

# Расчет спектров усиления и люминесценции квантово-каскадных лазерных структур с учетом несимметричных контуров уширения линии излучения

Д.В.Ушаков, В.К.Кононенко, И.С.Манак

*Для квантово-каскадных структур на сверхрешетках выполнен численный расчет уровней энергии, волновых функций и матричных элементов дипольных оптических переходов. Оценено влияние спектрального уширения на форму спектров испускания и предложены полуфеноменологические несимметричные контуры уширения линии излучения. Сравнение спектров электролюминесценции с рассчитанными спектрами спонтанной рекомбинации показало хорошее согласие результатов.*

**Ключевые слова:** квантово-каскадная сверхрешетка, усиление, люминесценция, контур линии уширения, гетероструктура *AllnAs-GaInAs*.

## 1. Введение

Квантово-каскадные структуры служат основой полупроводниковых излучателей и фотоприемников среднего и дальнего ИК диапазонов. Они относятся к униполярным периодическим системам, в которых оптические переходы и электроперенос осуществляются через состояния минизон [1, 2]. Формы полос испускания и фоточувствительности таких структур определяются, главным образом, уширением спектральных линий и их наложением.

В настоящей работе рассмотрены разнообразные несимметричные контуры уширения линий излучения в квантово-каскадных структурах на сверхрешетках и оценено их влияние на форму спектров усиления и спонтанной рекомбинации. Сравнение рассчитанных спектров испускания с наблюдаемыми спектрами электролюминесценции выполнено для гетероструктур в системе *AllnAs-GaInAs*.

## 2. Контуры уширения линии излучения

При проектировании квантово-каскадных лазерных структур и оптимизации их характеристик необходимо учитывать эффекты уширения линий межподзонных переходов, причем результаты моделирования существенно зависят от формы используемых функций спектрального уширения. Наиболее часто применяются симметричные функции с гауссовым, лоренцевским или экспоненциальными (см. [3] и [4]) контурами уширения линии излучения. Функциональные зависимости симметричных контуров, а также их ширины на полувысоте представлены в табл.1. Как видно из рис. 1,а, наиболее сильно спадающим оказывается G-контур, а медленнее всего спадает L-контур. Между ними находятся экспоненциальные U- и E-контуры, из которых E-контур более пологий. Численные кривые на рис.1 представлены для случая одинаковых полуширин линии излучения согласно значениям в табл.1.

Табл.1. Симметричные контуры уширения линии излучения.

Контур уширения	Вид функции	Полуширина линии
Лоренцевский (L)	$F_L(\Delta E, \gamma_L) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_L}{\Delta E^2 + \gamma_L^2}$	$\gamma_L$
Гауссов (G)	$F_G(\Delta E, \gamma_G) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\gamma_G} \exp\left(-\frac{\Delta E^2}{\gamma_G^2}\right)$	$\gamma_G \sqrt{\ln 2}$
Экспоненциальный (U) [3]	$F_U(\Delta E, \gamma_U) = \frac{1}{\gamma_U} \left[ \exp\left(\frac{\Delta E}{2\gamma_U}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta E}{2\gamma_U}\right) \right]^{-2}$	$\gamma_U \ln(3 + 2\sqrt{2})$
Экспоненциальный (E) [4]	$F_E(\Delta E, \gamma_E) = \frac{2}{\pi\gamma_E} \left[ \exp\left(\frac{\Delta E}{\gamma_E}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta E}{\gamma_E}\right) \right]^{-1}$	$\gamma_E \ln(2 + \sqrt{3})$

Д.В.Ушаков, И.С.Манак. Белорусский государственный университет, Белоруссия, 220030 Минск, просп. Независимости, 4; e-mail: UshakovDV@bsu.by; manak@bsu.by  
В.К.Кононенко. Институт физики им. Б.И.Степанова НАНБ, Белоруссия, 220072 Минск, просп. Независимости, 70; e-mail: lavik@dragon.bas-net.by

Поступила в редакцию 8 июля 2009 г.

