物理学报 Acta Physica Sinica
Chinese Physical Society
Institute of Physics, CAS

近800 nm波长张应变GaAsP/AlGaAs量子阱激光器有源区的设计

李建军

Design of active region for GaAsP/AlGaAs tensile strain quantum well laser diodes near 800 nm wavelength

Li Jian-Jun

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica, 67, 067801 (2018)　DOI: 10.7498/aps.67.20171816
在线阅读 View online: http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20171816
当期内容 View table of contents: http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I6

近800 nm波长张应变GaAsP/AlGaAs量子阱激光器有源区的设计*

李建军†

(北京工业大学, 光电子技术教育部重点实验室, 北京 100124)

(2017年8月11日收到; 2017年12月24日收到修改稿)

张应变$GaAs_{1-x}P_x$量子阱是高性能大功率半导体激光器的核心有源区, 基于能带结构分析优化其结构参数具有重要的应用指导意义. 首先, 基于6×6 Luttinger-Kohn模型, 采用有限差分法计算了张应变$GaAs_{1-x}P_x$量子阱的能带结构, 得到了第一子带间跃迁波长固定为近800 nm时的阱宽-阱组分关系, 即随着阱组分x的增加, 需同时增大阱宽, 且阱宽较大时靠近价带顶的是轻空穴第一子带lh_1, 阱宽较小时靠近价带顶的是重空穴第一子带hh_1. 计算并分析了导带第一子带c_1到价带子带lh_1和hh_1的跃迁动量矩阵元. 针对808 nm量子阱激光器, 模拟计算了阈值增益与阱宽的关系, 得到大阱宽有利于横磁模激射, 小阱宽有利于横电模激射. 进一步考虑了自发辐射和俄歇复合之后, 模拟计算了808 nm量子阱激光器的阱宽与阈值电流密度的关系, 阱宽较大时载流子对高能级子带的填充使得阈值电流密度增加, 而阱宽较小时则是低的有源区光限制因子导致阈值电流密度升高, 因此存在一最佳的阱宽-阱组分组合, 可使阈值电流密度达到最小. 本文的模拟结果可对张应变$GaAs_{1-x}P_x$量子阱激光器的理论分析和结构设计提供理论指导.

关键词: 量子阱, 能带结构, 张应变

PACS: 78.67.De, 85.60.Bt, 85.35.Be, 73.21.Fg **DOI:** 10.7498/aps.67.20171816

1 引 言

随着半导体激光器(laser diodes, LD)性能的不断提升, 波长在800 nm附近的LD在医疗、检测、抽运和工业加工等领域的应用日趋普遍[1−4], 其中波长为808 nm的LD是广泛应用的Nd:YAG固体激光器的核心抽运光源[5], 波长为793 nm 的LD是新型掺铥光纤激光器必不可少的泵源[6−8]. LD的性能与有源区材料的选取密切相关, 对于这一波段LD的有源区, 最早采用的是与GaAs衬底晶格匹配的AlGaAs材料[9], 由于没有应变, LD的阈值高、效率低; 另外, 由于有源区含易被氧化的Al, 器件的可靠性低. 有源区采用压应变的AlGaInAs材料后[10,11], 由于应变的引入使价带轻、重空穴带的简并消除, LD的阈值电流得以降低, 量子效率得以提高, 但为了补偿引入In后波长的变化, 意味着有源区需要更多的Al, 因此, 器件的可靠性是一个问题. 有源区采用无Al的InGaAsP材料后[12], 器件的可靠性和寿命得以提高, 但在实际的材料外延工艺中, 四元系InGaAsP材料的生长窗口很窄, 对外延条件的要求较为苛刻, 且导带的带阶小, 不利于对有源区中电子的限制, 器件的温度特性差.

采用张应变的GaAsP量子阱作为LD的有源区材料是一很好的选择[13−17], 其优点不但在于有源区的无铝提高了器件的可靠性, 更为重要的是GaAsP在腔面处弛豫后, 带隙增大, 自然地形成一腔面非吸收窗口, 有利于器件灾变性光学镜面烧毁(catastrophic optical mirror damage, COMD)水平的提高, 100 μm条宽单管LD的输出功率可达到55 W[14]未出现COMD, 寿命可超过10^5 h[18].

* 光电子技术教育部重点实验室发展基金(批准号: PXM2017_014204_500034)和北京市教委能力提升项目(批准号: PXM2016_014204_500026)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: lijianjun@bjut.edu.cn

然而, 与压应变量子阱相比, 将张应变量子阱作为LD的有源区时, 需要对阱的结构参数进行更为仔细的设计. 对于张应变量子阱, 除了张应变体材料的带隙收缩和价带简并消除效应外, 随着阱宽的变化, 量子效应会引起轻、重空穴子能级的相对位置发生变化. 例如, 重空穴的第一子带 hh_1 既可以位于轻空穴的第一子带 lh_1 之上[19], 也可以位于 lh_1 之下, hh_1 带甚至可以位于轻空穴的第二子带 lh_2 之下. 对于从导带第一子带 c_1 到 lh_1 和 hh_1 的电子跃迁, 由于光辐射表现出不同的偏振特性, 因此张应变量子阱的结构参数不但会影响LD的波长、阈值和光功率等特性, 甚至会影响激射模式的偏振特性.

本文基于 6×6 Luttinger-Kohn 理论模型, 采用有限差分法计算了GaAsP/AlGaAs张应变量子阱的能带结构, 给出了量子阱结构的优化设计方法, 以期对GaAsP/AlGaAs张应变量子阱LD的有源区设计和分析提供理论指导.

2 理论模型

图1是GaAsP/AlGaAs量子阱不考虑应变效应时沿 z 方向的带边能带示意图, 整个结构外延生长在GaAs衬底上, 垒区是 $Al_yGa_{1-y}As$ 材料, 阱区是张应变的 $GaAs_{1-x}P_x$ 材料, 因此称其为张应变GaAsP/AlGaAs量子阱. 量子阱的厚度为 $d_{QW}=z_2-z_1$, E_g^B 和 E_g^{QW} 分别是垒区和阱区的禁带宽度, ΔE_c 和 ΔE_v 分别是导带和价带的带阶.

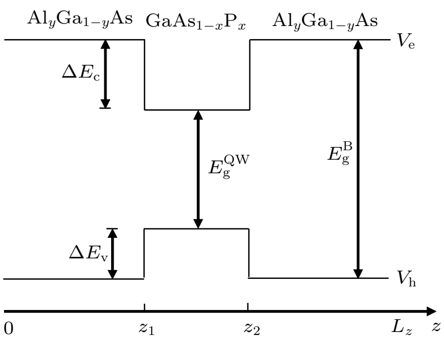

图1 GaAsP/AlGaAs量子阱带边能带示意图
Fig. 1. The energy band edge diagram of the GaAsP/AlGaAs quantum well.

令阱区价带顶的能量为零, 则价带顶的能量 V_h 和导带底的能量 V_e 可分别表示为

$$V_h(z)=-\frac{\Delta E_v}{E_g^B-E_g^{QW}}[E_g(z)-E_g^{QW}], \quad (1)$$

$$V_e(z)=E_g(z)+V_h(z). \quad (2)$$

导带电子的哈密顿量为[20]

$$H^c(\boldsymbol{k})=\left(\frac{\hbar^2}{2}\right)\left(\frac{k_t^2}{m_{n,t}}+\frac{k_z^2}{m_{n,z}}\right)+V_e(z) + a_c T_r, \quad (3)$$

其中, $m_{n,t}$ 和 $m_{n,z}$ 分别是垂直和平行于材料生长方向的电子有效质量, a_c 是导带形变势, $\delta E_c=a_cT_r$ 是由静压力引起的导带移动量, $\hbar$ 是普朗克常数. 对于生长在[001]晶向衬底上的应变半导体材料,

$$\varepsilon_{xx}=\varepsilon_{yy}=\frac{a_0-a_0^s(z)}{a_0}\equiv\varepsilon, \varepsilon_{zz}=-2\frac{C_{12}}{C_{11}}\varepsilon,$$
$$\varepsilon_{xy}=\varepsilon_{xz}=\varepsilon_{zy}=0, \quad (4)$$

$$T_r=\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy}+\varepsilon_{zz}=2\left(1-\frac{C_{12}}{C_{11}}\right)\varepsilon, \quad (5)$$

其中, a_0 和 $a_0^s(z)$ 分别是衬底和各应变外延层材料的晶格常数, C_{11} 和 C_{12} 是弹性刚度常数.

令导带电子的波函数为

$$\Psi_{n,k_t}^{c\eta}=\frac{e^{ik_t\rho}}{\sqrt{A}}\phi_n(z,k_t)|S,\eta\rangle, \quad (6)$$

其中, A 是量子阱的面积, k_t 是平行于阱方向的波矢, $\rho=\sqrt{x^2+y^2}$, ϕ_n 是导带第 n 个子带的包络函数, $|S,\eta\rangle$ 是基函数, η 是电子的自旋, 可取↑或↓.

