

$K^\circ P$ 方法计算 InGaAs/InP 应变量子阱的增益矩阵元^①

黄钟英 刘宝林

(厦门大学, 厦门 361005)

摘要: 应用 $K^\circ P$ 微扰法计算能带的基本方法, 在考虑偏振随波矢变化的情况下, 分别计算了无应变、1% 压缩应变和 1% 伸张应变下 4.0 nm 阱宽 InGaAs/InP 量子阱的增益矩阵元。计算表明, 增益矩阵元的偏振因子随波矢的变化而发生很大的变化。

关键词: $K^\circ P$ 方法 InGaAs/InP 应变量子阱 增益

中图分类号: O471.5

The calculation of gain matrix element of InGaAs/InP strain quantum well by using $K^\circ P$ method

HUANG Zhongying LIU Baolin

(Xiamen University, Xiamen 361005, CHN)

Abstract Taking TM and TE polarization into account, calculations of gain matrix elements are respectively made for unstrain, 1% tensile strain and 1% compressive strain InGaAs/InP quantum well with the well width of 4.0 nm by means of $K^\circ P$ method for calculating energy band. The result shows that the gain matrix elements change dramatically with the variation of wave vector.

Keywords $K^\circ P$ Method, InGaAs/InP, Strain Quantum Well, Gain

1 引言

1986 年英国 Adams^[1] 和美国 Bell 实验室的 E. Yablonovitch 等人^[2] 利用压缩应变将最高空穴带转变为类轻空穴带, 使 Auger 复合率和价带间吸收率 (IVBA) 以数量级减小; 理论上指出压缩应变是提高激光器性能的有效手段。从此开始了半导体器件特别是 III-V 族半导体激光器由原来的杂质工程向能带工程的转变。从 1986 年以后, 人们利用紧束缚法^[3] 和 $K^\circ P$ 法^[4] 对压缩应变量子阱进行很多的理论研究。量子阱能带理论结果使人们认识到, 利用量子尺寸效应可以使最高空穴子带在生长平面方向 Γ 点附近局部范围内有小的有效质量, 利用压缩应变效应可以使这一小的有效质量范围增大, 有效质量减小, 因此空穴态密度减小, 增益增大, 使激光器

振荡频率提高, T_0 上升和阈值电流下降, 发射功率提高。80 年代后期, 理论和实验工作主要是研究压缩应变对半导体能带和激光器性能的影响。

1990 年, 人们从实验上发现不仅利用压缩应变可以使激光器性能改善^[5], 利用伸张应变同样可以使激光器的阈值电流下降, 而且振荡频率和发光功率更高。对此, 英国 E. P. O'Reilly^[6] 等人指出, 伸张应变使轻空穴态为最高空穴子带, TM 模具有较大的增益矩阵元, 并对类似体材料即不考虑量子效应只考虑应变效应时计算了其增益谱, 发现它确实可以减小阈值电流。M. Sugawara^[7] 对 1.50 μm 发光波长 InGaAs/InP 量子阱的光增益进行了分析, 发现不论伸张还是压缩应变都能使激光器阈值电流减少, 并计算了无限势垒时的微分增益与阱宽的关系。文献 [8] 研究了伸张应变下峰值增益与载流子浓度的关系, 但是该文对偏振只考虑了 Γ 点情况。对伸张应变增益的理论探讨很少见报道。

① 1997-10-20 收稿; 1998-02-08 定稿

本文利用 $K \cdot P$ 微扰法计算能带的基本过程, 我们考虑偏振随波矢变化的情况下, 计算 InGaAs / InP 应变量子阱增益矩阵元, 发现增益矩阵元随偏振因子变化很大

2 应变量子阱增益的理论计算

应变量子阱增益的计算可以引用体材料的增益的计算方法^[9, 10], 但是由于在应变量子阱中有效质量近似受到破坏, 计算态密度方法就必须采用数值求解, 而且能量在 z 方向发生量子化现象, 偏振特性也发生变化, 增益矩阵元的计算也要复杂一些, 既要计算数值化的波函数, 又要考虑波矢的空间取向。

