來，但是圖 3.8(a)上則仍然可以看到明顯的溢電流分佈。詳細的數值比較如表 3.2 與表 3.3 所示。根據以上的圖形與數值比較，我們可以發現結構丙的電子溢流現象獲得較大程度的改善（相較於結構乙），尤其是在高電流操作下；接下來我們就來比較這兩種結構的雷射特性，看看哪種結構具有較佳的性能。

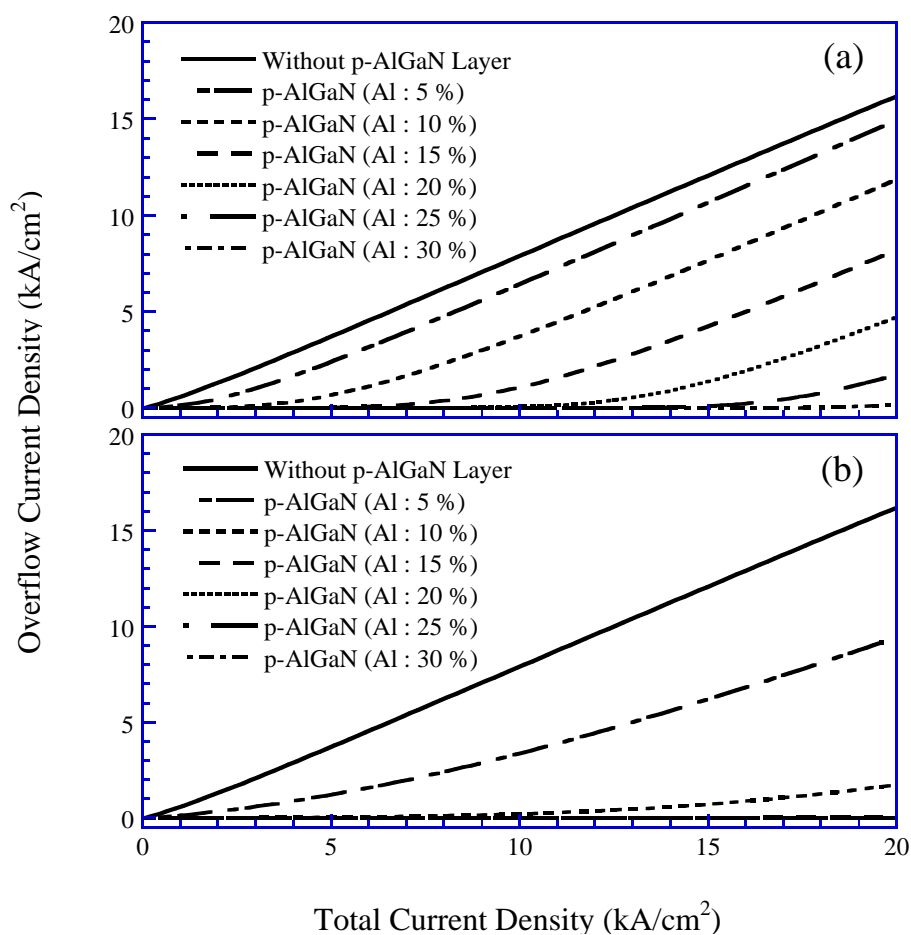


圖 3.8 (a)結構乙與(b)結構丙在不同輸入電流下之溢電流分佈。

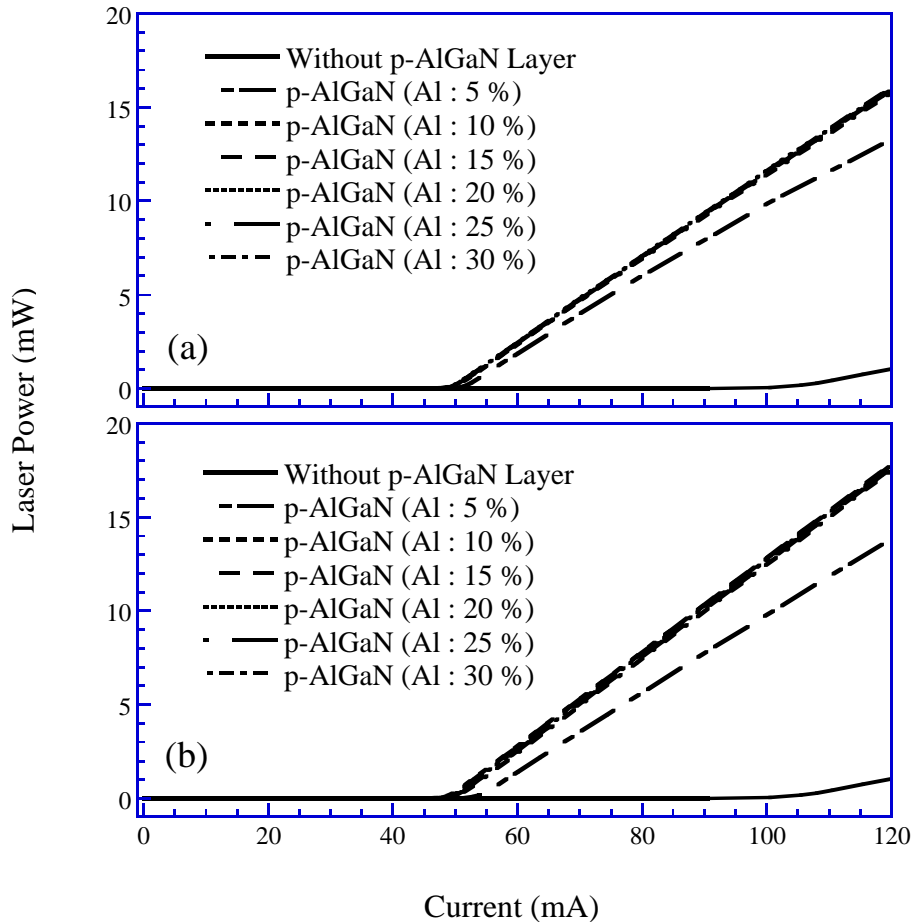


圖 3.9 (a)結構乙與(b)結構丙之雷射輸出功率對輸入電流之變化圖。

如同前面所提到的，溢電流程度的降低相對的也就是活性區電流的增加，因此溢流程度較低的元件，其雷射的臨界電流以及斜率效率等也都應該較佳（因為活性區內的載子濃度較高）；所以我們可以預期結構丙的雷射效能應該會比結構乙來得佳。圖 3.9 就是上述兩種結構個別的輸出功率對輸入電流之變化圖；從圖中可以看出這兩個結構在 0 ~

表 3.2 具有不同鋁濃度氮化鋁鎵阻礙層之氮化銦鎵單一量子井雷射
（結構(乙)）的各項模擬結果整理。其中斜率效率之選取範圍
為臨界電流至臨界電流以上 5 ~ 10 mA。

鋁的濃度 (%)	0	5	10	15	20	25	30
溢電流比例 (%) (總電流：1 kA/cm ²)	60.71	16.29	0.32	0.01	0.00	0.00	0.00
溢電流比例 (%) (總電流：20 kA/cm ²)	81.01	74.72	59.45	41.12	23.69	8.90	0.92
臨界電流 (mA)	103.63	51.16	49.63	49.34	49.28	49.31	49.53
斜率效率 (%)	6.52	21.33	22.93	23.06	23.11	22.93	22.88

表 3.3 具有不同鋁濃度氮化鋁鎵阻礙層之氮化銦鎵單一量子井雷射
（結構(丙)）的各項模擬結果整理。其中斜率效率之選取範圍
為臨界電流至臨界電流以上 5 ~ 10 mA。

鋁的濃度 (%)	0	5	10	15	20	25	30
溢電流比例 (%) (總電流：1 kA/cm ²)	60.71	15.33	0.60	0.02	0.00	0.00	0.00
溢電流比例 (%) (總電流：20 kA/cm ²)	81.01	47.19	8.76	0.27	0.01	0.00	0.00
臨界電流 (mA)	103.63	53.20	48.45	48.68	49.17	49.60	50.06
斜率效率 (%)	6.52	21.09	24.37	24.47	24.67	24.55	24.54

120 mA 的電流範圍中，其圖形的趨勢相當類似，且臨界電流以及斜率效率之差異並不明顯，僅可約略看出結構丙似乎具有稍微較佳的雷射性能。詳細的數值比較如表 3.2 與表 3.3 所示。

相較於圖 3.8 中兩結構差距甚大的溢電流分佈，圖 3.9 之結果似乎不甚合理，但是基於跟 3.3.2 小節一樣的理由：圖 3.9 中所顯示的 x 軸範圍 (0 ~ 120 mA) 其相對應之總電流密度為 0 ~ 1.2 kA/cm²，在圖 3.8 中僅只是 x 軸範圍的最前段部份；在這範圍裡只有鋁的濃度在 5 % 以內的兩個結構可看出有明顯的電子溢流現象發生，其餘結構的溢電流分佈幾乎都重疊在溢電流為零的線上。這就是為什麼在圖 3.9 中，除了鋁濃度在 5 % 以內的兩個結構外，其餘的結構之圖形均疊和在一起的原因。如果我們將圖 3.9 的電流範圍逐漸加大，則將可以看出結構丙之斜率效率開始變大，也就是開始具有較佳的雷射效能。

根據以上的模擬結果，可以總結出結構丙能比較有效的降低電子溢流的程度，且在高電流操作下具有較佳的雷射效能。再加上前面所提到的在長完活性區之後直接成長氮化鋁鎵層可以減低活性區中鎵溢走的比例，因此在實際元件的設計上，應該是以結構丙為較佳的結構設計。

3.3.4 較佳結構設計：同時使用方法一與方法二

綜合以上的結果，我們可以發現當 p 層的載子濃度較多，或者是在活性區之上具有一氮化鋁鎵阻礙層時，元件的溢電流程度與系統效

能均可以獲得有效的改善。因此如果同時使用上述兩種方法，可以預期將會有更好的結果出現。但是由於鋁的濃度過高時，在長晶過程中容易被氧化而形成晶體缺陷^[3]，因而影響元件效能；此外，當鋁的濃度越高時，雖然其能帶間隙較大，因而能在導電帶形成較高的位能障以阻止電子溢流，但相對的也會在價電帶阻礙電洞注入活性區中（如圖 3.10 所示）上述兩種現象都是使用氮化鋁鎵阻礙層時所遭遇到的一些限制；因此如何適當的調整鋁的濃度，使其能有效的阻止溢電流的產生，又不至於產生過度的負面影響就顯得非常的重要。接下來我將模擬同時使用上述兩種改善方法之元件，並探討其溢流情形及系統效能；但是由於目前仍無法找出一最佳的鋁濃度設計，因此在本次模擬上所使用的鋁濃度相當主觀的設定為 10 %。

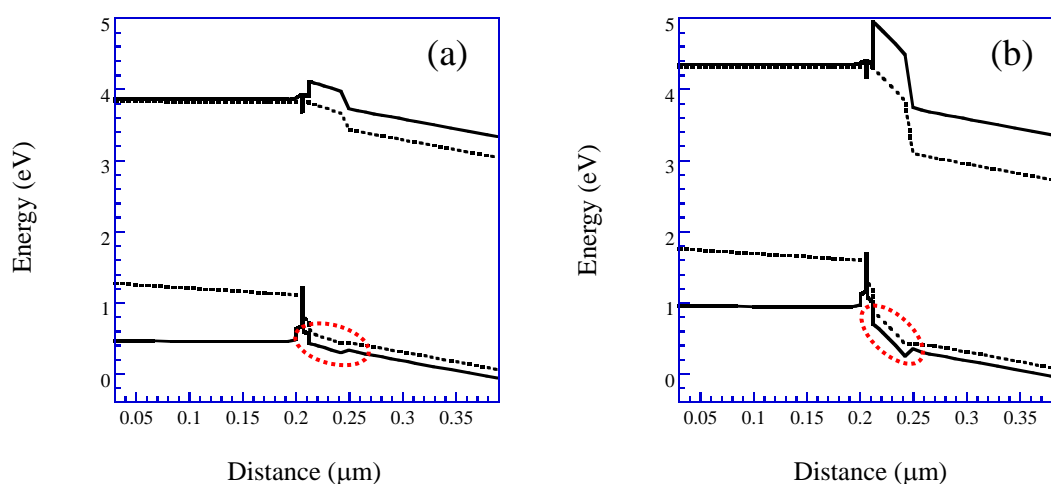


圖 3.10 氮化鋁鎵阻礙層之鋁的濃度為(a)10 %與(b)30 %時之能帶結構圖（電流為 200 mA）。

圖 3.11 就是我們將結構丙中阻礙層之鋁的濃度設定為 10 %，p 態摻雜濃度則設定為 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ，所模擬出來的氮化鎵鎵單一量子井雷射之溢電流密度以及活性區電流密度對輸入電流密度之變化圖以及雷射輸出功率對電流之變化圖。從圖 3.11(a)中可以清楚看出在整個電流範圍中，溢電流密度所佔的比例都相當小（無法用肉眼從圖中觀察到），也就是說幾乎所有的輸入電流都維持在活性區中，作為發光之用。這樣的結果確實比圖 3.6(a)與圖 3.8 之結果來的佳。至於圖 3.11(b)所示則和圖 3.6(b)及圖 3.9 之結果沒有太大的差異，主要原因仍然是因為在低電流輸入時，這幾種結構的溢電流比例均非常的低，因此對其雷射性能沒有太大的影響。

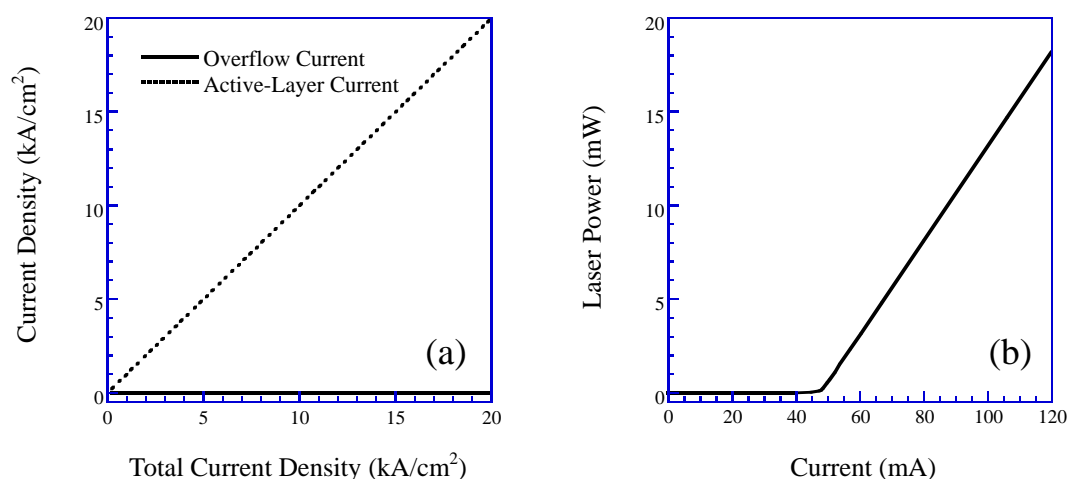


圖 3.11 較佳結構（阻礙層之鋁濃度為 10 %、p 態濃度為 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ）之(a)溢電流密度與活性區電流密度在不同輸入電流密度下之變化圖；(b)雷射輸出功率對電流之變化圖。

