

第 1 章 半导体中光子-电子的相互作用

1.1 半导体中量子跃迁的特点

在光电子学中，一切与光有关的现象从本质上都可以认为是量子现象，或者说是物质中有关量子相互作用和能量相互转换的结果，都是与量子跃迁联系在一起的。与通常两能级系统中跃迁发生在分立能级的单个电子态之间的情况不同，在半导体中与光有关的量子（电子或空穴，统称为载流子）跃迁一般发生在导带与价带之间。与这种跃迁相联系的光现象有以下三种。

(1) 受激吸收：当适当能量的光子与半导体相互作用，并把能量传递给价带中的电子，使之跃迁到导带，从而在半导体中产生电子-空穴对，这就是受激吸收，也是光电导、光探测器的工作原理，如图 1.1-1(a)所示。

(2) 自发发射：在热平衡下，如果在半导体的导带与价带中分别有一定数量的电子与空穴，导带中电子以一定的几率与价带中空穴复合并以光子形式放出复合所产生的能量，则称这一过程为自发发射跃迁，这是半导体发光二极管（LED）的工作原理，如图 1.1-1(b)所示。即使在半导体激光器中也可能存在一定比例的自发发射分量。

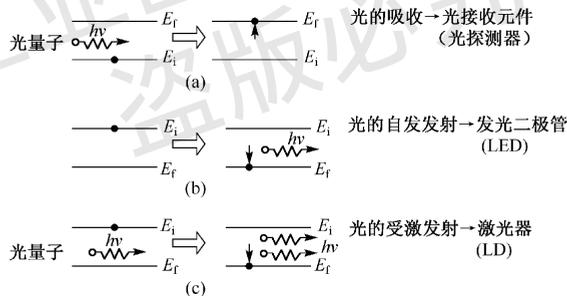


图 1.1-1 在半导体中与跃迁有关的三种光效应

(E_i 为跃迁初态能量, E_f 为跃迁终态能量)

(3) 受激发射：若上述导带电子与价带空穴复合过程不是自发的，而是在适当能量的光子激励下进行的，则由复合产生的光子就与激发该过程的光子有完全相同的特性（包括频率、相位和偏振等），这种跃迁过程称为受激发射。这是半导体激光器（LD）、半导体光放大器（SOA）的工作原理，如图 1.1-1(c)所示。

显然，上述三种过程是相互联系但又有区别的。受激吸收与受激发射是互逆的跃迁过程，而受激发射与自发发射的区别在于这种辐射跃迁中是否有外来光子的参与。而且，在实际的光电子器件中，有可能存在上述一种或并存两种、三种跃迁过程，只是在一定条件下某一跃

迁过程占主导地位罢了。以后还将看到，一些常用的半导体激光器、发光二极管和半导体光探测器在材料和结构上有一些共同的基础。事实上，半导体激光器在一定工作条件下（例如在零偏压下）可用来作光探测器；而在半导体激光器芯片解理面完全增透的情况下，依偏置电流的大小将呈现出自发发射或超辐射的特性。

正是由于半导体中的量子跃迁不是发生在分立的、有限的电子态之间，而是发生在（准）连续能级的导带与价带之间，因而使半导体在光电子学中有异于通常两能级激光模型的突出特点和重要地位：

（1）半导体能带中存在高的电子态密度，因而在半导体中有可能具有很高的量子跃迁速率。可以得到比其他气体或固体激光工作物质高几个数量级的光增益系数（如体材料可达 10^2cm^{-1} ，量子阱材料可达 10^3cm^{-1} 量级）。

（2）在半导体同一能带内处在不同激励状态的电子态之间存在相当大的相互作用（或有化运动），这种相互作用碰撞过程的时间常数与辐射过程的时间常数相比是很短的，因而能维持每个带内激励态之间的准平衡。一旦出现电子跃迁留下的空态，将迅速由其他原来未包括在跃迁过程中的电子所补充，这种载流子通过带内松弛的再分布过程几乎是瞬时完成的。因此，半导体激光器或其他半导体光电子器件有很高的量子效率和很好的高频响应特性。

（3）半导体中的电子态可以通过扩散或漂移运动在材料中传播，可以将载流子直接注入发光二极管或激光器的有源区中，因而有很高的能量转换效率。

（4）在两能级的激光系统中，每一处于激发态的电子有它唯一返回的基态（即某一特定的原子态）。在理想的本征半导体（或电离能非常小的杂质半导体）中，这一跃迁选择定则还能成立，即每一被激发到导带的电子，存在唯一允许它返回的价带态。而实际上，由于半导体材料本身不纯或在载流子之间存在互作用，跃迁选择定则受到扰动而变得不严格，电子跃迁发生在大量的导带电子与价带空穴之间。这种结果所造成的影响之一是使半导体激光器的光谱线宽较宽。

