

文章编号: 0253-2239(2008)08-1565-06

# PbTe/CdTe 量子阱光学性质的研究

徐天宁<sup>1,2</sup> 李家辉<sup>1</sup> 张磊<sup>1</sup> 吴惠桢<sup>1</sup>

(<sup>1</sup> 浙江大学物理系, 浙江 杭州 310027; <sup>2</sup> 浙江工业大学之江学院理学系, 浙江 杭州 310024)

**摘要** PbTe/CdTe 量子阱是一类新型异系低维结构材料, 实验观察到具有强的室温中红外光致发光现象。建立了理论模型, 计算了 PbTe/CdTe 量子阱的自发辐射率和光学增益。模型中量子阱分立能级的计算采用  $k \cdot p$  包络波函数方法和有限深势阱近似, 考虑了 PbTe 能带结构的各项异性和阱层中应变对能级的影响。计算了 PbTe/CdTe 量子阱自发辐射谱与带间弛豫和注入载流子浓度间的依赖关系, 计算结果与实验观察到的光致发光峰相符合。自发辐射谱线峰位随着注入载流子浓度的增加而出现蓝移, 当载流子浓度从  $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  增加到  $2.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , 基态发射峰从 372 meV 蓝移到 397 meV, 而第一激发态发射峰蓝移量为 15 meV。上述蓝移现象是由载流子与载流子及载流子与声子间的相互作用引起的。与 PbTe 体材料相比, PbTe/CdTe 量子阱结构具有更高的增益强度(提高近 15 倍)和更宽的增益区, 因而该体系可能是实现室温连续工作的中红外激光器的理想材料。

**关键词** IV-VI 半导体光学; PbTe/CdTe 量子阱;  $k \cdot p$ ; 包络波函数; 自发辐射

**中图分类号** O472+.3 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS20082808.1565

## Optical Properties of PbTe/CdTe Quantum Wells

Xu Tianning<sup>1,2</sup> Li Jiahui<sup>1</sup> Zhang Lei<sup>1</sup> Wu Huizhen<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou, Zhejiang 310027, China

<sup>2</sup> Department of Science, Zhijiang College of Zhejiang University of Technology, Hangzhou, Zhejiang 310024, China

**Abstract** Intense room-temperature midinfrared luminescent emission has been observed in PbTe/CdTe quantum wells. A theoretical model is developed to study the spontaneous emission and optical gain of the new heterostructure. In the model the discrete energy level is calculated based on the  $k \cdot p$  envelope function method and finite-confinement-potential approximation. Strain effects and anisotropic band structure characteristics of PbTe are taken into account. The dependences of spontaneous emission spectra on intraband relaxation and carrier density are investigated. It is shown that the calculation results are in agreement with the experimental data of photoluminescence. For PbTe/CdTe quantum wells (QWs) with well width of 20 nm, two emission peaks are dominant in the spontaneous emission spectra, which blueshift with carrier density increasing while intraband relaxation is considered in calculation. The shift of ground state emission is from 372 meV to 397 meV and that of the first excited state emission is 15 meV, as the carrier density increases from  $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  to  $2.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . The shifts of transition energies are attributed to carrier-carrier and carrier-phonon scattering mechanisms. As compared to the PbTe bulk material, the PbTe/CdTe QWs have higher and broader optical gain, which make them a promising material for mid-infrared laser operating in continuous-wave mode at room temperature.

**Key words** IV-VI semiconductor optics; PbTe/CdTe quantum wells;  $k \cdot p$ ; envelope function approach; spontaneous emission