從上述的結果可以發現如果將提升 p 態濃度以及使用氮化鋁鎵阻礙層這兩種方法同時採用，則確實可以在鋁濃度較低的情況下有效的防止電子溢流的產生。圖 3.12 則是將這樣的結構在不同的操作溫度下進行模擬所獲得的溢電流分佈圖。因為在高溫下，粒子受熱振盪的程度較大，因此電子溢流的問題也較為嚴重，而嚴重的溢電流效應又容易產生大量的熱能，使得元件的操作溫度上升。因此這是一種相當不好的惡性循環，許多溢流嚴重的元件就是因為這樣的效應而無法產生受激放射之雷射光，這也是為什麼溢流現象的改善在元件設計的過程中是這麼的重要。

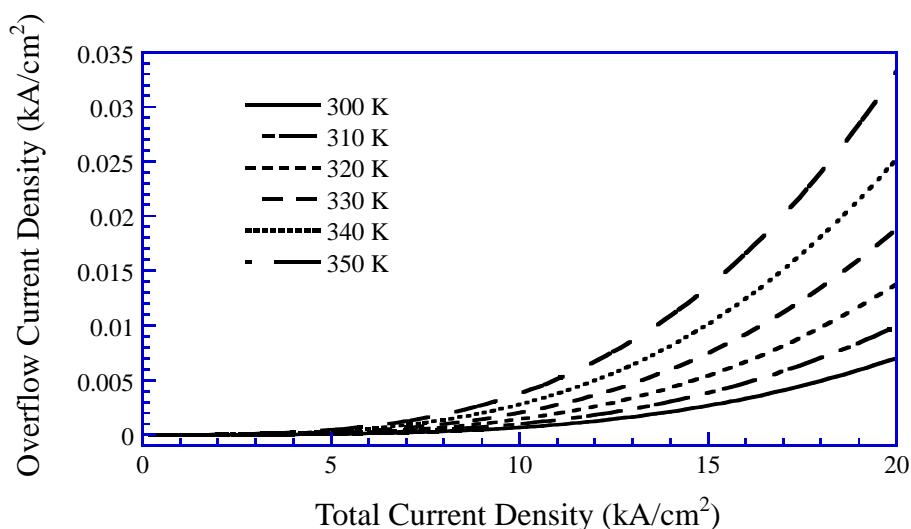


圖 3.12 較佳結構（阻礙層之鋁濃度為 10 %、p 態濃度為 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ）在不同溫度下之溢電流分佈圖。

從圖 3.12 中可以發現隨著溫度的上升，電子溢流的情形越來越嚴

重；但是若從其所佔總電流密度之比例來看，在最嚴重的情況下其溢電流比例也只有不到 0.175 %，因此可以說是相當微不足道。這樣的結果主要是由於電子溢流的程度已經被有效的壓制住，因此少量的溫度增加並不足以造成大量的溢電流產生。

3.3.5 較佳結構與初始結構之比較

在上一小節中已經證實了較佳結構設計可以有效的改善電子溢流現象，且其系統效能與雷射特性也都明顯的較初始結構來得佳。接下來我將針對這兩種極端結構的一些特殊性能來作比較，以探討其彼此的優劣性。

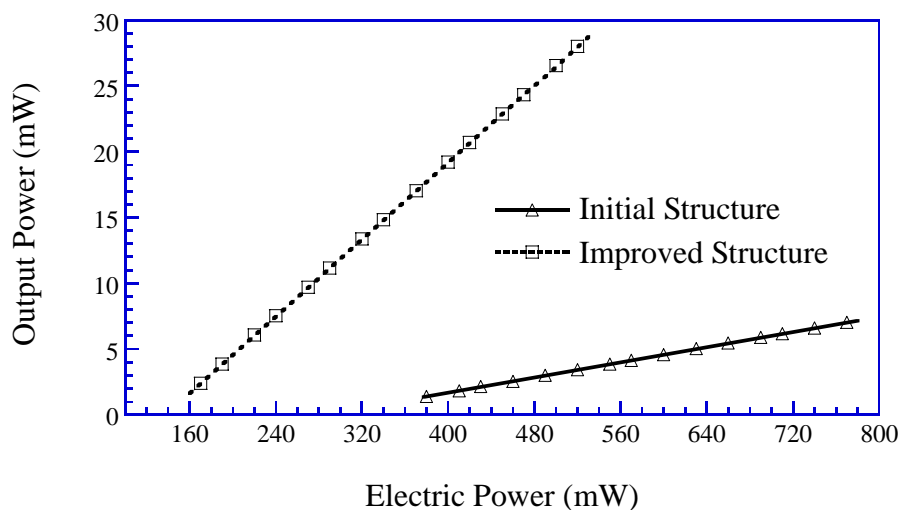


圖 3.13、氮化銦鎵單一量子井雷射之功率轉換效率圖；圖中三角形實線所示為原始結構（圖 3.2 之結構）之特性，正方形虛線則為較佳結構（阻礙層之鋁濃度為 10 %、p 態濃度為 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ）之特性。

首先我們來探討這兩種結構個別之功率轉換效率。從圖 3.13 中可以清楚的看出較佳結構具有明顯較大的功率轉換效率，也就是說在同樣的輸入功率下，較佳結構可以獲得較高的雷射輸出功率。如果換個角度思考，就是只要較少量的輸入功率就可以獲得同樣的輸出功率，因此在能量的節省上將有相當大的幫助。

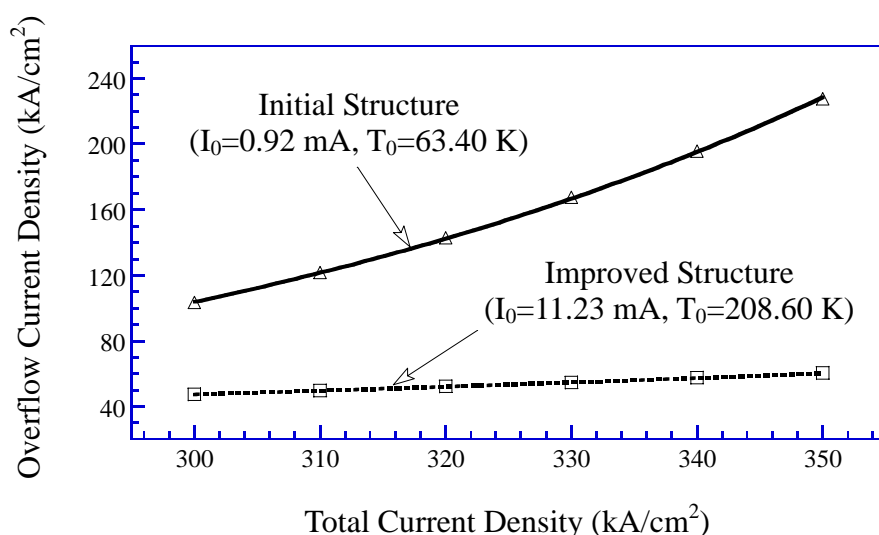


圖 3.14、氮化銦鎵單一量子井雷射在不同操作溫度下之臨界電流分佈圖；圖中三角形實線所示為原始結構（圖 3.2 之結構）之特性，正方形虛線則為較佳結構（阻礙層之鋁濃度為 10 %、p 態濃度為 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ）之特性。

接著，我們來看看這兩種結構之雷射效能對溫度的穩定性。圖 3.14 就是這兩種情況在數個不同溫度下之臨界電流變化圖。從圖中可以清楚的看出隨著溫度的增加，臨界電流也隨之上升，可是較佳結構之臨

界電流變化較為平緩，顯示出對溫度具有較佳的穩定性。這種情形也可以從兩者特性溫度（characteristic temperature）上的差異看出：兩者的特性溫度個別為 63.40 K 與 208.60 K，較佳結構的特性溫度明顯的比前者大很多。

如同上一小節所提到的，溢電流與溫度的關係相當微妙也相當密切：溢電流的增加很可能造成溫度的上升，而溫度的上升也會導致溢電流的提高。因此一旦電子溢流的程度被有效的壓制（如上述的第二種情況），元件對溫度的穩定性也就相對的大幅提升，如同圖 3.14 中所顯示的結果。

3.4 結論

在這一章中我使用商用的 *Lastip* 模擬軟體來探討氮化鎵鎵單一量子井結構的電子溢流現象，並進一步尋求其有效的改善方法。模擬的結果顯示出並非所有的電子都被侷限在活性區並貢獻至發光上，而是有大量的電子溢流至 p 態薄膜中；在室溫的情況下，這種溢電流的比例甚至遠高於活性區電流的比例，而主宰元件的電流分佈。這些溢流的電子除了會降低元件的有效載子比例外，一旦其以熱的形式釋放出能量，也會對雷射效能以及元件壽命造成嚴重的影響。因此，如何有效地改善此一嚴重的溢電流情形，就變成提高元件雷射效能的重要關鍵。

模擬結果顯示出如果能適當的提高 p 態的載子濃度，或是在活性

區之上增加一層氮化鋁鎵阻礙層，都能夠成功的降低電子溢流的程度，同時也可以有效的提升元件的雷射效能（具有較低的臨界電流與較高的斜率效率）。此外，如果將上述兩種方法同時使用，則可以在低鋁含量的情況下有效的阻止溢電流的產生，而且這樣的結構在操作溫度為 350 K 的條件下仍不至於有大量的電子溢流產生。模擬結果同時也顯示出這種幾乎沒有溢電流產生的結構對溫度具有相當高的穩定性，其特性溫度高達 208.60 K，遠高於溢流嚴重的結構（63.40 K）。

第四章 氮化銦鎵量子井雷射之電洞不均勻現象

在上一章中我們以理論模擬的方式對氮化銦鎵單一量子井雷射之電子溢流現象作了詳細的探討，並提出了一些有效的改善方法。其中電洞的傳輸困難被認為是溢電流嚴重的原因之一^[45]，但是這種電洞的不易傳輸除了會造成溢流程度的提升外，也會對元件造成一些其他的不利影響，例如：電洞分佈不均勻現象。本章節將同樣利用 *Lastip* 模擬軟體來探討氮化銦鎵量子井結構在活性區附近之電洞分佈不均勻現象，與其所造成的量子井個數與發光效率之影響，以及可能的解決方法。

4.1 前言

西元 1998 年與西元 2000 年，日本日亞公司 (Nichia chemical corporation) 的 Nakamura 等人於兩家國際知名的學術雜誌各發表了一篇關於氮化銦鎵半導體雷射的學術論文^{[50],[51]}，其中提到了在他們以氮化銦鎵薄膜為活性層的光電半導體元件之研究過程中，元件的雷射效能與發光效率並非單純的隨量子井個數的增加而增減，而是有一最佳值的存在：在雷射波長為 390 nm 至 420 nm 的範圍中，單一量子井雷射具有最低的臨界電流^[50]；當波長範圍超過 435 nm 時，則以雙量子井雷射之臨界電流最低^[51]。這樣的結果不只跟大部份學者的認知相違背，而且如果他們的結論是正確的，代表著要增加氮化銦鎵元件的發

光強度是不容易的，至少就增加量子井個數的方法而言就不可行。

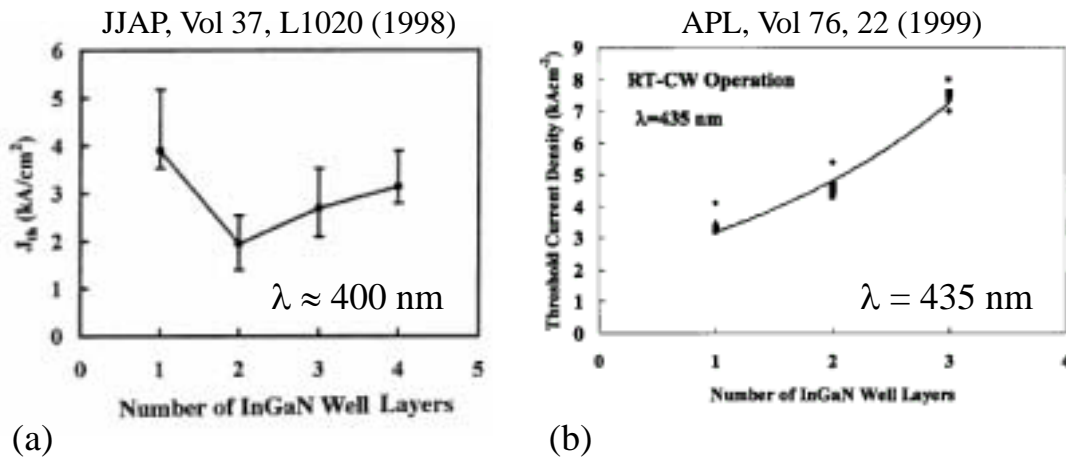


圖 4.1、Nakamura 等人所發表的量子井個數與臨界電流之關係。其中圖(a)與圖(b)個別摘自參考文獻[50]、[51]。

上述的研究成果是經由實際長晶再加以量測所得到的實驗結果。對於這樣的結論，該篇文章的作者們也提出了相關的解釋：他們認為由於氮化銦鎵薄膜中的銦容易在高溫的情況下流失，而氮化銦鎵材料的長晶溫度又高達 750⁰C 左右，因此在成長第二個或第三個量子井的時候，第一個量子井中的銦很可能會因為高溫而大量溢走，因而嚴重影響活性區的晶體品質^[51]。由於元件的內部損失 (internal loss) 隨著量子井個數的增加而增加，所以雷射的臨界電流才會跟著上升。

在我的模擬結果中也可以觀察到上述的雷射性能隨著量子井個數的增加而下降的現象。但是值得注意的是：在理論模擬的過程中並不會考慮到因為高溫而產生的銦溢走問題，因此上述實驗上的說明並不

適用於解釋理論模擬的結果；換句話說，勢必有其他可能的因素在影響著元件的發光效率。如果能設法找出這個現象真正的成因，就有可能對其進行改善，進而提升多量子雷射的性能。在本章接下來的部份，我將會對這一個主題進行詳細的理論模擬與分析。