以上所述的只是半导体中与量子跃迁有关的一些特点。至于跃迁所需遵守的定则、跃迁速率及其影响因素将在以下各节详细分析。

1.2 直接带隙与间接带隙跃迁^[1]

1.2.1 概述

1.1 节所述的电子在半导体能带之间的跃迁过程，实质上是非平衡载流子的产生与复合过程。跃迁速率取决于与跃迁有关的初态、终态的细节。按照量子力学原理，半导体中的电子态是用与晶格周期有关的波函数来描述的，其电子的波矢量 \mathbf{k} 是一个重要的状态变量。一般来说，半导体能带中电子的能量 E 和波矢量 \mathbf{k} 之间是一个非常复杂的、多极值的关系，并表现出复杂的能带结构，参见附录 B：半导体的电子能带结构。半导体的能带结构因材料而异，图 1.2-1 表示出 Ge、Si 和 GaAs 三种半导体的能带结构（ $E\sim\mathbf{k}$ 图）。电子的带间跃迁发生在导带和价带之间，如果电子跃迁的初、终态对应着布里渊区的同一波矢量 \mathbf{k} ，则在能带图上表现为竖直方向的跃迁，故称这种跃迁为竖直跃迁，如同电子在 GaAs 等多数 III~

V 族和 II-VI 族化合物半导体中跃迁的情况；相反，若跃迁所涉及的初、终态不对应同一波矢量 k ，且其差值大于晶格常数的倒数，则由能带图可以看出，电子在导带极小值与价带极大值之间的跃迁为非垂直方向，因而得名非垂直跃迁，电子在 Ge、Si 中的跃迁就属于这种情况。GaAs 等多数半导体中的垂直跃迁对应着布里渊区的中心点 (Γ)，此处的 $k=0$ 。而另一些垂直跃迁半导体（如 IV-VI 族化合物）则有多个导带能量最小值和价带能量最大值与布里渊区中心呈对称分布，这种简并态使同一 k 值的态密度增加。

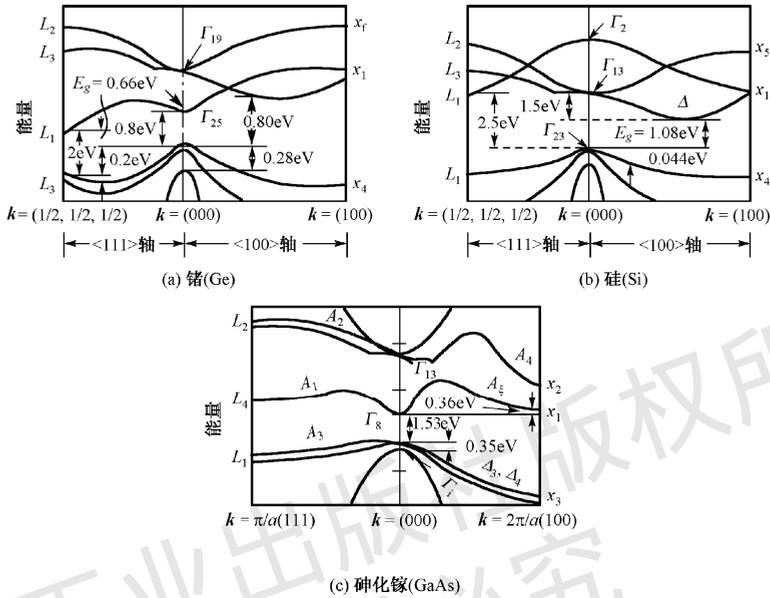


图 1.2-1 Ge, Si 和 GaAs 的能带图

不管是垂直跃迁还是非垂直跃迁，也不论是吸收光子还是发射光子，量子系统总的动量和能量都必须守恒，这就叫跃迁的 k 选择定则。设与电子跃迁有关的初态能量和动量分别为 E_i 和 $\hbar k_i$ ，而终态的能量和动量分别为 E_f 和 $\hbar k_f$ ，进一步假设跃迁过程只涉及一个光子，以 $E_i > E_f$ （电子从导带高能态跃迁到价带低能态）为例，上述能量和动量守恒定律可表示为

$$E_i - E_f - \hbar\nu = 0 \quad (1.2-1)$$

$$\hbar(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_p) = 0 \quad (1.2-2)$$

