

# POET: 一个自洽的半导体量子阱激光器的 二维模拟器\*

孔 军 张文俊 杨之廉

(清华大学微电子所 北京 100084)

**摘要** 我们开发了一个半导体量子阱激光器的数值模拟器 POET. 本文介绍了该模拟器的基本模型、工作流程和一些主要特性, 并演示了对掩埋异质结构渐变折射率分别限制异质结单量子阱激光器的模拟

EEACC: 4320J, 0290

## 1 引言

半导体激光器数值模拟的方法是: 从描述半导体物理现象的基本方程出发, 用数值方法进行求解, 得到激光器的光学和电学特性. 在半导体激光器的二维数值模拟方面, Wilt 和 Yariv 已作了第一个重要的工作<sup>[1]</sup>, 他们提出了一个双异质结激光器的二维数值模型, 电学部分采用漂移-扩散模型, 在有源区中载流子高度简并, 引入了 Fermi 统计, 光场用 Helmholtz 方程来描述. 具备了以后的模拟器的各项主要特征. 之后, 其他研究小组<sup>[2-7]</sup>相继也有所贡献. 目前, 较有代表性的是 Illinois 大学开发的 MNLASE<sup>[8]</sup>. MNLASE 首次实现了半导体量子阱激光器的二维数值模拟, 考虑了宏观温度分布. MNLASE 对每一个 Fabry-Perot 模式应用光子速率方程. 但是, 其多模模拟在算法上有重大的缺陷, 因而其多模模拟不能认为是成功的, 尽管如此, 但仍然是很有意义的一个尝试. MNLASE-II 可模拟调制特性, 对量子阱内的载流子能量分布作了较为细致的处理<sup>[9]</sup>.

我们开发的模拟器 POET 的电学部分是基于能量输运模型, 实现了收敛性没有问题的多模模拟, 以及谐振模式的自洽计算, 在模型与算法方面为半导体激光器模拟技术进一步的研究与开发提供了基础<sup>[10-13]</sup>.

## 2 基本模型

对建模来说半导体激光器是很复杂的器件, 器件内载流子与光的分布涉及到许多相互作用的物理过程. 以下物理机制是必须加以考虑的: 静电场与电荷的相互作用、载流子输运、

\* 国家自然科学基金资助, 项目号 69476025

孔 军 男, 1970 年出生, 博士生, 研究方向为半导体光电子器件的计算机模拟

杨之廉 男, 1934 年出生, 教授, 从事集成电路 CAD 的教学与研究

1998-06-16 收到, 1998-08-31 定稿

热扩散、谐振腔、辐射及非辐射复合等。简单的模型不会有好的精度, 过于复杂的模型又很难求解。

我们的模拟器的基本方程由六个电学方程(泊松方程, 电子和空穴连续性方程, 电子和空穴能量平衡方程, 热扩散方程)和两个光学方程(Helmholtz 方程与光子速率方程)组成。

泊松方程

$$\operatorname{div}(-\epsilon \nabla \varphi) = \rho \quad (1)$$

载流子连续性方程

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \operatorname{div} j_n - U \quad (2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \operatorname{div} j_p - U \quad (3)$$

载流子能量平衡方程

$$\frac{\partial w_n}{\partial t} = -\operatorname{div} S_n + j_n \cdot E_n - U w_n \quad (4)$$

$$\frac{\partial w_p}{\partial t} = -\operatorname{div} S_p + j_p \cdot E_p - U w_p \quad (5)$$

晶格热扩散方程

$$C_L \frac{\partial T_L}{\partial t} = \operatorname{div}(k \nabla T_L) + G_L \quad (6)$$

Helmholtz 方程

$$(\nabla^2 - \hat{\epsilon}_\omega \omega^2 / c^2 - \beta^2) \phi = 0 \quad (7)$$

光子速率方程

$$\frac{\partial S_\nu}{\partial t} = G_\nu S_\nu + R_\nu - S_\nu / \tau_\nu \quad (8)$$

