**文章编号:** 1672-8785(2023)01-0023-09

# 基于 GaInAs/AlInAs 中红外量子级联激光器的 自洽电子子带能级结构研究

周明艳<sup>1,2</sup> 徐 文<sup>1,2,3\*</sup> 肖宜明<sup>1</sup> 肖 欢<sup>1,2</sup> 李龙龙<sup>2,4</sup> Francois M. Peeters<sup>2,4</sup> 李浩文<sup>2</sup> 陈思凡<sup>5</sup> (1.云南大学物理与天文学院,云南昆明 650091; 2.深圳网联光仪科技有限公司,广东深圳 518118; 3.中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所,安徽 合肥 230031; 4.安特卫普大学物理系,比利时 安特卫普 B-2020; 5.深圳技术大学新材料与新能源学院,广东 深圳 515118)

摘 要:中红外(Mid-infrared, MIR)量子级联激光器(Quantum Cascade Laser, QCL)已被广泛应用于定向红外对抗、自由空间光通信、痕量气体传感等重要领 域。利用 Nextnano++软件进一步完善了自洽计算基于 MIR QCL 器件的薛定谔 方程和泊松方程的理论方法。针对 InP 衬底上生长的 GaInAs/AlInAs 多量子阱 MIR QCL 器件,研究了四能级双声子共振 QCL 结构中有源区的电子子带能级结 构,并对这些子带能级随器件工作温度、驱动电场、注入区掺杂浓度等变化的 规律进行了系统研究,获得了与实验结果一致的理论结果。此工作为 MIR QCL 器件的生长和制备提供了理论设计和研究方法,为了解器件工作条件提供了理 论预期,也为进一步提高 MIR QCL 的发光功率和效率提供了理论研究支撑。

关键词:量子级联激光器;中红外;GaInAs/AlInAs

中图分类号: O49 文献标志码: A DOI: 10.3969/j.issn.1672-8785.2023.01.004

## Study on Self-Consistent Electronic Subband Structure of GaInAs/AlInAs-Based Mid-Infrared Quantum Cascade Laser

ZHOU Ming-Yan<sup>1,2</sup>, XU Wen<sup>1,2,3\*</sup>, XIAO Yi-Ming<sup>1</sup>, XIAO Huan<sup>1,2</sup>, LI Long-Long<sup>2,4</sup>, Francois M. Peeters<sup>2,4</sup>, LI Hao-Wen<sup>2</sup>, CHEN Si-Fan<sup>5</sup>

(1. School of Physics and Astronomy, Yunnan University, Kunming 650091, China;
 2. Micro Optical Instruments Inc, Shenzhen 518118, China;

3. Institute of Solid State Physics, Hefei Institutes of Physical Science, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China;

收稿日期: 2022-09-19

基金项目:深圳市科技计划项目(KQTD20190929173954826);国家自然科学基金项目(U1930116; U206720039;12004331)

**作者简介:**周明艳(1997-),女,云南昭通人,硕士研究生,主要研究领域为量子级联激光器有源区波 函数、能级以及电子输运特性的理论设计和研究等。

\*通讯作者: E-mail: wenxu\_issp@aliyun.com

4. Department of Physics, University of Antwerp, Antwerp B-2020, Belgium;

#### 5. College of New Materials and New Energies, Shenzhen Technology University, Shenzhen 518118, China)

Abstract: The mid-infrared (MIR) quantum cascade lasers (QCLs) have been widely applied in the fields such as directional infrared countermeasure, free-space optical communication, trace gas sensing, and other important fields. We further improve the theoretical approach for self-consistent solution of the Schrödinger equation and the Poisson equation based on the MIR QCL device using the Nextnano++ software. We calculate the electronic subband structure in the active region of the four-level and double-phonon resonant QCL structure for GaInAs/AlInAs multi-quantum well-based MIR QCL devices grown on InP substrate. The dependence of these subband energies upon device operating temperature, driving electric field, and doping concentration in the injection region are studied. Theoretical findings are in line with the experimental results. This work provides theoretical design and research methods for the growth and preparation of MIR QCL devices, provides theoretical expectations for understanding the working conditions of devices, and provides theoretical research methods for the growth and preparation of MIR QCL.

