

InGaAs/InP 量子线的子带结构和光学增益*

何国敏 郑永梅 王仁智 刘宝林

(厦门大学物理系, 361005)

19990520 收稿, 19991101 收改稿

摘要: 采用有效质量理论 6 带模型, 计算了 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 量子线的光学性质, 具体计算了 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 量子线的能带结构、态密度、载流子浓度、光学跃迁矩阵元和光学增益谱, 并把量子线的光学增益谱和量子阱的光学增益谱作了比较。

关键词: 有效质量理论; 量子线; 光学增益

中图分类号: O 471.5 文献标识码: A 文章编号: 1000-3819(2001)01-0050-07

Valence Subband Structure and Optical Gain of InGaAs/InP Quantum Wire

HE Guomin ZHENG Yongmei WANG Renzhi LU Baolin

(Dept. of Phys. Xiamen University, 361005, CHN)

Abstract: In the framework of 6 band effective mass theory, the optical gain of $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ quantum wire are studied. The valence subband structure, density of states, carrier density, optical transition matrix elements, and optical gain are calculated. The results of optical gain for quantum wire are compared with those for quantum well.

Key words: effective-mass theory; quantum wire; optical gain

PACC: 6855

1 引 言

以 InP 为基的异质结构 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 是一对晶格匹配的半导体系统, 在半导体光电器件、高速器件(如金属-半导体-金属光电探测器, 高电子迁移率晶体管, 共振隧穿二极管等^[1,2])和光纤通讯中被广泛采用。目前, 随着生长工艺的不断发 展, 人们越来越关注低维量子系统, 如量子线和量子点结构, 因为低维量子结构具有特殊的输运性质, 高的电子迁移率, 和更

* 福建省自然科学基金资助课题(No. E9910005)

优的光学性质,如:更高的光学增益,和非线性光学性质等。

文中采用 Burt 和 Foreman 的有效质量理论^[3,4],计算了 In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP 量子阱和量子线的光学性质。具体计算了 In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP 量子线的能带结构、态密度、载流子浓度、光学跃迁矩阵元和光学增益谱,并把量子线的光学增益谱和量子阱的光学增益谱作了比较,计算中考虑了各种因素对计算结果的影响,如势阱区和势垒区中电子和空穴的有效质量不同对价带子带结构的影响^[5];由于采用 6×6 有效质量方程,计算中也考虑了自旋轨道分裂带(SO)与重空穴带(HH)、轻空穴带(LH)的耦合作用。目前对 In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP 系统的报道多数是对量子阱结构,而且只采用 4 带有效质量方程,没有考虑 SO 与 HH 和 LH 的耦合作用。文中的计算结果定量地比较了量子线结构和量子阱结构对器件光学性质的影响。有可能为 In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP 光电器件的设计及实验研制提供理论参考。

2 计算方法

2.1 能带结构

这里主要给出量子线光学增益的计算过程。计算采用理想的耦合量子线结构,其截面(沿 xy 方向)为长方形,在 xy 方向上,假设势阱宽度分别为 W_x 和 W_y ,势垒宽度分别为 B_x 和 B_y , $L_x = W_x + B_x$, $L_y = W_y + B_y$ 为量子线的周期。

根据 Burt 和 Foreman 的有效质量理论^[3,4],在一级近似下,电子的薛定谔方程为

$$\left\{ P \frac{1}{2m_e^*(x,y)} P + V_e(x,y) \right\} \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (1)$$

$$V_e(x,y) = \begin{cases} 0, & \text{in the wires} \\ V_{e0} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2)$$

$$m_e^*(x,y) = \begin{cases} m_1^* & \text{in the wires} \\ m_2^* & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3)$$

其中 V_{e0} 为电子的周期势, m_1^* 和 m_2^* 分别为 In_{0.53}Ga_{0.47}As 和 InP 的有效质量。

空穴的薛定谔方程为

$$[H_0 + V_h(x,y)] \Psi_h = E_v \Psi_h \quad (4)$$

$$V_h(x,y) = \begin{cases} 0, & \text{in the wires} \\ V_{h0} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (5)$$

其中 H_0 为 6×6 Foreman 有效质量 Hamiltonian^[4], V_{h0} 是空穴的周期势

电子和空穴的波函数可以用平面波展开^[5,6]

$$\Psi_e(z) = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} e^{ik_z z} \sum_{m_x, m_y} e_{m_x, m_y} e^{i(k_x + m_x \frac{2\pi}{L_x})x + i(k_y + m_y \frac{2\pi}{L_y})y} \quad (6)$$

