

N 型掺杂应变 Ge 发光性质*

黄诗浩¹⁾ 李成^{1)2)†} 陈城钊¹⁾ 郑元宇¹⁾ 赖虹凯¹⁾ 陈松岩¹⁾

1) (厦门大学物理系, 半导体光子学研究中心, 厦门 361005)

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

(2011 年 4 月 19 日收到; 2011 年 5 月 21 日收到修改稿)

应变锗材料具有准直接带特性, 而且与标准硅工艺兼容, 成为实现硅基发光器件重要的候选材料之一. 本文基于 van de Walle 形变势理论, 计算了应变情况下半导体 Ge 材料的能带结构以及载流子在导带中的分布; 通过分析载流子直接带和间接带间的辐射复合以及俄歇复合、位错等引起的非辐射复合的竞争, 计算了 N 型掺杂张应变 Ge 材料直接带跃迁的内量子效率和光增益等发光性质. 结果表明, 张应变可有效增强 Ge 材料直接带隙跃迁发光. 在 1.5% 张应变条件下, N 型掺杂 Ge 的最大内量子效率可以达到 74.6%, 光增益可以与 III - V 族材料相比拟.

关键词: 应变, N 型掺杂 Ge, 量子效率, 光增益

PACS: 62.20.fg, 61.72.uf, 73.50.Gr, 74.25.Gz

1 引言

Si 基激光器是实现 Si 基光通信和光电集成的关键器件之一. 由于 Si 的间接带特性, 制备 Si 基发光器件极具挑战性. 实现可商业化生产的 Si 基光源必须具备以下两个条件: (1) 制备工艺必须与 CMOS 工艺相兼容; (2) 最好能够实现电注入发光. 近年来, 应变 Ge 作为 Si 基发光的增益介质得到了广泛关注^[1-7]. 通过应变的方法可以降低 Ge 材料的直接带带隙与间接带带隙差值, 从而实现 Ge 从间接带材料到直接带材料的转变.

本文利用 van de Walle 形变势理论, 计算了应变情况下 Ge 的能带结构以及载流子在导带中的分布. 通过分析载流子在直接带、间接带辐射复合以及各种非辐射复合的竞争, 计算了应变 N 型掺杂 Ge 作为增益介质的内量子效率和光增益.

2 应变 Ge 的能带结构

Ge 属于间接带隙材料, 间接带的辐射复合过程需要声子的参与, 因此其发光效率低于传统的

III - V 族材料. 然而 Ge 的直接带与间接带导带底之间在室温下仅相差 136 meV, 而直接带的辐射复合效率要比间接带的高 3—5 个量级, 如果能实现 Ge 的直接带隙发光, 它的直接带发光效率将和 III - V 族材料相当. 其中关键的问题是如何使载流子更多地填充到 Ge 的直接带能谷中. 通过应变和掺杂的办法是解决这一关键问题的有效途径^[8].

2.1 应变对 Ge 能带结构的影响

要实现 Ge 的高效发光, 必须使 Ge 的直接带能谷占有大量的电子. 在准平衡状态下, Ge 直接带与间接带能谷的差值决定了直接带能谷占有电子数的多少. 这个差值越小, 则直接带能谷占有的电子数将越多. 通过应变的作用, 可以调节 Ge 的晶格结构, 进而裁剪 Ge 的能带特性. 对于应变 Ge 的能带结构, 可以采用 van de Walle 形变势理论^[9,10]进行相关计算. 理论计算表明, 张应变改变了 Ge 间接带、直接带带隙, 并且 Ge 的价带发生了退简并现象, 如图 1 所示.

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2007CB613404)、国家自然科学基金 (批准号: 61036003, 60837001)、中央高校基础业务费项目 (批准号: 2010121056) 和信息功能材料国家重点实验室开放课题资助的课题.

† E-mail: lich@xmu.edu.cn

基于形变势理论, 在应变的作用下, 直接带带隙、间接带带隙可以写成如下的形式:

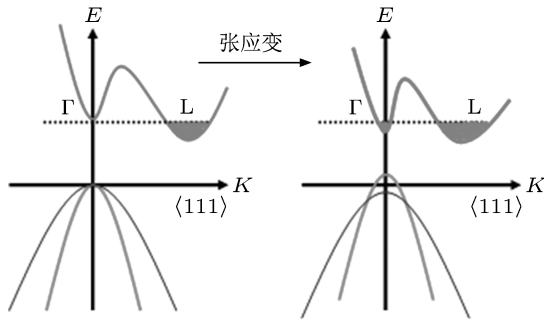


图1 张应变作用前、后 Ge 能带示意图

间接带导带底到重空穴带顶

$$E_g^{L-HH} = E_{g0}^L - \delta E_{hy}^L + 0.5\delta E_{sh}, \quad (1)$$

间接带导带底到轻空穴带顶

$$E_g^{L-LH} = E_{g0}^L - \delta E_{hy}^L + 0.25\delta E_{sh} + 0.5\Delta - 0.5 \times \sqrt{\Delta^2 + \Delta \cdot \delta E_{sh} + 2.25 \cdot (\delta E_{sh})^2}, \quad (2)$$

