

PbTe/CdTe 量子点的光学增益^{*}

徐天宁 吴惠桢[†] 斯剑霄

(浙江大学物理系 杭州 310027)

(2007 年 7 月 12 日收到, 2007 年 9 月 12 日收到修改稿)

PbTe/CdTe 量子点是一类新型异系低维结构材料, 实验发现具有强的室温中红外光致发光现象. 为研究这一材料体系的发光特性, 建立了理论模型, 计算了 PbTe/CdTe 量子点的光学跃迁和增益. 模型基于 $k \cdot p$ 包络波函数方法并考虑了 PbTe 能带结构的各向异性. 分析了量子点光学增益与量子点尺寸、注入载流子浓度的关系. 结果表明, 当注入载流子浓度在 $(0.3-3) \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 范围时, 尺寸为 15—20 nm 的量子点可以产生大于 5000 cm^{-1} 的光学增益. 增益峰位于 400 meV (3.1 μm) 附近. 量子点尺寸的增大使得增益峰强减小, 而量子点尺寸的减小又导致产生光学增益需要更高的注入载流子浓度. 优化的 PbTe 量子点尺寸为 15—20 nm.

关键词: PbTe/CdTe 量子点, 光学增益, 铅盐矿半导体

PACC: 7865P, 7320D, 7850G

1. 引言

半导体量子点结构由于具有类原子的电子能态特性和在新型光电器件方面的潜在应用, 已成为人们关注的一个热点^[1,2]. 铅盐矿半导体 (PbS, PbSe 和 PbTe) 具有许多独特的物理性质, 如对称的能带结构、强烈依赖于温度的窄带隙、重空穴带的缺失等^[3]. 对称的能带结构可以对低维结构中的电子和空穴同时进行有效的限制, 简并重空穴带的缺失降低了非辐射俄歇复合率 (与 III-V 族和 II-VI 族半导体能隙相近的材料相比, 俄歇复合率可以减少一个数量级以上^[4]). 而且, 铅盐矿半导体量子点的电子和空穴具有相对较大的玻尔半径, 能够在较大尺寸下获得强的量子限制效应^[5]. 根据电子和空穴的玻尔半径计算公式

$$a_{e,h} = \frac{\epsilon \hbar^2}{m_{e,h} e^2},$$

计算得到电子和空穴在 PbSe 和 PbTe 中的玻尔半径分别近似为 23 和 70 nm. 这里 ϵ 为介电常数, $m_{e,h}$ 为电子和空穴的质量. 这比 II-VI 族半导体 (如 CdSe) 中的电子和空穴的玻尔半径 ($a_e \approx 3 \text{ nm}$, $a_h \approx 1 \text{ nm}$) 要大得多^[6]. 这些特性使得铅盐矿半导体量子点在新

型中红外激光器和探测器制造方面有着重要的应用.

铅盐矿半导体量子点通常是由分子束外延技术和化学合成的方法制备得到^[5,7-9], 但这些量子点结构大多生长在电绝缘的 BaF_2 衬底上或嵌入在 SiO_2 中, 给进一步的光电器件研制带来限制. 就实际的光电器件应用而言, 最好能将量子点制备在半导体衬底上. CdTe 属于 II-VI 族半导体, 晶体具有闪锌矿结构, 晶格常数与 PbTe 晶体很接近. 最近, Heiss 等^[10] 通过对 PbTe/CdTe 单量子阱异质结在不同温度下进行退火处理, 获得了 PbTe 量子点. 这种嵌入在 CdTe 中的 PbTe 量子点展现了强的室温中红外光致发光现象, 使其在研制铅盐矿半导体红外发光器件方面具有潜在的应用价值. 然而, 到目前为止作者尚未见有关 PbTe/CdTe 量子点异质体系的光学跃迁和光增益的理论研究报道, 因而对该量子点异质体系的光学性质还缺乏了解, 这促使我们开展了这方面的研究工作.

铅盐矿半导体具有窄的直接带隙, 能带极值位于布里渊区 4 个等价的 L 点处, 等能面为扁长的旋转椭球面, 椭球长轴沿 111 方向, 椭球的长短轴分别由纵向和横向有效质量 (m_l^* 和 m_t^*) 表征. 铅盐矿半导体这些本征特性使其量子点的光学跃迁行为

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 10434090) 和教育部博士点基金 (批准号: 20060335035) 资助的课题.

[†] E-mail: hzwu@zju.edu.cn

要比Ⅲ-V族和Ⅱ-VI族半导体量子点复杂得多.文献^[11,12]对化学合成的PbSe和PbS量子点(尺寸小于12 nm)做过电子结构方面的计算.这类量子点嵌埋在绝缘玻璃中.计算中,他们采用了球对称模型和无限深势阱近似.但在PbTe/CdTe这一新的量子点异质体系中,测量得到的量子点典型尺寸在20 nm以上.而且,透射电子显微镜(TEM)观察到嵌埋

在CdTe中的PbTe量子点具有高度对称的几何结构,类似于小的菱方八面体(small-rhombo-cubooctahedron)^[10],量子点表面由三套晶面系({100},{110}和{111})组成,如图1(a)所示.另外,PbTe和CdTe的带隙差为1.2 eV,必须采用有限深势阱近似来描述量子点中的电子和空穴的跃迁行为.

