

УДК 621. 373.8

В.М. ВАНЦАН, канд. физ.-мат. наук,
А.Г. ПАЩЕНКО

**ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ СТАЦИОНАРНЫХ
КВАНТОМЕХАНИЧЕСКИХ СКОРОСТНЫХ
УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ
ИНЖЕКЦИОННЫХ ЛАЗЕРОВ В ПРИБЛИЖЕНИИ
ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ**

Как известно, в первых полупроводниковых лазерах на основе гомо-структур пороговая плотность тока быстро увеличивалась с ростом тем-

пературы. Это создавало серьезные трудности при реализации режима непрерывной генерации при температуре 300 К и выше, а также для получения высокоскоростной модуляции как малым, так и большим сигналом.

Для определения порога генерации и характеристик полупроводникового лазера в большинстве случаев в качестве теоретической модели применяются классические скоростные уравнения, которые оказались наиболее эффективными.

Однако ряд параметров полупроводниковых инжекционных лазеров, таких как частота генерации, квантовые шумы (амплитудные и фазовые), ширина линии генерации и т.д., трудно описать в приближении скоростных уравнений несмотря на большое количество работ, выполненных в этой области.

В начале 60-х годов Хаугом были проведены детальные исследования лазера на арсениде галлия [1]. Его теория основывалась на замене классических переменных скоростных уравнений квантовыми. Это позволяет достаточно точно описать зависимость концентрации фотонов, положения квазиуровня Ферми, усиления и спектра шумов от уровня накачки и температуры.

В данной работе предложено численное решение стационарных квантовомеханических уравнений для полупроводниковых инжекционных лазеров в приближении эффективной массы.

Аналитические выражения для расчета положения квазиуровня Ферми и количества фотонов в допороговой, пороговой и вышепороговой областях, полученные при решении квантовомеханических скоростных уравнений, приведены в работе [1].

Схема алгоритма программы расчета положения квазиуровня Ферми, количества фотонов и усиления как функции скорости накачки и температуры представлена на рис.1. Назначение блоков этой схемы следующее.

Б2 — ввод в программу исходных данных:

1. Физических постоянных

$h = 6,576 \times 10^{-16} \text{ эВ}\cdot\text{с}$ — постоянная Планка;

$k = 8,621 \times 10^{-5} \text{ эВ}\cdot\text{с}$ — постоянная Больцмана;

$c = 2,9979 \times 10^8 \text{ м}\cdot\text{с}^{-1}$ — скорость света в вакууме;

$m = 9,1 \times 10^{-31} \text{ кг}$ — масса свободного электрона.

2. Параметров полупроводникового материала активной области, в данном случае:

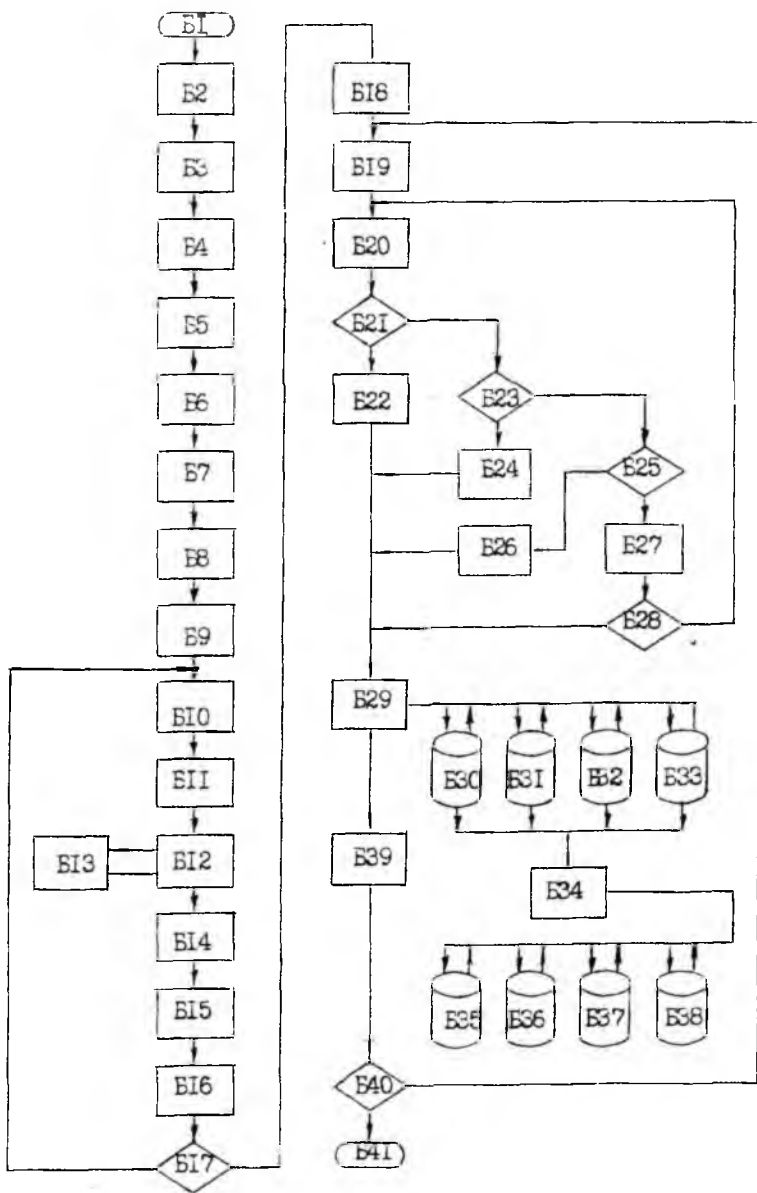


Рис. I

$E_g = 1,437 \text{ эВ}$ — ширина запрещенной зоны нелегированного GaAs;
 $\delta = 0,33 \text{ эВ}$ — величина спин-орбитального рабочего вещества;
 $\eta = 3,5$ — коэффициент преломления рабочего вещества;
 $\chi = 1 \times 10^{11}$ — коэффициент оптических потерь в материале;
 $V = 1 \times 10^{-14} \text{ м}^3$ — объем активной области;
 $T = [60 - 330 \text{ К}]$ — диапазон рабочих температур;
 $P_n = [1 \times 10^{17} - 10^{19} \text{ с}^{-1}]$ — диапазон измерения скорости накачки
 (количества электронов в секунду);
 $\lambda = 0,78 \times 10^{-6} \text{ м}$ — рабочая длина волны.

3. Математических констант, необходимых при расчетах:

$$\pi = 3,141526; S = 2/3; S_1 = 3/2.$$

БЗ — расчет массы электрона;

— в зоне проводимости MC $m_c = 0,072 m$;

— в валентной зоне MV $m_v = 0,5 m$;

— редуцированная масса электрона MR $m_r = 0,063 m$.

В любом полупроводниковом материале носители заряда — электроны и дырки характеризуются эффективными массами, значения которых определяются структурой энергетических зон данного полупроводникового материала и значительно отличаются от массы свободного электрона. Важно отметить, что для данного полупроводникового материала эффективные массы являются константами, характеризующими этот материал. В частности для GaAs эффективная масса электрона $m_e^* = 0,067 m_0$, где m_0 — масса свободного электрона. Эффективная масса дырки не может быть определена столь однозначно, поскольку в арсениде галлия существует разделение валентной зоны на подзоны легких и тяжелых дырок, которые вырождаются в точке $k = 0$ в центре зоны Бриллюэна.

Таким образом, каждая подзона характеризуется своей эффективной массой дырки, но для объемного полупроводника можно принять усреднение $m^{*P} = 0,5 m_0$. Подобное усреднение приемлемо поскольку, согласно правилам отбора по волновому вектору и энергии, излучаемый переход может происходить лишь в случае когда $k = 0$, что в прямозонном полупроводнике, каким является GaAs, соответствует переходу электрона из минимума зоны проводимости в максимум валентной зоны, т.е. в ту точку в k пространстве, где происходит вырождение подзон легких и тяжелых дырок, имеющих здесь одинаковую энергию.

Б4 — расчет отношения масс электрона, находящегося в различных состояниях, и круговой частоты генерации $\alpha = m_r/m_c$; $\beta = m_r/m_v$;

$$\Omega = 2 \cdot \pi \cdot c / \lambda.$$

Б5 — расчет феноменологического множителя ρ_L

$$\rho_L = V E^2 g \eta^3 / 2 \pi^2;$$

Б6 — расчет квадрата матричного элемента усиления

$$|g|^2 = \frac{\pi e^2}{6 V \eta^2 m_c} \cdot \frac{(E_g / \hbar \Omega) \cdot (E_g + \sigma)}{E_g + \frac{2}{3} \sigma};$$

Б7 — расчет плотности состояний для параболических зон

$$\rho' = V (2 m_r^3)^{1/2} / (\pi^2 \hbar^3);$$

Б8 — расчет феноменологического множителя

$$A = \pi \hbar \rho' |g|^2;$$

Б9 — оговаривается начало цикла по температуре для десяти фиксированных значений.