直接带导带底到重空穴带顶

$$E_g^{\Gamma-HH} = E_{g0}^\Gamma - \delta E_{hy}^\Gamma + 0.5\delta E_{sh}, \quad (3)$$

直接带导带底到轻空穴带顶

$$E_g^{\Gamma-LH} = E_{g0}^\Gamma - \delta E_{hy}^\Gamma - 0.25\delta E_{sh} + 0.5\Delta - 0.5 \times \sqrt{\Delta^2 + \Delta \cdot \delta E_{sh} + 2.25 \cdot (\delta E_{sh})^2} \quad (4)$$

其中, E_g^{L-LH} , E_g^{L-HH} 分别表示 L 能谷到轻、重空穴的距离; $E_g^{\Gamma-LH}$, $E_g^{\Gamma-HH}$ 分别表示 Γ 能谷到轻、重空穴的距离; E_{g0}^L , E_{g0}^Γ 分别表示无应变条件下的 L 能谷和 Γ 能谷的能带带隙; Δ 表示自旋轨道劈裂能.

$$\delta E_{hy}^L = -2a^L(1 - C_{12}/C_{11})e_{11},$$

$$\delta E_{hy}^\Gamma = -2a^\Gamma(1 - C_{12}/C_{11})e_{11},$$

$$\delta E_{sh} = -2b(1 + 2C_{12}/C_{11})e_{11}.$$

a^L , a^Γ 分别表示 L 能谷、 Γ 能谷流体静压力形成能; b 表示价带单轴应变的形变势参数; C_{11} , C_{12} 为 Ge 材料的弹性常数; e_{11} 为水平方向的应变, 计算中选择的各参数的数值如表 1 所示 [9-11].

表1 应变 Ge 能带结构计算相关参数表

a^Γ/eV	a^L/eV	b/eV	C_{12}/GPa	C_{11}/GPa	Δ/eV	E_{g0}^Γ/eV	E_{g0}^L/eV
-8.97	-2.78	-1.88	48.3	128.5	0.289	0.802	0.664

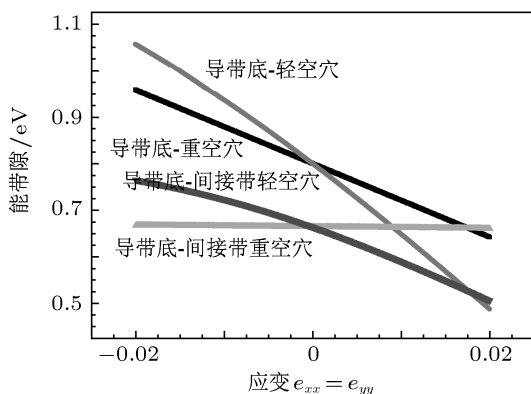


图2 Ge 直接、间接带导带底到轻、重空穴距离随应变的变化关系

导带直接带底和间接带底到轻、重空穴价带顶的能带隙和应变的关系的计算结果如图 2 所示. 其中 C-LH, C-HH 分别表示直接带底到轻、重空穴价带顶的能带隙; C-indLH, C-indHH 分别表示间接带底到轻、重空穴价带顶的能带隙. 在张应变的作用下, Ge 的能带结构发生了重要的变化. 一方面,

其价带轻空穴带和重空穴带发生退简并, 相对于无应变 Ge 的情况, 轻空穴会向上偏离原来位置, 重空穴会向下偏离原来位置; 另一方面, 导带直接带底 Γ 能谷和间接带底 L 能谷同时向下偏离原来位置, 并且 Γ 能谷向下偏离得快, 换句话说, 张应变缩小了导带 Γ 能谷和 L 能谷之间的差距. 当张应变为 1.7% 时, 此时的 Ge 由间接带隙材料转变为直接带隙材料, 带隙为 0.5 eV.

