

# 量子级联激光器有源核中界面声子的特性研究<sup>\*</sup>

徐刚毅<sup>†</sup> 李爱珍

(中国科学院上海微系统与信息技术研究所信息功能材料国家重点实验室, 上海 200050)

(2004 年 4 月 14 日收到, 2006 年 6 月 23 日收到修改稿)

研究了量子级联激光器有源核中界面声子的色散关系和静电势分布. 根据有源核内部的平移不变性导出了界面声子的色散关系. 计算显示有源核中的界面声子可以分为体声子和表面声子模式. 体声子的色散曲线构成一系列准连续的声子子带, 其静电势分布于整个有源核并呈现出 Bloch 波的特征. 表面声子的色散曲线位于各体声子子带的带隙内, 其静电势局域在有源核一侧. 这些结果将有助于量子级联激光器和子带跃迁激光器的优化设计.

关键词: 量子级联激光器, 界面声子

PACC: 7138, 7340L, 4255P

## 1. 引言

半导体量子级联激光器(quantum cascade laser, QCL)是中远红外波段的理想激光光源. QCL 的有源核由多个相同的单元结构重复生长构成, 每一单元为一个耦合多量子阱结构, 在适当的偏压下多量子阱的导带形成一系列的子带, 激光的产生源于电子在导带子带间的辐射跃迁. 电子与界面声子的散射过程已被证明是决定 QCL 导带子带中电子弛豫时间的最重要的过程, 也是决定粒子数反转的关键因素<sup>[1-5]</sup>. 因此, 准确地描述界面声子的色散关系和静电势是提高 QCL 性能的关键.

Yu 和 Kim 等人基于介观电连续模型和微观分析, 提出了用传输矩阵模型来求解多量子阱中界面声子的色散关系和静电势<sup>[6]</sup>, 其结果与基于第一性原理的微观计算能很好地一致, 并能极大地节省计算时间<sup>[7,8]</sup>. 因此传输矩阵模型也被用于研究 QCL 中的界面声子. 由于 QCL 有源核包含几百甚至上千个界面, 直接应用传输矩阵模型显然是困难的. 为简化起见, 目前普遍采用的方法是将传输矩阵模型用于 QCL 有源核中的一个单元结构<sup>[9-12]</sup>. 这种处理的假设是界面声子的静电势分布在各单元中都是相同的, 并且, 可以孤立地考虑一个单元中的声子行为而忽略其他单元的影响.

以上假设是否成立, 是一个核心的问题. 本文通过深入研究 QCL 有源核中界面声子的特性来回答这一问题. 考察 QCL 有源核中材料以及界面的规律可以发现: (1) 有源核每个单元为一个多量子阱结构, 各层中界面声子的静电势可通过传输矩阵建立联系. (2) 有源核内部存在平移不变性, 这使得有源核内界面声子的静电势具有 Bloch 波的特征<sup>[13-15]</sup>. 因此我们提出了描述 QCL 有源核界面声子的模型, 即用传输矩阵处理界面声子在一个单元内的行为, 而用 Bloch-Fluquet 理论处理界面声子静电势在单元与单元之间的传播. 以上分析可导出有源核中界面声子解的形式, 结合边界条件可确定界面声子的能量色散关系和静电势.

本文介绍了我们的模型, 并说明该模型与 Camley 等人提出的处理有限超晶格的模型之间的联系; 以 Williams 等人提出的 QCL 有源核为例研究有源核内界面声子的特性, 还证明了传输矩阵模型不能直接应用于描述 QCL 有源核中的界面声子.

## 2. 物理模型

图 1 为有源核的结构示意图, 整个有源核由  $p$  个单元组成, 镶嵌在上下波导层  $C$  和  $D$  之间. 每个单元由势垒材料  $A$  和势阱材料  $B$  组成, 共  $N$  层, 每层外延层的厚度为  $d_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ), 每个单元的

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号: 60406008)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: gxu@mail.sim.ac.cn

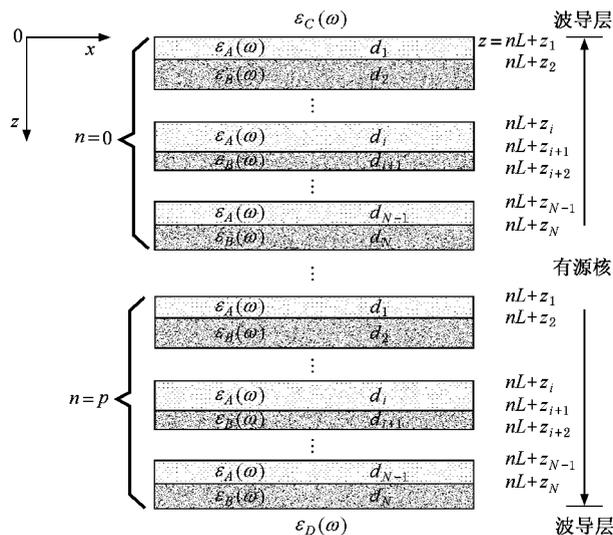


图1 量子级联激光器有源核结构示意图

厚度为  $L$  ( $L = \sum_{i=1}^N d_i$ ). 所有材料的介电常数都是频率  $\omega$  的函数, 即  $\epsilon_j = \epsilon_j(\omega)$  ( $j = A, B, C, D$ ). 界面声子的静电势  $\phi(\mathbf{r}, t)$  必须在所有区域满足 Laplace's 方程