**收稿日期**: 2007-04-29; **收到修改稿日期**: 2007-11-05

**基金项目**: 国家自然科学基金(10434090)和教育部博士点基金(20060335035)资助课题。

**作者简介**: 徐天宁(1980-), 男, 博士研究生, 主要从事 IV-VI 半导体材料低维结构制备及其光学性质等方面的研究。

E-mail: xtn9886@zju.edu.cn

**导师简介**: 吴惠桢(1959-), 男, 教授, 博士生导师, 主要从事半导体纳米光电子材料物理与半导体光电子器件等方面的研究。E-mail: hzwu@zju.edu.cn (通信联系人)

## 1 引 言

硫族铅化物 PbS, PbSe 和 PbTe 具有很多独特的物理性质: 对称的能带结构、强烈依赖于温度的能隙、重空穴带的缺失、低的俄歇复合率等<sup>[1]</sup>。这些特性使得它们在制备中红外激光器和探测器方面具有重要的应用。基于硫族铅化物的量子阱和超晶格结构, 如 PbSe/PbSrSe, PbTe/CdTe 和 PbTe/PbEuTe 等, 由于量子限制效应和台阶状态密度分布能改善器件性能如降低阈值电流和提高工作温度, 因而受到广泛关注<sup>[2~5]</sup>。最近在 PbTe/CdTe 单量子阱异质体系观察到强的中红外光致发光现象, 该现象即使在高于室温条件下仍能被观察到<sup>[2]</sup>。这使得硫族铅化物半导体激光器有可能实现室温连续波(Continuous-wave)方式工作。要利用 PbTe/CdTe 量子阱这一新的异质结构制备光电器件, 首先需要对其发光机制和光学增益进行研究。

硫族铅化物具有窄的直接带隙, 能带极值位于布里渊区四个等价的 L 点处, 等能面为扁长的旋转椭球面, 椭球长轴沿  $\langle 111 \rangle$  方向, 椭球的长短轴分别由纵向和横向有效质量表征。硫族铅化物这些本征特性使得 IV-VI 族半导体量子阱中的光学跃迁行为要比 III-V 族和 II-VI 族半导体量子阱的复杂得多。在沿  $[100]$  取向生长的 PbTe/CdTe 量子阱中, 量子限制和应变影响都不能解除 L-能谷的四度简并, 因而计算中必须考虑每个能谷对光发射的贡献。虽然 PbTe 和 CdTe 的晶格失配仅为  $-0.27\%$ , 但计算表明 PbTe 阱层中的应变对光跃迁能的影响不可忽略。在类似小晶格失配体系中考虑应变影响能使理论计算与实验数据获得较好的符合<sup>[6]</sup>。

本文给出了计算 PbTe/CdTe 量子阱自发辐射和光学增益的理论模型。模型基于  $k \cdot p$  包络波函数方法和有限深方势阱近似, 考虑了硫族铅化物能带结构的各项异性和非抛物性特征。同时也考虑了应变对量子阱中分立能级和光跃迁的影响。

## 2 理 论

PbTe/CdTe 量子阱异质结如图 1 所示。量子阱能带结构为 type I<sup>[2]</sup>。由于缺少 PbTe/CdTe 异质界面的带阶参量, 计算中我们把带阶参量  $Q$  设为  $11/12$  (非对称能带)<sup>[7]</sup> 和  $1/2$  (对称能带)。PbTe 和 CdTe 在 300 K 下的能隙分别为  $0.32 \text{ eV}$ <sup>[8]</sup> 和  $1.52 \text{ eV}$ <sup>[9]</sup>。等能面的各项异性求解可以通过计算导带和价带极值处的载流子迁移有效质量  $m_w^*$  进行。根据硫族铅

化物体材料和量子阱的能量色散关系可以推导出沿  $[001]$  方向即量子阱的限制方向的载流子迁移有效质量为  $m_w^* = 3m_t^* m_l^* / (2m_t^* + m_l^*)$ <sup>[10]</sup>。在量子阱平面内的载流子有效质量为  $m_x = m_t^*$  和  $m_y = (m_t^* + 2m_l^*)/3$ <sup>[11]</sup>。根据 300 K 下纵向和横向有效质量  $m_l^*$  和  $m_t^*$ <sup>[12]</sup>, 可以计算得到 PbTe/CdTe 量子阱中电子和空穴的迁移有效质量分别为  $m_{ew}^* = 0.043m_0$  和  $m_{hw}^* = 0.050m_0$ 。CdTe 势垒材料中的电子和空穴有效质量分别为  $m_e^* = 0.11m_0$  和  $m_h^* = 0.35m_0$ 。<sup>[13]</sup>

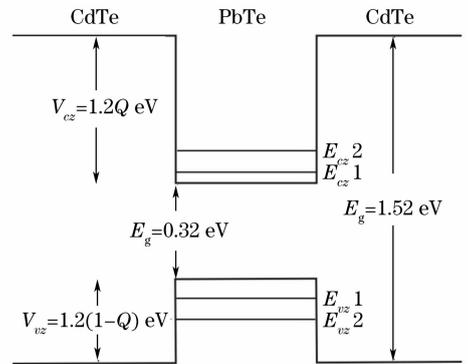


图 1 PbTe/CdTe 量子阱能带结构示意图。Q 为带阶参量  
Fig. 1 Energy-band structure of PbTe/CdTe quantum well at 300 K. The Q is band-offset parameter