图 3 给出直接带与间接带能谷差值随应变的变化关系. 可以看出随着的应变的增大, Ge 能够实现间接带材料到直接带材料的转换. 张应变能够提高 Ge 的准直接带特性, 从而提高 Ge 的直接带隙发光效率. 但是应变的引入同样也会给 Ge 材料带来不利影响. 首先, 应变太高容易损坏 Ge 的晶体质量, 比如生长过程中可能导致位错密度太大, 表面粗糙, 从而增强非辐射复合. 在实验上, 可以通过在 Si 上外延 Ge, 利用它们的晶格失配和热失配的共同作用获得一定程度的应变而保持良好的 Ge 晶

体质量. 图 4 表示了硅衬底上生长 Ge 在不同温度下退火后受到的张应变的实验值和理论计算的结果, 其中点为实验值, 实线为理论计算结果. 理论曲线只计算了热失配引起的 Ge 的应变.

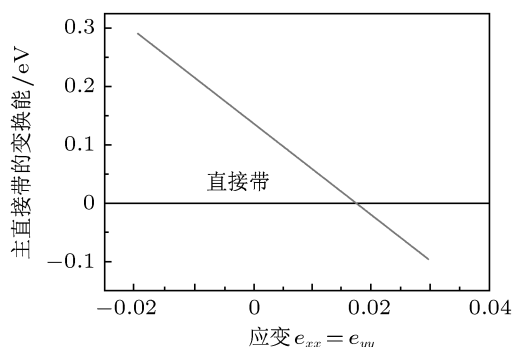


图 3 Ge 直接、间接带能谷差值随应变的变化关系

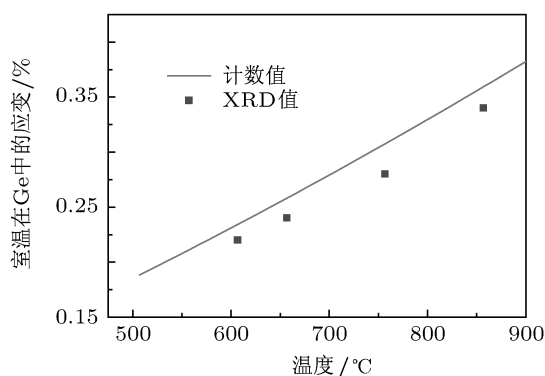


图 4 外延 Ge 退火温度与应变的关系

其次, 应变太高 Ge 的带隙减小, 远离了光通信波段的应用. 虽然, 当张应变为 1.7% 时, Ge 能够成为直接带隙材料, 提高了发光效率, 但是它的带隙相对应的光波长变为 2.5 μm , 不能满足光纤通信的需要

这两个问题表明, 仅仅通过应变的方法不足以使 Ge 的发光起到光通信应用的目的. 但是通过掺杂填充间接带能谷, 是有效解决这个问题的途径之一 [12].

2.2 载流子在 Ge 中的分布情况

在平衡状态下, 电子按能量大小遵循费米分布规律. 利用费米分布函数可以计算 Ge 导带中掺杂浓度与费米能级的关系, 用 n 表示导带的电子浓度, 则计算公式如下:

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_n^L kT}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{1 + \exp(x - \xi)}$$

$$+ \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_n^\Gamma kT}{\hbar^2} \right)^{3/2} \times \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{1 + \exp(x - \xi + (\Delta E/kT))} \quad (5)$$

其中, m_n^L, m_n^Γ 分别表示 L 能谷、 Γ 能谷状态密度有效质量这里分别取 0.56 $m_0, 0.038 m_0^{[3]}$; k 为玻耳兹曼常数; T 为绝对温度; \hbar 与普朗克常数 h 的关系为 $\hbar = h/(2\pi)$; ΔE 为 L 能谷与 Γ 能谷的差值; $\xi = \frac{E_F - E_c}{kT}$, E_F 是费米能级, E_c 为间接带导带底.

