

# 应变量子阱能带偏置的分析与计算

华玲玲<sup>1</sup> 杨阳<sup>2</sup>

(<sup>1</sup> 华北科技学院基础部, 北京 101601  
<sup>2</sup> 华北科技学院计算机学院, 北京 101601)

**摘要** 利用 Model-solid 及 Harrison 两种模型计算不同势垒材料的 InGaAs 量子阱的能带偏置比, 选择出适合于计算 InGaAs 量子阱能带偏置比的模型是 Model-solid 模型。讨论了引入应变、量子阱材料组分、势垒材料组分和禁带宽度对能带偏置的影响。结果表明, 压应变的引入会增大禁带宽度, 减小能带偏置; 随着势阱材料组分和势垒材料组分的增加, 能带偏置会逐渐增大, 但能带偏置比并非一直随势垒材料组分的增加而增大; In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/Al<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>As 量子阱的 Al 含量  $y$  约为 0.1 是较佳值, In 含量  $x$  小于 0.2 是较佳值。

**关键词** 激光器; 应变量子阱; 能带偏置; Model-solid 模型; Harrison 模型

**中图分类号** O417 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/LOP50.051404

## Analysis and Computation of Band Offset of Strained Quantum Wells

Hua Lingling<sup>1</sup> Yang Yang<sup>2</sup>

(<sup>1</sup> Department of Basic Courses, North China Institute of Science and Technology, Beijing, 101601 China)  
(<sup>2</sup> School of Computer, North China Institute of Science and Technology, Beijing 101601, China)

**Abstract** We calculate the band offset ratio of InGaAs quantum wells with different barrier materials using Model-solid theory and Harrison model. The Model-solid theory, which is more suitable for the studied materials, is selected to calculate the band offset ratio. Then we discuss the influence of the strain, quantum well material composition, barrier material composition and band gap, on the band offset. The results show that the compressive strain will increase the band gap and reduce the band offset. With increase of the trap material composition and barrier material composition, the band offset will gradually increase. However, the band offset ratio is not always increased with the increase of barrier material composition. In In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/Al<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>As quantum wells, the Al content ( $y$ ) of about 0.1 is the preferred value, and the In content ( $x$ ) less than 0.2 is the preferred value.

**Key words** lasers; strained quantum well; band offset; Model-solid theory; Harrison model

**OCIS codes** 140.3380; 140.5965; 140.3460; 250.5590; 230.5590

## 1 引言

异质结的能带偏置, 又称带边不连续性<sup>[1]</sup>。在光抽运垂直外腔面发射激光器<sup>[2~6]</sup>的设计及模拟中, 这是个必须首先解决的重要问题。能带偏置直接影响到量子阱的能带结构、自发辐射、增益特性及输出波长等重要物理量的计算。如果不能较为准确地确定异质结的能带偏置, 则其他的相关计算和模拟将是不可靠和无意义的工作。

能带偏置的实验测定是可信数据的首要来源。实验确定能带偏置的方法有很多, 如电容-电压或电流-电压技术、光致荧光或光致荧光激发测量、深能级瞬态光谱方法以及 X 射线光子发射光谱测量等。在众多的 III-VI 族二元、三元及四元合金中, 不仅可供获得的数据本身非常有限, 而且实验报道的数据之间也彼此存在差异。对于无可靠实验报道的材料, 特别是一些新材料, 在激光器的设计即模拟阶段, 对能带偏置的

收稿日期: 2013-01-08; 收到修改稿日期: 2013-02-25; 网络出版日期: 2013-04-28

基金项目: 中央高校基本科研业务费专项资金(2011B020)和华北科技学院教育科学研究基金资助课题。

作者简介: 华玲玲(1980—), 女, 硕士, 讲师, 主要从事光抽运半导体激光器方面的研究。

E-mail: your2008@vip.163.com

确定只能来源于理论的计算。被广泛应用的用于确定异质结能带偏置的方法主要有两种,即 Model-solid 模型<sup>[7]</sup>和 Harrison 模型<sup>[8]</sup>。

本文首先利用 Model-solid 及 Harrison 两种模型计算不同势垒材料(GaAs、AlGaAs 和 GaAsP)的 InGaAs 量子阱的能带偏置比,然后将计算结果与文献数据比较,从而选择出适合于计算 InGaAs 量子阱能带偏置比的模型。以  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$  应变量子阱为例,讨论了引入应变、量子阱材料组分、势垒材料组分和禁带宽度对能带偏置的影响,为光抽运垂直外腔面发射激光器能带结构的设计提供了理论依据。

