



一种量子级联激光器能带电子温度计算新方法^{*}

李光祥¹, 魏彪¹, 周海军¹, 孙远昆²

(1. 重庆大学 光电工程学院, 重庆 400044; 2. 电子科技大学 微波电真空器件国家级重点实验室, 成都 611731)

摘 要: 基于电子动能与温度的关系以及费米黄金定律, 对速率方程进行了优化, 使其能够计算电子温度, 进而实现了更为精准的速率方程求解。与已有的动能平衡法比较, 该方法对能带电子温度变化过程进行了详细的描述, 故无需采用优化算法求解, 所以可以避免因陷入局部最优解而带来的多次计算的收敛值一致性较差的问题。计算结果表明, 该方法在选取不同的初始温度时, 通过自洽求解, 即可解出各能级电子温度, 且均可获得一致性较好的收敛值。

关键词: 量子级联激光器; 速率方程; 能带电子温度; 数值仿真; 散射率

中图分类号: TN248

文献标志码: A

doi: 10.11884/HPLPB202335.220400

A new method for calculating electron temperature in subbands of quantum cascade lasers

Li Guangxiang¹, Wei Biao¹, Zhou Haijun¹, Sun Yuankun²

(1. College of Optoelectronic Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044, China;

2. National Key Laboratory of Science and Technology on Vacuum Electronics, University of Electronic Science and Technology, Chengdu 611731, China)

Abstract: Quantum cascade laser is a newly developed important medium and far infrared laser source. In view of the important parameter of energy band electron temperature in the research and design of quantum cascade lasers, based on the relationship between electron kinetic energy and temperature and Fermi Golden Rule, this paper optimizes the rate equation so that it can calculate the subband electron temperature, thus achieving a more accurate solution of the rate equation. The calculation results show that compared with the existing kinetic energy balance method, this method describes the process of electron temperature change in the energy band in detail, and there is no need to use the optimization algorithm for a solution. When different initial temperatures are selected, the electron temperature of each energy level can be solved by self-consistent solution, and the convergence value with good consistency can be obtained. The results show that the deviation of the convergence value of electron temperature from the mean value is less than 8%, and the deviation of scattering rate is less than 1.6%. This study provides a new method for the design and research of quantum cascade lasers.

Key words: quantum cascade lasers, rate equation, electron temperature of energy bands, numerical study, scattering rate

众所周知, 激光器是一种发射激光的装置, 迄今已有超过 60 年的发展历史。新近发展起来的量子级联激光器^[1], 是一种中、远红外激光光源, 因其在自由空间通信^[2-3]、气体检测^[4-5]、生物研究^[6-7]等方面有着广阔的应用前景而日益引人注目。对于研究和设计量子级联激光器, 数值仿真计算是一个十分重要的环节, 其仿真计算包括求解电子的波函数以及速率方程^[8]。在求解速率方程的过程中, 电子温度是一个非常重要的参数, 该参数描述了电子在某个能带中的分布情况, 电子的这种分布将直接影响到能带间电子的散射率。因此, 电子温度的计算对于准确求解激光器速率方程尤为重要。

国内外目前计算激光器能带电子温度的方法主要为动能平衡法^[9-11]。该方法是根据能级系统能量守恒的原理而建立的, 其没有对各能级的能量变化进行详细的描述, 故实际计算中需要用优化算法求解, 例如, 粒子群算法^[12-13]。

* 收稿日期: 2023-08-28; 修订日期: 2023-10-21

基金项目: 重庆市研究生科研创新项目 (CYS21059)

联系方式: 李光祥, 1264642674@qq.com。

这导致该方法计算结果的稳定性较差,且由于优化算法有掉入局部最优解的可能,尚需人为对计算结果根据其是否具有合理的物理意义而进行取舍,十分不便且不够严谨。为此,本文针对动能平衡法的上述缺点,借鉴了量子级联激光器 1½周期模型^[4]下电子数的速率方程描述方法,构建了一种量子级联激光器速率方程计算模型,开展对量子级联激光器各能级电子温度建立类似的微分方程组进行了研究,借以实现了对量子级联激光器各能级电子温度的准确、直观的描述。