式中， $\hbar\nu$ 为光子的能量， $\hbar\mathbf{k}_p$ 为光子的动量。光子的波数是很小的，如波长为 $1\mu\text{m}$ 时， $k_p \approx 6 \times 10^4 \text{ cm}^{-1} \ll \pi/a$ （ π/a 为布里渊区边界的波数， a 为晶格常数），因而可以将光子的动量忽略不计。由式 (1.2-2) 有 $\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_f$ ，这正是垂直跃迁的表述。由式 (1.2-1) 和式 (1.2-2) 所表示的能量和动量守恒定律只适合于仅有电子、空穴和光子这三种量子参与的垂直跃迁。因为这种守恒是它们之间直接的、自持的平衡，故又称垂直跃迁为直接带隙跃迁或直接跃迁。从量子力学的观点来看，这种跃迁属一级微扰过程，因而有较高的跃迁几率，所有高效率半导体光辐射器件（LD 和 LED）的有源区材料必须选用直接带隙半导体材料。

对于间接带隙半导体材料，其导带底与价带顶的位置对应不同的 k 值，则发生在导带底与价带顶之间的跃迁就不遵守由式 (1.2-2) 所表示的准动量守恒，但实验上却观察到电子由价带顶到导带底跃迁所引起的吸收，所以一定有另外的过程存在，它使得电子跃迁的初态和

终态不为同一 k 值时仍能满足准动量守恒，这就是有声子参与的吸收与发射过程。由于多声子过程较单声子过程发生的几率小得多，故在此只考虑单声子参与的跃迁过程。如果令声子的波矢量为 \mathbf{k}_s ，这时的准动量守恒变为

$$\hbar(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_p \pm \mathbf{k}_s) = 0 \quad (1.2-3)$$

如果略去光子的动量，则有

$$\hbar(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f \pm \mathbf{k}_s) = 0 \quad (1.2-4)$$

与此过程相对应的能量守恒为

$$(E_i - E_f - \hbar\nu \pm \hbar\omega_s) = 0 \quad (1.2-5)$$

式中， $\hbar\omega_s$ 表示声子的能量，声子实质是晶格热振动能量的量子化形成的微观粒子。符号“ \pm ”有双重意义，由于跃迁过程是导带电子跃迁到价带并发射光子，则上式中的负号表示发射声子，正号表示吸收声子，如图 1.2-2(a)所示。若跃迁过程是由吸收光子所激发的电子由价带到导带的跃迁（受激吸收），如图 1.2-2(b)所示，则有声子参与的能量和动量守恒关系与式(1.2-4)和式(1.2-5)类似，这里不再赘述。与前面的直接带隙跃迁相比，这种有声子参加才满足准动量守恒的跃迁被称为间接带隙跃迁或间接跃迁，由于除光子外还有声子参与电子和空穴之间的跃迁过程，因此有四种量子参与这种跃迁过程，属二级微扰过程，其跃迁几率比前面所述的一级微扰过程小得多。因此，不能用间接带隙半导体材料来做半导体激光器或发光二极管的有源材料。无疑，对理想的半导体光电探测器，其吸收区也宜用直接带隙半导体材料。但对于声子 $\hbar\omega_s$ 所参与的跃迁过程，只要入射光子的能量 $\hbar\omega > E_g$ (E_g 为半导体材料的禁带宽度或带隙)，那么价带内距价带顶能量范围为 $(\hbar(\omega \pm \omega_s) - E_g)$ 的电子以及导带内距导带底能量范围为 $(\hbar(\omega \pm \omega_s) - E_g)$ 的电子空态都能参与跃迁，这就使参与跃迁的状态范围扩大，这在一定程度上弥补了间接带隙跃迁几率小的因素，而使总的跃迁几率并不太小。基于这点，目前硅是在短波段 ($0.6 \sim 1.0 \mu\text{m}$)、锗是在长波段 ($1.0 \sim 1.7 \mu\text{m}$) 可用的光探测器的光吸收材料。

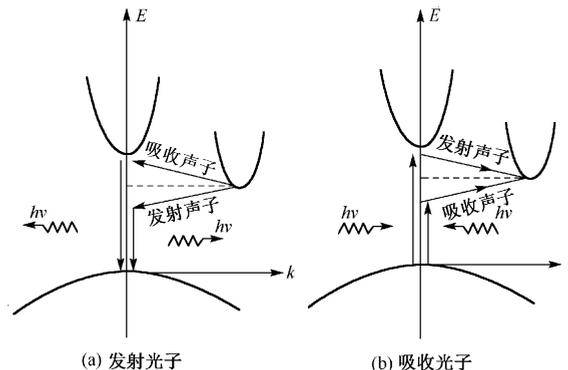


图 1.2-2 间接带隙跃迁

1.2.2 电子在能带之间的跃迁几率^[2, 3]

