

简并态锗在大注入下的自发辐射谱模拟

汪建元 林光杨 王佳琪 李成

Simulation of spontaneous emission spectrum of degenerate Ge under large injection level

Wang Jian-Yuan Lin Guang-Yang Wang Jia-Qi Li Cheng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, **66**, 156102 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.156102

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.156102>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I15>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

掺杂硅纳米梁谐振频率的理论模型及分子动力学模拟

Study on resonance frequency of doping silicon nano-beam by theoretical model and molecular dynamics simulation

物理学报.2017, 66(10): 106103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.106103>

掺杂单晶硅纳米薄膜杨氏模量的多尺度理论模型

The multi-scale theoretical models of Young's modulus of doped monocrystalline silicon nano-film

物理学报.2015, 64(23): 236103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.236103>

Si基IV族异质结构发光器件的研究进展

Recent progress in Ge and GeSn light emission on Si

物理学报.2015, 64(20): 206102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.206102>

铒离子注入绝缘体上Si的射程分布研究

Investigation on range distribution of Er ions implanted in silicon-on-insulator

物理学报.2014, 63(17): 176101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.176101>

掺杂对多层Ge/Si(001)量子点光致发光的影响

Effect of doping on the photoluminescence of multilayer Ge quantum dots deposited on Si(001) substrate

物理学报.2013, 62(7): 076108 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.076108>

## 简并态锗在大注入下的自发辐射谱模拟\*

汪建元 林光杨 王佳琪 李成†

(厦门大学物理学系, 协同创新中心, 半导体光子学研究中心, 厦门 361005)

(2017年3月8日收到; 2017年5月16日收到修改稿)

基于费米狄拉克模型模拟了应变、温度以及掺杂对简并态锗的直接带自发辐射谱的影响. 随着温度升高, 更多的电子被激发到导带中, 使得锗自发辐射谱的峰值强度和积分强度随温度的升高而增大. 对自发辐射谱峰值强度的  $m$  因子进行计算, 结果表明张应变可以显著提高锗自发辐射的温度稳定性. 在相同应变水平下, 由  $\Gamma$ -hh 跃迁引起的自发辐射谱峰值强度大于  $\Gamma$ -lh 跃迁引起的自发辐射谱峰值强度, 但二者的积分强度几乎相等. 此外, 计算结果还证明了 n 型掺杂能显著提高锗的自发辐射强度. 以上结果对于研究简并态半导体的自发辐射性质有重要的参考意义.

**关键词:** 简并态锗, 自发辐射, 应变, 掺杂**PACS:** 61.72.uf, 65.80.-g, 73.43.Cd, 74.25.Gz**DOI:** 10.7498/aps.66.156102

## 1 引言

锗(Ge)由于具有准直接带特性及与硅(Si)工艺相兼容等优势被认为是硅基光源的理想候选材料之一. 理论计算<sup>[1]</sup>及实验结果<sup>[2]</sup>已证实室温下锗的直接带隙与间接带隙差仅为136 meV, 并且在张应变下该带隙差能进一步减小, 有助于提高锗的发光效率. 在锗中引入约2%的张应变时, 锗能转变为直接带隙半导体. 另一方面, 相比于本征锗, n型掺杂锗在相同注入水平下有更多的电子可以被注入到  $\Gamma$  能谷中, 因而提高锗中 n 型掺杂浓度是提高锗发光效率的另一种途径<sup>[3]</sup>. 基于应变能带工程以及 n 型重掺杂手段, 已有关于锗的直接带光致发光以及电致发光的大量报道<sup>[4-10]</sup>. 然而受工艺限制, 在器件制备中能在锗里引入的张应变仍有限, 锗的直接带发光一般是在简并态(大注入或 n 型重掺杂)下实现的. Schubert 等<sup>[11]</sup>提出的自发辐射理论是基于玻尔兹曼近似推导的, 适用于注入水平足够低的情形. 对于简并态材料的发光, 该理论已不适用. 目前, 对简并态材料自发辐射性质的研究仍

很少, 例如发光峰位以及发光强度在不同注入水平的变化等. 要精确地分析自发辐射谱, 对简并态材料的自发辐射性质的系统研究必不可少.

本文借助 matlab 编程计算了锗在  $10^{19}$ — $10^{20}$   $\text{cm}^{-3}$  注入载流子水平下的直接带自发辐射性质. 首先讨论了在不同应变水平及温度下锗准费米能级的变化; 然后基于费米狄拉克载流子分布模型系统地研究了应变水平、样品温度、掺杂类型及掺杂浓度对发光峰位和  $m$  因子的影响. 本文的计算结果可以为其他简并材料发光性质的研究提供参考.

## 2 应变及温度对准费米能级的影响

准费米能级反映了材料中非平衡载流子的填充水平, 决定了材料的自发辐射强度. 在计算材料自发辐射谱之前, 有必要探讨应变及温度对材料准费米能级的影响. 简并态下, 锗中载流子与准费米能级的关系可以用(1)式来表示<sup>[12]</sup>:

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2k_B T}{\hbar^2} \right)^{1.5} \left\{ \int_0^\infty \frac{(m_n^L)^{1.5} x_1^{0.5} dx_1}{1 + \exp(x_1 - \xi_1)} \right.$$

\* 国家重点基础研究计划(批准号: 2013CB632103)和国家自然科学基金(批准号: 61474094)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: lich@xmu.edu.cn

$$+ \int_0^\infty \frac{(m_n^\Gamma)^{1.5} x_1^{0.5} dx_1}{1 + \exp[x_1 - \xi_1 + \Delta E_{\Gamma,L}/(k_B T)]}, \quad (1a)$$

$$p = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2k_B T}{\hbar^2} \right)^{1.5} \left\{ \int_0^\infty \frac{(m_{lh})^{1.5} x_2^{0.5} dx_2}{1 + \exp(x_2 - \xi_2)} + \int_0^\infty \frac{(m_{hh})^{1.5} x_2^{0.5} dx_2}{1 + \exp[x_2 - \xi_2 + \Delta E_{lh,hh}/(k_B T)]} \right\}, \quad (1b)$$