1 计算模型

本文进行仿真计算的量子级联激光器为一种基于双声子共振的、35级级联、type-I型 In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}法布里-珀罗量子级联激光器^[15],其电子散射由电子-纵向声子散射主导,故不考虑其他散射机制。电子温度速率方程借鉴了电子数速率方程。电子数速率方程为

$$\frac{dN_i}{dt} = -N_i \sum_{i,i \neq j}^N \frac{1}{\tau_{if}} + \sum_{f,f \neq i}^N \frac{N_f}{\tau_{fi}} \quad (1)$$

式中: N_i, N_f 分别为 i, f 能级电子数, $1/\tau_{if}$ 为从 i 能级向 f 能级跃迁的平均电子散射率, N 为能级数。其中

$$\frac{1}{\tau_{if}} = \frac{\int \frac{1}{\tau_{if}^{(k)}} f^{\text{FD}}(E_i^k, N_i, T_i) (1 - f^{\text{FD}}(E_i^k + E_i^v - E_f^v \pm E_p, N_f, T_f)) dk}{\int f^{\text{FD}}(E_i^k, N_i, T_i) dk} \quad (2)$$

式中: T_i, T_f 分别为 i, f 能级电子平均温度, f^{FD} 为费米-狄拉克分布函数, E_i^v, E_f^v 为 i, f 能级电子势能, E_i^k, E_p 分别为 i 能级电子动能和声子能量, $\tau_{if}^{(k)}$ 为从 i 能级向 f 能级跃迁且波矢为 k 的电子的寿命,其可根据费米黄金定律计算^[16]。

显然,在式(2)分子的积分中乘以 E_i^k ,即可描述 i 能级到 f 能级的能量平均迁移率 τ_{if}^E ,即

$$\frac{1}{\tau_{if}^E} = \frac{\int \frac{E_i^k}{\tau_{if}^{(k)}} f^{\text{FD}}(E_i^k, N_i, T_i) (1 - f^{\text{FD}}(E_i^k + E_i^v - E_f^v \pm E_p, N_f, T_f)) dk}{\int f^{\text{FD}}(E_i^k, N_i, T_i) dk} \quad (3)$$

则式(1)可改写成关于各能级能量迁移的速率方程,即

$$\frac{dE_i}{dt} = -N_i \sum_{i,i \neq j}^N \frac{1}{\tau_{if}^E} + \sum_{f,f \neq i}^N \frac{N_f}{\tau_{if}^E} \quad (4)$$

又因为单个电子动能与温度的关系为

$$E = k_B T \quad (5)$$

式中: k_B 为玻耳兹曼常数, T 为电子温度,又因为本文考虑的温度为某一能级的电子平均温度,故可得在电子迁移过程 i 能级上电子温度的变化为

$$dT_i = \frac{dE_i}{N_i k_B} \quad (6)$$

将式(6)代入式(4),可得电子温度的速率方程为

$$\frac{dT_i}{dt} = -\frac{1}{k_B} \sum_{i,i \neq j}^N \frac{1}{\tau_{if}^E} + \sum_{f,f \neq i}^N \frac{N_f}{\tau_{if}^E N_i k_B} \quad (7)$$

同时,自洽求解式(1)和式(7),即可得到激光器各能级电子的数量与温度分布。

2 算法设计

本文所用算法,系为经典的基于 1.5 周期模型的自洽求解法。该算法设计具体流程,如图 1 所示。首先,根据费米黄金定律,计算出各个能级上各点的散射率;其次,设置各能级初始电子温度以及初始电子数,根据式(2)和式(3),计算出该电子温度和电子数下的电子数以及电子能量平均散射率;最后,根据式(1)和式(7),计算出各能级电子以及电子温度,并将计算出的电子数与电子温度作为初始条件,重复上述过程,直至结果收敛到一定的精度。