Key words: quantum cascade laser; mid-infrared; GaInAs/AlInAs

## 0 引言

目前,QCL<sup>[1]</sup>已成为中红外和太赫兹频段 的先进固态激光光源,其发光原理是基于半导 体量子阱中量子化的子带间电子跃迁导致的光 辐射,发光光子频率主要由量子阱结构决定, 受材料带隙的影响较小。这是 QCL 与传统半 导体和带间级联激光器的本质区别。1994年, FaistJ等人在贝尔实验室通过分子束外延 (Molecular Beam Epitaxy, MBE) 技术首次成 功制备了 GaInAs/AlInAs/InP 材料结构的量子 级联激光器,其激光波长为 4.26 µm<sup>[1]</sup>。二十 多年来,随着 QCL 结构设计的改进和生长、 工艺技术的进步, QCL 的制备得到了极大的 发展。量子级联激光器体积小、结构紧凑、激 光线宽窄和波长覆盖范围广,可实现中红外3 ~25 um 和太赫兹 300 GHz~10 THz 光源<sup>[2]</sup>, 因此在痕量气体检测[3-5]、医疗诊断[6-8]、自由 空间光通信[9-10]、定向红外对抗[11]等领域都有 广泛的应用。在中红外波段, QCL 可用于 CH<sub>4</sub>、N<sub>2</sub>O、CO、H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>等气体的检测<sup>[12-15]</sup>、 呼吸系统的疾病诊断[16]、血糖的无创检 测[17-18]和药物成分分析[19]等

目前, 主流的 MIR QCL 为在 InP 衬底上 外延生长的 GaInAs/AlInAs 多量子阱结构, 其 激光波长可覆盖 3.3~24 μm, 激光器结构大多 采用三量子阱垂直跃迁结构<sup>[1]</sup>、四阱双声子共 振结构<sup>[20]</sup>、浅阱高垒结构<sup>[21]</sup>和非共振抽取结构<sup>[22]</sup>等。值得一提的是,四量子阱双声子共振结构在三阱垂直跃迁结构的基础上,在注入区后分别增加了一层较薄的量子阱和垒材料层,其优点在于可增强上激发能级的电子注入效率<sup>[20]</sup>。四阱双声子共振结构是首先突破瓦级输出功率的QCL有源区结构<sup>[23]</sup>。因此,本 文将主要研究四阱四能级双声子MIR QCL 结构。

近年来,QCL 的理论模拟和计算主要 集中在增加辐射功率、减小阈值电流等的结 构设计<sup>[2]</sup>上。Tavish J M 等人通过自洽求解 子带粒子速率方程,模拟计算了发光波长为 9.18 µm的 GaInAs/AlInAs QCL 结构, 研究 了注入区掺杂浓度、外加偏置电场和温度对 QCL散射率、能级粒子数和电流密度的影 响<sup>[24]</sup>。LiJ等人用薛定谔-泊松-速率方程自 洽计算模拟了波长为 4.267 μm 的 GaInAs/ AlInAs 体 系 的 QCL 并 分 析 了 其 输 出 特 性<sup>[25]</sup>。Khorami A A 等人通过自洽求解薛定 谔方程和泊松方程,设计和模拟了太赫兹 GaAs/AlGaAs QCL,研究了温度和外加电 场对阈值电流和输出功率的影响[26]。在大 多数模拟计算中,主要研究 QCL 有源区导 带内的电子输运过程和载流子输出性能。

四能级双声子共振 QCL 器件的激光波长

由有源区内的高电子子带能级和低能级的能 量差决定,通过低子带能级间电子-纵向光学 (Longitudinal-optical, LO)声子共振散射实 现子能级间的粒子数反转。因此,对有源区 的波函数和子带能级的模拟计算既是研究 QCL 输出特性的基础, 也是能否实现粒子数 反转的关键。通过数值求解薛定谔方程获得 QCL有源区波函数和子带能级的常用方法有 跃迁矩阵法<sup>[27]</sup>、有限差分方法<sup>[28]</sup>和 Shooting 法<sup>[29]</sup>等。本文通过应用 Nextnano++软件, 自洽求解薛定谔方程和泊松方程,获得基于 GaInAs/AlInAs/InP 结构的 MIR QCL 有源 区电子子带能级的波函数和能级能量,并系 统研究这些子带能级随器件工作温度、驱动 电场、注入区掺杂浓度等的变化规律,可为 QCL 器件结构的设计和研究提供理论计算方 法。

#### 1 理论研究方法和器件结构

在本研究中,我们应用 Nextnano++软件,自治计算 QCL 有源区内的电子子带能级结构。由于 MIR QCL 器件主要由有源区和注入区构成,而注入区一般是 n-型掺杂,会形成 泊松电势,使材料导带边弯曲,导致量子阱中 电子子带能级变化。因此,需自治求解薛定谔 方程和泊松方程,从而更准确地获得有源区的 电子子带能级和波函数。在有效质量近似下, 沿量子阱生长方向 z 的薛定谔方程和泊松方 程为

$$\left[-\frac{\hbar}{2}\frac{d}{dz}\frac{1}{m^{*}(z)}\frac{d}{dz}+V(z)-\varepsilon_{n}\right]\varphi_{n}(z)=0$$