## 2 计算原理和模型

### 2.1 能带偏置

量子阱的能带偏置,是指在两种不同材料所构成的异质结界面上,两个禁带宽度之差的分配问题。如图 1 所示,令量子阱和势垒的禁带宽度分别为  $E_g^w$  和  $E_g^b$ , 其差为  $\Delta E_g = E_g^b - E_g^w$ , 其中上标 b 和 w 分别表示势垒和量子阱区。则  $\Delta E_C$  和  $\Delta E_V$  分别表示  $\Delta E_g$  分配给导带(CB)下端的电势带阶和价带(VB)上端的电势带阶。

对于异质结量子阱,导带和价带的能带偏置定义为

$$\Delta E_C = E_C^b - E_C^w, \quad (1)$$

$$\Delta E_V = E_V^w - E_V^b. \quad (2)$$

导带和价带的能带偏置比分别表示为

$$Q_C = \frac{\Delta E_C}{\Delta E_g} = \frac{\Delta E_C}{\Delta E_C + \Delta E_V}, \quad (3)$$

$$Q_V = \frac{\Delta E_V}{\Delta E_g} = 1 - Q_C. \quad (4)$$

(1)~(4)式中  $E_V^w$ 、 $E_C^w$ 、 $E_V^b$ 、 $E_C^b$  分别为量子阱和势垒的价带边和导带边位置。

### 2.2 应变对能带的偏置作用

外延生长量子阱时,如果外延层与基质材料的晶格常数不匹配,则在外延层中将引入应变,形成所谓应变量子阱。应变附加的势能会使能带边发生移动,改变材料带隙能,即改变能带偏置,并使原来在价带顶简并的重空穴和轻空穴退简并。另外,应变会使能带结构发生变形,最重要的应变效应就是使价带曲率半径增大,即空穴的有效质量减小。量子阱的应变类型有压应变和张应变两种,当势阱的晶格常数比势垒的晶格常数大时,成为具有压应变的应变量子阱;反之则成为具有张应变的应变量子阱。压应变时重空穴带上升,位于轻空穴带之上,电子-重空穴(E-HH)跃迁成为主要跃迁;而在张应变时,情况则刚好相反,轻空穴带位于重空穴带之上,电子-轻空穴(E-LH)跃迁成为主要跃迁。

应变对导带边的作用<sup>[9]</sup>是产生一个流体静压形变能  $P_{ce}$ , 其满足

$$P_{ce} = a_c(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) = 2a_c \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \epsilon, \quad (5)$$

式中  $a_c$  为导带的流体静压势,  $\epsilon_{xx}$ 、 $\epsilon_{yy}$  和  $\epsilon_{zz}$  为应变张量的分量,且对应变张量  $\epsilon_{ij}$  有

$$\epsilon = \epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a_0 - a(x)}{a(x)}, \quad \epsilon_{zz} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}}\epsilon, \quad \epsilon_{xy} = \epsilon_{yx} = \epsilon_{xz} = 0, \quad (6)$$

选择晶体生长面的方向[001]为  $z$  轴,  $a_0$  是衬底的晶格常数,  $a(x)$  是外延层的晶格常数,  $C_{11}$  和  $C_{12}$  为晶体的弹性模量。

应变引起的价带漂移有两个分量,一部分是流体静压形变能  $P_e$ , 它的作用是使整个价带上升或下降,影响到整个应变层的带隙宽度;另一部分是四角形剪切形变能  $Q_e$ , 它的作用是使轻重空穴带向相反的方向移动,即退简并。它们各自满足

$$P_e = -a_v(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) = -2a_v \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \epsilon, \quad (7)$$

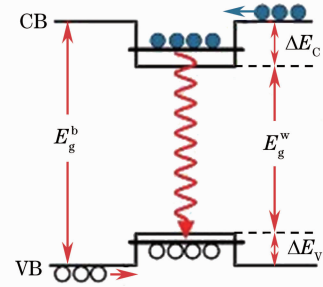


图 1 量子阱结构示意图

Fig. 1 Structure of the quantum wells

$$Q_\epsilon = -\frac{b}{2}(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} - 2\epsilon_{zz}) = -b\left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}}\right)\epsilon, \quad (8)$$

式中  $a_v$  为价带的流体静压势,  $b$  为剪切形变势。

## 2.3 两种模型

### 2.3.1 Model-solid 模型

由 Van de Walle<sup>[7]</sup> 发展起来的 Model-solid 理论可用来计算无应变量子阱和应变量子阱的能带偏置。这一模型基于局域密度泛函理论和赝势法, 考虑了价带的自旋-轨道耦合作用以及量子阱中应变附加的势能向导带和价带的影响, 先确定价带带边位置, 然后通过带隙计算给出导带带边位置, 详细描述见文献[7]。在 Model-solid 计算中, 引入价带平均能量  $E_{av} = (E_{HH}^0 + E_{LH}^0 + E_{SO}^0)/3$ , 其中  $E_{HH}^0$ 、 $E_{LH}^0$  和  $E_{SO}^0$  分别是无应变时重空穴带(HH)、轻空穴带(LH)和自旋-轨道分裂带(SO)的能量。这种方法能利用实验得到的有限参数, 如禁带宽度  $E_g$ 、价带平均能量  $E_{av}$  等, 去确定能带偏置比, 从而确定能带结构。存在应变时, 价带各带边能量分别为