$\phi_n(z,k_t)$ 应满足薛定谔方程,

$$H^c\phi_n(z,k_t)=E_n^c(k_t)\phi_n(z,k_t), \quad (7)$$

其中, E_n^c 是导带第 n 个子带的本征能量. (7)式可用 $k_t=0$ 处的解近似,

$$E_n^c(k_t)\approx E_n^c(k_t=0)+\frac{\hbar^2k_t^2}{2m_{n,t}^w}, \quad (8)$$

$$\phi_n(z,k_t)\approx\phi_n(z,k_t=0)=\phi_n(z), \quad (9)$$

其中, $m_{n,t}^w$ 是量子阱中电子平行于阱方向的有效质量. ϕ_n 通过下式进行归一化,

$$\int_0^L|\phi_n(z)|^2dz=1. \quad (10)$$

在轴向近似下, 基于Luttinger-Kohn方法, 考虑轨道自旋后的价带 6×6 哈密顿量对角化为[20]

$$\boldsymbol{H}^v(\boldsymbol{k})=\begin{bmatrix}\boldsymbol{H}_{3\times3}^U(\boldsymbol{k}) & 0\\ 0 & \boldsymbol{H}_{3\times3}^L(\boldsymbol{k})\end{bmatrix}, \quad (11)$$

其中,

$$\boldsymbol{H}^{\sigma}_{3\times 3}(\boldsymbol{k}) = -\begin{bmatrix} P+Q-V_{\rm h}(z) & R_k \mp \mathrm{i}S_k & \sqrt{2}R_k \pm \dfrac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}S_k \\ R_k \pm \mathrm{i}S_k & P-Q-V_{\rm h}(z) & \sqrt{2}Q \pm \mathrm{i}\sqrt{\dfrac{3}{2}}S_k \\ \sqrt{2}R_k \mp \dfrac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}S_k & \sqrt{2}Q \mp \mathrm{i}\sqrt{\dfrac{3}{2}}S_k & P+\varDelta(z)-V_{\rm h}(z) \end{bmatrix}, \tag{12}$$

式中的各量为

$$\begin{aligned} &P = P_k + P_\varepsilon, \quad Q = Q_k + Q_\varepsilon, \\ &P_k = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right)\gamma_1(k_t^2+k_z^2), \\ &Q_k = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right)\gamma_2(k_t^2-2k_z^2), \\ &R_k = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right)\sqrt{3}\left(\frac{\gamma_2+\gamma_3}{2}\right)k_t^2, \\ &S_k = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right)2\sqrt{3}\gamma_3 k_t k_z, \\ &P_\varepsilon = -a_v(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy}+\varepsilon_{zz}), \\ &Q_\varepsilon = -\frac{b}{2}(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy}-2\varepsilon_{zz}), \end{aligned} \tag{13}$$

其中, γ_1, γ_2 和 γ_3 是Luttinger参数; a_v 和 b 是Bir-Pikus形变势; $\varDelta(z)$ 是自旋轨道分裂能量. (12)式中的上下正负号对应于 $\sigma=\mathrm{U}$ 和 $\sigma=\mathrm{L}$. 应变对价带的影响由 P_ε 和 Q_ε 项体现.

轴向近似下价带空穴的波函数为

$$\begin{aligned} \varPsi^{v\sigma}_{m,k_t} = {}& \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_t\rho}}{\sqrt{A}}(g^\sigma_{m,\rm hh}|u^\sigma_{\rm hh}\rangle + g^\sigma_{m,\rm lh}|u^\sigma_{\rm lh}\rangle \\ &+ g^\sigma_{m,\rm so}|u^\sigma_{\rm so}\rangle), \end{aligned} \tag{14}$$

其中, $u^\sigma_{\rm hh}$, $u^\sigma_{\rm lh}$ 和 $u^\sigma_{\rm so}$ 是价带基函数; $g^\sigma_{m,\rm hh}$, $g^\sigma_{m,\rm lh}$ 和 $g^\sigma_{m,\rm so}$ 是对应于 $u^\sigma_{\rm hh}$, $u^\sigma_{\rm lh}$ 和 $u^\sigma_{\rm so}$ 分量的包络函数, m 是价带子带的序号. 包络函数应满足以下归一化关系:

$$\begin{aligned} &\int_0^L (|g^\sigma_{m,\rm hh}(z,k_t)|^2 + |g^\sigma_{m,\rm lh}(z,k_t)|^2 \\ &+ |g^\sigma_{m,\rm so}(z,k_t)|^2)\,\mathrm{d}z = 1, \end{aligned} \tag{15}$$

$g^\sigma_{m,i}(z,k_t)$ 可通过求解薛定谔方程得到,

$$-\begin{bmatrix} P+Q-V_{\rm h}(z) & R_k \mp \mathrm{i}S_k & \sqrt{2}R_k \pm \dfrac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}S_k \\ R_k \pm \mathrm{i}S_k & P-Q-V_{\rm h}(z) & \sqrt{2}Q \pm \mathrm{i}\sqrt{\dfrac{3}{2}}S_k \\ \sqrt{2}R_k \mp \dfrac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}S_k & \sqrt{2}Q \mp \mathrm{i}\sqrt{\dfrac{3}{2}}S_k & P+\varDelta(z)-V_{\rm h}(z) \end{bmatrix} \begin{pmatrix} g^\sigma_{m,\rm hh}(z,k_t) \\ g^\sigma_{m,\rm lh}(z,k_t) \\ g^\sigma_{m,\rm so}(z,k_t) \end{pmatrix} = E^{\rm v}_{\sigma,m}(k_t) \begin{pmatrix} g^\sigma_{m,\rm hh}(z,k_t) \\ g^\sigma_{m,\rm lh}(z,k_t) \\ g^\sigma_{m,\rm so}(z,k_t) \end{pmatrix}, \tag{16}$$

其中, $E^{\rm v}_{\sigma,m}(k_t)$ 是第 m 个子带的能级, 系数矩阵中的 k_z 需用 $-\mathrm{i}\partial/\partial z$ 代替, 上、下正负号分别与 σ 等于U和L对应.

3 数值方法

本文采用有限差分法求解方程(7)和(16). 沿 z 方向将整个求解区域用 N 个等距格点进行划分, 第1个格点与 $z=0$ 对应, 第 N 个格点与 $z=L_z$ 对应, 相邻格点的间距为 $\Delta z = L_z/(N-1)$. 在第 j 个格点处, 方程(7)的差分离散式为

$$\begin{aligned} &a(j)\phi_n(j-1) + b(j)\phi_n(j) + c(j)\phi_n(j+1) \\ &= E^{\rm c}_n\phi_n(j) \quad (2 \leqslant j \leqslant N-1), \end{aligned} \tag{17}$$

其中,

$$a(j) = -\frac{\hbar^2}{2}\frac{2}{m_{n,z}(j)+m_{n,z}(j-1)}\frac{1}{(\Delta z)^2}, \tag{18a}$$

$$c(j) = -\frac{\hbar^2}{2}\frac{2}{m_{n,z}(j)+m_{n,z}(j+1)}\frac{1}{(\Delta z)^2}, \tag{18b}$$

$$b(j) = -a(j) - c(j) + V_{\rm e}(j) + \delta E_{\rm c}(j). \tag{18c}$$

对于束缚态, ϕ_n 在垒区应是消逝波, 本文取固定边界条件, 即 $\phi_n(1)=\phi_n(N)=0$. (17)式的求解转化为求三对角系数矩阵本征值的问题.

利用如下差分公式[20],

$$\begin{aligned} &A(z)\frac{\partial^2 g}{\partial z^2}\bigg|_{z=z_i} \to \frac{\partial}{\partial z}\left(A(z)\frac{\partial g}{\partial z}\right)\bigg|_{z=z_i} \\ \approx{}& \frac{A(z_{i+1})+A(z_i)}{2(\Delta z)^2}g(z_{i+1}) \\ &- \frac{A(z_{i-1})+2A(z_i)+A(z_{i+1})}{2(\Delta z)^2}g(z_i) \end{aligned}$$

$$+\frac{A(z_i)+A(z_{i-1})}{2(\Delta z)^2}g(z_{i-1}), \tag{19}$$

$$B(z)\frac{\partial g}{\partial z}\bigg|_{z=z_i} \to \frac{1}{2}\left(B(z)\frac{\partial g}{\partial z}+\frac{\partial(Bg)}{\partial z}\right)\bigg|_{z=z_i}$$
$$\approx \frac{B(z_{i+1})+B(z_i)}{4\Delta z}g(z_{i+1})$$
$$-\frac{B(z_i)+B(z_{i-1})}{4\Delta z}g(z_{i-1}), \tag{20}$$

得到方程(16)在j点处的差分离散式为$(2 \leqslant j \leqslant N-1)$

$$\boldsymbol{A}(j)\boldsymbol{G}_{k_t}^{\sigma,m}(j-1)+\boldsymbol{B}(j)\boldsymbol{G}_{k_t}^{\sigma,m}(j)$$
$$+\boldsymbol{C}(j)\boldsymbol{G}_{k_t}^{\sigma,m}(j+1)=\boldsymbol{E}_{\sigma,m}^{\mathrm{v}}\boldsymbol{G}_{k_t}^{\sigma,m}(j), \tag{21}$$