(1)

$$V(z) = \Delta E_C + e\phi(z) + eFz \qquad (2)$$

$$\nabla \cdot \left[ \kappa(z) \nabla \phi(z) \right] = -\rho(z) \tag{3}$$

$$\rho(z) = eN_d + e\sum_n N_n |\varphi_n(z)|^2 \qquad (4)$$

式(1)中, $m^*(z)$ 为不同材料层中电子的有效质量,V(z)为结构中电子的势能, $\Delta E_c$ 为不同材料层中导带的能带台阶值,F为外加电场强度, $\phi(z)$ 为泊松电势, $\varepsilon_n$ 为第n个电子子带能

级,  $\varphi_n(z)$ 为第 n 个子带能级的波函数。式(3) 中,  $\kappa(z)$ 为不同材料的介电常数,  $\rho(z)$ 为结构 中的电荷密度分布,  $N_d$  为注入区掺杂浓度(假 设为 n-型),  $N_n$  为第 n 个电子子带上的电子 浓度。

在本研究中,我们考虑一个典型的四能级 双声子共振 QCL 结构(见图 1)。该结构可用于 生长、制备发光波长约为 9 μm 的 QCL 光源。 在此结构中,有源区和注入区由 Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>As 和 Al<sub>y</sub>In<sub>1-y</sub>As 材料层构成, *x* 为 Ga 组分, *y* 为 Al 组分,GaInAs 为势阱层,AlInAs 为势垒层。 不同材料层中的电子有效质量 *m*\*(*z*)可通过 GaAs、InAs 和 AlAs 材料的电子有效质量的插 值计算得到,所需各项参数如表 1 所示<sup>[31]</sup>。 在本研究中,我们只考虑材料组分对电子有效 质量的影响,忽略温度效应。这样,Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>-As 和 Al<sub>y</sub>In<sub>1-y</sub>As 材料层中电子的有效质量计 算公式为<sup>[31]</sup>

$$m^*(A_jB_{1-j}C) = jm^*(A_jC)$$

+  $(1-j)m^*(B_{1-j}C) - j(1-j)d_m$ · (5) 式中, *j* 为材料组分 *x* 或 *y*, *d\_m*· 为考虑非抛物 线能带色散效应的修正因子。当 *x*=0.47、*y* = 0.48 时, *m*\*(Ga<sub>0.47</sub>In<sub>0.53</sub>As) = 0.043*m*<sub>0</sub>, *m*\* (Al<sub>0.48</sub>In<sub>0.52</sub>As) = 0.073*m*<sub>0</sub>, *m*<sub>0</sub> 为静止电子质 量。更进一步, GaInAs 和 AlInAs 材料层导带 的能带台阶值为

$$\Delta E_c = \Delta E_g - \Delta E_V \tag{6}$$

式中, $\Delta E_v = 0.18$  eV 为两种材料的价带台阶 值,是一个近似常数; $\Delta E_g = E_g (Al_y In_{1-y} As) - E_g (Ga_x In_{1-x} As), E_g (Al_y In_{1-y} As) 和 E_g (Ga_x In_{1-x} - As) 可以通过 E_g (GaAs), E_g (InAs) 和 E_g (AlAs) 插值计算得到:$ 

 $E_g(A_j B_{1-j}C) = jE_g(A_j C)$ 

+  $(1-j)E_g(B_{1-j}C) - j(1-j)d_{E_g}$  (7) 式中,  $d_{E_g}$ 为考虑非抛物能带色散效应的修正 因子(由表 2<sup>[31]</sup>给出)。另外, GaInAs 和 AlInAs材料层导带台阶值的温度依赖性可通 过式(8)<sup>[31]</sup>得到:

$$E_g(T) = E_g(T=0) - \frac{\alpha T^2}{T+\beta}$$
(8)