4.2 模擬結構與參數設定

由於本章節的重點擺在探討量子井個數與雷射效能之關係，因此在模擬的結構上我以之前研究電子溢流時所採用的較佳結構（氮化鋁鎵阻礙層之鋁的濃度為 10 %，p 態薄膜的電洞摻雜濃度為 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ；由於此一結構幾乎沒有電子溢流現象的產生，因此可以簡化可能影響實驗結果的變因）來作為這次模擬的初始結構，再去改變一些可調參數，如：量子井個數、摻雜濃度 等。至於模擬上的一些常數參數則大致維持不變。

4.3 模擬結果與分析

4.3.1 量子井個數與雷射性能之關係

在模擬上，首先以之前探討電子溢流時所使用之較佳結構來作為標準的單一量子井結構，再試著去改變活性區中的量子井個數，並比較不同量子井個數元件的雷射效能與發光特性，以進一步與 Nakamura 等人之實驗結果相比較。

圖 4.2 即是不同量子井個數之氮化鎵半導體雷射的輸出功率與

輸入電流之關係圖。圖中所謂的單一量子井 (Single Quantum Well) 雷射即是第三章中所使用的較佳結構。從圖中可以清楚的看出隨著量子井個數的增加，雷射的臨界電流也大幅的增加，其中三量子井雷射甚至在輸入電流高達 1000 mA 時仍未能有雷射光輸出；至於雷射的斜率效率則是隨著量子井個數的增加而減少。如果單純從圖一的結果來看，明顯的是以單一量子井結構具有最好的雷射效能，這樣的模擬結果似乎與 Nakamura 等人由實驗所得的結論^[51]相呼應。但是如同前言中所提到的，在理論模擬的過程中，經由長晶所造成的內部損失並不會隨量子井個數而變，因此除了前言中所提到的實驗上之解釋外，必定有其他的因素在影響著多量子井元件的發光效率。

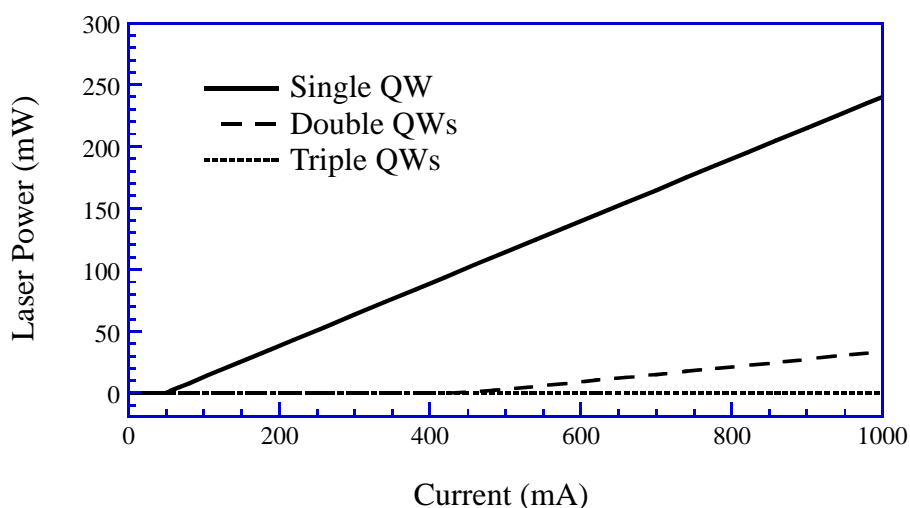


圖 4.2、不同量子井個數之氮化銦鎵半導體雷射的輸出功率與電流之關係圖 (三個雷射系統之輸出波長均為 462 nm)。

4.3.2 各量子井間的電洞分佈不均勻現象

在本小節中將分別模擬單一量子井、雙量子井以及三量子井元件之各項特性，以探討造成多量子井元件效能降低之原因。圖 4.3 即是模擬所得之上述三種元件在輸入電流為 200 mA 時之能帶結構圖。從圖中可以看出在此一電流條件下，三種元件導電帶之準費米能階分佈並沒有顯示出任何特別的不連續性，但是價電帶中的準費米能階分佈則呈現出明顯的不連續現象，顯示出三種元件的電洞分佈都非常的均勻；尤其是越靠近 n 態薄膜的量子井其電洞分佈量越少。

圖 4.4 則是上述三種雷射元件之載子濃度分佈圖。從圖中可以清楚的看出多量子井元件在各個量子井中的電子濃度大小均相差不大，其中由於阻礙層的作用，使得最靠近 p 態薄膜的量子井往往具有較高的電子濃度，這個現象是可以理解的。至於電洞濃度的分佈則隨位置的不同而有明顯的差異：越接近 n 態薄膜的量子井，其電洞濃度越低。這種電洞分佈不均勻的現象與圖 4.3 之結果一致。

上述的這種電洞分佈不均勻現象在 Domen 等人所發表的文章中也曾被觀察到^[45]，其形成的原因主要有兩個：一是由於氮化物材料之電洞的有效質量較大，因此其移動速率也就較低，使得電洞難以移動到離 p 態薄膜較遠的量子井中^[45]；另外一個原因則是由於氮化物之價電帶的能隙補償差比例較高(在本次模擬中， $\Delta E_c : \Delta E_v$ 設定為為 3:7^[25])，使得價電帶的量子井之井深較深，因此而影響電洞在活性層中的移動能力^[45]。

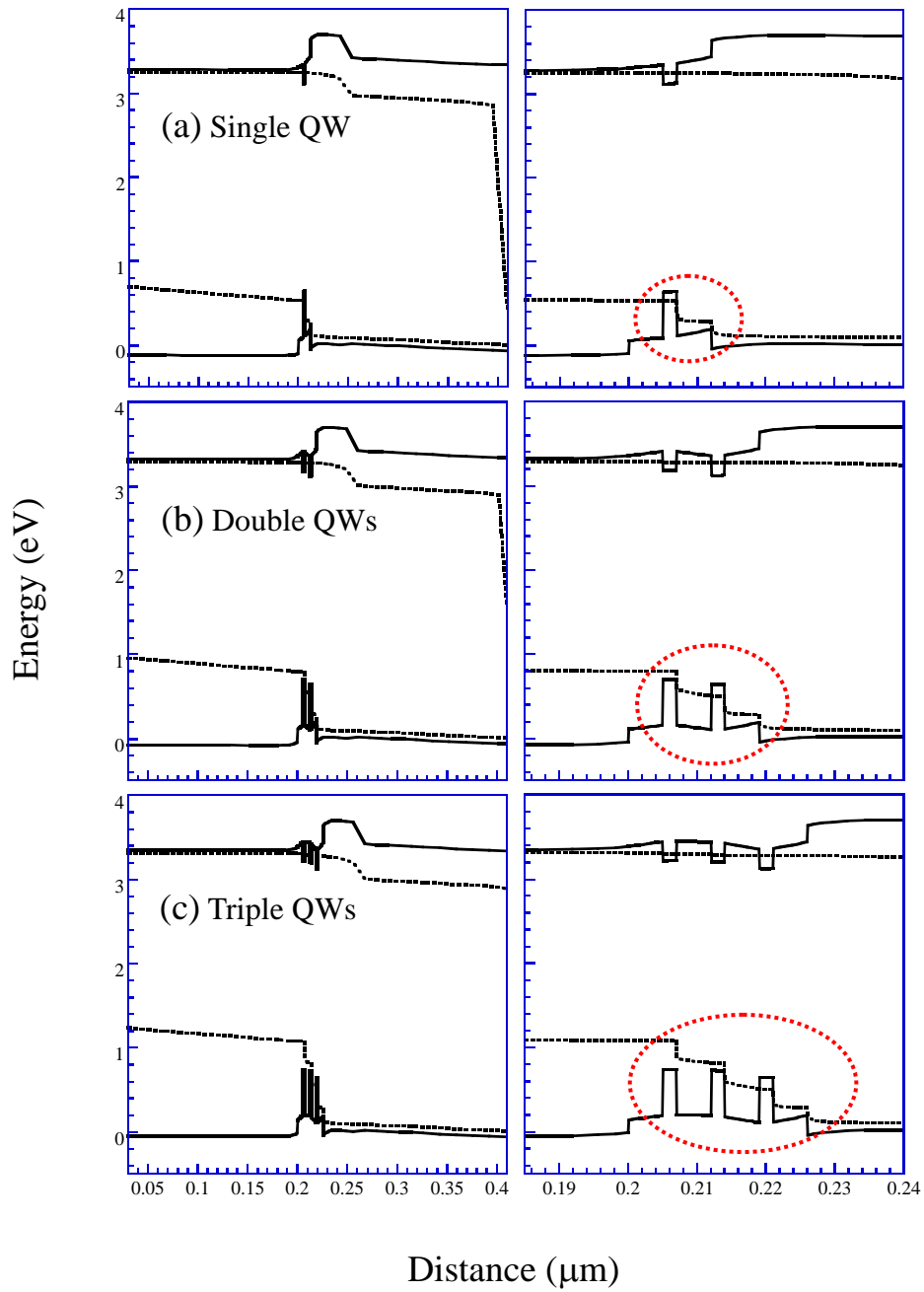


圖 4.3、氮化銦鎵(a)單一量子井雷射(b)雙量子井雷射(c)三量子井雷射在輸入電流為 200 mA 時之能帶結構圖；其中右圖為左圖在活性區附近之放大圖。

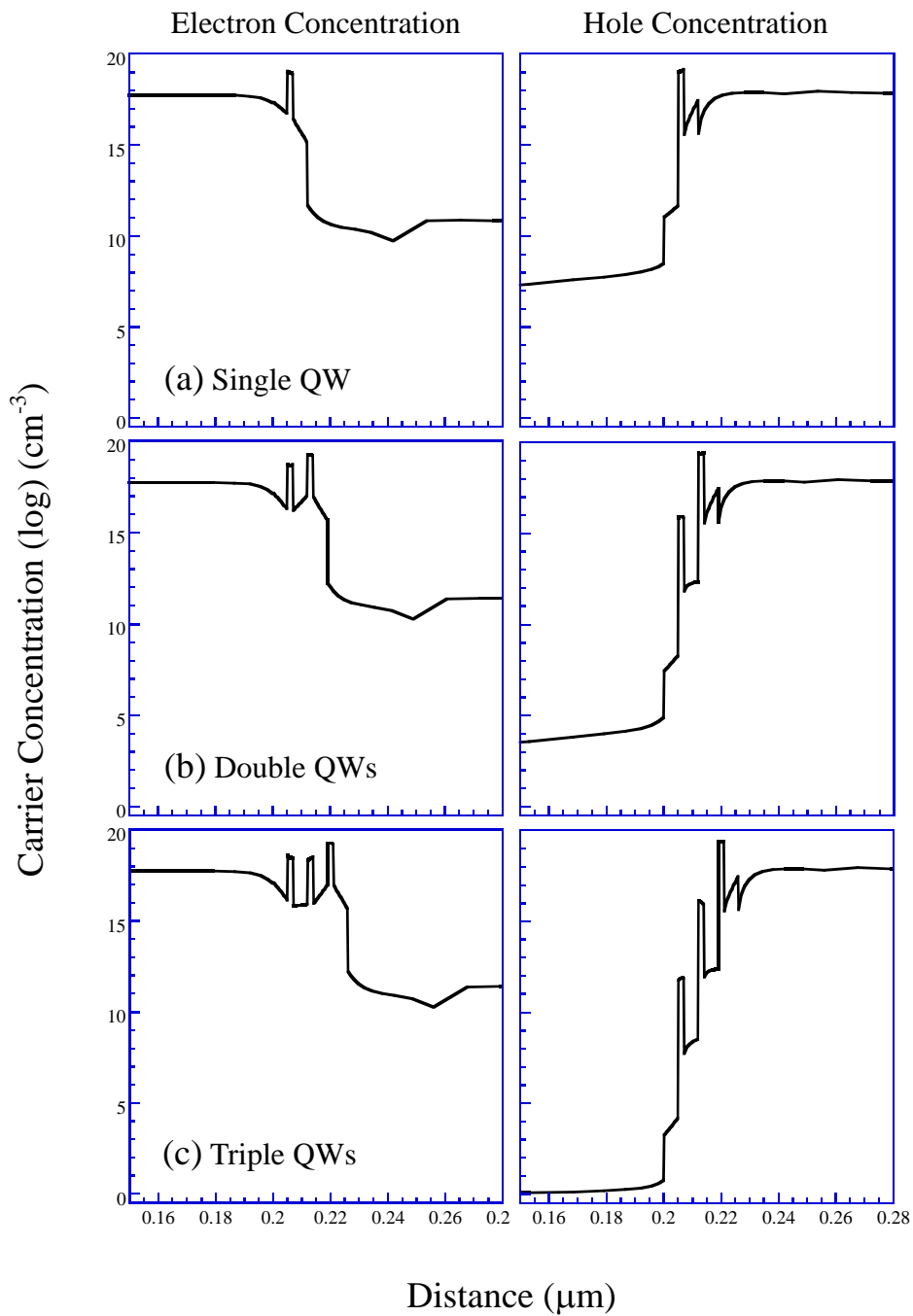


圖 4.4、氮化銦鎵(a)單一量子井雷射(b)雙量子井雷射(c)三量子井雷射在輸入電流為 200 mA 時之載子濃度分佈圖；其中左圖為電子濃度，右圖則為電洞濃度。

如果仔細觀察圖 4.4 之三量子元件的電子與電洞分佈，可以發現最靠近 p 態薄膜之量子井其電子與電洞濃度均甚高，甚至比單一量子井結構在同樣電流輸入下之濃度還高。造成此一量子井之載子濃度偏高的原因有兩個：一是由於在這樣的電流強度下並未足以產生雷射效應（就三量子井雷射而言），因此量子井中的電子與電洞並不會由於受激性再結合（stimulated recombination）的作用而大量的消耗掉，因此才會累積到這麼高的濃度；另一個造成電子濃度偏高的原因則是前面提到過的阻礙層之作用。

由於此一量子井所累積的電子、電洞數目相當的高，所以其粒子反轉數（population inversion）也相對的非常大；在這樣高的粒子反轉數下，單一量子井雷射早就已經產生雷射效應，但是三量子井雷射卻在高達 1000 mA 的電流輸入下仍無法發出雷射光。在雙量子井元件中也可以觀察到類似的現象，因此這個問題的成因很可能就是造成多量子井元件效能變差的元兇。如果能找出上述現象的原因，並設法加以解決，或許就能改善氮化物多量子井雷射效能不佳的現象。