Экспериментальные наблюдения показывают, что контур линии спектрального уширения несимметричен [4, 5]. Такой контур можно получить, предположив, что участок при  $\Delta E < 0$  описывается функцией  $C_- F_1(\Delta E)$ , а при  $\Delta E > 0$  – функцией  $C_+ F_2(\Delta E)$ . Сшивая функции в нуле ( $C_- F_1(0) = C_+ F_2(0)$ ) и учитывая условие нормировки ( $C_- + C_+ = 2$ ), можно определить коэффициенты  $C_-$  и  $C_+$ . Смешанная модель уширения линии испускания, в

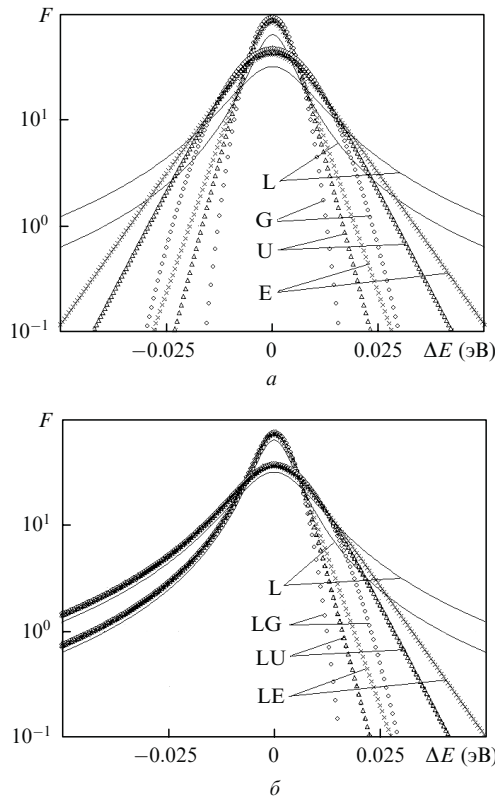


Рис.1. Спектральные распределения симметричных (а) и несимметричных (б) контуров уширения линии излучения для параметра уширения  $\gamma_L = 5$  и  $10$  мэВ.

которой при одинаковых параметрах уширения участок при  $\Delta E < 0$  описывается лоренцианом, а при  $\Delta E > 0$  – гауссианом, предложена в работе [6].

В табл.2 представлены расчеты функциональных зависимостей несимметричных LG-, LU- и LE-контуров уширения линии излучения. Во всех случаях полагалось, что участок при  $\Delta E < 0$  описывается лоренцианом и ширины контуров на полувысоте одинаковы. Приведен также DA-контур, полученный в работе [7] на основе теории возмущений для многочастичной системы с кулоновским взаимодействием. Спектральные кривые для

несимметричных контуров уширения представлены на рис.1,б. Видно, что на длинноволновом крыле при  $\Delta E < 0$  все кривые испытывают степенное затухание и сливаются с L-контуром, а на коротковолновом крыле при  $\Delta E > 0$  они пересекаются и экспоненциально затухают в соответствии с G-, U- и E-контурными.

### 3. Расчет излучательных характеристик

Коэффициент усиления  $g$  для межподзонных переходов в зависимости от частоты света  $\nu$  в многоуровневом приближении без учета уширения линии излучения имеет вид дельта-функции:

$$g_{nm}(\nu) \sim |z_{nm}|^2 \int dE_f [f(E_i(k_f)) - f(E_f)] \times \delta[E_i(k_f) - E_f - h\nu]. \tag{1}$$

Введем контур уширения согласно [5, 6, 8]. Тогда

$$g_{nm}(\nu) \sim |z_{nm}|^2 \int dE_{if} E_{if} F(h\nu - E_{if}) \int dE_f [f(E_i(k_f)) - f(E_f)] \delta[E_i(k_f) - E_f - E_{if}]. \tag{2}$$

После интегрирования в (2) получим окончательное выражение для коэффициента усиления  $g(\nu)$  для внутриподзонных переходов в многоуровневом приближении [9]:

$$g(\nu) = \sum_n \sum_m g_{nm}(\nu) = \frac{e^2}{\hbar^3 \epsilon_0 c n_r d} \sum_n \sum_m m_{fm} |z_{nm}|^2 \times \int_{E_{fm}}^{\infty} dE_f (E_i - E_f) F[h\nu - (E_i - E_f), \gamma] \times [f(E_i - F_n) - f(E_f - F_m)], \tag{3}$$

где  $E_i = (E_f - E_{fm})(m_{fm}/m_{in}) + E_{in}$ ;  $z_{nm} = \int \psi_n^* z \psi_m dz$  – матричный элемент дипольных переходов;  $F_n$  и  $F_m$  – квазиуровни Ферми в минизонах  $n$  и  $m$  с энергиями  $E_{in}$  и  $E_{fm}$  и эффективными массами  $m_{in}$  и  $m_{fm}$ ;  $d$  – толщина квантовокаскадной структуры;  $n_r$  – показатель преломления;  $\epsilon_0$  – электрическая постоянная. Суммирование в (3) прово-

Табл.2. Несимметричные контуры уширения линии излучения.