35 periods	
Ga <sub>x</sub> In <sub>1-x</sub> As (2.9 nm)	
Al <sub>y</sub> In <sub>1-y</sub> As (2.5 nm)	
Ga <sub>x</sub> In <sub>1-x</sub> As (2.9 nm)	
Al <sub>y</sub> In <sub>1-y</sub> As (2.3 nm, Si: 7x10 <sup>16</sup> cm <sup>-3</sup> )	
Ga <sub>x</sub> In <sub>1-x</sub> As (3.0 nm, Si: 7x10 <sup>16</sup> cm <sup>-3</sup> )	
Al <sub>y</sub> In <sub>1-y</sub> As (1.9 nm, Si: 7x10 <sup>16</sup> cm <sup>-3</sup> )	Į Į
Ga <sub>x</sub> In <sub>1-x</sub> As (3.1 nm, Si: 7x10 <sup>16</sup> cm <sup>-3</sup> )	ectio
Al <sub>y</sub> In <sub>1-y</sub> As (1.5 nm)	i n re
Ga <sub>x</sub> In <sub>1-x</sub> As (3.2 nm)	gio
Al <sub>y</sub> In <sub>1-y</sub> As (1.3 nm)	
Ga <sub>x</sub> In <sub>1-x</sub> As (3.3 nm)	
Al <sub>y</sub> In <sub>1-y</sub> As (1.4 nm)	
Ga <sub>x</sub> In <sub>1-x</sub> As (3.4 nm)	
Al <sub>y</sub> In <sub>1-y</sub> As (2.2 nm)	
Ga <sub>x</sub> In <sub>1-x</sub> As (7.5 nm)	
Al <sub>y</sub> In <sub>1-y</sub> As (0.9 nm)	
Ga <sub>x</sub> In <sub>1-x</sub> As (7 nm)	Las
AlyIn <sub>1-y</sub> As (0.9 nm)	erin
Ga <sub>x</sub> In <sub>1-x</sub> As (5.7 nm)	gre
Al <sub>y</sub> In <sub>1-y</sub> As (0.7 nm)	gion
Ga <sub>x</sub> In <sub>1-x</sub> As (2 nm)	
Al <sub>y</sub> In <sub>1-y</sub> As (4 nm)	]↓
InP substrate	

图 1 一个激光发光波长约为 9 μm 的 QCL 的有源区、 注入区结构示意图。这里, x 为 Ga 组分, y 为 Al 组 分, GaInAs 为势 阱层, AlInAs 为势 垒层, InP 为衬 底, 不同材料层的生长厚度已标出, 典型的注入区 掺杂浓度已标出, 器件需生长 35 个周期

式中, α 和 β 为常数,由表 1 给出<sup>[31]</sup>。因此, 在 QCL 器件中,电子子带能级结构的温度依 赖性主要由导带台阶值与温度的相关性导致。

由于 GaInAs 和 AlInAs 材料的晶格失配较 小,在计算过程中可不考虑由此引起的应变和 极化效应。因此,在 QCL 有源区和注入区, 薛定谔方程的边界条件为狄利克雷边界条件, 泊松方程的边界条件为诺曼边界条件。在计算 中,我们考虑三个注入区/有源区周期单元。 每个周期单元(即单个注入区/有源区)的长度 为 L<sub>p</sub>,三个周期单元的总长度 L 为 3L<sub>p</sub>。这 样,电子波函数的边界条件为

$$\varphi_n(0) = \varphi_n(L) = 0 \tag{9}$$

泊松电势的边界条件为

$$\partial_z \phi(0) = \partial_z \phi(L) = 0 \tag{10}$$

由于有源区单个周期的势能  $V(z_0) - V(z_0 + L_p)$ =  $eFL_p$  由驱动电场提供,所以  $\phi(z_0) = \phi(z_0 + L_p)$ 。每个周期呈电中性,即

$$\int_{z_0}^{z_0+L_p} \rho(z) dz = 0 \tag{11}$$

可认为 $\partial_z \phi(z_0) = \partial_z \phi(z_0 fL_p)$ 。进一步,由于有 源区的电子为注入电子,在平衡态时各个子带 上的电子浓度由子带间的电子-光子和电子-声 子散射决定。为避免重复计算,我们暂不考虑 有源区注入电子对泊松电势的贡献。通过应用 Nextnano++软件对薛定谔方程和泊松方程的 迭代自洽求解,可得到收敛的 $\phi(z), \varphi_n(z)$ 和  $\varepsilon_n$ 。

表1 二元合金 GaAs、InAs 和 AlAs 的各项参数

	GaAs	InAs	AlAs
$E_{g}(T=0)$ (eV)	1.519	0.417	3.099
$\alpha ({\rm meV/K})$	0.5405	0.276	0.885
β(K)	204	93	530
$m^*(A_jC/B_{1-j}C)(m_0)$	0.067	0.026	0.15

