

# 第七章 应变量子阱光增益 的计算

---

# 主要内容

---

7 . 1 应变体材料

7 . 2 应变量子阱的能带

7 . 3 应变量子阱的准费米能级

7 . 4 应变量子阱的光增益

# 7.1 应变体材料

## 1. 什么叫应变

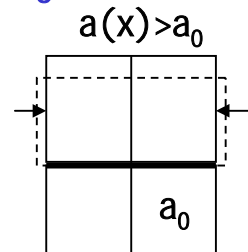
在不同的材料系间进行异质外延生长时，如果两种材料的晶格常数相等，或失配度 $\Delta a/a_0$ 小于0.5%，则生长出的材料质量比较好，不会因晶格常数失配而引起晶体中大的应力甚至位错缺陷。因此在早期的研究中外延生长尽量在晶格常数尽可能匹配的材料系间进行，如GaAs/AlGaAs材料间的外延生长。

但是，晶格失配总或多或少存在，近年来的研究发现，如果失配度不是很大，且生长的外延材料小于某一临界厚度 $h_c$ ，则通过外延材料发生弹性形变，以在平行方向上达到统一的平衡晶格常数 $a_{//}$ ，并保持晶体良好的结构性质，这种外延层称为应变层。由于应变层发生了弹性形变，要维持这一形变就会有一定的应力，这种应力称为内应力。内应力的存在改变了晶体结构的对称性，进而改变了材料的能带结构，提供了一种有效的能带裁剪手段。我们可以利用这些性质来改善器件的电学和光学性质。

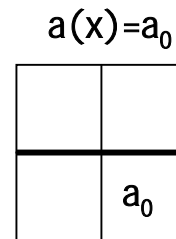
# 7.1 应变体材料

## 2. 应变的种类

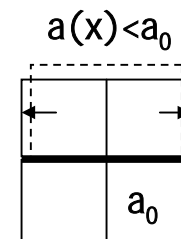
根据外延层和衬底材料间晶格常数的不同，应力有两种类型。当外延层的晶格常数大于衬底的晶格常数时，为了通过应变保持平行方向晶格常数的一致，外延层水平方向的晶格常数减小，而垂直方向的晶格拉长，从而在平面内产生双轴压应变，如图7.1(a)所示。反之，如果外延层的晶格常数小于衬底的晶格常数，将会在处延层垂直于长方向的平面内产生双轴张应变，如图7.1(c)所示。应变使得晶体产生畸变，改变了晶体的对称性，进而使材料的能带结构发生了变化，通过应变材料的研究可更加深入地了解材料的本征特性，如禁带宽度，形变势和能带结构参数 $\gamma_1$ 、 $\gamma_2$ 、 $\gamma_3$ 等。



(a) 压应变



(b) 无应变



(c) 张应变

图7.1 不同晶格常数下的应变

# 7.1 应变体材料

## 3. 临界厚度

在匹配材料系的生长中，材料的生长厚度不受限制。但是对于晶格失配的应变材料系，则必须考虑不会产生失配位错的最大厚度 $h_c$ ，当材料的厚度大于 $h_c$ 时，内应力释放，材料中产生位错和缺陷。 $h_c$ 的计算公式为，

$$h_c = \frac{a_0}{\kappa \sqrt{2\pi f}} \frac{1-0.25\nu}{1+\nu} \left( \ln \frac{h_c \sqrt{2}}{a_0} + 1 \right) \quad (7.1)$$

其中 $h_c$ 是临界厚度， $a_0$ 是应变层的晶格常数， $f$ 是失配量，定义为

$$f = \Delta a_0 / a_0 \quad (7.2)$$

$\nu$ 是泊松比，定义为

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (7.3)$$

$C_{11}$ 和 $C_{12}$ 是材料的弹性常数；常数  $\kappa$  相应于应变超晶格、单量子阱和单应变层的取值分别为1、2和4。

## 7.1 应变体材料

图7.2是由式(7.1)计算得到的GaAs衬底上生长应变 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的临界厚度与InAs组份 $x$ 的关系，计算中所选取的参数如表7-1所示， $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的参数由InAs和GaAs的相应参数线性插值得到。由图可见，随 $x$ 的增大，由于 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 与GaAs间的晶格失配增大，临界层厚度减小。

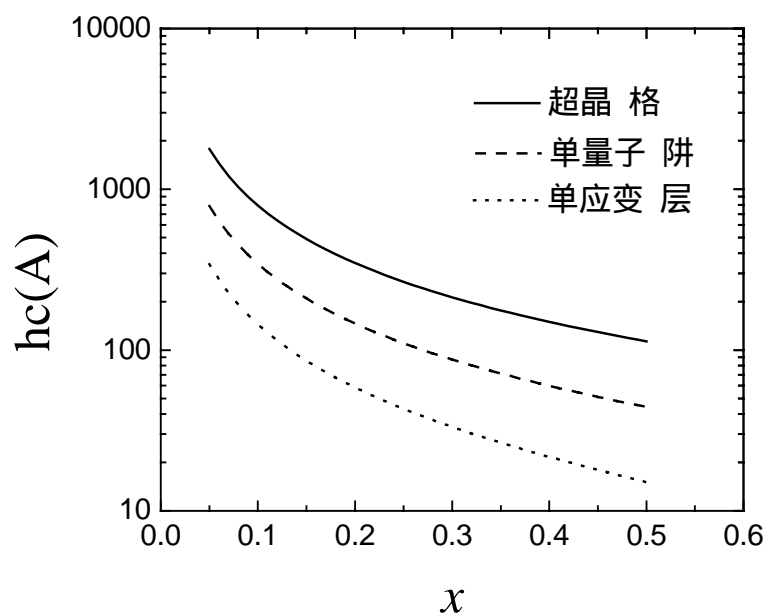


图7.2 应变 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 临界层厚度与InAs组份 $x$ 的关系

表 7.1 : InAs 和 GaAs 的材料参数

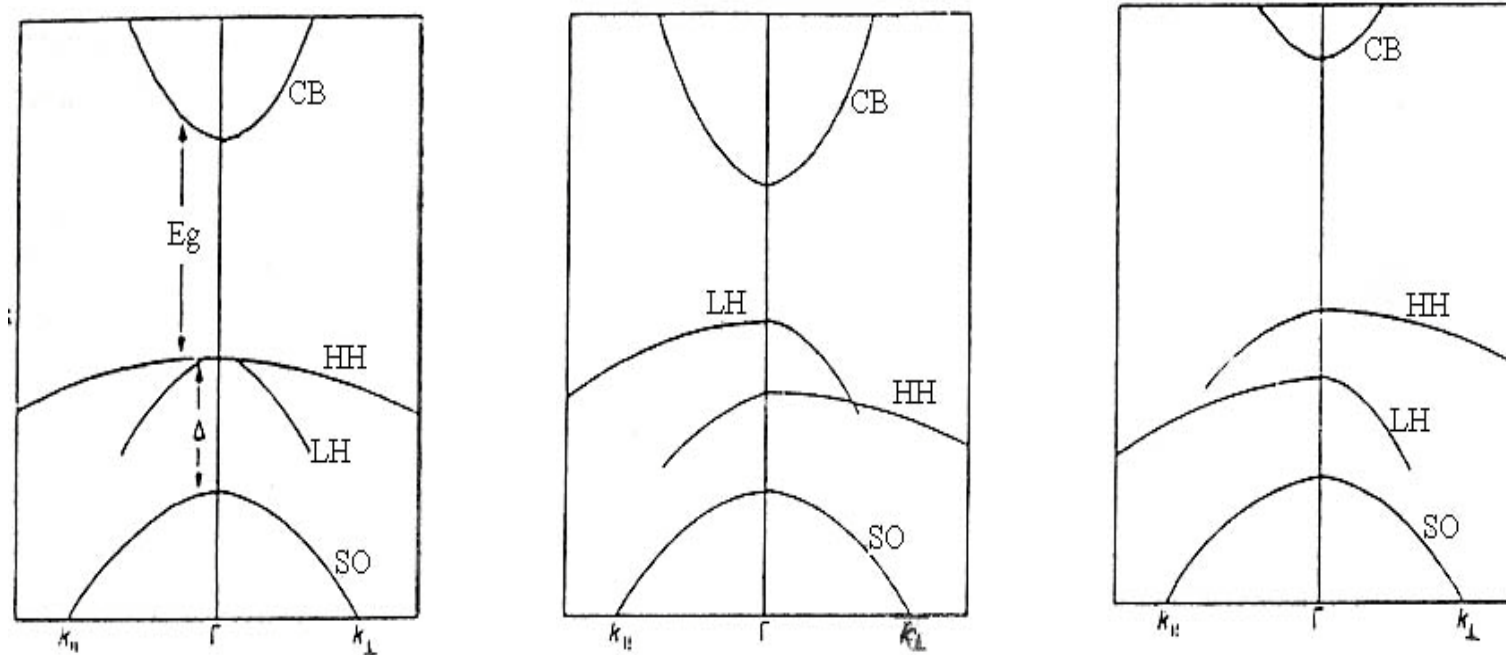
参 数	InAs	GaAs
$a_0(\text{\AA})$	6.0584	5.6533
$C_{11}(10^{11}\text{dyn/cm}^2)$	8.329	11.88
$C_{12}(10^{11}\text{dyn/cm}^2)$	4.526	5.38
$a(\text{eV})$	-6.0	-9.77
$b(\text{eV})$	-1.8	-1.7
$\gamma_1$	20.4	6.85
$\gamma_2$	8.3	2.1
$\gamma_3$	9.1	2.9