其中, $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{B}$和$\boldsymbol{C}$是3×3的系数矩阵, $\boldsymbol{G}_{k_t}^{\sigma,m}(j)$代表第$m$个子带水平波矢为$k_t$在格点$j$处的包络函数值,

$$\boldsymbol{G}_{k_t}^{\sigma,m}(j)=\begin{pmatrix} g_{m,\mathrm{hh}}^{\sigma}(j,k_t)\\ g_{m,\mathrm{lh}}^{\sigma}(j,k_t)\\ g_{m,\mathrm{so}}^{\sigma}(j,k_t)\end{pmatrix}. \tag{22}$$

受篇幅所限, 这里只给出系数矩阵$\boldsymbol{B}(j)$的形式:

$$\boldsymbol{B}(j)=-\begin{bmatrix} P_k+P_\varepsilon+Q_k+Q_\varepsilon-V_{\mathrm{h}} & R_k\mp \mathrm{i}S_k & \sqrt{2}R_k\pm\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}S_k\\ R_k\pm\mathrm{i}S_k & P_k+P_\varepsilon-Q_k-Q_\varepsilon-V_{\mathrm{h}} & \sqrt{2}(Q_k+Q_\varepsilon)\pm\mathrm{i}\sqrt{\frac{3}{2}}S_k\\ \sqrt{2}R_k\mp\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}S_k & \sqrt{2}(Q_k+Q_\varepsilon)\mp\mathrm{i}\sqrt{\frac{3}{2}}S_k & P_k+P_\varepsilon+\varDelta-V_{\mathrm{h}}\end{bmatrix}_j, \tag{23}$$

式中矩阵的下标j表示各矩阵元与j有关. 各矩阵元的具体差分形式为

$$P_k(j)=\left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right)\left(k_t^2\gamma_1(j)+\frac{\gamma_1(j-1)+2\gamma_1(j)+\gamma_1(j+1)}{2(\Delta z)^2}\right), \tag{24a}$$

$$Q_k(j)=\left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right)\left(k_t^2\gamma_2(j)-2\frac{\gamma_2(j-1)+2\gamma_2(j)+\gamma_2(j+1)}{2(\Delta z)^2}\right), \tag{24b}$$

$$R_k(j)=\left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right)\sqrt{3}k_t^2\left(\frac{\gamma_2(j)+\gamma_3(j)}{2}\right), \tag{24c}$$

$$S_k(j)=0, \tag{24d}$$

$P_\varepsilon(j)$, $Q_\varepsilon(j)$, $V_{\mathrm{h}}(j)$和$\Delta(j)$则取格点j 处的相应值即可. 仍然取固定边界条件, $G_{k_t}^{\sigma,m}(1)=G_{k_t}^{\sigma,m}(N)=0$. 联立方程(21), 求解转化为求块三对角矩阵本征值的问题, 每个矩阵元是一3×3的矩阵.

对于非掺杂量子阱, 阱区的电子浓度和空穴浓度相等, 设都等于n_{QW}. 解得方程(17)和(21)后, 由n_{QW}可确定导带电子的准费米能级F_{c}和价带的准费米能级F_{v},

$$n_{\mathrm{QW}}=\frac{m_{n,t}^{\mathrm{w}}k_{\mathrm{B}}T}{\pi d_{\mathrm{QW}}\hbar^2}\sum_n \ln\left\{1+\exp\left[\frac{F_{\mathrm{c}}-E_n^{\mathrm{c}}(k_t=0)}{k_{\mathrm{B}}T}\right]\right\}, \tag{25}$$

$$n_{\mathrm{QW}}=\frac{\Delta k_t}{\pi d_{\mathrm{QW}}}\sum_m\sum_i\frac{1}{1+\exp\left(\frac{F_{\mathrm{v}}-e_m^{\mathrm{v}}(k_t^i)}{k_{\mathrm{B}}T}\right)}k_t^i, \tag{26}$$

其中, k_t^i是将k_t进行等间距离散化后第i个k_t对应的值, 两个相邻k_t点的间隔为Δk_t, k_{B}是玻尔兹曼常数, T是绝对温度.

导带第n个子带与价带第m个子带间的横电(TE)和横磁(TM)模跃迁动量矩阵元为[20]

$$|M_{\mathrm{TE},nm}^{\sigma}(k_t)|^2=\frac{M_{\mathrm{b}}^2}{4}\left\{\left|\left[\sum_j(g_{m,\mathrm{lh}}^{\sigma}(j,k_t)+\sqrt{2}g_{m,\mathrm{so}}^{\sigma}(j,k_t))^{\dagger}\phi_n(j,k_t)\right]\right|^2\right.$$
$$\left.+3\left|\sum_j g_{m,\mathrm{hh}}^{\sigma}(j,k_t)^{\dagger}\phi_n(j,k_t)\right|^2\right\}, \tag{27}$$

$$|M_{\mathrm{TM},nm}^{\sigma}(k_t)|^2=M_{\mathrm{b}}^2\left[\left|\sum_j\left(g_{m,\mathrm{lh}}^{\sigma}(j,k_t)-\frac{1}{\sqrt{2}}g_{m,\mathrm{so}}^{\sigma}(j,k_t)\right)^{\dagger}\phi_n(j,k_t)\right|^2\right], \tag{28}$$

其中, 上标†表示求复共轭, $M_{\rm b}^2 = m_0 E_{\rm p}/6$, m_0是电子的质量, $E_{\rm p}$是阱区的能量参数, 可由表1中的值线性插值得到.

光增益的数值解为

$$g^{\rm TE}(\hbar\omega) = \frac{q^2\gamma}{n_{\rm r}c\varepsilon_0 m_0^2 \omega d_{\rm QW}} \frac{\Delta k_t}{\pi} \sum_{\sigma={\rm U,L}} \sum_{n,m} \sum_i |M_{{\rm TE},nm}^{\sigma}(k_t^i)|^2 \frac{(f_n^{\rm c}(k_t^i) - f_{\sigma m}^{\rm v}(k_t^i))k_t^i}{(E_{\sigma,nm}^{\rm cv}(k_t^i) - \hbar\omega)^2 + \gamma^2}, \tag{29}$$

$$g^{\rm TM}(\hbar\omega) = \frac{q^2\gamma}{n_{\rm r}c\varepsilon_0 m_0^2 \omega d_{\rm QW}} \frac{\Delta k_t}{\pi} \sum_{\sigma={\rm U,L}} \sum_{n,m} \sum_i |M_{{\rm TM},nm}^{\sigma}(k_t^i)|^2 \frac{(f_n^{\rm c}(k_t^i) - f_{\sigma m}^{\rm v}(k_t^i))k_t^i}{(E_{\sigma,nm}^{\rm cv}(k_t^i) - \hbar\omega)^2 + \gamma^2}, \tag{30}$$

其中, ω是光子频率, q是单位电荷量, γ洛沦兹函数的半宽, $n_{\rm r}$是折射率, c是光速, ε_0是真空介电常数. 由于动量矩阵元与导带电子的自旋无关, 上两式中对η的求和已用简单的乘2做了代替. $f_n^{\rm c}$ 和 $f_{\sigma m}^{\rm v}$ 分别是费米分布函数, $E_{\sigma,nm}^{\rm cv}$ 是相同k_t时导带和价带子带间的能量差:

$$f_n^{\rm c}(k_t^i) = \frac{1}{1+\exp\left(\dfrac{E_n^{\rm c}(k_t^i) - F_{\rm c}}{k_{\rm B}T}\right)}, \tag{31a}$$

$$f_{\sigma m}^{\rm v}(k_t^i) = \frac{1}{1+\exp\left(\dfrac{E_{\sigma,m}^{\rm v}(k_t^i) - F_{\rm v}}{k_{\rm B}T}\right)}, \tag{31b}$$

$$E_{\sigma,nm}^{\rm cv}(k_t^i) = E_n^{\rm c}(k_t^i) - E_{\sigma,m}^{\rm v}(k_t^i). \tag{32}$$

自发辐射谱的数值解为

$$\begin{aligned} & r_{\rm sp}(\hbar\omega) \\ = & \frac{q^2 n_{\rm r}\omega\Delta k_t \gamma}{\pi^3\hbar c^3 \varepsilon_0 m_0^2 L_z} \sum_{\sigma={\rm U,L}} \sum_{n,m} \sum_i |M_{{\rm sp},nm}^{\sigma}(k_t^i)|^2 \\ & \times \frac{f_n^{\rm c}(k_t^i)(1 - f_{\sigma m}^{\rm v}(k_t^i))k_t^i}{(E_{\sigma,nm}^{\rm cv}(k_t^i) - \hbar\omega)^2 + \gamma^2}, \end{aligned} \tag{33}$$

其中,

$$\begin{aligned} & |M_{{\rm sp},nm}^{\sigma}(k_t^i)|^2 \\ = & \frac{1}{3}(2|M_{{\rm TE},nm}^{\sigma}(k_t^i)|^2 + |M_{{\rm TM},nm}^{\sigma}(k_t^i)|^2). \end{aligned} \tag{34}$$

对(33)式在整个光能量范围内积分, 可得到自发辐射率$R_{\rm sp}$, 即

$$\begin{aligned} R_{\rm sp} = & \int {\rm d}\,(\hbar\omega)\, r_{\rm sp}\,(\hbar\omega) \\ \approx & \Delta\,(\hbar\omega) \sum_j r_{\rm sp}\,(\hbar\omega_j)\,, \end{aligned} \tag{35}$$

其中$\Delta(\hbar\omega)$是$\hbar\omega_j$的间隔.