$$E_{HH} = E_{av} + \frac{1}{3}\Delta - P_\epsilon - Q_\epsilon, \quad (9)$$

$$E_{LH} = E_{av} - \frac{1}{6}\Delta - P_\epsilon + \frac{Q_\epsilon}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\Delta^2 + 2\Delta Q_\epsilon + 9Q_\epsilon^2}, \quad (10)$$

$$E_{SO} = E_{av} - \frac{1}{6}\Delta - P_\epsilon + \frac{Q_\epsilon}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{\Delta^2 + 2\Delta Q_\epsilon + 9Q_\epsilon^2}; \quad (11)$$

导带能量为

$$E_C = E_{av} + \frac{1}{3}\Delta + E_g + P_{ce}, \quad (12)$$

式中  $\Delta$  为自旋-轨道耦合分离能,  $E_g$  是无应变时量子阱的禁带宽度。

### 2.3.2 Harrison 模型

Harrison 模型基于原子轨道线性组合法(LCAO)和从头算原子赝势法, 需要知道无应变时导带和价带的位置  $E_C^0$  和  $E_V^0$ , 并考虑应变附加的势能向导带和价带的影响, 从而确定导带和价带的带边位置, 详细描述参考文献[8]。考虑应变存在时, 价带带边能量为

$$E_{HH} = E_V^0 - P_\epsilon - Q_\epsilon \quad (\text{compressive strain}), \quad (13)$$

$$E_{LH} = E_V^0 + P_\epsilon + Q_\epsilon \quad (\text{tensile strain}). \quad (14)$$

导带边位置由下式给定:

$$E_C = E_C^0 + P_{ce}. \quad (15)$$

本文中模拟计算所有二元材料参数参考文献[10,11], 这里不再列出。对于三元合金  $AB_xC_{1-x}$ , 各参数由二元合金 AB 和 AC 的相应参数通过插值得到

$$P(AB_xC_{1-x}) = xP(AB) + (1-x)P(AC) - x(1-x)b_{ABC}, \quad (16)$$

式中  $b_{ABC}$  是合金 ABC 的弯曲参数, 反映插值对线性的偏离程度。计算中考虑了由于温度升高导致的带隙收缩, 计算式为

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha\Theta}{2}\left[\sqrt{1 + \left(\frac{2T}{\Theta}\right)^p} - 1\right], \quad (17)$$

式中  $E_g(0)$  是温度为 0 K 时的带隙,  $\alpha$  是倾斜参数,  $\Theta$  和  $p$  是平价声子温度的声子色散参数。所用三元材料的非零弯曲参数如表 1 所示<sup>[11]</sup>, 在计算带隙收缩时所用参数如表 2 所示<sup>[11]</sup>。

表 1 三元合金的非零弯曲参数

Table 1 Nonzero bowing parameters of ternary alloy

Parameters	$b_{E_g}$	$b_\Delta$	$b_{a_c}$
InGaAs	0.477	0.15	2.61
$Al_xGa_{1-x}As$	$-0.127 + 1.310x$		
GaAsP	0.19		

表 2 计算带隙收缩所用参数

Table 2 Parameters for the calculation of band-gap reduction

Parameter	Quantity /unit	GaAs	InAs	AlAs	GaP
Band-gap energy at 0 K	$E_g(0)$ /eV	1.519	0.417	3.099	2.886
Slope parameter	$\alpha$ /(meV/K)	0.472	0.281	0.362	0.480
Average phonon temperature	$\Theta$ / K	230	143	218	358
Phonon dispersion parameter	$p$	2.44	2.10	2.32	2.09

## 2.4 禁带宽度

根据(16)式可得无应变时  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  量子阱的禁带宽度<sup>[12]</sup>  $E_g$  与 In 组分  $x$  关系的理论公式:

$$E_g(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) = xE_g(\text{InAs}) + (1-x)E_g(\text{GaAs}) - x(1-x)b_{\text{InGaAs}}, \quad (18)$$

考虑应变后量子阱有效禁带宽度表示为

$$\begin{aligned} E_{\text{C-HH}}(x) &= E_g(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) + \delta E_{\text{C}}(x) - \delta E_{\text{HH}}(x) \quad (\text{compressive strain}), \\ E_{\text{C-LH}}(x) &= E_g(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) + \delta E_{\text{C}}(x) - \delta E_{\text{LH}}(x) \quad (\text{tensile strain}), \end{aligned} \quad (19)$$