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (1)$$

此外在所有界面处还需满足边界条件, 即静电势和电位移矢量的法向分量必须连续. 我们令坐标系  $z$  和  $x$  轴分别垂直和平行于界面, 并令  $z$  轴的 0 点为有源核与波导层  $C$  的界面处. 由系统在  $x, y$  方向的平移不变性,  $\phi(\mathbf{r}, t)$  可表为

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \Phi(z) e^{i(kx - \omega t)}, \quad (2)$$

$k$  为平行界面方向的波矢,  $\omega$  为界面声子的频率. 由(1)和(2)式可以得到  $\Phi(z)$  的普遍形式  $\Phi(z) = A_+ e^{+\gamma z} + A_- e^{-\gamma z}$ .

图1所示的结构类似有限超晶格结构, 在  $z$  方向存在平移不变性. 因此界面声子的静电势  $\Phi(z)$  具有 Bloch 波的形式, 即  $\Phi(z)$  可以表示为两项之和, 每一项本质上是每一层中表面波形式的静电势函数与一个包络函数 ( $e^{-\gamma nL}$  或  $e^{+\gamma nL}$ ,  $\gamma$  为 Bloch 波在  $z$  方向的波矢) 的乘积. 因此, 我们可以将有源核中静电势  $\Phi(z)$  表示为

$$\Phi(z) = C e^{+\gamma z}, \quad z < 0, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{n,i}(z) = & e^{-\gamma nL} (A_{i,+} e^{k(z-nL-z_i)} + A_{i,-} e^{-k(z-nL-z_i)}) \\ & + e^{+\gamma nL} (A'_{i,+} e^{k(z-nL-z_i)} + A'_{i,-} e^{-k(z-nL-z_i)}), \\ & nL + z_i \leq z \leq nL + z_{i+1}, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\Phi(z) = D e^{-\gamma z}, \quad z \geq pL. \quad (5)$$

其中(3)式和(5)式分别表示静电势在上下波导层中的分布. (4)式表示静电势  $\Phi(z)$  在有源核内第  $n$  单元第  $i$  层内的分布.  $C, A_{i,+}, A_{i,-}, A'_{i,+}, A'_{i,-}, D$  为待确定的系数.  $\gamma$  和  $-\gamma$  表示 Bloch 波的波矢. 当  $\gamma$  为纯虚数时  $\Phi(z)$  具有行波特性的; 当  $\gamma$  的实部大于 0 时,  $\Phi(z)$  为指数式衰减的表面波. 结合边界条件可得到界面声子具体的能量色散关系.

首先处理一个单元内的边界条件. 在第  $n$  单元中的第  $i$  层和第  $i+1$  层的边界处  $z = nL + z_{i+1}$ ,  $\Phi(z)$  的连续要求

$$\begin{aligned} & e^{-\gamma nL} [A_{i,+} e^{k d_i} + A_{i,-} e^{-k d_i}] \\ & + e^{+\gamma nL} [A'_{i,+} e^{k d_i} + A'_{i,-} e^{-k d_i}] \\ = & e^{-\gamma nL} [A_{i+1,+} + A_{i+1,-}] + e^{+\gamma nL} [A'_{i+1,+} + A'_{i+1,-}]. \end{aligned} \quad (6)$$

$\epsilon(\omega) \frac{\partial \Phi(z)}{\partial z}$  的连续则要求

$$\begin{aligned} & \epsilon_i \left[ e^{-\gamma nL} (A_{i,+} e^{k d_i} - A_{i,-} e^{-k d_i}) \right. \\ & \left. + e^{+\gamma nL} (A'_{i,+} e^{k d_i} - A'_{i,-} e^{-k d_i}) \right] \\ = & \epsilon_{i+1} \left[ e^{-\gamma nL} (A_{i+1,+} - A_{i+1,-}) \right. \\ & \left. + e^{+\gamma nL} (A'_{i+1,+} - A'_{i+1,-}) \right], \end{aligned} \quad (7)$$