4.3.3 活性區的吸收效應

圖 4.5 所示為雙量子井雷射與三量子井雷射沿著長晶方向之自發輻射率圖與受激放射率圖；其中圖 4.5(a)與圖 4.5(c)中的小圖所顯示的是活性區附近之放大圖。從圖中可以清楚的看出各個量子井內的自發輻射率相差很大，而且越靠近 p 態薄膜的量子井自發輻射率越大，其

成因主要來自於上述的電洞分佈不均勻現象。

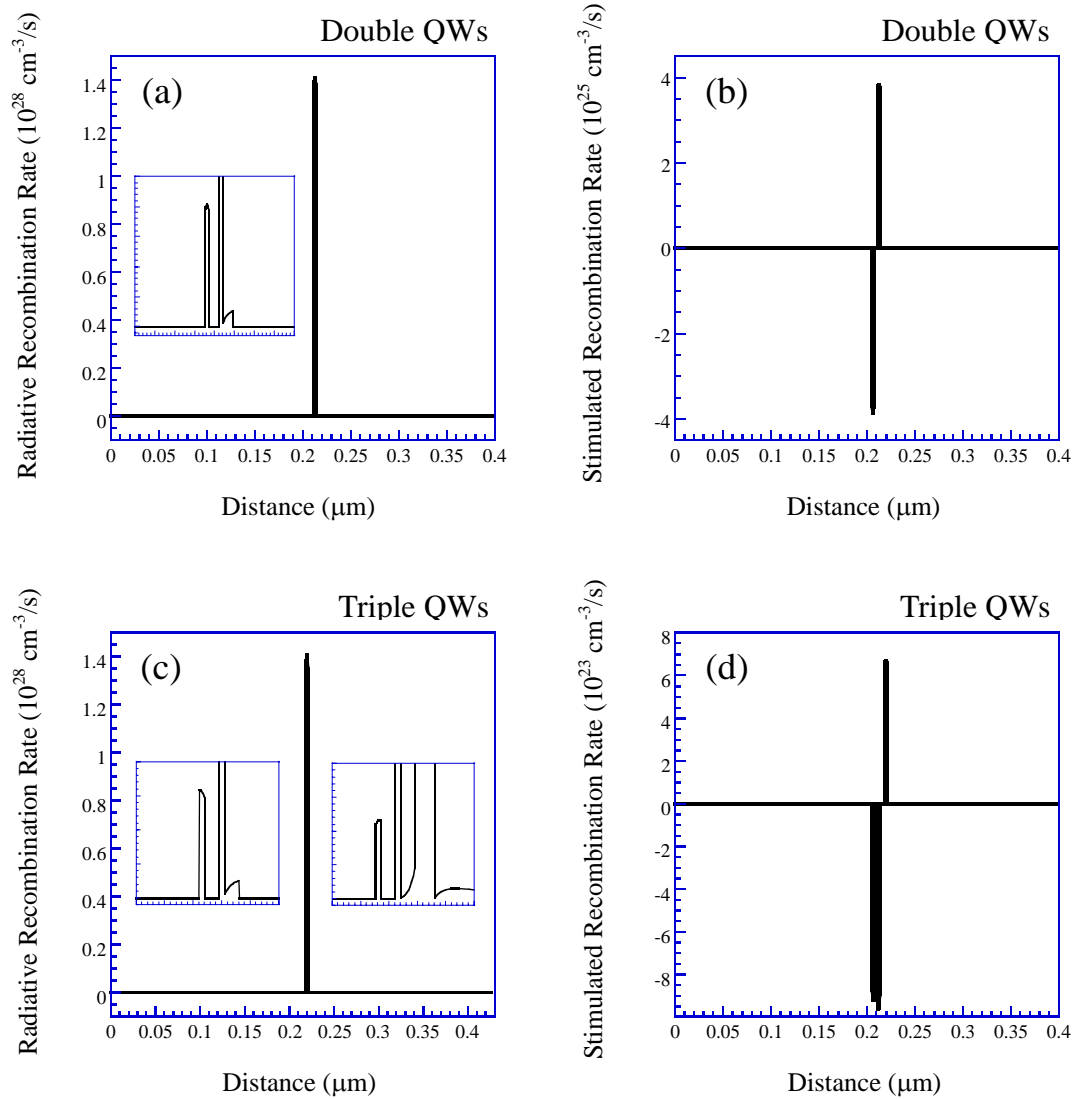


圖 4.5、氮化銦鎵雙量子井雷射與三量子井雷射之自發輻射率圖以及受激放射率圖（輸入電流為 200 mA）。

圖 4.5(b)與圖 4.5(d)則分別顯示出兩種雷射結構之受激放射率分佈

圖。從圖中可以發現到依然是最靠近 p 態薄膜的量子井之受激放射率最大，此一現象跟之前自發輻射率的結果相符合。但是值得我們注意的是：除了最靠近 p 態薄膜的量子井之外，其餘的量子井之受激放射率均為負值。換句話說，只有最靠近 p 態薄膜的量子井才有產生雷射輸出，其餘的量子井不只並未貢獻至受激放射上，甚至還形成吸收最靠近 p 態薄膜的量子井所發出的自發輻射光或受激放射光。由於該量子井所產生的光子幾乎都被其餘的量子井所吸收，以至於在雷射共振腔內沒有足夠的光子來引誘大量的上能階電子躍遷至雷射下能階，因此才會形成上述的空有大量的粒子反轉數，卻無法形成大量雷射輸出的怪異現象。

綜合上述的模擬結果，我們可以做出以下的結論：造成氮化鎵半導體元件之雷射效能與發光效率隨量子井個數之增加而遞減的原因，主要是因為在多量子井結構中，部分的量子井會吸收光子而大幅增加元件的內部損失，因而影響雷射效應的產生。至於量子井的吸光問題則主要來自於活性區之電洞分佈不均勻現象；由於越靠近 n 態薄膜的量子井之電洞濃度越少，因此這些量子井的價電帶中仍然有著大量的電子存在，一旦鄰近的量子井所發出的自發輻射光或受激放射光在空間上通過此一量子井，就會有很大的可能被其吸收而形成系統的損失。

因此若要改善氮化鎵多量子井雷射的系統效能，首先要設法排除活性區的吸收現象，而追根究底則要從電洞的不均勻分佈著手。在

下一小節中將介紹如何來改善電洞分佈不均勻現象，及其對雷射效能的影響。

4.3.4 披覆層 p 態摻雜

從上一小節的模擬結果可以得知造成活性區之電洞不均勻分佈的主要原因是由於電洞不容易傳輸至非緊鄰 p 態薄膜之量子井中；因此如果能有效的增加該量子井的電洞注入量，使得價電帶的電洞數目增加（電子數目減少），就可以降低其所造成的吸收效應，因而減少系統的內部損失。此外，如果電洞注入的數量夠多，甚至還能使這些量子井由原本吸收光子的行為轉變成為放射光子（主要為受激放射），如此一來就能大幅的改進多量子井雷射之系統效能。

要在同樣電流大小的情況下增加注入各個量子井中的電洞數目，首先想到的就是提升 p 態薄膜之電洞摻雜濃度。由於在早先的論文中均認為氮化物相關材料的 p 態摻雜相當不容易進行^{[1]-[4]}，因此實際長晶上的摻雜濃度有一定的上限存在，這也是為什麼在之前模擬中的 p 態濃度值均設定的較小的原因。但是在幾篇西元 2000 年以後所發表的論文中，都已經成功的成長出電洞濃度為 10^{19} cm^{-3} 甚至於 10^{20} cm^{-3} 以上的氮化銦鎵與氮化鎵薄膜^{[46]-[48]}；因此在接下來的理論模擬中，p 態濃度的設定最高將達 $3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 左右。

為了要探討提升 p 態濃度對電洞分佈的影響，我利用上述之多量子井雷射（雙量子井雷射與三量子井雷射）來進行模擬。結果發現在

各個摻雜濃度下 (p 態濃度最高達 $3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$), 兩個雷射系統個別之電洞均勻性與系統效能並沒有太大的變化, 仍然只有最靠近 p 態薄膜之量子井貢獻至雷射輸出上, 其餘的量子井依舊呈現出會吸收光子的現象。因此, 單純的提升 p 態薄膜的摻雜濃度對上述問題的解決並沒有太大的幫助。

由於增加 p 態濃度的方法仍然無法使電洞有效的傳輸至距離較遠的量子井中, 因此另外一個更直接的想法就是在量子井旁的披覆層 (barrier) 進行大量的 p 態摻雜, 以拉近含有大量電洞的薄膜與量子井之距離, 使電洞更容易傳輸至量子井中。一般光電半導體的活性區, 無論是活性層或披覆層, 通常都是純質未摻雜的; 但是在氮化物元件這種電洞注入困難的情況下, 如果在披覆層摻雜大量的電洞, 則披覆層中的電洞可以直接的流入鄰近的量子井中, 如此一來就可避免大部分的電洞均被最靠近 p 態薄膜的量子井侷限住, 而產生電洞難以傳輸至其餘量子井的情況。

圖 4.6 就是上述的多量子井結構在披覆層摻雜濃度為 $2.3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 時活性區附近之載子濃度圖與受激放射率圖。從圖 4.6(a)與(c)中可以看出兩種結構的電洞分佈均明顯的比披覆層未經摻雜時之電洞分佈來得均勻, 顯示出要在各個量子井中增加電洞注入量的目的成功的達成。此外, 從圖 4.6(b)與(d)中也可以看出活性區中的每個量子井之受激放射率均為正值, 顯示出各個量子井均有貢獻至雷射輸出上; 也就是說某些量子井不只不再扮演吸收光子的扯後腿角色, 甚至還擔負起增加雷

射增益的功能。如此一來整體的系統效能當然會比未進行披覆層摻雜的原始結構來的佳。

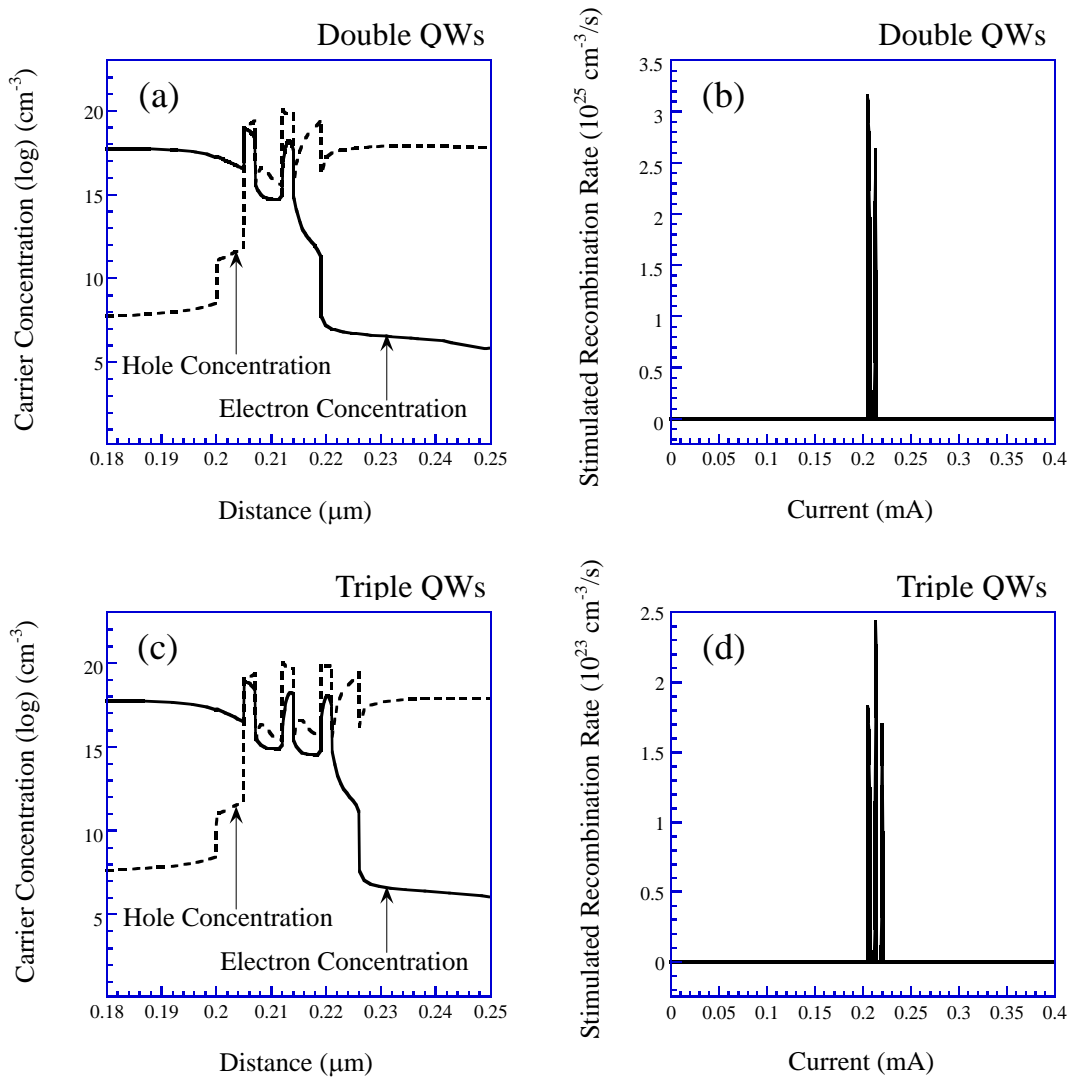


圖 4.6、氮化銦鎵雙量子井雷射與三量子井雷射在披覆層摻雜濃度為 $2.3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 時活性區附近之載子濃度圖以及受激放射率圖（輸入電流為 200 mA）。