2.1 应变量子阱的增益计算

与体材料相同, 应变量子阱中光增益为^[11]

$$g(E) = \frac{B_{12}(f_c - f_v)}{c \bar{n}} \quad (1)$$

式中, B_{12} 为跃迁几率, c 为真空中的光速, \bar{n} 为折射率, 因此 $c \bar{n}$ 为光子在半导体有源区的群速度。 f_c 和 f_v 分别为导带和价带的电子占有几率。 根据费米黄金准则^[11]

$$B_{12} = \frac{\alpha}{\hbar} \left(\frac{q}{m_0} \right)^2 \cdot \frac{2\hbar k}{4\sqrt{\epsilon_0} n^2 k^2} |\langle J^{*(c)}(\vec{r}) | \vec{P} | J^{*(v)}(\vec{r}) \rangle|^2 = |M|^2 \quad (2)$$

\hbar 为普朗克常数 \hbar 除以 α , q 和 m_0 分别为自由电子电荷和质量, ϵ_0 为真空介电常数, k 为光子的圆频率, \vec{P} 为动量算符, M 为动量矩阵元, $J^{*(c)}(\vec{r})$ 和 $J^{*(v)}(\vec{r})$ 分别为导带和价带的波函数, 它们的表达式可以用 $K \cdot P$ 微扰理论计算得到^[12]

$$J_n^{(l)} = F_n^{(l)}(z) \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}) u_n^{(l)}(\vec{r}) \quad (3)$$

l 为 w (阱) 或 b (垒), $u_n^{(l)}(\vec{r})$ 为布洛赫波的周期部分, $F_n^{(l)}(z)$ 为包络函数部分, n 表示量子态, 采用费米黄金准则得到系数 (B) 和动量矩阵元 (偶极矩阵元, M_{mn})

$$B = \pi q^2 \hbar^2 / (m_0^2 \epsilon_0 n^2 k) \quad (4)$$

$$M_{mn} = \langle J^{*(c)}(\vec{r}) | \vec{P} | J^{*(v)}(\vec{r}) \rangle = \langle F_{cn}(z, \vec{K}_{c//}) u_c \exp(i\vec{K}_{c//} \cdot \vec{r}) | \vec{P} | F_{vm}(z, \vec{K}_{v//}) u_v \exp(i\vec{K}_{v//} \cdot \vec{r}) \rangle = \int_{-w}^w F_{cn}(z, \vec{K}_{c//}) \frac{dF_{vm}(z, \vec{K}_{v//})}{dz} dz \cdot \langle u_c | \vec{P} | u_v \rangle \cdot \mathbb{W}_{\vec{K}_{c//}, \vec{K}_{v//}} = M_{ef} \cdot M_{br} \cdot \mathbb{W}_{\vec{K}_{c//}, \vec{K}_{v//}} \quad (5)$$

其中, $M_{br} = \langle u_c | \vec{P} | u_v \rangle$, $M_{ef} = \int_{-w}^w F_{cn}(z, \vec{K}_{c//}) \frac{dF_{vm}(z, \vec{K}_{v//})}{dz} dz$, M_{ef} 为应变量子阱包络态矩阵元,

M_{br} 为体材料布洛赫态的矩阵元, $\mathbb{W}_{\vec{K}_{c//}, \vec{K}_{v//}}$ 表示直接跃迁为 1, w 为阱宽的一半。 非直接跃迁的几率很小, 在本材料体系中不予讨论。 因此计算了应变量子阱中的包络函数, 就可计算出应变量子阱中的增益矩阵元。

体材料的增益矩阵元 M_{br} ^[6] 可表示为

$$|M_{br}|^2 = \frac{m_0}{12} \left(\frac{m_0}{m_n^*} \right) \cdot \frac{E_g(E_g + \Delta)}{E_g + 2/3\Delta} \quad (6)$$

Δ 为能带自旋-轨道耦合分裂, m_n^* 为导带电子有效质量。

2.2 偏振对增益矩阵元的影响

众所周知, 传统的异质结构激光器都是以 TE 模激射的, 主要是由于 TE 模和 TM 模的端面反射率不一致引起的, 而与增益矩阵元无关, 因为它们都是相等的。 而在量子阱结构中, 出现了空间取向的不对称, 波函数的空间取向的不一致导致动量矩阵元与偏振有相关性。 Chang 等人^[13] 利用紧束缚法分析了量子阱结构中动量矩阵元与偏振的关系, Asada^[14, 15] 和 Ramanishi^[16] 采用 $K \cdot P$ 微扰理论分析了量子阱中增益与偏振的关系。 上面给出的重轻空穴带波函数为 k 与 z 轴之间方向重合, 当波矢与 z 轴呈如图 1 所示的空间取向时, 波函数应作如下变换^[17]