此处,  $\epsilon_i$  表示第  $i$  层材料的介电常数 ( $\epsilon_i = \epsilon_A(\omega)$  或  $\epsilon_B(\omega)$ ). 因为对任意的  $\gamma$  (6)式和(7)式都必须成立, 则各系数必须满足

$$\begin{aligned} & A_{i,+} e^{k d_i} + A_{i,-} e^{-k d_i} = A_{i+1,+} + A_{i+1,-}, \\ & \epsilon_i (A_{i,+} e^{k d_i} - A_{i,-} e^{-k d_i}) = \epsilon_{i+1} (A_{i+1,+} - A_{i+1,-}), \end{aligned} \quad (8)$$

以及

$$\begin{aligned} & A'_{i,+} e^{k d_i} + A'_{i,-} e^{-k d_i} = A'_{i+1,+} + A'_{i+1,-}, \\ & \epsilon_i (A'_{i,+} e^{k d_i} - A'_{i,-} e^{-k d_i}) = \epsilon_{i+1} (A'_{i+1,+} - A'_{i+1,-}). \end{aligned} \quad (9)$$

对(8)式和(9)式做适当的处理后, 可以发现, 同一单元两相邻层中  $\Phi(z)$  的各系数之间可以用一个矩阵建立联系:

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} A_{i+1,+} \\ A_{i+1,-} \end{pmatrix} = G_i \cdot \begin{pmatrix} A_{i,+} \\ A_{i,-} \end{pmatrix}, \\ & \begin{pmatrix} A'_{i+1,+} \\ A'_{i+1,-} \end{pmatrix} = G_i \cdot \begin{pmatrix} A'_{i,+} \\ A'_{i,-} \end{pmatrix}, \\ & G_i = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e^{k d_i} & e^{-k d_i} \\ \epsilon_i / \epsilon_{i+1} e^{k d_i} & -\epsilon_i / \epsilon_{i+1} e^{-k d_i} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (10)$$

由此,每一单元各层  $\Phi(z)$  的系数可以通过一系列的传输矩阵  $G_i$  建立联系. 如,同一单元第 1 层和第  $N$  层中  $\Phi(z)$  的系数满足

$$\begin{pmatrix} A_{N,+} \\ A_{N,-} \end{pmatrix} = G_{N-1} \cdots G_i \cdots G_1 \cdot \begin{pmatrix} A_{1,+} \\ A_{1,-} \end{pmatrix}, \quad (11)$$

$$\begin{pmatrix} A'_{N,+} \\ A'_{N,-} \end{pmatrix} = G_{N-1} \cdots G_i \cdots G_1 \cdot \begin{pmatrix} A'_{1,+} \\ A'_{1,-} \end{pmatrix}.$$

现在我们考察两个相邻单元的界面处应满足的边界条件,在  $z = nL$  ( $0 < n < p$ ) 时,同样可以得到

$$\begin{aligned} & e^{-\gamma nL} [A_{N,+} e^{kd_N} + A_{N,-} e^{-kd_N}] \\ & + e^{\gamma nL} [A'_{N,+} e^{kd_N} + A'_{N,-} e^{-kd_N}] \\ = & e^{-\chi(n+1)L} [A_{1,+} + A_{1,-}] + e^{\chi(n+1)L} [A'_{1,+} + A'_{1,-}], \end{aligned} \quad (12a)$$

以及

$$\begin{aligned} & \epsilon_N \left\{ e^{-\gamma nL} [A_{N,+} e^{kd_N} - A_{N,-} e^{-kd_N}] \right. \\ & \left. + e^{\gamma nL} [A'_{N,+} e^{kd_N} - A'_{N,-} e^{-kd_N}] \right\} \\ = & \epsilon_1 \left\{ e^{-\chi(n+1)L} [A_{1,+} - A_{1,-}] + e^{\chi(n+1)L} [A'_{1,+} - A'_{1,-}] \right\}. \end{aligned} \quad (12b)$$

同样可以将(12a)和(12b)式表示成矩阵形式

$$\begin{aligned} e^{-\gamma L} \begin{pmatrix} A_{1,+} \\ A_{1,-} \end{pmatrix} &= G_N \cdot \begin{pmatrix} A_{N,+} \\ A_{N,-} \end{pmatrix}, \\ e^{\gamma L} \begin{pmatrix} A'_{1,+} \\ A'_{1,-} \end{pmatrix} &= G_N \cdot \begin{pmatrix} A'_{N,+} \\ A'_{N,-} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (13)$$