式中  $\delta E_{\text{C}}(x) = P_{\epsilon}$  为应变所致导带漂移,  $\delta E_{\text{HH}}(x) = -P_{\epsilon} - Q_{\epsilon}$  为压应变时价带漂移,  $\delta E_{\text{LH}}(x) = -P_{\epsilon} + Q_{\epsilon}$  为张应变时价带漂移。

半导体量子阱激光器通常是 TE 模式激光,主要由导带第一子带电子到价带第一子带空穴的跃迁决定,这一跃迁的光子能量可以表示为<sup>[13]</sup>

$$\begin{aligned} E &= \frac{hc}{\lambda} = E_{\text{C-HH}}(x) \quad (\text{compressive strain}), \\ E &= \frac{hc}{\lambda} = E_{\text{C-LH}}(x) \quad (\text{tensile strain}). \end{aligned} \quad (20)$$

通过求解(20)式可以确定在量子阱不同组分处的激光波长。因此在设计激光器时可根据需要的激光波长确定量子阱的材料组分。

## 3 计算结果及分析

能带偏置由材料组分、禁带宽度、带边位置和应变等因素决定。In 组分大小直接关系到  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  材料带隙的宽窄,也就决定着器件发射波长的长短。增大波长就要求增加 In 的组分。但是随着 In 组分  $x$  的增加,晶格失配越来越严重,产生的内应力也就越大,这将使器件性能显著变差。因此以下计算中 In 的组分取  $0 \sim 0.5$ ,温度取 300 K,引入的应变都是压应变。

表 3 列出了  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 、 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}$  和  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}_{0.95}\text{P}_{0.05}$  材料体系的  $\Delta E_{\text{C}}$  和  $Q_{\text{C}}$  的 Model-solid 及 Harrison 模型计算结果,并给出了一些文献报道的数据。 $Q_{\text{C}}$  随  $x$  的变化关系如图 2 所示。

表 3 两种模型计算结果与文献比较

Table 3 Calculation results of two models in comparison with the results in references

Barrier	$\Delta E_{\text{C}}/\text{eV}$		$Q_{\text{C}}$		Reference
	Model-solid theory	Harrison model	Model-solid theory	Harrison model	
GaAs	0~0.292	0~0.124	0.631~0.567	0.246~0.324	For $0.1 < x < 0.3$ , $Q_{\text{C}} = 0.6$ <sup>[14]</sup> ; for $0 < x < 0.3$ , $Q_{\text{C}} = 0.65$ <sup>[15]</sup>
$\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}$	0.054~0.345	0.050~0.174	0.644~0.578	0.650~0.379	For $0.07 < x < 0.18$ , $0.6 < Q_{\text{C}} < 0.7$ <sup>[16]</sup>
$\text{GaAs}_{0.95}\text{P}_{0.05}$	0.021~0.314	0.028~0.153	0.410~0.554	0.477~0.347	For $0.1 < x < 0.2$ , $Q_{\text{C}} = 0.5$ <sup>[11]</sup>

图 2(a)是用两种不同模型计算所得的  $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$  量子阱的能带偏置比。由图可知 Model-solid 模型所得  $Q_{\text{C}}$  随  $x$  增大而递减,而 Harrison 模型所得  $Q_{\text{C}}$  随  $x$  增大而递增。与表 3 中文献[14,15]数据对比可得,对于以 GaAs 作为势垒的  $\text{InGaAs}$  量子阱,Model-solid 模型计算结果与文献报道实验数据吻合,而 Harrison 模型的计算结果则偏离较远。

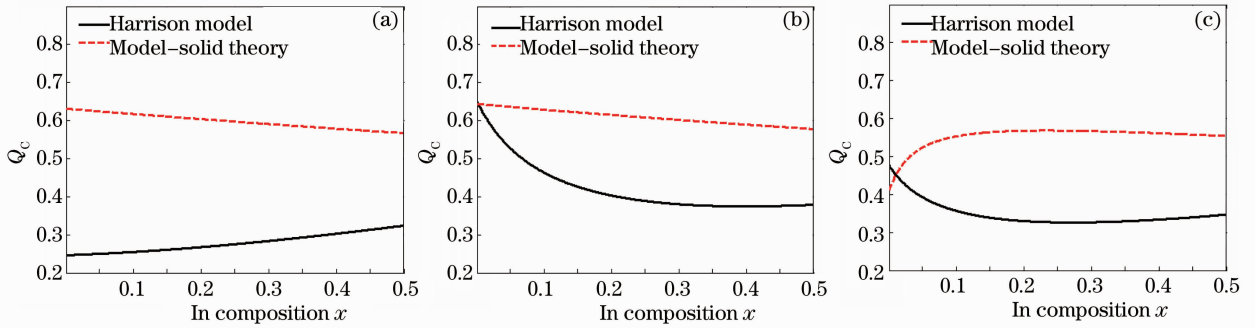


图2  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  应变量子阱导带偏置比, 衬底分别为 (a) GaAs, (b)  $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}$  和 (c)  $\text{GaAs}_{0.95}\text{P}_{0.05}$