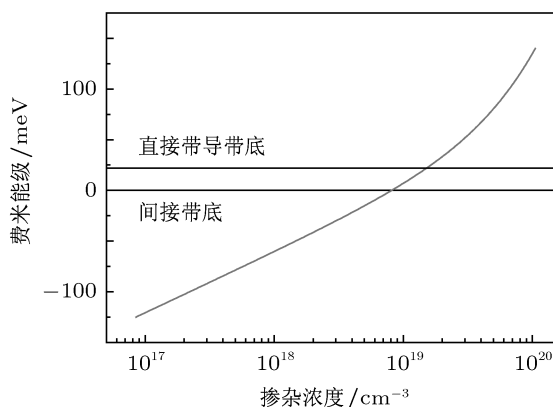


图 5 载流子填充水平与准费米能级的关系

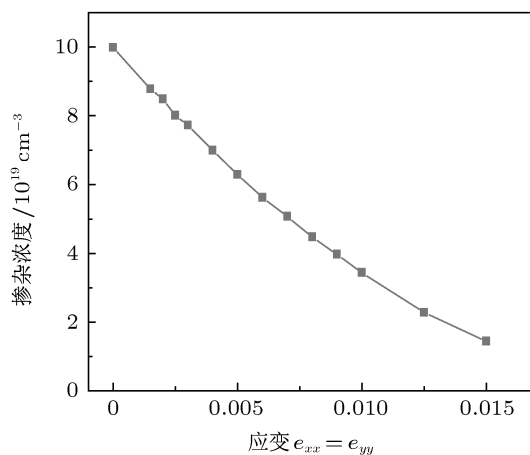


图 6 费米能级到达 Ge 直接带底所需载流子浓度与应变的关系

图 5 给出 1.5% 张应变条件下 N 型掺杂浓度引起的准费米能级的位置变化. 通过计算发现, Ge 在 1.5% 应变下, 当掺杂浓度约为 $8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 时, 准费米能级达到间接带底, 而掺杂浓度为 $1.4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 时准费米能级达到直接带导带底. 当掺杂浓度提高时, 准费米能级随之提高, 载流子通过费米分布规律, 占据直接带导带底的几率将得到提高.

图 6 表示当费米能级达到直接带底时所需要

的掺杂浓度与应变的变化关系. 从中我们可以得到应变越大, 费米能级达到直接带底时所需要的掺杂浓度越低.

3 N型掺杂应变 Ge 的发光性质

讨论半导体中的光电物理过程, 首先需要电子与空穴对复合进行分析. 在应变 N 型掺杂 Ge 材料中, 间接带、直接带能谷中均占有一定数量的电子, 他们与价带轻、重空穴的复合过程表现出辐射复合还是非辐射复合显得尤为重要. 辐射复合与非辐射复合之间的竞争关系决定了材料的内量子效率, 另外非辐射复合对注入型半导体激光器的影响之一是使阈值电流密度增加.

3.1 Ge 中载流子的复合

处于热平衡状态下的 N 型掺杂 Ge, 在一定温度下, 电子和空穴的浓度是一定的. 当对平衡态下的 N 型掺杂 Ge 注入载流子或光照, 非平衡载流子就会进行复合. 非平衡载流子的复合过程可以分为辐射复合和非辐射复合. 用 n 和 p 分别表示电子浓度和空穴浓度.

辐射复合率可以写成:

$$R = rnp, \quad (6)$$

其中系数 r 称为电子空穴复合概率, 可以通过实验测得^[13]. 热平衡时, 产生率 = 复合率; 即:

$$G = rn_0p_0 = rn_i^2, \quad (7)$$

其中 n_0, p_0 为平衡时载流子浓度, n_i 为本征载流子浓度; 对于净复合率:

$$U_d = R - G = r(np - n_i^2), \quad (8)$$

在注入电子 Δn 的情况下有下列关系式:

$$n = n_0 + \Delta n; \quad p = p_0 + \Delta p; \quad \Delta n = \Delta p,$$

代入上式可以得到净复合率的表达式:

$$U_d = r(n_0 + p_0)\Delta p + r(\Delta p)^2. \quad (9)$$

于是非平衡载流子的寿命可以写成:

$$\tau = \frac{\Delta n}{U_d} = \frac{1}{r(n_0 + p_0 + \Delta n)}. \quad (10)$$

从非平衡载流子寿命的公式可以看出, 寿命跟电子空穴复合概率, 平衡时电子空穴的浓度及注入的载流子浓度有关, 那么对于 Ge 间接带材料, 可分为直接带和间接带辐射复合; 直接带复合非平衡载流子寿命写成:

$$\tau_n = \tau_p = \frac{\Delta n}{r_{\text{dir}}(n_{\text{dir}}p - n_{\text{dir}0}p_0)}, \quad (11)$$

间接带复合非平衡载流子寿命写成:

$$\tau_n = \tau_p = \frac{\Delta n}{r_{\text{ind}}(n_{\text{ind}}p - n_{\text{ind}0}p_0)}, \quad (12)$$

其中 $r_{\text{dir}}, r_{\text{ind}}$ 分别为 Γ, L 带电子空穴复合概率; $n_{\text{dir}}, n_{\text{ind}}$ 分别为 Γ, L 带电子浓度; p 为价带空穴浓度; $n_{\text{dir}0}, n_{\text{ind}0}$ 分别为未注入载流子平衡状态下 Γ, L 带电子浓度; p_0 为未注入载流子平衡状态下价带空穴浓度.