表 2 GaInAs 和 AlInAs 的能带弯曲参数

	GaInAs	AlInAs
$d_{m^*}$	0.0091	0.049
$d_{E_{\pi}}$	0.477	0.70

#### 2 结果和讨论

本研究中,我们考虑图 1 中 QCL 有源区 和注入区材料层为 Ga<sub>0.47</sub>In<sub>0.53</sub>As/Al<sub>0.48</sub>In<sub>0.52</sub>As, 即 x=0.47 和 y=0.48。从注入区开始,一个 周期内各材料层的厚度分别为 2.9、2.5、2.9、 2.3、3.0、1.9、3.1、1.5、3.2、1.3、3.3、 1.4、3.4、2.2、7.5、0.9、7、0.9、5.7、 0.7、2 和 0.4。其中,正常字体表示 GaInAs 层,加粗字体表示 AlInAs 层,带下划线的表 示 Si 掺杂的注入区材料层。图 2 所示为温度 T= 240 K、电场强度 F=35 kV/cm 和掺杂浓度  $N_d=7 \times 10^{16}$  cm<sup>-3</sup> 条件下,自洽计算获得的 QCL 结构的导带边 V(z)、电子子带能级  $\epsilon_n$  以 及波函数  $|\varphi_n(z)|^2$  随量子阱生长方向的变化。 结果表明: (1)此量子阱结构的有源区中存在 四个电子子能级。(2)  $\epsilon_4$  和  $\epsilon_3$  之间的能量差为



图 2 在温度为 240 K、驱动电场强度为 35 kV/cm、注入区掺杂浓度为 7×10<sup>16</sup> cm<sup>-3</sup>时,四能级双声子 共振QCL结构有源区的导带边、电子子带波函数和子带能级沿量子阱生长方向的变化。这里, $\epsilon_4 =$  33.49 meV,  $\epsilon_3 = -93.73$  meV,  $\epsilon_2 = -128.36$  meV,  $\epsilon_1 = 169.95$  meV,  $\Delta E_c = 535$  meV

127.22 meV,即激光发光波长为 9.74  $\mu$ m;  $\epsilon_3$ 与  $\epsilon_2$ 、 $\epsilon_2$  与  $\epsilon_1$ 之间的子带能级能量差  $\Delta E_{32}$ 和  $\Delta E_{21}$ 分别为 34.63 meV 和 34.59 meV,接近 Ga<sub>0.47</sub>In<sub>0.53</sub>As 材料层中 LO 声子的能量(约 34.3 meV<sup>[32]</sup>)。(3)在外加驱动电场作用下,前一 个有源区中的最低子带能级  $\epsilon_1$ 高于后一个有 源区中的最高子带能级  $\epsilon_4$ 。

因此,图1和图2显示的结构为典型的四 能级双声子共振QCL结构:(1)由于 $\epsilon_4$ 子带能 级与其他子带能级的能量差远大于量子阱层 GaInAs中LO-声子的能量,注入电子从 $\epsilon_4$ 能 级向 $\epsilon_3$ 能级的弛豫将主要通过电子-光子交互 作用实现。(2)由于 $\epsilon_3 - \epsilon_2$ 和 $\epsilon_2 - \epsilon_1$ 接近量子 阱中LO-声子的能量, $\epsilon_3$ 能级上的电子将通过 电子-声子共振散射<sup>[33]</sup>迅速弛豫到 $\epsilon_2$ 能级(然 后到 $\epsilon_1$ 能级),从而在 $\epsilon_4$ 能级和 $\epsilon_3$ 能级之间形 成粒子数反转,放大电子-光子交互作用并形 成激光激发。(3)由于前一个有源区中的最低 子带能级 ε<sub>1</sub> 高于后一个有源区中的最高子带 能级 ε<sub>4</sub>,前一个有源区中通过激光激发和电 子-声子交互作用弛豫到最低能级的电子可通 过量子隧穿经过注入区,进入到下一个有源 区,减小前一个有源区中电子的累积及相关的 热电子效应<sup>[34]</sup>。(4)通过隧穿进入和注入区注 入到下一个有源区的电子可形成激光的级联激 发,提高器件的电子注入和发光效率。图1和 图 2 所示的结构可应用于发光波长约为 9 μm 的 QCL 的生长和制备。

外加偏置电场对 QCL 发光波长和有源区 内各个能级差的影响如图 3 所示。可以看出, 能级差  $\Delta E_{43}$  随电场的增大而减小,即激光发 光波长随电场的增加而变长(如插图所示)。声 子散射能级的能量差  $\Delta E_{32}$ 和  $\Delta E_{21}$  随电场的增 加而增大。当 F 大于约 40 kV/cm 时,  $\Delta E_{32}$ 和  $\Delta E_{21}$ 明显大于 GaInAs 材料的 LO-声子能量, 暗示在强电场作用下这些能级间的电子-声子 共振散射将减弱。当 F>37 kV/cm 时,  $\Delta E_{32}$ 