PbTe/CdTe 量子阱中应变对光学跃迁的影响作如下考虑。假设只有 PbTe 阱层存在应变而 CdTe 势垒层无应变。因而应变 PbTe 阱层材料的带隙是无应变下的 PbTe 带隙  $E_g$  与应变修正项  $\delta E_g$  之和。PbTe 禁带的变化将影响阱中分立能级和光学跃迁矩阵元的计算 (参见附录 1 和 2)。应变修正项可写为

$$\delta E_g = (D_d + D_u/3)(2\epsilon_{\parallel} + \epsilon_{\perp}), \quad (1)$$

式中  $D_d = D_d^c - D_d^v$  和  $D_u = D_u^c - D_u^v$  是导带和价带形变势的差值,  $(\epsilon_{\parallel}, \epsilon_{\perp})$  是应变张量分量,  $\epsilon_{\perp} // [001]$ ,  $\epsilon_{\parallel} // [100]$ , 或  $[010]$ 。根据 300 K 下的弹性常数<sup>[14]</sup> 和  $\epsilon_{\perp} = (-2C_{12}/C_{11})\epsilon_{\parallel}$  可得  $\epsilon_{\perp} = -0.14\epsilon_{\parallel}$ , 因而计算  $\delta E_g$  时只有  $\epsilon_{\parallel}$  和  $(D_d, D_u)$  为待定参量。由于缺少 PbTe/CdTe 量子阱的高分辨 X 射线衍射数据, 无法获知阱层材料的应变弛豫情况。我们假设 PbTe 阱层是完全应变的, 对所有量子阱而言  $\epsilon_{\parallel}$  都由  $\epsilon_{\parallel} = (a_{\text{CdTe}} - a_{\text{PbTe}})/a_{\text{PbTe}}$  计算得到。形变势参量采用第一性原理计算得到的数值,  $D_d = 4.57 \text{ eV}$ ,  $D_u = -2.17 \text{ eV}$ <sup>[15]</sup>。

PbTe/CdTe 量子阱中自发辐射产生于导带中电子和价带中空穴的复合, 激子效应由于 PbTe 具有高介电常数 ( $\sim 400$ )<sup>[16]</sup> 而可以忽略。PbTe/CdTe

量子阱各向异性和非抛物能带近似下的量子能级和光学跃迁矩阵元计算分别在附录 I 和 II 中给出。PbTe/CdTe 量子阱自发辐射率可写为

$$R_{sp}(E) = \frac{8\pi n_r^2 E^2}{h^3 c^2} \frac{f_c(1-f_v)}{f_c - f_v} G(E) = \frac{n_r e^2 E}{\pi \hbar^2 c^3 \epsilon_0 m_0^2} \sum_n |P_{cv}^\sigma|^2 \int_0^\infty dE_t \rho_r^{2D} f_c(E_t) \times [1 - f_v(E_t)] B_{cv}(E_t - E), \quad (2)$$

式中  $f_c$  是导带中电子的布居概率函数,  $f_v$  是价带中空穴的布居概率函数,  $n_r$  是 PbTe 的折射率,  $E_t = \hbar^2 k_t^2 / 2m_r$ ,  $m_r$  是量子阱平面内电子和空穴的约化有效质量,  $\rho_r^{2D}$  是约化态密度。(2)式考虑了洛伦兹线型展宽<sup>[17]</sup>:

$$B_{cv}(E_t - E) = \frac{\Gamma_{cv}/2\pi}{(E_{nt} + E_t - E)^2 + (\Gamma_{cv}/2)^2}, \quad (3)$$