Fig. 2 Conduction band offset ratios of  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  strained quantum wells (QWs) with (a) GaAs barrier, (b)  $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}$  barrier and (c)  $\text{GaAs}_{0.95}\text{P}_{0.05}$  barrier

图 2(b) 是用两种不同模型计算所得的  $\text{InGaAs}/\text{AlGaAs}$  量子阱的能带偏置比。由图可知两种模型所得  $Q_c$  都随  $x$  增大而递减。对比文献[16]数据, 图 2(b) 也说明, 对于以  $\text{AlGaAs}$  作为势垒的  $\text{InGaAs}$  量子阱,  $\text{Model-solid}$  模型计算结果与文献报道实验数据吻合, 而  $\text{Harrison}$  模型的计算结果则偏离较远一些。

图 2(c) 是用两种不同模型计算所得的  $\text{InGaAs}/\text{GaAsP}$  量子阱的能带偏置比。与图 2(a) 和 (b) 不一样,  $\text{Model-solid}$  模型所得  $Q_c$  随  $x$  增大先急剧增大后趋于定值, 而  $\text{Harrison}$  模型所得  $Q_c$  随  $x$  增大先递减再趋于定值。对比表 3 中文献[11]的数据, 对于  $\text{GaAsP}$  作为势垒的  $\text{InGaAs}$  量子阱, 两种模型计算结果与文献报道实验数据均存在一定程度的偏离。

综合起来考虑, 可以认为, 在计算应变量子阱的带边偏置时,  $\text{Model-solid}$  模型比  $\text{Harrison}$  模型更适合用于计算  $\text{InGaAs}$  量子阱的带边偏置。

图 3 给出了  $\text{Model-solid}$  模型计算的  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 、 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}$  和  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}_{0.95}\text{P}_{0.05}$  材料体系导带能带偏置比和导带能带偏置随  $\text{In}$  组分变化图。从图 3(a) 可以看出,  $\text{In}$  组分相同时, 衬底为  $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}$  的材料导带能带偏置比最大, 而衬底为  $\text{GaAs}_{0.95}\text{P}_{0.05}$  材料的最小。从图 3(b) 可以看出, 衬底为  $\text{GaAs}_{0.95}\text{P}_{0.05}$  的材料导带偏置能量比衬底为  $\text{GaAs}$  的大, 因为  $\text{GaAs}_{0.95}\text{P}_{0.05}$  材料的禁带宽度比较大。  $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}$  材料具有最大的导带能带偏置比和最大的导带偏置。

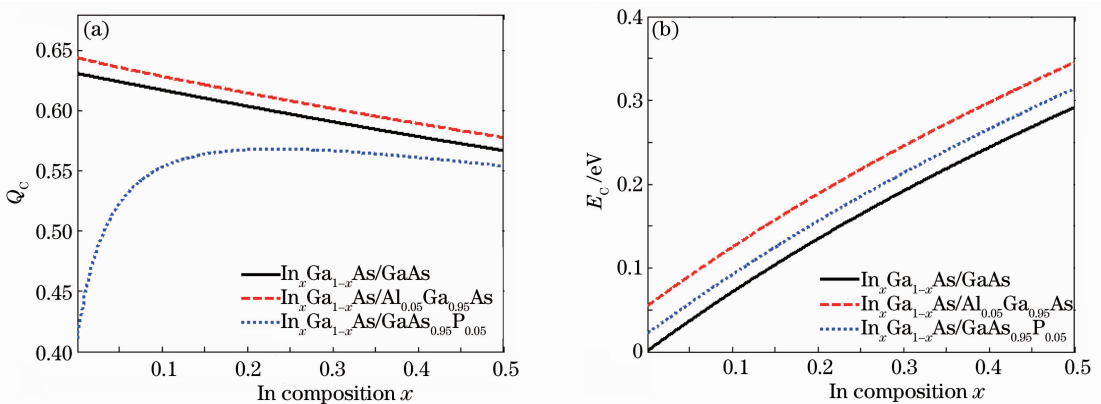


图 3 用  $\text{Model-solid}$  模型计算所得 (a) 应变量子阱导带能带偏置比和 (b) 应变量子阱导带偏置能量

Fig. 3 (a) Conduction band offset ratios and (b) conduction band offsets of three strained QWs calculated with  $\text{Model-solid}$  theory

就能带偏置而言, 一般来讲, 导带能带偏置越大, 意味着量子阱的深度越深, 因而量子阱对载流子的约束能力就越强, 载流子的热泄漏就会越少, 宏观表现上就是激光器件的温度性能越好, 即激光能承受越高的温度上升。因此, 大的导带能带偏置对于激光器是有益的。另一方面, 就能带偏置比而言, 当载流子浓度较大时, 过高的能带偏置比会抑制电子和空穴在多量子阱中的平均分布, 而适中的能带偏置比则有助于电子和空