和

$$\Psi_h(z) = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} e^{ik_z z} \begin{pmatrix} a_{m_x, m_y} \\ b_{m_x, m_y} \\ c_{m_x, m_y} \\ d_{m_x, m_y} \\ f_{m_x, m_y} \\ g_{m_x, m_y} \end{pmatrix} e^{i(k_x + m_x \frac{2\pi}{L_x})x + i(k_y + m_y \frac{2\pi}{L_y})y} \quad (7)$$

其中 $m_x, m_y = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3,$

2.2 态密度

求解式(1)和(4), 得到电子和空穴的能量本征值 $E(k_z)$ 后, 量子线的态密度为

$$DOS(E) = \frac{1}{W_x W_y} \frac{2}{(2\pi)} dk_z \delta[E - E(k_z)] \quad (8)$$

计算中 δ 函数由 Lorentzian 函数代替。

2.3 载流子浓度

电子浓度 n_n 和空穴浓度 n_p 可以通过积分态密度得到。例如, 空穴在准费米能级 E_{fv} 下的载流子浓度 n_p 为

$$n_p = \frac{1}{W_x W_y} \frac{dk_z}{(2\pi)} f_v(E_{vn_v}, E_{fv}) \quad (9)$$

其中 E_{vn_v} 为空穴能量, f_v 为 Fermi-Dirac 分布,

$$f_v = \frac{1}{1 + \exp(E_{vn_v} - E_{fv})/k_B T} \quad (10)$$

k_B 是 Boltzmann's 常数, T 是热力学温度。

2.4 光学跃迁矩阵元

电子和空穴之间的光学跃迁矩阵元为^[7]

$$M = \frac{2}{m_0} |\epsilon \cdot P_{nn}|^2 \quad (11)$$

其中 $|\epsilon \cdot P_{nn}|$ 为动量跃迁矩阵元。把波函数式(6)和(7)代入式(11), 可求得 xy 方向和 z 方向的光学跃迁矩阵元 M_{xy} 和 M_z 分别为

$$M_z = \frac{2p^2}{m_0} \cdot \frac{1}{3} [2 \left(\sum_{m_x, m_y} e_{m_x, m_y}^* c_{m_x, m_y} \right)^2 + 2 \left(\sum_{m_x, m_y} e_{m_x, m_y}^* b_{m_x, m_y} \right)^2 + \left(\sum_{m_x, m_y} e_{m_x, m_y}^* f_{m_x, m_y} \right)^2 + \left(\sum_{m_x, m_y} e_{m_x, m_y}^* g_{m_x, m_y} \right)^2] \quad (12)$$

$$M_{xy} = \frac{2p^2}{m_0} \cdot \frac{1}{2} [2 \left(\sum_{m_x, m_y} e_{m_x, m_y}^* a_{m_x, m_y} \right)^2 + \left(\sum_{m_x, m_y} e_{m_x, m_y}^* d_{m_x, m_y} \right)^2 + \frac{1}{3} \left(\sum_{m_x, m_y} e_{m_x, m_y}^* b_{m_x, m_y} \right)^2 +$$

$$\frac{1}{3} \left(e_{m_x m_y}^* C_{m_x m_y} \right)^2 + \frac{2}{3} \left(e_{m_x m_y}^* f_{m_x m_y} \right)^2 + \frac{2}{3} \left(e_{m_x m_y}^* g_{m_x m_y} \right)^2 \quad (13)$$

其中 $p = s |p_x| x = s |p_x| y = s |p_x| z$ 。 $\frac{2p^2}{m_0}$ 为材料的光学跃迁常数, 对 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, 由下式可以得到其值为 19.0 eV

$$\frac{2p^2}{m_0} = \left(\frac{m_0}{m_e} - 1 \right) \frac{(E_G + \Delta_0)}{(E_G + \frac{2}{3}\Delta_0)} E_G \quad (14)$$

其中 E_G, m_e 和 Δ_0 分别为 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ 的带隙、电子质量和自旋轨道分裂值。

2.5 光学增益谱

量子线的光学增益可写为^[8]

$$g(E) = \frac{\pi e^2 \hbar}{m_0 \epsilon_0 n c E} \frac{M^{\text{cv}} dk_z}{(2\pi) W_x W_y} (f_{c_v} + f_{v_c} - 1) \frac{\hbar/\tau}{\pi(E_{\text{ev}} - E)^2 + (\hbar/\tau)^2} \quad (15)$$