将(11)式代入(13)式可得

$$e^{-\gamma L} \begin{pmatrix} A_{1,+} \\ A_{1,-} \end{pmatrix} = M \cdot \begin{pmatrix} A_{1,+} \\ A_{1,-} \end{pmatrix}, \quad (14a)$$

$$e^{\gamma L} \begin{pmatrix} A'_{1,+} \\ A'_{1,-} \end{pmatrix} = M \cdot \begin{pmatrix} A'_{1,+} \\ A'_{1,-} \end{pmatrix}, \quad (14b)$$

$$M \equiv G_N G_{N-1} \cdots G_1. \quad (14c)$$

显然  $A_{i,+}$ ,  $A_{i,-}$ ,  $A'_{i,+}$ ,  $A'_{i,-}$  具有非平凡解的充要条件是(14)中它们的系数行列式值为 0 (14a)和(14b)可导出相同的  $\gamma$  和  $\epsilon_c(\omega)$  应满足的方程

$$\text{De}[M - e^{-\gamma L} \cdot E] = 0, \quad (15)$$

其中  $E$  为二阶单元矩阵. 当一个单元含有的总层数为 2 时 ( $N=2$ ), 该有源核结构将简化为普通的有限超晶格结构, 而这时(15)式有更具体的表达式为

$$\begin{aligned} \cosh(\gamma L) &= \cosh(kd_2) \cosh(kd_1) \\ &+ \frac{1}{2} \left( \frac{\epsilon_A}{\epsilon_B} + \frac{\epsilon_B}{\epsilon_A} \right) \sinh(kd_2) \sinh(kd_1). \end{aligned} \quad (16)$$

上式与文献[14]的第(33)式,即描述有限超晶格中  $\gamma$  和  $\epsilon_c(\omega)$  应满足的方程,完全一致.

现在考察有源核与波导层的界面处的边界条件,在有源核与上波导层的界面处,  $z=0$ ,

$$\begin{aligned} C &= A_{1,+} + A_{1,-} + A'_{1,+} + A'_{1,-}, \\ \epsilon_c \cdot C &= \epsilon_A (A_{1,+} - A_{1,-} + A'_{1,+} - A'_{1,-}). \end{aligned} \quad (17)$$

在有源核与下波导层的界面处,  $z=pL$ ,

$$\begin{aligned} D e^{-kpL} &= e^{-\chi(p-1)L} [A_{N,+} e^{kd_N} + A_{N,-} e^{-kd_N}] \\ &+ e^{\chi(p-1)L} [A'_{N,+} e^{kd_N} + A'_{N,-} e^{-kd_N}], \\ -\epsilon_D D e^{-kpL} &= \epsilon_N \left\{ e^{-\chi(p-1)L} [A_{N,+} e^{kd_N} - A_{N,-} e^{-kd_N}] \right. \\ &\left. + e^{\chi(p-1)L} [A'_{N,+} e^{kd_N} - A'_{N,-} e^{-kd_N}] \right\}. \end{aligned} \quad (18)$$

将(12a)和(12b)式代入上式,可以得到

$$\begin{aligned} D e^{-kpL} &= e^{-\gamma pL} [A_{1,+} + A_{1,-}] + e^{\gamma pL} [A'_{1,+} + A'_{1,-}], \\ -\epsilon_D D e^{-kpL} &= \epsilon_1 \left\{ e^{-\gamma pL} [A_{1,+} - A_{1,-}] \right. \\ &\left. + e^{\gamma pL} [A'_{1,+} - A'_{1,-}] \right\}. \end{aligned} \quad (19)$$

由(14a)和(14b)式容易得到  $A_{i,+}$  与  $A_{i,-}$ , 以及  $A'_{i,+}$  与  $A'_{i,-}$  之间满足以下关系:

$$\begin{aligned} A_{i,-} &= K A_{i,+}, \\ A'_{i,-} &= K' A'_{i,+}, \end{aligned} \quad (20)$$

其中

$$K = -\frac{M_{11} - e^{-\gamma L}}{M_{12}}; \quad K' = -\frac{M_{11} - e^{\gamma L}}{M_{12}}, \quad (21)$$

其中  $M_{i,j}$  为矩阵  $M$  的第  $(i,j)$  个元素. 将(20)和(21)式代入(17)和(19)式,经整理可得到

$$\begin{pmatrix} (1+K) & (1+K') & -1 & 0 \\ \epsilon_A(1-K) & \epsilon_A(1-K') & -\epsilon_C & 0 \\ e^{-\gamma pL}(1+K) & e^{\gamma pL}(1+K') & 0 & -e^{-kpL} \\ \epsilon_A e^{-\gamma pL}(1-K) & \epsilon_A e^{\gamma pL}(1-K') & 0 & \epsilon_D e^{-kpL} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_{1,+} \\ A'_{1,+} \\ C \\ D \end{pmatrix} = 0, \quad (22)$$

各变量  $(A_{1,x}, A'_{1,x}, C, D)$  具有非平凡解的充要条件是其系数矩阵的行列式值为 0, 经整理可得

$$\left[ \epsilon_A^2(1 - K)(1 - K') - \epsilon_C \epsilon_D(1 + K)(1 + K') - \epsilon_A(\epsilon_C - \epsilon_D)(1 - KK') \right] \tan(\gamma p L) - \epsilon_A(\epsilon_C + \epsilon_D)(K - K') = 0. \quad (23)$$

(23) 和 (15) 式共同构成 QCL 有源核中界面声子色散关系的方程. 同样可以证明当有源核中一个单元只含有 2 层材料 (即  $N = 2$ ) 时 (23) 式与文献 [14] 中描述有限超晶格色散关系的 (45) 式是完全一致的.