$$x_1 = \frac{E - E_C}{k_B T}, \xi_1 = \frac{E_{Fn} - E_C}{k_B T}, \quad (1c)$$

$$x_2 = \frac{E_V - E}{k_B T}, \xi_2 = \frac{E_V - E_{Fp}}{k_B T}, \quad (1d)$$

(1) 式中,  $n$  和  $p$  为电子和空穴浓度;  $k_B$  为玻尔兹曼常数;  $T$  为样品温度;  $m_n^L$  和  $m_n^\Gamma$  为  $L$  和  $\Gamma$  能谷中的态密度有效质量;  $m_{lh}$  和  $m_{hh}$  为轻空穴带和重空穴带的态密度有效质量;  $E_{Fn}$  和  $E_{Fp}$  为电子和空穴的准费米能级.  $L$  和  $\Gamma$  能谷能量差 ( $\Delta E_{\Gamma,L}$ ) 以及轻重空穴带能量差 ( $\Delta E_{lh,hh}$ ) 取决于应变水平. 室温下, 对体锗而言,  $\Delta E_{\Gamma,L} = 136$  meV,  $\Delta E_{lh,hh} = 0$  meV. 在沿 [001] 的双轴张应变 ( $\varepsilon_{//}$ ) 下, 锗各带边的移动可以表示为<sup>[13]</sup>

$$\Delta E_C^\Gamma(\varepsilon_{//}) = 2a_\Gamma(1 - c_{12}/c_{11})\varepsilon_{//}, \quad (2a)$$

$$\Delta E_C^L(\varepsilon_{//}) = 2a_L(1 - c_{12}/c_{11})\varepsilon_{//}, \quad (2b)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_V^{lh}(\varepsilon_{//}) &= 2a_V(1 - c_{12}/c_{11})\varepsilon_{//} - \Delta_0/6 \\ &+ \delta E_{001}/4 + \frac{1}{2}[(\Delta_0)^2 + \Delta_0 \delta E_{001} \\ &+ 2.25(\delta E_{001})^2]^{0.5}, \end{aligned} \quad (2c)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_V^{hh}(\varepsilon_{//}) &= 2a_V(1 - c_{12}/c_{11})\varepsilon_{//} + \Delta_0/3 \\ &- \delta E_{001}/2, \end{aligned} \quad (2d)$$

式中,  $a_\Gamma$ ,  $a_L$  和  $a_V$  分别为  $\Gamma$  能谷、 $L$  能谷和价带的静水压形变常数;  $c_{12}$  和  $c_{11}$  为弹性常数;  $\Delta_0$  为自旋-轨道劈裂能;  $b_{001}$  为剪切形变常数,  $\delta E_{001} = -2b_{001} \left( 1 + 2 \frac{c_{12}}{c_{11}} \right) \varepsilon_{//}$  为剪切形变势能. 值得注意的是,  $\Delta E_{\Gamma,L}$  也与温度有关. 根据 Varshini 定律<sup>[14]</sup>, 当温度大于 300 K 时, 锗直接带隙和间接带隙的减小量为

$$\Delta E_{g,\Gamma}(T) = p_1 \Delta T, \quad (3a)$$

$$\Delta E_{g,L}(T) = p_2 \Delta T, \quad (3b)$$

式中  $p_1 \approx -4.2 \times 10^{-4}$  eV/K,  $p_2 \approx -3.6 \times 10^{-4}$  eV/K;  $\Delta T$  为样品温度相对室温的变化. 因此, 同时考虑应变和样品温度的作用后,  $\Delta E_{lh,hh}$  和  $\Delta E_{\Gamma,L}$  可以表示为

$$\begin{aligned} \Delta E_{lh,hh}(\varepsilon_{//}) \\ = \Delta E_V^{lh}(\varepsilon_{//}) - \Delta E_V^{hh}(\varepsilon_{//}), \end{aligned} \quad (4a)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_{\Gamma,L}(\varepsilon_{//}, T) \\ = \Delta E_C^\Gamma(\varepsilon_{//}) - \Delta E_C^L(\varepsilon_{//}) + \Delta E_{g,\Gamma}(T) \\ - \Delta E_{g,L}(T). \end{aligned} \quad (4b)$$

计算过程中所用的锗相关参数列于表 1 中 ( $m_0$  为电子静止质量)<sup>[13,15-17]</sup>.

表 1 计算锗准费米能级所用的参数

Table 1. Parameters used for calculation of quasi-Fermi level of Ge.

$m_n^L/m_0$	$m_n^\Gamma/m_0$	$m_{lh}/m_0$	$m_{hh}/m_0$	$a_\Gamma/\text{eV}$	$a_L/\text{eV}$	$a_V/\text{eV}$	$\Delta_0/\text{eV}$	$b_{001}/\text{eV}$	$c_{12}/\text{eV}$	$c_{11}/\text{eV}$
0.65	0.038	0.043	0.284	-8.97	-2.78	1.24	0.289	-1.88	47.9	129.2

## 2.1 应变对准费米能级的影响

图 1 示出了室温下锗在 -1%—2% 应变范围内的载流子浓度与准费米能级的关系. 可以看出, 当锗中应变小于 2% 时, 应变对电子准费米能级的影响几乎可以忽略; 当锗中应变达到 2% 后, 在相同载流子浓度下, 锗的电子准费米能级显著升高. 电子准费米能级的这种变化与电子在  $L$  和  $\Gamma$  能谷的竞争分布有关. 由于  $L$  能谷的态密度远大于  $\Gamma$  能谷的态密度, 当锗中应变小于 2% 时, 锗为间接带隙半

导体, 电子优先填充  $L$  能谷, 因而应变对电子准费米能级影响很小; 当锗中应变达到 2% 时, 锗转变为直接带隙半导体, 电子优先填充  $\Gamma$  能谷, 因而电子的准费米能级显著升高. 空穴也有类似的现象: 在压应变下, 空穴优先填充态密度有效质量大的重空穴带, 应变对空穴的准费米能级影响很小; 在张应变下, 空穴优先填充在态密度有效质量小的轻空穴带, 且随着应变增大, 轻、重空穴价带顶能量差增大, 因而空穴的准费米能级随张应变的提高显著降低.