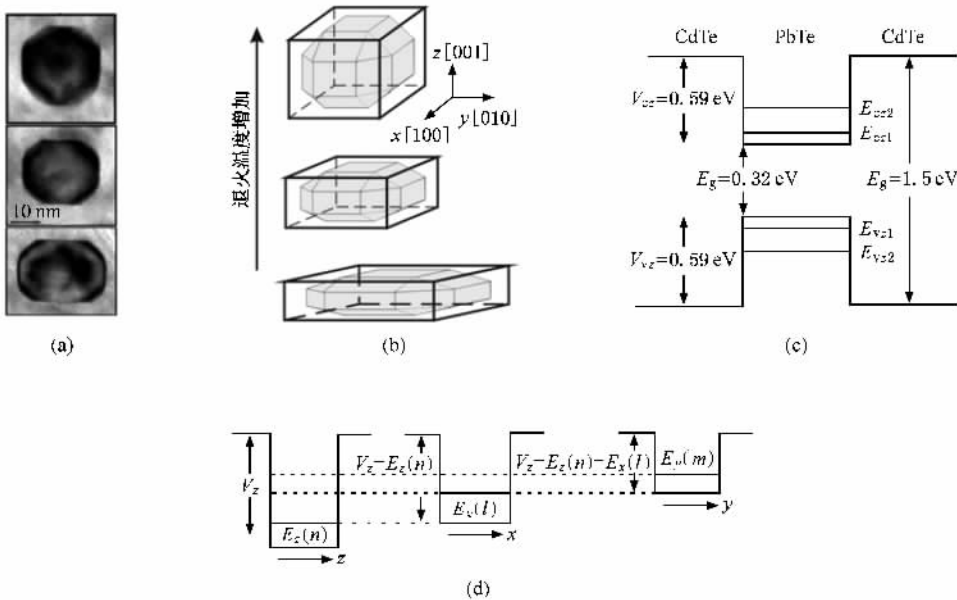


图1 PbTe/CdTe量子点异质体系 (a)PbTe/CdTe量子点的TEM截面图^[10] (b)PbTe量子点几何形状与退火温度的关系及量子盒近似 (c)PbTe/CdTe异质体系的能带结构示意图 (d)量子盒三维量子限制势分解成沿x,y和z方向的3个一维限制势

本文建立了计算PbTe/CdTe量子点光学跃迁和增益的理论模型,分析了量子点光学增益与量子点尺寸、注入载流子浓度的关系.计算中,量子点的几何形状近似为具有6个{100}晶面的量子盒.模型基于 $k \cdot p$ 包络波函数方法和有限深势阱近似,考虑了铅盐矿半导体能带结构的各项异性.

2. 理 论

2.1. 体系描述和各向异性计算

PbTe/CdTe量子点异质体系如图1所示.根据TEM的测试数据^[10],当对PbTe/CdTe量子阱结构在250℃进行退火后,PbTe二维阱层首先分裂成扁平的岛状结构,岛的平均高度为10 nm左右,平面尺寸为几百纳米.然后这些扁平的岛状结构在退火温度升至280℃或更高时,部分地转变为平均尺寸为25 nm高度对称的量子点结构.这些量子点形状如小的

菱方八面体,具有{100},{110}和{111}晶面,如图1(b)所示.量子点的光致发光峰位于375 meV(3.3 μm)^[10].为简化计算,我们把量子点近似为具有{100}晶面的立方量子盒.对实际菱方八面体量子点而言,采用立方模型来计算量子点中分立能级是一个比较好的近似.菱方八面体内切于立方体中(图1(b)),其体积略小于立方体体积,因而用立方模型来近似计算菱方八面体结构的量子点能级,计算结果会稍低于实际量子点中的能级.我们计算的25 nm立方量子点跃迁能量(374 meV)与实验测量结果^[10]相比约低1 meV,这一误差与Ngo等^[13]在研究不同几何形状对量子点能级计算的影响时得到的结果相符.而且这一小的差异可以很容易从它们的等效几何尺寸来加以修正.

PbTe/CdTe界面处能带结构属于类型I^[14],如图1(c)所示.由于缺少PbTe/CdTe异质界面的带阶数据,同时考虑到PbTe具有高度对称的导带和价带结构,我们把带阶比 $\Delta E_c/\Delta E_v$ 设为1:1.为证实上述

假设的合理性,我们计算了不同带阶比下($\Delta E_c/\Delta E_v = 1:1, 4:1, 11:1$)的基态跃迁能,发现当量子点尺寸超过 20 nm 时不同带阶比引起的跃迁能差异小于 15 meV. PbTe 和 CdTe 室温下的带隙分别为 0.32 eV^[15]和 1.5 eV^[16].量子点的三维限制势可以分解为沿 x , y 和 z 方向的 3 个一维限制势^[17],如图 1(c,d)所示.