为了更深刻地理解电子在半导体能带之间跃迁的特点，有必要了解上述两种跃迁的几率，它是决定电子在半导体能带之间产生受激跃迁和自发辐射跃迁速率的一个基本量。决定跃迁

几率的基本出发点是考虑到与半导体中电子相互作用的辐射场是一个随时间周期变化的函数, 因此, 处理半导体中电子与光子相互作用的量子力学系统时要使用与时间有关的微扰论。为此, 首先要确定包括微扰 (把辐射场看成是微扰) 在内的描述量子力学系统能量的哈密顿量和描述该系统信息的波函数, 再求解与时间有关的薛定谔方程 (参见附录 A: 薛定谔方程与一维方势阱), 从而得出电子在辐射场作用下跃迁几率的大小。

电子在辐射场中所受到的力是非保守力, 即它所做的功不仅与力的大小有关, 还与路径有关。因此用矢量场而不用标量场来表示辐射场。设辐射场的矢量势为 \mathbf{A} , 受到其微扰的量子力学系统的哈密顿量可表示为

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m_0} (\mathbf{P} - e\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}) \quad (1.2-6)$$

式中, m_0 为自由电子质量, \mathbf{P} 为电子的动量, 相应的动量算符 $\mathbf{P} = -j\hbar\nabla$, 其中 ∇ 是熟知的劈形或梯度算符, $V(\mathbf{r})$ 为随空间坐标 \mathbf{r} 变化的晶格周期势。对于散度 $\text{div}\mathbf{A} = 0$ 的电磁场, 交换律 $\mathbf{P}\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{P}$ 成立。将式 (1.2-6) 展开, 可以将辐射电磁场与电子互作用的哈密顿量写为

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{j e \hbar}{m_0} \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2 \mathbf{A}^2}{2m_0} \quad (1.2-7)$$

如果忽略含 \mathbf{A}^2 的非线性项, 并与本征量子力学 (未受微扰) 的哈密顿量 $\mathbf{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$ 比较就可得到微扰势 \mathbf{H}' 为

$$\mathbf{H}' = \frac{j e \hbar}{m_0} \mathbf{A} \cdot \nabla \quad (1.2-8a)$$

或者

$$\mathbf{H}' = -\frac{e}{m_0} \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} \quad (1.2-8b)$$

现在就可以将式 (1.2-8) 定义为系统互作用哈密顿量。令矢量势为空间和时间的函数, 并表示为

$$\mathbf{A} = A_0 \mathbf{a} \exp[j(\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (1.2-9)$$

式中, A_0 为矢量势场的振幅, \mathbf{k}_p 为辐射光场的波矢, ω 为辐射场的角频率, \mathbf{a} 为单位矢量。为了求出 A_0 , 利用场论知识可以合理地将矢量势与电场强度 \mathbf{E} 的关系表示为

$$-\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \mathbf{E} \quad (1.2-10)$$

其中电场强度 \mathbf{E} 为

$$\mathbf{E} = eE_0 \exp[j(\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (1.2-11)$$

式, e 为电场的单位矢量, 所以式 (1.2-9) 可写为

$$\mathbf{A} = \frac{E_0}{j\omega} \mathbf{a} \exp[j(\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (1.2-12)$$

因而有

$$|A|^2 = |A \cdot A^*| = \left(\frac{E_0}{\omega} \right)^2 \quad (1.2-13)$$

为了进一步表示 A_0 , 需计算电场强度 E_0 。为此, 可将坡印廷矢量与光子通量联系起来。坡印廷矢量的时间平均为

$$\langle S \rangle = \frac{1}{2} \text{Re}(E \times H^*) \quad (1.2-14)$$

式中, H^* 为磁场强度矢量的共轭 (注意不要与哈密顿算符的表示混淆), 它可由电场强度矢量利用麦克斯韦方程求得

$$H = \left(\frac{a_{\perp} E_0 k_p}{\mu_0 \omega} \right) \exp[j(k_p \cdot r - \omega t)] \quad (1.2-15)$$

式中, a_{\perp} 是与 a 垂直的单位矢量, $k_p = \bar{n}\omega/c$, c 为真空中的光速, \bar{n} 为半导体材料的折射率, μ_0 为真空中的磁导率。将式 (1.2-11) 和式 (1.2-15) 代入式 (1.2-14) 后得到

$$\langle S \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{E_0^2 k_p}{\mu_0 \omega} \right) \quad (1.2-16)$$