Контур уширения	Вид функции	Параметр уширения
Лоренца – Гаусса (LG)	$F_{LG}(\Delta E, \gamma_L) = \begin{cases} C_- F_L(\Delta E, \gamma_L), & \Delta E \leq 0, \\ C_+ F_G(\Delta E, \gamma_G), & \Delta E \geq 0 \end{cases}$ $C_- = \frac{2\sqrt{\pi \ln 2}}{1 + \sqrt{\pi \ln 2}}, \quad C_+ = \frac{2}{1 + \sqrt{\pi \ln 2}}$	$\gamma_G = \frac{\gamma_L}{\sqrt{\ln 2}}$
Лоренца – Унгера (LU)	$F_{LU}(\Delta E, \gamma_L) = \begin{cases} C_- F_L(\Delta E, \gamma_L), & \Delta E \leq 0, \\ C_+ F_U(\Delta E, \gamma_U), & \Delta E \geq 0 \end{cases}$ $C_- = \frac{2\pi \ln(3 + 2\sqrt{2})}{4 + \pi \ln(3 + 2\sqrt{2})}, \quad C_+ = \frac{8}{4 + \pi \ln(3 + 2\sqrt{2})}$	$\gamma_U = \frac{\gamma_L}{\ln(3 + 2\sqrt{2})}$
Лоренца – Елисеева (LE)	$F_{LE}(\Delta E, \gamma_L) = \begin{cases} C_- F_L(\Delta E, \gamma_L), & \Delta E \leq 0, \\ C_+ F_E(\Delta E, \gamma_E), & \Delta E \geq 0 \end{cases}$ $C_- = \frac{2 \ln(2 + \sqrt{3})}{1 + \ln(2 + \sqrt{3})}, \quad C_+ = \frac{2}{1 + \ln(2 + \sqrt{3})}$	$\gamma_E = \frac{\gamma_L}{\ln(2 + \sqrt{3})}$
Дрозда – Афоненко (DA)	$F_A(\Delta E, \gamma_A) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_A}{\gamma_A^2 + \Delta E^2} \frac{2}{1 + \exp(\Delta E/kT)}$	$\gamma_A = \gamma_L$

Табл.3. Параметры зонной структуры полупроводников.

Соединение	$m_c/m_e$	$\gamma_1$	$\gamma_2$	$\gamma_3$	$E_p$ (эВ)	$\Delta S_0$ (мэВ)	$E_{g0}$ (эВ)	$E_{g300}$ (эВ)	$\alpha$ (мэВ/К)	$\beta$ (К)	$F$
GaAs	0.067	6.98	2.06	2.93	28.8	341	1.519	1.42	0.5405	204	-1.938
AlAs	0.15	3.76	0.82	1.42	21.1	280	3.099	3.0	0.885	530	-0.477
InAs	0.026	20.0	8.5	9.2	21.5	390	0.417	0.354	0.276	93	-2.896
b (GaInAs)	0.0091	0	0	0	-1.48	150	0.477	0	0	0	1.77
b (AlInAs)	0	0	0	0	-4.81	150	0.7	0	0	0	-4.44
Ga <sub>0.47</sub> In <sub>0.53</sub> As	0.041	13.88	5.47	6.25	25.3	330	0.816	0.735	0.4	145	-2.886
Al <sub>0.48</sub> In <sub>0.52</sub> As	0.073	12.2	4.81	5.47	22.51	300	1.530	1.445	0.568	303	-0.627

Примечание:  $m_c$  – эффективные массы электронов;  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  – параметры Латтинжера;  $E_p$  – энергия, связанная с матричным элементом межзонных переходов Кейна;  $\Delta S_0$  – энергия спин-орбитального отщепления;  $E_g$  – ширина запрещенной зоны;  $\alpha$  и  $\beta$  – параметры Варши для расчета температурной зависимости ширины запрещенной зоны;  $F$  – параметр, характеризующий взаимодействие зоны проводимости с вышележащими энергетическими зонами.