如上所述,铅盐矿半导体具有各向异性的能带结构特征.等能面的各向异性可以通过计算导带底和价带顶的迁移有效质量 m_w^* 进行求解.从 Kane's 两带模型计算得到的铅盐矿半导体能量色散关系可以推导出沿 [100] 方向(即量子点沿 x 受限方向)的载流子迁移有效质量计算公式^[18]

$$m_w^* = \frac{3m_l^* m_t^*}{2m_l^* + m_t^*}.$$

考虑到 [100] 方向的等价性,量子点其他两个受限方向上的载流子迁移有效质量可用相同的公式计算.将室温下 PbTe 横向和纵向有效质量 m_t^* 和 m_l^* ^[19]代入上式,经计算可得 PbTe 量子点的 [111] 能谷中电子和空穴的迁移有效质量分别为

$$m_{ew}^* = 0.043m_0,$$

$$m_{hw}^* = 0.050m_0.$$

对于 [001] 取向的 PbTe/CdTe 量子点,其他 3 个能谷([$\bar{1}11$],[$\bar{1}\bar{1}1$]和[$1\bar{1}1$])与 [111] 能谷具有完全对称性,因而这些能谷具有与 [111] 能谷相同的电子和空穴的迁移有效质量,量子限制效应并不解除能谷的四度简并特性. CdTe 势垒层的电子和空穴有效质量为各向同性,分别为^[20]

$$m_e^* = 0.11m_0,$$

$$m_h^* = 0.35m_0.$$

2.2. 光学增益计算

PbTe 量子点的光学增益产生于分立能级上的电子和空穴的带间辐射复合,激子效应由于 PbTe 材料具有高的介电常数($\epsilon \approx 400$)^[21]而可以忽略.量子点中分立能级和包络波函数的计算在附录 A 中给出,光学跃迁矩阵元的计算在附录 B 中给出. PbTe 量子点的光学增益计算公式可表示为^[22]

$$\alpha(E) = \frac{he^2 N_D}{n_r c \epsilon_0 m_0^2} \sum_{c,v} \frac{|P_{cv}^\sigma|^2}{E_{cv}} (f_c - f_v) B_{cv}(E - E_{cv}), \quad (1)$$

式中 f_c 是导带中电子的占据概率分布函数, f_v 是价带中空穴的占据概率分布函数, N_D 是量子点的体

密度, n_r 是量子点材料折射率, E_{cv} 是带间跃迁能, $E_{cv} = E_g + E_c + E_v$. 方程(1)考虑了洛伦兹线型均匀展宽

$$B_{cv}(E - E_{cv}) = \frac{\hbar \Gamma_{cv}/\pi}{(E - E_{cv})^2 + (\hbar \Gamma_{cv})^2}, \quad (2)$$

式中 Γ_{cv} 是偏振失相或散射率^[22]. 洛伦兹线型的半峰宽可表示为 $2\hbar \Gamma_{cv}$. 量子点中载流子占据概率分布函数与载流子浓度关系可表示为

$$N = \sum_{lmn} \frac{2\delta(E_c - E_{clmn})}{V_D} f_c(E_c) = \sum_{lmn} \frac{2}{\left[1 + \exp\left(\frac{E_{clmn} - E_{Fc}}{kT}\right)\right] V_D}, \quad (3)$$

$$P = \sum_{lmn} \frac{2\delta(E_v - E_{vlmn})}{V} f_v(E_v) = \sum_{lmn} \frac{2}{\left[1 + \exp\left(\frac{E_{Fv} - E_{vlmn}}{kT}\right)\right] V_D}, \quad (4)$$

式中 N 和 P 分别为电子和空穴密度, V_D 为量子点的几何体积,对立方量子盒而言, $V_D = a^3$, a 是量子点尺寸. 准费米能级(E_{Fc} , E_{Fv})和分立能级(E_{clmn} , E_{vlmn})的正负标定以导带(价带)边指向导带(价带)内为正, E_{Fc} , $E_{clmn} > 0$ 和 E_{Fv} , $E_{vlmn} > 0$.

3. 结果及讨论

根据上述理论模型,我们计算了具有单一尺寸的 PbTe/CdTe 量子点的光学增益. 计算中用到的参数如下: PbTe 的折射率 n_r 为 5.5, 量子点密度 N_D 由 $\xi = N_D V_D$ ^[22] 计算得到, 其中 ξ 为量子点的覆盖度(设为 20%). 计算量子点准费米能时, 考虑到大尺寸量子点($a > a_e$)的准费米能与注入载流子浓度的变化关系应该随量子点尺寸增加而与体材料趋于一致. 一般而言, 当量子点尺寸 a 大于若干个 a_e 时, 量子限制效应可以忽略. 对于尺寸为 200 nm 的量子点, 其能态数为 3×10^4 , 而相同体积和能量范围条件下 PbTe 体材料的能态数为^[23] 9×10^5 . 因而需对(3), (4)式进行修正, 使得量子点中能级数随尺寸增大而急剧增加并趋于体材料的能态数. 我们定义并使用量子点有效限制体积

$$V_D' = V_D \left(1 - \frac{a}{10a_e}\right)^3$$

代替量子点的几何体积 V_D , 其中量子点尺寸 a 满足 $a < 10a_e$. 用有效限制体积计算得到尺寸为 200 nm

的量子点能态数与体材料具有相同的数量级 (10^5)。根据文献 [22], $\hbar\Gamma_{cv}$ 设为 5 meV。 $\hbar\Gamma_{cv}$ 的增加将使得增益谱展宽 峰强减弱,但不影响增益谱与量子点尺寸以及注入载流子浓度的变化关系,因而本文不讨论量子点增益谱与 $\hbar\Gamma_{cv}$ 的变化关系。计算跃迁矩阵元时,我们用了 $E_g = 0.32$ eV, $m_{\perp} = m_{el}^*$ 和 $m_{\parallel} = m_{el}^*$ 。