另外, 光子通量是光子能量 $\hbar\omega$ 与其群速 (c/\bar{n}) 之积, 而 $c^2 = 1/(\mu_0 \epsilon_0)$, ϵ_0 为真空中的介电常数, 因而有

$$\frac{\hbar\omega c}{\bar{n}} = \frac{1}{2} \bar{n} \epsilon_0 E_0^2 c \quad (1.2-17)$$

由式 (1.2-13) 和式 (1.2-17) 可以得到

$$|A|^2 = \frac{2\hbar}{\epsilon_0 \bar{n}^2 \omega} \quad (1.2-18)$$

因此, 可以将 A 最后表示为

$$A = a \left(\frac{2\hbar}{\epsilon_0 \bar{n}^2 \omega} \right)^{1/2} \exp[j(k_p \cdot r - \omega t)] \quad (1.2-19)$$

将式 (1.2-19) 代入式 (1.2-8b), 便得到辐射场与半导体中电子互作用的哈密顿量为

$$H' = -a \frac{e}{m_0} \left(\frac{2\hbar}{\epsilon_0 \bar{n}^2 \omega} \right)^{1/2} \exp[j(k_p \cdot r - \omega t)] \cdot P \quad (1.2-20)$$

在得到相互作用哈密顿量以后, 下一步便是要找到描述该量子系统的波函数。所有在晶格周期势场中运动的电子的波函数, 都可以表示为反映晶格周期特点的布洛赫函数 $u(\mathbf{r})$ 和具有某一波矢 \mathbf{k} 的平面波函数之积, 即反映出晶体中的电子波函数为周期函数 $u(\mathbf{r})$ 所调制的自由电子波函数的物理意义 (参见附录 B: 半导体的电子能带结构)。先考虑在某一体积 V 内只有单个电子和空穴—在能带之间跃迁的简单情况。设跃迁的初态用导带电子波函数 $\Psi_2(\mathbf{r})$ 表示, 跃迁的终态用价带空穴波函数 $\Psi_1(\mathbf{r})$ 表示, 两者都归一化到体积 V , 这种对初、终态的假设是无关紧要的。事实上, 后面将看到如令电子从价带跃迁到导带, 其跃迁几率和相反过程的跃迁几率是相同的。

$$\Psi_2(\mathbf{r}, t) = V^{-1/2} u_2(\mathbf{r}) \exp[(\mathbf{k}_c \cdot \mathbf{r} - \omega_2 t)] \quad (1.2-21)$$

$$\Psi_1(\mathbf{r}, t) = V^{-1/2} u_1(\mathbf{r}) \exp[\mathbf{k}_v \cdot \mathbf{r} - \omega_1 t] \quad (1.2-22)$$

至此，已求得了相互作用哈密顿量 \mathbf{H}' 和有关的波函数。将它们代入薛定谔方程求解即得到跃迁几率 B_{21} ，这也就是著名的费米“黄金准则”，表示为

$$B_{21} = \frac{\pi}{2\hbar} \left| \langle \Psi_2^*(\mathbf{r}, t) | \mathbf{H}' | \Psi_1(\mathbf{r}, t) \rangle \right|^2 \quad (1.2-23)$$

将式 (1.2-20)、式 (1.2-21) 和式 (1.2-22) 代入式 (1.2-23) 便得到

$$\begin{aligned} B_{21} = & \frac{\pi}{2\hbar} \left| \langle V^{-1/2} u_2^*(\mathbf{r}) \exp[\mathbf{j}(-\mathbf{k}_c \cdot \mathbf{r} + \omega_2 t)] \right. \\ & \times \left[-\mathbf{a} \times \frac{e}{m_0} \left(\frac{2\hbar}{\epsilon_0 \bar{n}^2 \omega} \right)^{1/2} \exp[\mathbf{j}(\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \cdot \mathbf{P} \right. \\ & \left. \left. \times V^{-1/2} u_1(\mathbf{r}) \exp[\mathbf{j}(\mathbf{k}_v \cdot \mathbf{r} - \omega_1 t)] \right] \right|^2 \end{aligned} \quad (1.2-24)$$

考虑到动量算符 $\mathbf{P} = -j\hbar\nabla$ ，而其中梯度算符 ∇ 是沿电磁场电矢量方向，同时取光的偏振方向平行于 \mathbf{k}_v ，则可列出在外光场作用下导带电子向价带跃迁的几率为

$$\begin{aligned} B_{21} = & \frac{\pi e^2 \hbar}{m_0^2 \epsilon_0 \bar{n}^2 \hbar \omega} \left| \left\langle \frac{\hbar}{2\pi j} V^{-1} \exp[\mathbf{j}(\omega_2 - \omega_1 - \omega)t] \right. \right. \\ & \left. \left. \times \exp[\mathbf{j}(\mathbf{k}_p - \mathbf{k}_c + \mathbf{k}_v) \cdot \mathbf{r}] u_2^*(\mathbf{r}) (\mathbf{j}\mathbf{k}_v + \nabla) u_1(\mathbf{r}) \right\rangle \right|^2 \end{aligned} \quad (1.2-25)$$