4 模拟结果与讨论

表1列出了二元系材料GaAs, GaP和AlAs在300 K时的材料参数[21,22], 三元系材料GaAsP和AlGaAs的参数可由相应二元系材料线性插值得到. $\rm GaAs_{1-\mathit{x}}P_{\mathit{x}}$和$\rm Al_{\mathit{y}}Ga_{1-\mathit{y}}As$的带隙可由下式插值[21]:

$$\begin{aligned} & E_{\rm g}\,({\rm GaAs}_{1-x}{\rm P}_x) \\ = & (1-x)\,E_{\rm g}\,({\rm GaAs}) + xE_{\rm g}\,({\rm GaP}) - x\,(1-x)\,C, \end{aligned} \tag{36a}$$

$$\begin{aligned} & E_{\rm g}\,({\rm Al}_y{\rm Ga}_{1-y}{\rm As}) \\ = & (1-y)\,E_{\rm g}\,({\rm GaAs}) + yE_{\rm g}\,({\rm AlAs}) - y\,(1-y)\,C, \end{aligned} \tag{36b}$$

其中, $E_{\rm g}$是材料的带隙, $E_{\rm g}$后面括号里的内容是对应的体材料, C是弯曲参数. 相应于$\varGamma$带隙, $\rm GaAs_{1-\mathit{x}}P_{\mathit{x}}$的$C$等取0.19 eV, $\rm Al_{\mathit{y}}Ga_{1-\mathit{y}}As$的$C = -0.127 + 1.310y$.

表1 在300 K时的材料参数 ($1\ {\rm dyn.cm^{-2}} = 0.1$ Pa)
Table 1. Material parameters at 300 K.

参数	GaAs	GaP	AlAs
a_0/Å	5.6533	5.4495	5.6611
$E_{\rm g}^{\varGamma}$/eV	1.4225	2.7770	3.0990
$\varDelta$/eV	0.34	0.08	0.28
γ_1	6.85	4.05	3.76
γ_2	2.1	0.49	0.82
γ_3	2.9	1.25	1.42
$C_{11}/10^{11}$ dyn·cm^{-2}	11.88	14.05	12.5
$C_{12}/10^{11}$ dyn·cm^{-2}	5.38	6.20	5.34
$a_{\rm c}$/eV	−7.17	−7.14	−5.64
$a_{\rm v}$/eV	1.16	1.7	2.47
b/eV	−1.7	−1.6	−2.3
$E_{\rm p}$/eV	28.8	31.4	21.1
m_n^*/m_0	0.071	0.13	0.15

具体计算过程中, 将$\rm Al_{\mathit{y}}Ga_{1-\mathit{y}}As$垒层的Al组分$y$固定为0.4, 垒层的厚度固定16 nm, 由文

献 [23] 的模型固体理论计算 $\Delta E_{\mathrm{c}}/\Delta E_{\mathrm{v}}$, 差分步长 $\Delta z = 0.1$ nm.

将量子阱用作LD的有源区时, 激射波长主要决定于导带第一子带 c_1 到价带第一子带的跃迁能量. 图2给出了 $k_t = 0$, 且 $E_1^{\mathrm{c}} - E_1^{\mathrm{v}}$ 固定为808 nm (Nd:YAG的抽运源) 和793 nm (掺铥光纤激光器的抽运源) 跃迁波长时, 阱宽 d_{QW} 和P组分 x 间的匹配关系, 后文中分别称这种匹配关系的量子阱为793 nm QW和808 nm QW. 在 x 固定的情况下, 随着 d_{QW} 的增加, 由于 E_1^{c} 向导带底移动, E_1^{v} 向价带顶移动, 导致 $E_1^{\mathrm{c}} - E_1^{\mathrm{v}}$ 减小, 为了在 d_{QW} 增加时保证 $E_1^{\mathrm{c}} - E_1^{\mathrm{v}}$ 固定不变, 需要通过增加阱中P的组分 x 来增加带隙 E_{g} 以进行补偿. 即在跃迁波长固定的情况下, 宽的阱宽与大的张应变量对应, 这一点与GaAs衬底上的压应变InGaAs量子阱正好相反. 在图2中同时给出了由力平衡模型 [24] 求得的 $\mathrm{GaAs}_{1-x}\mathrm{P}_x$ 的临界层厚度与组分 x 的关系. 由于在相同阱宽下, 793 nm QW的 x 比808 nm QW的高, 793 nm QW的阱宽极限应小于19 nm, 而808 nm QW在20 nm以下的阱宽都满足临界厚度的要求.

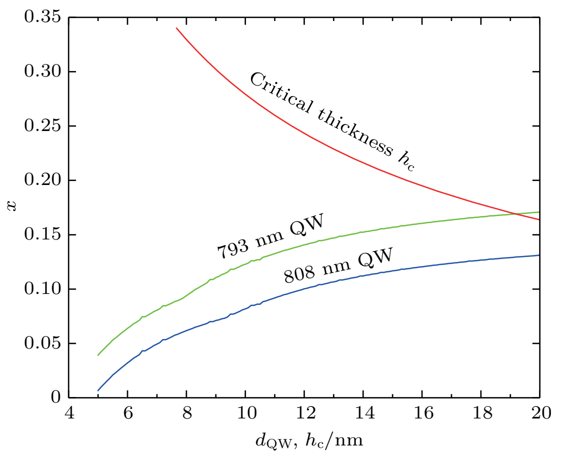

图2 近800 nm QW的阱宽和组分间的关系

Fig. 2. Relationship between well width and P composition x for 800 nm QW.

图3给出的是 $k_t = 0$ 时, 808 nm QW的 E_1^{c} 与价带轻、重空穴第一、二子能级间的能量差, 注意图中纵坐标的方向是向下为正. 当阱宽为9.3 nm时, 轻空穴第一子能级 E_1^{lh} 和重空穴第一子能级 E_1^{hh} 重合; 当阱宽小于9.3 nm时, 靠近价带顶的是 E_1^{hh}, 当阱宽大于9.3 nm时, 靠近价带顶的是 E_1^{lh}. 另外, 当阱宽大于9.3 nm时, 随阱宽的增加, 重空穴的第一、二子能级逐渐远离价带顶, 而轻空穴的第二子级 E_2^{lh} 却逐渐靠近价带顶. 相比而言, 对于GaAs衬底上的压应变InGaAs量子阱, 不论阱宽如何变化, 永远是重空穴第一子带 hh_1 最靠近价带顶. 当 $d_{\mathrm{QW}} = 16.3$ nm时, E_2^{lh} 与 E_2^{hh} 重合, 当 d_{QW} 进一步增加到等于18.6 nm时, E_2^{lh} 甚至与 E_1^{hh} 重合, 而当 d_{QW} 大于18.6 nm时, 原本远离价带顶的 E_2^{lh} 比 E_1^{hh} 更靠近价带顶.

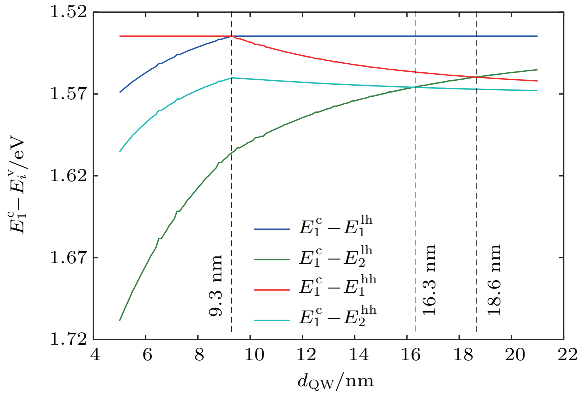

图3 808 nm QW导带第一子带到价带第一、二子带的能量差

Fig. 3. Transition energy from the conduction first subband to the valence first and second band for 808 nm QW.