E_{ev} 为带间跃迁能量, n 为折射率, ϵ_0 是介电常数, c 是光速, τ 是带间弛豫时间(计算中取为 10^{-13} 秒)。计算中调整电子和空穴的准费米能级使电子浓度 n_n 和空穴浓度 n_p 相等。

表 1 计算所用的参数, 包括晶格常数 a_0 , 空穴和电子的有效质量

$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$, 和 m_e^* , 电子和空穴的周期势 V_{e0}, V_{h0} , 自旋轨道分裂值 Δ_0

Tab 1 The parameters used in the calculation for $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ and InP , including the lattice constants a_0 , effective masses $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$, and m_e^* , confining potentials V_{e0}, V_{h0} , and spin-orbit splitting energies Δ_0

Parameters	$\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$	InP
a_0/nm	0.5869	0.5869
m_e^*/m_0	0.041	0.079
γ_1	14.06	4.95
γ_2	5.4	1.65
γ_3	6.2	2.35
V_{e0}/eV	0	0.26
V_{h0}/eV	0	-0.34
Δ_0/eV	0.356	0.110

3 计算结果

计算所用的参数如表 1。图 1 给出 $W_x = W_y = 8 \text{ nm}, B_x = B_y = 15 \text{ nm}$ 的量子线的价带子带结构。从图中可见, 由于考虑重轻空穴之间的混合效应, 以及势阱区和势阱区有效质量不同, 价带能级在 $k_z = 0$ 处简并解除。

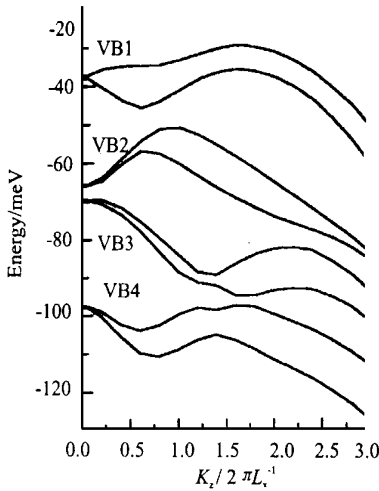


图 1 In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP 量子线的价带子带结构

Fig. 1 The valence subband structure of In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP quantum wire

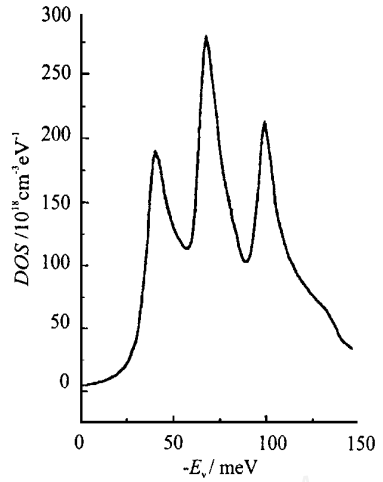


图 2 In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP 量子线的态密度

Fig. 2 The density of states for valence hole subbands of the In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP quantum wire

图 2 给出了 In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP 量子线的态密度。尖锐的峰值是一维量子系统的特点。带边尖锐的态密度可以提高量子系统的光学性质。图 3 给出了第一导带(CB)到最高的四个价带