图 2 给出了 PbTe/CdTe 量子点室温光学增益与注入载流子浓度的变化关系。根据 Heiss 等^[10]的实验结果,我们首先选择具有典型尺寸 ($a = 25$ nm) 的量子点进行研究。如图 2 所示,当注入载流子浓度从 3×10^{17} cm⁻³ 增加到 6×10^{17} cm⁻³ 时开始出现增益峰,增益峰位于 374 meV。该增益峰产生于 PbTe/CdTe 量子点中每个能谷 [111] [$\bar{1}\bar{1}\bar{1}$] [$\bar{1}\bar{1}1$] 和 [$1\bar{1}\bar{1}$] 的基态电子和空穴的辐射复合跃迁。随着注入载流子的继续增加,增益峰强随之增加并趋于饱和。当注入载流子浓度增加到 1.8×10^{18} cm⁻³ 时,在 526 meV 附近出现第二个增益峰。该增益峰产生于量子点的第一激发态电子和空穴的辐射复合跃迁。当载流子浓度继续增加到 3×10^{18} cm⁻³ 时,第一激发态的增益峰强逐渐增强并超过基态的增益峰强,同时在 530 meV 附近出现强度较弱的第三个增益峰。上述增益峰与注入载流子浓度的变化关系主要由量子点导带和价带中分立能级与准费米能的相对位置发生改变而引起。

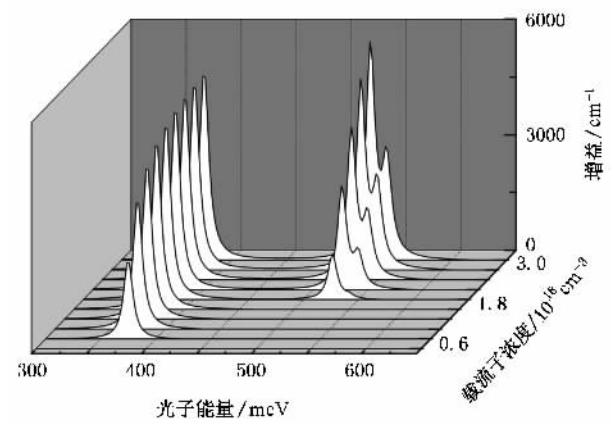


图 2 不同注入载流子浓度下尺寸为 25 nm 的 PbTe/CdTe 量子点室温光学增益谱

为了说明量子点中分立能级和准费米能的关系,图 3 给出了不同载流子浓度下导带中准费米能与量子点尺寸的变化关系,不同尺寸量子点中电子的分立能级也在图中给出。由于 PbTe 具有对称的能带结构,价带中空穴的分立能级和准费米能与导带

中电子的相似。从图 3 可以看到,在注入相同的电子浓度下,导带中的准费米能随着量子点的尺寸增加而急剧下降。而当量子点尺寸超过 25 nm 时,准费米能几乎不随量子点尺寸的变化而变化。对同一尺寸的量子点而言,准费米能随着注入电子浓度的增加而增加。当注入电子浓度超过 1.2×10^{18} cm⁻³ 时,准费米能与量子点尺寸的变化曲线在 10—25 nm 范围内出现波包,并随着电子浓度的增加而向量子点小尺寸方向移动。上述准费米能与量子点尺寸以及电子浓度的变化关系主要与量子点中分立能级数、能级的分布情况和量子点的体积有关。对 PbTe/CdTe 量子点而言,可以根据量子点尺寸 a 把量子点分成三类。第一类为 $a < 10$ nm。这类量子点体积小,能级数少(一般只有基态能级和第一激发态能级,而且基态和第一激发态能量差在 0.4 eV 左右),电子填充主要受到基态能级的影响,准费米能的变化与 PbTe 体材料类似。第二类为 $10 \text{ nm} < a < 25$ nm。这类量子点中出现更多能级,基态和第一激发态能量差范围在 0.1—0.2 eV,电子填充时受到第一激发态能级的影响变得强烈,使得准费米能随着电子注入出现非单调上升。第三类为 $a > 25$ nm。这类量子点的分立能级数随着尺寸的继续增加而急剧增加,基态和第一激发态之间的能量差小于 0.1 eV,电子填充受到多能级的影响,使得准费米能随电子注入浓度的变化在一定的范围内(如 25—50 nm)几乎不受量子点尺寸的影响。但随着尺寸的增加,量子点中准费米能逐渐减小,其与载流子浓度的变化关系与体材料趋于一致。图 4 给出了这三类量子点准费米能与注入电子浓度的变化关系,PbTe 体材料的准费米能与注入载流子浓度的变化关系^[24]也在图中给出以作比较。