通过 (23) 式和 (15) 式还可以确定 QCL 有源核中界面声子模式的个数. (23) 式和 (15) 式有一个共同的特点, 即, 若  $\gamma = x$  满足等式则  $\gamma = -x$  也满足等式. 而从 (4) 式可见它们对应静电势  $\phi(z)$  的同一个解. 因此只需寻找  $\text{Re}(\gamma) \geq 0$  的解. 由 (23) 式可知, 对任一波矢  $k$ ,  $\gamma$  解的个数为  $p + 1$ , 而由 (15) 式可知对任意一个  $\gamma$  值,  $\epsilon_A(\omega)/\epsilon_B(\omega)$  解的个数为  $N$ . 以 GaAs/AlGaAs 材料体系构成的有源核为例, 根据半导体材料  $\epsilon(\omega)$  满足的形式:

二元材料

$$\epsilon(\omega) = \epsilon(\infty) \frac{\omega^2 - \omega_{LO}^2}{\omega^2 - \omega_{TO}^2}, \quad (24a)$$

三元材料

$$\epsilon(\omega) = \epsilon(\infty) \frac{(\omega^2 - \omega_{LOA}^2)(\omega^2 - \omega_{LOB}^2)}{(\omega^2 - \omega_{TOA}^2)(\omega^2 - \omega_{TOB}^2)}, \quad (24b)$$

可知, 对任意一个  $\epsilon_A(\omega)/\epsilon_B(\omega)$  的值, 可以有 3 个  $\omega$  的解, 2 个类 GaAs 声子模式和 1 个类 AlAs 声子模式. 因此, 对任何一个波矢, 有源核中最多包含有  $3N(p + 1)$  个界面声子模式, 其中  $2N(p + 1)$  个属于类 GaAs 声子,  $N(p + 1)$  属于类 AlAs 声子. 从 (24) 式可知  $\epsilon_A(\omega)/\epsilon_B(\omega)$  的值必须是实数, 因此有源核中实际允许的界面声子模式的个数有可能小于  $3N(p + 1)$ .

### 3. 结果与讨论

本节讨论传输矩阵模型和我们的模型在处理 QCL 有源核界面声子特性时的区别. 以 Williams 等提出的量子级联激光器有源核结构为例 [16], 并假设有源核含 10 个单元, 上下波导层均为  $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ . 该有源核中的一个单元 GaAs 和  $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$  交替生长构成, 各层的厚度为  $\underline{5.4}/7.8/\underline{2.4}/6.4/\underline{3.8}/14.8/\underline{2.4}/9.4$  (nm), 其中带下划线的值代表势垒层的厚

度. 本文所用的二元材料与三元材料的介电常数与声子频率列于表 1 中.

表 1 计算所用的介电常数和声子频率 [61]

	GaAs	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$
$\epsilon_\infty$	10.89	$10.89 - 2.73 \times x$
$\hbar\omega_{LO}$ (类 GaAs) / meV	36.25	$36.25 - 6.55 \times x + 1.79 \times x^2$
$\hbar\omega_{TO}$ (类 GaAs) / meV	33.29	$33.29 - 0.64 \times x - 1.16 \times x^2$
$\hbar\omega_{LO}$ (类 AlAs) / meV		$44.63 + 8.78 \times x - 3.32 \times x^2$
$\hbar\omega_{TO}$ (类 AlAs) / meV		$44.63 + 0.55 \times x - 0.30 \times x^2$