式中  $\Gamma_{cv}$  为线宽, 表示偏振失相或散射率。

### 3 结果和讨论

根据上述理论模型计算了 PbTe/CdTe 量子阱的自发辐射率和光学增益。计算中用到的其他参量如下, PbTe 折射率  $n_r = 5.5$ , 线宽  $\Gamma_{cv}$  选择范围为  $0 \sim 20$  meV, 计算光学跃迁矩阵元时我们用了  $m_\perp = m_{et}^*$  和  $m_\parallel = m_{el}^*$ 。首先讨论带阶比和应变对跃迁能的影响。图 2 是非抛物近似下的基态跃迁能与阱宽的变化关系曲线。实线和虚线表示非对称能带下 ( $Q=11/12$ ) 计算得到的光学跃迁能, 区别在于前者考虑了应变对跃迁能的影响, 而后者未考虑应变的影响。点线表示带阶参量为  $1/2$  并考虑应变影响的计算结果。图 2 插图中的实线表示采用不同带阶参量计算的跃迁能差值与阱宽的变化关系, 虚线表示

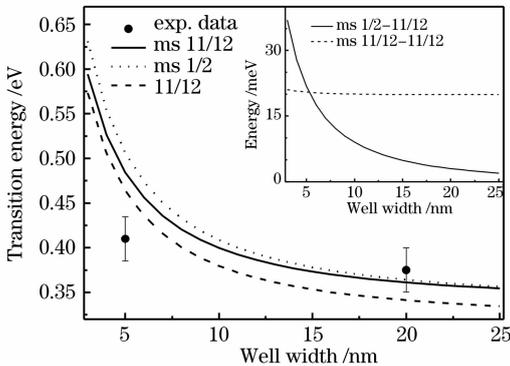


图 2 PbTe/CdTe 量子阱中跃迁能与阱宽的变化关系曲线 (300 K)

Fig. 2 Transition energy as a function of PbTe well width in PbTe/CdTe quantum well at 300 K

应变对跃迁能的影响与阱宽的变化关系。可以看出, 随着阱宽从 5 nm 增加到 25 nm, 带阶参量引起的跃迁能之差从 22 meV 减小到 2 meV, 表明对宽量子阱而言, 带阶参量的选择对计算结果影响不大。计算中考虑应变使得基态跃迁能增加  $\sim 20$  meV。由于不考虑应变弛豫, 应变引起跃迁能的增量不随阱宽变化。以阱宽为 20 nm 的 PbTe/CdTe 量子阱为例, 考虑应变影响能使计算结果与实验光致发光峰位<sup>[2]</sup>更好地符合。但是, 理论结果和实验测量值之间仍存在 10 meV 左右的差别, 这主要由于带间弛豫效应和载流子注入浓度引起 (可以从随后的理论计算得到证明)。应该指出, 对窄量子阱 (5 nm) 而言, 理论计算与实验结果有较大的偏离。一个可能的原因是我们的模型基于  $k \cdot p$  包络波函数方法, 该方法更适合计算宽量子阱和能量靠近能带极值的情况。另一个原因是窄量子阱阱宽的微小波动对跃迁能计算影响很大, 而对宽量子阱而言影响较小。如图 2 所示, 阱宽为 4 nm 和 6 nm 量子阱的跃迁能差别有  $\sim 70$  meV, 而阱宽为 19 nm 和 21 nm 量子阱的跃迁能差别仅为  $\sim 3$  meV。因此, 基于上述分析我们在计算 PbTe/CdTe 量子阱自发辐射率和光学增益时主要以 20 nm 宽量子阱为例, 采用  $11/12$  的带阶参量并考虑应变影响。

图 3 为不同线宽  $\Gamma_{cv}$  下计算得到的自发辐射谱线。计算给出的零线宽自发辐射谱线具有尖锐的台阶状结构, 但随着线宽的增加, 谱线出现展宽并变得光滑。而实验上观察到的发射谱线也是光滑的曲线, 说明计算中考虑展宽是必要的。发射谱线的展

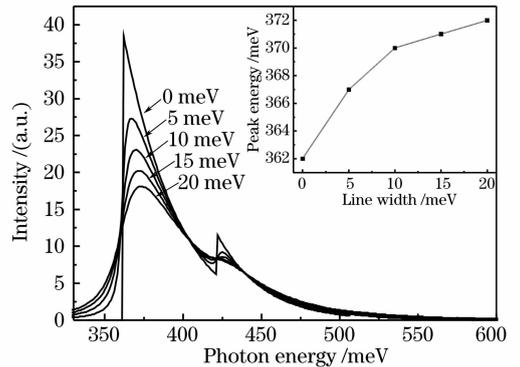


图 3 不同线宽下的 PbTe/CdTe 量子阱自发辐射谱。基态发射峰与线宽的变化关系如插图所示

Fig. 3 Spontaneous emission spectra of PbTe/CdTe single quantum well as a function of photon energy with line width as a parameter. The emission peak blueshift from ground state transition with line width increasing is shown in the inset