图4给出了 d_{QW} 分别为6, 9.3, 14, 16.3, 18.6和20 nm时, 808 nm QW价带子带的能量色散关系, 图中能量零点取为无应变体材料的价带顶. 众所周知, 张应变体材料的轻、重空穴带在带顶处的简并消除, 且轻空穴带位于重空穴带之上, 因此对于 $d_{\mathrm{QW}} = 20$ nm趋向于体材料的宽阱情形, 轻空穴子带 lh_1 和 lh_2 都位于重空穴子带 hh_1 之上, 且 $k_t = 0$ 时 lh_1 带的能量为正, 这是由于张应变引起的带隙收缩和轻空穴带的上移造成的. 随着 d_{QW} 的减小, 量子尺寸效应逐渐增强, 子带的数目逐渐减少. 对于808 nm QW, d_{QW} 的减小需伴随阱中P组分 x 的同时减少, 因此张应变作用逐渐减弱, 808 nm QW随 d_{QW} 的减小逐步向无应变量子阱过渡, 体现为当 $d_{\mathrm{QW}} = 6$ nm, $x = 0.03204$ 时, 不但 hh_1 子带位于 lh_1 和 lh_2 的子带之上, lh_2 子带甚至比 hh_3 子带还要低. 从图4可见, 当 $k_t = 0$ 时, 与图3相对应, $d_{\mathrm{QW}} = 9.3$ nm时, $E_1^{\mathrm{lh}} = E_1^{\mathrm{hh}}$; $d_{\mathrm{QW}} = 16.3$ nm 时, $E_2^{\mathrm{lh}} = E_2^{\mathrm{hh}}$; $d_{\mathrm{QW}} = 18.6$ nm时, $E_2^{\mathrm{lh}} = E_1^{\mathrm{hh}}$.

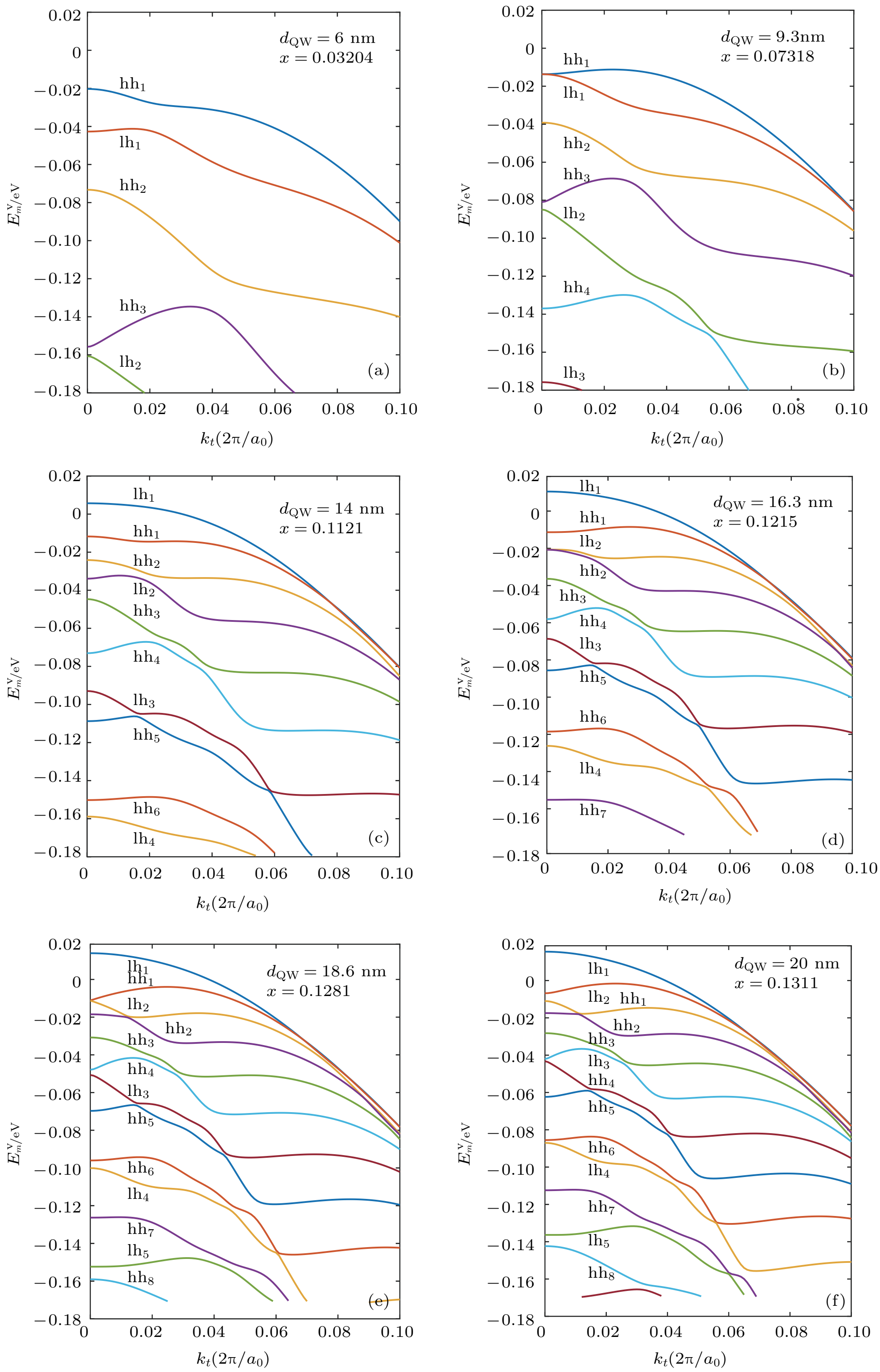

图 4　不同阱宽时 808 nm QW 的价带子带结构

Fig. 4. Valence subband structure of the 808 nm QW for different well widths.

图 4 中标注的各子带是轻空穴带还是重空穴带以及其子带序号是根据 $k_t = 0$ 时的波函数确定的. 图 5 (a)—(d) 分别给出了量子阱厚度为 14 nm, 且 $k_t = 0$ 时前 4 个价带子带的包络函数, 波函数用 $\sqrt{\Delta z}$ 进行了归一化, 成为无量纲量. 由 $|g_{\rm hh}|^2$ 和 $|g_{\rm lh}|^2$ 的相对大小以及波函数的波节数, 可以确定

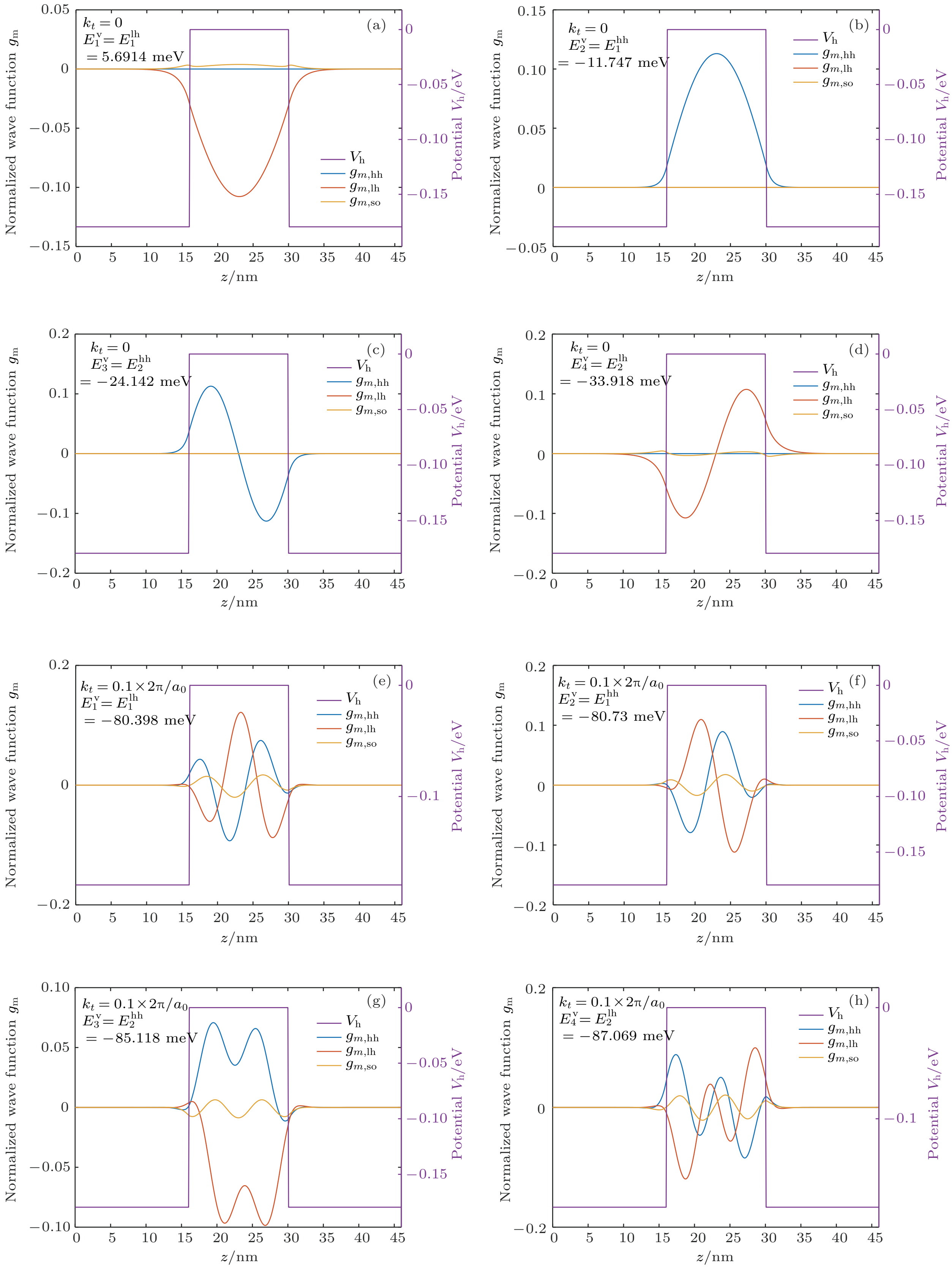

图 5 $d_{\rm QW} = 14$ nm 时 808 nm QW 前 4 个价带子带的波函数 (a)—(d) $k_t = 0$; (e)—(h) $k_t = 0.1 \times 2\pi/a_0$

Fig. 5. The envelope function of the top four valence subband for 808 nm QW with $d_{\rm QW} = 14$ nm: (a)–(d) Corresponding to $k_t = 0$; (e)–(h) corresponding to $k_t = 0.1 \times 2\pi/a_0$.