在高浓度载流子的情况下, 电子空穴对在复合跃迁中可能将释放出来的能量给予另一个电子或空穴并把它激发到带内一个更高的能态上去. 复合所放出的能量对另一个电子或空穴是作为附加的动能出现的, 这就是非辐射复合中的俄歇复合. 俄歇复合非平衡载流子寿命可以写成:

$$\tau = \frac{\Delta n}{\gamma_n(n^2p - nn_0p_0) + \gamma_p(np^2 - pn_0p_0)}, \quad (13)$$

其中, γ_n, γ_p 分别为俄歇复合系数.

对于应变 N 型掺杂 Ge, 当掺杂的费米能级达到 Ge 直接带底时, Ge 的直接带能谷中占有了大量的电子, 在注入过剩载流子的情况下, 电子与空穴的复合过程主要考虑了直接带辐射复合、间接带辐射复合和俄歇复合三个过程.

计算参数的数值如表 2 所示^[3].

表 2 应变 N 型掺杂 Ge 载流子复合计算相关参数表

$r_{\text{dir}}/\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$	$r_{\text{ind}}/\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$	$\gamma_n/\text{cm}^6 \cdot \text{s}^{-1}$	$\gamma_p/\text{cm}^6 \cdot \text{s}^{-1}$
1.3×10^{-10}	5.1×10^{-15}	3.0×10^{-32}	7.0×10^{-32}

图 7 表示 1.5% 张应变条件下的 N 型掺杂 Ge (掺杂浓度为 $1.4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) 在不同的注入载流子情况下, 直接带辐射复合寿命、间接带辐射复合寿命和俄歇复合寿命三者的竞争关系. 当注入的载流子浓度约小于 $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 时直接带辐射复合起主导作用, 随着注入载流子的增大, 俄歇复合起主导作用, 这将降低 Ge 的发光效率.

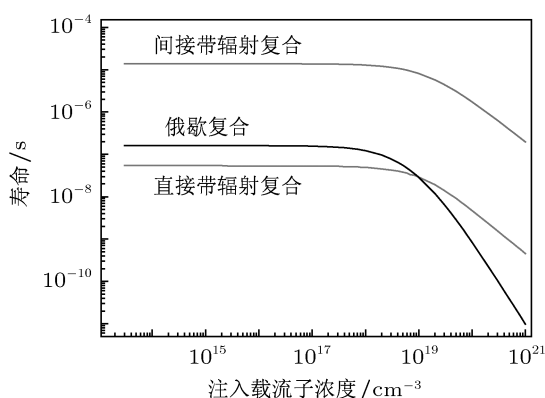


图7 载流子寿命随注入载流子浓度的变化关系

3.2 内量子效率

发光效率反映了半导体器件本身的光电转换能力. 而器件的电子空穴注入效率, 出光效率以及内量子效率决定了半导体器件的发光效率. 前面两种效率可以通过优化器件的设计, 得到改善, 然而获得高内量子效率的难点在于材料设计. 在应变 N 型掺杂 Ge 非平衡载流子的复合过程中, 直接带辐射复合、间接带辐射复合和俄歇复合, 三者之间的竞争关系决定了 N 型掺杂 Ge 的内量子效率. 由于直接带辐射复合概率比间接带的高很多, 我们仅考虑直接带跃迁的内量子效率, 表示为

$$\eta = \frac{\tau_{\text{dir}}^{-1}}{\tau_{\text{dir}}^{-1} + \tau_{\text{ind}}^{-1} + \tau_{\text{A}}^{-1}}, \quad (14)$$

其中 τ_{dir} , τ_{ind} 、 τ_{A} 分别为直接带、间接带和俄歇复合非平衡载流子寿命.

图 8 计算了 1.5% 应变条件下的 N 型掺杂 Ge 的内量子效率. 从结果可以看出, 随着注入载流子浓度增加到 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 时, 俄歇复合开始起主要作用, 其内量子效率反而降低了, 这与 III - V 材料在实验上得到的结论是相一致的 [14].

图 9 反映了最大内量子效率与应变的关系. 当应变达到 1% 以后, N 型掺杂 Ge 的内量子效率有了显著的提高. 因此增加应变是提高应变 N 型掺杂 Ge 的内量子效率的有效途径.

考虑到材料的位错密度对发光效率的影响. 利用文献 [15] 的模型, 计算了非平衡载流子被位错俘获的寿命与位错的关系:

$$\tau_n = (4\pi D_n N_D)^{-1} \times \left[\frac{2D_n}{aV_n S} - \frac{3}{2} - \ln(\pi a^2 N_D) \right],$$

$$\tau_p = (4\pi D_p N_D)^{-1} \times \left[\frac{2D_p}{aV_p S} - \frac{3}{2} - \ln(\pi a^2 N_D) \right], \quad (15)$$

其中 $D_{n(p)}$ 为扩散系数; N_D 为 Ge 材料的位错密度; a 为晶格常数; $V_{n(p)}$ 为室温下, 电子(空穴)热运动速度; $S = 0.5$ 为经验值.