宽是因为当载流子注入量子阱的过程中,载流子与载流子之间以及载流子与声子之间存在散射等相互作用使得载流子在阱中重新分布,即所谓的带间弛豫现象<sup>[18]</sup>。带间弛豫可由带间弛豫时间  $\tau_{in}$  表征, $\tau_{in}$  由载流子与载流子,载流子与声子散射等机制决定,其大小为单位时间里载流子受到散射几率的倒数。由于 PbTe/CdTe 量子阱作为一种新的异质体系未被广泛研究,目前很难通过计算获得该体系的带间弛豫时间并指出哪种散射机制起主导作用。因此我们只考虑带间弛豫对发射谱的影响,不去探讨带间弛豫的根源。根据 M. Asada<sup>[18]</sup> 的研究,带间弛豫时间  $\tau_{in}$  与线宽  $\Gamma_{cv}$  的关系为  $1/\tau_{in} = \Gamma_{cv}/\hbar$ 。线宽  $\Gamma_{cv}$  增加说明载流子受到的散射几率增加, $\tau_{in}$  减小,载流子与载流子或者载流子与声子的相互作用明显使得能谱展宽<sup>[19]</sup>。随着线宽从 0 增加到 20 meV,谱线变宽,而且基态发射峰出现 10 meV 的蓝移(图 3 插图所示)。该蓝移现象的根源在于能量-时间的测不准关系  $\Gamma_{cv} \cdot \tau_{in} \approx \hbar$ ,即  $\Gamma_{cv}$  增加, $\tau_{in}$  减小,电子和空穴由于受到散射的影响而不再严格按照费米分布函数进行能带填充。当线宽给定,发射谱随着注入载流子浓度的增加而变化。

图 4(a) 为不同载流子浓度下的自发辐射谱(线宽为 20 meV)。如图中虚线所示,基态发射峰随载

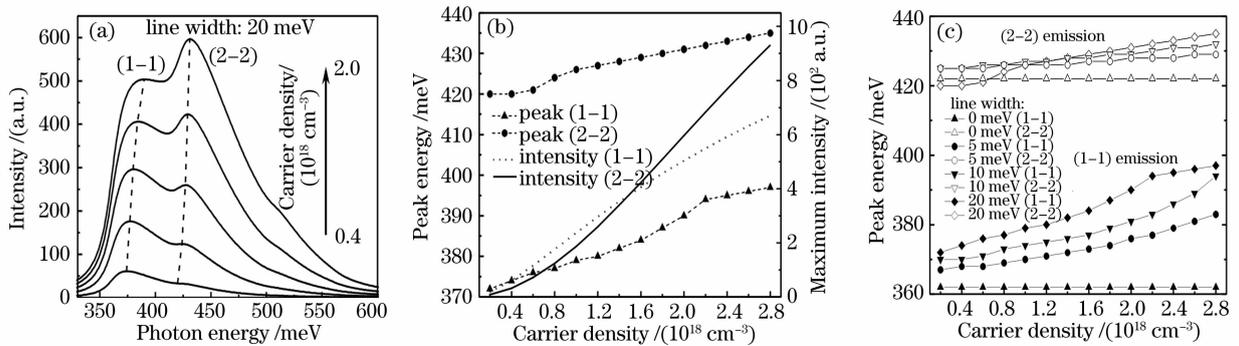


图 4 (a)不同载流子浓度下的 PbTe/CdTe 量子阱自发辐射谱, (b) 发射峰位及其强度与载流子浓度的变化关系曲线, (c) 发射峰与载流子和线宽的变化关系曲线

Fig. 4 (a) Spontaneous emission spectra of PbTe/CdTe single quantum well with carrier density as a parameter, (b) dependences of the emission peak shifts and the emission intensity on carrier density, (c) shifts of emission peak energy as a function of carrier density with line width as a parameter