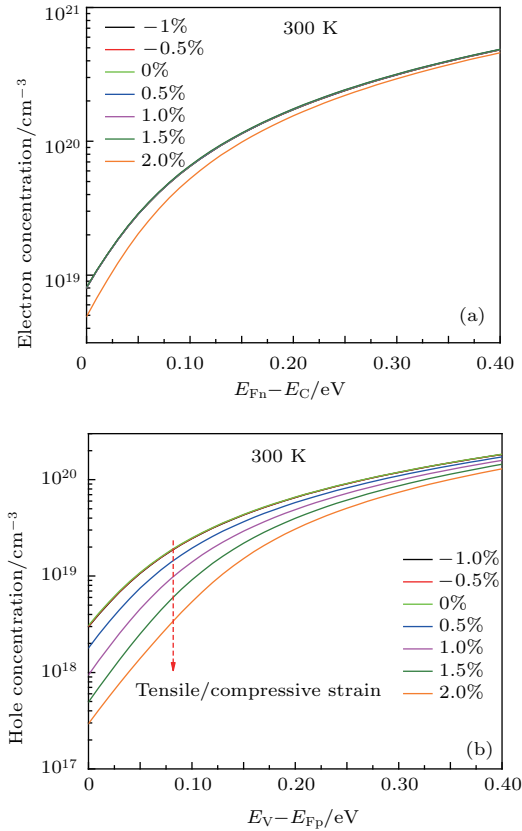


图1 (网刊彩色) 室温下锗在-1%—2%应变范围内的(a)电子浓度与电子准费米能级的变化关系及(b)空穴浓度与空穴准费米能级的变化关系

Fig. 1. (color online) For Ge under various strains at room temperature, (a) relationship between electron concentration and quasi-Fermi level position of electron, and (b) relationship between hole concentration and quasi-Fermi level position of hole.

## 2.2 温度对准费米能级的影响

图2示出了受1%张应变的锗在300—425 K范围内载流子浓度与准费米能级的关系. 随着温度的升高, 载流子在能带中的分布更加弥散, 需要更多的载流子浓度来维持准费米能级的位置. 由于导(价)带的态密度与导(价)带到导(价)带底(顶)能量差的平方根成正比, 在能带更高能处, 温度对准费米能级的影响减弱.

## 3 简并态锗的自发辐射

对于锗直接带发光, 光子能量  $E$  与倒格矢  $\mathbf{k}$  的关系可表示为

$$\begin{aligned} h\nu &= E(\mathbf{k}) \\ &= 0.5\hbar^2 k^2 / m_{e\Gamma}^* + 0.5\hbar^2 k^2 / m_h^* + E_{g,\Gamma} \end{aligned} \quad (5)$$

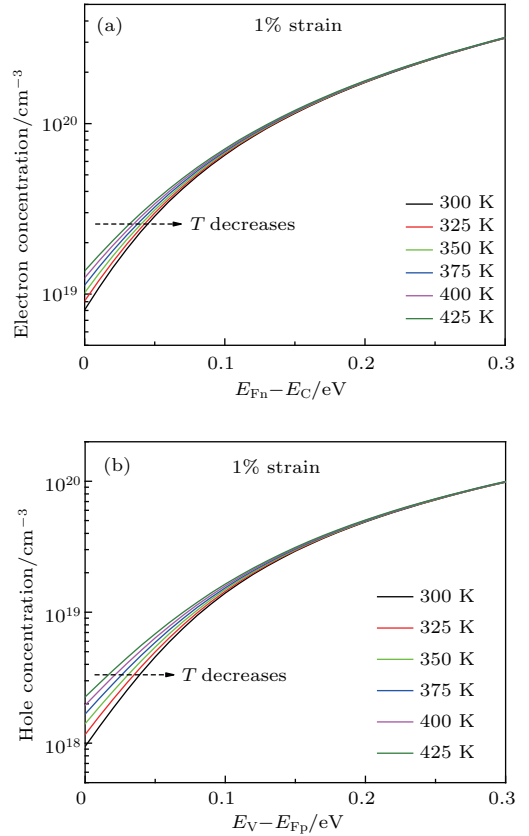


图2 (网刊彩色) 受1%张应变的锗在300—425 K温度范围内的(a)电子浓度与电子准费米能级的关系图及(b)空穴浓度与空穴准费米能级的关系图

Fig. 2. (color online) For Ge under various temperatures with 1% strain, (a) relationship between electron concentration and quasi-Fermi level position of electron, and (b) relationship between hole concentration and quasi-Fermi level position of hole.

其中  $m_{e\Gamma}^* = 0.038m_0$  为  $\Gamma$  能谷中电子有效质量,  $m_h^* = 0.043m_0$  或  $m_h^* = 0.284m_0$  为轻空穴或重空穴有效质量.  $E_{g,\Gamma}$  为锗的直接带带隙, 由第2部分可推知其与温度和应变的依赖关系为

$$\begin{aligned} E_{g,\Gamma}(\varepsilon_{//}, T) &= E_{g,\Gamma 0} + \Delta E_C^\Gamma(\varepsilon_{//}) - \Delta E_V^{hh}(\varepsilon_{//}) \\ &\quad + \Delta E_{g,\Gamma}(T) \quad (\text{张应变下}), \end{aligned} \quad (6a)$$

$$\begin{aligned} E_{g,\Gamma}(\varepsilon_{//}, T) &= E_{g,\Gamma 0} + \Delta E_C^\Gamma(\varepsilon_{//}) - \Delta E_V^{hh}(\varepsilon_{//}) \\ &\quad + \Delta E_{g,\Gamma}(T) \quad (\text{压应变下}), \end{aligned} \quad (6b)$$

式中,  $E_{g,\Gamma 0} = 0.802$  eV 为室温下 (300 K) 体锗的直接带隙.