这里  $\rho$  是电荷密度;  $\epsilon$  是静电场介电常数;  $\varphi$  是静电势;  $U$  是净载流子复合率;  $S_n$  是电子能流;  $w_n$  电子能量密度;  $U w_n$  是电子能量损失速率;  $T_L$  是晶格温度;  $k$  是晶格热导率;  $C_L$  是晶格比热容;  $G_L$  是晶格热产生率;  $\phi$  是光场;  $\beta$  是传播常数;  $c$  是真空中光速;  $\hat{\epsilon}_\omega$  是光频相对介电常数;  $S_\nu$  是模式  $\nu$  的光子占有数;  $G_\nu$  是模式增益;  $R_\nu$  是模式自发辐射;  $\tau_\nu$  是模式寿命; 其它符号取通常的含义。

目前只考虑了稳态模拟。电学部分与光学部分主要通过量子阱中的辐射复合相耦合, 包括自发辐射与受激辐射。载流子与光子的另外一种相互作用是自由载流子吸收, 它要在能量平衡方程的复合项中及速率方程的光子寿命中得到体现, 也会对折射率产生影响。

我们的模拟器 POET 的电学部分是基于通用器件模拟程序 PISCES 的能量运输模型版本 PISCES-2ET<sup>[10,11]</sup>。在能量运输模型中引入了 Boltzmann 输运方程的二阶矩方程, 即能量平衡方程, 与漂移-扩散模型相比是对 Boltzmann 输运方程更好的近似。在能量运输模型中还引入了热扩散方程, 得以描述器件中晶格温度分布, 这对激光器模拟也是很重要的。

我们对每一个模式建立相应的 Helmholtz 方程和速率方程。每个模式都有自己的场分布, 这样就能反映出光限制因子对能量的依赖关系。

增益模型和自发辐射模型采用文献[8]中的模型。在计算光学增益时, 严格的选择定则

与实验不很符合, POET 中使用了弛豫的选择定则 在半导体量子阱激光器中, 有限深量子阱会比较明显地影响增益曲线的形状, 尤其是峰值的位置, 进而影响到主模的能量 有限深势阱的机制在我们的模拟器中也予以考虑<sup>[14]</sup>.

### 3 工作流程

程序总的流程如图 1 所示 POET 用输入卡来描述器件的结构, 以及控制求解的过程

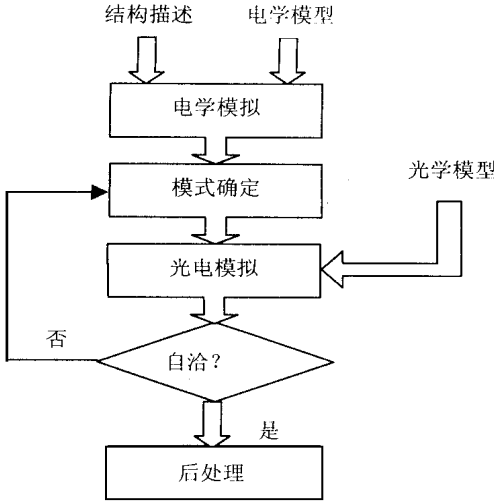


图 1 POET 的工作流程

下面分别做简单的说明

#### 3.1 结构描述

结构描述至少用到下列几类卡, 括号内为卡的名称:

- 网格定义 (mesh 卡, x mesh 卡, y. mesh 卡)
- 区域定义 (region 卡)
- 电极 (electrode 卡)
- 掺杂 (doping 卡)

#### 3.2 指定电学模型与参数

在程序中提供了很多模型与参数供用户选择, 根据不同的器件, 用户需要指定的内容包括复合模型、迁移率模型、输运模型、弛豫时间、电离、边界、禁带变窄以及 Fermi/Boltzmann 统计

等 这些模型要通过 model 卡、material 卡、symbolic 卡和 contact 卡等来说明

#### 3.3 指定光学模型与参数

要指定的光学模型与参数有波导散射损耗、端面反射、有限/无限深量子阱、增益模型的参数、非量子阱区的贡献等, 用 optele 卡描述 optele 卡也用来控制完整的光电特性综合模拟