PbTe/CdTe 量子阱的光学增益是利用该异质体系制备激光器的一个重要参量。图 5 给出了不同载流子浓度下的 PbTe/CdTe 量子阱的光学增益曲线。当注入载流子浓度为  $1.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  开始出现光学增益,增益谱为单峰曲线,增益峰位于 368 meV。当载流子浓度增加到  $1.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  时,在 425 meV 附近开始出现第二个增益峰,其峰强随载流子浓度增加

而逐渐超过第一个增益峰强。显然,位于 368 meV 的增益峰由基态能级电子空穴复合产生,而位于 425 meV 的增益峰由第一激发态能级的电子和空穴复合产生。两者峰强的变化主要由各自能级与准费米能的相对位置引起。与 PbTe 体材料光学增益进行比较(图 5 插图所示)<sup>[20]</sup> 可以看出,当注入载流子浓度为  $3.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  时,PbTe/CdTe 量子阱

流子浓度增加而出现明显的蓝移。这是因为当更多的载流子注入量子阱中时,基态和第一激发态间的能态将被填充,由于带间弛豫的影响,更多的高能态的电子和空穴参与复合使得总的跃迁能随载流子的增加而蓝移。基态发射峰强度随着载流子浓度的增加而增加并逐渐开始饱和。当载流子浓度达到  $1.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  时,第一激发态峰强与基态发射峰强相当,随后发射谱线中第一激发态发射峰起主导作用。这与实验观察到 PbTe/CdTe 量子阱光致发光谱是一致的,随着激发功率的增加,高能态发射峰变得明显<sup>[2]</sup>。图 4(b) 给出了发射峰位和强度与载流子浓度的变化关系。可以看到,当载流子浓度从  $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  增加到  $2.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ,基态发射峰从 372 meV 蓝移到 397 meV,而第一激发态发射峰从 420 meV 蓝移到 435 meV。发射峰位蓝移量同时也受到线宽大小的影响,零线宽时,发射峰位不随载流子浓度增加而变化,但随着线宽的增加,发射峰随着载流子浓度增加而明显蓝移,如图 4(c) 所示。应该指出,对窄带隙半导体材料而言,室温下的光致发光谱测量实验一般需要比较大的泵浦功率,才能获得信号比较强的红外荧光,因此光激发载流子浓度是比较容易达到  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 。

增益强度是体材料的 $\sim 15$ 倍,而且具有更宽的增益区。这表明用 PbTe/CdTe 量子阱异质结在降低 IV-VI 激光器的阈值电流,提高工作温度以及波长调制方面具有很大的潜力。

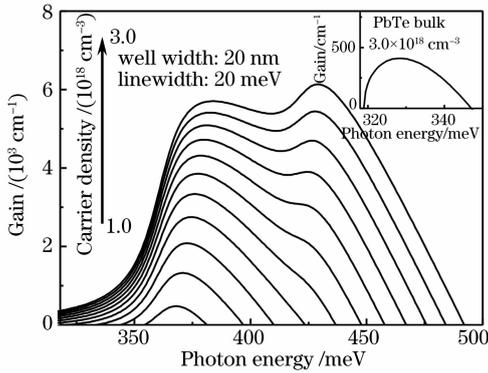


图 5 不同载流子浓度下 PbTe/CdTe 量子阱的增益理论曲线。插图 of PbTe 体材料光学增益理论曲线

Fig. 5 Calculated optical gain as a function of photon energy for PbTe/CdTe quantum wells with carrier density as a parameter. The inset is the gain for PbTe bulk with carrier density of  $3.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

## 4 结 论

我们建立了计算 PbTe/CdTe 量子阱自发辐射谱和光学增益的理论模型。模型基于  $k \cdot p$  包络波函数方法和有限深方势阱近似,考虑了 PbTe 材料等能面的各向异性和非抛物性,讨论了带阶参量和应变对跃迁能的影响。计算结果表明,对宽量子阱而言,带阶参量的选择对跃迁能的影响不大,而考虑应变可以使得计算结果更接近实验数据。对自发辐射谱而言,考虑载流子-载流子和载流子-声子间散射机制对谱线的形状和峰位的移动是必要的。同时自发辐射谱的强度和峰位也是注入载流子浓度的函数。计算得到的 PbTe/CdTe 量子阱的光学增益相比体材料而言具有更高的增益强度(提高了 $\sim 15$ 倍)和更宽的增益区,因而在中红外半导体光电器件方面具有潜在应用。本文的理论模型也适用于其他 IV-VI 半导体量子阱的发光特性的研究。