在重掺杂或大注入下, 锗处于简并态, 此时直接带发光强度 ( $I$ ) 随光子能量 ( $h\nu = E(\mathbf{k})$ ) 的分布

可表示为

$$I(\mathbf{k}) \propto m_r^{3/2} \sqrt{\frac{0.5\hbar^2 k^2}{m_{e\Gamma}^*} + \frac{0.5\hbar^2 k^2}{m_h^*}} f_{e,\Gamma}(\mathbf{k}) f_h(\mathbf{k}), \quad (7a)$$

$$f_{e,\Gamma}(\mathbf{k}) = \left[ 1 + \exp\left(\frac{\frac{0.5\hbar^2 k^2}{m_{e\Gamma}^*} + E_{C,\Gamma} - E_{Fn}}{k_B T}\right) \right]^{-1}, \quad (7b)$$

$$f_h(\mathbf{k}) = \left[ 1 + \exp\left(\frac{\frac{0.5\hbar^2 k^2}{m_h^*} + E_{Fp} - E_{V,\Gamma}}{k_B T}\right) \right]^{-1}, \quad (7c)$$

式中,  $m_r = m_n^\Gamma m_h / (m_n^\Gamma + m_h)$  为态密度折合有效质量,  $m_h = m_{lh}$  或  $m_{hh}$ ;  $f_{e,\Gamma}(\mathbf{k})$  和  $f_h(\mathbf{k})$  为电子在  $\Gamma$  能谷及价带中空穴的费米狄拉克分布函数;  $E_{C,\Gamma}$  和  $E_{V,\Gamma}$  分别为  $\Gamma$  能谷谷底和价带顶的能量. 为了便于分析, 所有自发辐射谱都经过相同的归一化处理.

### 3.1 温度和应变对自发辐射谱的影响

图 3(a) 为 1% 张应变本征锗在  $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  载流子注入浓度下的  $\Gamma$ -hh 跃迁自发发射谱. 模拟的样品温度为 300—425 K. 随着温度的升高, 锗的带隙减小、载流子在能带中的分布更加弥散, 因而自发辐射谱的峰值位置向低能端移动并且谱的半高宽增大. 虽然在更高温度下, 载流子在价带和导带中的占据概率降低, 但是由于  $\Gamma$  能谷和  $L$  能谷的能量差减小, 使得有更多的电子填充到  $\Gamma$  能谷中, 因而自发发射谱的峰值强度随温度的升高反而增大. 另外, 当样品温度升高时, 激发到  $\Gamma$  能谷及价带中的载流子总数目变多, 因而锗的自发辐射积分强度也随着温度的升高而增大.

图 4(a) 为不同应变下本征锗在  $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  注入载流子浓度下的  $\Gamma$ -hh 跃迁室温自发发射谱. 随着应变的增大, 自发辐射谱的半高宽、峰值强度和积分强度也都随之增大. 自发辐射强度的增大是由于应变的引入减小了  $L$  能谷和  $\Gamma$  能谷的能量差, 使得有更多的电子能散射到  $\Gamma$  能谷中参与自发辐射. 当锗中引入 0.8% 张应变时, 自发辐射的峰值

强度和积分强度相比无应变锗的情形都提高了 10 倍左右, 与文献 [18] 报道的光致发光测试结果一致.

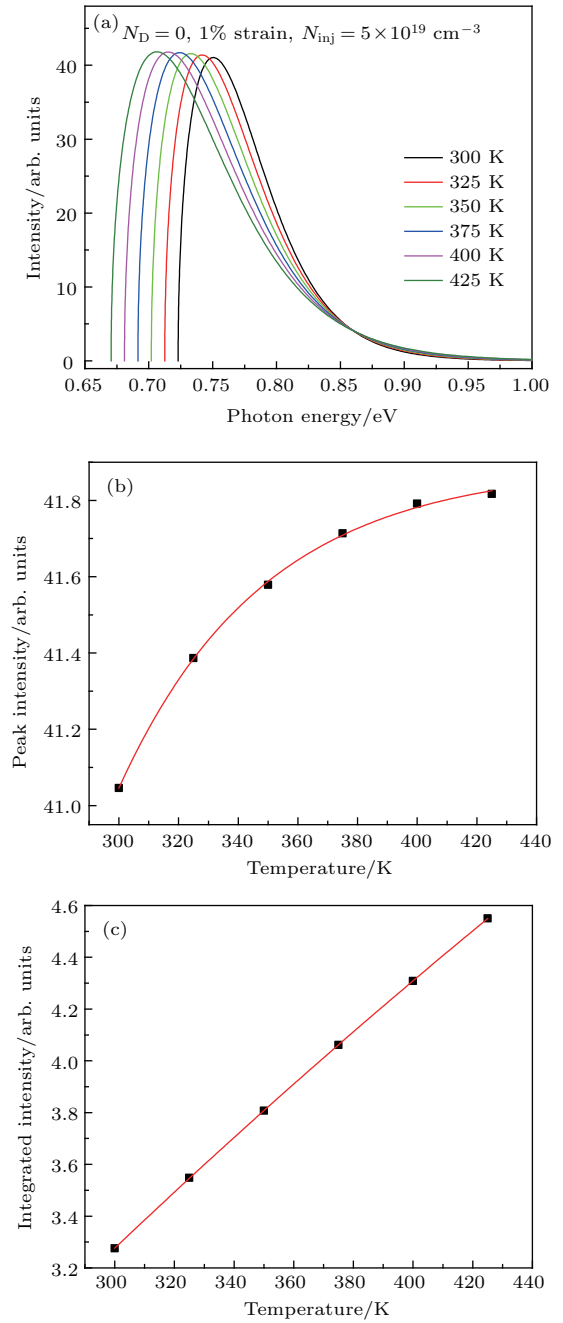


图 3 (网刊彩色) (a) 本征锗在  $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  注入载流子浓度、1% 张应变下  $\Gamma$  能谷电子重空穴跃迁自发发射谱随温度的变化及对应的 (b) 峰值强度、(c) 积分强度随温度的变化

Fig. 3. (color online) (a) Calculation of spontaneous emission spectra from  $\Gamma$ -hh recombination in intrinsic Ge with injection carrier concentration of  $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  under 1% strain at various sample temperature and corresponding dependence of (b) peak intensity and (c) integrated intensity on sample temperature.



从图中还可以看出, 虽然  $\Gamma$ -hh 跃迁自发辐射的峰值强度大于  $\Gamma$ -lh 跃迁自发辐射的峰值强度, 但它们的积分强度几乎相等. 这是由于虽然轻空穴带态密度更小, 但空穴在其中的能量分布更加弥散.