#### 3.4 电学求解控制

这类卡用来控制电学方程的求解, 包括 solve 卡、method 卡和 symbolic 卡

#### 3.5 光电模拟

有三种类型的卡 eigset 卡用来配置特征值求解器 setmodes 卡用来初始化谐振腔内的模式 optele 卡用来控制完整的光电方程组的求解

### 4 模拟器特性

POET 实现了激光器模拟功能与著名的半导体器件模拟软件 PISCES 的完全相结合 如果仅仅是把 PISCES 的电学输出结果用来计算光学特性, 而不考虑光学部分对电学部分的影响, 则不可能可靠地模拟出阈值以上的激光器特性 例如, 我们知道, 电学部分保持不变, 就不能解释激光器增益饱和现象 这样 PISCES 提供的丰富的复合、迁移率模型以及边界条件等, 都可以为 POET 所利用

POET 的一个重要的特点就是在多模模拟时完全的自洽性 数值求解的结果是模型基本方程组的精确求解 这里的自洽性有两个含义 一是给定频率时的自洽解, 二是各个模式

的频率本身也可以自洽地决定 前者是由于控制方程概念的引入<sup>[13]</sup>, 后者是由于模拟器有很高的计算效率, 尤其是 Helmholtz 方程的求解的高速度, 并进而自洽地决定模式的谐振频率<sup>[12]</sup>.

此外, POET 还有下面的特点

1. 速度快

器件模拟的速度是比较慢的, 对半导体激光器而言, 这一点尤其突出 要使激光器的数值模拟为工业界所接受, 必须提高计算效率 POET 在算法把速度置于优先考虑的地位, 在考虑了能量方程及多模模拟后, 仍然具有比较快的速度 (在 SPARC20 工作站上运行, 500 格点的器件约需 CPU 时间 20 分钟), 对研究及实际应用来说都是可接受的

2. 稳定性

稳定性是激光器模拟的一个难点 POET 正是在这一方面具有其领先性的 不管是在阈值以上还是在阈值以下, 都可以十分稳定地收敛 即使注入的电流相当的大, 也能很好地工作

3. 易用性

POET 用输入文件来控制程序的运行 保留了 PISCES 的所有功能 对激光器的结构描述很方便, 计算结果有文本与图形两种输出方式

4. 灵活性

不但对器件结构的变化有灵活性, 而且体现在求解方式上 能量方程的求解与否, 进行单模模拟还是多模模拟, 处理的模式数, 精度高低等等都可进行指定

### 5 模拟实例

这里给出一个渐变折射率分别限制异质结 (GRN-SCH) 掩埋异质结构 (BH) 单量子阱 (SQW) 激光器 (graded-index-separate-confinement-hetero-junction buried heterostructure single-quantum well laser)<sup>[15]</sup> 的数值模拟的例子. GaAs 量子阱 10nm 厚; 对称地分布在量子阱两边的渐变波导层厚 0.4μm, AlAs 分子 (mole) 比从 0.2 渐变到 0.5; p-和 n-Ga<sub>0.5</sub>Al<sub>0.5</sub>As 包层 1.5μm 厚, 掺杂浓度  $5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ , 有源层与渐变波导层都未掺杂 在垂直于量子阱平面的方向上, Al 含量的分布如图 2 所示 条宽 1μm. 用 1μm p-Ga<sub>0.3</sub>Al<sub>0.7</sub>As 和 3μm n-Ga<sub>0.3</sub>Al<sub>0.7</sub>As 来做电流限制 腔长 250μm.

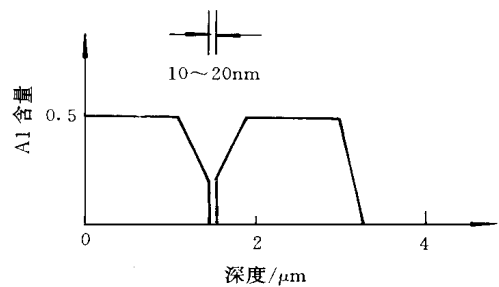


图2 GRN-SCH BH SQW 激光器 Al 含量纵向分布示意图

图 3 显示了一个激光器的光强-电流曲线 这

里的输出功率是从前端射出的所有模式的受激辐射所携带的功率 图中模拟结果与实验数据进行了比较 未镀膜的激光器 ( $R = 31\%$ ) 连续波运行的阈值为 3.3mA; 经过 HR 镀膜的激光器的前端反射率 67%, 后端反射率 71%, 阈值约为 0.9mA<sup>[15]</sup>. 根据对所讨论的激光器的实验测量, 波导散射损耗取为  $15 \text{cm}^{-1}$ <sup>[15]</sup>. 考虑到端面反射率的测量误差等的影响, 模拟结果与实验符合得很好. 量子阱激光器的端面反射率的增强使得谐振腔损耗明显降低, 从而导致了阈值电流的显著下降