дится по всем квантовым числам начальных ( $n$ ) и конечных ( $m$ ) состояний, для которых  $E_{in} - E_{im} > 0$ .

Известно, что в полупроводниках при переходах зона проводимости – валентная зона скорость спонтанной рекомбинации  $r_{sp}(h\nu)$  и коэффициент усиления  $g(\nu)$  удовлетворяют универсальному соотношению. Для униполярных квантово-каскадных лазеров при межподзонных переходах универсальное соотношение имеет похожий вид [9]:

$$r_{sp}(h\nu) = v_{gr}\rho(h\nu) \sum_n \sum_m g_{nm}(\nu) \times \left[ 1 - \exp\left(\frac{E_n - E_m - (F_n - F_m)}{kT}\right) \right]^{-1}, \quad (4)$$

где  $\rho(h\nu) = (h\nu)^2 n_r^2 / (\pi^2 c^2 \hbar^3 v_{gr})$  – плотность электромагнитных мод;  $v_{gr}$  – скорость света в кристалле.

#### 4. Обсуждение результатов

Значения энергии и вид волновых функций для потенциальной ямы произвольной формы находились  $k \cdot p$ -методом в расширенной модели Бастарда из решения стационарного уравнения Шредингера [10, 11]. Параметры зонной структуры для тройных соединений  $A_xB_{1-x}C$  аппроксимировались по экспериментальным и теоретическим данным бинарных соединений АВ согласно [12] с использованием параметра квадратичной аппроксимации  $b_{ABC}$ :

$$D_{ABC}(x) = xD_{AC} + (1 - x)D_{BC} - x(1 - x)b_{ABC}. \quad (5)$$

Табличные данные параметров зонной структуры для соединений GaAs, AlAs и InAs, а также рассчитанные по формуле (5) данные интерполяции для соединений Ga<sub>0.47</sub>In<sub>0.53</sub>As и Al<sub>0.48</sub>In<sub>0.52</sub>As представлены в табл.3.

На рис.2 и 3 приведены результаты численных расчетов зонной структуры, уровней энергии, волновых функций, матричных элементов дипольных переходов, а также спектров усиления и испускания гетероструктуры Al<sub>0.48</sub>In<sub>0.52</sub>As – Ga<sub>0.47</sub>In<sub>0.53</sub>As. Толщины слоев структуры (в нанометрах) последовательно, слева направо, имеют следующие значения: 4.4/ **1.7**/ 0.9/ **5.3**/ 1.1/ **5.2**/ 1.2/ **4.7**/ 1.3/ **4.2**/ 1.5/ **3.9**/ 1.6/ **3.4**/ 1.8/ **3.1**/ 2.1/ **2.8**/ 2.5/ **2.7**/ 3.2/ **2.7**/ 3.6/ **2.5**. Во всей последовательности слоев квантовые ямы Ga<sub>0.47</sub>In<sub>0.53</sub>As выделены жирным, а подчеркнуты слои, легированные примесями Si с концентрацией  $1.5 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$  [13]. На рис.2,а квадраты модулей волновых функций, соответствующих  $N$ -му периоду, показаны жирными

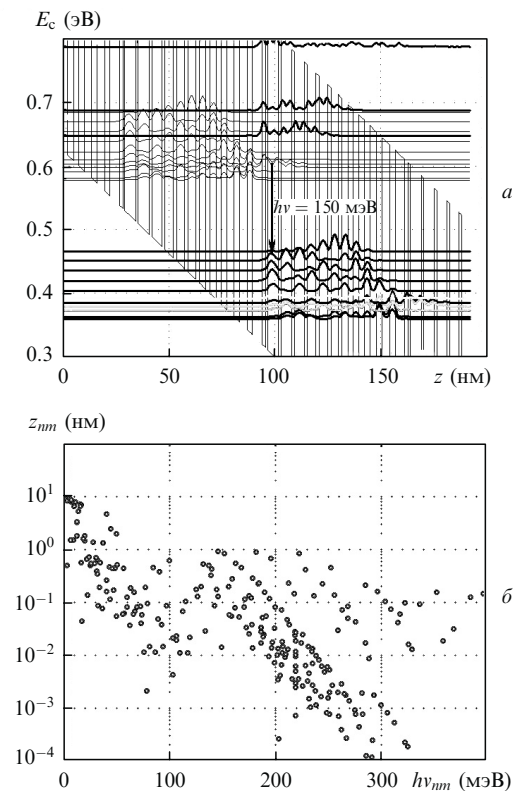


Рис.2. Диаграмма зоны проводимости  $E_c(z)$  и квадраты модулей волновых функций электронов (а) и дипольные матричные элементы переходов  $z_{nm}$  (б) для квантово-каскадной структуры Al<sub>0.48</sub>In<sub>0.52</sub>As – Ga<sub>0.47</sub>In<sub>0.53</sub>As в электрическом поле с напряженностью  $E = 3.25 \times 10^4$  В/см;  $h\nu_{nm} = E_n - E_m$ .