## 7.1 应变体材料

### 4. 应变对能带的影响

图7.3给出了应变体材料在不同应变下的能带示意图。应变对导带的影响主要是使导带底上移(压应变)或下移(张应变)。而应变对价带的影响却要大得多，主要体现在三个方面：(1) 由流体静压力导致的整个价带的上移(对于张应变)或下移(对于压应变)，从而改变材料的禁带宽度；(2) 由切向应力引起的在价带顶处轻空穴带和重空穴带的分离，简并被消除，对于压应变，重空穴带位于轻空穴带上方，而对于张应变则正好相反；(3) 轻空穴和重空穴的有效质量变为各向异性，特别是对于压应变，由于重空穴带在平行方向的有效质量减小，用此材料作有源区制成的半导体激光器的阈值电流密度显著降低。

## 7.1 应变体材料



(a) 非应变

(b) 张应变

(c) 压应变

图7.3 应变体材料在不同应变下的能带



## 7.1 应变体材料

### 5. 应变体材料的禁带宽度

由图7.3可见，应变体材料的禁带宽度为

$$E_g^s = E_g^0 - \delta E_{hy} \mp \zeta \quad (7.4)$$

其中 $E_g^0$ 是无应变时材料的禁带宽度； $\delta E_{hy}$ 是由于流体静压力引起的整个带隙的变化，对于压应变为负值，对于张应变为正值； $\zeta$ 是由于切向应变引起的轻、重空穴带向上或向下的移动量，对于压应变， $\zeta$ 为负值，对于张应变， $\zeta$ 为正值；“-”号对应于导带底到轻空穴价带顶的带隙，“+”号对应于导带底到重空穴价带顶的带隙。 $\delta E_{hy}$ 和 $\zeta$ 的具体表示式为，

$$\delta E_{hy} = -2a \left[ 1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right] \varepsilon \quad (7.5)$$

$$\zeta = -b \left[ 1 + 2 \frac{2C_{12}}{C_{11}} \right] \varepsilon \quad (7.6)$$

其中 $a$ 和 $b$ 是形变势； $\varepsilon$ 是应变变量，表示为

$$\varepsilon = \frac{a_0 - a_s}{a_0} \quad (7.7)$$

其中 $a_0$ 和 $a_s$ 分别是衬底层和应变层材料的晶格常数。非应变 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的禁带宽度为

$$E_g^0(x) = 1.424 - 1.619x + 0.555x^2 \quad (7.8)$$

## 7.1 应变体材料

图7.4给出了在GaAs上生长的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 应变层的带隙与InAs组份 $x$ 的关系，图中同时给出了相应于各带隙跃迁的光子波长。由图7.4可见，尽管切应变使导带与重空穴带间的能量 $E_g^h$ 减小，但由于流体静压力的作用，其值仍大于非应变InGaAs的带隙。当 $x$ 从0.0变化到0.3时，相应于 $E_g^h$ 的波长变化范围是 $0.87 \sim 1.12\mu\text{m}$ ，从而填补了用匹配材料难以实现的波长范围（匹配GaAs/AlGaAs材料系的波长范围是 $0.87 \sim 0.65\mu\text{m}$ ，匹配InGaAsP/InP材料系的波长范围是 $1.1 \sim 1.6\mu\text{m}$ ）。当 $x=0.2$ 时， $E_g^h=1.213\text{eV}$ ，相应的波长是 $1.023\mu\text{m}$ ， $E_g^l=1.308\text{eV}$ 。

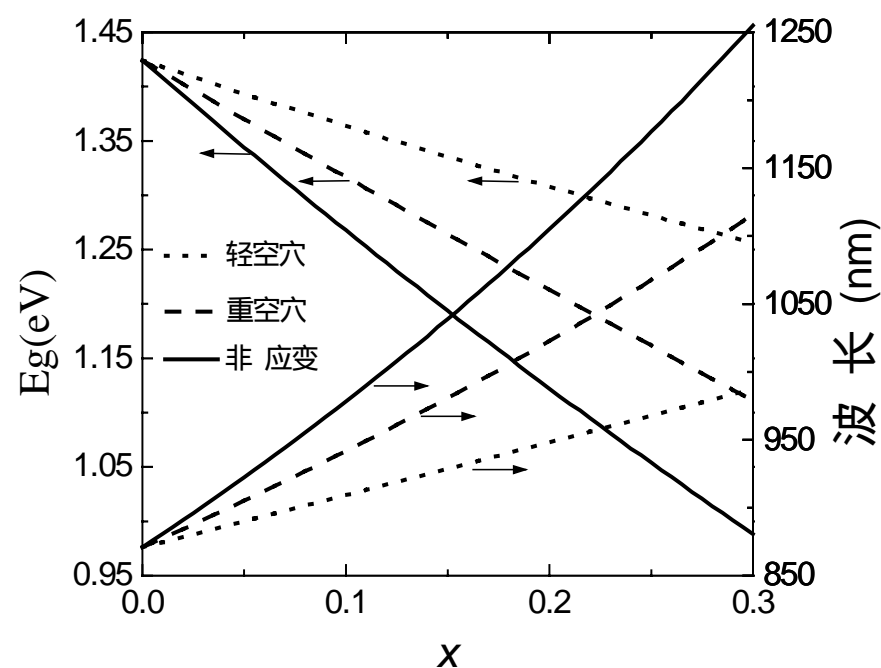


图7.4  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的带隙与 $x$ 的关系

## 7.1 应变体材料

### 6. 应变体材料的价带等能面

对于应变半导体材料价带结构的严格分析应基于Luttinger-Kohn哈密顿算符，考虑应变量对算符的修正后，通过求解 $4 \times 4$ 矩阵的本征值对轻、重空穴的能带结构进行耦合求解。对于沿(001)方向生长的应变外延层，可将 $4 \times 4$ 的哈密顿量简化转换成两个 $2 \times 2$ 的块对角阵，最后得到在 $k_x$ - $k_z$ 平面内的能量分布为

$$-E = \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m} (k_x^2 + k_z^2) \pm \left[ \left( \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m} (k_x^2 - 2k_z^2) + \zeta \right)^2 + 3 \left( \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m} k_x^2 \right)^2 + 12 \left( \frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m} k_x k_z \right)^2 \right]^{1/2} \quad (7.9)$$

其中 $k_x$ 指向平面内的(100)方向， $k_z$ 指向材料的生长方向； $\gamma_1$ 、 $\gamma_2$ 和 $\gamma_3$ 是Luttinger数， $m$ 是自由电子的质量。

## 7.1 应变体材料

图7.5给出了由式(7.8)得到的非应变 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ 及在GaAs上生长的应变 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ 的价带等能量曲线轮廓图, 计算中 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ 材料的Luttinger参数的选取由表7-1中InAs和GaAs的参数线性插值得到, 对于非应变 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ ,  $\zeta=0$ 。图中的能量从各价带顶算起, 从0.01eV到0.05eV, 间隔为0.01eV。从图中可以看出, 对于非应变材料, 空穴沿 $x$ 和 $z$ 方向具有相同的有效质量, 但与轻空穴相比, 重空穴的各向异性更强。对于应变材料, 等能量曲线沿 $x$ 和 $z$ 方向的对称性受到破坏, 以重空穴为例, 当能量变化相同值时, 波矢沿 $z$ 方向的变化量要比 $x$ 方向的大, 也即与 $x$ 方向相比, 重空穴沿 $z$ 方向具有更大的有效质量。与重空穴相反, 应变的轻空穴却是沿 $x$ 方向比 $z$ 方向具有更大的有效质量。由于生长在GaAs上的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 材料中的应力属压应变, 重空穴带位于轻空穴带之上, 当用该 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 材料作量子阱半导体激光器的有源区时, 跃迁主要发生在导带与重空穴带之间, 而重空穴沿垂直于生长方向的平面内( $x$ 方向)有较小的有效质量, 量子阱中载流子的填充主要与平面内的有效质量有关, 因此可在较低的载流子浓度下实现粒子数反转, 使得激光器的阈值电流密度降低。