图 4 显示了注入电流 1.86mA 时主模附近几个模式的净模式增益(模式增益减去模式损耗). 如图所示, 净模式增益都小于零. 稳态时, 这是反映模拟器的自治性的一个重要的特性

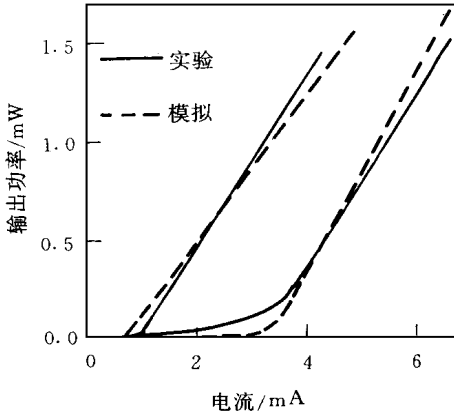


图 3 HR 镀膜及未镀膜的情况下的光-电流曲线 阈值较大者为未镀膜的器件

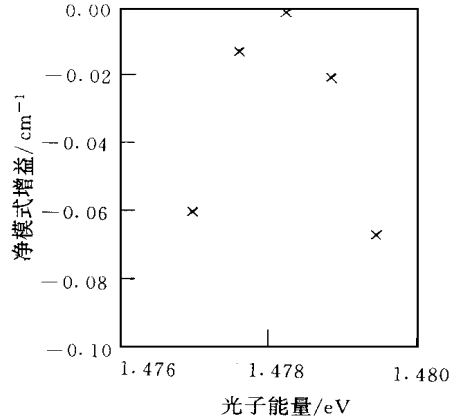


图 4 主模及其邻近的模式的净模式增益

由于自发辐射的补偿作用, 腔内光子数依然可以保持不变. 净模式增益的绝对值较小的模式有较大的光子数. 当注入电流增大时, 主模的净模式增益趋于零, 而且仍然必须小于零, 尽管在很高的注入条件下, 其值会非常接近零.

图 5 是在相同注入条件下腔内各模式的光子占有数分布. 当注入电流增加时, 主模与其相邻模式的输出功率之比会随之增大.

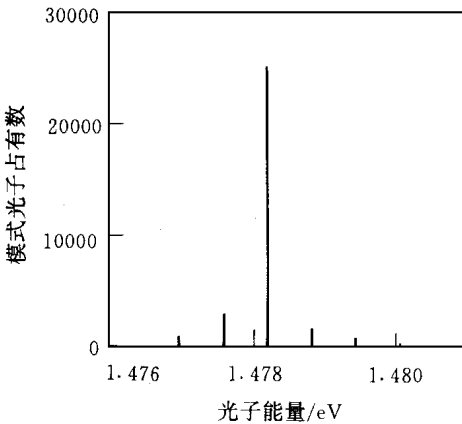


图 5 注入电流 1.86mA 时, 主模及其邻近的模式的光子数

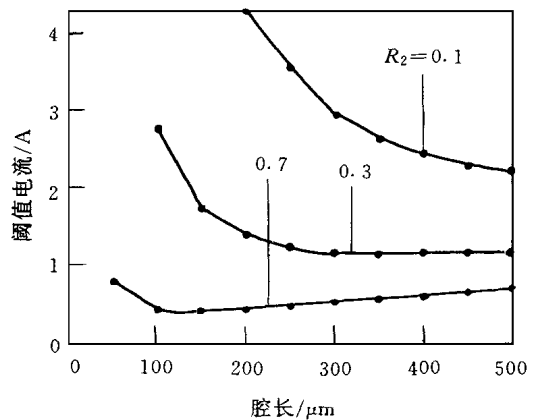


图 6 阈值电流与腔长及反射率的关系 ( $R_1 = 0.1$ )