该模型计算结果如图 10 所示, 与文献 [16] 报道结果相符合. (14) 式增加位错密度引起的非辐射复合的影响, 内量子效率可写为

$$\eta = \frac{\tau_{\text{dir}}^{-1}}{\tau_{\text{dir}}^{-1} + \tau_{\text{ind}}^{-1} + \tau_{\text{A}}^{-1} + \tau_{\text{dislocation}}^{-1}}, \quad (16)$$

计算得到位错密度对应变 N 型掺杂 Ge 发光效率的影响, 如图 11 所示. 图中表明 1.5% 应变下 N 型掺杂 Ge 位错密度从 10^5 cm^{-3} 到 10^6 cm^{-3} , 则内量子效率从 0.7428 降到 0.7034, 下降了 5.3%. 该结果表明位错密度在 10^6 cm^{-3} 以下时对材料的发光效率影响可以忽略.

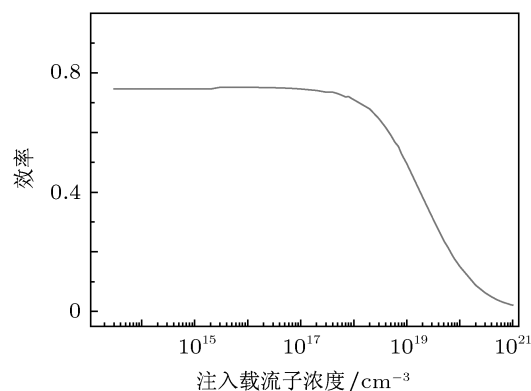


图8 不同注入载流子浓度下的最大内量子效率

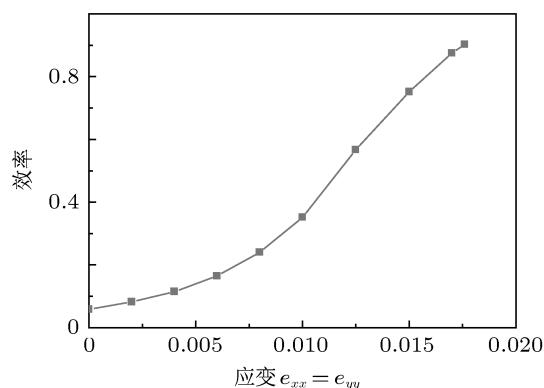


图9 内量子效率与应变的关系

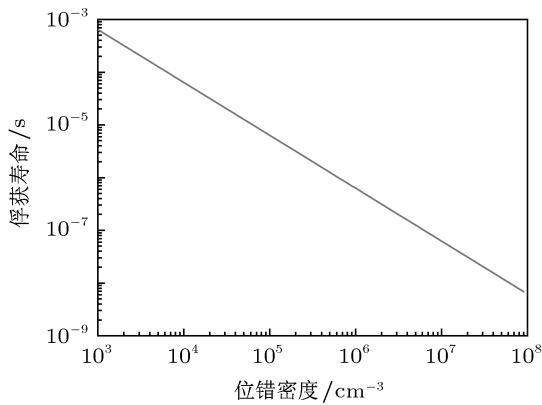


图 10 非平衡载流子被位错俘获的寿命与位错的关系

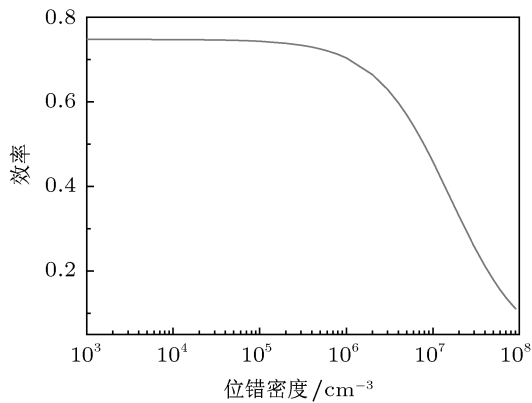


图 11 位错密度对内量子效率的影响

3.3 光增益与吸收

应变 N 型掺杂 Ge 的光增益与吸收系数的关系可表示为

$$\gamma_{\Gamma}(h\nu) = \alpha_{\Gamma}(h\nu)(f_c - f_v), \quad (17)$$

其中 $\gamma_{\Gamma}(h\nu)$ 为增益系数; $\alpha_{\Gamma}(h\nu)$ 为吸收系数; $(f_c - f_v)$ 表示粒子数反转因子.