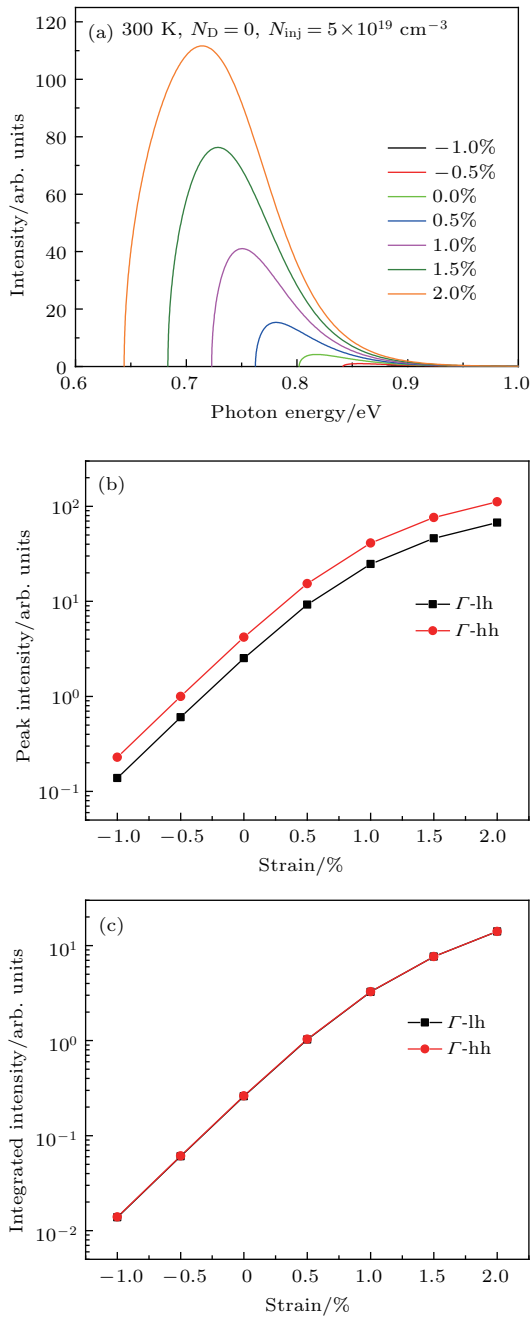


图4 (网刊彩色) (a) 室温时本征锗在  $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  注入载流子浓度、不同应变下的  $\Gamma$ -hh 跃迁自发发射谱及其与  $\Gamma$ -lh 跃迁自发发射谱的 (b) 峰值强度、(c) 积分强度随应变的变化

Fig. 4. (color online) (a) Calculation of spontaneous emission spectra from  $\Gamma$ -hh transition of intrinsic Ge under various strains at room temperature with injection carrier concentration of  $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ; variation of (b) peak intensity and (c) integrated intensity of spontaneous emission spectra from  $\Gamma$ -hh and  $\Gamma$ -lh transitions versus the strain level in Ge.

### 3.2 掺杂类型及掺杂浓度对自发辐射谱的影响

图5(a)和图5(b)分别示出了p型掺杂浓度对0.2%张应变锗和1%张应变锗在  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  注入载流子浓度下的室温  $\Gamma$ -lh 跃迁自发发射谱的影响. 计算的p型掺杂浓度范围为  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  至  $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . 为了更直观地研究自发辐射强度的变化, 忽略了重掺杂下的能带缩减效应<sup>[19]</sup>. 可以看出, 对于0.2%张应变锗, 其自发辐射强度随着p型掺杂浓度的增大略微增大. 然而, 当锗中张应变增大到1%时, p型掺杂浓度的增加对自发辐射强度的增大变得更小. 图5(c)定量地显示了不同p型掺杂浓度下自发辐射谱峰值强度相比于本征锗的提高倍数. 随着受主浓度的增加, 自发辐射谱峰值强度的增强迅速达到饱和值. 在  $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  受主浓度下, 0.2%张应变锗的峰值强度相比本征锗仅提高了约20%, 对1%张应变锗仅提高了约7%. 上述结果表明, p型掺杂并不能有效地提高锗的自发辐射强度.

为了对比, 同时模拟了n型掺杂浓度对锗自发发射谱的影响. 图6(a)和图6(b)示出了n型锗在与图5(a)和图5(b)相同应变水平和注入载流子浓度下的自发发射谱. 图6(c)为不同n型掺杂浓度下锗相比于本征锗的自发发射谱峰值强度增强因子随n型掺杂浓度的变化. 可以看出, 随n型掺杂浓度的增加, 自发发射谱的峰值强度显著增大. 对于0.2%张应变锗, 在  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  和  $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  n型掺杂浓度下, 自发发射谱峰值强度分别增强了约1.7倍和约22.6倍. 当锗中张应变增大到1%, 自发发射谱峰值强度增强因子仍大于约1.5倍和9.8倍. 上述结果说明n型掺杂能大大提高锗的自发辐射强度.

### 3.3 掺杂、应变及温度对自发辐射峰值强度 $m$ 因子的影响

通过  $L-I^m$  关系拟合  $LI$  曲线可以提取出自发辐射谱的  $m$  因子, 以定量表征材料的自发辐射性质. 大多数情况下, 载流子的注入浓度 ( $\Delta n$ ) 近似正比于注入电流 ( $I$ )<sup>[20]</sup>. 因而,  $m$  因子可以通过线性拟合  $\log L - \log \Delta n$  曲线得到.