图 6 作出了阈值电流对腔长与反射率的依赖关系, 实心的圆圈代表模拟点. 前端的反射率  $R_1$  固定为 0.1, 后端的反射率  $R_2$  分别取 0.1, 0.3 和 0.7. 当反射率增大时, 阈值上升. 阈值随腔长的变化反映出两种不同的趋势: 当腔长较小时, 阈值电流会随着腔长的减小很快的增加; 而当腔长较大时, 阈值电流会随着腔长的增大而增加. 前者是由于损耗的急剧增加, 而

后者是由面积的增大引起的 当反射率增大时, 第一种效应会减弱

## 6 结论

我们开发了一个自洽的半导体量子阱激光器的二维数值模拟器 POET. 该模拟器适用于在光传播轴向材料结构不变的器件, 如掩埋异质结构和脊形波导结构的激光器 我们介绍了该模拟器的模型、流程与特性, 并演示了对掩埋异质结构渐变折射率分别限制异质结单量子阱激光器的模拟 结果与实验有良好的符合

## 参 考 文 献

- [ 1 ] D. P. Wilt and A. Yariv, IEEE J. Quantum Electron., 1981, **17**: 1941~ 1949
- [ 2 ] T. Kumar, R. F. Omondroyd and T. E. Ozzi, IEEE J. Quantum Electron., 1986, **22**: 1975~ 1985
- [ 3 ] K. B. Kahan, IEEE J. Quantum Electron., 1988, **24**: 641~ 651
- [ 4 ] M. Ueno, S. Asada and S. Kumashiro, IEEE J. Quantum Electron., 1990, **26**: 972~ 981
- [ 5 ] T. Ohtoshi, K. Yamaguchi and N. Chinone, IEEE J. Quantum Electron., 1989, **25**: 1369~ 1375
- [ 6 ] 郭长志, 柴自强, 半导体学报, 1990, **11**: 570~ 577.
- [ 7 ] Z. M. Li, K. M. Dzurko and S. P. Mcclister, COMPEL., 1991, **10**: 255~ 268
- [ 8 ] G. H. Song, Two-dimensional simulation of quantum well lasers including energy transport, Technical Report CE-91-01, the Beckman Institute, University of Illinois, 1991.
- [ 9 ] K. Hess, Hot electrons and phonons in quantum well lasers and as simulated by M N LASE II, Physics and simulation of optoelectronic devices VI, San Jose, CA, USA, Jan, 1998, SPIE vol 3283
- [ 10 ] Z. Yu, D. Chen, L. So and R. W. Dutton, PISCES-2ET—two dimensional device simulation for silicon and heterostructure. Integrated Circuits Lab., Stanford University, 1994
- [ 11 ] 孔军, 杨之廉, 半导体学报, 1998, **19**(11), 846~ 850
- [ 12 ] 孔军, 张文俊, 杨之廉, 半导体学报, 1999, **20**(10): 888~ 893
- [ 13 ] J. Kong, Z. Yu and Z. Yang, Stable and fast simulation of semiconductor lasers, Physics and simulation of optoelectronic devices VI, San Jose, CA, USA, Jan, 1998, SPIE vol 3283
- [ 14 ] P. S. Zory, Ed., Quantum well lasers, Boston: Academic Press, 1993
- [ 15 ] P. L. Derry, A. Yariv, K. Y. Lau *et al.*, Appl Phys Lett., 1987, **50**: 1773~ 1775.

## POET: A Self-consistent Two-dimensional Simulator for Semiconductor Quantum Well Lasers

Kong Jun, Zhang Wenjun, Yang Zhilian

(Tsinghua University, Institute of Microelectronics, Beijing 100084)

Received 16 June 1998, revised manuscript received 31 August 1998

**Abstract** A self-consistent two-dimensional simulator for semiconductor quantum well lasers, POET, is developed. We have described the basic model, program flow and some major features. A GRN-SCH-BH SQW laser is simulated as demonstration.