# 7.1 应变体材料

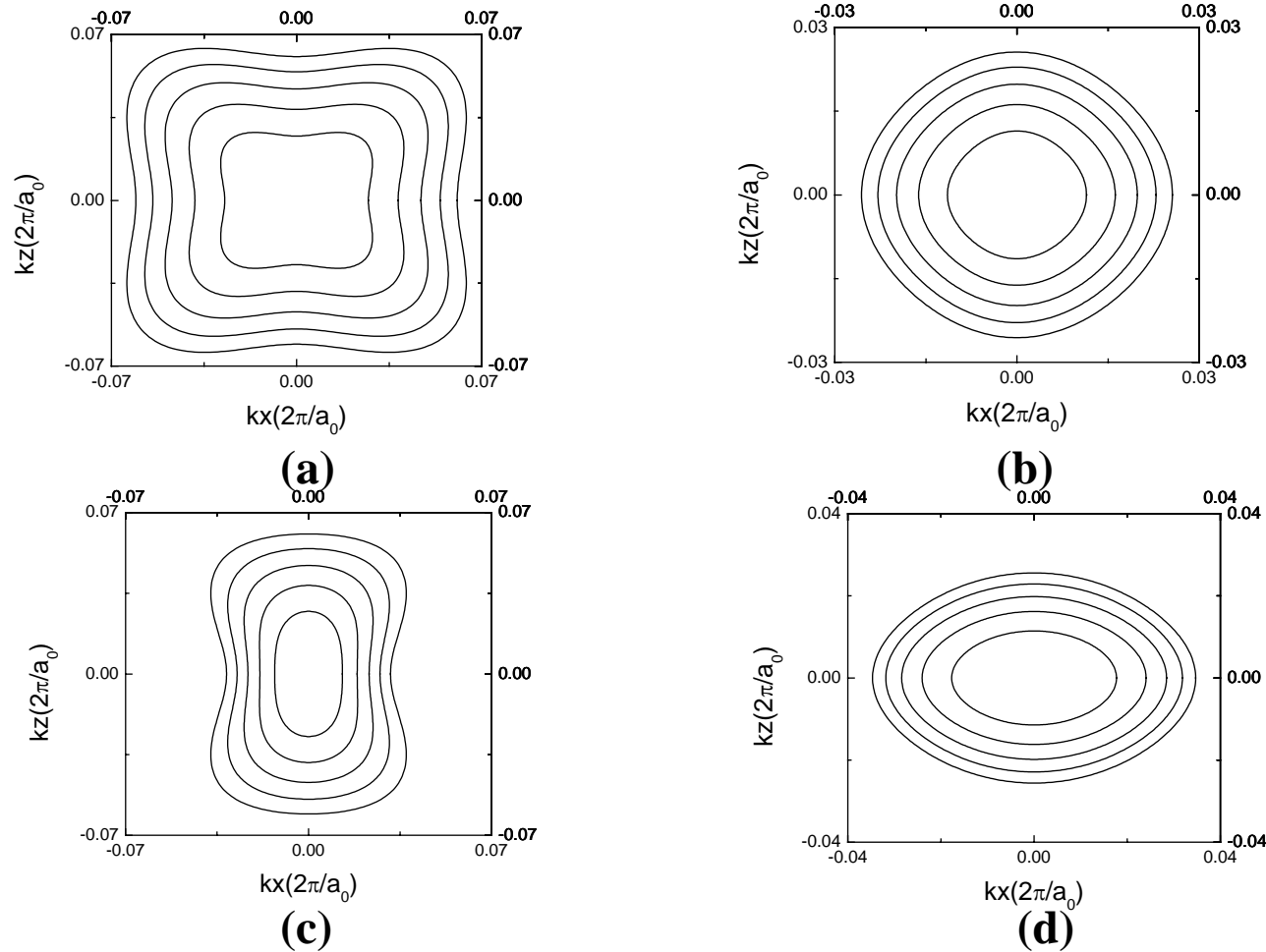


图7.5  $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ 的价带等能面轮廓图。能量自价带顶算起, 从0.01eV变化到0.05eV, 间隔为0.01eV。(a)非应变重空穴, (b)非应变轻空穴, (c)应变重空穴, (d)应变轻空穴

# 7.1 应变体材料

## 7. 应变体材料的价带有效质量

为了用显式表示价带空穴的有效质量，引入下面的近似表达式

$$-E = \frac{\hbar^2}{2m_x m_0} k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m_z m_0} k_z^2 \pm \zeta \quad (7.10)$$

其中  $\zeta$  前的“+”号对应于重空穴，“-”号对应于轻空穴， $m_x$ 和 $m_z$ 是沿 $x$ 和 $z$ 方向由(7.9)式在一定波矢范围内的拟合值， $m_z$ 对应于轻、重空穴可分别取 $1/(\gamma_1+2\gamma_2)$ 和 $1/(\gamma_1-2\gamma_2)$ ，而对于 $m_x$ 则需采用最小二乘法进行拟合。拟合过程中波矢范围的选取应包含参与光跃迁的所有 $k$ 值。引入(7.10)式的目的在于在进行应变量子阱中空穴子能级的计算时可以只考虑 $m_z$ ，而在进行阱内载流子浓度的计算时可以只考虑 $m_x$ ，从而使得在增益计算时对价带的处理大为简化。图7.6是对GaAs上生长的 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ 应变层的拟合结果，图中实线是由(7.9)式计算得到的结果，虚线是由(7.10)式拟合得到的结果，可见，拟合值与精确值符合的很好。得到的结果为：对于重空穴， $m_x^h = 0.087$ ， $m_z^h = 0.347$ ；对轻空穴， $m_x^l = 0.132$ ， $m_z^l = 0.062$ 。

# 7.1 应变体材料

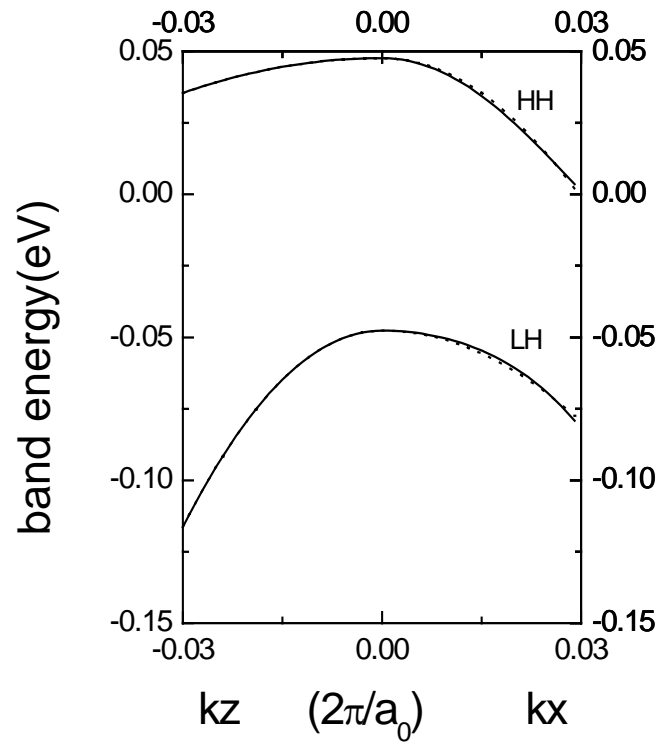


图7.6 应变 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ 的价带E-k关系

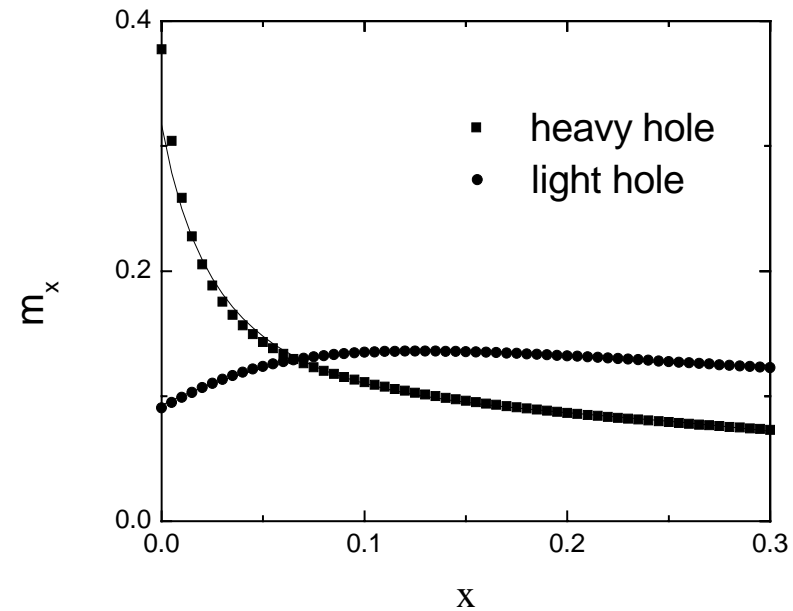


图7.7 应变 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 平面内空穴有效质量与 $x$ 的关系

## 7.1 应变体材料

图7.7中的离散点是应变 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的 $\text{InAs}$ 组份 $x$ 取不同值时，拟合得到的平面内空穴有效质量的变化情况。随 $x$ 的增大，平面内重空穴的有效质量 $m_x^h$ 减小，轻空穴的有效质量 $m_x^l$ 先增大后减小，特别是在 $x$ 从0到0.1的范围内 $m_x$ 的变化尤为明显。当 $x$ 等于0.065时， $m_x^l$ 和 $m_x^h$ 的值相等。图中的实线是我们由最小二乘法，利用多项式拟合得到的结果，相应于轻空穴和重空穴的拟合公式分别为

$$m_x^l = 0.0927 + 0.7909x - 4.3520x^2 + 6.9098x^3 \quad (7.11a)$$

$$m_x^h = 1/(3.1582 + 87.8859x - 344.1332x^2 + 569.0532x^3) \quad (7.11b)$$

式(7.11)可用于平面内空穴有效质量的快速估算。



## 7.2 应变量子阱的子能级

### 1. 带边能带图

图7.8给出了在实空间的应变InGaAs/GaAs量子阱的带边能带图，由于应变InGaAs中切向应力的作用造成轻空穴带和重空穴带分离，因此InGaAs的重空穴带和轻空穴带与GaAs价带形成的带阶是不同的，这也是在计算应变量子阱中价带子能级时必须考虑的。由于阱中的InGaAs是压应变材料，重空穴带位于轻空穴带之上，导带底与重空穴价带顶间的带隙 $E_g^h$ 可由式(7.4)得到。如果知道了导带带阶 $\Delta E_c$ 与价带带阶 $\Delta E_v^h$ 之比 $\Delta E_c / \Delta E_v^h$ ，则可求得各带阶差，