由 Bernard-Duraffourg 条件可知,量子点材料产生增益需要满足

$$E_{fc} - E_{fv} \geq E_{clm} - E_{vlm} = \hbar\nu. \tag{5}$$

从图 3 可知,小尺寸量子点产生光增益需要更高的注入载流子浓度,而随着量子点尺寸的增大,将有更多的能级参与发光。图 5 给出了不同尺寸量子点的最大增益与注入载流子浓度关系。由图 5 可知,在 $(0.3\text{--}3) \times 10^{18}$ cm⁻³ 范围内,5 和 10 nm 的量子点没有产生光学增益峰。15 nm 的量子点在 1.2×10^{18} cm⁻³ 的载流子浓度下开始出现增益并随载流子浓度增大而急剧增加。虽然量子点尺寸增大可以减小产生增益所需的注入载流子浓度,但产生的最大增

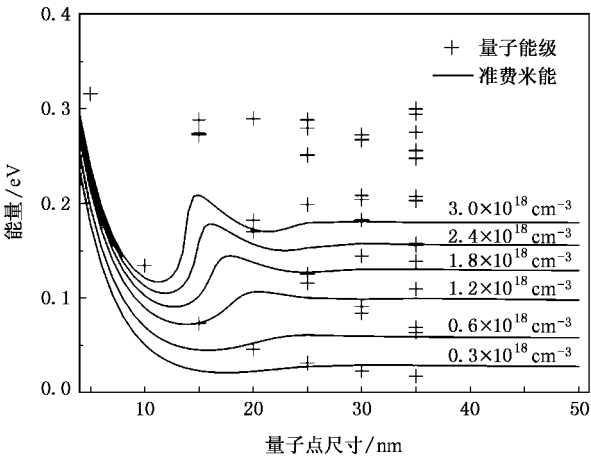


图3 不同电子浓度下 PbTe/CdTe 量子点导带中准费米能与量子点尺寸的变化关系 图中同时给出了部分量子点导带电子的分立能级

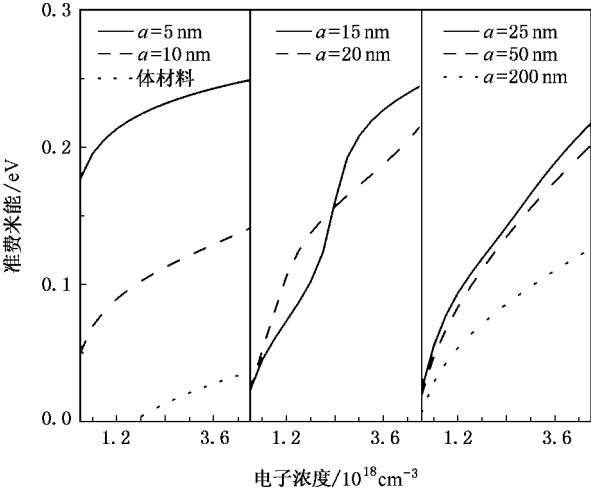


图4 三类不同尺寸的 PbTe/CdTe 量子点导带中准费米能与注入电子浓度的变化关系 图中同时给出 PbTe 体材料导带中准费米能与注入电子浓度的变化关系

益峰强也随之减小.这是因为在相同覆盖度条件下,量子点尺寸增大意味着密度减小,因而产生的增益总和必然减小.同时,大尺寸量子点的增益峰强更容易趋于饱和,这与大尺寸量子点具有更低的基态能级有关.当准费米能随载流子浓度急剧增加时很容易高于基态能级,使得(1)式中的 $f_c - f_v$ 很快趋于常数,从而使增益峰强不再随载流子浓度的改变而发生变化.我们也计算了室温下 PbTe 体材料的光学增益,其峰值在 $3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 时仅约为 400 cm^{-1} .相比较而言,PbTe/CdTe 量子点($a < 25 \text{ nm}$)的光学增益是体材料的10倍以上.即使考虑强烈的均匀展宽效应($\hbar\Gamma_{cv} = 20 \text{ meV}$),15 nm 量子点的光学增益仍然

是体材料的11倍左右.因而,PbTe 量子点结构可能是提高IV-VI族中红外半导体激光器性能的理想材料之一.