穴在多量子阱中的平均分布,有助于提高激光器件的内量子效率,所以适中的能带偏置比对激光器是有利的。综合图 3(a)和(b),可以看到,以 GaAsP 为势垒的 InGaAs 量子阱具有较为适中的能带偏置比和较高的导带偏置,因而相比起来 GaAsP 是 InGaAs 量子阱最为合适的势垒材料。

图 4(a)给出了用 Model-solid 模型计算的  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$  压应变量子阱,当 In 组分  $x$  从 0~0.5 变化时,导带能带偏置比  $Q_c$  随 Al 组分的变化关系图。由图可知,在 In 含量不变的情况下,势垒中 Al 含量  $y < 0.1$  时,  $Q_c$  迅速增大;当  $0.1 < y < 0.5$  时,  $Q_c$  迅速减小;当  $0.5 < y < 1$  时,  $Q_c$  迅速增大。在 Al 含量不变的情况下,随着势阱中 In 含量的增加,  $Q_c$  减小。图 4(b)给出了导带能带偏置  $\Delta E_c$  随 Al 组分的变化关系图。在 In 含量不变的情况下,随着 Al 含量的增加,分配给导带的电势带阶  $\Delta E_c$  逐渐增大,即 Al 含量越大,对应量子阱深度就越深,因此可以直接用 Al 的含量来表示量子阱的深度。在 Al 含量不变的情况下,随着势阱中 In 含量的增加,  $\Delta E_c$  逐渐增大。综合图 4(a)和(b)可以看出,Al 含量大于 0.1 后,其含量继续增大对能带偏置比的贡献就不明显了,要使以  $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$  为势垒的  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  量子阱具有较为适中的能带偏置比和较高的导带偏置,则势垒中 Al 含量  $y \approx 0.1$  是最佳的,势阱中 In 含量  $x < 0.2$  是较好的。

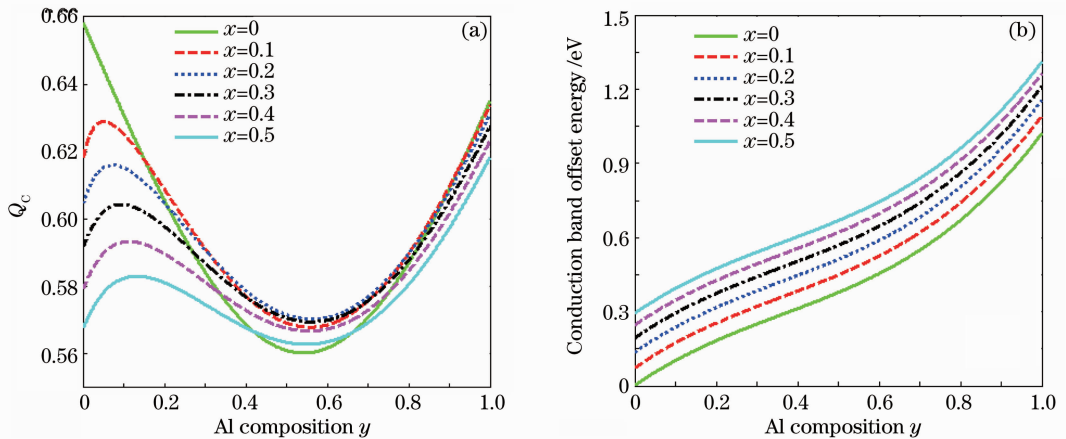


图 4  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$  压应变量子阱, In 组分  $x=0\sim 0.5$  时, (a) 导带能带偏置比和 (b) 导带偏置能量随 Al 组分的变化关系

Fig. 4 (a) Relation between conduction band offset ratio and Al molar fraction and (b) relation between conduction band offset and Al molar fraction for  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$  compressively strained QWs, when In composition  $x=0\sim 0.5$

禁带宽度对能带偏置也有直接影响。图 5(a)给出了  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}$  压应变量子阱的禁带宽度  $E_g$  与 In 组份  $x$  的关系。由图 5(a)可知,当 In 组分  $x$  增加时,禁带宽度  $E_g$  减小,所以分配给导带的电势带阶  $\Delta E_c$  将会增大,这与图 4(b)的分析结果一致;当引入压应变时禁带宽度  $E_g$  增大,这是因为压应变量子

