

УДК 621.373.826

А.Г. ПАЩЕНКО

**РАСЧЕТ ПОЛОЖЕНИЯ КВАЗИУРОВНЯ ФЕРМИ И
КОЛИЧЕСТВА ФОТОНОВ В СИЛЬНО
ЛЕГИРОВАННОМ АРСЕНИДЕ ГАЛЛИЯ**

В полупроводниковых инжекционных лазерах на основе гомо-, гетеро- и квантоворазмерных структур для создания активной области наряду с чистыми используются сильно легированные полупроводниковые материалы, с ярко выраженными донорными или акцепторными уровнями.

Как известно, атомы элементов второй группы (Zn, Cd, Hg), а также Cu, Ag, Au, Na, Ca замещают галлий в кристаллической решетке и создают дырки в валентной зоне, поскольку они имеют меньше валентных электронов, чем галлий, следовательно, они являются акцепторами, сообщающими кристаллу проводимость р-типа. Наиболее эффективными акцепторами в арсениде галлия являются цинк и кадмий. На практике чаще всего используют цинк ввиду его большей предельной растворимости (примерно 10^{20}см^{-3}), а также значительного коэффициента диффузии. Акцепторный уровень цинка расположен в запрещенной зоне на 0,08 эВ выше максимума валентной зоны.

Наиболее эффективными донорами являются селен и Те, растворимость которых велика (коэффициент распределения при кристаллизации для Se равен 0,5, для Те — 0,3, тогда как для Zn он равен 0,1). Атомы этих элементов замещают мышьяк. Энергетический уровень, который они создают при концентрации примеси более $5 \cdot 10^{17}\text{см}^{-3}$, сливается с зоной проводимости.

Атомы элементов IV группы являются амфотерными примесями, т.е. могут быть либо донорами либо акцепторами. При малых концентрациях они занимают места только в одной из подрешеток (либо галлия, либо мышьяка), но с увеличением концентрации начинают занимать места и в подрешетке другого элемента. Например, кремний при малых концентрациях занимает места галлия и является донором, а в сильно легированном материале занимает и места мышьяка, образуя донорно-акцепторные пары [1].

Из теории лазеров известно, что генерация лазерного излучения в системе энергетических уровней возможна лишь при создании инверсной населенности на более высоком из них. Помимо этого, в случае полупроводника необходимо достаточно большое количество вакансий, которые могли бы занять частицы после рекомбинации. При инжекционном механизме накачки электроны попадают в область полупроводника, где они являются неосновными носителями и далее излучательно рекомбинируют с дырками. Следовательно, для осуществления излучательной рекомбинации как можно большей интенсивности, для преодоления потерь на поглощение необходимо, чтобы полупроводник с р-типом проводимости был сильно вырожден, т.е. сильно легирован акцепторной примесью. В случае GaAs наиболее широко применимой акцепторной примесью является цинк. Помимо этого, повышение концентрации носителей в области рекомбинации приведет к увеличению коэффициента преломления и, следовательно, к улучшению условий канализации оптического излучения в той области полупроводника, где оно, по сути, возникает. Поэтому при разработке источников лазерного

излучения на основе полупроводников с р-п-переходами представляют интерес не только чистые материалы, где преобладают зона-зонные излучательные переходы, но и материалы сильно легированные, где преобладают зона-примесные или примесь-зонные переходы (для полупроводников, легированных акцепторами и донорами соответственно). Но независимо от механизма излучательной рекомбинации энергии переходов как и в чистом полупроводнике будут лежать в пределах $h\nu = E_c - E_v$ для межзонных переходов и $h\nu = F_n - F_p$ — для переходов с участием примеси, где F_n и F_p — уровни Ферми для электронов и дырок соответственно, которые в случае сильно легированного полупроводника будут определяться концентрацией введенной примеси, а не только условиями нарушения термодинамического равновесия, как в случае чистого полупроводника. Соответствующее изменение будет претерпевать и количество излучаемых фотонов, поскольку пороговая скорость накачки зависит от количества введенной примеси.

Цель данной работы — расчет положения квазиуровня Ферми ξ и количества фотонов N в сильно легированном GaAs.