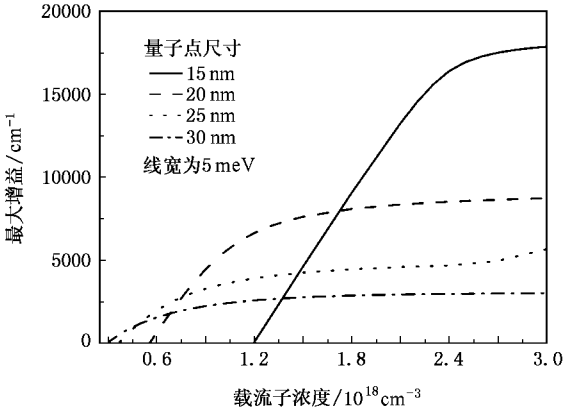


图5 不同尺寸的 PbTe/CdTe 量子点产生的最大增益与注入载流子浓度的变化关系

4. 结 论

我们建立了计算 PbTe/CdTe 量子点光学跃迁和增益的理论模型.模型基于 $k \cdot p$ 包络波函数方法并考虑了 PbTe 能带结构的各向异性.计算结果表明,PbTe/CdTe 量子点体系可以根据量子点尺寸分成三类.第一类为 $a < 10 \text{ nm}$,光学增益产生于基态跃迁,准费米能与注入载流子浓度的变化关系与体材料具有相同趋势.第二类为 $10 \text{ nm} < a < 25 \text{ nm}$,光学增益以基态跃迁为主,第一激发态开始参与发光,准费米能随载流子浓度增加而非单调上升.第三类为 $a > 25 \text{ nm}$,多能级参与发光,准费米能随量子点尺寸增加逐渐与体材料相同.当载流子浓度为 $(0.3-3) \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 范围时,尺寸在15—20 nm 范围的量子点可产生大于 5000 cm^{-1} 的光学增益,远大于 PbTe 体材料的光学增益(400 cm^{-1}).因而这类尺寸的 PbTe/CdTe 量子点是一种制备室温连续工作中的红外半导体发光器件的理想材料.

附录 A 能级和包络波函数计算

量子点中的分立能级通过 $k \cdot p$ 包络波函数方法进行计算.该方法适用于尺寸较大的量子点或量子能级靠近带边的情况^[12].通常把球形量子点边界处的包络波函数设为零^[6,11,12],然后用计算得到的包络波函数对体布洛赫波函数周期部分进行调制.对量子盒而言,当量子盒尺寸远大于晶

格周期时,包络波函数可近似写为

$$\psi(x,y,z) = \varphi_l(x)\varphi_m(y)\varphi_n(z),$$

其中 $\varphi_l(x)$ 、 $\varphi_m(y)$ 和 $\varphi_n(z)$ 分别为沿 x 、 y 和 z 方向的包络波函数^[17].我们以沿 z 方向包络波函数 $\varphi_n(z)$ 为例进行求解. $\varphi_n(z)$ 满足类 Schrödinger 方程^[18]

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_z}\frac{d^2}{dz^2} + V_z(z)\right)\varphi_n(z) = E_n\varphi_n(z), \quad (\text{A1})$$

其中,限制势函数

$$V_z(z) = \begin{cases} 0 & (|z| < w_z/2), \\ V_z & (|z| \geq w_z/2). \end{cases} \quad (\text{A2})$$

这里 m_z 是 PbTe 量子盒沿 $[001]$ 方向(z 方向)的载流子迁移有效质量, w_z 是量子盒沿 z 方向的尺寸, V_z 是势垒高度, E_n 是载流子的量子能级.应用 $\varphi_n(z)$ 和 $\frac{d\varphi_n(z)}{m_z dz}$ 在界面处的连续性条件,就可以求出载流子的量子能级和相应的包络波函数.量子能级可由下列方程求解:

$$\frac{m_{zb}}{m_{zw}}\kappa \tan(\kappa w/2) = \beta, \quad (\text{A3})$$

$$\frac{m_{zb}}{m_{zw}}\kappa \cot(\kappa w/2) = -\beta, \quad (\text{A4})$$

式中

$$\kappa^2 = \frac{2m_{zw}E_n}{\hbar^2}, \quad (\text{A5})$$
$$\beta^2 = \frac{2m_{zb}(V_z - E_n)}{\hbar^2} \quad (0 < E_n < V_z).$$

这里 m_{zw} 和 m_{zb} 分别为载流子在阱中和垒中的有效质量,相应的波函数为

$$\begin{aligned} \varphi_n(z) &= A \cos(\kappa z) & (|z| < w_z/2, n \text{ 为偶数}), \\ \varphi_n(z) &= A \sin(\kappa z) & (|z| < w_z/2, n \text{ 为奇数}), \\ \varphi_n(z) &= B \exp(-\beta|z|) & (|z| \geq w_z/2). \end{aligned} \quad (\text{A6})$$

量子盒中其他方向的量子能级(E_x, E_y)也可以通过上述方法进行求解,计算中采用相应的势函数(如图 1(d)所示).PbTe 量子盒中最终的载流子量子能级由下式给出:

$$E_{lmn} = E_x + E_y + E_n. \quad (\text{A7})$$

附录 B 带间跃迁矩阵元计算

量子盒中电子跃迁概率正比于带间跃迁矩阵元的平方,即

$$|P_{cv}^l|^2 = |\psi_{clm}|^2 |\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}|^2 |\psi_{vlm}|^2, \quad (\text{B1})$$

式中下标 l, m 和 n 表示量子能级的指标, ψ_{clm} 是电子波函数,当量子盒尺寸比晶格周期大得多时可以近似表示为^[17]

$$\psi_{clm} = u_c(r)\varphi_{cxl}(x)\varphi_{cym}(y)\varphi_{czn}(z). \quad (\text{B2})$$

这里 $\varphi_{cxl}(x)$ 、 $\varphi_{cym}(y)$ 和 $\varphi_{czn}(z)$ 分别为附录 A 中求解得到的不同限制方向上的包络波函数, $u_c(r)$ 是布洛赫波函数周期性部分.对铅盐矿半导体而言,位于布里渊区 L 点的导