当光辐射场与半导体中电子发生共振相互作用时，即满足 $\omega = \omega_2 - \omega_1$ ，则上式括号中第一个指数变为 1。由式 (1.2-25) 还可以看到，当满足

$$\mathbf{k}_p - \mathbf{k}_c + \mathbf{k}_v = 0 \quad (1.2-26)$$

时，则括号中第二个指数也变为 1，这时括号中就有非零值。然而式 (1.2-26) 正是竖直跃迁动量守恒表示式 (1.2-2) 的另一种具体表述。这就从理论上证明，只有当半导体中的电子在辐射场作用下满足动量守恒 (k 选择定则) 所产生的跃迁才有最大的跃迁几率。

式 (1.2-25) 中符号 $\langle \dots \rangle$ 中的乘积常被称为跃迁矩阵元或动量矩阵元，并用 M 表示。基于电子与辐射场所产生的竖直共振跃迁，则 M 可变成如下的简单形式：

$$\begin{aligned} M = & \frac{\hbar}{2\pi j} \frac{1}{V} \langle u_2^*(\mathbf{r}) (\mathbf{j}\mathbf{k}_v + \nabla) u_1(\mathbf{r}) \rangle \\ = & \frac{\hbar}{2\pi j} \frac{1}{V} \int u_2^*(\mathbf{r}) (\mathbf{j}\mathbf{k}_v + \nabla) u_1(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \end{aligned} \quad (1.2-27)$$

至此，可将跃迁几率写为

$$B_{21} = \frac{\pi e^2 \hbar}{m_0^2 \epsilon_0 \bar{n}^2 \hbar \omega} |M|^2 \quad (1.2-28)$$

要想从式 (1.2-27) 中得到矩阵元 M 的值，就需知道布洛赫函数的具体形式，在此不详细去研究这些函数，而直接列出凯恩 (Kane) 对直接带隙跃迁 III-V 族化合物半导体动量矩阵元的近似^[4]

$$|M|^2 \approx \frac{m_0^2 E_g}{3m_c} \cdot \frac{1 + \Delta/E_g}{1 + (2/3)\Delta/E_g} \left\{ 1 - \frac{m_c}{m_0} \right\} \quad (1.2-29)$$

式中, m_c 为带导电子的有效质量, E_g 为禁带宽度, Δ 是在 1.6 节中还将讨论的自旋-轨道裂矩带至价带顶的能量大小。以 GaAs 半导体为例, 设 $m_c = 0.067m_0$, $E_g = 1.42\text{eV}$, $\Delta = 0.33\text{eV}$, 将这些值代入式 (1.2-29), 则有

$$|M|_{\text{GaAs}}^2 = 4.96m_0 E_g \quad (1.2-30)$$

将式 (1.2-29) 代入式 (1.2-28), 并令 $h\nu = E_g$, 则可近似得到 III-V 族化合物半导体中电子的辐射跃迁几率为

$$B_{21} = \frac{e^2 h}{6m_c \epsilon_0 \bar{n}^2} \cdot \frac{1 + \Delta/E_g}{1 + (2/3)\Delta/E_g} \left\{ 1 - \frac{m_c}{m_0} \right\} \quad (1.2-31)$$

由上式可以看出, 跃迁几率对 E_g 的依赖性并不很强, 不同半导体中电子跃迁几率的差别在很大程度上取决于电子的有效质量。

对竖直跃迁矩阵元式 (1.2-27) 稍做深入的分析, 我们还将发现在竖直跃迁类型中还存在着允许的和非允许的 (禁戒) 跃迁。将式 (1.2-27) 分解为

$$M = \frac{h}{2\pi j} V^{-1} \left[\int u_2^*(\mathbf{r}) \nabla u_1(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} + j\mathbf{k}_v \int u_2^*(\mathbf{r}) u_1(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \right] \quad (1.2-32)$$