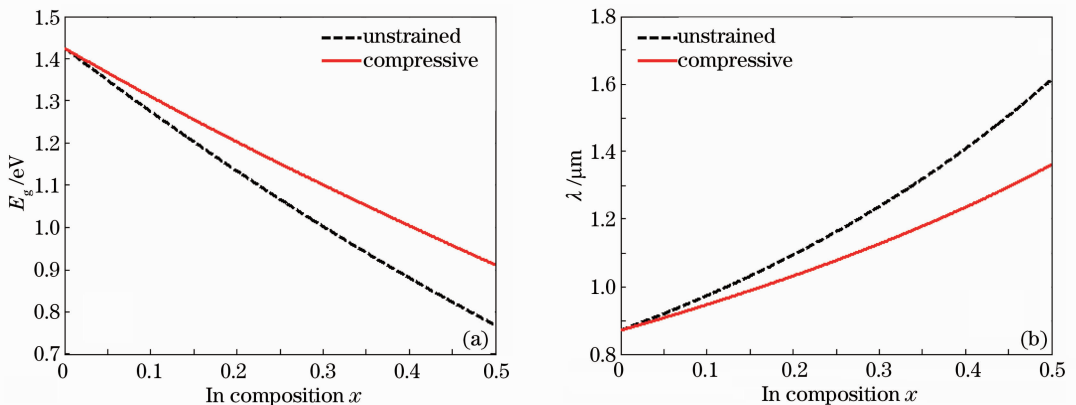


图 5  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}$  压应变量子阱 (a) 禁带宽度与 In 组分  $x$  的关系及 (b) 发射波长与 In 组分  $x$  的关系  
Fig. 5 (a) Relation between band gap and In composition  $x$  and (b) relation between emission wavelength and In composition  $x$  for  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}$  compressively strained QWs

子阱结构导带向上漂移,价带向下漂移,有源区的禁带宽度比无应变时的禁带宽度增宽,则相应的导带电势带阶  $\Delta E_C$  比无应变时减小。

图 5(b)给出了  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{As}$  压应变量子阱发射波长与 In 组份  $x$  的关系。当  $x=0\sim 0.5$  时,发射波长增大,无应变的波长变化范围是  $0.87\sim 1.62\ \mu\text{m}$ ,引入压应变时的波长变化范围是  $0.87\sim 1.36\ \mu\text{m}$ ,从而填补了用匹配材料难以实现的波长范围。这些能带结构的改变正是人们所期望的十分重要的能带工程,它改变了传统无应变量子阱激光器中轻的导带有效质量与非常重的价带有效质量之间的巨大不对称性,从而更有利于提高激光器的性能。

## 4 结 论

本文利用 Model-solid 及 Harrison 两种模型计算不同势垒材料(GaAs、AlGaAs 和 GaAsP)的 InGaAs 量子阱的能带偏置比,然后将计算结果与文献数据比较,从而选择出适合于 InGaAs 量子阱能带偏置比计算的模型是 Model-solid 模型,GaAsP 是 InGaAs 量子阱最为合适的势垒材料。以  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$  压应变量子阱为例,讨论了引入应变、量子阱材料组分、势垒材料组分、禁带宽度对能带偏置的影响,得到了以下结论:量子阱中压应变的引入将会改变量子阱结构,使得导带向上漂移,价带向下漂移,从而增大禁带宽度  $E_g$ ,减小能带偏置  $\Delta E_C$ ,使量子阱变浅;在 Al 含量不变的情况下,势阱中 In 含量的增加会增大导带能带偏置  $\Delta E_C$ ,但减小导带偏置比  $Q_C$ ,即分配给价带的电势带阶  $\Delta E_V$  会更多一些;在 In 含量不变的情况下,随着 Al 含量的增加,分配给导带的电势带阶  $\Delta E_C$  逐渐增大,即 Al 含量越大,导带能带偏置越大,意味着量子阱的深度越深;量子阱的阱深主要影响对载流子的约束能力、量子阱的增益、温度稳定性、对抽运光的吸收等,太浅的阱会造成大量载流子的泄漏,从而直接降低量子阱的增益和温度稳定性,而太深的阱又会减小量子阱对抽运光的吸收,带来降低激光器量子效率、加速热熄灭等不利影响,InGaAs/AlGaAs 量子阱的阱深即 Al 含量  $y\approx 0.1$  是较佳值,势阱中 In 含量  $x<0.2$  是较佳值。以上模拟分析结果为量子阱能带结构的设计和 optimization 提供了一定的理论依据,对器件工艺具有一定的指导意义。