图5(a)和图5(d)分别与lh_1和lh_2对应, 图5(b)和图5(c)分别与hh_1和hh_2对应. 从图中同时看到, 当$k_t = 0$时, 轻空穴子带的波函数以g_{lh}分量为主, 兼有少量的g_{so}耦合分量, 且g_{hh}分量为零, 而重空穴子带的波函数中都是g_{hh}分量, g_{lh}和g_{so}分量都为零. 另外, lh和hh的第一子带波函数满足偶对称, lh和hh的第二子带波函数满足奇对称. 图5(e)—(h)是$k_t = 0.1 \times 2\pi/a_0$时, 14 nm阱宽808 nm QW前4个价带子带的波函数. 显见, 当k_t远离布里渊区中心时, 不但各子带波函数的对称性受到破坏, 且hh, lh以及so带间的耦合变得加强, g_{so}分量在各带中的比例不可忽略.

图6给出了14 nm阱宽时808 nm QW导带第1子带c_1到价带前4个子带的跃迁动量矩阵元, 其中动量矩阵元的值用体材料的$|M_b|^2$进行了归一化(考虑导带有两个自旋方向后应给图中的值乘以2). 在$k_t = 0$处, c_1到lh_1的TE和TM动量矩阵元分别为$0.22|M_b|^2$和$1.05|M_b|^2$, c_1到hh_1的TE和TM动量矩阵元分别为$0.75|M_b|^2$和0, 该结果与文献[20]一致. 因此, c_1到lh_1的跃迁以TM模为主, 且有更高的跃迁强度; c_1到hh_1的跃迁以TE模为主, 且有更高的偏振选择比. 在$k_t = 0$处, c_1到lh_2和hh_2的跃迁是严格禁止的, 体现为跃迁动量矩阵元为零. 当k_t远离布里渊区中心时, 在c_1—lh_1的TM模和c_1—hh_1的TE模的跃迁强度降低的同时, 由于波函数对称性的破坏, 原本在$k_t = 0$时禁止的带间跃迁不再被满足.

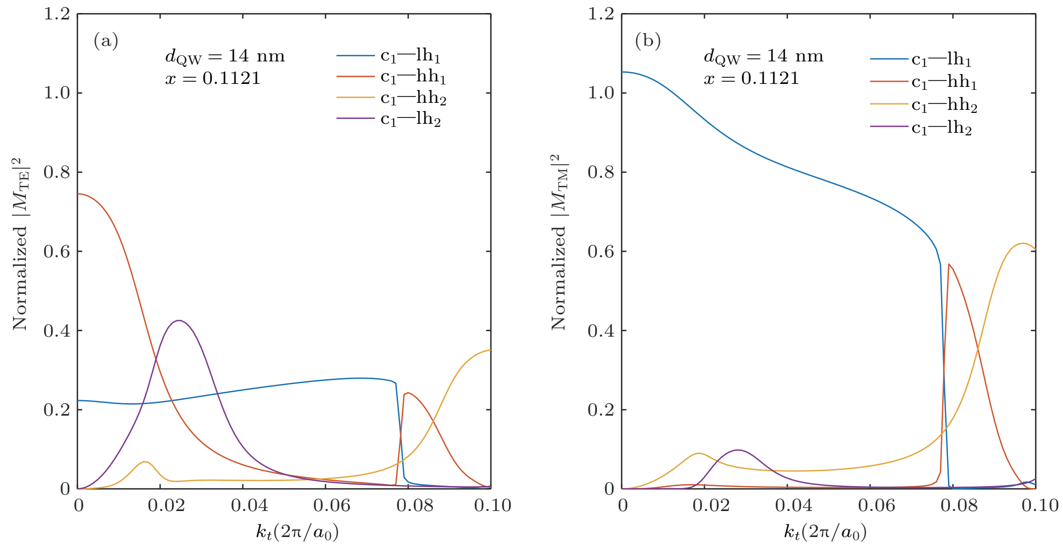

图6　$d_{QW} = 14$ nm时 808 nm QW导带第1子带到价带前4个子带的跃迁动量矩阵元　(a) TE模; (b) TM模

Fig. 6. The momentum-matrix elements from c1 to the top four valence subband for 808 nm QW with $d_{QW} = 14$ nm: (a) TE mode; (b) TM mode.

考虑将$Al_{0.4}Ga_{0.6}As/GaAs_{1-x}P_x/Al_{0.4}Ga_{0.6}As$量子阱用作808 nm LD的有源区, 光限制层为$Al_{0.9}Ga_{0.1}As$材料, 波导层的总厚度为1.4 μm. 在5—20 nm的阱宽范围内, 根据传输矩阵法模拟得到基横模的有源区光限制因子与量子阱的厚度d_{QW}间近似满足:

$$\Gamma = 0.008077 + 0.0016395(d_{QW} - 6), \tag{37}$$

其中, d_{QW}的单位是nm. LD的振幅阈值条件为

$$\Gamma g_{th} = \alpha_i + \frac{1}{L}\ln\left(\frac{1}{r_1 r_2}\right), \tag{38}$$

其中, g_{th}是有源区的阈值增益, α_i是腔损耗, L是腔长, r_1和r_2分别是两个腔面的反射系数.

在满足图2的阱宽-组分关系下, 图7分别给出了腔长为1.5 mm(蓝实线)和3 mm(黑实线)时, 808 nm LD的阈值增益与阱宽的关系, 其中$\alpha_i = 1.1\ \mathrm{cm}^{-1}$, $r_1 r_2 = 30\%$. 由于有源区的光限制因子随阱宽的增加而增大, 因此阈值增益随阱宽的增加而减小. 在图中同时给出了阈值条件下TE模和TM模的峰值增益, 对于$L = 1.5$ mm (3 mm)情形, 当$d_{QW} = 7.8$ nm (8.2 nm)时, TE模和TM模的峰值增益相等; 当$d_{QW} < 7.8$ nm (8.2 nm)时, TE模的峰值增益比TM模的高, 激射模以TE模为主; 而当$d_{QW} > 7.8$ nm (8.2 nm)时, TM模的峰值增益比TE模的高, 激射模以TM模

为主. 另外, TE模和TM模的峰值增益相等时对应的7.8 nm (8.2 nm)阱宽, 比图3中$E_1^{hh} = E_1^{lh}$时的9.3 nm阱宽要小, 这是由于c_1到lh_1的TM模的跃迁动量矩阵元比c_1到hh_1的TE 模的大造成的. 相应于图7的阈值条件, 图8给出了腔长为1.5 mm时的阈值载流子浓度n_{th}与阱宽的关系, 随阱宽的增加, 由于g_{th}降低, 相应的n_{th}也减少. 图中同时还给出了在阈值条件下导带第一子带上的载流子浓度n_1和价带第一子带上的载流子浓度p_1, 随阱宽的增加, 由于各子带间的能量差随阱宽减小而降低, 载流子在高能量子带上的填充不可忽略, 导致第一子带上的载流子数目与n_{th}的比率随阱宽的增加而减小.

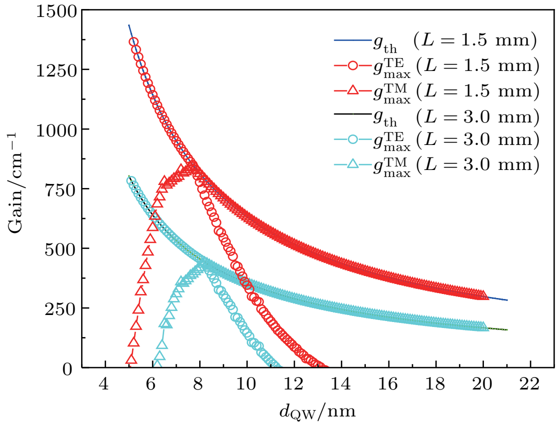

图7 808 nm LD阈值增益与阱宽的关系

Fig. 7. Relationship between threshold gain and the well width for 808 nm LD.