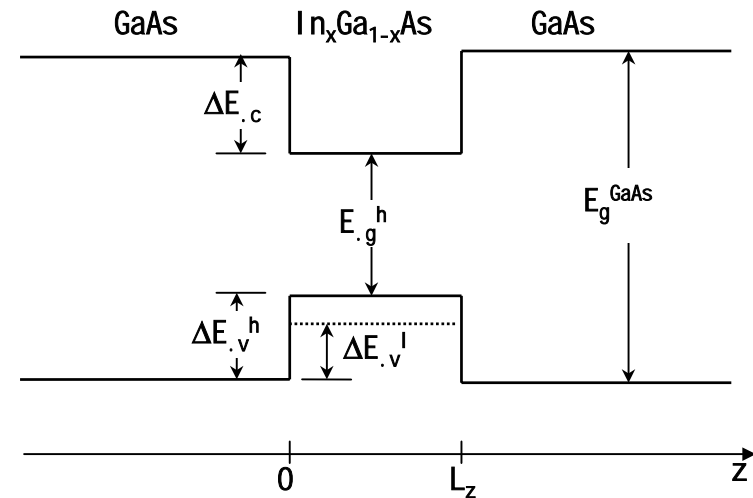


图7.8 InGaAs/GaAs应变量子阱能带图

$$\Delta E_c = (E_g^{GaAs} - E_g^h) \frac{1}{1 + \Delta E_v^h / \Delta E_c} \quad (7.12a)$$

$$\Delta E_v^h = (E_g^{GaAs} - E_g^h) \frac{1}{1 + \Delta E_c / \Delta E_v^h} \quad (7.12b)$$

$$\Delta E_v^l = \Delta E_v^h - (E_g^l - E_g^h) \quad (7.12c)$$

## 7.2 应变量子阱的子能级

在计算过程中，我们选取 $E_g^{\text{GaAs}}=1.424\text{eV}$ ， $\Delta E_c/\Delta E_v^h=0.6/0.4$ ，则由图7.4及式(7.12)可以求得对于 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ 的量子阱： $\Delta E_c=0.127\text{eV}$ ， $\Delta E_v^h=0.085\text{eV}$ ， $\Delta E_v^l=-0.011\text{eV}$ 。 $\Delta E_v^l$ 为负值意味着阱中轻空穴的价带顶比势垒区的要高，也就是说， $\text{InGaAs}$ 对于轻空穴不是阱，而是垒，因此在计算 $\text{InGaAs}$ 中空穴的量子能级时，可以只考虑重空穴带，而不必考虑轻空穴带。

### 2. 单阱子能级的求解

(1)方程. 量子阱中z方向子能级的计算应分别求解阱区和垒区的薛定谔方程，然后根据波函数以及粒子流密度在界面处的连续条件得到z方向能量应满足的本征方程为

$$\sqrt{\frac{m_b^*}{m_w^*} \frac{(\Delta E - E_i)}{E_i}} = \begin{cases} \text{tg} \sqrt{\frac{m_w^* E_i L_z^2}{2\hbar^2}} & \text{(偶对称)} \\ -\text{ctg} \sqrt{\frac{m_w^* E_i L_z^2}{2\hbar^2}} & \text{(奇对称)} \end{cases} \quad (7.13)$$

## 7.2 应变量子阱的子能级

其中， $m_b^*$ 和 $m_w^*$ 分别是势垒和势阱中载流子沿z方向的有效质量， $\Delta E$ 是势垒高度， $E_i$ 是能量本征值， $L_z$ 是量子阱宽度， $\hbar=h/2\pi$ ， $h$ 是普朗克常数。相应于导带、重空穴价带和轻空穴价带， $m_b^*$ 、 $m_w^*$ 和 $\Delta E$ 的取值分别如表7-2所示，表中 $\gamma_1$ 和 $\gamma_2$ 由表7-1中的值确定， $\Delta E_c$ 、 $\Delta E_v^h$ 、 $\Delta E_v^l$ 的值由式(7.12)确定。

表 7-2：计算量子阱子能级参数的选取

	导带	重空穴价带	轻空穴价带
$m_b^*(m_0)$	0.067	$1/(\gamma_1-2\gamma_2)_{\text{GaAs}}$	$1/(\gamma_1+2\gamma_2)_{\text{GaAs}}$
$m_w^*(m_0)$	$0.067-0.04x$	$1/(\gamma_1-2\gamma_2)_{\text{InGaAs}}$	$1/(\gamma_1+2\gamma_2)_{\text{InGaA}}$
$\Delta E$	$\Delta E_c$	$\Delta E_v^h$	$\Delta E_v^h$

(2) 跃迁波长与阱宽及组份的关系. 在量子阱半导体激光器中，注入到阱中的电子主要分布在 $E_n(1)$ 能级上，空穴主要分布在 $E_p^h(1)$ 能级上，因此光跃迁主要在这两个能级间进行，我们定义相应于这两个能级间的跃迁能量为 $E^{11}$ ，对应的波长为 $\lambda^{11}$ 。图7.9给出了对于不同的阱中InAs组份 $x$ ， $E^{11}$ 和 $\lambda^{11}$ 随阱宽 $L_z$ 的变化关系。

## 7.2 应变量子阱的子能级

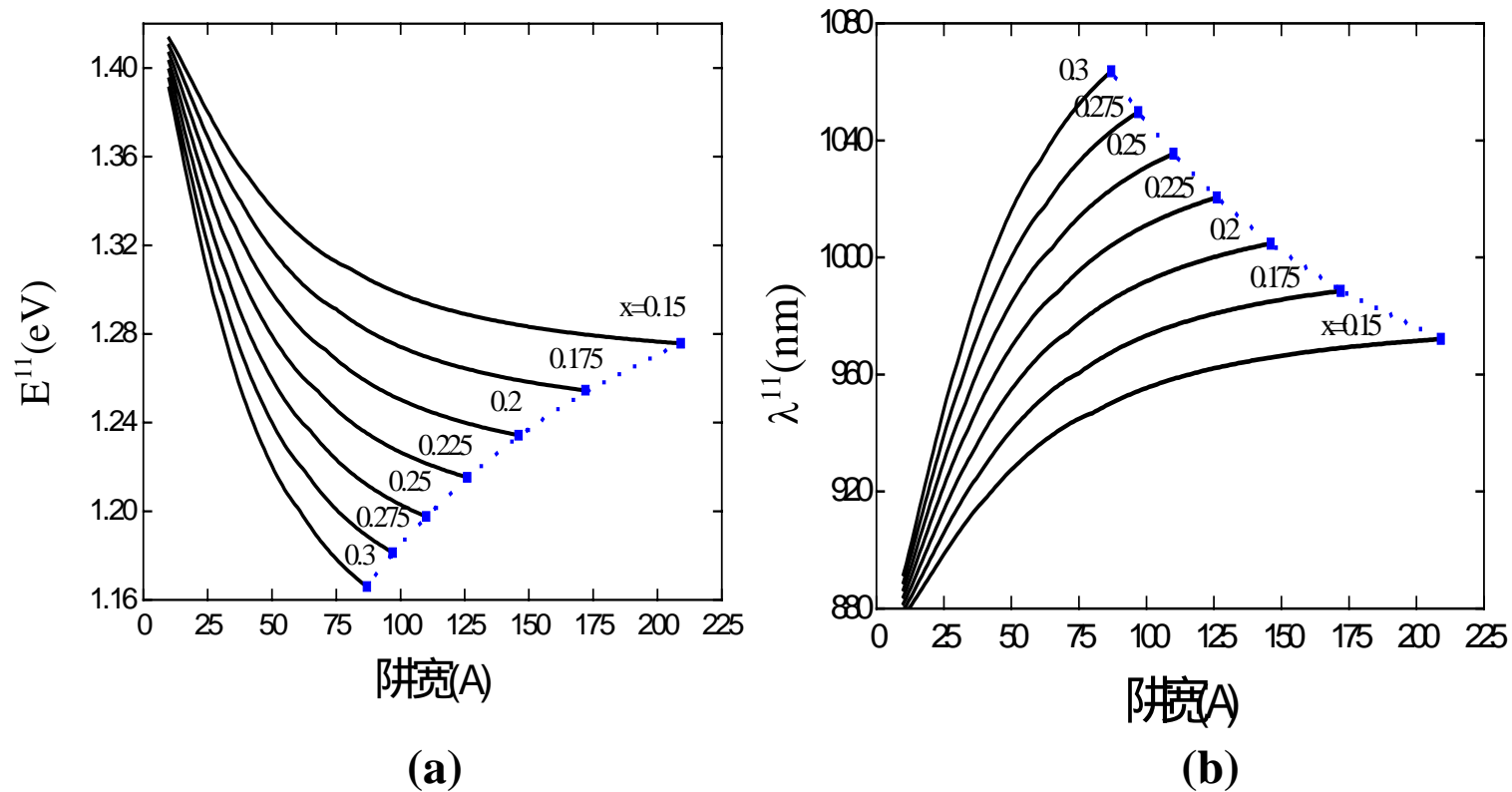


图7.9  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 量子阱中第一个子能级对间的跃迁能量(a)及波长(b)与阱宽的关系

## 7.2 应变量子阱的子能级

### 3. 多阱子能级的求解

对于实际的激光器，有源区可能是多阱结构，且阱的形状可能不是方形的，因此有必要寻找一合适的方法来求解多量子阱中的子能级。

(1) 基本方程. 设沿 $x$ 方向势能分布函数为 $U(x)$ ，则电子沿 $x$ 方向的Schordinger方程为，

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m_0m^*}{\hbar^2}(E_i - U)\psi = 0 \quad (7.14)$$

其中 $\psi$  是电子的波函数， $\hbar = h/2\pi$ ， $h$ 是Plank 常数， $m_0$ 是电子的静止质量， $m^*$ 是电子以 $m_0$ 为单位的有效质量， $E_i$ 是电子的本征能级。

在材料a与材料b的界面 $x_0$ 处，波函数及其偏导数应满足以下连续条件，

$$\psi_a(x_0) = \psi_b(x_0) \quad (7.15a)$$

$$\frac{1}{m_a^*} \frac{d\psi_a(x_0)}{dx} = \frac{1}{m_b^*} \frac{d\psi_b(x_0)}{dx} \quad (7.15b)$$