图 3 在温度为 240 K、注入区掺杂浓度为 7×10<sup>16</sup> cm<sup>-3</sup>时,QCL 有源区中各子带能级的 能量差随驱动电场强度的变化。插图显示激光波长随电场强度的变化

和 ΔE<sub>21</sub>之间的差别随 F 的增大而增大。这些 结果显示,大的驱动电场将减弱器件中的电 子-声子共振散射,降低粒子数反转和 QCL 的 发光效率,同时也会造成电子在前一个有源区 的累积和相关热电子效应。这些结果与实际 QCL 器件工作中发现的电场效应一致<sup>[35]</sup>。

图 4 显示注入区掺杂浓度对发光波长和有 源区各子带能级差的影响。注入区掺杂会导致 QCL 量子阱结构中的泊松电势,使导带边弯曲,影响量子阱中的子带能级。从图 4 中可以 看出, $\Delta E_{43}$ 随注入区掺杂浓度的增加而增大, 即发光波长随掺杂浓度的增加而产生蓝移(如 插图所示)。声子散射能级能量差  $\Delta E_{32}$ 和  $\Delta E_{21}$ 随注入区掺杂浓度的增加而变小。当  $N_d > 1.2$ ×10<sup>17</sup> cm<sup>-3</sup>时, $\Delta E_{32}$ 和  $\Delta E_{21}$ 小于 GaInAs 材料 的 LO-声子能量,暗示此时这些能级间的电 子-声子共振散射将显著减弱<sup>[33]</sup>。在较低掺杂 浓度的情况下,能级 3 和 2 之间的能量差大于 能级 2 和 1 之间的能量差;当掺杂浓度高于 8 ×10<sup>16</sup> cm<sup>-3</sup>后,情况相反。这些结果表明,注 入区的高浓度掺杂不利于 QCL 器件中由电子-声子共振散射导致的粒子数反转效率,会降低 QCL 的发光效率。此结果与 QCL 器件工作中 发现的注入区掺杂效应一致<sup>[36]</sup>。

图 5(a) 显示温度对 QCL 有源区中各子带 能级差的影响。我们发现, ΔE43 随温度的变化 不大。在 30~450 K 温度范围内, ΔE43 的变化 小于1 meV。随着温度增加,  $\Delta E_{43}$ 先微弱增加 后微弱减小。这样, QCL 的发光波长随温度 的漂移也不大(见插图)。声子散射能级的能量 前所述,温度对 GaInAs/AlInAs 量子阱中电子 子带能级的影响主要由 GaInAs/AlInAs 异质结 的能带台阶值与温度的依赖性导致(见式(8))。 由于 $E_{g}(T)$ 随温度的变化有一个极值,异质结 的能带台阶值随温度的变化也会出现一个极 值。在图 4(b)中,我们给出 Ga<sub>0.47</sub>In<sub>0.53</sub>As/ Al<sub>0.48</sub>In<sub>0.52</sub>As 异质结的导带台阶值与温度的依 赖关系,式(8)的结果与 Nextnano++软件给 出的结果完全一致。



图 4 在电场强度为 35 kV/cm、温度为 240 K时,QCL 有源区中各子带的能级差随注入区掺杂浓度的 变化。插图显示激光波长随掺杂浓度的变化



图 5 (a)在电场强度为 35 kV/cm、注入区掺杂浓度为 7×10<sup>16</sup> cm<sup>-3</sup>时,QCL 有源区中各子带能级的 能量差随温度的变化(插图显示激光波长随温度的变化);(b) Ga<sub>0.47</sub>In<sub>0.53</sub>As/Al<sub>0.48</sub>In<sub>0.52</sub>As 异质结的 导带台阶值与温度的依赖关系(线表示式(4)的结果,点表示 Nextnano++软件给出的结果)

## 3 结束语

本文对基于 GaInAs/AlInAs 材料的四能级 双声子共振量子级联激光器有源区中的电子能 级结构进行了理论研究。通过自治求解薛定谔 方程和泊松方程,获得了有源区的电子子带波 函数和子带能级。研究了外加偏置电场、注入 区掺杂浓度和器件工作温度对电子子带能级的 影响。得到的主要结论如下:

(1)外加偏置电场对有源区中电子子带能

级的影响较大,过大的偏置电压会导致 QCL 发光效率降低;