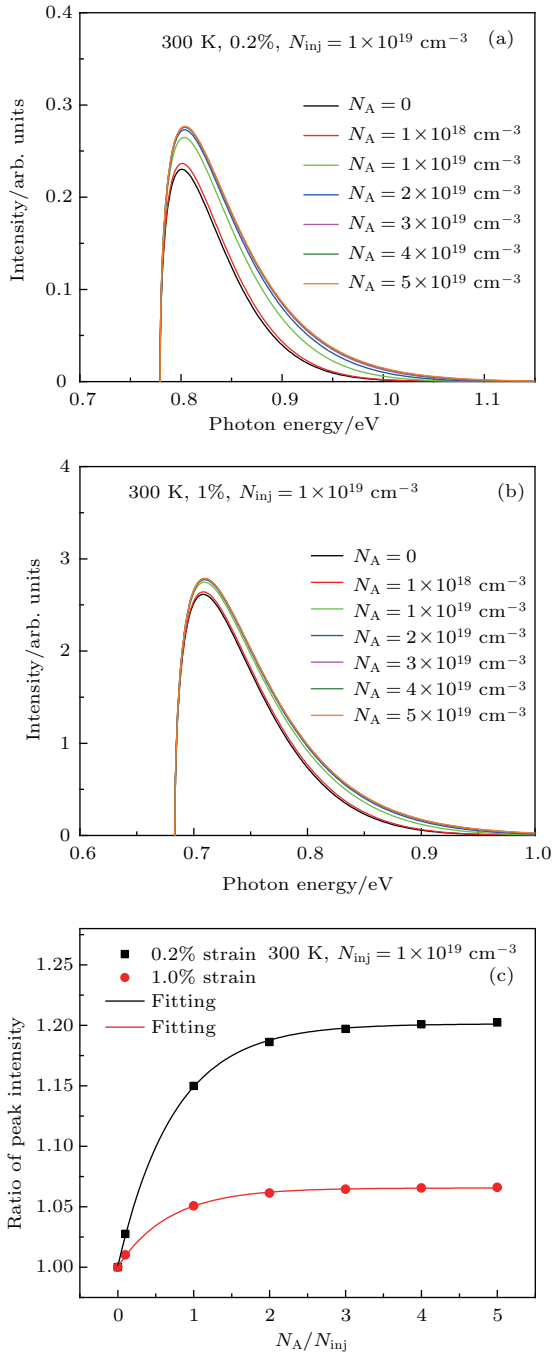


图5 (网刊彩色) (a) 0.2% 张应变 Ge 及 (b) 1% 张应变 Ge 在  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  注入载流子浓度、不同 p 型掺杂浓度下的室温  $\Gamma$ -lh 跃迁自发发射谱; (c) 上述模拟条件下的峰值发光强度与本征锗的比值随 p 型掺杂浓度的变化; 上述计算过程中忽略了重掺杂引起的能带缩减效应

Fig. 5. (color online) The spontaneous emission spectra for Ge under various p-type doping concentrations (a) with 0.2% tensile strain and (b) with 1% tensile strain under injection carrier concentration of  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  at room temperature from  $\Gamma$ -lh transition; (c) the amplification of peak intensity compared to that of intrinsic Ge under p-type doping. The effect of band gap narrowing by heavy doping is neglected.

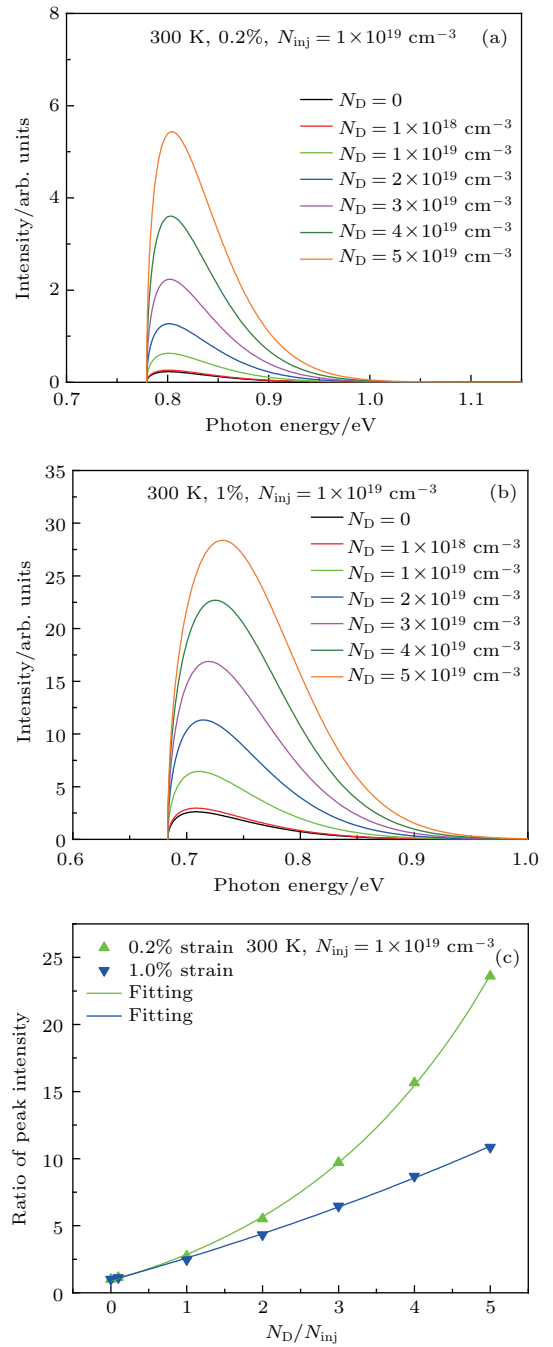


图6 (网刊彩色) (a) 0.2% 张应变 Ge 及 (b) 1% 张应变 Ge 在  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  注入载流子浓度、不同 n 型掺杂浓度下的室温  $\Gamma$ -lh 跃迁自发发射谱; (c) 上述模拟条件下的峰值发光强度与本征锗的比值随 n 型掺杂浓度的变化; 上述计算过程中忽略了重掺杂引起的能带缩减效应

Fig. 6. (color online) The spontaneous emission spectra for Ge under various n-type doping (a) with 0.2% tensile strain and (b) with 1% tensile strain under injection carrier concentration of  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  at room temperature from  $\Gamma$ -lh transition; (c) the amplification of peak intensity compared to that of intrinsic Ge under n-type doping. The effect of band gap narrowing by heavy doping is neglected.

图 7(a) 示出了  $n$  型掺杂浓度对体锗室温自发辐射谱  $m$  因子的影响. 由于施主杂质能额外提供电子, 随着  $n$  型掺杂浓度的增大,  $m$  因子逐渐变小. 在注入载流子浓度分别为  $10^{19}$ ,  $10^{20}$   $\text{cm}^{-3}$  下, 当锗中施主杂质为  $5 \times 10^{19}$   $\text{cm}^{-3}$  时,  $m$  因子分别从本征锗的 1.64, 2.60 减小至 0.75, 1.30. 当锗中存在张应变时,  $\Gamma$  能谷和  $L$  能谷的能量差减小, 在相同注入水平下有更多的电子能填充至  $\Gamma$  能谷中. 因此,  $m$  因子随锗中张应变水平增大而减小 (图 7(b)). 在  $10^{19}$   $\text{cm}^{-3}$  注入载流子浓度下, 当锗中张应变变为 2.0% 时,  $m$  因子从体锗的 1.64 减小至 0.90.