边界条件，

$$\psi(x = \pm\infty) = 0 \quad (7.16)$$

## 7.2 应变量子阱的子能级

(2) 方程的求解. 将待求解的区域分为m层，在每一层内的势能和有效质量近似为常数，则在第j层内的Schordinger方程可表示为，

$$\frac{d^2\psi_j}{dx^2} + \frac{2m_0m_j^*}{\hbar^2}(E_i - U_j)\psi_j = 0 \quad (7.17)$$

其中 $m_j^*$ ， $U_j$ 和 $\psi_j$ 分别表示在第j层内的电子有效质量，势能和波函数。上式可进一步写为，

$$\frac{d^2\psi_j}{dx^2} + k_0^2[m_j^*(E_i - U_j)]\psi_j = 0 \quad (7.18)$$

其中， $k_0 = \sqrt{2m_0}/\hbar$ 。将式(7.18)与如下一维光波导的波动方程进行比较，

$$\frac{d^2E_x}{dy^2} + (n^2k_0^2 - \beta^2)E_x = 0 \quad (7.19)$$

可以发现，式(7.18)与式(7.19)有完全相同的形式，因此方程(7.14)可以用传输矩阵法进行求解。

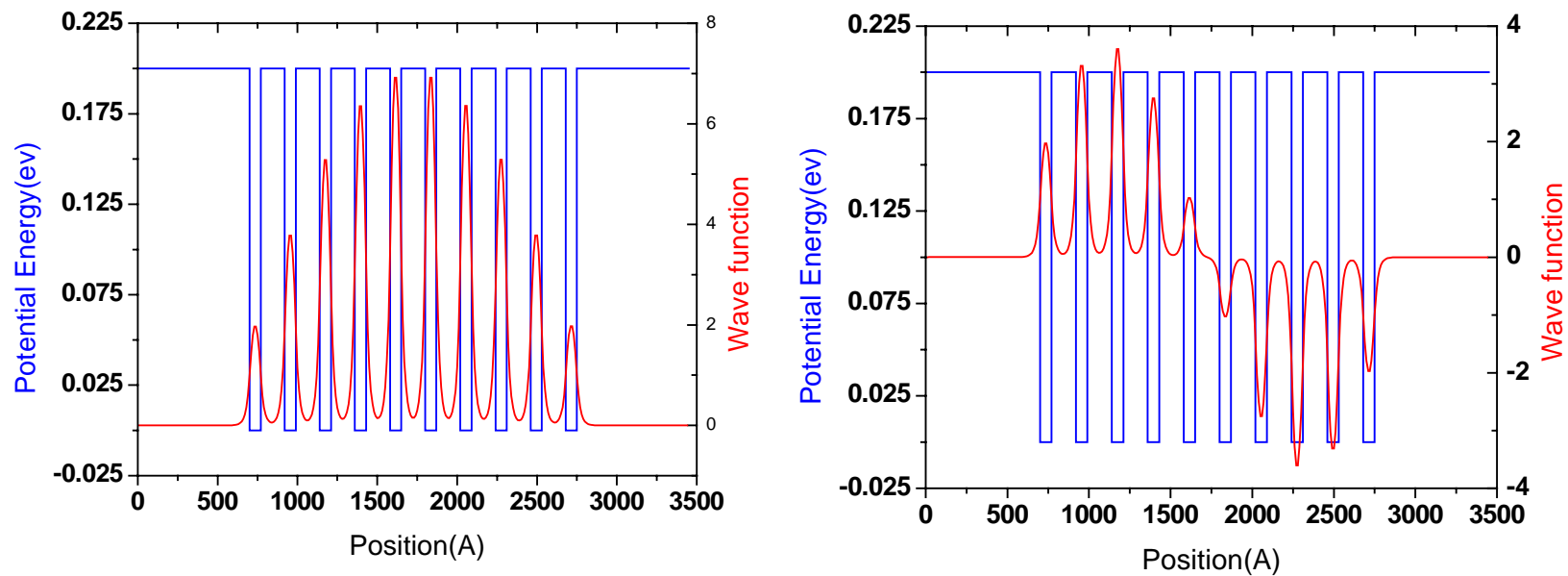
## 7.2 应变量子阱的子能级

(3) 数值结果. 以一十周期超晶格结构为例，其中阱宽为7nm，垒宽为15nm，阱深为0.2eV，假设垒和阱的有效质量相同，都为 $0.067m_0$ 。模拟得到超晶格的子能级共有20个，

i	Ei(eV)	i	Ei(eV)
1	5.053068022522023E-002	11	1.723896781504140E-001
2	5.053359135802982E-002	12	1.726056449470734E-001
3	5.053818120177521E-002	13	1.729541957279754E-001
4	5.054407963926931E-002	14	1.734175648681379E-001
5	5.055081010801256E-002	15	1.739696283441494E-001
6	5.055782768613054E-002	16	1.745749955310451E-001
7	5.056456499081129E-002	17	1.751886009991826E-001
8	5.057047417049286E-002	18	1.757567806861154E-001
9	5.057507573298826E-002	19	1.762212484590893E-001
10	5.057799565486033E-002	20	1.765270765837840E-001

显然，前10个子能级形成一子带，子带宽度为 $4.73154 \times 10^{-5} \text{eV}$ ，后10个子能级形成第二个子带 $4.1374 \times 10^{-3} \text{eV}$

## 7.2 应变量子阱的子能级



(a)

(b)

图7.10 超晶格第一 (a) 和第二(b)个子能级的波函数分布



## 7.3 应变量子阱的准费米能级

1 量子阱中的态密度. 在量子阱中, 电子沿垂直于阱方向的运动受到了限制, 其能量只能取一些分立的本征能级 $E_z^i$ , 但是电子在阱的平面内仍可自由运动。对于抛物带近似, 处于本征能级 $E_z^i$ 上的电子的总能量为,

$$E = E_z^i + \frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2m_{xy}} \quad (7.20)$$

其中 $m_{xy}$ 和 $k_{xy}$ 分别是阱中沿阱平面方向载流子的有效质量和波矢。由式(7.20)可见, 在 $k$ 空间量子阱的等能面是一个圆, 如图7.11所示。从 $k_{xy}$ 到 $k_{xy}+dk_{xy}$ 范围内的态在 $k$ 空间中是一个圆环, 其在 $k$ 空间占据的面积为,

$$dS = 2\pi \left[ \frac{2m_{xy}}{\hbar^2} (E - E_z^i) \right]^{1/2} dk_{xy}$$

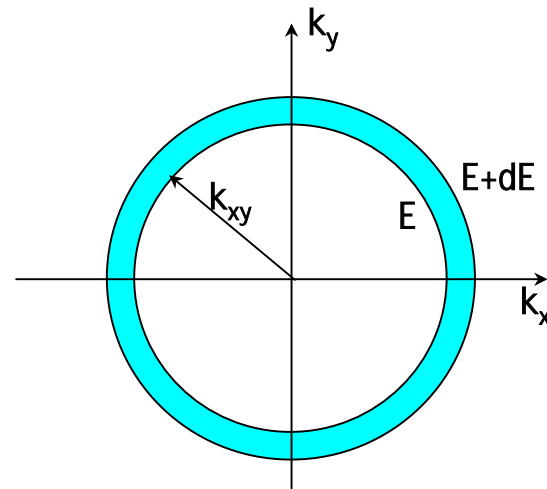


图7.11 量子阱中的等能面

## 7.3 应变量子阱的准费米能级

在二维k空间中，一个态占据的面积为 $(2\pi)^2/(L_x L_y)$ ，其中 $L_x$ 和 $L_y$ 分别是材料沿x和y方向的尺度。所以在 $k_{xy}$ 到 $k_{xy}+dk_{xy}$ 范围内的所有状态数为

$$dN = \frac{dS}{(2\pi)^2/(L_x L_y)} = 2\pi \left[ \frac{2m_{xy}}{\hbar^2} (E - E_z^i) \right]^{1/2} dk_{xy} \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2}$$

因此二维空间的能量态密度为

$$\rho(E) = \frac{dN}{dE} \frac{1}{V} = 2\pi \left[ \frac{2m_{xy}}{\hbar^2} (E - E_z^i) \right]^{1/2} \frac{dk_{xy}}{dE} \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} \frac{1}{L_x L_y L_z} = \frac{m_{xy}}{2\pi L_z \hbar^2} \quad (7.21)$$

即在量子阱中的能量态密度是一常数，且与阱宽成反比，与载流子在量子阱平面内的有效质量成正比。当考虑自旋后，式(7.21)应乘以2。

## 7.3 应变量子阱的准费米能级

2. 电子准费米能级. 在非平衡情况下, 注入到量子阱中的电子浓度可由费米统计分布得到,

$$n = \sum_{i=1}^{N_c} \int_{E_n(i)}^{\infty} \rho(E) f(E) dE \quad (7.20)$$

其中,  $\rho = m_{xy}^c / (\pi \hbar^2 L_z)$  (7.21)

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f^n}{kT}\right)} \quad (7.22)$$

其中  $N_c$  是阱中电子的子能级总数,  $E_n(i)$  是各子能级的能量,  $\rho$  是各子能级的态密度,  $f(E)$  是费米统计函数,  $m_{xy}^c$  是阱中电子沿平行于阱方向的有效质量,  $L_z$  是阱宽,  $k$  是玻尔兹曼

常数,  $T$  是温度,  $E_f^n$  是电子准费米能级。

由于各量子能级的态密度为常数, 当不考虑阱以上部分的载流子时, 式 (7.20) 可写为

$$n = \frac{m_{xy}^c kT}{\pi \hbar^2 L_z} \sum_{i=1}^N \ln \left\{ 1 + \exp[(E_f^n - E_n(i)) / kT] \right\} \quad (7.23)$$