由于在应变的条件下 Ge 的价带发生了退简并现象, 导带的电子到轻、重空穴的跃迁矩阵元也随之发生变化, 通过实验拟合 0.2% 应变下 Ge 的吸收系数可以得到图 12 及相应的拟合公式 [3]:

$$\alpha_{\Gamma}(h\nu) = A(0.318\sqrt{h\nu - E_g^{\Gamma}(lh)} + 0.682\sqrt{h\nu - E_g^{\Gamma}(hh)})/h\nu. \quad (18)$$

系数 0.318 和系数 0.682 不同是因为直接带到轻、重空穴的联合态密度不同, 到重空穴的联合态密度比较大. 从实验拟合结果来看 [3], 应变对系数 A 的影响不大, 这里计算取 $A = 2.0 \times 10^4 \text{ eV}^{1/2}/\text{cm}$.

计算得到 1.5% 应变 N 型掺杂 Ge (掺杂浓度为 $1.4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) 在注入不同载流子浓度 Δn 时的增益情况如图 13 所示.

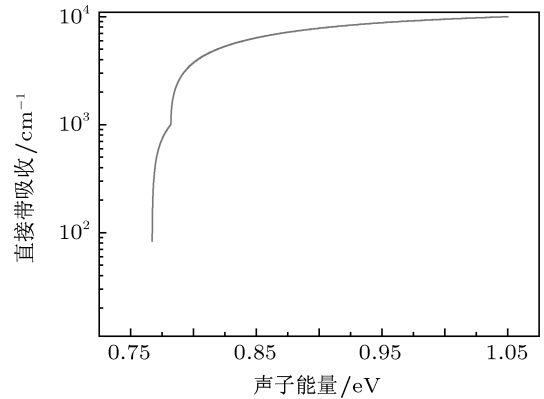


图 12 0.2% 张应变 Ge 吸收曲线

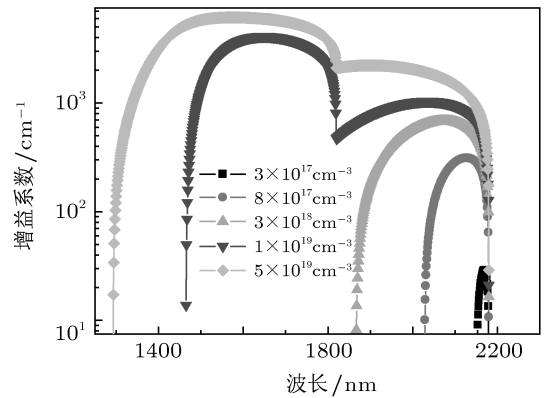


图 13 1.5% 张应变条件下 N 型掺杂 Ge 增益随注入载流子浓度的变化

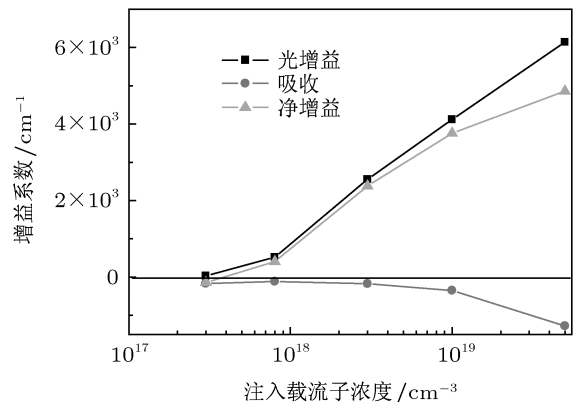


图 14 光增益、自由载流子吸收以及净增益随着注入载流子的关系

自由载流子的吸收随着波长的增大而增加, 并且在高注入载流子的情况下, 自由载流子吸收的影响变得不可忽略. 当应变 N 型掺杂 Ge 增益介质达到粒子数反转的条件时, 自由载流子的吸收和光增益过程将互相竞争, 最终决定了材料的净光增益.

通过拟合 N 型掺杂 Ge^[17] 和 p+Ge^[18] 自由载流子的吸收过程, 可以得到自由载流子吸收和光波长的关系:

$$\alpha_{ab}(\lambda) = -3.4 \times 10^{-25} n_c \lambda^{2.25} - 3.2 \times 10^{-25} p_v \lambda^{2.43}. \quad (19)$$

图 14 表示 1.5% 应变下 N 型掺杂 Ge 材料光增益、自由载流子吸收以及净增益随着注入载流子的关系. 计算表明, 在 1.5% 张应变条件下, 自由载流子的吸收对 N 型掺杂 Ge 光净增益的影响不大, 这是因为较高的应变 Ge 很接近直接带材料, 直接带占有大量的载流子, 而这些载流子大部分参与了辐射复合过程. 在 1.5% 张应变 $1.4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 掺

杂浓度下注入载流子浓度为 $5.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 时, 可获得的最大净增益达到 4860 cm^{-1} , 该结果可以与 III - V 族材料相比.