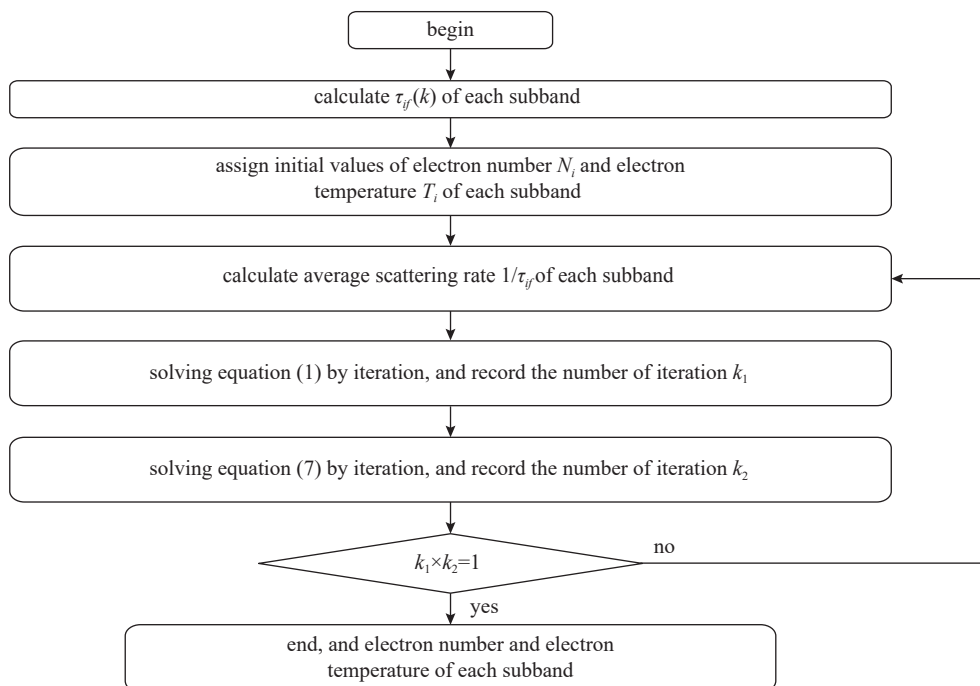


Fig. 1 Program flow chart of self consistent solution of electron number and electron temperature

图 1 自洽求解电子数、电子温度程序流程图

为了探究本算法在不同初始条件(初始温度)下计算结果的一致性,本文计算了从 100 K 到 1000 K,步长为 100 K,共 10 组数据,并进行了分析。采用各组数据相对于平均值的相对误差绝对值,表征其稳定性,即,相对误差越小,稳定性越好。

3 计算结果及分析

3.1 散射率

不同偏置电压下散射率的计算结果如图 2 所示:图 2(a)为初始温度为 300 K 时各能级在不同偏置电压下散射率的计算值;图 2(b)为 100 K、200 K、300 K、400 K、500 K、600 K、700 K、800 K、900 K、1000 K 的初始温度下,各能级在不同偏置电压下散射率的平均值。

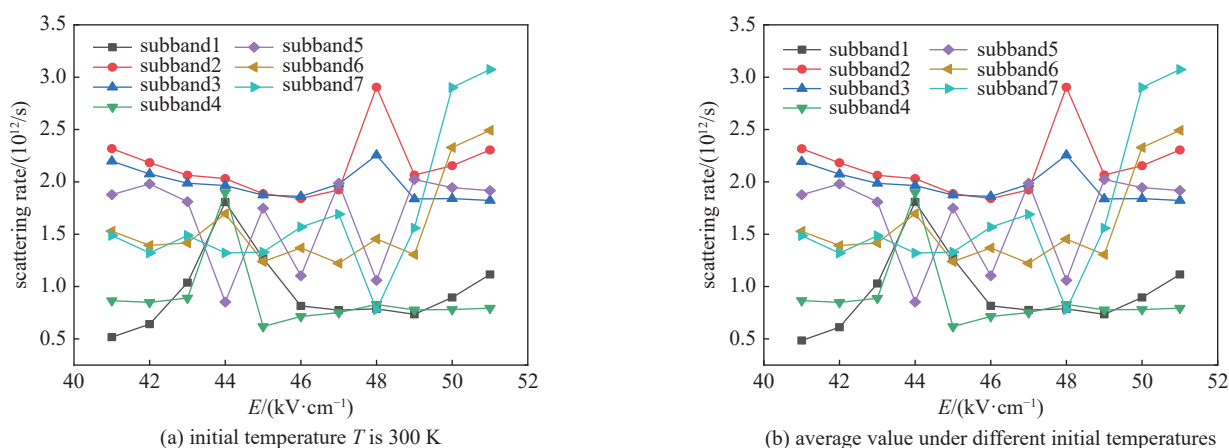


Fig. 2 Calculation result of the scattering rate of each energy level under different bias voltages