## 参 考 文 献

- Cao Chunfang, Wu Huizhen, Si Jianxiao *et al.*. Abnormal Raman spectra of PbTe crystalline thin films grown by molecular beam epitaxy[J]. *Acta Physica Sinica*, 2006, **55**(4): 2021~2026
- 曹春芳,吴惠楨,斯剑霄等. 分子束外延 PbTe 单晶薄膜的反常拉曼光谱研究[J]. *物理学报*, 2006, **55**(4): 2021~2026
- Mitsuaki Yano, Isao Makabe, Kazuto Koike. Photoluminescence characterized thermal mismatch of PbTe/CdTe single quantum wells

- grown on GaAs substrates[J]. *Phys. E*, 2004, **20**: 449~452
- H. Z. Wu, N. Dai, M. B. Johnson *et al.*. Unambiguous observation of subband transitions from longitudinal valley and oblique valleys in IV-VI multiple quantum wells[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2001, **78**(15): 2199~2201
- D. L. Partin. Lead salt quantum effect structures[J]. *IEEE J. Quant. Electron.*, 1988, **24**(8): 1716~1726
- P. J. McCann, K. Namjou, X. M. Fang. Above-room-temperature continuous-wave mid-infrared photoluminescence from PbSe/PbSrSe quantum wells[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1999, **75**(23): 3608~3610
- E. Abramof, E. A. de Andrada e Silva, S. O. Ferreira *et al.*. Optical spectra of PbTe/Pb<sub>1-x</sub>Eu<sub>x</sub>Te quantum wells[J]. *Phys. Rev. B*, 2001, **63**(8): 085304-1~8
- W. Heiss, H. Groiss, E. Kaufmann *et al.*. Centrosymmetric PbTe/CdTe quantum dots coherently embedded by epitaxial precipitation[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2006, **88**(19): 192109-1~3
- Shu Yuan, H. Krenn, G. Springholz *et al.*. Dispersion of absorption and refractive index of PbTe and Pb<sub>1-x</sub>Eu<sub>x</sub>Te ( $x < 0.05$ ) below and above the fundamental gap[J]. *Phys. Rev. B*, 1993, **47**(12): 7213~7226
- Kazuto Koike, Takayoshi Honden, Isao Makabe *et al.*. PbTe/CdTe single quantum wells grown on GaAs (100) substrates by molecular beam epitaxy[J]. *J. Cryst. Growth*, 2003, **257**: 212~217
- Majed F. Khodr, Patrick J. McCann, Bruce A. Mason. Effects of band nonparabolicity on the gain and current density in EuSe-PbSe<sub>0.78</sub>Te<sub>0.22</sub>-EuSe IV-VI semiconductor quantum-well lasers[J]. *IEEE J. Quant. Electron.*, 1996, **32**(2): 236~247
- Z. Shi, X. Lv, F. Zhao *et al.*. [110] Orientated lead salt midinfrared lasers[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2004, **85**(15): 2999~3001
- H. Preier. Recent advances in lead chalcogenide diode lasers[J]. *Appl. Phys.*, 1979, **20**: 189~206
- Sotirios Baskoutas, Andreas F. Terzis. Size-dependent band gap of colloidal quantum dots[J]. *J. Appl. Phys.*, 2006, **99**(1): 013708-1~4
- H. Zogg, S. Blunier, A. Fach *et al.*. Thermal-mismatch-strain relaxation in epitaxial CaF<sub>2</sub>, BaF<sub>2</sub>/CaF<sub>2</sub> layers on Si(111) after many temperature cycles[J]. *Phys. Rev. B*, 1994, **50**(15): 10801~10810
- L. G. Ferreira. Deformation potentials of lead telluride[J]. *Phys. Rev.*, 1965, **137**(5A): A1601~A1609
- G. M. T. Foley, D. N. Langenberg. Microwave magnetoplasma study of lattice and electronic properties of PbTe[J]. *Phys. Rev. B*, 1977, **15**(10): 4830~4849
- S. L. Chuang. *Physics of Optoelectronic Devices* [M]. New York: ohn Wiley & Sons. nc., 1995. Chapter 9. 363
- M. Asada. Intraband relaxation time in quantum-well lasers[J]. *IEEE J. Quant. Electron.*, 1989, **25**(9): 2019~2026
- M. Takeshima. Theory of the carrier-carrier and carrier-phonon interactions under double injection into undoped quantum wells and its application to a laser problem[J]. *Phys. Rev. B*, 1987, **36**(15): 8082~8093
- W. W. Anderson. Gain-frequency-current relation for Pb<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub>Te double heterostructure lasers[J]. *IEEE J. Quant. Electron.*, 1977, **13**(7): 532~543
- M. Asada, A. Kameyama, Y. Suematsu. Gain and intervalence band absorption in quantum-well lasers[J]. *IEEE J. Quant. Electron.*, 1984, **20**(7): 745~753
- Xu T N, Wu H Z, Si J X, P. J. McCann. Optical transitions in PbTe/CdTe quantum dots[J]. *Phys. Rev. B*, 2007, **76**: 155328-1~9
- Xu Tianning, Wu Huizhen, Si Jianxiao. Optical gain in PbTe/CdTe quantum dots[J]. *Acta Physica Sinica*, 2008, **57**(4): 2574~2581
- 徐天宁, 吴惠楨, 斯剑霄. PbTe/CdTe 量子点的光学增益[J].