只要知道了注入阱中的载流子浓度  $n$ , 通过上式用数值方法可以很容易地求得电子的准费米能级  $E_f^n$ 。

## 7.3 应变量子阱的准费米能级

3. 空穴准费米能级. 对于非掺杂量子阱, 由电中性原理, 注入到阱中的空穴浓度应和电子浓度相等, 但空穴同时分布在重空穴子能级和轻空穴子能级上。类似于式 (7.23), 阱中的空穴浓度为

$$p = \frac{m_{xy}^h kT}{\pi \hbar^2 L_z} \sum_{i=1}^{N_h} \ln \{1 + \exp[(E_f^p - E_h(i)) / kT]\} + \frac{m_{xy}^l kT}{\pi \hbar^2 L_z} \sum_{i=1}^{N_l} \ln \{1 + \exp[(E_f^p - E_l(i)) / kT]\} \quad (7.24)$$

其中 $m_{xy}^h$ 和 $m_{xy}^l$ 分别是重空穴和轻空穴的有效质量,  $E_h(i)$ 和 $E_l(i)$ 是重空穴和轻空穴的各子能级能量,  $N_h$ 和 $N_l$ 分别是阱中重空穴和轻空穴的能级总数,  $E_f^p$ 是空穴的准费米势。

### 4. 模拟结果.

(1)  $E_f$ 与载流子浓度的关系. 图7.12示出了对于阱宽为8nm的 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ 量子阱, 准费米能级随注入载流子浓度的变化情况, 其中电子准费米能级的零点选为导带底, 空穴准费米能级的零点选为重空穴的价带顶。随注入载流子浓度的增加, 电子和空穴准费米能级分别向导带底和价带顶移动, 由于导带电子的有效质量较小, 阱中导带电子首先发生简并。

## 7.3 应变量子阱的准费米能级

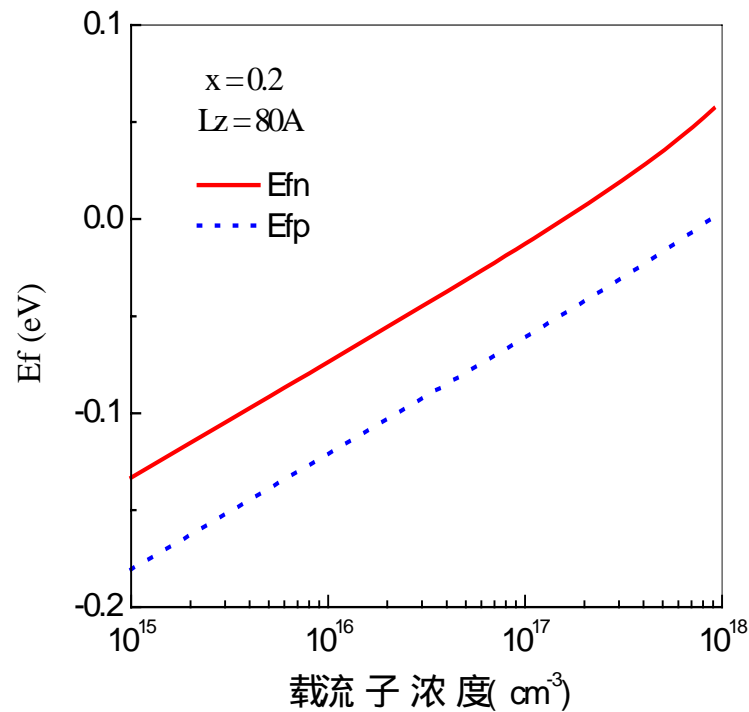


图7.12  $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ 量子阱准费米能级随注入载流子浓度的变化关系

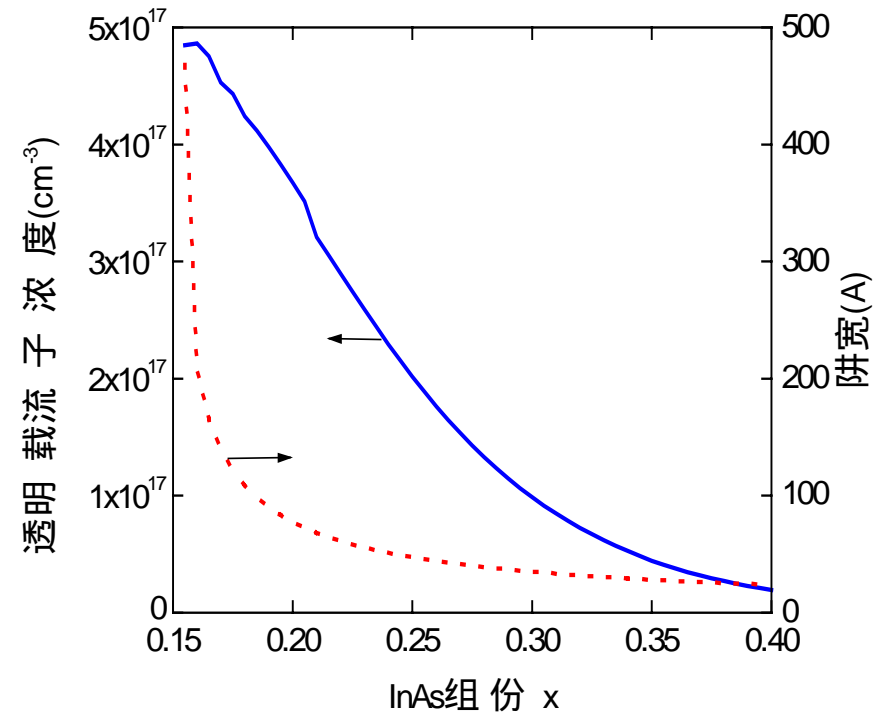


图7.13 980nm量子阱透明载流子浓度与阱中InAs组份的关系

## 7.3 应变量子阱的准费米能级

(2)透明载流子浓度与 $x$ 的关系. 如果电子准费米能级与空穴准费米能级的差正好等于 $E_n(1)-E_h(1)$ , 能量等于 $E_n(1)-E_h(1)$ 的光子通过量子阱时, 受激发射率与受激吸收率相等, 即光子可以无衰减地通过量子阱材料, 我们把这时的载流子浓度称为透明载流子浓度。如图7.13所示, 对于一定范围内的不同InAs组份, 通过调整阱的宽度可以使发射波长达到980nm。图7.13给出了 $E_n(1)$ 与 $E_h(1)$ 间发射波长固定为980nm时, 透明载流子浓度与阱中InAs组份 $x$ 的关系。随 $x$ 的增加, 导带电子的有效质量减小(见表7-2), 同时价带重空穴沿阱平面方向的有效质量由于应力作用也减小(见图7.7), 导致透明载流子浓度随 $x$ 的增加成指数型降低。

## 7.4 应变量子阱的光增益

### 7.4.1 增益的定义

如图7.14所示，当能量为  $\hbar\omega > E_c - E_v$  的光子进入半导体材料时，存在两种过程：a. 价带中的电子吸收光子而在导带中产生一电子，即受激吸收；b. 导带中的电子在光子的作用下跃迁到价带同时发出一能量、相位与入射光子完全相同的光子，即受激辐射。设光沿  $x$  方向传播，通量为  $\Phi(\omega)$ ，如果入射光引起的电子向下跃迁的速率  $W_{c \rightarrow v}$  (单位时间单位体积向下跃迁的电子数) 大于电子向上跃迁的速率  $W_{v \rightarrow c}$  (单位时间单位体积向上跃迁的电子数)，入射光将被放大。

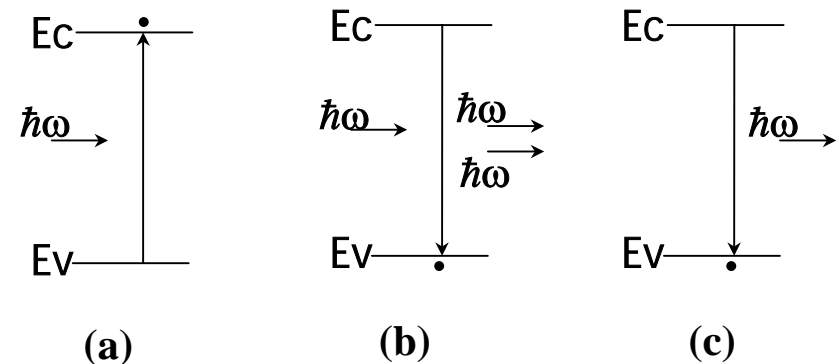


图7.14 半导体中的光子电子相互作用  
(a)受激吸收，(b)受激发射，  
(c)自发发射

## 7.4 应变量子阱的光增益

光通量沿x方向单位长度的增加量为

$$\frac{d\Phi}{dx} = W_{c \rightarrow v} - W_{v \rightarrow c} \quad (7.25)$$

材料的光增益g定义为单位长度所产生的附加光子通量 $d\Phi/dx$ 与总光子通量之比，

$$g = \frac{1}{\Phi} \frac{d\Phi}{dx} = \frac{W_{c \rightarrow v} - W_{v \rightarrow c}}{\Phi} \quad (7.26)$$

由上式可以得到光通量随传输位置的变化为

$$\Phi = \Phi_0 \exp(gx) \quad (7.27)$$

当 $g > 0$ 时，光被放大，当 $g < 0$ 时，光被衰减吸收。

### 7.4.2 增益的表示式

如果我们知道了光通量 $\Phi$ 和电子向上向下的跃迁速率即可求得光增益。

1. 光通量. 光通量可表示为波在单位体积内贮存的能量乘以波的群速度再除以每个光子的能量，

$$\Phi(\omega) = \frac{1}{\hbar\omega} \left( \frac{c}{n_g} \right) \left( \frac{1}{2} \bar{n}^2 \varepsilon_0 \omega^2 A_0^2 \right) \quad (7.28)$$