图 2 不同偏置电压下各能级电子散射率的计算结果

从图 2(a)可以看出,在单次计算中,当初始温度为 300 K 时,1、4 能级的散射率最低,即电子寿命最长,这是因为高能级(5、6、7 能级)以及注入区的电子首先散射到 4 能级,导致了电子在 4 能级上的聚集,从而导致了该能级上电子寿命较长,即散射率较低。同时,由于 1 能级势能最低,有源区 2、3、4 能级的电子最终都会散射到 1 能级,使得电子在该能级上聚集,最终导致该能级上电子寿命较长,即散射率较低。同样的原因导致了 2、3、5、6、7 能级电子散射率较高。

诚然,外加电场的不断增大使得激光器最终在外加电场为 44 kV/cm 处发生粒子数反转,而该状态的改变也导致了 4 能级散射率出现了一个极值。超过了阈值电压后,4 能级散射率相比阈值电压前有些许的下降,这使得 4 能级上电子寿命更长,从而导致了粒子数反转。与此同时,2、3 能级的散射率最为接近且最大,这使得从 4 能级上跃迁下来的电子能迅速向 1 能级转移,从而为粒子数反转创造条件,这正是本文仿真计算的激光器采用的双声子共振辅助隧穿的设计结果,即 2 能级的存在是为了使 3 能级电子快速向 1 能级转移。此外,6、7 能级散射率随着电压的增加逐渐增大,而阈值电压后的 6、7 能级的势能与注入区能带势能相似,这说明此时注入区电子散射率也在增加,即,注入区电子随外加电场增加越来越快的向有源区转移。再者,5 能级发生了多次跳变,以及外加电场为 48 kV/cm 处 2、5、7 能级出现极值,这可能是本计算方法尚未完善所致。对比图 2(a)和图 2(b)可知,单次计算的结果与各温度下的计算结果几乎相同,这说明本方法中电子散射率的计算结果对不同初始温度具有很好的稳定性,均能收敛到相似的值。

如图 3(a)和图 3(b)所示,本方法中对电子散射率的计算,初始温度为 300K 的计算结果相对于均值的偏差总体低于 0.0025;2—7 能级在 100 K、200 K、300 K……1000 K 的十个初始条件下的计算结果中,各个计算结果相对于各初始温度下的均值,偏差均小于 0.018,且均随外加电场的增加总体呈下降趋势。这是因为本方法的计算中,计算顺序是按照外加电场从小到大进行的,且电子数前一次的计算结果会作为后一次计算结果初始值,因为相邻电压条件下电子分布较为接近,这样做可以加快计算结果的收敛,而这也使得外加电场越高时,其迭代的次数就越多,从而使得其计算结果越稳定。图 3(b)为各初始温度下计算结果相对于均值的偏差的最大值,根据上述计算原理,其变化趋势亦与图 3(a)相同。由此可知,本计算方法可以通过增加迭代次数使计算结果更靠近收敛极限,从而增加计算结果的稳定性。