4 结 论

N 型重掺杂应变 Ge 作为 Si 基发光材料的增益介质比起体 Ge 具有更大的应用价值. 计算结果表明通过提高 Ge 所受的张应变和 N 型掺杂浓度可有效提高 Ge 的直接带辐射跃迁内量子效率, 实现与 III - V 族材料相比拟的光增益. 基于应变工程和掺杂工程的硅基 Ge 材料有望应用于高效的硅基发光器件.

- [1] Cheng S L, Lu J, Shambat G, Yu H Y, Saraswat K, Vuckovic J, Nishi Y 2009 *Opt. Express* **17** 10019
- [2] Hu W X, Cheng B W, Xue C L, Xue H Y, Su S J, Bai A Q, Luo L P, Yu Y D, Wang Q M 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95**
- [3] Liu J, Sun X, Pan D, Wang X, Kimerling L C, Koch T L, Michel J 2007 *Opt. Express* **15** 11272
- [4] Liu J F, Sun X C, Camacho-Aguilera R, Kimerling L C, Michel J 2010 *Opt Lett* **35** 679
- [5] Sun X C, Liu J F, Kimerling L C, Michel J 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95**
- [6] Huang W Q, Liu S R 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 0972 (in Chinese) [黄伟其, 刘世荣 2005 物理学报 **54** 0972]
- [7] Ma S Y, Qin G G, You L P, Wang Y Y 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1580 (in Chinese) [马书懿, 秦国刚, 尤力平, 王印月 2001 物理学报 **50** 1580]
- [8] Huo Y, Lin H, Chen R, Makarova M, Rong Y, Li M, Kamins T I, Vuckovic J, Harris J S 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 011111
- [9] Van de Walle C G 1989 *Phys. Rev. B Condens Matter* **39** 1871
- [10] Van de Walle C G, Martin R M 1986 *Phys. Rev. B Condens Matter* **34** 5621
- [11] Ishikawa Y, Wada K, Liu J, Cannon D D, Luan H C, Michel J, Kimerling L C 2005 *J. Appl. Phys.* **98** 013501
- [12] El Kurdi M, Kociniewski T, Ngo T P, Boulmer J, Debarre D, Boucaud P, Damlencourt J F, Kermarrec O, Bensahel D 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94**
- [13] Van Roosbroeck W, Shockley W 1954 *Phys. Rev.* **94** 1558
- [14] Shen Y, Mueller G, Watanabe S, Gardner N, Munkholm A, Krames M 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 141101
- [15] Karpov S Y, Makarov Y N 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 4721
- [16] Wertheim G, Pearson G 1957 *Phys. Rev.* **107** 694
- [17] Spitzer W G, Trumbore F, Logan R 1961 *J. Appl. Phys.* **32** 1822
- [18] Newman R, Tyler W 1957 *Phys. Rev.* **105** 885

The optical property of tensile-strained n-type doped Ge*

Huang Shi-Hao¹⁾ Li Cheng^{1)2)†} Chen Cheng-Zhao¹⁾ Zheng Yuan-Yu¹⁾
Lai Hong-Kai¹⁾ Chen Song-Yan¹⁾

1) (*Department of Physics, Semiconductor Photonics Research Center, Xiamen University, Xiamen 361005, China*)

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

(Received 19 April 2011; revised manuscript received 21 May 2011)

Abstract

Tensile-strained germanium is one of the promising materials for Si-based photonic devices due to its quasi-direct band and compatibility with silicon technology. The band structure of tensile-strained germanium is investigated based on the theory of van de Walle deformed potential. The carrier distributions in the conduction bands at Γ and L valleys under the strain, and the n-type doping concentration in germanium are analyzed. Considering the competition between radiative recombinations at Γ and L valleys and Auger recombination, as well as dislocation induced non-radiative recombination, internal quantum efficiency and optical gain for direct band transition in n-type Ge are calculated. It is shown that 74.6% internal quantum efficiency can be obtained in the 1.5% tensile-strained n-type doped Ge under carrier injection and a strong optical gain is predicted, which is comparable to those of III - V materials.

Keywords: strain, n-type doped germanium, internal quantum efficiency, optical gain

PACS: 62.20.fg, 61.72.uf, 73.50.Gr, 74.25.Gz

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2007CB613404), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61036003, 60837001), the Fundamental Research Funds for the Central Universities of China (Grant No. 2010121056), and the Open Project of State Key Laboratory of Functional Materials for Informatics of China.

† E-mail: lich@xmu.edu.cn