Б10 — расчет энергии фотона для данной температуры

$$\Delta = (4 k \chi T / A)^{2/3};$$

Б11 — расчет нижнего предела интегрирования по формуле

$$BL = -3 \Delta / k T;$$

Б12 — обращение к подпрограмме численного интегрирования DCARTE.

Б13 — вычисление соотношений

$$z = \int_{-3\Delta/kT}^{\infty} (x + 3\Delta/kT)^{1/2} (e^x + e^{\alpha x} + e^{\beta x} + 1)^{-1} dx,$$

$$z1 = \int_{-3\Delta/kT}^{\infty} (x + 3\Delta/kT)^{1/2} (e^x + e^{\alpha x} + e^{\beta x} + 1)^{-1} \times \\ \times \left[\alpha (1 + e^{-\alpha x})^{-1} + \beta (1 + e^{-\beta x})^{-1} \right] dx.$$

Б14 — расчет коэффициентов разложения скорости спонтанной релаксации R1 и R2

$$R1 = A\rho_L (kT)^{3/2} z,$$

$$R2 = A\rho_L (kT)^{3/2} z1;$$

Б15 — расчет порогового значения квазиуровня Ферми для каждого значения температуры $\xi_{th} = 3 \cdot \Delta$, где Δ — энергетическая ширина лазерного перехода, зависящая от температуры.

Б16 — приращение счетчика цикла по температуре.

Б17 — проверка счетчика цикла на переполнение.

Б18 — начало цикла по скорости накачки P_n (по его начальному значению).

Б19 — начало цикла по T (по первому элементу массива температур).

Б20 — расчет нормированного коэффициента $otn(I)$ для каждой температуры по формуле

$$otn(I) = P_n / R1(I);$$

Б21, Б23, Б25 — проверка принадлежности скорости накачки для данной температуры к допороговой и вышепороговой области по нормированному коэффициенту $otn(I)$.

В случае принадлежности P_n к допороговой области величины N, G1, G2 и ξ рассчитываются в Б22 по формулам

$$N = \left[\frac{-(\chi + R1 - P_n) + \sqrt{(\chi + R1 - P_n)^2 - (4\chi(R1 - P_n + R_2/kT))\chi}}{\sqrt{\chi(\xi_{th} + \Delta - 2kT)}} \right] / 4\chi.$$

$$\xi = (R1 - P_n - \chi)kT / R2 - \xi_{th} + \sqrt{\left((R1 - P_n - \chi) / kT / R2 - \xi_{th} \right) + \xi_{th}^2 - (kT / R2)\chi} + \sqrt{\chi(2\chi(2kT - \Delta) - \xi_{th}(P_n - R1))}$$

В случае принадлежности P_n к вышепороговой области N и ξ рассчитывается в Б26 по формулам:

$$N = \frac{(P - R1)}{2\chi};$$

$$\xi = \xi_{th} - \left(\frac{\chi}{P - R1} \right) \chi (2kT - \Delta)$$

Величины $G1$ и $G2$ в пороговой и вышепороговой областях вычисляются в Б24 и Б26 по формулам (1) и (2). Различия в результатах вычисления достигаются за счет того, что N и ξ , входящие в эти выражения в допороговой, пороговой и вышепороговой областях определяются из различных соотношений.

Б27 — приращение переменной цикла по температуре.

Б28 — проверка переменной цикла по температуре на переполнение, если оно не достигнуто, то цикл повторяется заново с Б20.

Б29, Б30, Б31, Б32, Б33, — вывод рассчитанных значений двумя потоками;

- первый поток — в текстовом, табличном виде для лучшего восприятия и вывод на печать;

- второй поток — в цифровом виде сохраняется в файлах на диске для представления в виде графиков с помощью графического пакета GRAFER, обращение к которому отражено в Б34.