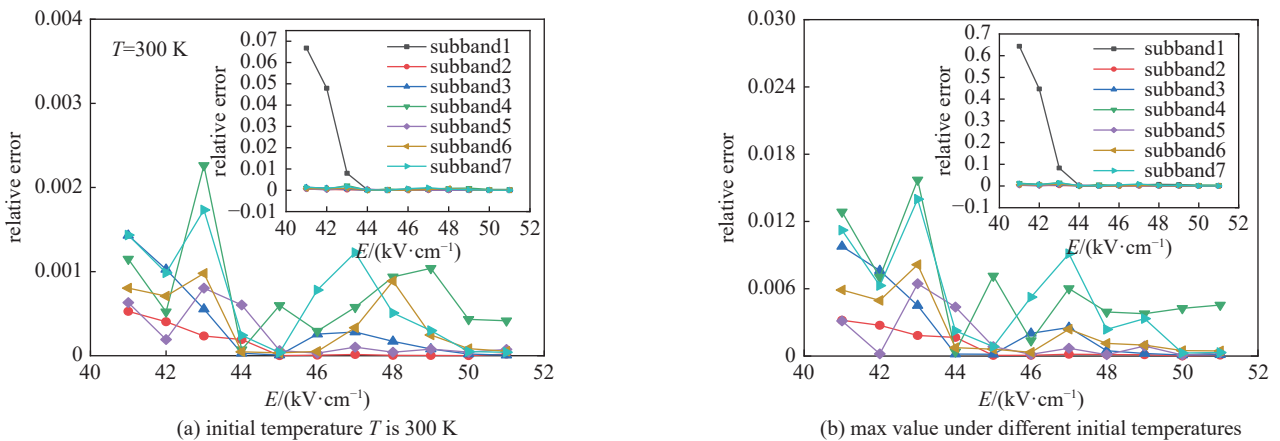


Fig. 3 Relative error of the scattering rate calculation result relative to the mean value under different bias voltage

图 3 为不同初偏置电压下散射率计算结果相对于均值的相对误差

3.2 电子温度

如图 4(a)所示,随着外加电场的增加,1—3 能级的电子温度总体逐渐上升,这是因为外加电场的电势能部分转化成了电子的动能,从而使电子温度上升,同时在外加电场为 44 kV/cm 处,即激光器发生粒子数反转的临界电压处,4 能级即激光上能级电子温度快速增加并出现极值,导致该子带上电子向高 K 态转移,从而使 4 能级电子向高能级跃迁的概率增加,向低能级跃迁的概率减小,从而导致了 1—3 能级及 5 能级的电子温度均出现极小值。然而,4 能级电子温度极值的出现,则是因为此时处于激光器状态的突变点,即,阈值电压。

此外,当外加电场超过阈值电压后,4 能级电子温度迅速降低,且温度随电压的增加变化较小,与阈值电压前相似,较为稳定。与此同时,4 能级电子温度在阈值电压之后低于阈值电压之前的电子温度,这导致了 4 能级电子相比于阈值电压之前,其在该能级中的分布向带底集中,这使得其向高能级的跃迁受到抑制,从而导致了如图 2(a)所示的结果,即,其散射率降低。此外,6、7 能级电子温度下降,这使其电子向带底集中,从而加快了其向低能级跃迁的速率,抑制了其向高能级的跃迁,4、6、7 能级的变化导致了定向电流的形成。5 能级居中,故其温度变化不明显。对比分析图 4(a)和图 4(b)可知,单次计算结果与各初始温度下的计算结果非常接近,这说明本计算方法在不同的初始温度下,其对电子温度的计算均能收敛到相似的值,具有很好的稳定性。

如图 5(a)所示,当初始温度为 300 K 时,本方法对电子温度的计算结果相对于各初始温度下计算结果的均值

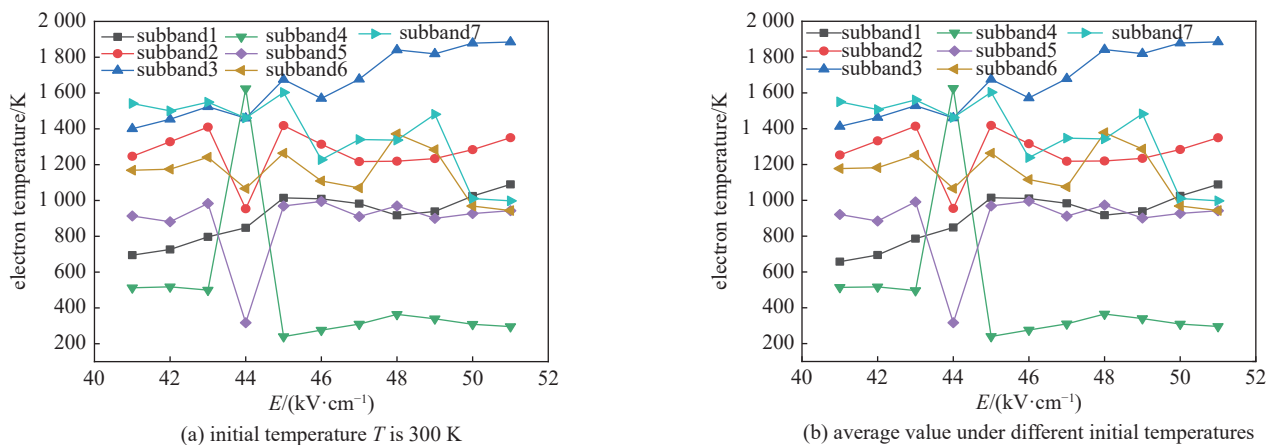


Fig. 4 (a) Calculation result of the electron temperature of each energy level under different bias voltage