带和价带的带边周期性函数可写为^[15,25,26]

$$|c\uparrow\rangle = -\sin\theta^-|z\uparrow\rangle - \cos\theta^-|X_+\downarrow\rangle, \quad (\text{B3})$$

$$|c\downarrow\rangle = \sin\theta^-|z\downarrow\rangle - \cos\theta^-|X_-\uparrow\rangle, \quad (\text{B4})$$

$$|v\uparrow\rangle = \text{icos}\theta^+|R\uparrow\rangle + \sin\theta^+|S_+\downarrow\rangle, \quad (\text{B5})$$

$$|v\downarrow\rangle = \text{icos}\theta^+|R\downarrow\rangle + \sin\theta^+|S_-\uparrow\rangle, \quad (\text{B6})$$

式中 $|c\uparrow\rangle$ 和 $|c\downarrow\rangle$ 表示导带自旋向上态和向下态,具有 L_{62}^- 对称性, $|v\uparrow\rangle$ 和 $|v\downarrow\rangle$ 表示价带自旋向上态和向下态,具有 L_{61}^+ 对称性.文献[25]给出了其他符号的说明.铅盐矿半导体在 $[100]$ 限制方向上 4 个能谷简并,因而这 4 个斜能谷($[111]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 、 $[11\bar{1}]$ 和 $[\bar{1}1\bar{1}]$)具有相同的带间跃迁概率.

图 B1 给出了 $[111]$ 能谷坐标及光入射示意图.入射光沿 $[001]$ 方向入射,偏振矢量 $\mathbf{e}$ 在 x, y 平面内.由于周期性波函数(B3)–(B6)式仅在能谷所在坐标系中成立(这里为 $[111]$ 能谷坐标系 x', y', z')^[15],因而偏振矢量 $\mathbf{e}$ 必须投影到能谷坐标系中.偏振矢量在 x, y, z 坐标系中为

$$\mathbf{e} = (\sin\varphi, \cos\varphi, 0),$$

而在 x', y', z' 坐标系中为

$$\mathbf{e}' = \left(\frac{\sin\varphi - \cos\varphi}{\sqrt{2}}, \frac{\sin\varphi + \cos\varphi}{\sqrt{6}}, \frac{\sin\varphi + \cos\varphi}{\sqrt{3}} \right).$$

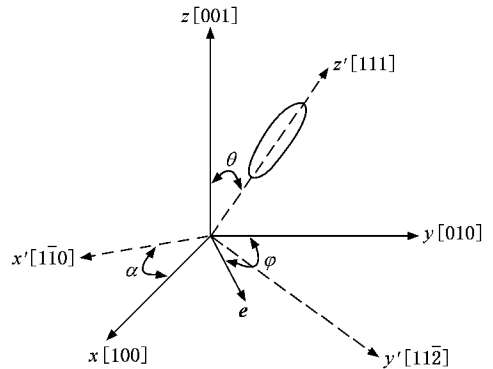


图 B1 沿 $[100]$ 方向生长的 PbTe/CdTe 量子盒坐标系(x, y, z)和位于布里渊区 L 点处沿 $[111]$ 方向的能谷坐标系(x', y', z')。入射光沿 z 方向,偏振矢量为 $\mathbf{e}$. 对非偏振光而言,需要对偏振矢量在 $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ 范围内求平均

利用矩阵元^[15,25]

$$c\uparrow|\mathbf{e}' \cdot \mathbf{p}_{cv}(0)|v\uparrow\rangle = P_{//}\mathbf{e}'_z, \quad (\text{B7})$$

$$c\uparrow|\mathbf{e}' \cdot \mathbf{p}_{cv}(0)|v\downarrow\rangle = P_{\perp}(\mathbf{e}'_x + \text{i}\mathbf{e}'_y), \quad (\text{B8})$$

$$c\downarrow|\mathbf{e}' \cdot \mathbf{p}_{cv}(0)|v\uparrow\rangle = P_{\perp}(\mathbf{e}'_x - \text{i}\mathbf{e}'_y), \quad (\text{B9})$$

$$c\downarrow|\mathbf{e}' \cdot \mathbf{p}_{cv}(0)|v\downarrow\rangle = -P_{//}\mathbf{e}'_z, \quad (\text{B10})$$

可求得 $[111]$ 能谷的带间跃迁矩阵元在非偏振光入射下的表达式(偏振矢量 $\mathbf{e}'$ 对 φ 求平均)

$$|c|\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}(0)|v|^2 = \sum_{i,j=\uparrow,\downarrow}^{\text{oblique}} |ci|\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}|vj|^2$$

$$= \chi (2P_{\perp}^2 + P_{\parallel}^2) / 3. \quad (\text{B11})$$

这里 $P_{\perp}$ 和 $P_{\parallel}$ 是横向和纵向跃迁矩阵元

$$\begin{aligned} \frac{2P_{\perp}^2}{m_0} &= E_g \frac{m_0}{m_{\perp}}, \\ \frac{2P_{\parallel}^2}{m_0} &= E_g \frac{m_0}{m_{\parallel}}, \end{aligned} \quad (\text{B12})$$