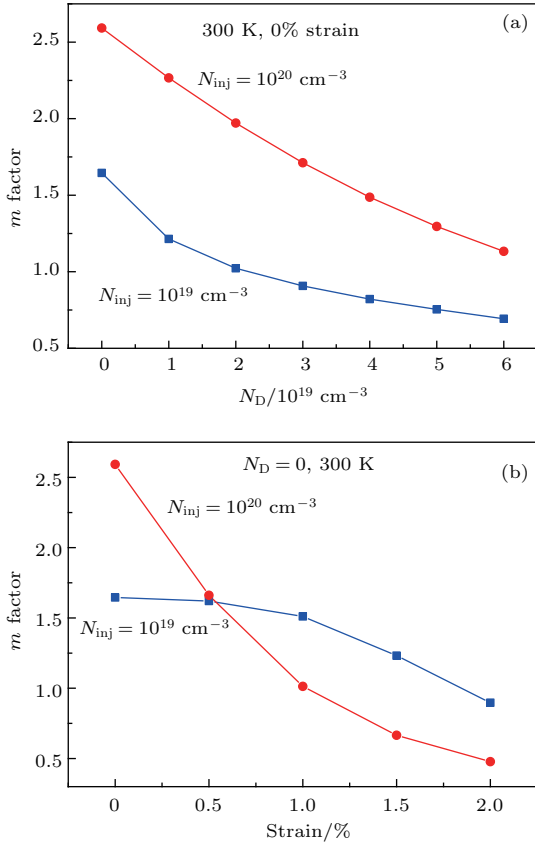


图 7 (网刊彩色) (a) 室温下体 Ge 自发辐射谱  $m$  因子随  $n$  掺杂浓度的变化; (b) 室温下本征 Ge 自发辐射谱  $m$  因子随张应变的变化

Fig. 7. (color online) (a) The dependence of  $m$  factor for spontaneous emission spectra of bulk Ge on  $n$ -type doping concentration at room temperature; (b) the dependence of  $m$  factor for spontaneous emission spectra of intrinsic Ge on tensile strain at room temperature.

图 8(a) 和图 8(b) 分别为无应变本征锗及 1% 张应变本征锗的自发辐射  $m$  因子随温度的变化. 对于无应变本征锗, 在  $10^{19}$   $\text{cm}^{-3}$  注入载流子浓度下,  $m$  因子从 300 K 下的 1.64 略微减小至 425 K 下的 1.6; 在  $10^{20}$   $\text{cm}^{-3}$  注入载流子浓度下,  $m$  因子从

300 K 下的 2.60 减小至 425 K 下的 1.94. 对于 1% 张应变本征锗,  $m$  因子几乎和温度无关, 且随着注入载流子浓度的增加,  $m$  因子从  $10^{19}$   $\text{cm}^{-3}$  的 1.50 减小至  $10^{20}$   $\text{cm}^{-3}$  的 1.01. 这些结果表明张应变能提高锗自发辐射的温度稳定性.

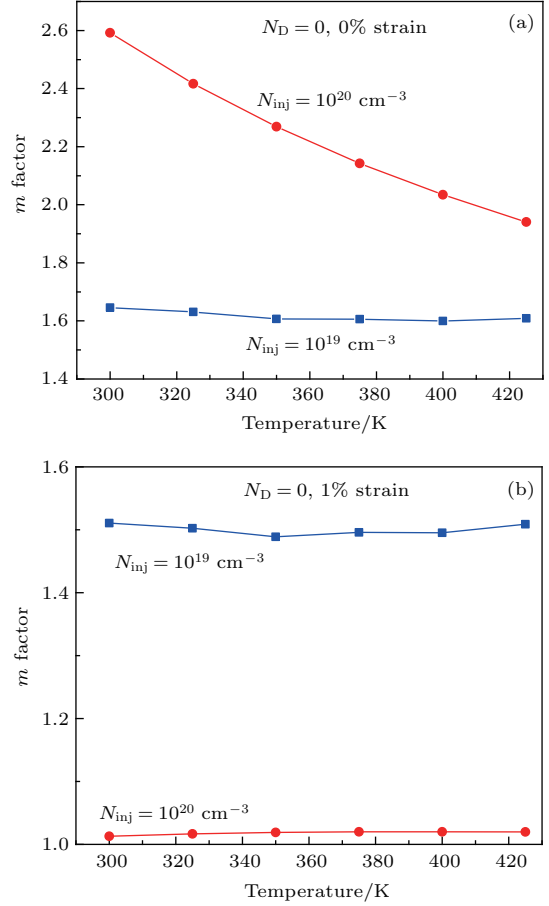


图 8 (网刊彩色) (a) 无应变本征锗及 (b) 1% 张应变本征锗自发辐射谱  $m$  因子随温度的变化

Fig. 8. (color online) The dependence of  $m$  factor for spontaneous emission spectra of intrinsic Ge (a) without strain and (b) with 1% tensile strain on sample temperature.

## 4 结 论

本文模拟并分析了应变、温度以及掺杂对简并态锗自发辐射谱的影响. 在  $10^{19}$ — $10^{20}$   $\text{cm}^{-3}$  注入载流子浓度范围内, 压应变对准费米能级的影响可以忽略, 而张应变有助于提高载流子的填充水平, 从而大大增强了自发辐射强度. 随着温度的升高,  $\Gamma$  能谷和  $L$  能谷间的能量差减小, 同时有更多的电子(空穴)被激发到导带(价带)中. 因而, 虽然在更高温度下载流子在能带中的分布更加弥散, 自发辐射谱的峰值强度和积分强度仍随温度升高而增大.



计算结果表明, 在镉中引入受主杂质对自发发射谱强度的影响很小, 而在镉中引入施主杂质能极大地提高自发发射谱强度. 对  $L-\Delta n$  曲线  $m$  因子的研究表明, 张应变可以提高镉自发辐射的温度稳定性. 本文的模拟结果对于其他的简并态材料自发辐射性质的研究起着指导意义.