## 参 考 文 献

- Hua Lingling, Zhang Peng, Zhang Xiao *et al.*. Calculation of band offset ratio of strained quantum wells[J]. *China Science and Technology Information*, 2009, (6): 44~45  
华玲玲, 张 鹏, 张 晓 等. 应变量子阱带边不连续性计算[J]. 中国科技信息, 2009, (6): 44~45
- Song Yanrong, Guo Xiaoping, Wang Yonggang *et al.*. An novel laser: optically pumped vertical external cavity surface emission laser[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2005, **34**(10): 1448~1450  
宋晏蓉, 郭晓萍, 王勇刚 等. 新型光泵浦垂直外腔面发射半导体激光器[J]. 光子学报, 2005, **34**(10): 1448~1450
- Ni Yanhai. Study on Novel Optically-Pumped Vertical-External-Cavity Surface-Emitting Lasers[D]. Chongqing: Chongqing Normal University, 2011. 1~15  
倪滨海. 新型垂直外腔面发射激光器研究[D]. 重庆: 重庆师范大学, 2011. 1~15
- Liu Xiangnan, Wang Xiaohua, Wang Fei *et al.*. Analysis of thermal characteristic in optically pumped semiconductor vertical-external-cavity surface-emitting laser with double heatspreaders [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2011, **48**(9): 091404  
刘向南, 王晓华, 王 菲 等. 双散热片结构光抽运垂直外腔面发射激光器的热特性分析[J]. 激光与光电子学进展, 2011, **48**(9): 091404
- Zhang Peng, Yu Weiming, Song Yanrong *et al.*. Semiconductor saturable absorber mirror mode-locked optically pumped vertical-external-cavity surface-emitting semiconductor lasers[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2006, **43**(6): 52~57  
张 鹏, 于未茗, 宋晏蓉 等. 半导体可饱和吸收镜锁模光抽运垂直外腔面发射半导体激光器[J]. 激光与光电子学进展, 2006, **43**(6): 52~57
- Chen Baizhong, Dai Teli, Liang Yiping *et al.*. Finite element analysis of thermal management in optical pumping semiconductor vertical-external cavity surface-emitting laser [J]. *Chinese J. Lasers*, 2009, **36**(10): 2745~2750  
陈柏众, 戴特力, 梁一平等. 用有限元法讨论光抽运垂直外腔面发射半导体激光器的散热性能[J]. 中国激光, 2009, **36**(10): 2745~2750
- C. G. Van de Walle. Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory[J]. *Phys. Rev. B*, 1989, **39**(3):

1871~1883

- 8 W. A. Harrison. Elementary theory of heterojunctions[J]. *J. Vac. Sci. Technol.*, 1997, **14**(4): 1016~1021
- 9 Song Yanrong, Hua Lingling, Zhang Peng *et al.*. Calculation of band structure of InGaAs/GaAs strained quantum wells [J]. *J. Beijing University of Technology*, 2011, **37**(4): 565~569  
宋晏蓉, 华玲玲, 张 鹏 等. InGaAs/GaAs 应变量子阱能带结构的计算[J]. 北京工业大学学报, 2011, **37**(4): 565~569
- 10 Hua Lingling, Song Yanrong, Zhang Peng *et al.*. Study on the gain characteristics of optically pumped semiconductor laser [J]. *Acta Optica Sinica*, 2010, **30**(6): 1702~1708  
华玲玲, 宋晏蓉, 张 鹏 等. 光抽运半导体激光器增益特性研究[J]. 光学学报, 2010, **30**(6): 1702~1708
- 11 Peng Zhang, Yanrong Song, Jinrong Tian *et al.*. Gain characteristics of the InGaAs strained quantum wells with GaAs, AlGaAs, and GaAsP barriers in vertical-external-cavity surface-emitting lasers[J]. *J. Appl. Phys.*, 2009, **105**(5): 053103
- 12 Wang Xuerong, Wei Liping, Zheng Huibao *et al.*. Al contents of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  epitaxial films studied by photoluminescence technique[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2012, **49**(5): 051601  
王雪蓉, 魏莉萍, 郑会保 等. 利用光致发光法测定  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  外延膜中的铝元素含量[J]. 激光与光电子学进展, 2012, **49**(5): 051601
- 13 Zhang Yan, Ning Yongqiang, Zhang Jinsheng *et al.*. Structural design of 808 nm InGaAlAs vertical cavity surface emitting laser[J]. *Chinese J. Lasers*, 2011, **38**(9): 0902007  
张 艳, 宁永强, 张金胜 等. 808 nm InGaAlAs 垂直腔面发射激光器的结构设计[J]. 中国激光, 2011, **38**(9): 0902007
- 14 J. P. Reithmaier, R. Hoyer, H. Riechert *et al.*. Band offset in elastically strained InGaAs/GaAs multiple quantum wells determined by optical absorption and electronic Raman scattering[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1990, **56**(6): 536~538
- 15 S. Niki, C. L. Lin, W. S. C. Chang *et al.*. Band-edge discontinuities of strained-layer  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  heterojunctions and quantum wells[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1989, **55**(13): 1339~1341
- 16 N. Debbar, Dipankar Biswas, Pallab Bhattacharya. Conduction-band offsets in pseudomorphic  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$  quantum wells ( $0.07 \leq x \leq 0.18$ ) measured by deep-level transient spectroscopy[J]. *Phys. Rev. B*, 1989, **40**(2): 1058~1063