ми линиями, а  $(N - 1)$ -му – тонкими. При вычислениях высота  $\Delta E_c$  потенциальных барьеров в зоне проводимости полагалась равной 0.51 эВ. Рассчитанные значения  $m_c$  эффективных масс носителей тока составили  $0.073m_e$  для барьерных слоев Al<sub>0.48</sub>In<sub>0.52</sub>As и  $0.041m_e$  для квантовых ям Ga<sub>0.47</sub>In<sub>0.53</sub>As.

Заполнение уровней энергии и соответствующие квазиуровни Ферми находились путем численного решения системы балансных уравнений [14]. Результаты расчетов спектров излучения представлены на рис.3. Видно, что при малой напряженности электрического поля (менее  $2.0 \times 10^4$  В/см) преобладает поглощение света. С ростом уровня возбуждения  $E$  от  $2.1 \times 10^4$  до  $3.4 \times 10^4$  В/см происходит перестройка максимума коэффициента усиления от 115 до 150 мэВ. При дальнейшем увеличении напряженности электрического поля наблюдается расстройка

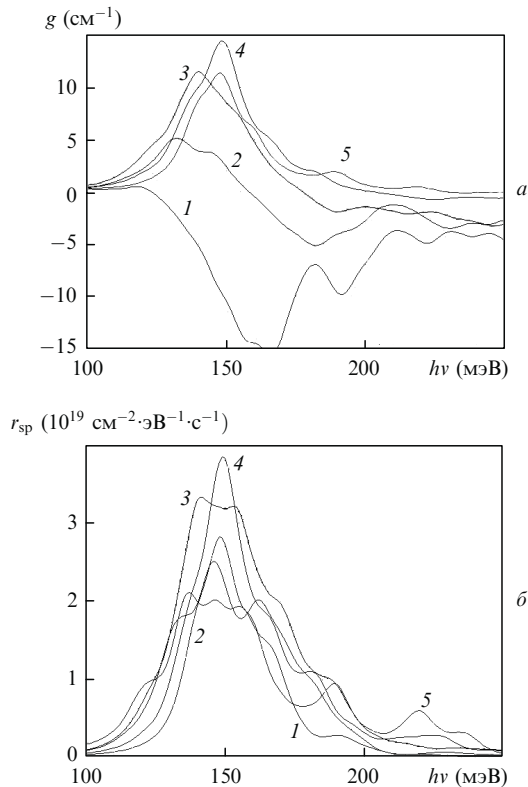


Рис.3. Спектры усиления  $g(\nu)$  (а) и спонтанного испускания  $r_{sp}(h\nu)$  (б) квантово-каскадной структуры, рассчитанные с учетом LE-контура уширения при  $E = 2.0$  (1),  $2.4$  (2),  $2.8$  (3),  $3.4$  (4),  $4.0 \times 10^4$  В/см (5);  $\gamma_L = 7$  мэВ,  $T = 300$  К.

рабочих уровней, коэффициент усиления падает, но появляются новые пики в коротковолновой области 190 и 220 мэВ. Для данной квантово-каскадной структуры имеет место двухфотонный резонанс, когда расстояние между нижним рабочим уровнем предыдущего каскада и верхним рабочим уровнем следующего равно удвоенной энергии оптического фотона, наступающий при  $E = 3.25 \times 10^4$  В/см. При этом рассчитанная плотность порогового тока  $J = 2.19$  кА/см<sup>2</sup> хорошо согласуется с экспериментальными данными [13].