Б35, Б36, Б37, Б38 — вывод рассчитанных значений в виде графиков и сохранение данного графического представления в файлах на диске.

Б39 — приращение внешнего цикла по скорости накачки на переменную цикла.

Б40 — проверка переменной цикла по скорости накачки на переполнение, если оно достигнуто, цикл повторяется с Б19.

После завершения цикла по скорости накачки Б41 завершает выполнение программы.

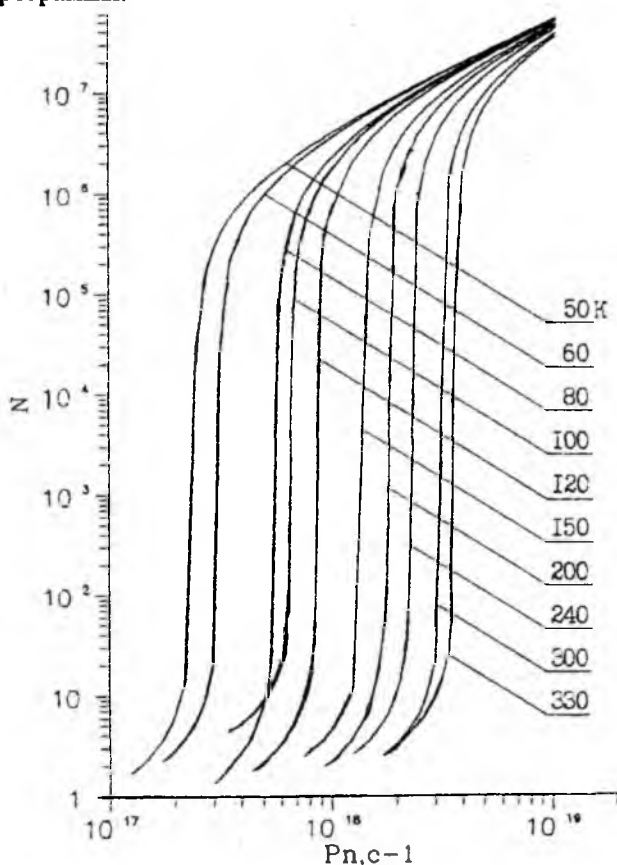


Рис. 2

По предложенному алгоритму была разработана программа расчета зависимости положения квазиуровня Ферми (ksi) и концентрации фотонов N от скорости накачки Pn , на языке FORTRAN версии 5.1.

На рис.2 и 3 представлены графики рассчитанных зависимостей, полученные с помощью графического пакета GRAFER. Эти зависимости отражают реальные физические процессы, протекающие в полупроводниковом инжекционном лазере на различных стадиях инжекции. Увеличение концентрации фотонов до порога, резкий скачок на пороге и монотонное насыщение выше порога.

Как показано на рис.3, на пороге не наблюдается резкий переход от допороговых, быстро возрастающих значений ξ (ksi) к послепороговым насыщенным значениям. Для некоторых температур, например, 50—120 и 300—330 К, в пороговой области наблюдается переход пикового характера, а при температурах 120—300 К — плавный переход.