在描述只有空间反演而时间不变的量子力学系统的所谓宇称算符中, 动量算符 ∇ 为奇宇称算符, 即, 当它作用到波函数后, 波函数的奇/偶性或者 +/- 号要改变。所以只有当满足动量守恒式 (1.2-26), 且满足 $u_2^*(\mathbf{r})$ 与 $u_1^*(\mathbf{r})$ 具有相反宇称时才使式 (1.2-32) 中第一项积分不为零。这时所产生的跃迁为允许的竖直跃迁。相反, 若 $u_2^*(\mathbf{r})$ 与 $u_1^*(\mathbf{r})$ 具有相同宇称, 则式 (1.2-32) 中第一项积分为零, 而第二项积分对矩阵元只产生很小的贡献, 因而跃迁几率很小, 这种竖直跃迁为非允许的跃迁。前者对应 GaAs、InP 等半导体中导带极小值与价带极大值均处于 $k = 0$ 的情况, 此时价带是原子的 s 态, 导带是原子的 p 态; 后者对应 Ge 等半导体, 其价带极大值与导带极小值不对应同一 \mathbf{k} 值, 竖直跃迁中导带与价带分别由原子的 d 态和 s 态构成, 这种非允许的直接带隙跃迁几率虽小, 但不为零。有关这方面的问题在 9.1 节中还将详细分析。

1.2.3 电子在浅杂质能级和与其相对的能带之间的跃迁

在掺杂的半导体中, 存在着束缚在局部能级 (施主或受主能级) 上的电子或空穴与相对能带 (即施主能级与价带或受主能级与导带) 中的自由载流子之间发生互作用而产生跃迁。这时, 前面所提到的由动量守恒所得出的严格 k 选择定则被松弛或不再成立, 跃迁矩阵元变成只与能量有关。

束缚电子的波函数可以写成与晶格周期有关的布洛赫函数 $u(\mathbf{r})$ 与类氢原子中的电子态波函数 $\Psi_{\text{env}}(\mathbf{r})$ 之积, 即

$$\Psi_1(\mathbf{r}) = \Psi_{\text{env}}(\mathbf{r}) u_1(\mathbf{r}) \quad (1.2-33)$$

式中, $\Psi_{\text{env}}(\mathbf{r})$ 是一个依指数衰减但相对晶格周期来说变化很缓慢的函数, 其形式为

$$\Psi_{\text{env}}(\mathbf{r}) = \pi^{-1/2} \left(\frac{1}{a^*} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{-r}{a^*} \right) \quad (1.2-34)$$

式中, $a^* = 4\pi\epsilon\hbar^2 / (m^*e^2)$ 是束缚态的有效玻尔半径, m^* 为束缚态的有效质量, ϵ 为介电常数, 对 GaAs 的束缚电子或空穴的有效玻尔半径分别为 100\AA 和 10\AA , 这作为表征电子运动的特征尺寸将在第 6 章用到。

与束缚态相对的能带中自由载流子波函数可以取抛物线能带近似中波矢为 \mathbf{k}_b 的平面波函数。例如, 在不考虑时间因素时, 导带电子的波函数有和式 (1.2-21) 相同的形式, 即

$$\Psi_2(\mathbf{r}) = V^{-1/2} u_2(\mathbf{r}) \exp(j\mathbf{k}_b \cdot \mathbf{r}) \quad (1.2-35)$$

式中, $u_2(\mathbf{r})$ 为抛物线能带的布洛赫函数。至此, 就可将杂质能级与相对能带之间的跃迁矩阵元写为

$$M_{\text{bi}} = V^{-1/2} \int_V \Psi_{\text{env}}^*(\mathbf{r}) u_1^*(\mathbf{r}) \mathbf{P} u_2(\mathbf{r}) \exp(j\mathbf{k}_b \cdot \mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (1.2-36)$$

式中, \mathbf{P} 为动量算符。或者将式 (1.2-36) 写成

$$M_{\text{bi}} = V^{-1/2} \langle u_1^*(\mathbf{r}) | \mathbf{P} | u_2(\mathbf{r}) \rangle \int_V \Psi_{\text{env}}^*(\mathbf{r}) \exp(j\mathbf{k}_b \cdot \mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (1.2-37)$$

式 (1.2-37) 中的积分为矩阵元的包络部分, 写做

$$M_{\text{env}} = \int_V \Psi_{\text{env}}^*(\mathbf{r}) \exp(j\mathbf{k}_b \cdot \mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (1.2-38)$$

矩阵元 $\langle u_1^*(\mathbf{r}) | \mathbf{P} | u_2(\mathbf{r}) \rangle$ 是本征带的布洛赫平均矩阵元或带间跃迁矩阵元 M_{bb} 。对 III-V 族化合物半导体的 $|M_{\text{bb}}|^2$ 已由式 (1.2-29) 给出。因此

$$M_{\text{bi}} = M_{\text{bb}} M_{\text{env}} \quad (1.2-39)$$

将式 (1.2-34) 代入式 (1.2-38) 并完成适当的积分后就得到

$$|M_{\text{env}}|^2 = \frac{64\pi a^{*3}}{(1 + a^{*2} k_b^2)^4 V} \quad (1.2-40)$$