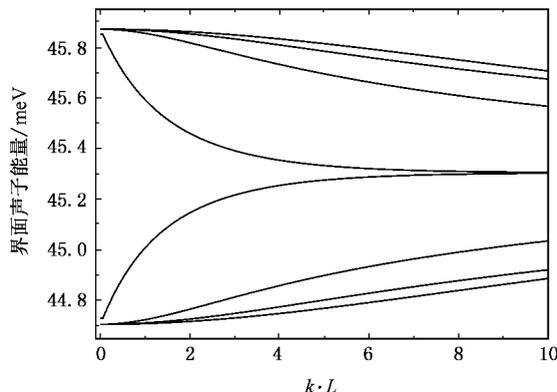


图 2 由传输矩阵模型得到的有源核中 8 个类 AlAs 界面声子的色散关系

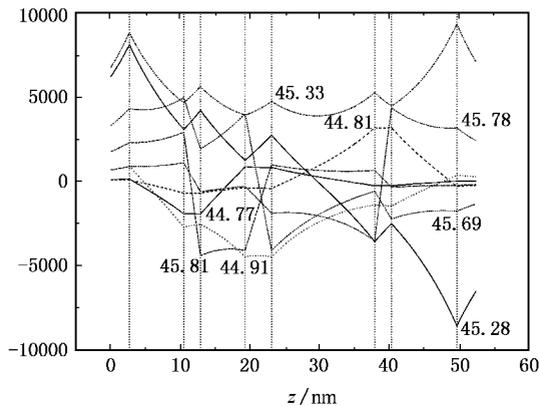


图 3 由传输矩阵模型得到的 8 个类 AlAs 界面声子在有源核一个单元内的静电势分布 ( $k \cdot L = 5$ ) (图中标出了各声子的能量, 单位为 meV)

我们首先讨论传输矩阵模型的结果. 图 2 显示了该模型得到的 QCL 有源核界面声子中所有 8 个类 AlAs 声子的色散关系. 图 3 则显示了  $k \cdot L = 5$  时这 8 个类 AlAs 声子在有源核一个单元内的静电势分布. 不难发现, 对任意一个声子模式, 当用传输矩阵模型分别计算该声子模式在两个相邻单元内的静电势分布时, 静电势  $\phi(z)$  在单元与单元的边界处是不连续的. 作为例子, 图 4 显示了传输矩阵模型

得到的第 5 个类 AlAs 声子在两个单元内的静电势分布,在单元的边界处静电势的不连续性显然不符合声子静电势的规律<sup>[7-10]</sup>,其原因在于该模型没考虑到相邻单元中界面声子之间的耦合.

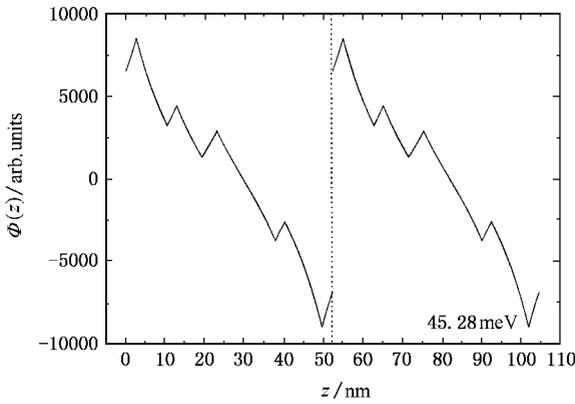


图 4 由传输矩阵模型得到的第 5 个类 AlAs 界面声子在有源核两个相邻单元内的静电势分布 ( $k \cdot L = 5$ ,  $\hbar\omega = 45.28$  meV)

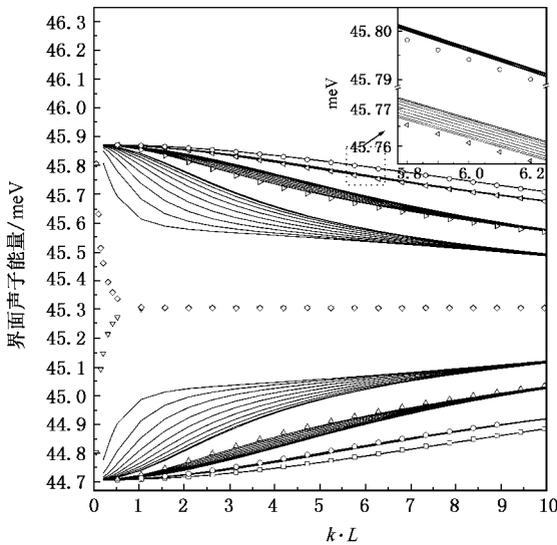


图 5 用我们的模型得到的 QCL 有源核中类 AlAs 界面声子的色散关系. 实线对应的为体声子模式,各点组成的曲线对应表面声子的色散关系

以下介绍用本文模型得到的界面声子的色散关系和静电势. 我们的结果表明有源核中包含有  $3N(p+1)$  个界面声子模式,图 5 给出了其中  $N(p+1)$  个类 AlAs 声子的色散关系. 其中有  $N_p$  模式属于体声子模式,即  $\text{Re}[\gamma] = 0$ ,对应图中实线所示的色散曲线. 这  $N_p$  个体声子模式构成  $N$  个准连续的声子子带,每个子带由  $p$  条声子色散曲线构成,类似于电子在超晶格中形成的子能带. 对比图 2 和图 5