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta \cos \phi & \cos \theta \sin \phi & -\sin \theta \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ \cos \theta \cos \phi & \sin \theta \sin \phi & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} \quad (7)$$

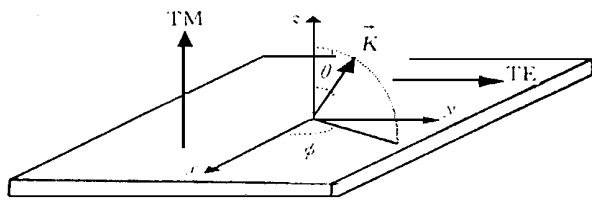


图 1 波矢的空间取向

Fig. 1 The space orientation of wave vector

θ 为 \vec{K} 与 z 轴夹角, ϕ 为 \vec{K} 在 xy 平面上投影与 x 轴夹角, 所以, $|3/2, \pm 3/2\rangle$ 态的波函数为: $\frac{1}{2} \{ (\cos \theta \cos \phi i \sin \phi |x\rangle + (\cos \theta \sin \phi \pm i \cos \phi) |y\rangle - \sin \theta |z \downarrow \rangle \text{ or } |z \uparrow \rangle \}$

$|3/2, \pm 1/2\rangle$ 态的波函数为: $\frac{1}{6} \{ (\cos \theta \cos \phi i \sin \phi |x\rangle + (\cos \theta \sin \phi \pm i \cos \phi) |y\rangle - \sin \theta |z \downarrow \rangle \text{ or } |z \uparrow \rangle + \frac{2}{3} \{ (\cos \theta \cos \phi i \sin \phi |x\rangle + (\cos \theta \sin \phi \pm i \cos \phi) |y\rangle \}$ 因此, 量子阱中增益矩阵元

$$\langle S|P|\frac{3}{2}, \pm \frac{3}{2}\rangle = \begin{cases} \frac{3}{4}M_{mn}^2(1 + \cos^2\theta) & \text{TE模} \\ \frac{3}{2}M_{mn}^2 \sin^2\theta & \text{TM模} \end{cases} \quad (8)$$

$$\langle S|P|\frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle = \begin{cases} \frac{1}{4}M_{mn}^2(1 + \cos^2\theta) + M_{mn}^2 \sin^2\theta & \text{TE模} \\ \frac{3}{2}M_{mn}^2 \sin^2\theta + M_{mn}^2 \cos^2\theta & \text{TM模} \end{cases} \quad (9)$$

M_{mn} 为量子阱的体材平均增益矩阵元。由于在量子阱中,波矢在 z 方向发生量子化,即波矢方向为 $x-y$ 平面方向,此时 $\theta = 90^\circ$,从式(8)(9)可以看出,导带与 $|3/2, \pm 3/2\rangle$ 态作用主要是以 TE 偏振,在带边增益矩阵元为 $3/2M_{mn}^2$ 而与 $|3/2, \pm 1/2\rangle$ 态作用时,主要以 TM 模偏振,在带边增益矩阵元为 $2M_{mn}^2$ 。因此,伸张应变会使 $|3/2, \pm 1/2\rangle$ 态为最高空穴子带,主要以 TM 模偏振,并有较大的增益矩阵元。这就是采用伸张应变量子阱作有源区的应变量子阱激光器的激射都为 TM 模的主要原因之一。

3 计算结果与讨论

本文是在文献 [12] 的应变量子阱能带的计算结果的基础上进行增益矩阵元的计算,与文献 [12] 的取值相同,计算中使用的应变参数见表 1,对于其他材料的参数采用内插方法得到。

表 1 几种半导体材料的应变势和 Luttinger 参数 [17]

Tab. 1 Parameters of strained potential energy and Luttinger for semiconductor materials