29

(2)注入区掺杂浓度对有源区中电子子带 能级的影响较大,过高的掺杂浓度会降低 QCL的发光效率;

(3)温度对有源区中电子子带能级的影响 较小,不会导致 QCL 发光波长的显著漂移。

本研究工作为进一步理论研究 QCL 器件 结构中电子子带间的粒子数反转、激光发光效 率、电子在有源区的累积等基本的器件物理特性打下了电子能带结构基础,也可为 QCL 器件的设计、生长、制备提供理论支撑。

#### 参考文献

- [1] Faist J, Capasso F, Sivco D L, et al. Quantum Cascade Lase [J]. Science, 1994, 264 (5158): 553-556.
- [2] Romanova K A, Galyametdinov Y G. Theoretical simulation of quantum cascade lasers based on GaInAs/AlInAs and GaInAs/AlAsSb quantum wells [J]. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 2020, 862(2): 022040.
- [3] Giglio M, Zifarelli A, Sampaolo A, et al. Broadband detection of methane and nitrous oxide using a distributed-feedback quantum cascade laser array and quartz-enhanced photoacoustic sensing [J]. *Photoacoustics*, 2020, **17**: 100159.
- [4] Sobanski N, Tuzson B, Scheidegger P, et al. Advances in High-Precision NO<sub>2</sub> Measurement by Quantum Cascade Laser Absorption Spectroscopy
   [J]. Applied Sciences, 2021, 11(3): 1222.
- [5] Terabayashi R, Saito K, Sonnenschein V, et al. Mid-infrared cavity ring-down spectroscopy using DFB quantum cascade laser with optical feedback for radiocarbon detection [J]. Japanese Journal of Applied Physics, 2020, 59(9): 092007.
- [6] Zimmerleiter R, Nikzad-Langerodi R, Ruckebusch C, et al. QCL-based mid-infrared hyperspectral imaging of multilayer polymer oxygen barrier-films [J]. Polymer Testing, 2021, 98: 107190.
- [7] Koyama T, Shibata N, Kino S, et al. A Compact Mid-Infrared Spectroscopy System for Healthcare Applications Based on a Wavelength-Swept, Pulsed Quantum Cascade Laser [J]. Sensors, 2020, 20(12): 3438.
- [8] Villanueva-López V, Pacheco-Londoño LC, Villarreal-González R, et al. API Content and Blend Uniformity Using Quantum Cascade Laser Spectroscopy Coupled with Multivariate Analysis [J]. *Pharmaceutics*, 2021, **13**(7): 985.
- [9] Pang X, Ozolins O, Zhang L, et al. Free-Space

Communications Enabled by Quantum Cascade Lasers [J]. *Physica Status Solidi* (a), 2020, **218** (3): 2000407.

- [10] Stephen M J, Dial E, Razeghi M. High-speed Free Space Optical Communications Based on Quantum Cascade Lasers and Type-II Superlattice Detectors [C]. SPIE, 2020, 11288: 1128814.
- [11] Meng B, Wang Q J. Broadly tunable single-mode mid-infrared quantum cascade lasers [J]. Journal of Optics, 2015, 17(2): 023001.
- [12] Giglio M, Zifarelli A, Sampaolo A, et al. Broadband detection of methane and nitrous oxide using a distributed-feedback quantum cascade laser array and quartz-enhanced photoacoustic sensing [J]. *Photoacoustics*, 2020, **17**: 100159.
- [13] Sobanski N, Tuzson B, Scheidegger P, et al. Advances in High-Precision NO<sub>2</sub> Measurement by Quantum Cascade Laser Absorption Spectroscopy
   [J]. Applied Sciences, 2021, 11(3): 1222.
- [14] Liu N, Xu L, Zhou S, et al. Soil Respiration Analysis Using a Mid-infrared Quantum Cascade Laser and Calibration-free WMS-based Dual-gas Sensor [J]. Analyst, 2021, 146 (12): 3841– 3851.
- [15] Terabayashi R, Saito K, Sonnenschein V, et al. Mid-infrared Cavity Ring-down Spectroscopy Using DFB Quantum Cascade Laser with Optical Feedback for Radiocarbon Detection [J]. Japanese Journal of Applied Physics, 2020, 59 (9): 092007.
- [16] Zimmerleiter R, Nikzad-Langerodi R, Ruckebusch C, et al. QCL-based Mid-infrared Hyperspectral Imaging of Multilayer Polymer Oxygen Barrierfilms [J]. Polymer Testing, 2021, 98: 107190.
- [17] Koyama T, Takuya N, Kino S, et al. A Compact Mid-Infrared Spectroscopy System for Healthcare Applications Based on a Wavelength-Swept, Pulsed Quantum Cascade Laser [J]. Sensors, 2020, 20(12): 3438.
- [18] Jernelv IL, Hjelme DR, Aksnes A. Infrared Measurements of Glucose in Peritoneal Fluid with a Tuneable Quantum Cascade Laser [J]. Biomedical Optics Express, 2020, 11(7): 3818–3829.