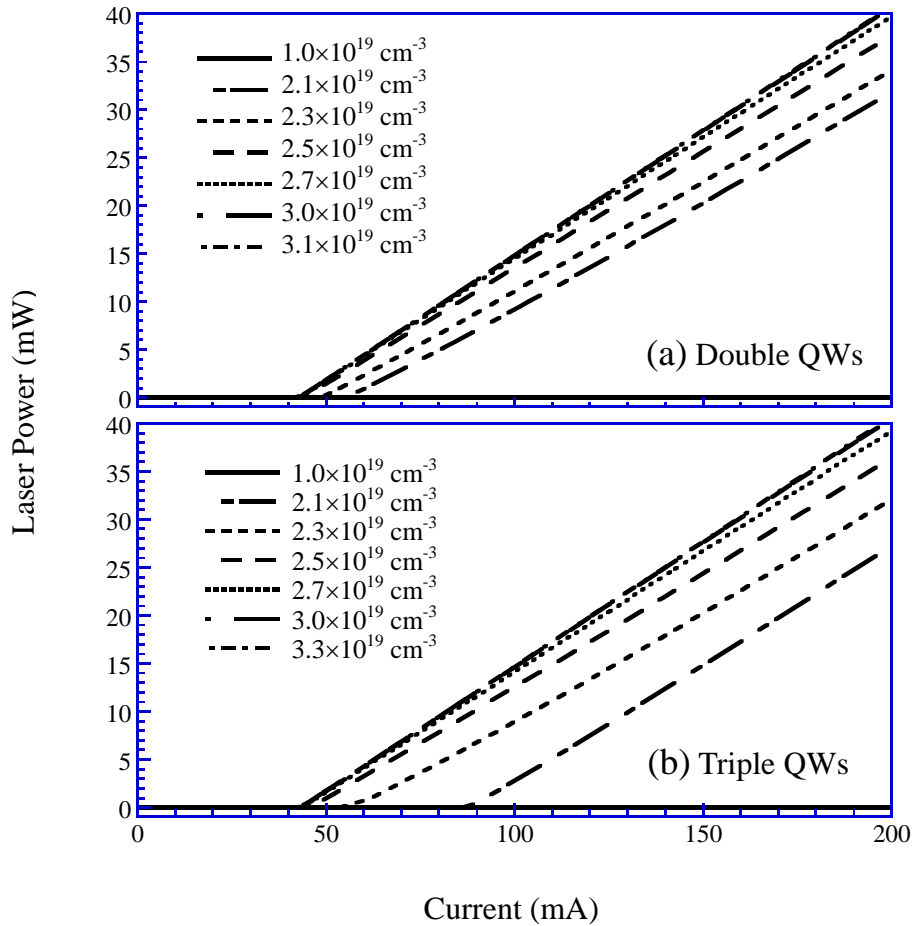


圖 4.7、氮化銦鎵(a)雙量子井雷射與(b)三量子井雷射在不同披覆層摻雜濃度下之輸出功率與電流之關係圖。

接著我們再來看看上述的雷射元件在經過披覆層 p 態摻雜後之雷射效能與發光效率。圖 4.7 就是它們在不同披覆層摻雜濃度下的輸出功率與電流之關係圖；其中披覆層摻雜濃度如果設的太高會使程式產生收斂困難的問題，因而無法得到最終的模擬結果，因此在接下來的模

擬過程中，此一數值最高將只設定到 $3.1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 與 $3.3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ (所能模擬的最上限值)。

從圖中可以看出隨著摻雜濃度的增加，雷射的臨界電流有越來越小的趨勢，斜率效率則隨之而變大，顯示出系統的效能確實獲得有效的改善。而當披覆層摻雜濃度增加到 $3.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 時，兩個雷射系統的效能似乎已趨於最佳化(臨界電流個別為 42.76 mA 與 43.22 mA，斜率效率則為 25.86 % 與 25.74 %)，再次的提升披覆層的摻雜濃度已無法進一步的改善系統效能。

從以上的模擬結果看起來，這種披覆層 p 態摻雜的方法確實能成功的解決活性區中電洞分佈不均勻的問題，並且有效的提升系統的雷射性能與效率。我也試著將同樣的理論模擬過程運用在更多量子井個數的雷射系統上，結果發現類似的模擬結果：在使用披覆層 p 態摻雜的情況下，系統效能獲得大幅的改善，活性區的電洞分佈也都相當均勻，顯示出此一方法可以適用在大多數的多量子井結構中。

值得注意的是，當各個量子井中的電洞濃度因為披覆層摻雜而增加的同時，卻似乎有越靠近 p 態薄膜的量子井其電子濃度越低的趨勢(如圖 4.6(a)與(c))；這種電子不均勻分佈的現象或許是因為在雷射效應產生之時，最靠近 n 態薄膜的量子井由於受激放射而消耗掉大部份的電子，使得能往之後的量子井移動之電子數目下降，因而影響其電子濃度。但是也有另外一種可能性，就是由於披覆層的高度摻雜而使得其電子的能帶分佈相對的上移，因而阻礙電子往 p 態薄膜方向的行

進。

此外，目前的實驗結果顯示出高度 p 態摻雜的氮化物晶片往往具有電阻值偏高的缺點^{[1],[45]}，因此在前述高度披覆層摻雜的情況下，很可能會因為電阻值過高而造成系統的溫度上升，因而降低元件的雷射效能。因此，雖然用理論模擬的方式可以證實適度的披覆層摻雜可以提升多量子井雷射的性能，但是實際上仍待長晶技術的突破，以獲得高濃度、低電阻值的氮化物薄膜，如此一來上述的研究成果才能真正運用至實際應用上。

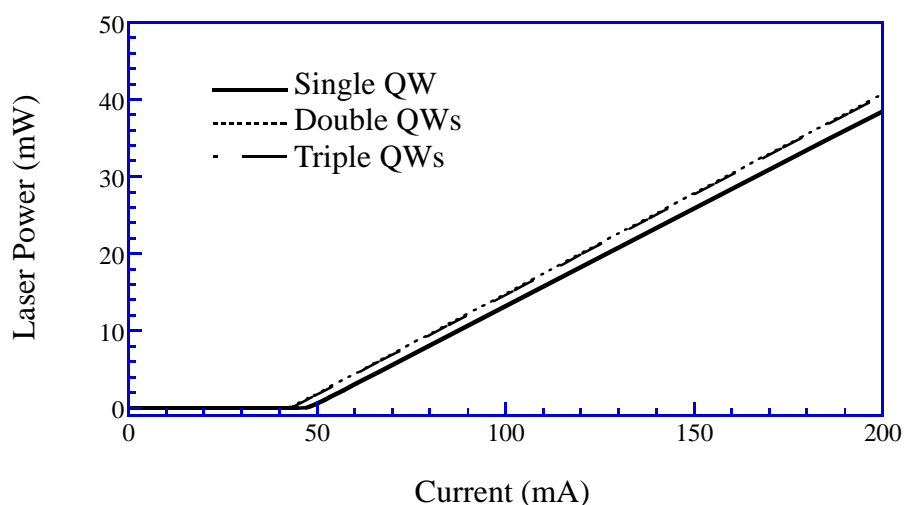


圖 4.8、氮化銦鎵單一量子井雷射與披覆層摻雜濃度為 $3.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 之雙量子井雷射與三量子井雷射之輸出功率與電流之關係圖。

接著我們就來比較電洞分佈已然均勻的雙量子井、三量子井雷射與最初的單一量子井雷射之輸出功率與電流之關係。從圖 4.8 中可以清

楚的看出多量子井雷射具有稍微較低的臨界電流，以及略微較高的斜率效率；顯示出經過披覆層摻雜後之多量子井雷射擁有較單一量子井雷射更佳的系統效能。上述現象的成因主要是因為多量子井雷射之電洞總數較多（由於披覆層 p 態摻雜之故），使得各量子井中的電洞濃度較高，因此才會造成雷射性能的提升。

4.4 結論

在其他學者的實驗結果^{[50]-[51]}以及本次模擬所獲致的結果中均可以發現：隨著量子井數目的增加，氮化鎵半導體雷射的雷射性能與發光效率隨之而變差；換句話說，單一量子井雷射具有最佳的雷射性能^[50]（在部份實驗結果中，雙量子井雷射具有最佳的雷射性能^[51]）。這樣的現象主要是由於氮化物的電洞移動率較低以及價電帶的能隙補償差較高^[45]，以至於各個量子井中的電洞分佈不均勻所致。

我們發現在沒有任何改善的情況下，多量子井雷射活性區中越靠近 n 態薄膜的量子井其電洞濃度越低，而且除了緊鄰 p 態薄膜的量子井貢獻至雷射效應外，其餘的量子井均扮演著吸收光子的反派角色，並因此而造成多量子井雷射的高臨界電流現象，嚴重者甚至無法產生雷射光輸出。關於此一問題，我們發現只要在量子井兩側的披覆層適度的進行 p 態摻雜，就可以有效的改善此一電洞不均勻現象，並因此而大幅提升系統的性能與效率。

第五章 結論

以往由於缺乏高亮度、高效率的短波長藍綠光半導體材料，所以各種可能的材料系統都曾被嘗試用在此一波段上，其中 III-V 族氮化物由於具有許多材料特性上的問題，因此曾經不被看好能在眾多材料中脫穎而出，但是隨著長晶技術的成熟以及結構設計的突破，再加上短波長光源需求的倍增，使得 III-V 族氮化物成為目前藍綠光波段材料的第一選擇，並且是眾多學者爭相研究的目標。

本篇論文首先就藍綠光發光元件的發展歷程以及各種可能的材料系統作一個概略性的說明，並且特別針對 III-V 族氮化物作略為詳細的介紹。此外，對於氮化物材料特性的基本認識，不只是研究此一材料系統的必備知識，對將來理論或實驗上的分析也都有相當的幫助，因此我將本次研究中所蒐集到的文獻資料加以整理與分析，並且將其併入本篇論文中，希望能做為對此一材料系統有興趣者的入門介紹。

在論文的主要內容方面，我利用理論模擬的方式探討氮化銦鎵量子井雷射的兩個負面效應：電子溢流現象與活性區之電洞分佈不均勻現象，並利用各種可能的方法來改善上述的問題。模擬結果顯示出氮化銦鎵單一量子井雷射在室溫的情況下有嚴重的電子溢流產生，但是經由適度的提升 p 態摻雜濃度以及氮化鋁鎵阻礙層的使用，溢電流的程度能被減輕至最低，並因此而造成元件效能的大幅提升；此外，經過改善後的雷射元件，其發光效率以及對溫度的穩定性也都較初始元

件來得佳。

而在另外一個主題的探討上，我發現由於電洞的傳輸不易，使得各個量子井之電洞分佈極端的不均勻，並因而造成氮化銻鎵多量井雷射效能的急遽下降。但是在經過披覆層的 p 態摻雜後，各量子井中的電洞注入量大幅的增加，電洞的分佈也趨於均勻，並因而有效的提升多量子井雷射的系統效能。在此一方法的作用下，多量子井雷射的性能不只大幅的提升，甚至還比單一量子井雷射的性能來得好。

在附錄 A 中，我提供了 Lastip 軟體的基本介紹，以及簡單的操作說明，希望能做為此一軟體的快速上手資料。至於本篇論文中所使用的輸入程式 (.layer 檔、.gain 檔、.sol 檔、.plt 檔) 則詳述在附錄 B 中；由於全部的程式內容太過龐大且許多地方都重複，因此這裡只列出最具代表性的一個，也就是初始結構之程式。附錄 C 則是我在就學期間曾經發表過的論文列表，其中包括英文期刊論文、中文期刊論文以及研討會論文，並在其中選擇具有代表性的論文數篇全文刊載在附錄 C 之後。

參考文獻

- [1] S. Nakamura, and G. Fasol, *The Blue Laser Diode*, Springer-Verlag, Heidelberg, 1997.
- [2] J. I. Pankove, and T. D. Moustakas, *Gallium Nitride (GaN) I - Semiconductors and Semimetals Volume 50*, Academic Press, San Diego, California, USA, 1998.
- [3] G. B. Stringfellow, and M. G. Craford, *High Brightness Light Emitting Diodes: Semiconductors and Semimetals Volume 48*, Academic Press, San Diego, California, USA, 1997.
- [4] S. C Jain, M. Willander, and R. V. Overstraeten, "III-nitrides: Growth, characterization, and properties," J. Appl. Phys, **87**, 965, 2000.
- [5] S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, T. Matsushita, and T. Mukai, "InGaN/GaN/AlGaN-based LEDs and laser diodes," MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. **3**, 31, 1999.
- [6] S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, T. Matsushita, H. Kiyoku, Y. Sugimoto, T. Kozaki, H. Umemoto, M. Sano and T. Mukai, "Violet InGaN/GaN/AlGaN-Based laser diodes operable at 50°C with a fundamental transverse mode," J. Appl. Phys, **38**, L226, 1999.
- [7] H. Morkoc, S. Strite, G. B Gao, M. E. Lin, B. Sverdlov, and M. Burns, "Large-band-gap SiC, III-V nitride, and II-VI ZnSe-based semiconductor device technologies," J. Appl. Phys, **76**, 1363, 1994.
- [8] Y. P. Varshni, "Temperature dependence of the energy gap in semiconductors," Physica **34**, 149, 1967.

- [9] H. Teisseyre, P. Perlin, T. Suski, I. Grzegory, S. Porowski, J. Jun, A. Pietraszko, and T. D. Moustakas, "*Temperature dependence of the energy gap in GaN bulk single crystals and epitaxial layer*," J. Appl. Phys, **76**, 2429, 1994.
- [10] M. O. Manasreh, "*Optical absorption near the band edge in GaN grown by metalorganic chemical-vapor deposition*," Phys. Rev. B, **53**, 16425, 1996.
- [11] B. Monemear, "*Fundamental energy gap of GaN from photoluminescence excitation spectra*," Phys. Rev. B, **10**, 676, 1974.
- [12] J. Petalas, S. Logothetidis, and S. Bouladakis, M. Alouani, and J. M. Wills, "*Optical and electronic-structure study of cubic and hexagonal GaN thin films*," Phys. Rev. B, **52**, 8082, 1995.
- [13] Q. Guo, and A. Yoshida, "*Temperature dependence of band gap change in InN and AlN*," J. Appl. Phys, **33**, 2453, 1994.
- [14] P. Lautenschlager, M. Garriga, and M. Cardona, "Temperature dependence of the interband critical-point parameters of InP," Phys. Rev. B, **36**, 4813, 1974.
- [15] A. F. Wright, and J. S. Nelson, "*Bowing parameters for zinc-blende $Al_{1-x}Ga_xN$ and $Ga_{1-x}In_xN$* ," Appl. Phys. Lett. **66**, 3051, 1995.
- [16] W. Shan, W. Walukiewicz, E. E. Haller, B. D. Little, J. J. Song, M. D. McCluskey, N. M. Johnson, Z. C. Feng, M. Schurman, and R. A. Stall, "*Optical properties of $In_xGa_{1-x}N$ alloys grown by metalorganic chemical vapor depositioon*," J. Appl. Phys. **84**, 4452, 1998.
- [17] M. D. McCluskey, C. G. Van de Walle, C. P. Master, L. T. Romano, and N. M. Johnson, "*Large band gap bowing of $In_xGa_{1-x}N$ alloys*,"