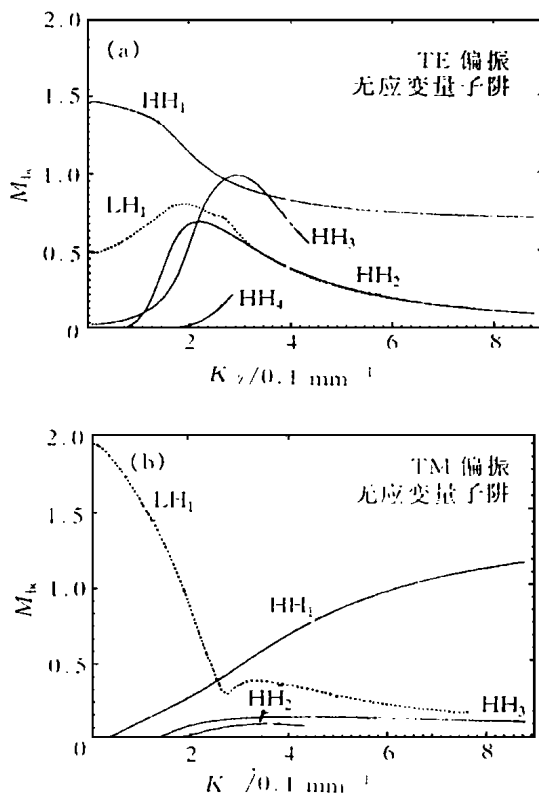
材料	V_1	V_2	V_3	静水压形变势 (eV)	单轴形变势 (eV)
GaAs	6.95	2.25	2.86	- 8.0	- 1.7
InAs	19.67	8.37	9.29	- 6.0	- 1.8
In _{0.47} Ga _{0.53} As	10.80	4.40	4.40	—	—

由于在应变量子阱中,重轻空穴发生强烈的耦合,能带在 K 空间变成完全非抛物线形式 [12],有效质量近似受到破坏,波函数就必须采用数值求解,增益矩阵元的计算也必须采用数值方法进行。应变量子阱的能带在 K_\perp 方向是量子化的,波函数在 K_\perp 方向也是量子化的。而在 K_\parallel 方向通过包络函数 $F(z, K_\parallel)$ 来描述,因此,增益矩阵元是 K_\parallel 的函数,应变通过改变体材料的哈密顿矩阵元影响能带和波

函数 [12],因此增益矩阵元也受应变的影响。

我们知道, $K^\circ P$ 方法计算应变量子阱能带的过程中,把应变作为微扰来处理,在应变哈密顿矩阵中, Γ 点非对角项都变为零,即重轻空穴解耦,这时可以用传统的方势阱的方法来计算能级和知道能级的顺序,并与能带计算的结果比较,就可以方便地定出重轻空穴的能带的编号,即定出增益矩阵元的编号。

图 2(a)~(f)给出了几种根据上述计算的能带、波函数和增益矩阵元偏振因子计算的阱宽为 4.0 nm 无应变、1% 压缩应变和 1% 伸张应变时的增益矩阵元随波矢变化。从图中可以明显看出随着波矢变化,增益矩阵元偏振因子变化很大。对于 TM 模,在第一导带电子子带到第一轻空穴子带的跃迁增益偏振因子随波矢增大而很快减小。而对 TE 模,第一电子子带到第一重空穴子带的跃迁增益偏振因子随波矢也缓慢变化。因此,对于只限带边情况必然会对计算增益带来较大误差。从中还可以明显看出,由于 Mixing 效应,在抛物线近似方法被认为是禁止跃迁的第一电子子带到第二和第四重(或轻)空穴子带的跃迁,在无应变和应变量子阱中都是允许的,并且应变使这一效应明显增大。伸张应变使最高空穴带具有最大的增益矩阵元。