物理学报, 2008, 57(4): 2574~2581

## 附录 1 应变 PbTe/CdTe 量子阱非抛物近似的能级和包络波函数计算

抛物能带中的量子能级可以用包络波函数方法进行近似计算。包络波函数由 Schrödinger-like 方程给出<sup>[10]</sup>:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} + V(z) \right] \varphi_n(z) = E_n \varphi_n(z),$$

式中  $m(z)$  为沿生长方向的阱层或势垒层的载流子有效质量,  $V(z)$  为势阱函数

$$V(z) = \begin{cases} 0, & (|z| < \omega_z/2) \\ V, & (|z| \geq \omega_z/2) \end{cases},$$

式中  $V = Q(E_g^b - E_g^w)$  为导带中电子受到的限制势,  $V = (1-Q)(E_g^b - E_g^w)$  为价带中空穴受到的限制势,  $Q$  为带阶参量,  $\omega_z$  为阱宽。根据包络波函数  $\varphi_n(z)$  和  $\frac{1}{m(z)} \frac{d\varphi_n(z)}{dz}$  在界面

连续性条件可以求得量子能级的计算式<sup>[10]</sup>

$$\frac{m_b}{m_w} \kappa \tan(\kappa \omega/2) = \beta,$$

$$\frac{m_b}{m_w} \kappa \cot(\kappa \omega/2) = -\beta,$$

式中  $\kappa = \pm \sqrt{2m_w E_n/\hbar^2}$  和  $\beta = \pm \sqrt{2m_b(V - E_n)/\hbar^2}$  分别为阱中和垒中的波矢,  $m_w$  和  $m_b$  分别为阱中和垒中的有效质量。对应变的 PbTe/CdTe 量子阱, 其非抛物近似下的量子能级可以如下计算, 阱层中有效质量  $m_w$  用非抛物近似的有效质量  $m_w(E_n) = m_w(1 + 2E_n/E_g^w)$ <sup>[10]</sup> 替换, 带隙  $E_g^w$  都用考虑应变修正后的  $E_g^w + \delta E_g$  替换。

## 附录 2 带间跃迁矩阵元计算

半导体量子阱中带间跃迁矩阵元可表示为

$$P_{cv}^{\sigma} = \langle \psi_{cn} | \mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cv} | \psi_{cn} \rangle,$$

式中  $c$  和  $v$  分别表示导带和价带,  $n$  表示分立能级指标,  $\psi_{cn}$  表示电子波函数, 当阱宽远大于晶格周期时可用下式表示<sup>[21]</sup>

$$\psi_{cn} = u_c(r) \exp(i\mathbf{k}_t \cdot \boldsymbol{\rho}) \varphi_{cn}(z),$$

式中  $\mathbf{k}_t = k_x \mathbf{x} + k_y \mathbf{y}$  和  $\boldsymbol{\rho} = x\mathbf{x} + y\mathbf{y}$  分别为量子阱内平面波矢和位置矢量,  $u_c(r)$  为布洛赫波函数周期性部分。对于 [100] 取向的 IV-VI 半导体量子阱, 其跃迁矩阵元的具体求解可以参见文献[22, 23]。