图 4 各能级电子温度在不同偏置电压下的计算值

的相对误差均小于 0.06, 且除 1 能级外加电场为 40、42 kV/cm 的两点外, 其余各点计算结果的相对误差均小于 0.01。此外, 如图 5(b) 所示, 各能级电子温度在各初始温度下计算结果的相对与均值的相对误差的最大值中, 除了 1 能级外加电场为 40、42 kV/cm 的两点外, 其余各点均小于 0.09, 说明了该方法对电子温度计算具有很好的稳定性。

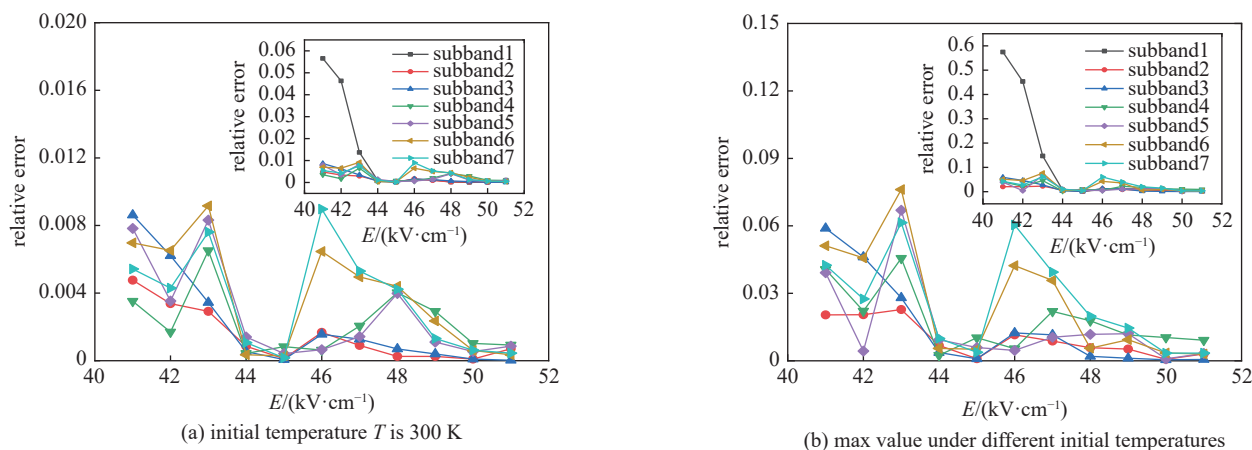


Fig. 5 Relative error of the electron temperatures of each energy level relative to the mean value under different bias voltage

图 5 各能级电子温度计算结果在不同偏置电压下相对于均值的误差

4 结论

量子级联激光器在高精度光谱检测领域具有显著的优势, 因此对其各能级电子温度进行仿真计算, 可为研究和设计量子级联激光器的高精度光谱输出提供有力的保证。本文基于电子温度与动能的关系以及费米黄金定律对速率方程进行了优化, 使其具有计算各能级电子温度的功能。与传统的动能平衡法相比: 传统的动能平衡法计算过程需要依赖优化算法, 其收敛一致性较差, 往往需要从多次计算的结果中人为挑选出其中较为符合物理意义的结果, 而人为的主观介入会削弱其计算过程的严谨性; 本文提出的方法则不需要借助优化算法, 而是用自洽求解的方法模拟了各能级电子数以及电子温度从初始状态到稳态的收敛过程, 理论上其计算结果有非常好的收敛一致性, 而从计算结果可知, 对于散射率, 2—7 能级在 100 K、200 K、300 K, ..., 1000 K 的十个初始条件下的计算结果中, 各个计算结果相对于各初始温度下的均值, 偏差均小于 0.018, 对于电子温度的计算, 2—7 能级在 100 K、200 K、300 K, ..., 1000 K 的十个初始条件下的计算结果中, 各个计算结果相对于各初始温度下的均值, 偏差均小于 0.09, 具有较好的收敛一致性。所以本文方法在收敛一致性上优于现有的动能平衡法, 这对量子级联激光器的模拟仿真、光调制以及自设计具有重要意义。

