

一个 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的折射率模型*

孔 军 张文俊 杨之廉

(清华大学微电子所 北京 100084)

摘要 我们开发了一个高纯 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的室温折射率模型, 适用于直接禁带以上和以下部分, 并在禁带处连续. 对与 1.2 和 1.8eV 之间的能量的光子, 模型与实验符合得很好. 该模型也可推广到 GaInAsP 等其它半导体材料

EEACC: 4110, 2520D

1 引言

在半导体激光器的研究当中, 常要了解谐振腔中的光场分布情况, 而光场分布是由场方程来描述的. 为了求解场方程, 必须给出光学介电常数的分布. 我们知道, 许多因素, 如温度、自由载流子吸收以及光子能量的变化等都会影响材料折射率的数值. 由于激光器物理机制的复杂性, 通常, 对折射率要做简化的处理, 但相应对光限制因子等带来了较大的误差. 因此在半导体激光器的数值模拟以及其它一些应用当中, 希望对折射率有一个精度尽可能高的描述, 同时又不需要巨大的计算开销.

虽然 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 是最常用的激光器材料之一, 但是对于直接禁带宽度以上能量的光子, 一直没有这样一个令人满意的折射率模型. 这正是有源区中的情形, 在这里折射率的确定是十分重要的.

由 Wemple 和 DiDomenico 提出的有效单振子模型 (single-effective-oscillator model)^[1] 在光子能量远小于直接禁带时, 可以比较好地表示 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 及其它许多材料. 当光子能量小于直接禁带并接近于直接禁带时, Afromowitz 给出了一个半经验模型可以较好的描述 GaAs 的折射率^[2]. 他还给出了一个插值方法, 用来计算 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的折射率. 但是, 他的模型依然只在直接禁带以下才有效.

我们在这个模型的基础上采用了更合理的近似, 引入了介电常数虚部在禁带宽度处的连续谱, 并且使用了一种更严格的推导方法, 从而得到了一个新的折射率模型, 它不仅适用于禁带以下, 而且可适用于禁带以上能量的光子, 并在禁带处连续, 模型与实验数据符合得很好. 许多其它的半导体材料, 如 GaInAsP 也可以用类似的方法来处理.

* 国家自然科学基金资助, 项目号 69476025

孔 军 男, 1970 年出生, 博士生, 从事半导体光电子器件的计算机模拟的研究

杨之廉 男, 1934 年出生, 教授, 研究方向为集成电路 CAD, 着重于器件的模型与模拟

1998-06-16 收到, 1998-09-14 定稿

2 模型

介电常数的实部 ϵ_1 , 可以通过著名的 Kramers-Kronig 关系与虚部 ϵ_2 联系起来

$$\epsilon_1(E) - 1 = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{E' \epsilon_2(E') dE'}{E'^2 - E^2} \quad (1)$$

我们用下面的方式近似虚部 ϵ_2 ,

$$\epsilon_2(E) = \begin{cases} \eta E_{\Gamma}^4 \left(\frac{E - E_s}{E_{\Gamma} - E_s} \right)^2 & E_s < E < E_{\Gamma} \\ \eta E^4 & E_{\Gamma} < E < E_f \\ 0 & \text{其它} \end{cases} \quad (2)$$

这里 E 是光子能量; E_{Γ} 是直接禁带. 与 Afromowitz 的方法不同的是, 该近似在 E_{Γ} 处是连续的, 与实际的 ϵ_2 谱更加接近. 将(2)代入(1), 推导可得下面折射率的公式

$$n^2 - 1 = \frac{\eta}{2\pi} (E_f^4 - E_{\Gamma}^4) + \frac{\eta}{\pi} (E_f^2 - E_{\Gamma}^2) E^2 + \frac{\eta}{\pi} E^4 \times \ln \left| \frac{E_f^2 - E^2}{E_{\Gamma}^2 - E^2} \right| + \frac{2\eta E_f^4}{\pi (E_{\Gamma} - E_s)^2} \times \left[\frac{(E_{\Gamma} - E_s)(E_{\Gamma} - 3E_s)}{4} + \frac{E^2 + E_s^2}{2} \ln \left| \frac{E_f^2 - E^2}{E_s^2 - E^2} \right| - E_s E \left(\ln \left| \frac{E_{\Gamma} - E}{E_s - E} \right| - \ln \frac{E_{\Gamma} + E}{E_s + E} \right) \right] \quad (3)$$