- Appl. Phys. Lett. **72**, 2725, 1998.
- [18] L. T. Romano, B. S. Krusor, M. D. McCluskey, D. P. Bour, and K. Nauka, "*Structural and optical properties of pseudomorphic $In_xGa_{1-x}N$ alloys,*" Appl. Phys. Lett. **73**, 1757, 1998.
- [19] C. Wetzel, T. Takeuchi, S. Yamaguchi, H. Katoh, H. Amano, and I. Akasaki, "*Optical band gap in $Ga_{1-x}In_xN$ ($0 < x < 0.2$) on GaN by photoreflexion spectroscopy,*" Appl. Phys. Lett. **73**, 1994, 1998.
- [20] H. P. D. Schenk, P. de Mierry, M. Laugt, F. Omnes, M. Leroux, B. Beaumont, and P. Gibart, "*Indium incorporation above $800^{\circ}C$ during metalorganic vapor phase epitaxy of InGaN,*" Appl. Phys. Lett. **75**, 2587, 1999.
- [21] J. Wagner, A. Ramakrishnan, D. Behr, M. Maier, N. Herres, M. Kunzer, H. Obloh, and K.-H. Bachem, "*Composition dependence of the band gap energy of $In_xGa_{1-x}N$ layers on GaN ($x \leq 0.15$) grown by metal-organic chemical vapor deposition,*" MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. **4s1**, **G2.8**, 1999.
- [22] L. Bellaiche, T. Mattila, L.-W. Wang, S.-H. Wei, and A. Zunger, "*Resonant hole localization and anomalous optical bowing in InGaN alloys,*" Appl. Phys. Lett. **74**, 1842, 1999.
- [23] C. A. Parker, J. C. Robert, S. M. Bedair, M. J. Reed, S. X. Liu, N. A. El-Masry, and L. H. Robins, "*Optical band gap dependence on composition and thickness of $In_xGa_{1-x}N$ ($0 < x < 0.25$) grown on GaN,*" Appl. Phys. Lett. **75**, 2566, 1999.
- [24] G. Martin, S. Strite, A. Botchkarev, A. Agarwal, A. Rockett, H. Morkoc, W. R. L. Lambrecht, and B. Segall, "*Valence-band*

- discontinuity between GaN and AlN measured by x-ray photoemission spectroscopy," Appl. Phys. Lett.* **65**, 610, 1994.
- [25] G. Martin, A. Botchkarev, A. Rockett, and H. Morkoc, "*Valence-band discontinuities of wurtzite GaN, AlN, and InN heterojunctions measured by x-ray photoemission spectroscopy,*" *Appl. Phys. Lett.* **68**, 2541, 1996.
- [26] J. Baur, K. Maier, M. Kunzer, U. Kaufmann, and J. Schneider, "*Determination of the GaN/AlN band offset via the (-/0) acceptor level of iron,*" *Appl. Phys. Lett.* **65**, 2211, 1994.
- [27] J. R. Waldrop, and R. W. Grant, "*Measurement of AlN/GaN (0001) heterojunction band offsets by x-ray photoemission spectroscopy,*" *Appl. Phys. Lett.* **68**, 2879, 1996.
- [28] S.-H. Wei, and A. Zunger, "*Valence band splittings and band offsets of AlN, GaN, and InN,*" *Appl. Phys. Lett.* **69**, 2719, 1996.
- [29] S.-H. Wei, and A. Zunger, "*Calculated natural band offsets of all II–VI and III–V semiconductors: Chemical trends and the role of cation d orbitals,*" *Appl. Phys. Lett.* **72**, 2011, 1998.
- [30] M. Suzuki, and T. Uenoyama, "*Optical gain and crystal symmetry in III–V nitride lasers,*" *Appl. Phys. Lett.* **69**, 3378, 1996.
- [31] A. S. Barker, Jr. and M. Ilegems, "*Infrared lattice vibrations and free-electron dispersion in GaN,*" *Phys. Rev. B*, **7**, 743, 1973.
- [32] M. Suzuki, and T. Uenoyama, "*First-principles calculation of effective mass parameters of gallium nitride,*" *Jpn. J. Appl. Phys.* **34**, 3442, 1995.

- [33] Y. C. Yeo, T. C. Chong, and M. F. Li, "*Electronic band structures and effective-mass parameters of wurtzite GaN and InN*," J. Appl. Phys. **83**, 1429, 1998.
- [34] C. P. Foley, and T. L. Tansley, "*Pseudopotential band structure of indium nitride*," Phys. Rev. B, **33**, 1430, 1986.
- [35] J. I. Pankove and T. D. Moustakas, *Gallium Nitride (GaN) II - Semiconductors and Semimetals Volume 57*, Academic Press, San Diego, California, USA, 1999.
- [36] J. A. Majewski, M. Stadelé, and P. Vogl, "*Electronic structure of biaxially strained wurtzite crystals GaN, AlN, and InN*," MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. **1**, 30, 1999.
- [37] J. H. Edgar, *Properties of Group III Nitrides*, Electronic Materials Information Service, London, 1994.
- [38] K. Shimada, T. Sota, and K. Suzuki, "*First-principles study on electronic and elastic properties of BN, AlN, and GaN*," J. Appl. Phys. **84**, 4951, 1998.
- [39] H. Morkoc, S. Strite, G. B. Gao, M. E. Lin, B. Sverdlov, and M. Burns, "*Large-band-gap SIC, III-V nitride, and II-VI ZnSe-based semiconductor device technologies*," J. Appl. Phys. **76**, 1363, 1994.
- [40] K. Kim, W. R. L. Lambrecht, and B. Segall, "*Elastic constants and related properties of tetrahedrally bonded BN, AlN, GaN, and InN*," Phys. Rev. B, **53**, 16310, 1996.
- [41] A. F. Wright, and J. S. Nelson, "*Explicit treatment of the gallium 3d electrons in GaN using the plane-wave pseudopotential method*," Phys. Rev. B, **50**, 2159, 1994.

- [42] D. Vogel, P. Kruger, and J. Pollmann, "*Structural and electronic properties of group-III nitrides*," Phys. Rev. B, **55**, 12836, 1997.
- [43] K. Miwa, and A. Fukumoto, "*First-principle calculation of the structure, electronic, and vibration properties of gallium nitride and aluminum nitride*," Phys. Rev. B, **48**, 7897, 1993.
- [44] S. Strite, and H. Morkoc, "*GaN, AlN, and InN: A review*," J. Vac. Sci. Technol. B, **10**, 1237, 1992.
- [45] K. Domen, R. Soejima, A. Kuramata, and T. Tanahashi, "*Electron overflow to the AlGaN p-cladding layer in InGaN/GaN/AlGaN MQW laser diodes*," MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. **3**, 2, 1998.
- [46] K. Kumakura, T. Makimoto, and N Kobayashi, "*Activation energy and electrical activity of Mg in Mg-doped $In_xGa_{1-x}N$ ($x < 0.2$)*," Jpn. J. Appl. Phys. **39**, L337, 2000.
- [47] T. Takeuchi, G. Hasnain, S. Corzine, M. Hueschen, R. P. Schneider, Jr., C. Kocot, M. Blomqvist, Y. Chang, D. Lefforge, M. R. Krames, L. W. Cook, and S. A. Stockman, "*GaN-based light emitting diodes with tunnel junctions*," Jpn. J. Appl. Phys. **40**, L861, 2001.
- [48] S. Jeon, Y. Song, H. Jang, G. M. Yang, S. W. Hwang, and S. J. Son, "*Lateral current spreading in GaN-based light-emitting diodes utilizing tunnel contact junctions*," Appl. Phys. Lett. **78**, 3265, 2001.
- [49] P. S. Zory, Jr, *Quantum Well lasers*, Academic Press, San Diego, California, USA, 1993.
- [50] S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, H. Kiyoku, Y. Sugimoto, T. Kozaki, H. Umemoto, M. Sano, and K. Chocho, "*InGaN/GaN/AlGaN-based laser diodes grown*

on GaN substrates with a fundamental transverse mode," Jpn. J. Appl. Phys. **37**, L1020, 1998.

- [51] S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, T. Matsushita, and T. Mukai, "*Blue InGaN-based laser diodes with an emission wavelength of 450 nm,*" *Appl. Phys. Lett.* **76**, 22, 2000.

附錄 A 模擬軟體 (LASTIP) 之使用說明

LASTIP 軟體的全名為 LASer Technology Integrated Program，是一套能夠模擬二維半導體發光元件的模擬軟體，其出品公司為加拿大的 Crosslight 公司。軟體的操作相當簡單，經由輸入已知的材料參數及結構，就可以獲得各項關於雷射特性的資料。因此只要建立足夠且適當的物理模式 (physical models)，並且輸入正確的材料參數，這一套軟體將可以作為最佳化已知雷射元件或者是評估新穎的系統結構相當有用的一套工具。接下來將針對此一模擬軟體的各項功能及特性作一些基本的說明。

A.1、材料系統與參數設定

模擬中所使用的各項材料參數 (包含塊材與量子井結構) 均設定在 `crosslight.mac` 檔案中，並且開放給使用者進行更正。雖然軟體本身內建的材料參數已經相當完整，但是在有需要的情況下仍然可以經由自行修改或線上下載的方式對其進行更新。軟體內建的材料系統包括：AlGaInAs、GaInAsP (長在 GaAs 或 InP 基板上)、AlGaInP、InGaN、AlGaN... 等常用的材料系統，使用者只需在軟體已經建構好的架構下進行修改即可。此外，也可以利用自行輸入的方式建立軟體所沒有包含的材料系統。

A.2、程式所能模擬的系統、結構

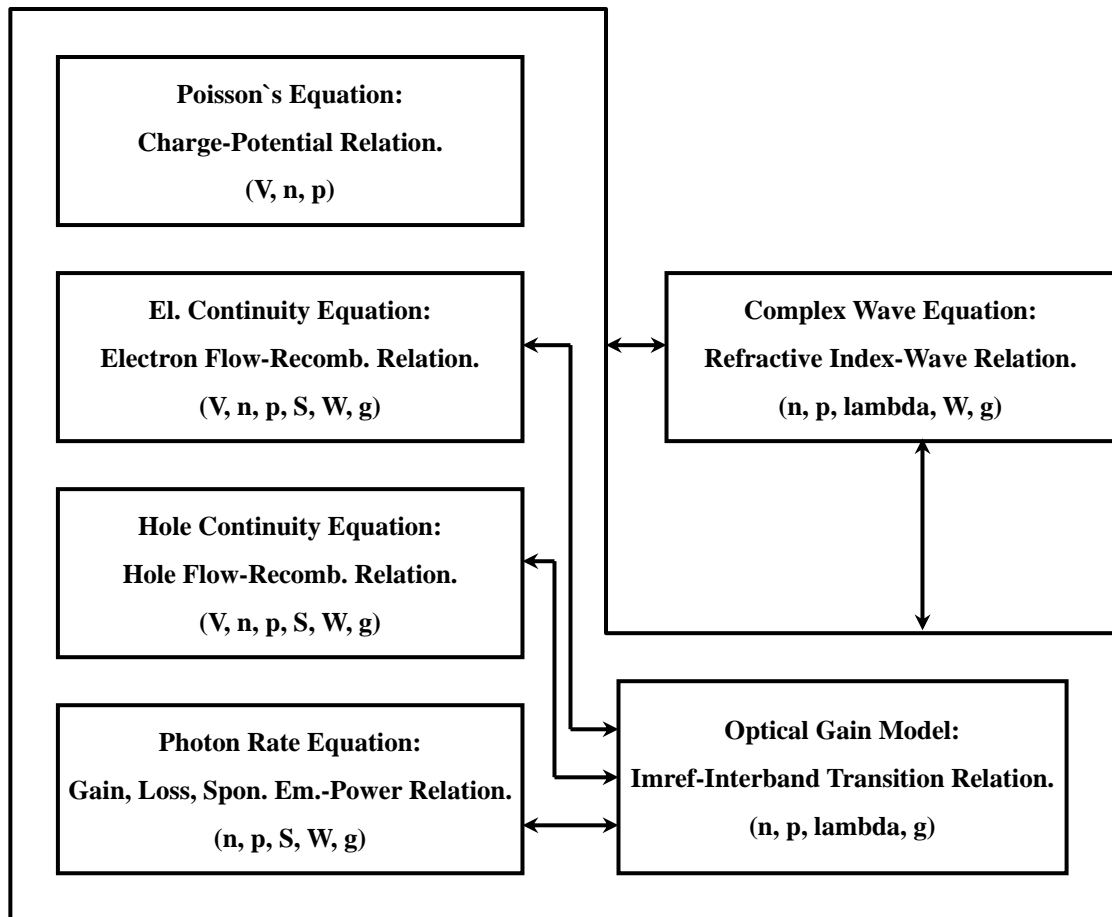
LASTIP 所能模擬的系統結構相當開放，使用者可以利用圖形操作介面 (graphic user interface) 或者是直接撰寫程式的方式建立所需要模擬的結構，再利用程式內建的轉檔功能將建立好的結構轉換成程式的內部語言；只要利用上述兩種方法所能夠設定的各種結構，都可以經由此一軟體來加以模擬。原則上 *LASTIP* 所能模擬的系統結構如下 (不限波長與材料)：

- (1) Fabry-Perot (FP) 雷射；
- (2) Distributed Feedback (DFB) 雷射；
- (3) Gain-Coupled DFB 雷射；
- (4) Distributed Bragg Reflector (DBR) 雷射；
- (5) Multielectrode Distributed Feedback (MEDFB) 雷射；
- (6) Semiconductor Optical Amplifiers；
- (7) Light Emitting Diodes (LEDs)；

A.3、理論計算與原理

LASTIP 軟體的計算方式是利用各種的特性方程式 (物理模型) 來架構出模擬的各項特性與結果；所包含的式子包括基本的 Poisson 方程式、連續方程式、光場分佈方程式以及雷射腔內的光子分佈等等，以及一些描述載子特性、邊界特性...等的理論公式。上述的理論公式與模型在使用手冊中均有概略的介紹，但是由於其內容敘述的不夠詳

盡，因此尚需搭配半導體物理相關書籍一併閱讀。各方程式彼此之間的關聯及其相關的參數系統如下圖所示。



其中 V 代表電位， n 與 p 則代表電子與電洞之濃度。光子數目與光場強度分別以 S 與 W 來表示， λ 代表波長，增益值則表示為 g 。

A.4、模擬所能獲得的結果與資料

在輸入合適的材料參數與結構設定，並且經由上述的理論計算過程後，我們可以獲得下列的模擬結果與資料：

- (1) 輸出能量與電流之關係；
- (2) 電流與電壓之關係；
- (3) 二維的電位、電場與電流分佈；
- (4) 二維的電子與電洞濃度分佈；
- (5) 不同電壓下之能帶結構；
- (6) 價電帶混合模式下之量子井次能帶結構；
- (7) 二維的深層能階所捕獲載子之分佈；
- (8) 二維的光場分佈；
- (9) 二維的區域性光增益分佈；
- (10) 不同電流輸入下之增益頻譜；
- (11) 不同電流輸入下之自發輻射頻譜；
- (12) 遠場分佈；
- (13) 上述所有資料隨時間之變化；
- (14) 上述所有資料在不同溫度下之變化；