其中 $A_0$ 是平面波矢量势的振幅， $\bar{n}$ 是材料的折射率， $c$ 是真空光速， $\varepsilon_0$ 是真空介电常数。波的群速度由群折射率 $\bar{n}_g$ 来表征，定义为

$$\bar{n}_g = \bar{n}_{eff} + \omega(d\bar{n}_{eff}/d\omega) \quad (7.29)$$

其中 $\bar{n}_{eff}$ 是导波模式的等效折射率。对于非导波模式，等于 $\bar{n}$ 。



## 7.4 应变量子阱的光增益

2. 跃迁速率. 在频率为 $\hbar\omega=E_{cv}$ 的光作用下电子从导带向价带的跃迁速率 $W_{c\rightarrow v}$ 可由量子力学的微扰理论求得,

$$W_{c\rightarrow v}(E_{cv}) = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{eh}|^2 \rho_{red}(E_{cv}) f_c(E_{cv}) [1 - f_v(E_{cv})] \quad (7.30a)$$

其中 $E_{cv}$ 是跃迁导带态与价带态的能量差。 $W_{v\rightarrow c}$ 与 $W_{c\rightarrow v}$ 有相同的形式, 只不过将式(7.30)中的 $f_c$ 和 $f_v$ 调换即可。即,

$$W_{v\rightarrow c}(E_{cv}) = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{eh}|^2 \rho_{red}(E_{cv}) f_v(E_{cv}) [1 - f_c(E_{cv})] \quad (7.30b)$$

由上两式得,

$$W_{c\rightarrow v}(E_{cv}) - W_{v\rightarrow c}(E_{cv}) = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{eh}|^2 \rho_{red}(E_{cv}) [f_c(E_{cv}) - f_v(E_{cv})] \quad (7.31)$$

可见, 向下的净跃迁速度由Hamilton微扰矩阵元绝对值的平方、折合态密度、导带电子的占据几率 $f_c(E_{cv})$ 和价带电子的占据几率 $f_v(E_{cv})$ 决定, 下面分别给出其具体表示式。

## 7.4 应变量子阱的光增益

(1) **微扰矩阵元**. 微扰矩阵元决定了辐射场作用下电子在能带之间的跃迁几率，其求解的基本出发点是考虑到与半导体中电子相互作用的辐射场是一个随时间周期变化的函数，使用与时间有关的微扰论处理半导体中电子与光子相互作用的量子力学系统。通过把辐射场看成是微扰，利用费米“黄金准则”得到

$$|H'_{eh}|^2 = \left( \frac{qA_0}{2m_0} \right)^2 |M_T|^2 \quad (7.32)$$

其中 $m_0$ 是自由电子质量， $M_T$ 称为动量矩阵元，对于导带到重空穴带和导带到轻空穴带的跃迁分别取不同的值，其值可由密度矩阵理论求得。

对压应变材料，

$$\text{TE模: } |M_T|^2 = \begin{cases} M_0^2/2 & (\text{重空穴}) \\ M_0^2/6 & (\text{轻空穴}) \end{cases} \quad (7.33a)$$

$$\text{TM模: } |M_T|^2 = \begin{cases} 0 & (\text{重空穴}) \\ 2M_0^2/3 & (\text{轻空穴}) \end{cases} \quad (7.33b)$$

$$M_0^2 = \left( \frac{m_0}{m_c} - 1 \right) \frac{(E_g^0 + \Delta)}{2(E_g^0 + 2\Delta/3)} m_0 E_g^0 \quad (7.33c)$$

其中 $E_g^0$ 是非应变体材料的禁带宽度，由式(7.8)决定， $m_c$ 是导带电子的有效质量， $\Delta$ 是价带自旋轨道能量分裂值。式(7.33)中我们假设跃迁只发生在导带与价带量子子能级号相等的情况。

## 7.4 应变量子阱的光增益

(2) 折合态密度. 在跃迁过程中, 能量和动量守恒决定了跃迁的能量态密度, 称为折合态密度, 其值为

$$\rho_{red} = 1 / \left( \frac{1}{\rho_c} + \frac{1}{\rho_v} \right) \quad (7.34)$$

其中对于量子阱材料有

$$\rho_c = m_{xy}^c / (\pi \hbar^2 L_z) \quad (7.35a)$$

$$\rho_v = m_{xy}^h / (\pi \hbar^2 L_z) \quad (\text{重空穴}) \quad (7.35b)$$

$$\rho_v = m_{xy}^l / (\pi \hbar^2 L_z) \quad (\text{轻空穴}) \quad (7.35c)$$

将式(7.35)代入(7.34), 得

$$\rho_{red} = \frac{m_r}{\pi \hbar^2 L_z} \quad (7.36)$$

其中 $m_r$ 称为折合有效质量,

$$m_r = \begin{cases} \frac{m_{xy}^c m_{xy}^h}{m_{xy}^c + m_{xy}^h} & (\text{对C-H跃迁}) \\ \frac{m_{xy}^c m_{xy}^l}{m_{xy}^c + m_{xy}^l} & (\text{对C-L跃迁}) \end{cases} \quad (7.37)$$



## 7.4 应变量子阱的光增益

(3)载流子的占据几率. 载流子在阱中沿垂直于阱的方向运动受到限制, 但在平行于阱的方向却可以自由运动, 设导带和价带中的相应态沿平行于阱的方向的波矢分别为 $k_c$ 和 $k_v$ , 则这两态间的能量差为,

$$E_{cv} = (E_{ci} + \frac{\hbar^2 k_c^2}{2m_{xy}^c}) + (E_{vi} + \frac{\hbar^2 k_v^2}{2m_{xy}^v}) + E_g^s \quad (7.38)$$

其中 $E_g^s$ 是应变体材料的带隙, 对重空穴为 $E_g^h$ , 对轻空穴为 $E_g^l$ ,  $m_{xy}^v$ 对于轻、重空穴也取不同的有效质量。在跃迁过程中, 动量必须守恒, 即 $k_c=k_v$ , 所以

$$\hbar^2 k_c^2 = \hbar^2 k_v^2 = 2m_r (E_{cv} - E_g^s - E_{ci} - E_{vi})$$

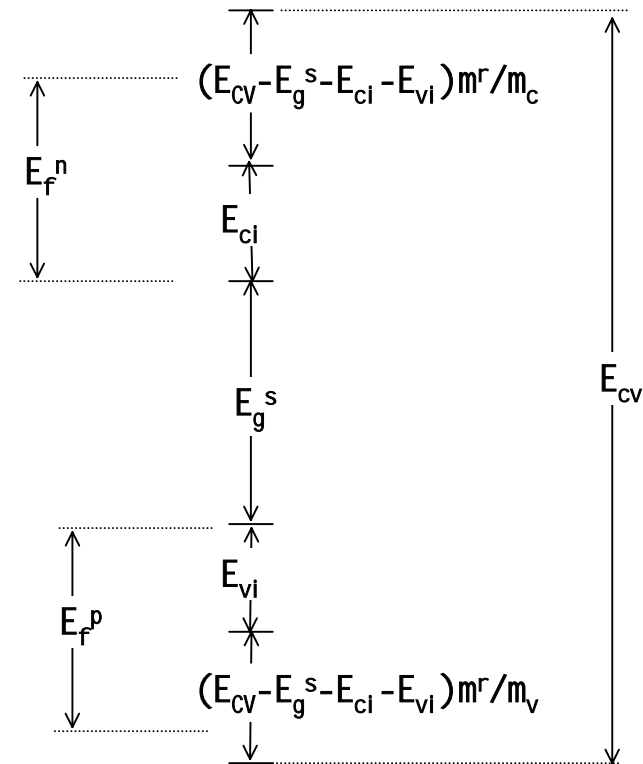


图7.15 各能级相对位置图

## 7.4 应变量子阱的光增益

因此 $E_{cv}$ 在导带和价带中沿平行于阱方向分配的能量分别为：

$$\frac{\hbar^2 k_c^2}{2m_{xy}^c} = \frac{m_r}{m_{xy}^c} (E_{cv} - E_g^s - E_{ci} - E_{vi}) \quad (7.39a)$$

$$\frac{\hbar^2 k_v^2}{2m_{xy}^v} = \frac{m_r}{m_{xy}^v} (E_{cv} - E_g^s - E_{ci} - E_{vi}) \quad (7.39b)$$

各能级的相对位置如图7.15所示，据此可以写出相应于能量 $E_{cv}=\hbar\omega$ ，电子在导带和价带的占据几率分别为：

$$f_c(E_{cv}) = \frac{1}{1 + \exp\left\{\left[\frac{m_r}{m_{xy}^c} (E_{cv} - E_g^s - E_{ci} - E_{vi}) + E_{ci} - E_f^n\right]/kT\right\}} \quad (7.40a)$$

$$f_v(E_{cv}) = \frac{1}{1 + \exp\left\{-\left[\frac{m_r}{m_{xy}^v} (E_{cv} - E_g^s - E_{ci} - E_{vi}) + E_{vi} - E_f^p\right]/kT\right\}} \quad (7.40b)$$

其中 $E_{ci}$ 、 $E_f^n$ 从导带底向上算起为正， $E_{vi}$ 、 $E_f^p$ 从价带顶向下算起为正。

## 7.4 应变量子阱的光增益

3. 光增益表示式. 将式(7.28)和(7.31)代入式(7.26)得到光增益的表示式为

$$g(\hbar\omega) = \left( \frac{1}{\hbar\omega} \right) \frac{\pi q^2 \hbar}{\varepsilon_0 c m_0^2} \frac{\bar{n}_g}{n} |M_T|^2 \rho_{red}(f_c - f_v) \quad (7.41)$$