Для расчета использованы выражения, полученные при решении стационарных квантовомеханических скоростных уравнений [2]: на пороге генерации

$$\xi_{th} = E_0 [1 + \ln(2\chi kT / BE_0)] \quad (1)$$

$$N = \frac{1}{8\chi} \cdot 2(\chi + R_1 - P) + [4(\chi + R_1 - P)^2 + 16(P - R_1 + (R_2 / kT)(\xi_{th} + \Delta - 2kT))]^{\frac{1}{2}}, \quad (2)$$

выше порога генерации

$$\xi = \xi_{th} - [\chi / (P - R_1)] (2kT - \Delta), \quad (3)$$

$$N = (P - R_1) / 2\chi, \quad (4)$$

ниже порога генерации

$$\xi = \xi_{th} - (kT / R_2) (R_1 - P), \quad (5)$$

$$N = [R_2 / (R_1 - P)] (\xi_{kt} - \Delta + 2kT) / kT - 1. \quad (6)$$

Схема алгоритма программы расчета положения квазиуровня Ферми и количества фотонов в зависимости от скорости накачки и температуры приведена на рис. 1.

Назначение блоков следующее

A1 — ввод в программу исходных данных:

1. Физических постоянных

$h = 6,576 \cdot 10^{-16}$ эВ/с — постоянная Планка;
 $k = 8,621 \cdot 10^{-5}$ эВ/к — постоянная Больцмана;
 $c = 2,9979 \cdot 10^8$ м/с — скорость света в вакууме;
 $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$ кг — масса свободного электрона.

2. Параметры полупроводникового материала активной области в данном случае

$E_g = 1,437$ эВ — ширина запрещенной зоны;
 $\sigma = 0,33$ — величина спин-орбитального расщепления;
 $\eta = 3,5$ — коэффициент преломления рабочего вещества;
 $\chi = 1 \cdot 10^{11}$ — коэффициент оптических потерь в материале;
 $V = 12 \cdot 10^8$ — объем активной области;
 $T = 60-320$ — диапазон рабочих температур;
 $P = 10^{17}-10^{19}$ — диапазон изменения скорости накачки;
 $\lambda = 0,78 \cdot 10^{-6}$ — рабочая длина волны.

3. Математические константы, необходимые при расчете

$\pi = 3,14152$; $S = 2/3$; $S1 = 3/2$.

A3 — создание цикла по $j, j = 1$.

A4 — расчет множителя kT/E_0 .

A5 — расчет суммы

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n e^{-2n}}{x - n},$$

первому слагаемому присваивается значение "ноль".