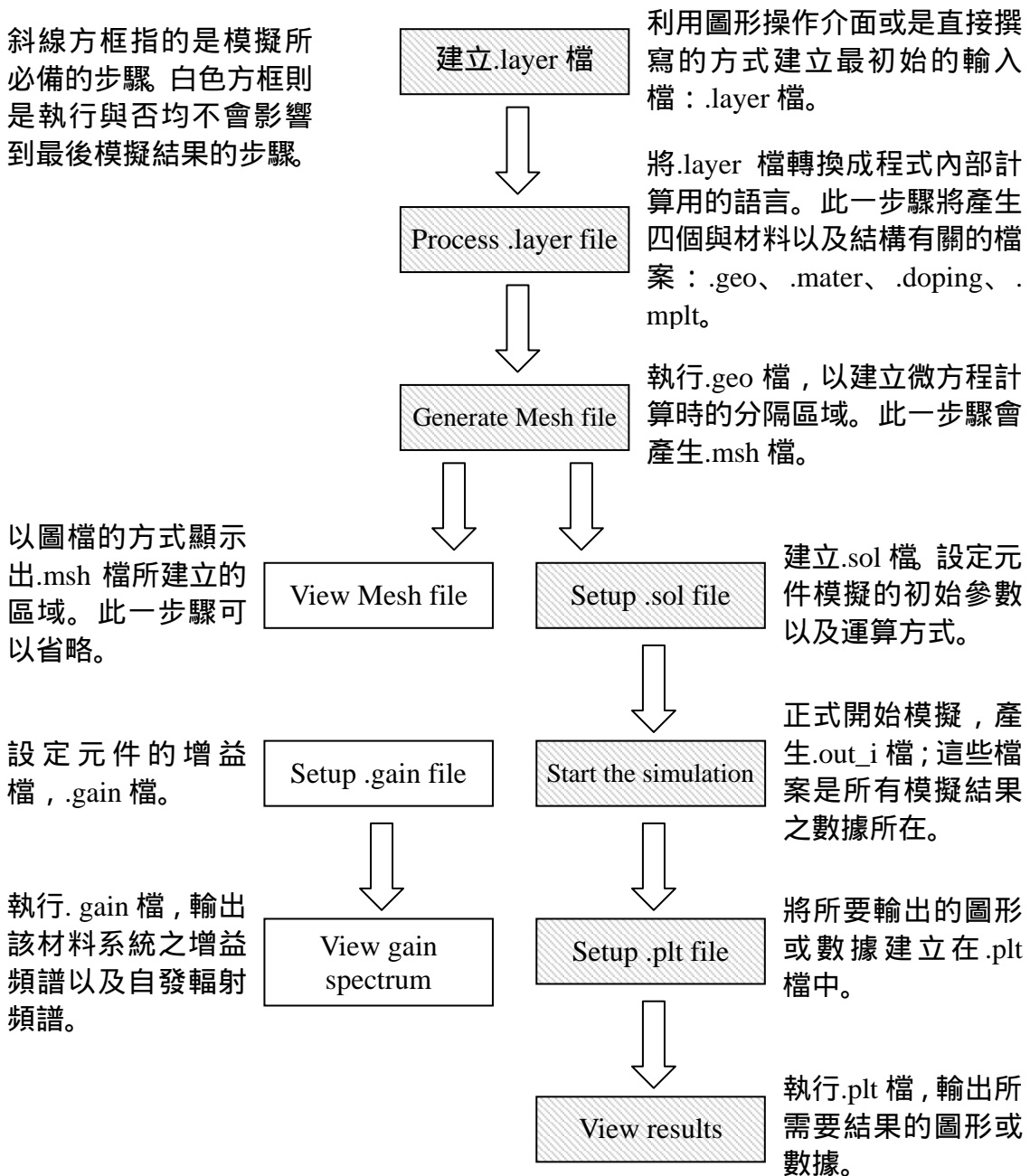
以上所有的模擬結果均可以利用圖檔或純文字檔案的方式輸出，以利於更一步的分析、處理。

A.5、主要操作程序與流程

LASTIP 軟體主要的操作程序是利用輸入元件的材料系統、結構設定以及一些初始參數，再經過檔案轉換的過程將原始的輸入檔轉成程式內部計算用的語言後，就可以正式進行模擬。詳細的操作流程如下圖所示，其中方框內的文字敘述與軟體面板上操作按鈕的文字均一致。

附註：

斜線方框指的是模擬所必備的步驟。白色方框則是執行與否均不會影響到最後模擬結果的步驟。



A.5.1 步驟一：建立.layer 檔

利用簡單的程式語言架構起元件的結構、材料成份，是最初始的輸入檔。建立.layer 檔的方法常用的有兩種，一種是先利用程式內建的圖形操作介面（直接執行“Draw GUI”，就會開啟此一介面。）架構起整個結構，再轉換檔案成.layer 檔；另外一種方式則是直接撰寫.layer 檔。一般而言，如果是要建立新的結構，往往會使用前者的方式；如果只是要對舊結構作稍許的修改或調變材料成份，則直接修改.layer 檔會比較方便（在 *LASTIP* 軟體中，所有參數的單位均設定為 MKS 制）。

A.5.1.1 直接撰寫.layer 檔

程式中以 column 代表元件的縱向橫截面特性；大部份的光電半導體元件只需要一個 column 即足以描述其系統結構，但是在某些特殊結構的情況下（如氮化物元件的脊狀結構）則需要用到兩個以上的 column。其中 w 指的是 column 的寬度，如果是單一 column 的結構，則 w 亦代表整個元件的寬度。 $mesh_num$ 與 r 則是指電腦在進行差分計算時所區分的網目數目以及網目分佈的等比級數，網目的數目越多則模擬結果越準確，但所需要的計算時間也就越多；其中在 column 這一段中所輸入的數值代表整個 column 橫向的網目分佈，而在各層中所輸入的數值則代表各層縱向的網目分佈。程式會依據我們所輸入的 $mesh_num$ 與 r 值來對網目進行等比分佈（由下到上、由左至右），因此若輸入的 r 值為 1，則代表網目均勻分佈，若 r 值小於 1，則表示網

目分佈越來越密。一般來說，我們常將活性區下方薄膜的 r 值設定為小於 1，活性區上方薄膜的 r 值則設為大於 1，以增加活性區邊界區域的計算（其他區域，包括活性區，都將 r 值設定為 1。）

程式中的電極設定以 `bottom_contact` 以及 `top_contact` 表示；我們可以在這裡設定電極的橫向範圍（`from`、`to`），邊界參數（`contact_num`）以及電極型式（`contact_type`）等等，其中電極型式可以設定為 `ohmic` 以及 `schottky` 兩種。

LASTIP 程式在設定結構時主要是依據由下到上、由左至右的原則，將整體結構分成各層（`layer`）來加以個別設定。在各層中可以輸入材料名稱（`macro_name`）成份比例（`var1`、`var2`...）以及該層厚度（`d`）摻雜濃度（`n_doping1` 或 `p_doping1`）等參數；由於程式會依據所輸入的材料名稱自動至 `crosslight.mac` 檔案中載入所有的材料參數，因此這裡所輸入的材料名稱必須跟該檔案中的名稱設定一致。在各層中也都需要設定 n 跟 r 值，其意義跟之前所介紹過的 `mesh_num` 與 r 值一樣，只是這裡指的是各層縱向的網目分佈。

此外，在某些層中會特別設定 `xp1` 以及 `xp2` 兩個參數，其所代表意義是指對邊界進行額外更詳細的計算（`extr_mesh_point`）；其中 `xp1` 代表的是下邊界，`xp2` 則為上邊界。將此一數值設定為 1 則代表開啟此一額外計算功能，設定為 0 或者根本不設定此一參數則代表不使用額外計算功能。在正常的情況下，我們只在活性區以及最靠近活性區的邊界使用此一功能。

活性層的設定跟上述各層的設定極為相似，只是要多設定活性材料 (active_macro) 及其成份比例 (avar1、avar2...)。其中活性材料若為塊材，則直接輸入其材料名稱；活性材料若為量子井結構，則需以 A/B 的形式輸入，A 為活性層材料，B 為披覆層材料。相關的材料名稱可參考 crosslight.mac 檔或使用手冊之說明。

以上就是.layer 檔的概略介紹以及參數說明，完整的檔案內容可參考附錄 B 之資料。如果還有任何不夠詳盡的地方，請直接參考 *LASTIP* 軟體之使用手冊。

A.5.1.2 圖形操作介面

由於圖形操作介面相當簡單明瞭，只需要在程式所指定的空格中輸入參數即可，再加上使用手冊中也有清楚的說明，因此接下來的部份將只針對其轉檔過程中所會產生的兩個錯誤進行說明。

當我們在圖形操作介面建立好元件的結構及參數設定後，只要存檔就會自動產生三個同檔名的檔案：.layer 檔、.ascii 檔、.gui 檔，其中所產生的.layer 檔中會出現兩個程式錯誤：

- (1) extr_mesh_point 設定錯誤：凡是 xp2 均會被誤設為 xp1。
- (2) 活性材料的成份比例之參數名稱錯誤：原本應為 avar1、avar2...，但經轉檔後卻誤為 var1、var2....

因此使用者需在轉檔完成後手動更正這些錯誤。

A.5.2 步驟二：Process .layer file

此一步驟是將初始的輸入檔 (.layer 檔) 轉換成 *LASTIP* 內部所使用的語言, 經由此一步驟會產生 .geo 檔、.mater 檔、.doping 檔以及 .mplt 檔。這些檔案個別描述元件的結構、材料、摻雜濃度...等特性, 並且會被使用在之後的正式模擬中。

A.5.3 步驟三：Generate Mesh file

此一步驟是將上述的 .geo 檔轉換成 .msh 檔, 也就是將網目分佈的資料轉換成電腦所能運算的檔案。完成後還可以利用 “View Mesh file” 的步驟來觀看元件的網目分佈 (此一步驟的完成與否並不會影響到模擬結果, 因此往往被省略掉)。

A.5.4 步驟四：Setup .sol file

此一檔案是模擬過程中最主要的輸入檔, 大部份的計算時間都會花費在這裡。 .sol 檔的建立可以利用程式內建的交談式介面 (直接執行 “Setup .sol file” 即可開啟此一介面), 依其指示一步一步輸入, 或者是直接撰寫的方式。由於 .sol 檔的內容比較簡單且沒有變化, 因此我們大部份都利用舊有的檔案來直接加以修改, 再變更檔案名稱即可。

檔案的一開始是在載入之前已經設定好的結構與參數, 如 .msh 檔、.mater 檔以及 .doping 檔, 並將模擬結果資料設定為以 .out 檔的型式輸出。接著再設定牛頓法的非線性參數 (newton_par), 如 damping_step、 max_iter 等; 除非特殊需要, 否則這些參數不會被改變。

init_wave 的設定則是在輸入解波方程時的一些初始值, 其中

point_ll 與 point_ur 代表解波方程時所要計算的方形區域(point_ll 為下方、左邊的邊界點, point_ur 則為上方、右邊的邊界點), 此一區域必須小於或等於之前所輸入的元件大小; fld_center 則是預計的光學模式中心 (optical mode center), 此一數值僅僅只是一個初始值, 程式在執行的過程中會自動調整至之正確的數值; length 指的是雷射腔長度, 由於之前的結構設計與參數設定均是二維的(因為 *LASTIP* 是一個二維的模擬軟體), 因此加上此一參數後, 就能夠架構成完整的三度空間元件; backg_loss 則為系統的背景損失參數(background loss coefficient), 各層的吸收...等效應都包含在此一參數內; init_wavel 與 wavel_range 分別代表預估的雷射輸出波長以及可能的雷射波長範圍, 程式會從 init_wavel 的數值開始計算波方程, 並在 wavel_range 的範圍中尋找真正的增益波峰; front_back 則是在設定雷射前後反射鏡的反射率, 如果此一參數改成 mirror_ref, 則表示前後反射鏡的反射率均一致。

接下來所要設定的則是程式作運算時之電壓或電流條件 (scan)。如果我們選擇的是電壓, 則程式會從初始電壓依不定的間隔 (bias step 或 bias interval) 增加至最終電壓, 並在每一個指定間隔均輸出模擬資料。value_to 指的是計算過程中的運算終點; print_step 則是上述所謂的指定間隔 (電壓間隔或電流間隔...等), 程式會在每個指定間隔將模擬所得的資料輸出至電腦中 (以.out 檔的型式輸出); min_step 以及 max_step 則是模擬所允許的最小與最大的條件間隔。

跟 A.5.1 小節一樣, 本小節的內容是選擇較常用在.sol 檔中的參數

來加以說明，如果需要用到其他的參數或指令，可以在使用手冊中找到相關的說明。

A.5.5 步驟五：Start the simulation

在執行此一步驟後，*LASTIP* 程式開始正式進行模擬，並將模擬所得的結果以.out 檔的型式紀錄在硬碟中。當程式進行運算的時候，所有的運算進度會以及時顯示或存成 report 檔的方式顯示出來，因此如果程式執行的過程中有任何的錯誤、問題，都可以從其中看出。

A.5.6 步驟六：Setup .plt file

此一步驟是在設定欲輸出模擬結果的輸入檔。在上一步驟中我們已經獲得全部的模擬結果資料 (.out 檔)，而在這裡則是要設定哪些資訊是我們所想要的，然後在下一個步驟將這些選定的資訊從.out 檔中解析出來，並以圖形或資料點的方式呈現在我們面前。

要設定.plt 檔仍然有兩種主要方式，一種就是直接執行程式中的 Setup .plt file 以開啟程式內建的交談式介面，並依其指示一步步輸入；另外一種方式則是手動撰寫.plt 檔。跟.layer 檔一樣，如果是要建立新的.plt 檔，則建議使用前者的方式；相反的，如果所要取得的資訊都一樣，則建議以直接修改.plt 檔的方式會比較方便。

A.5.7 步驟七：View results

執行上述的.plt 檔以取得.out 檔中所紀錄的資料。

附錄 B 模擬中所使用的完整程式內容

在這一節中我將介紹本篇論文所使用的詳細程式內容。由於在探討電子溢流以及電洞不均勻性時所使用的結構與材料參數均是連貫有延續性的，因此在此僅附上第三章之初始結構（圖 3.2）的模擬程式，其餘結構之程式均可以利用這些檔案來加以修改而獲得。例如，要獲得圖 3.6 之結果只需改變.layer 檔之 p 態濃度，其餘的參數及檔案均維持不變即可。