式(7.41)给出了发生于导带与价带一对子能级间跃迁时的增益, 实际中的量子阱有可能有多个子能级, 因此对于频率为 $\omega$ 的入射光应考虑发生于多个子能级对间的跃迁。考虑多个子能级后, 增益重写为

$$g(\hbar\omega) = \sum_i g^{ch}(\hbar\omega) + \sum_j g^{cl}(\hbar\omega) \quad (7.42)$$

式中右边第一项表示导带与重空穴价带子能级间的跃迁,  $i$ 是导带子能级数和重空穴价带子能级数中的小者; 第二项表示导带与轻空穴价带子能级间的跃迁,  $j$ 是导带子能级数和轻空穴价带子能级数中的小者。

## 7.4 应变量子阱的光增益

### 7.4.3 考虑光谱展宽的光增益

实验测得的光增益谱一般要比式(7.42)的结果要宽，关于增益谱的展宽目前主要有带尾理论和载流子带内驰豫理论。载流子带内驰豫理论不但可以处理阈值以下的激射特性，还可以处理阈值以上的特性，因此我们采用此理论来研究增益谱的展宽。在式(7.42)的推导过程中，假设了如果电子不与光子作用，电子将永远呆在导带中相应的态上。但是载流子带内驰豫理论认为，电子与声子及其它电子的相互作用将不断地把电子散射到其它态上去。因此一个给定态的寿命不是无限的。平均说来，每经过约0.1皮秒，一个电子（或空穴）将被散射到一个新态上去。如果我们假设态随时间指数衰减，那么与时间有关的态的Fourier能谱将为洛仑兹型，因此每个态的能量不再是陡峭的，而是在能量期望值的每边有一个 $\Delta E \approx \hbar/0.1\text{ps} \approx 7\text{meV}$ 的能量扩展。这意谓着能量为 $\hbar\omega$ 的入射光子不仅与 $E_{\text{cv}}=\hbar\omega$ 的跃迁作用，并且也与 $E_{\text{cv}} \approx \hbar\omega \pm \Delta E$ 能量范围内的跃迁作用。

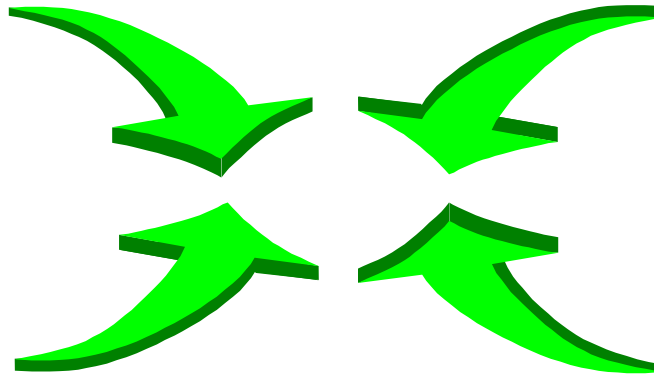
## 7.4 应变量子阱的光增益

考虑了态的能量展宽后，增益表示为

$$G(\hbar\omega) \equiv \int g(\hbar\omega) L(E_{cv}) dE_{cv} \quad (7.43)$$

$$L(E_{cv}) \equiv \frac{1}{\pi} \frac{\hbar / \tau_{in}}{(E_{cv} - \hbar\omega)^2 + (\hbar / \tau_{in})^2} \quad (7.44)$$

其中 $g(\hbar\omega)$ 由式(7.42)给出， $L(E_{cv})$ 是归一化的洛仑兹型函数， $\tau_{in}$ 是带内弛豫时间，或简称为态的寿命。





## 7.4 应变量子阱的光增益

### 7.4.4 数值计算

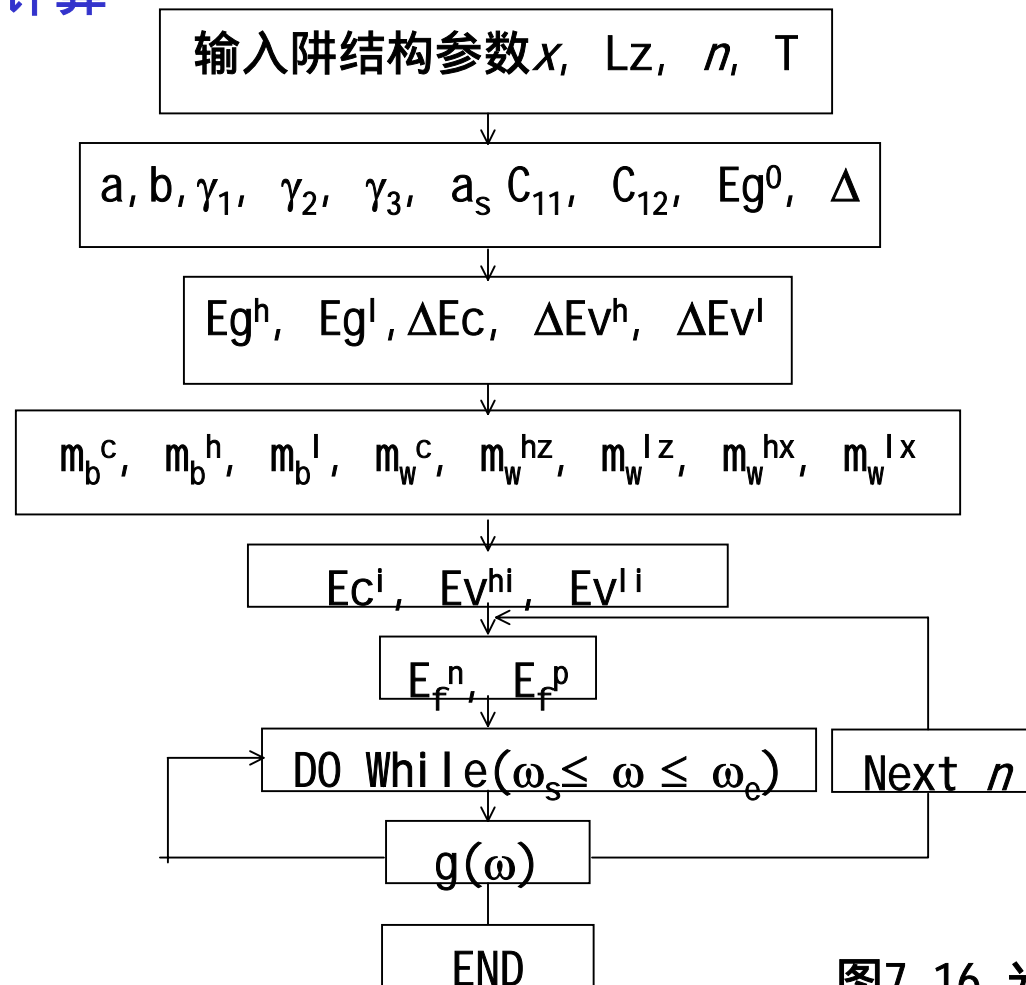


图7.16 光增益计算流程图

## 7.4 应变量子阱的光增益

对于不同载流子浓度，计算得到的 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ 的增益谱如图7.17所示，其中载流子浓度从 $1 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ 变化到 $5 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ ，间隔为 $1 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ ，虚线是未考虑因载流子带内驰豫引起谱线加宽时的增益，实线是考虑了载流子带内驰豫时的增益，载流子在带内的驰豫时间取为 $0.1\text{ps}$ 。从图中可以得到：峰值增益随载流子浓度的增加而增加；考虑载流子的带内驰豫效应后，增益谱的谱线加宽，同时增益的峰值降低。

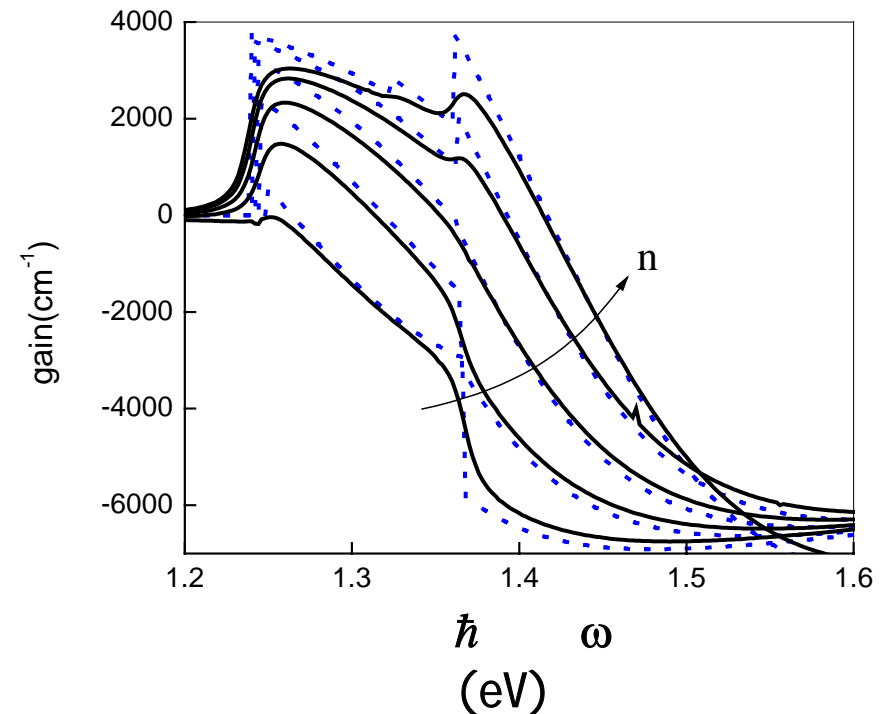


图7.17  $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ 量子阱在不同注入载流子浓度下的光增益