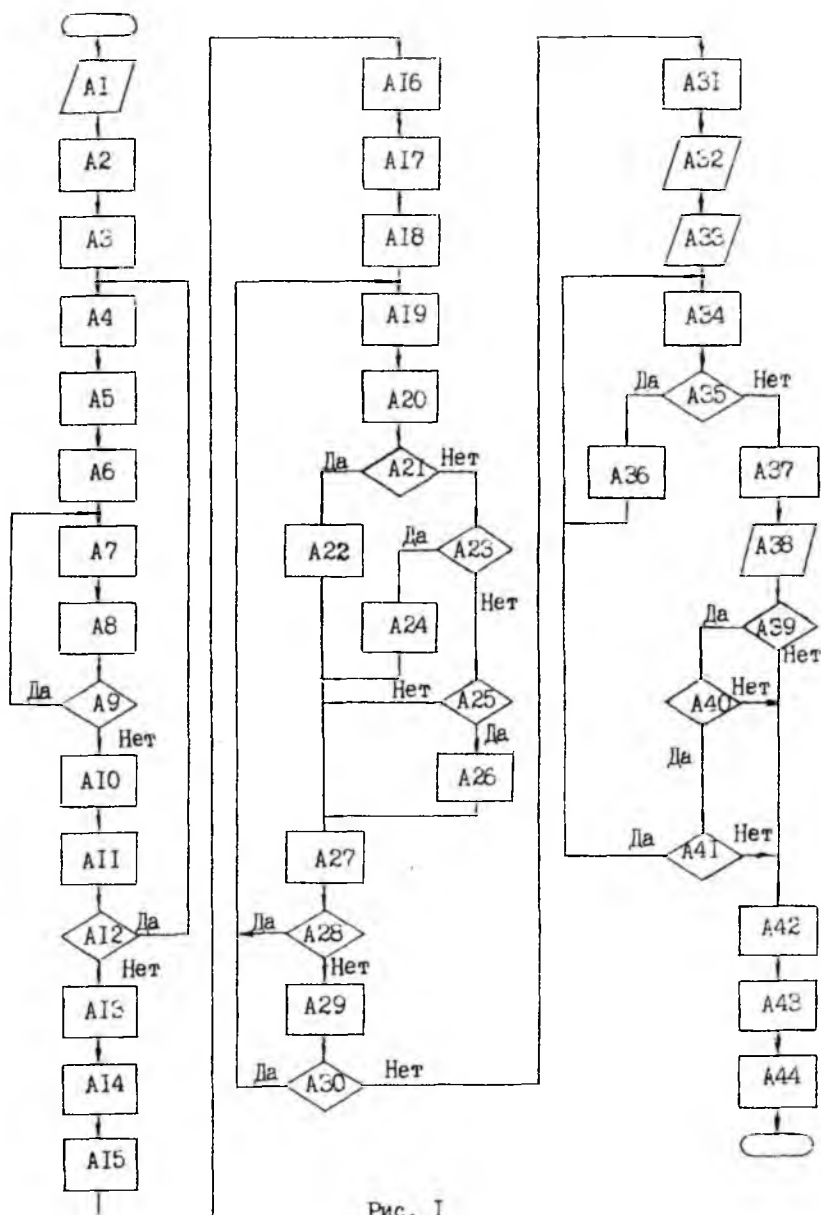


Рис. I

A6 — создание цикла по n , $n_1 = 1$. Максимальное значение $n = 4$, т.к. при $n > 4$ сумма стремится к нулю.

A7, A8, A9 — вычисление суммы при $n = 1$; приращение шага по $n = n + 1$; при $n \leq 4$ цикл закрывается.

A10 — расчет коэффициентов I_1, I_2 по формулам

$$I_1 = E_0 I_1^{\text{th}/E_0} \left(\frac{\pi \chi}{\sin \pi \chi} - \chi I_1^{2\chi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \ell^{-2n}}{x - n} \right),$$

$$I_2 = \chi I_1 - \frac{\chi E_0 \ell^{2\chi + E_{\text{th}}/E_0}}{1 + \ell^2}.$$

A11, A12, A13 — приращение цикла по j , $j = j + 1$; проверка переменной цикла j на переполнение, $j \leq 3$, если оно достигнуто, цикл повторяется с A4; вывод результатов расчета I_1, I_2 на печать.

A14 — расчет величин, необходимых для нахождения решений уравнений (1) — (6):

1) определение круговой частоты

$$\Omega = c/2\pi\lambda,$$

2) определение кратности вырождения энергетических уровней

$$|g|^2 = \frac{\pi e^2}{6 V_{\eta}^2 m_c} \cdot \frac{(E_g/h\Omega)(E_0 - \sigma)}{E_g - 2\sigma/3},$$

3) расчет $|\hbar|^2$

$$|\hbar|^2 = (64\pi a^3/V)|g|^2,$$

4) расчет B по формуле

$$B = \pi \hbar z \rho_0 |\hbar|^2 / 2,$$

5) расчет энергии фотона для данной температуры

$$\Delta = E_0 \ln(2\chi kT/BE_0),$$

6) расчет феноменологического множителя ρ_L

$$\rho_L = VE_g^2 h^3 / 2\pi\lambda^3,$$

7) расчет коэффициента разложения спонтанной релаксации

$$R_1 = 2B\rho_L I_1, \quad R_2 = 2B\rho_L I_2.$$

A15 — блок вывода на печать значений B , R_1 , R_2 .