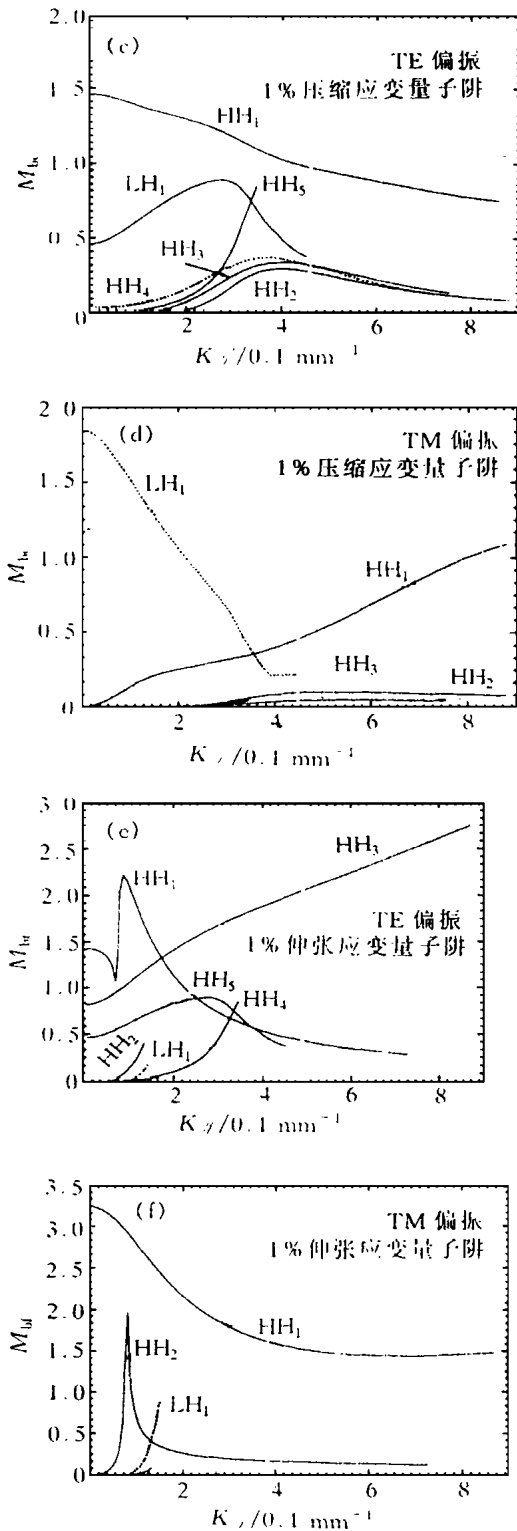


图 2 增益矩阵元随波矢的变化关系

Fig. 2 The variation of gain matrix elements with wave vector

参 考 文 献

- 1 Adams A R. Band-structure engineering for low threshold high-efficiency. *Electron. Lett.*, 1986; 22: 249
- 2 Yablonoitch E, Kane E O. Reduction of lasing threshold current density by the lowering of valence band effective

. *J. Lightwave Technol.*, 1986; 4: 504

- 3 Osbourn G C. Strained-layer superlattices form lattice mismatched materials. *J. Appl. Phys.*, 1988; 53: 1586
- 4 Yablonoitch E, Kane E O. Band structure engineering of semiconductor lasers for optical communications. *J. Lightwave Technol.*, 1988; 6: 1992
- 5 Tanban-EK T, Logan R A, Olsson N A et al. Performance enhancement of InGaAs/InP quantum well lasers by both tensile and compressive strain. *21st International Semicon. Laser Conf.*, 1990; D-3
- 6 O'Reilly E P, Jones G, Ghitu A et al. Improved performance due to suppression of spontaneous emission in tensile-strain semiconductor lasers. *Electron. Lett.*, 1991; 27: 1417
- 7 Sugawara M. Theoretical calculation of optical gain in InGa_{1-x}As/InP quantum. *Appl. Phys. Lett.*, 1992; 60: 1842
- 8 Chong T C, Fonstat C G. Theoretical gain of strained-layer semiconductor lasers in the large strain regime. *IEEE J. Quantum Electron.* 1989; 25: 171
- 9 Casey H C, Panish M B. *Heterostructure Lasers*. New York, Academic, 1987: ch3
- 10 Dutta N K. Calculated absorption, emission, and gain in In_{0.72}Ga_{0.28}As_{0.6}P_{0.4}. *J. Appl. Phys.*, 1981; 51: 6095
- 11 凯西 H C, 帕尼什 M B 著, 杜宝勋译. *异质结构激光器 (上册)*. 北京: 国防工业出版社, 1983
- 12 刘宝林等. InGaAs/InP应变量子阱的能带的比较. *量子电子学*, 1998; 15(1): 15-21
- 13 Chang Y C, Schulman J N. Modification of optical properties of GaAs-GaAl_{1-x}As superlattices due to band mixing. *Appl. Phys. Lett.*, 1983; 43(6): 536
- 14 Asada M, Kameyama A, Suematsu Y. Gain and intervalence band absorption in quantum-well lasers. *IEEE J. Quantum Electron.*, 1984; 20: 745
- 15 Asada M, Suematsu Y. Density-matrix theory of semiconductor lasers with relaxation broadening model-gain and gain-suppression in semiconductor lasers. *IEEE J. Quantum Electron.*, 1985; 21: 434
- 16 Yamanishi M, Suemune I. Comment on polarization dependent momentum matrix elements in quantum well lasers. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 1984; 23: L35
- 17 Kane E O. Band structure of indium antimonide. *J. Phys. Chem. Solids*. 1957; 1: 249



黄钟英 女, 1948年2月出生, 厦门大学物理系讲师。长期从事基础物理、半导体器件、III-V族半导体能级方面的教学、实验和研究工作。