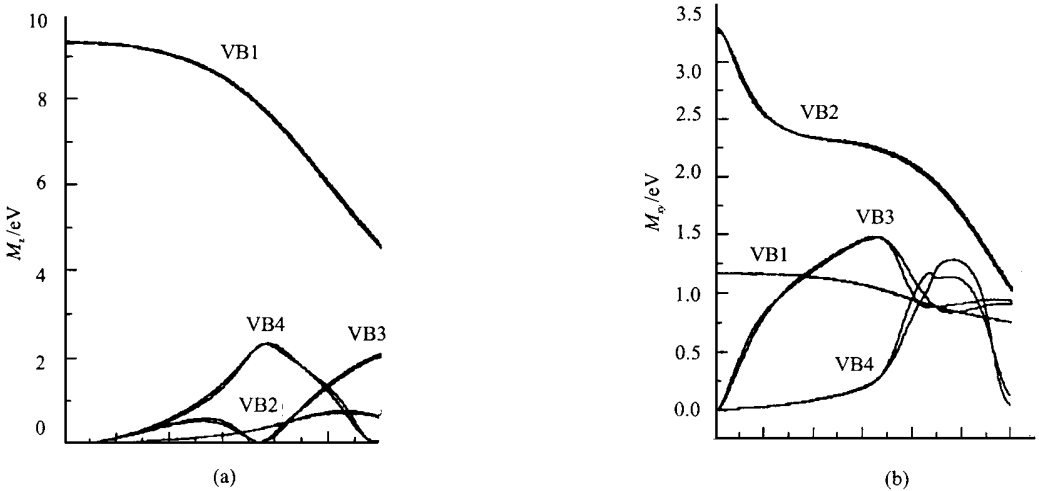


图 3 In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP 量子线价带到第一导带的光学跃迁矩阵元, (a)为M_z, (b)为M_{xy}

Fig. 3 The squared optical transition matrix elements from the first conduction band to the valence subbands as a function of k_z for the In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP quantum wire

(VB)的光学跃迁矩阵元, (a)和(b)分别为M_z和M_{xy}。从图中可见,M_z主要是第一价带(VB1)到第一导带(CB1)的跃迁,M_{xy}主要是第二价带(VB2)到CB1的跃迁。图4是不同电子浓度下In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP量子线的光学增益谱:(a)是沿z方向极化,(b)是沿xy方向极化。从图4可见,xy方向的光学增益具有多峰值结构,对应于不同价带到导带的跃迁;而z方向的光学增益

主要由VB1-CB1的跃进,而且z方向的光学增益具有最大的增益系数。图5是阱宽8 nm,垒宽15 nm的量子阱的光学增益谱:(a)是z方向极化(TM), (b)是xy方向极化(TE)。比较图4

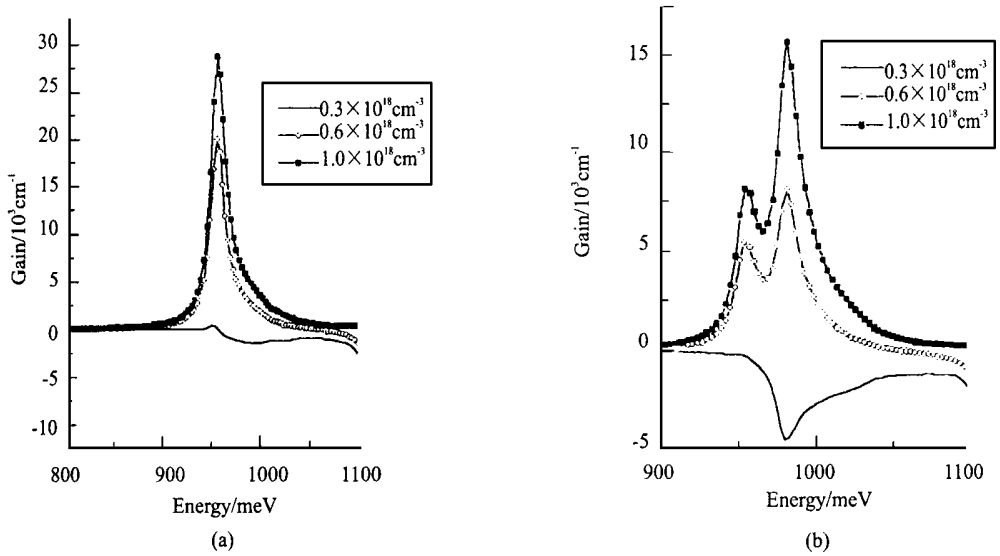


图4 不同载流子浓度下, In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP 量子线的光学增益

Fig 4 Optical gain spectra of In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP quantum wire at different carrier concentrations