A16 — вывод численных значений скорости накачки P : $P_1 = 5 \cdot 10^{17}$,
 $P_2 = 2,5 \cdot 10^{18}$, $P_3 = 10 \cdot 10^{18}$.

A17 — открывается внешний цикл по температуре: $i = 1$.

A18 — открывается внешний цикл по энергии E_0 : $j = 1$.

A19 — значения ξ и N приравниваются нулю.

A20 — расчет отношений $\vartheta = P/R_1$.

A21, A23, A25 — проверка принадлежности накачки для данной температуры к допороговой, пороговой и вышепороговой области по отношению P/R_1 .

A22 — в случае, если $0,5 \leq P/R_1 \leq 0,98$, выполняется расчет положения квазиуровня Ферми и концентрации фотонов по формулам (1) и (2) в блоке A1.

A24 — в случае, если $0,98 \leq P/R_1 \leq 1,04$, то расчет выполняется по формулам (3) и (4) в блоке A14.

A26 — если $1,04 < P/R_1$, то расчет выполняется по формулам (5) и (6).

A27, A28 — выполняется приращение цикла j , $j + 1$; проверка переменной цикла по энергии $E_0(j)$ на переполнение, если оно не достигнуто $j < 3$, то цикл повторяется.

A29, A30 — выполняется приращение внешнего цикла по температуре $i = i+1$; проверка переменной цикла по температуре на переполнение $i \leq 3$.

A31 — блок вывода на печать результатов расчета положения квазиуровня Ферми и концентрации фотонов в околопороговой и пороговой областях.

A32 — блок вывода значений, полученных в результате расчета (по программе нахождения квазиуровня Ферми или концентрации фотонов), в программу построения графиков зависимости ξ и N от скорости накачки и температуры.

A33 — блок ввода постоянных и вещественных переменных, необходимых для создания программы построения графиков.

A34 — блок реализации построений графиков с помощью специальных операторов графических построений.

A35 — блок логической проверки построения графиков, если результаты работы программы неудовлетворительны, то на экран поступает сообщение о неправильности ввода значений.

A36 — печать сообщения “ошибка в графиках”.

A37 — блок, задающий код штриховки графиков.

A38 — блок ввода значений для получения графиков в цветном режиме.

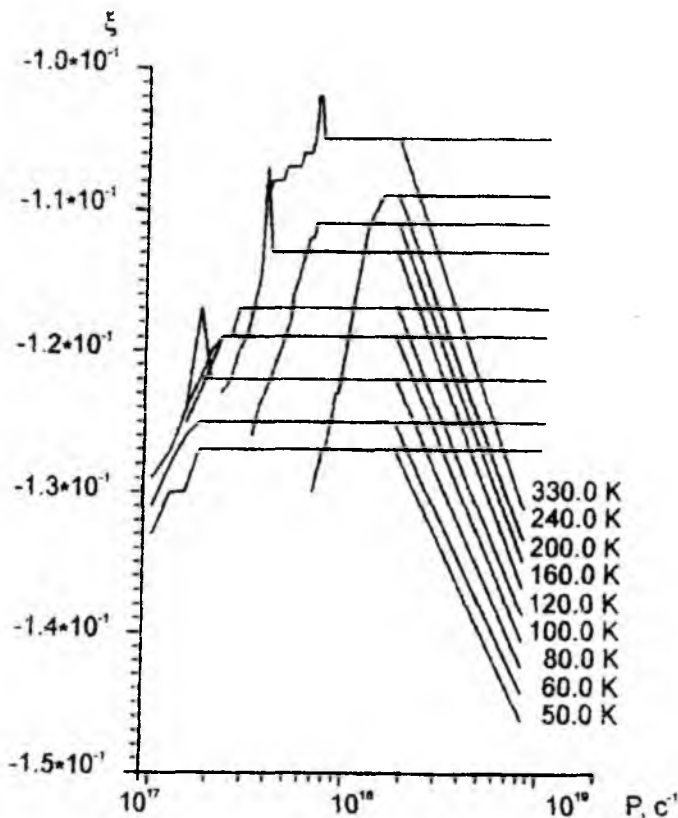


Рис. 2

A39 — блок проверки счетчика на переполнение, если $x = 1$, то первый график рисуется красным цветом, если нет, то программа переходит к блоку A40.