参考文献:

- [1] Faist J, Capasso F, Sivco D L, et al. Short wavelength ($\lambda \sim 3.4 \mu\text{m}$) quantum cascade laser based on strained compensated InGaAs/AlInAs[J]. *Applied Physics*

- Letters, 1998, 72(6): 680-682.
- [2] Spitz O, Herdt A, Wu Jiagui, et al. Private communication with quantum cascade laser photonic chaos[J]. *Nature Communications*, 2021, 12: 3327.
- [3] Rodriguez E, Mottaghizadeh A, Gacemi D, et al. Room-temperature, wide-band, quantum well infrared photodetector for microwave optical links at 4.9 μm wavelength[J]. *ACS Photonics*, 2018, 5(9): 3689-3694.
- [4] Irimajiri Y, Morohashi I, Kawakami A. Multifrequency heterodyne detection of molecules using a hot electron bolometer mixer pumped by two phase-locked THz-quantum cascade lasers[J]. *IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology*, 2020, 10(5): 474-479.
- [5] Dostál M, Suchánek J, Válek V, et al. Cantilever-enhanced photoacoustic detection and infrared spectroscopy of trace species produced by biomass burning[J]. *Energy & Fuels*, 2018, 32(10): 10163-10168.
- [6] Zhang Jianxiong, He Yong, Liang Shanshan, et al. Non-invasive, opsin-free mid-infrared modulation activates cortical neurons and accelerates associative learning[J]. *Nature Communications*, 2021, 12: 2730.
- [7] Liu Xi, Qiao Zhi, Chai Yuming, et al. Nonthermal and reversible control of neuronal signaling and behavior by midinfrared stimulation[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2021, 118: e2015685118.
- [8] Li Z M S, Li Yingying, Ru Guoping. Simulation of quantum cascade lasers[J]. *Journal of Applied Physics*, 2011, 110: 093109.
- [9] Jirauschek C, Kubis T. Modeling techniques for quantum cascade lasers[J]. *Applied Physics Reviews*, 2014, 1: 011307.
- [10] 孙远昆. 量子级联激光器的数值优化及其光电调制特性研究[D]. 重庆: 重庆大学, 2020: 26-28. (Sun Yuankun. Numerical optimization and photoelectric modulation characteristics of quantum cascade laser[D]. Chongqing: Chongqing University, 2020: 26-28)
- [11] Slingerland P, Baird C, Giles R H. Application of multi-subband self-consistent energy balance method to terahertz quantum cascade lasers[J]. *Semiconductor Science and Technology*, 2012, 27: 065009.
- [12] 高星星. 几种粒子群优化算法及其应用研究[D]. 银川: 北方民族大学, 2020: 7-8. (Gao Xingxing. Several particle swarm optimization algorithms and their applications[D]. Yinchuan: North Minzu University, 2020: 7-8)
- [13] Peng Chen, Sun Yuankun, Zhu Liguang, et al. Investigation of subband electron temperatures of quantum cascade lasers[J]. *IEEE Photonics Journal*, 2019, 11: 1500710.
- [14] Donovan K, Harrison P, Kelsall R W. Self-consistent solutions to the intersubband rate equations in quantum cascade lasers: analysis of a GaAs/Al_xGa_{1-x}As device[J]. *Journal of Applied Physics*, 2001, 89(6): 3084-3090.
- [15] Liu Zhijun, Wasserman D, Howard S S, et al. Room-temperature continuous-wave quantum cascade lasers grown by MOCVD without lateral regrowth[J]. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2006, 18(12): 1347-1349.
- [16] 祁昶, 石新智, 叶双莉, 等. THz 量子级联激光器跃迁速率的数值求解及验证[J]. *光电子·激光*, 2013, 24(12): 2283-2288. (Qi Chang, Shi Xinzhi, Ye Shuangli, et al. Numerical calculation and validation of transition rate for terahertz quantum cascade lasers[J]. *Journal of Optoelectronics-Laser*, 2013, 24(12): 2283-2288)