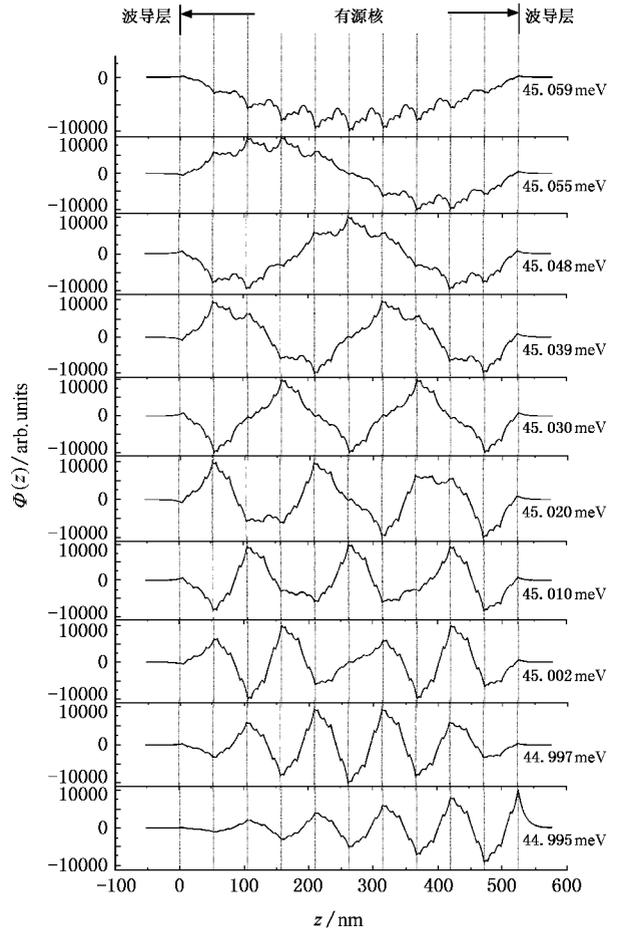


图 6 计算得到的图 4 中第四个体声子子带中的 10 个体声子模在  $k \cdot L = 5$  时静电势在有源核内部的分布(图中标出了各体声子模的能量. 各竖直的虚线表示单元与单元的边界)

可以发现,图 2 中的  $N$  个声子能级在图 5 中演变成  $N$  个声子的子带,这是因为在我们的模型中考虑了各单元中界面声子之间的耦合作用. 此外,图 5 还显示存在  $N$  个表面声子模式,即  $\text{Re}[\gamma] > 0$ ,对应图中各点所示的色散曲线. 表面声子的能量始终位于体声子子带之间的带隙内.

现在,我们考察各体声子和表面声子的静电势分布. 针对图 5 中第 4 个体声子子带中的 10 个模式(在短波极限这些声子的能量约为 45.03 meV),我们计算了  $k \cdot L = 5$  时声子静电势在有源核和波导层内的分布,结果示于图 6 中. 由图可知,在传输矩阵模型中存在的静电势的不连续性在我们的模型中不复存在. 图 6 还表明体声子的静电势呈现出 Bloch 波的特征. 不同的体声子模式,其静电势  $\Phi(z)$  以 Bloch 波的形式并按不同的波矢  $\gamma$  在有源核内传播. 图 7 则显示了 8 个表面声子的静电势的分布情

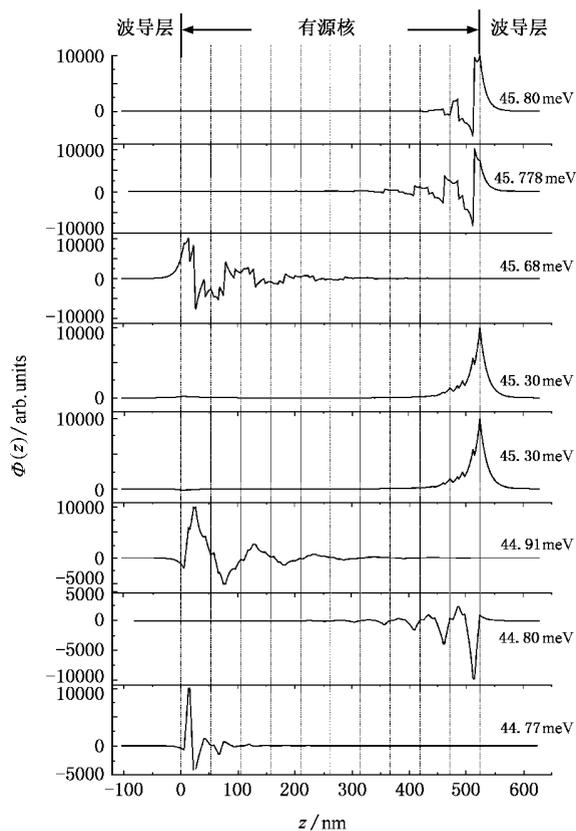


图7 计算得到的图4各表面声子在  $k \cdot L = 5$  时,静电势在有源核内部的分布(图中标出了各表面声子的能量,各竖直的虚线表示单元与单元的边界)

况.由图可知,表面声子主要局域在有源核与上波导层或下波导层的边界处,在远离界面的区域静电

势迅速衰减.这些特征表明 QCL 有源核与有限超晶格颇为相似<sup>[13-15]</sup>,它们的界面声子均可分为分布于整个周期结构的体声子模式和局域在周期结构一侧的表面声子模式.图6和图7显示了一个共同的特征,即界面声子的静电势分布在各单元内是不相同的,这表明此前人们研究 QCL 有源核界面声子的假设并不正确.