A40, A41 — блок построения второго графика зеленым цветом, если нет, то переход к блоку A41; блок построения графика синим цветом, если нет, то программа возвращается к началу.

A42 — блок сохранения полученных результатов в файле.

A43 — блок вывода на печать графиков.

Результаты расчетов количества фотонов N и положения квазиуровня Ферми ξ в зависимости от скорости накачки P и температуры T представлены на рис. 2 и 3 соответственно. Можно сделать вывод, что с ростом температуры количество фотонов возрастает приблизительно на порядок с увеличением температуры на 100 К.

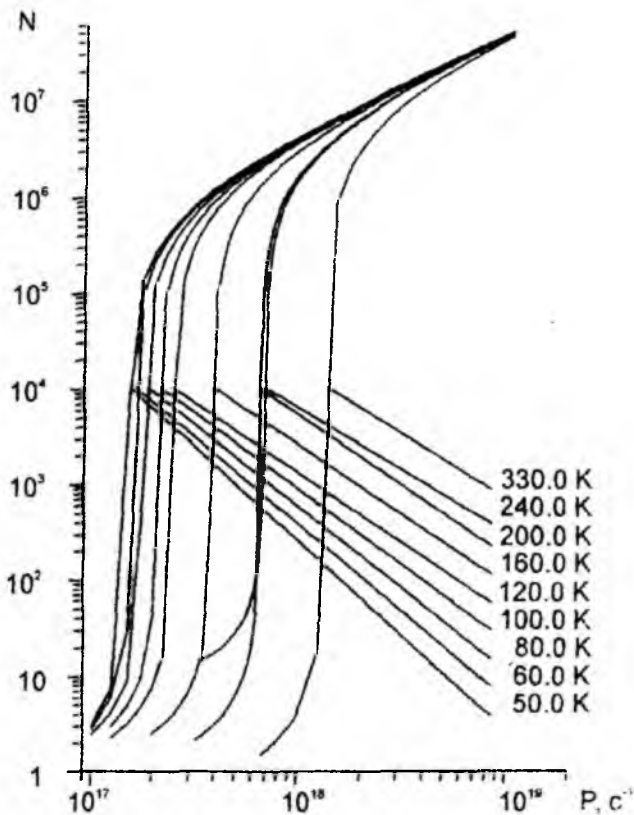


Рис. 3

Значительный рост количества фотонов наблюдается в области выше порога.

До порога возрастание количества фотонов не столь значительно.

Это связано с тем, что в сильно легированном полупроводнике в режиме суперлюминисценции возникает сильная конкуренция между носителями при зона-зонных переходах, благодаря чему преобладают бе-

ызлучательные переходы на глубокий акцепторный уровень. В пороговой области наблюдается скачок количества фотонов на 4-5 порядков. Этот скачок обусловлен накоплением носителей на глубоком акцепторном уровне и приводит к созданию инверсной населенности при дальнейшем увеличении скорости накачки.

Медленное возрастание положения квазиуровня Ферми с увеличением скорости накачки в допороговой области обусловлено прежде всего тем, что полупроводник сильно легирован и большое количество примесных дырок задает высокое положение квазиуровня Ферми. Переход от режима суперлюминисценции к генерации вследствие небольшого превышения количества неосновных носителей оказывает на положение квазиуровня Ферми значительное влияние. По этой причине пороговая область на рис.3 выражена не резко.

Полученные результаты могут быть использованы при расчете порогового тока и коэффициента усиления, а разработанный алгоритм и программа включены в библиотеку программ расчета полупроводниковых инжекционных лазеров.

Список литературы: 1. Рабцев Н.Г. Материалы квантовой электроники. М.: Сов. радио. 1972. 384 с. 2. Ванчан В.М., Пащенко А.Г. Численное решение стационарных квантовомеханических скоростных уравнений для полупроводниковых инжекционных лазеров в приближении эффективной массы // Радиотехника. 1997. № 101. С. 82-90.

Поступила в редакцию 17.04.96