B.1、.layer 檔

```
begin_layer
$
column column_num=1 w=10.000 mesh_num=7 r=1.000
$
bottom_contact column_num=1 from=0.000 to=10.000 contact_num=1
&&
    contact_type=ohmic
$
top_contact column_num=1 from=0.000 to=10.000 contact_num=2 &&
    contact_type=ohmic
$
$
layer_mater macro_name=gan column_num=1
layer d=0.100 n=7 r=1.000 n_doping1=1.00e+024
$
layer_mater macro_name=gan column_num=1
layer d=0.100 n=10 r=0.700 xp2=1 n_doping1=1.00e+024
$
```

```

layer_mater macro_name=ingan column_num=1 var1=0.020
layer d=0.005 n=10 r=1.000 xp1=1 xp2=1
$
layer_mater      macro_name=ingan      column_num=1      var1=0.20
active_macro=InGaN/InGaN &&
  avar1=0.20 avar2=0.020 avar3=300.000
layer d=0.002 n=10 r=1.000 xp1=1 xp2=1
$
layer_mater macro_name=ingan column_num=1 var1=0.020
layer d=0.005 n=10 r=1.000 xp1=1 xp2=1
$
layer_mater macro_name=gan column_num=1
layer d=0.100 n=10 r=1.300 xp1=1 p_doping1=1.00e+023
$
layer_mater macro_name=gan column_num=1
layer d=0.100 n=7 r=1.000 p_doping1=1.00e+023
$
end_layer

```

B.2、.gain 檔

```

$file:sqw.gain
begin_gain
plot_data plot_device=data_file
get_active_layer name=InGaN/InGaN      &&
  var1= 0.200E+00 &&
  var2= 0.02 &&
  var3= 0.3000E+03 &&
  mater=1
active_reg type=macro &&
  mode=te &&
  thickness= 0.002 &&
  tau_scat= 0.1000E-12 &&
  exch_coef=0.e-10 mater=1
gain_wavel wavel_range=[ 0.35 0.55] &&

```

```

    conc_range=[ 0.1000E+23 0.1000E+27] &&
    curve_number= 5          data_file=gain.txt
sp.rate_wavel wavel_range=(0.42 0.52) &&
    conc_range=(1.e20 1.e20) curve_number=1 &&
    data_point=10000        data_file=Spon.txt
end_gain

```

B.3、.sol 檔

```

$file:overflow.sol
begin
load_mesh mesh_inf=Overflow.msh
include file=Overflow.mater
include file=Overflow.doping
output sol_outf=Overflow.out
newton_par damping_step=5. max_iter=100 print_flag=3
sor_par max_iter=3000 print_sor=noprint
init_wave point_ll=[ 0.0000E+00 0.0000E+00] &&
    point_ur=[ 10 0.412] &&
    fld_center=[ 5 0.206] &&
    length= 0.5000E+03 backg_loss=2500 &&
    boundary_type=[2 2 1 1] init_wavel= 0.461E+00 &&
    front_back=[0.85 0.90] &&
    wavel_range=[ 0.440E+00 0.470E+00]
equilibrium
newton_par damping_step=1. print_flag=3
scan var=voltage_1 value_to=-3.0 print_step=1.5 &&
    init_step=0.02 min_step=1.e-5 max_step=0.8
scan var=current_1 value_to=2000. print_step=200. &&
    init_step=5 min_step=1.e-5 max_step=20
end

```

B.4、.plt 檔

```

$file:overflow.plt

```

```

begin_pstprc
plot_data plot_device=postscript
get_data main_input=overflow.sol      &&
    sol_inf=overflow.out              &&
    xy_data=[ 13 13] scan_data=[1 13]
plot_1d variable=elec_conc           &&
    from=[ 0.5000E+01 0.0000E+00] &&
    to=[ 0.5000E+01 0.4120E+00] &&
    xrange=[ 0.0000E+00 0.4120E+00]
plot_1d variable=potential           &&
    from=[ 0.5000E+01 0.0000E+00] &&
    to=[ 0.5000E+01 0.4120E+00] &&
    xrange=[ 0.0000E+00 0.4120E+00]
plot_1d variable=band                &&
    from=[ 0.5000E+01 0.0000E+00] &&
    to=[ 0.5000E+01 0.4120E+00] &&
    xrange=[ 0.0000E+00 0.4120E+00]
plot_1d variable=total_curr_y        &&
    from=[ 0.5000E+01 0.0000E+00] &&
    to=[ 0.5000E+01 0.4120E+00] &&
    xrange=[ 0.0000E+00 0.4120E+00]
plot_1d variable=field_y             &&
    from=[ 0.5000E+01 0.0000E+00] &&
    to=[ 0.5000E+01 0.4120E+00] &&
    xrange=[ 0.0000E+00 0.4120E+00]
plot_1d variable=elec_energy         &&
    from=[ 0.5000E+01 0.0000E+00] &&
    to=[ 0.5000E+01 0.4120E+00] &&
    xrange=[ 0.0000E+00 0.4120E+00]
plot_1d variable=acceptor_conc      &&
    from=[ 0.5000E+01 0.0000E+00] &&
    to=[ 0.5000E+01 0.4120E+00] &&
    xrange=[ 0.0000E+00 0.4120E+00]
plot_1d variable=recomb_rad          &&
    from=[ 0.5000E+01 0.0000E+00] &&

```

```

to=[ 0.5000E+01 0.4120E+00] &&
xrange=[ 0.0000E+00 0.4120E+00]
plot_1d variable=local_gain &&
from=[ 0.5000E+01 0.0000E+00] &&
to=[ 0.5000E+01 0.4120E+00] &&
xrange=[ 0.0000E+00 0.4120E+00]
plot_1d variable=recomb_st &&
from=[ 0.5000E+01 0.0000E+00] &&
to=[ 0.5000E+01 0.4120E+00] &&
xrange=[ 0.0000E+00 0.4120E+00]
plot_scan scan_var=voltage_1 &&
variable=total_curr_1
plot_scan scan_var=current_1 &&
variable=laser_power
get_data main_input=overflow.sol &&
sol_inf=overflow.out &&
xy_data=[ 1 13] convert_data=yes
end_pstprc

```

附錄 C 論文發表清單

C.1、SCI 認定英文雜誌論文：5 篇（3 篇已發表、2 篇即將投稿）

- (1) Yen-Kuang Kuo and **Jih-Yuan Chang**, "*Numerical study on passive Q-switching of tunable Cr:LiCAF laser with Cr:YSO solid state saturable absorber*," Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 40, No. 10, pp. 5949-5950, 2001.
- (2) Yen-Kuang Kuo, Horng-Min Chen, and **Jih-Yuan Chang**, "*Numerical study of the Cr:YSO Q-switched ruby laser*," Optical Engineering, Vol. 40, No. 9, pp. 2031-2035, 2001.
- (3) Yen-Kuang Kuo, **Jih-Yuan Chang**, Chia-Ching Lin, and Horng-Min Chen, "*Tunable Cr:YSO Q-switched Cr:BeAl₂O₄ laser: numerical study on laser performance along three principal axes of the Q switch*," Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 39, No. 7A, pp. 4002-4005, 2000.
- (4) Yen-Kuang Kuo and **Jih-Yuan Chang**, "*Theoretical study on Cr:YSO Q-switched Cr:LiCAF laser system*," to be submitted.
- (5) Yen-Kuang Kuo and **Jih-Yuan Chang**, "*Electronic current overflow and inhomogeneous hole distribution of the InGaN quantum well structures*," to be submitted.

C.2、中文雜誌論文：3 篇（2 篇已發表、1 篇即將投稿）

- (1) 洪國凱、張誌原、黃旭晴、郭艷光, "紫外光氮化鎵面射型半導體雷射之設計與分析," 光學工程季刊, 第74期, 第48至52頁, 2001年6月.
- (2) 張誌原、郭艷光, "電子溢流對氮化鎵多量子井元件光學特性之影響," 光學工程季刊, 第73期, 第45至50頁, 2001年3月.
- (3) 張誌原、郭艷光, "氮化鎵量子井雷射之電子溢流現象與電洞不均勻性探討," 即將投稿至物理雙月刊.

C.3、研討會論文：15 篇

- (1) *Jih-Yuan Chang (張誌原) and Yen-Kuang Kuo (郭艷光), "Optical Performance of the Cr:YSO Q-Switched Cr:LiCAF Laser System,"* in Conference of Year 2002 Annual Meeting of Chinese Physical Society (2002年中華民國物理年會), paper E-070, 2002.
- (2) 張誌原、郭艷光, "氮化鎵多量子井結構之電洞不均勻性探討," in Proceedings of Conference on Optics And Photonics Taiwan'01 (2001台灣光電科技研討會) (會議地點: 中山大學), paper P3, 2001.

- (3) **Jih-Yuan Chang** (張誌原) and Yen-Kuang Kuo (郭艷光), "*Numerical Study of the Cr:LiCAF/Cr:YSO Q-Switching System*," in Conference of Year 2001 Annual Meeting of Chinese Physical Society (2001年中華民國物理年會) (會議地點: 台灣大學), paper PE13, 2001. (摘要刊登於物理雙月刊, 第23卷, 第1期, 236頁)
- (4) Yi-An Chang (張詒安), **Jih-Yuan Chang** (張誌原), Yen-Kuang Kuo (郭艷光), Jiann Lin, and Chung-I Chiang, "*Optical Properties of InGaN Multi-Quantum Well Structures - Experimental Measurement and Numerical Simulation*," in Conference of Year 2001 Annual Meeting of Chinese Physical Society (2001年中華民國物理年會) (會議地點: 台灣大學), paper PE14, 2001. (摘要刊登於物理雙月刊, 第23卷, 第1期, 237頁)
- (5) Yen-Kuang Kuo, Kuo-Kai Horng, Ya-Lien Huang, **Jih-Yuan Chang**, Yuni Chang, and Hsu-Ching Huang, "*Temperature dependent optical properties of the InGaN semiconductor materials: experimental and numerical studies*," in *Optoelectronic Materials and Devices*, Proceedings of SPIE Vol. 4078, pp. 579-586, 2000.
- (6) Yen-Kuang Kuo, **Jih-Yuan Chang**, Horng-Min Chen, and Chia-Ching Lin, "*Broadband Cr:YSO solid-state saturable absorber for ruby, alexandrite, and Cr:LiCAF lasers: numerical study on passive Q-switching performance*," in *Optoelectronic Materials and Devices*, Proceedings of SPIE Vol. 4078, pp. 587-594, 2000.

- (7) Man-Fang Huang, Pin-Hui Liu, J. S. Liu, Yen-Kuang Kuo, Ya-Lien Huang, Kuo-Kai Horng, **Jih-Yuan Chang**, Yuni Chang, and Hsu-Ching Huang, "*Experimental and numerical study on the optical properties of yellow-green AlGaInP light emitting diodes,*" in Optoelectronic Materials and Devices, Proceedings of SPIE Vol. 4078, pp. 595-602, 2000.
- (8) Yen-Kuang Kuo, Hsu-Ching Huang, **Jih-Yuan Chang**, Yuni Chang, Kuo-Kai Horng, Ya-Lien Huang, Wen-Wei Lin, and Man-Fan Huang, "*A study of the optical properties of the yellow-green AlGaInP and the blue-UV InGaN semiconductor materials,*" in the 13th Annual Lasers and Electro Optics Society Meeting (IEEE/LEOS 2000, Puerto Rico), paper ThL 4 (Conference Proceedings pp. 790-791), 2000.
- (9) Yen-Kuang Kuo, Kuo-Kai Horng, Hsu-Ching Huang, Ya-Lien Huang, **Jih-Yuan Chang**, Yuni Chang, Wen-Wei Lin, Yi-An Chang, and Chih-Kang Chang, "*Numerical Study on III-N and III-P Semiconductor Materials with LASTIP, PICS3D, and CASTEP,*" in the 2nd International Photonics Conference (IPC2000, National Chiao Tung University, Hsinchu, Taiwan), paper W-S1-A003, Proc. IPC 2000, pp. 17-19, 2000.
- (10) **Jih-Yuan Chang** and Yen-Kuang Kuo, "*Temperature-Dependent Current Overflow of InGaN Quantum Well Structure – A Numerical Study,*" in the 2nd International Photonics Conference (IPC2000,

National Chiao Tung University, Hsinchu, Taiwan), paper W-S1-A004, Proc. IPC 2000, pp. 20-22, 2000.

- (11) **Jih-Yuan Chang**, Yen-Kuang Kuo, Jiann Lin, and Chung-I Chiang, "*Optical Property of an InxGal-xN/GaN Quantum Well Structure*," in the 2nd International Photonics Conference (IPC2000, National Chiao Tung University, Hsinchu, Taiwan), paper TH-S1-P002, Proc. IPC 2000, pp. 491-493, 2000.
- (12) Jiann Lin, **Jih-Yuan Chang**, Wen-Wei Lin, and Yen-Kuang Kuo, "*Dimension effect simulations of InGaN active layer in GaN LED*," in the 8th Asia Pacific Physics Conference, Taipei, 2000.
- (13) Yen-Kuang Kuo, **Jih-Yuan Chang**, and Horng-Min Chen, "*Numerical study on passive Q-switching of ruby and tunable Cr:LiCAF lasers with Cr:YSO solid-state saturable absorber*," in Conference of Year 2000 Annual Meeting of Chinese Physical Society (2000年中華民國物理年會) (會議地點: 成功大學), paper FC2, 2000. (摘要刊登於物理雙月刊, 第22卷, 第1期, 102頁)
- (14) Yen-Kuang Kuo, Jiann Lin, Kuo-Kai Horng, Ya-Lien Huang, **Jih-Yuan Chang**, Yuni Chang, Hsu-Ching Huang, Jen-Inn Chyi, Chang-Cheng Chuo, and Man-Fang Huang, "*Experimental and numerical studies on the optical properties of InGaN and AlGaInP short-wavelength semiconductor materials*," in Conference of Year 2000 Annual Meeting of Chinese Physical Society (2000年中華民國

物理年會) (會議地點: 成功大學), paper PF12, 2000. (摘要刊登於
物理雙月刊, 第22卷, 第1期, 162至163頁)

- (15) Yen-Kuang Kuo, Horng-Min Chen, Chia-Ching Lin, *Jih-Yuan Chang*, Yuni Chang, and Kuo-Kai Horng, "*Performance of alexandrite laser with Cr:YSO solid-state saturable absorber: a numerical study*," in Proceedings of Conference on Optics And Photonics Taiwan'99 (1999台灣光電科技研討會) (會議地點: 中央大學), paper TH-III 2-C-8, pp. 793-796, 1999.