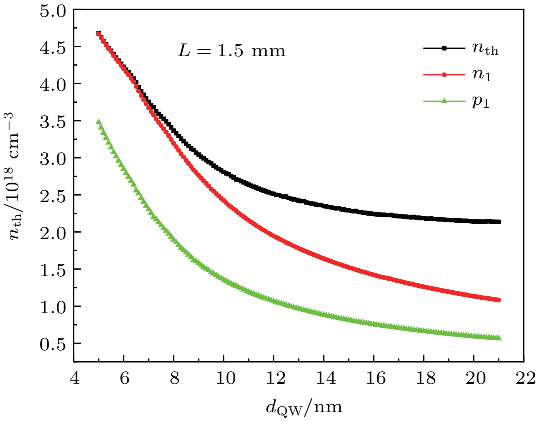

图8 808 nm LD阈值载流子浓度与阱宽的关系

Fig. 8. Relationship between threshold carrier concentration and the well width for 808 nm LD.

相应于图7的阈值条件, 图9给出了腔长为1.5 mm且阱宽分别为5.5, 7.8和12 nm时的阈值增益谱. 尽管$d_{QW} = 7.8$ nm时TE模和TM模的峰值增益相等, 二者对应的峰值波长并不相等. 根据图3, 此时hh_1带比lh_1带更靠近价带顶, 由于TM模(c_1—lh_1)强的动量矩阵元对lh_1带上低载流子浓度的补偿作用, TM模的峰值波长相对于TE模(c_1—hh_1)的峰值波长蓝移. 当$d_{QW} = 5.5$ nm时, hh_1带更靠近价带顶, TE模增益比TM模增益大, 而当$d_{QW} = 12$ nm时, lh_1带更靠近价带顶, TM模增益比TE模的大.

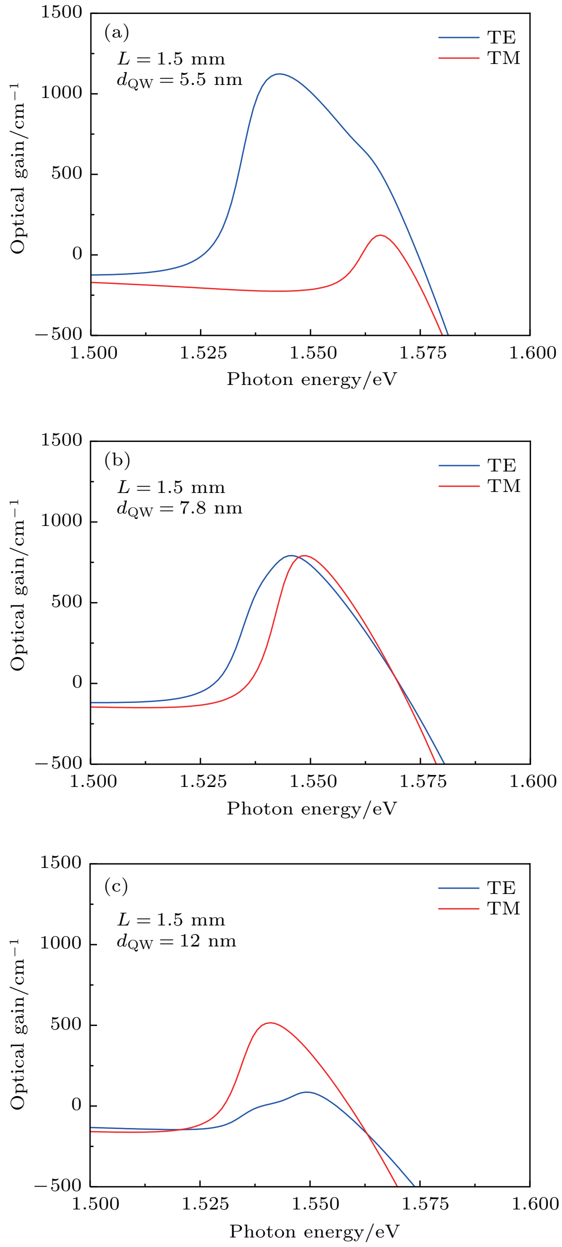

图9 不同阱宽808 nm LD的阈值增益谱

Fig. 9. Threshold optical gain of 808 nm LD with different well widths.

图10是在阈值处, 1.5 mm腔长808 nm LD的复合率R与阱宽的关系, R包括自发辐射率R_{sp}

和俄歇复合率 R_{Aug} 两部分, 其中 $R_{\mathrm{Aug}} = C_{\mathrm{a}}n_{\mathrm{th}}^3$, $C_{\mathrm{a}} = 6 \times 10^{-30}$ cm^6/s 是俄歇复合系数. 随阱宽的增加, 由于 n_{th} 降低 (见图8), 使得 R_{sp} 和 R_{Aug} 都减小. 图10内插图是腔长为1.5 mm, 阱宽分别为5.5, 7.8和12 nm时, 在阈值条件下LD的自发辐射谱.

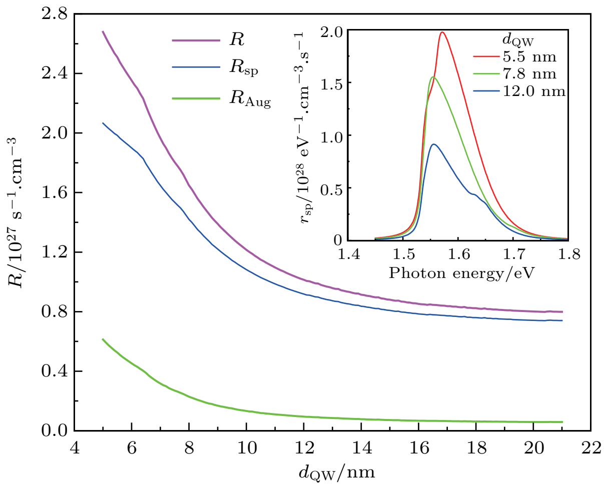

图10 1.5 mm腔长808 nm LD阈值条件下的复合率与阱宽的关系

Fig. 10. Relationship between recombination rate and well width under threshold condition for 808 nm LD with $L = 1.5$ mm.

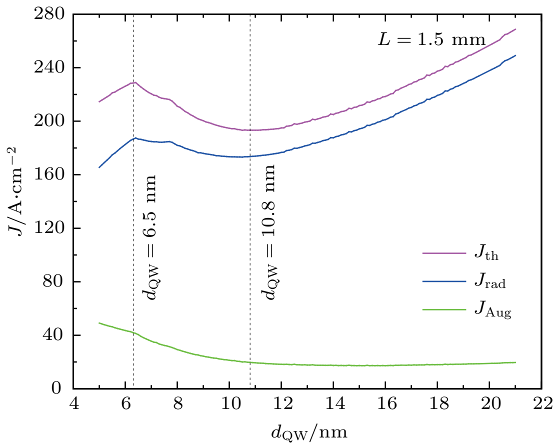

图11 1.5 mm腔长808 nm LD阈值电流密度与阱宽的关系

Fig. 11. Relationship between threshold current density and well width for 808 nm LD with $L = 1.5$ mm.

根据阈值载流子浓度 n_{th} 求得复合率后, 可进一步求得阈值电流密度,

$$J_{\mathrm{th}} = J_{\mathrm{rad}} + J_{\mathrm{Aug}} = qd_{\mathrm{QW}}R_{\mathrm{sp}} + qd_{\mathrm{QW}}R_{\mathrm{Aug}}, \tag{39}$$

其中, J_{rad} 和 J_{Aug} 分别是阈值处的自发辐射和俄歇复合电流密度分量. 图11是1.5 mm腔长808 nm LD阈值电流密度与阱宽的关系. 在 $d_{\mathrm{QW}} = 10.8$ nm处有一 J_{th} 的极小值. $d_{\mathrm{QW}} > 10.8$ nm时, 随 d_{QW} 的增加, 尽管复合率 R 减小, 但 d_{QW} 和 R 相乘的结果仍然是增加的, 使得 J_{th} 随 d_{QW} 的增加而增大, 这是由于载流子填充高能量子带的概率增大造成的. 而 $d_{\mathrm{QW}} < 10.8$ nm时, 随 d_{QW} 的减小, R 快速增大 (图10), d_{QW} 和 R 相乘的结果是增加的, 体现为 J_{th} 的增加, 这是由于窄阱宽的低光限制因子造成的. $d_{\mathrm{QW}} < 6.5$ nm时窄阱宽作用虽然可以使 J_{th} 降低, 但 J_{Aug} 的成分也在增加, 且过高的阈值载流子浓度 (图8) 会增加载流子从阱区向垒区的逃逸概率. 因此, 从阈值电流密度角度考虑, $d_{\mathrm{QW}} = 10.8$ nm (阱区相应的P组分 x 为0.09) 是最优值.