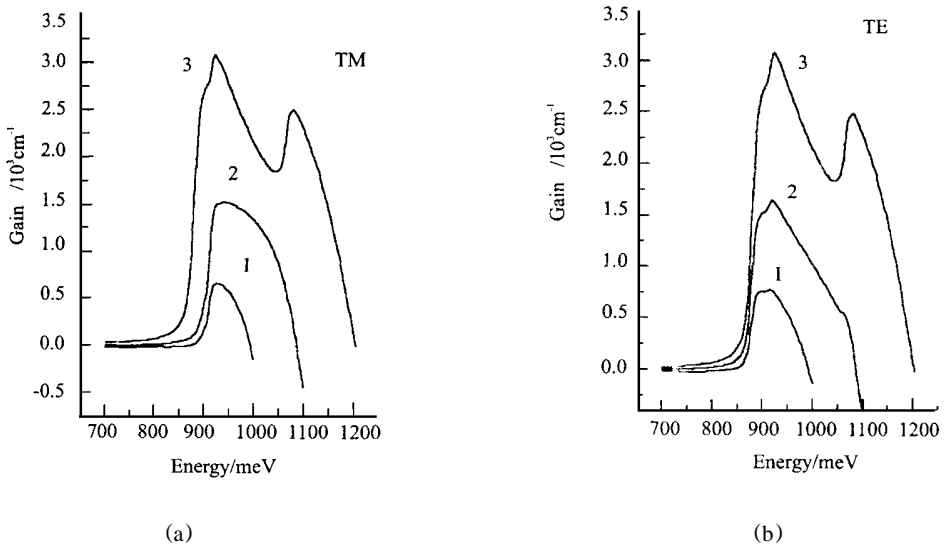


图5 不同载流子浓度下, In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP 量子阱的光学增益: (1) $n_n = 1.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$; (2) $n_n = 3.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$; (3) $n_n = 6.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

Fig 5 Optical gain spectra of In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP quantum well at carrier concentrations: (1) $n_n = 1.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$; (2) $n_n = 3.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$; (3) $n_n = 6.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

和图5, 可以看到量子线结构和量子阱结构光学增益的不同特点。首先, 对晶格匹配的 In_{0.53}

$\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 量子阱, 在同一电子浓度下, xy 方向和 z 方向的光学增益系数几乎一样; 对量子线 xy 方向和 z 方向的光学增益不同, 具有各向异性, 而且量子线的光学增益谱更尖锐, 在更低的电子浓度下可以获得更高的增益系数。

4 小 结

在有效质量理论的基础上, 计算了 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 量子线的光学增益。量子线结构尖锐的态密度和光学增益, 说明量子线比量子阱提高了器件的光学性质。

参 考 文 献

- 1 Futatsugi T, Yamaguchi Y, Muto S, *et al*. Resonant tunneling bipolar transistors using $\text{InAs}/\text{InGaAs}$ heterostructures *J Appl Phys*, 1989; **65**: 1 771
- 2 Chan P T, Choy H S, Shu C, *et al*. High performance $\text{InP}/\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ metal-semiconductor-metal photodetector with a strained $\text{Al}_{0.1}\text{In}_{0.9}\text{P}$ barrier enhancement layer *Appl Phys Lett*, 1995; **67**(12): 1 715
- 3 Burt M G. The justification for applying the effective-mass approximation to microstructure *J Phys Condens Matter*, 1992; **4**: 6 651
- 4 Foreman B A. Effective-mass hamiltonian and boundary conditions for the valence bands of semiconductor microstructures *Phys Rev B*, 1993; **48**(8): 4 964
- 5 Li S S, Xia J B, Yan Z L, *et al*. Effective-mass theory for InAs/GaAs strained coupled quantum dots *Phys Rev B*, 1996; **54**: 11 575
- 6 汤惠, 黄昆. 量子阱中空穴子带的理论 *半导体学报*, 1987; **8**: 1
- 7 Chang Y C, Schuman J N. Interband Optical transitions in $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ and InAs-GaSb superlattices *Phys Rev B*, 1985; **31**: 2 069
- 8 Vurgaftman I, Hinckley J M, Singh J. A comparison of optoelectronic properties of lattice-matched and strained quantum well and quantum wire structures *IEEE QE*, 1994; **30**(1): 75



郑永梅 (ZHENG Yongmei) 男, 福建省仙游县人, 1941年1月生, 1964年厦门大学物理系物理学专业半导体专门化(五年制)毕业, 1996年晋升为教授, 主要从事凝聚态物理、半导体物理与半导体器件物理、固体电子态理论计算研究, 为美国 A S S S 成员, 中国高等科学技术中心协联成员(1997. 1. 1~ 1999. 12. 31), 已在国内外科技刊物上正式发表论文 30 多篇。



何国敏 (HE Guomin) 厦门大学物理系研究生, 主要学习半导体物理与器件物理。

王仁智 (WANG Renzhi) 1935年10月生, 1960年厦门大学物理系毕业, 教授, 博士生导师, 从事固体电子态理论与人构材料电子结构研究, 发表论文 80 多篇, 是 C C A S T 协联成员。