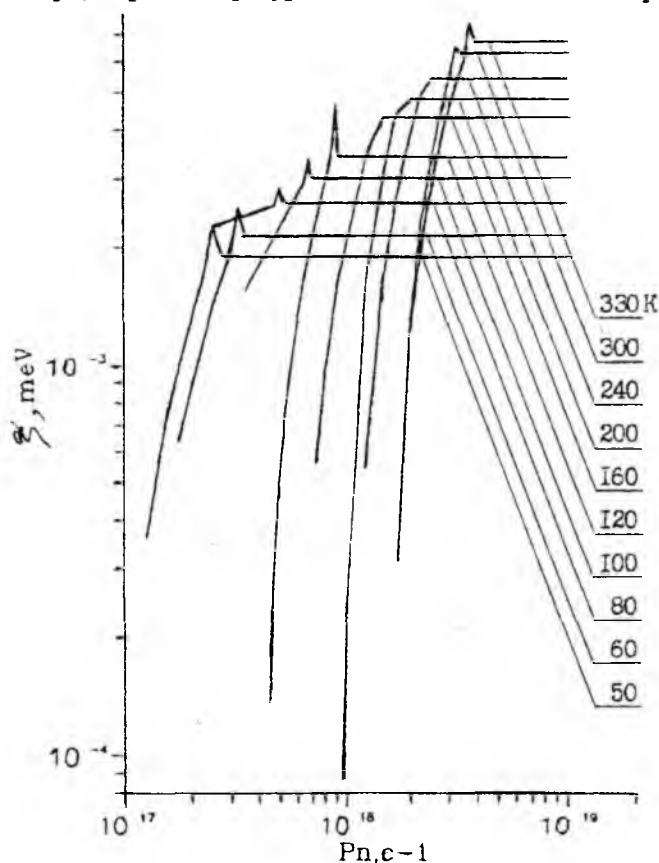


Рис. 3

Подобный характер зависимости $\xi(ksi) = f(P_n)$ в пороговой области был предсказан в работе [1].

Диапазон изменения скорости накачки от 10^{17} до 10^{19} с⁻¹ был выбран не случайно, т.к. именно при такой скорости накачки достигается инверсия населенности в кристаллах GaAs, необходимая для поддержания генерации.

Изменение скорости накачки в указанных пределах присуще любому способу создания инверсной населенности в полупроводниковых лазерах и выполняется для любых конструкций и внутренних структур самого лазерного диода. Поэтому полученные решения можно распространить на инжекционные лазеры на основе квантоворазмерных структур (КРС).

При переходе от обычных гетероструктур к гетеропереходам с квантовым ограничением — квантоворазмерным структурам аналитические выражения для плотности фотонов и положения квазиуровня Ферми нуждаются в уточнении.

Общность полученных решений обусловлена тем, что как в классических, так и в квантовомеханических скоростных уравнениях сохраняется связь между количеством инжектированных носителей и излучаемых в лазерную моду фотонов в единицу времени, баланс которых и подводят скоростные уравнения в любом представлении. При этом характер данной зависимости не меняется с изменением механизмов создания инверсной населенности, способов электронного и оптического ограничения, условий распространения генерируемого излучения в полупроводнике, будут лишь изменяться коэффициенты и множители в слагаемых уравнений, учитывающие влияние того или иного физического процесса на механизм генерации, условия распространения и т.д.

В этом смысле, величины, входящие в выражения для определения количества фотонов и положения квазиуровня Ферми, в плане описания процессов в КРС изменяются следующим образом:

- в связи с тем, что КРС уровни энергии электронов имеют не непрерывный, а дискретный спектр значений и переходы разрешены лишь для уровней энергии с одинаковой четностью, а не со дна зоны проводимости, функция плотности состояний для зон существенно изменяется. Согласно теории КРС она станет не параболической, а ступенчатой;

- наряду с изменениями плотности состояний изменяются также и матричные элементы перехода и усиления, которые зависят от нее.

- возникает необходимость переопределения величин R1 и R2 — коэффициентов разложения функции скорости рекомбинации в ряд Тейлора с учетом принятых изменений;

- резко уменьшается объем активной области, т.к. в случае КРС он будет включать в себя только объем квантовых ям, а не всей гетероструктуры.

Определение положения квазиуровня Ферми становится для КРС вопросом еще более актуальным, чем для объемных гетероструктур, поскольку из всех возможных разрешенных состояний для электрона в зоне проводимости, полученных в результате решения уравнения Шредингера, реально занятыми окажутся только те, которые по значению своей энергии окажутся ниже энергии квазиуровня Ферми.

Следовательно, последующую оценку этих уровней на предмет их устойчивости и возможности создания на них инверсной населенности необходимо проводить не только по правилам отбора, но и по вероятности нахождения на них электронов, задаваемой положением квазиуровня Ферми.

В КРС возникает также необходимость более точного определения эффективных масс носителей с учетом распада валентной зоны на подзоны легких и тяжелых дырок как в области квантовых ям, так и в области ограничивающих и разделяющих барьеров, так как от их отношения будут зависеть уровни энергии частиц в квантовых ямах, а значит и времена жизни частиц и частоты переходов.

Список литературы: 1. *Haug H., Phys. Rev., 184,338, 1969. № 15 Уж 96.* 2. *Ванцын В.М., Паченко А.Г.* Разработка математических моделей для расчета и проектирования инжекционных лазеров. Часть I. Расчет коэффициента усиления и порогового тока. Деп. в ГНТБ Украины.

Поступила в редколлегию 05.12.95