5 结 论

对于外延生长在GaAs衬底上的张应变 $\mathrm{GaAs}_{1-x}\mathrm{P}_x$ 量子阱, 需通过组分 x 和阱宽的同时增加或减小以实现LD激射波长不变, 大阱宽时最靠近价带顶的是 lh_1 带, 小阱宽时最靠近价带顶的是 hh_1 带. 将张应变 $\mathrm{GaAs}_{1-x}\mathrm{P}_x$ 量子阱用作近800 nm LD的有源区时, 大的阱宽有利于TM模激射, 小的阱宽有利于TE模激射. 对于波长固定为近800 nm的LD, 存在一最佳的阱宽-阱组分组合, 可使阈值电流密度最小, 小阱宽时过低的有源区光限制因子使阈值电流密度增大, 而大阱宽时则是载流子对高能量子带上的填充导致阈值电流密度升高. 对于具体的 $\mathrm{GaAs}_{1-x}\mathrm{P}_x$ 量子阱LD, 应根据器件的结构参数 (如腔长和光限因子等) 和内部参数 (如内损耗和腔面反射率等), 对量子阱的结构参数进行优化设计.

参考文献

[1] Ronen D, Yuri B, Shalom C, Genady K, Moshe L, Yaki O, Ophir P, Dan Y, Yoram K 2011 *Proc. SPIE* **8039** 80390E

[2] Wang L J, Ning Y Q, Qin L, Tong C Z, Chen Y Y 2015 *Chin. J. Lumin.* **36** 1 (in Chinese) [王立军, 宁永强, 秦莉, 佟存柱, 陈泳屹 2015 发光学报 **36** 1]

[3] Jiang X M, Zhong H Q, Yang H, Zhou Y, Liu Z M, Zhao C H, Yan J S, Ye B G, Su C K, Wu X L, Hou Y Q, Jiang W L, Liu J X, Wang Z, Lin J, Long J, Guo Z Y 2017 *Infra. Laser Eng.* **46** 0206001 (in Chinese) [姜雪梅, 钟会清, 杨辉, 周艳, 刘智明, 赵仓焕, 晏锦胜, 叶丙刚, 苏成康,

吴秀丽, 侯雨晴, 姜万玲, 刘键雄, 王振, 林锦, 龙佳, 郭周义 2017 红外与激光工程 **46** 0206001]

[4] Degtyareva N S, Kondakov S A, Mikayelyan G T, Gorlachuk P V, Ladugin M A, Marmalyuk A A, Ryaboshtan Y L, Yarotskaya I V 2013 *Quantum Electron.* **43** 509

[5] Fan Z W, Qiu J S, Tang X X, Bai Z A, Kang Z J, Ge W Q, Wang H C, Liu H, Liu Y L 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 054205 (in Chinese) [樊仲维, 邱基斯, 唐熊忻, 白振岙, 康治军, 葛文琦, 王昊成, 刘昊, 刘悦亮 2017 物理学报 **66** 054205]

[6] Liu J, Liu C, Shi H X, Wang P 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 194208 (in Chinese) [刘江, 刘晨, 师红星, 王璞 2016 物理学报 **65** 194208]

[7] Liu J, Liu C, Shi H X, Wang P 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 194209 (in Chinese) [刘江, 刘晨, 师红星, 王璞 2016 物理学报 **65** 194209]

[8] Wang X F, Zhang J H, Gao Z Y, Xia G Q, Wu Z M 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 114209 (in Chinese) [王小发, 张俊红, 高子叶, 夏光琼, 吴正茂 2017 物理学报 **66** 114209]

[9] Petroff P, Hartman R L 1973 *Appl. Phys. Lett.* **23** 469

[10] Li J J, Han J, Deng J, Zou D S, Shen G D 2006 *Chin. J. Laser* **33** 1159 (in Chinese) [李建军, 韩军, 邓军, 邹德恕, 沈光地 2006 中国激光 **33** 1159]

[11] Wang Z F, Yang G W, Wu J Y, Song K C, Li X S, Song Y F 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 164203 (in Chinese) [王贞福, 杨国文, 吴建耀, 宋克昌, 李秀山, 宋云菲 2016 物理学报 **65** 164203]

[12] Botez D 1999 *Proc. SPIE* **3628** 1

[13] Klehr A, Wünsche H J, Liero A, Prziwarka T, Erbert G, Wenzel H, Knigge A 2017 *Semicond. Sci. Technol.* **32** 045016

[14] Crump P, Wenzel H, Erbert G, Ressel P, Zorn M, Bugge F, Einfeldt S, Staske R, Zeimer U, Pietrzak A, Tränkle G 2008 *IEEE Photon. Technol. Lett.* **20** 1378

[15] Paschke K, Einfeldt S, Fiebig C, Ginolas A, Häusler K, Ressel P, Sumpf B, Erbert G 2007 *Proc. SPIE* **6456** 64560H

[16] Li P X, Jiang K, Zhang X, Tang Q M, Xia W, Li S Q, Ren Z X, Xu X G 2013 *Proc. SPIE* **8605** 860510

[17] Wang Y, Yang Y, Qin L, Wang C, Yao D, Liu Y, Wang L J 2008 *Proc. SPIE* **7135** 71350N

[18] Häusler K, Sumpf B, Erbert G, Tränkle G 2007 *Conference on Lasers and Electro-Optics-Pacific Rim* Seoul, Republic of Korea, August 26–31, 2007 p10020732

[19] Wenzel H, Erbert G, Bugge F, Knauer A, Maege J, Sebastian J, Staske R, Vogel K, Tränkle G 2000 *Proc. SPIE* **3947** 32

[20] Chang C S, Chuang S L 1995 *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **1** 218

[21] Vurgaftman I, Meyer J R, Ram-Mohan L R 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 5815

[22] Chuang S L 1991 *Phys. Rev. B* **43** 9649

[23] Chris G, van de Walle 1989 *Phys. Rev. B* **39** 1871

[24] Matthews J W, Blakeslee A E 1974 *J. Cryst. Growth* **27** 118

Design of active region for GaAsP/AlGaAs tensile strain quantum well laser diodes near 800 nm wavelength*

Li Jian-Jun†

(Key Laboratory of Opto-electronics Technology (Beijing University of Technology), Ministry of Education, Beijing 100124, China)

(Received 11 August 2017; revised manuscript received 24 December 2017)

Abstract

As an active region, the tensile strain $GaAs_{1-x}P_x$ quantum well plays an important role in the high power semiconductor laser diode with a wavelength of about 800 nm. Accompanied with the improved stability due to the Al-free active region, the $GaAs_{1-x}P_x$ quantum well laser also shows a high level of catastrophic optical mirror damage because of the non-absorbing window at the facet, which is formed automatically by the relaxation of the tensile strain $GaAs_{1-x}P_x$ material. On the other side, the $GaAs_{1-x}P_x$ quantum well laser can provide a transverse magnetic (TM) polarized light source which is important for many solid state laser systems. However, the energy band structure of the tensile strain $GaAs_{1-x}P_x$ quantum well is more complicated than that of the compressed or lattice matched quantum well. Although the light hole band is on the top of the heavy hole band for the bulk tensile strain $GaAs_{1-x}P_x$ material, the situation may be different from the tensile strain $GaAs_{1-x}P_x$ quantum well, in which the first light hole subband lh_1 can be either on the top of the first heavy hole subband hh_1 or reversed, that will cause the laser to generate either TM or transverse electric (TE) polarized light according to the well structure. So it is meaningful to optimize the tensile strain $GaAs_{1-x}P_x$ quantum well structure based on the analysis of the energy band structure. Firstly, according to the 6×6 Luttinger-Kohn theory, the energy band structure of the tensile strain $GaAs_{1-x}P_x$ quantum well is calculated by the finite difference method. The relationship between the interband transition energy and the well structure parameters is established. It is found that the well composition x and the well width should increase simultaneously, in order to fix the first subband transition wavelength at about 800 nm. Special attention is paid to the 808 nm quantum well, the valence structures of different well widths are calculated, the detailed analysis of the envelope function shows that the top valence subband is lh_1 for wider well width, while it is changed to hh_1 for narrower well width. Meanwhile, both the TE and the TM momentum matrix element are calculated as a function of the transverse wave vector for the subband transition from c_1 to lh_1, lh_2, hh_1 and hh_2, respectively. Further, the threshold optical gains of different well widths are simulated for 808 nm laser diode with the tensile strain $GaAs_{1-x}P_x$ quantum well as an active region, the wider well width benefits the TM mode, while the narrower one is favor of TE mode. Finally, according to the threshold carrier density, the relationship between the threshold current density and the well width is analyzed for 808 nm laser diode by considering both the spontaneous and the Auger recombination, an optimum combination of the well width and the well composition exists. For wider well width, the threshold current density will be higher because of the high energy subband carrier filling effect. For narrower well width, the decrease of the optical confinement factor will lead to the increase of threshold current density.

Keywords: quantum well, energy band structure, tensile strain

PACS: 78.67.De, 85.60.Bt, 85.35.Be, 73.21.Fg **DOI:** 10.7498/aps.67.20171816

* Project supported by the Development Foundation for Optoelectronics Technology Lab., Ministry of Education, China (Grant No. PXM2017_014204_500034) and the Scientific Research Fund Project of Municipal Education Commission of Beijing, China (Grant No. PXM2016_014204_500026).

† Corresponding author. E-mail: lijianjun@bjut.edu.cn