Вычисления излучательных характеристик квантово-каскадных структур на сверхрешетках проведены с использованием различных моделей уширения линии излучения. При этом задавался параметр уширения  $\gamma_L$  для лоренцевского контура линии испускания, а остальные параметры уширения находились согласно табл.1 и 2. На рис.4 для сравнения представлены рассчитанные спектры испускания и измеренные при  $T = 300$  К спектры люминесценции [13]. Оптические переходы исследуемой структуры лежат в области длин волн  $\sim 8.45$  мкм (150 мэВ). Как следует из рис.4, несимметричные LG-, LU-, LE- и DA-контурсы уширения линии излучения наилучшим образом описывают экспериментальные спектры. Лоренцевская модель уширения линии излучения менее всего подходит для описания спектров излучения.

## 5. Заключение

Таким образом, в настоящей работе проведен численный расчет спектров усиления и спонтанного испускания

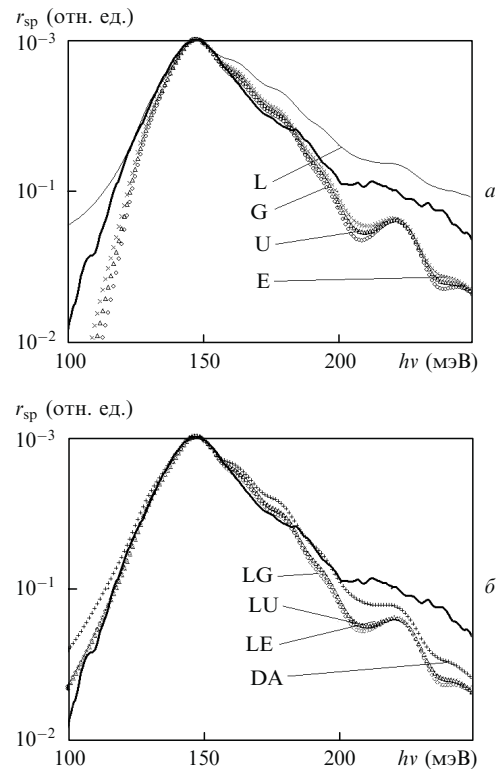


Рис.4. Спектры электролюминесценции из работы [13] (жирная кривая) в сравнении со спектрами спонтанного испускания квантово-каскадной сверхрешеточной структуры, рассчитанными для симметричных (а) и несимметричных (б) контурсов уширения с параметром уширения  $\gamma_L = 7$  мэВ;  $E = 3.25 \times 10^4$  В/см,  $T = 300$  К.

квантово-каскадных структур. Предложенные полуфеноменологические выражения для несимметричных контурсов уширения линии излучения позволяют адекватно описывать полосы испускания для межподзонных переходов. Показано хорошее соответствие рассчитанных спектров излучения с полученными экспериментально.

Авторы выражают благодарность А.А.Афоненко за обсуждение результатов. Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект Ф08Р-119).

1. Казаринов Р.Ф., Сурис Р.А. *ФТП*, **5**, 797 (1971).
2. Faist J., Capasso F., Sivco D.L., Sirtori C., Hutchinson A.L., Cho A.Y. *Science*, **264**, 553 (1994).
3. Unger K. *Phys. Stat. Sol. B*, **149**, K141 (1988).
4. Елисеев П.Г., Акимова И.В. *ФТП*, **32**, 478 (1998).
5. Yamanishi M., Lee Y. *IEEE J. Quantum Electron.*, **23**, 367 (1987).
6. Кононенко В.К., Манак И.С., Наливко С.В., Шевцов В.А., Шуляев Д.С. *ЖПС*, **64**, 221 (1997).
7. Дрозд А.Н., Афоненко А.А. *ЖПС*, **74**, 642 (2007).
8. Asada M. *IEEE J. Quantum Electron.*, **25**, 2019 (1989).
9. Ушаков Д.В., Манак И.С. *Оптика и спектроскопия*, **104**, 847 (2008).
10. Yoo K.H., Ram-Mohan L.R., Nelson D.F. *Phys. Rev. B*, **39**, 12808 (1989).
11. Sirtori C., Capasso F., Faist J., Scandolo S. *Phys. Rev. B*, **50**, 8663 (1994).
12. Vurgaftman I., Meyer J.R., Ram-Mohan L.R. *J. Appl. Phys.*, **89**, 5815 (2001).
13. Wittmann A., Gresch T., Gini E., Hvozdar L., Hoyler N., Giovannini M., Faist J. *IEEE J. Quantum Electron.*, **44**, 36 (2008).
14. Ушаков Д.В., Манак И.С. *ЖПС*, **74**, 801 (2007).