## 4. 结 论

本文深入研究了量子级联激光器有源核中界面声子的色散关系和静电势分布.作者根据有源核内部的平移不变性导出了界面声子解的形式,并给出了色散关系方程.我们的模型克服了传输矩阵模型中不可避免的界面声子静电势不连续的问题.本文提出的模型与 Camley 等人提出的描述有限超晶格中界面声子的模型是一致的,但我们的模型适用于更普遍的情况,即每个周期结构中可以包括任意数目的外延层.

我们的模型表明 QCL 有源核中的界面声子可以分为体声子模式和表面声子模式.体声子的色散曲线构成了一系列准连续的声子子带,其静电势分布于整个有源核并有 Bloch 波的特征.表面声子的色散曲线位于各体声子子带的带隙内,其静电势局域在有源核的一侧.这些结果有利于量子级联激光器和子带间激光器的优化结构.

- [1] Faist J, Capasso F, Sivo D L, Sirtori C, Hutchinson A L, Cho A Y 1994 *Science* **264** 553
- [2] Kohler R, Tredicucci A, Beltram F, Beere H E, Linfield E H, Davies A G, Ritchie D A, Iotti R C, Rossi F 2002 *Nature (London)* **417** 156
- [3] Faist J, Capasso F, Sirtori C, Sivo D L, Hutchinson A L, Cho A Y 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 411
- [4] Huang K, Zhu B, 1989 *Phys. Rev. B* **38** 13377
- [5] Zhu K G, Shi J Z, Shao Q Y 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2304 (in Chinese) [朱开贵、石建中、邵庆益 2000 *物理学报* **49** 2304]
- [6] Yu S, Kim K W, Strosio M A, Iafate G J, Sun J P, Haddad G I 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 3363
- [7] Rucker H, Molinari E, Lugli P 1992 *Phys. Rev. B* **45** 6747

- [8] Kim K W, Bhatt A R, Strosio M A, Turley P J, Teitsorth S W 1997 *J. Appl. Phys.* **72** 2282
- [9] Menon V M, Goodhue W D, Karakashian A S, Ram-Mohan L R 2000 *J. Appl. Phys.* **88** 5262
- [10] Kisin M V, Strosio M A, Belenky G, Gorfinkel V B, Luryi S 1998 *J. Appl. Phys.* **83** 4816
- [11] Williams B S, Hu Q 2001 *J. Appl. Phys.* **90** 5504
- [12] Smet J H, Fonstad C G, Hu Q 1996 *J. Appl. Phys.* **79** 9305
- [13] Camley R E, Mills D L 1984 *Phys. Rev. B* **29** 1695
- [14] Johnson B L, Weiler J T, Camley R E 1985 *Phys. Rev. B* **32** 6544
- [15] Tsumoto T, Uehara Y, Ushioda S 1994 *Phys. Rev. B* **49** 4745
- [16] Williams B S, Callebaut H, Kumar S, Hu Q, Reno J L 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 1015



# Interface phonons in the active core of a quantum cascade laser<sup>\*</sup>

Xu Gang-Yi<sup>†</sup> Li Ai-Zhen

( *State Key Laboratory of Functional Materials for Informatics , Shanghai Institute of Microsystem and Information Technology ,  
Chinese Academy of Sciences , Shanghai 200050 , China* )

( Received 14 April 2004 ; revised manuscript received 23 June 2006 )

## Abstract

We consider the propagation of the interface phonons in the active core of a quantum cascade laser. Based on the translation invariance in the interior of the active core, an implicit dispersion relation is derived. Numerical calculations show that the interface phonons in the active core can be classified as bulk phonons and surface phonons. The dispersion curves of bulk phonons form a series of subbands, and their electrostatic potential is distributed in the whole region of the active core, showing the character of Bloch wave. While the dispersion curves of the surface phonons are located in the gap between the subbands of the bulk phonons, and the electrostatic potential is localized near the interface between the active core and the waveguide layer. Our results are helpful to the design of quantum cascade lasers and other intersubband lasers.

**Keywords** : quantum cascade laser, interface phonon

**PACC** : 7138, 7340L, 4255P

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Sciences Foundation of China ( Grant No. 60406008 ).

<sup>†</sup> E-mail : gyxu@mail.sim.ac.cn