### 参考文献

- [1] Sun X C, Liu J F, Kimerling L C, Michel J 2010 *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **16** 124
- [2] Ghrib A, Kersauson M D, Kurdi M E, Jakomin R, Beaudoin G, Sauvage S, Fishman G, Ndong G, Chaigneau M, Ossikovski R, Sagnes I, Boucaud P 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 201104
- [3] Cai Y, Han Z H, Wang X X, Rodolfo E, Aguilera C, Kimerling L C, Michel J, Liu J F 2013 *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **19** 1901009
- [4] Lin G Y, Wang C, Li C, Chen C W, Huang Z W, Huang W, Chen S Y, Lai H K, Jin C Y, Sun J M 2016 *Appl. Phys. Lett.* **108** 191107
- [5] Michael O, Martin G, Daniel W, Marc S, Mathias K, Erich K, Jörg S 2013 *Opt. Express* **21** 2206
- [6] Lin G Y, Yi X H, Li C, Chen N L, Zhang L, Chen S Y, Huang W, Wang J Y, Xiong X H, Sun J M 2016 *Appl. Phys. Lett.* **109** 141104
- [7] Bernhard S, André K, Martin K, Michael O, Erich K, Jörg S 2014 *Phys. Status Solidi C* **11** 1686
- [8] Liu Z, Hu W X, Li C, Li Y M, Xue C L, Li C B, Zuo Y H, Cheng B W, Wang Q M 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 231108
- [9] Lin G Y, Chen N L, Zhang L, Huang Z W, Huang W, Wang J Y, Xu J F, Chen S Y, Li C 2016 *Materials* **9** 803
- [10] Rodolfo E, Camacho A, Cai Y, Neil P, Bessette J T, Marco R, Kimerling L C, Jurgen M 2012 *Opt. Express* **20** 11316
- [11] Schubert E F, Gessmann T, Kim J K 2005 *Light Emitting Diodes Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology*
- [12] Huang S H, Li C, Chen C Z, Zheng Y Y, Lai H K, Chen S Y 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 036202 (in Chinese) [黄诗浩, 李成, 陈城钊, 郑元宇, 赖虹凯, 陈松岩 2012 物理学报 **61** 036202]
- [13] van de Walle C G 1989 *Phys. Rev. B* **39** 1871
- [14] Varshni Y P 1967 *Physica* **34** 149
- [15] Liu J F, Cannon D D, Kazumi W, Yasuhiko I, David T D, Samerkhae J, Michel J, Lionel C K 2004 *Phys. Rev. B* **70** 155309
- [16] Wortman J J, Evans R A 1965 *J. Appl. Phys.* **36** 153
- [17] Cheng S L, Lu J, Shambat G, Yu H Y, Saraswat K, Vuckovic J, Nishi Y 2009 *Opt. Express* **17** 10019
- [18] Capellini G, Reich C, Guha S, Yamamoto Y, Lisker M, Virgilio M, Ghrib A, Kurdi M E, Boucaud P, Tillack B, Schroeder T 2014 *Opt. Express* **22** 399
- [19] Rodolfo C A, Han Z H, Cai Y, Lionel C K, Jurgen M 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 152106
- [20] 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** 092102

# Simulation of spontaneous emission spectrum of degenerate Ge under large injection level\*

Wang Jian-Yuan Lin Guang-Yang Wang Jia-Qi Li Cheng<sup>†</sup>

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

( Received 8 March 2017; revised manuscript received 16 May 2017 )

## Abstract

Germanium (Ge) is considered as a promising material for silicon (Si) based light source. Based on tensile strain and n-type heavy doping approaches, the light emitting efficiency of Ge can be improved. Nevertheless, due to the difficulty in introducing large tensile strain into Ge, the photoluminescence or electroluminescence of Ge is demonstrated under degenerated states currently. Traditional spontaneous emission (SE) theory deduced from Boltzmann approximation is inapplicable for this case. To accurately analyze the SE properties of Ge, the influences of strain, temperature and doping on quasi-Fermi level and subsequent SE spectrum of degenerated Ge are theoretically investigated based on Fermi-Dirac distribution model. Owing to large density of states (DOS) in heavy hole (hh) the valance band (VB) and  $L$  valley, it is found that compressive strain has a negligible effect on the quasi-Fermi level under carrier concentration of  $10^{19}$ – $10^{20}$   $\text{cm}^{-3}$ , while tensile strain is of benefit to the improvement of carrier occupation levels, leading to dramatic increases of both peak and integrated intensities of SE spectra. Although the peak intensity of SE from  $\Gamma$ -hh transition is larger than that from  $\Gamma$ -lh transition regardless of strain levels in Ge, the integrated intensities of SE from  $\Gamma$ -hh and  $\Gamma$ -lh transitions are almost equal. With the increase of sample temperature, the carriers acquire larger kinetic energy, resulting in more dispersive distribution of electrons (holes) in  $\Gamma$  valley (VB). However, more electrons (holes) are induced into conduction (valence) band at the same time. And according to Varshini's law the energy difference between  $\Gamma$  and  $L$  valleys is reduced at higher temperature. Thus, both the peak and integrated intensities of the SE spectra become larger at higher temperature. It is impressive that n-type doping can greatly enhance the SE intensity compared with p-type doping irrespective of strain levels in Ge, demonstrating the significance of n-type doping in the enhancement of Ge SE. Furthermore, it is found that  $m$  factors, which can be extracted from linear fitting of  $\log L$ - $\log \Delta n$  curves, diminish at heavier doping concentration. Under tensile strain condition, the variation of  $m$  factors for Ge SE with the sample temperature becomes less sensitive, implying that the tensile strain can effectively enhance the temperature stability of Ge SE. These results provide a significant guidance for analyzing the SE properties of degenerated Ge and other degenerated semiconductors.

**Keywords:** degenerated Ge, spontaneous emission, strain, doping

**PACS:** 61.72.uf, 65.80.-g, 73.43.Cd, 74.25.Gz

**DOI:** 10.7498/aps.66.156102

\* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2013CB632103) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61474094).

† Corresponding author. E-mail: lich@xmu.edu.cn