在这个模型中有四个参数, 即 η , E_f , E_s 和 E_{Γ} . 以下主要讨论如何确定这四个参数. E_{Γ} 即直接禁带, 可采用通常的插值公式^[2]

$$E_{\Gamma} = 1.424 + 1.266x + 0.26x^2 \quad (4)$$

这样还有三个描述 ϵ_2 谱的参数需要决定. E_s 定义为 ϵ_2 下降到 E_{Γ} 处的 5% 时的光子能量, 这样可以使公式(2)中的第一项所定义的 ϵ_2 谱的形状在禁带边缘处与实验数据符合得比较好^[3].

$$E_s = E_{\Gamma} - 0.21 \quad (5)$$

η 和 E_f 的决定用到了有效单振子模型在光子能量远小于禁带宽度时与实验很符合的性质. 取有效单振子模型, 折射率 n 有

$$n^2 - 1 = \frac{E_0 E_d}{E_0^2 - E^2} \quad (6)$$

对 GaAs, E_0 是 3.65, E_d 是 35.97. 它们是用 Afromowitz 的方法来决定的, 不过这里参数 E_d 用了更加精确的值. 展开(6), 取前两项

$$n^2 - 1 = M_0 + M_2 E^2 \quad (7)$$

$$M_0 = \frac{E_d}{E_0}, \quad M_2 = \frac{E_d}{E_0^3}$$

其中 M_0 和 M_2 分别是零阶和二阶项的系数. 因为有效单振子模型在能量远低于带宽时是相当精确的, 令(3)和(7)的相似项相等, 则可以得到参数 η 和 E_f .

接着是分离出(3)的对应的低阶项. 要注意的是, 在推导时不要展开对数项, 这会容易导致精度损失. 对(3), 可推出如下的相对于光子能量 E 的零阶和二阶项的系数

$$M_0 = \frac{\eta}{2\pi} (E_f^4 - E_{\Gamma}^4) + \frac{\eta}{\pi} \alpha_0 \quad (8)$$

其中

$$\alpha_0 = \frac{2E_{\Gamma}^4}{(E_{\Gamma} - E_s)^2} \left(E_s^2 \ln \frac{E_{\Gamma}}{E_s} + \frac{1}{2} (E_{\Gamma} - E_s) (E_{\Gamma} - 2E_s) \right) \quad (9)$$

$$M_2 = \frac{\eta}{\pi} (E_f^2 - E_{\Gamma}^2) + \frac{\eta}{\pi} \alpha_0 \quad (10)$$

其中

$$\alpha = \frac{2E_{\Gamma}^4}{(E_{\Gamma} - E_s)^2} \left(\ln \frac{E_{\Gamma}}{E_s} + \left(\frac{E_s}{E_{\Gamma}} - 1 \right) \left(3 - \frac{E_s}{E_{\Gamma}} \right) \right) \quad (11)$$

这样, E_f 和 η 是(7)~(11)的解

$$E_f = \sqrt{E_0^2 + \sqrt{(E_0^2 - E_{\Gamma}^2)^2 + 2(\alpha_0 E_0^2 - \alpha_0)}} \quad (12)$$

$$\eta = \frac{2\pi E_d / E_0}{E_f^4 - E_{\Gamma}^4 + 2\alpha_0} \quad (13)$$

显然, η 与 E_d 成正比. 从(3), 我们知道 η 是 E 的高阶项的系数. 换句话说, 对高能量的光子, 模型对 η 敏感. 这也是为什么我们要比较精确地决定(6)中 E_d 的原因.

对于 GaAs, 按照(12)和(13), 可得 E_f 是 4.966, η 是 0.10249.

把这个折射率模型应用于 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$. E_s 用与 GaAs 相同的方式表示. E_0 和 E_d 的插值法分别为^[2]

$$E_0 = 3.65 + 0.871x + 0.179x^2 \quad (14)$$

$$E_d = 35.97 - 2.32x \quad (15)$$

将它们代入(12)和(13)可得到 E_f 和 η 实际上根据上面的方程, E_f 和 η 曲线可作为 Al 含量 x 的函数画出来. 然后用多项式来拟合, 即可得到如下公式

$$E_f = 4.966 + 0.929x + 0.071x^2 \quad (16)$$

$$\eta = 0.10249 - 0.105x + 0.05169x^2 - 0.01144x^3 \quad (17)$$

这样, 最后的模型由(3), (4), (5), (16)和(17)组成.

3 结果与讨论

图 1 显示了高纯 GaAs 在 1.2 和 1.8eV 之间的折射率. 实线代表实验数据^[4]. 虚线代表我们的模型, 可以看到模型与实验符合得非常好, 误差小于 0.005. 甚至两个峰也很接近.