- [19] Villanueva-López V, Pacheco-Londono L C, Villarreal-González R, et al. API Content and Blend Uniformity Using Quantum Cascade Laser Spectroscopy Coupled with Multivariate Analysis [J]. *Pharmaceutics*, 2021, **13**(7): 985.
- [20] Beck M, Hofstetter D, Aellen T, et al. Continuous Wave Operation of a Mid-Infrared Semiconductor Laser at Room Temperature [J]. Science, 2002, 295(5553): 301-305.
- [21] Bai Y, Bandyopadhyay N, Tsao S, et al. Highly Temperature Insensitive Quantum Cascade Lasers
  [J]. Applied Physics Letters, 2010, 97 (25): 251104.
- [22] Lyakh A, Maulini R, Tsekoun A, et al. 3 W Continuouswave Room Temperature Single-facet Emission from Quantum Cascade Lasers Based on Nonresonant Extraction Design Approach [J]. Applied Physics Letters, 2009, 95(14): 141113.
- [23] Bai Y, Darvish S R, Slivken S, et al. Room Temperature Continuous Wave Operation of Quantum Cascade Lasers with Watt-level Optical Power
  [J]. Applied Physics Letters, 2008, 92 (10): 101105.
- [24] Tavish J M, Indjin D, Harrison P. Aspects of the Internal Physics of GaInAs/AlInAs Quantum Cascade Lasers [J]. Journal of Applied Physics, 2006, 99(11): 114505.
- [25] Li J, Ma X, Wei X, et al. Efficient Self-consistent Schrödinger-Poisson-rate Equation Iteration Method for the Modeling of Strained Quantum Cascade Lasers [J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2016, 49(19): 195106.
- [26] Khorami A A, Riahi A, Ghahramani M, et al. Design and Simulation of Terahertz GaAs/AlGaAs Quantum Cascade Laser for Higher Power Performance [J]. Optik, 2016, 127(3): 1097–1099.
- [27] Hutchings D C. Transfer Matrix Approach to the Analysis of an Arbitrary Quantum Well Structure in an Electric Field [J]. Applied Physics Letters, 1989, 55(11): 1082–1084.

- [28] Alharbi F. An Explicit FDM Calculation of Nonparabolicity Effects in Energy States of Quantum Wells [J]. Optical and Quantum Electronics, 2008, 40(8): 551-559.
- [29] Harrison P, Alex V. Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures [M]. New York: John Wiley & Sons, 2016.
- [30] Xu W, Folkes P A, Gumbs G. Self-consistent Electronic Subband Structure of Undoped InAs/ GaSb-based Type-II and Broken-gap Quantum Well Systems [J]. Journal of Applied Physics, 2007, 102(3): 033703.
- [31] Vurgaftman I, Meyer JR, Ram-Mohan LR. Band Parameters for III-V Compound Semiconductors and Their Alloys [J]. Journal of Applied Physics, 2001, 89(11): 5815-5875.
- [32] Tredicucci A, Gmachl C, Capasso F, et al. Long Wavelength Superlattice Quantum Cascade Lasers at λ≃17 μm [J]. Applied Physics Letters, 1999, 74(5): 638-640.
- [33] Xu W. LO-phonon Emission in an Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As-GaAs-Al<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>As Single Quantum Well with Two Occupied Electronic Subbands [J]. *Physical Re*view B, 1995, **51**(19): 13294–13302.
- [34] Zhu C, Zhang Y G, Li A Z, et al. Analysis of Key Parameters Affecting the Thermal Behavior and Performance of Quantum Cascade Lasers [J]. Journal of Applied Physics, 2006, 100 (5): 053105.
- [35] Saha S, Kumar J. Effect of Temperature and Electric Field on Quantum Cascade Laser Transients[C]. Kolkata: International Conference on Optics and Photonics, 2015.
- [36] Li Y Y, Li A Z, Gu Y, et al. The Effects of Injector Doping Densities on Lasing Properties of InP-based Quantum Cascade Lasers at 4.3 µm
  [J]. Journal of Crystal Growth, 2013, 378: 587-590.