式中 $m_{\perp}$ 和 $m_{\parallel}$ 为布里渊区 L 点处的各向异性带边有效质量. 因而方程 (B1) 可以改写成

$$\begin{aligned} |P_{cv}^r|^2 &= |\varphi_{cxd}\varphi_{cym}\varphi_{czn}| |\varphi_{vxd}\varphi_{vym}\varphi_{vzn}|^2 \\ &\times |c|\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}(0)|v|^2 \\ &= 2I_{cv}^2(2P_{\perp}^2 + P_{\parallel}^2) / 3. \end{aligned} \quad (\text{B13})$$

-
- [1] Mowbray D J , Skolnick M S 2005 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **38** 2059
- [2] Liu Y M , Yu C Y , Yang H B , Huang Y Z 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5023 (in Chinese) [刘玉敏、俞重远、杨红波、黄永箴 2006 物理学报 **55** 5023]
- [3] Cao C F , Wu H Z , Si J X , Xu T N , Chen J , Shen W Z 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2021 (in Chinese) [曹春芳、吴惠桢、斯剑霄、徐天宇、陈 静、沈文忠 2006 物理学报 **55** 2021]
- [4] McCann P J , Namjou K , Fang X M 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 3608
- [5] Lipovskii A , Kolobkova E , Petrikov V , Kang I , Olkhovets A , Krauss T , Thomas M , Silcox J , Wise F , Shen Q , Kycia S 1997 *Appl. Phys. Lett.* **71** 3406
- [6] Kang I , Wise F W 1997 *J. Opt. Soc. Am. B* **14** 1632
- [7] Springholz G , Holy V , Pinczolits M , Bauer G 1998 *Science* **282** 734
- [8] Alchalabi K , Zimin D , Kostorz G , Zogg H 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 026104
- [9] Rodriguez E , Jimenez E , Padilha L A , Neves A A R , Jacob G J , Cesar C L , Barbosa L C 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 113117
- [10] Heiss W , Groiss H , Kaufmann E , Hesser G , Böberl M , Springholz G , Schäffler F , Koike K , Harada H , Yano M 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 192109
- [11] Andreev A D , Kolobkova E V , Lipovskii A A 2000 *J. Appl. Phys.* **88** 750
- [12] Tudury G E , Marquezini M V , Ferreira L G , Barbosa L C , Cesar C L 2000 *Phys. Rev. B* **62** 7357
- [13] Ngo C Y , Yoon S F , Fan W J , Chua S J 2006 *Phys. Rev. B* **74** 245331
- [14] Yano M , Makabe I , Koike K 2004 *Physica E* **20** 449
- [15] Shu Y , Krenn H , Springholz G , Bauer G 1993 *Phys. Rev. B* **47** 7213
- [16] Matatagui E , Thompson A G , Cardona M 1968 *Phys. Rev.* **176** 950
- [17] Asada M , Miyamoto Y , Suematsu Y 1986 *IEEE J. Quantum Electron.* **22** 1915
- [18] Khodr M F , McCann P J , Mason B A 1996 *IEEE J. Quantum Electron.* **32** 236
- [19] Preier H 1979 *Appl. Phys.* **20** 189
- [20] Baskoutas S , Terzis A F 2006 *J. Appl. Phys.* **99** 013708
- [21] Foley G M T , Langenberg D N 1977 *Phys. Rev. B* **15** 4830
- [22] Sugawara M , Mukai K , Nakata Y , Ishikawa H , Sakamoto A 2000 *Phys. Rev. B* **61** 7595
- [23] Chuang S L 1995 *Physics of Optoelectronic Devices* (New York : John Wiley & Sons) p29
- [24] Altschul V , Finkman E 1991 *Appl. Phys. Lett.* **58** 942
- [25] Mitchell D L , Wallis R F 1966 *Phys. Rev.* **151** 581
- [26] Bauer G , Pascher H , Zawadzki W 1992 *Semicond. Sci. Technol.* **7** 703

Optical gain in PbTe/CdTe quantum dots^{*}

Xu Tian-Ning Wu Hui-Zhen[†] Si Jian-Xiao

(*Department of Physics , Zhejiang University , Hangzhou 310027 , China*)

(Received 12 July 2007 ; revised manuscript received 12 September 2007)

Abstract

A theoretical model is developed to study the optical transition and optical gain of PbTe/CdTe quantum dots. The model is based on the $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ envelope function approach, and anisotropic band structure characteristics of PbTe are taken into consideration. The relationships of optical gain of PbTe/CdTe quantum dots vs dot size and injection carrier density are given. The theoretical results suggest that PbTe/CdTe quantum dots with dot size of 15—20 nm are promising materials for mid-infrared lasers, which may produce optical gain higher than 5000 cm^{-1} when the injection carrier density ranges $(0.3—3) \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. The optical gain decreases with dot size increasing. However, higher injection carrier density is required for PbTe/CdTe quantum dots with smaller sizes ($< 15 \text{ nm}$). Therefore the optimal PbTe quantum dot sizes are 15—20 nm.

Keywords : PbTe/CdTe quantum dots , optical gain , lead salt semiconductors

PACC : 7865P , 7320D , 7850G

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10434090) and the Doctoral Foundation of Ministry of Education , China (Grant No. 20060335035).

[†] E-mail hzwu@zju.edu.cn