图 2 中作出了 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的折射率的模型与实验^[5]的曲线. 图中用 x_{PL} 表示的 Al 含量是用测量光致发射峰值位置得到的, 误差一般取为 0.02. 与 Afromowitz 的办法相同, x_c 表示在模型中所用的是与实验最佳拟合的 Al 含量. 这里 x_c 与 x_{PL} 的不一致是在 x_{PL} 的测量误差范围内的.

计算所得曲线较大的峰, 是由于公式(2)中通过公式(5)所定义的 ϵ 谱的在禁带处的渐变形状在应用于 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 时的精度不如 GaAs. 通过改进的 ϵ 谱的形状定义, 应该可以获得更好的近似.

有意思的是对于 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$, 在过了峰值区之后, 计算值略小于实验值. 能量越高, 这个分离越大. 这个现象可解释如下: 由于 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的实验数据引入了一个与消光系数有关的近似, 使得折射率的测量值比实际要稍大一些^[4,5]. 另外, 我们的模型也简单地把折射率

定义为介电常数的实部 ϵ_1 的平方根, 这使折射率的计算值要稍大一些 两个效应都对图 1 中的移动有贡献 估计前者更为重要, 后者在这里是可以忽略的 图 2 中的实验数据是已经修正过的, 所以我们能看到极好的拟合

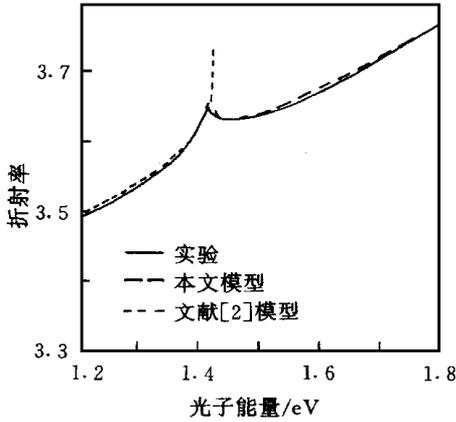


图 1 GaAs 折射率曲线
这里提出的模型与实验值符合得很好

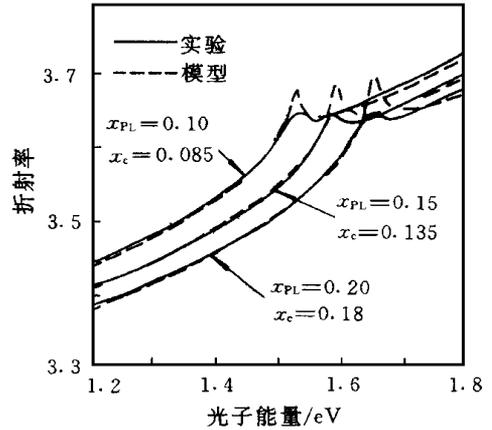


图 2 Ga_{1-x}Al_xAs 折射率曲线
 x_{PL} 是实验确定的 Al 含量, x_c 是模型中采用的
与实验数据最佳拟合的值

4 小结

在半导体激光器的模拟器的研究与开发方面的工作中, 我们认识到开发一个便于计算同时又有足够精度的折射率模型的需要, 并且提出了一个高纯 Ga_{1-x}Al_xAs 的室温折射率模型, 适用于直接禁带以上和以下部分, 并在禁带处连续 对与 1.2 和 1.8eV 之间的能量的光子, 模型与实验符合得很好. 该模型也可推广到 GaInAsP 等其它半导体材料

参 考 文 献

[1] S. H. Wemple and M. DiDomenico, Phys Rev. , 1971, **B3**: 1388~ 1351.
 [2] M. A. Afromowitz, Solid State Commun. , 1974, **15**: 59~ 63.
 [3] E. D. Palik, Ed. , Handbook of Optical Constants of Solids, Academic Press: Orlando, 1985.
 [4] D. D. Sell, H. C. Casey and K. W. Wecht, J. Appl Phys. , 1974, **45**: 2650~ 2657.
 [5] H. C. Casey, D. D. Sell and M. Panish, Appl Phys Lett. , 1974, **24**: 63~ 65.

A Refractive Index Model for $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$

Kong Jun, Zhang Wenjun, Yang Zhilian

(*Institute of Microelectronics, Tsinghua University, Beijing 100084*)

Received 16 June 1998, revised manuscript received 14 September 1998

Abstract We have developed a refractive index model of high purity $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ at room temperature, which is valid both below and above the direct band edge, and continuous at the direct band edge. The model is in good agreement with the experimental data for photon energies between 1.2 and 1.8 eV. It can be extended to other semiconductor materials such as GaInAsP .

EEACC: 4110, 2520D