当跃迁发生在浅受主能级与导带之间时, 式中 $k_b = (2m_c E_c / \hbar^2)^{1/2}$, 其中 E_c 是从导带底算起的导带电子能量。图 1.2-3 给出了 $|M_{\text{env}}|^2 (V / a^{*3})$ 与 $a^* k_b$ 之间的关系。由图看出, 与跃迁相联系电子可能产生的跃迁主要是与那些 $k_b < 1/a^*$ 的空穴态相关的。因为, k_b 出现在式 (1.2-40) 的分母中, 所以随着较低能量的导带被填满而使这种浅受主能级与导带之间的跃迁几率减小。也就是说, 这种不遵守 k 选择定则的跃迁矩阵元是与能量有关的。随着空穴浓度的增加, 束缚电子的跃迁几率起初成比例地增加, 但随着导带低能级的占满和高能级的 $|M_{\text{env}}|^2$ 趋向零, 总的跃迁 (包括浅受主能级与导带之间的跃迁以及价带与导带之间的跃迁) 几率将趋向一个有限值, 即达到带与带之间的跃迁几率。这就说明, 尽管上面所说是浅受主能级与导带间的跃迁, 但不管是受主还是施主能级, 只要与晶格间距相比所发生的宏观变化仍能用正常晶格波函数描述任何电子或空穴态, 就可用一个结合的矩阵元将它们耦合到相对能带中的所有态, 而该矩阵元最终值总是等于带间矩阵元 M_{bb} 。

这种离化的杂质态向相对能带的跃迁, 对半导体的光吸收将产生影响, 在吸收谱中将出现由此产生的吸收峰, 即使光子能量略小于 E_g , 也能导致光电导。

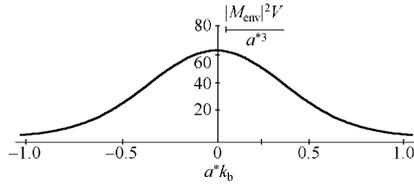


图 1.2-3 束缚电子和相对能带中自由电子之间辐射复合概率与 a^*k_b 的函数关系

1.2.4 重掺杂时的带-带跃迁

早期的同质结半导体激光器为了实现粒子数反转，需对 N 区和 P 区分别掺以浓度高达 $10^{18}/\text{cm}^3$ 的施主杂质和 $10^{17}/\text{cm}^3$ 的受主杂质。此外，几乎在所有的半导体光电子器件中，也需要对与金属接触的半导体材料施以浓度大于 $10^{18}/\text{cm}^3$ 的高掺杂（重掺杂）。当掺杂浓度高到一定程度时，杂质原子外层电子的波函数（按经典说法是外层电子运动的轨道）发生相互交叠而形成杂质能带，当杂质带与本征抛物线能带相接时，就相当于原来的导带或价带长出了一个带尾，相当于带隙变窄，因而光谱变宽。

因为杂质相对于晶格来说是随机分布的，因此，带尾的形成是各杂质电势无规则涨落的结果。处在带尾中的电子或空穴态，既不同于本征带内的电子或空穴态，又区别于处于单个杂质原子上的束缚态，这就需要有另外一种形式的波函数来描述它们，因而也有一种与这种波函数有关的矩阵元来反映涉及与能带尾态跃迁的有关特点。

斯特恩（Stern）^[5]对高掺杂半导体中的跃迁几率作了理论分析，为了反映出在带尾中的半局域电子态的特点，提出了一个既有晶体中电子所具有的周期性特点，又有如束缚电子那样其振幅随距离杂质中心位置指数衰减的波函数（ad hoc 波函数）。和前面描述杂质能级上的束缚电子一样，这种波函数也表示为一个包络函数 Ψ_{env} 与一个布洛赫函数之积，所不同的是 Ψ_{env} 取以下形式：

$$\Psi_{\text{env}} = \left(\frac{\beta^3}{\pi} \right)^{1/2} \exp(j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \exp[-\beta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)] \quad (1.2-41)$$

式中， β 是一个决定波函数从中心点 $\mathbf{r} - \mathbf{r}_i$ 衰减速率的系数， \mathbf{k} 是反映出平面波特点的波矢量。 \mathbf{k} 和 β 可以这样确定，设施主杂质带底以上能量为 E' 的某一特定态的 \mathbf{k} 值等于本征抛物导带底 E_c 以上某一能量为 E^* 的态的 \mathbf{k}_c 值，则有

$$\frac{\hbar^2 k_c^2}{2m_c} = E^* - E_c \quad (1.2-42)$$

$$\frac{\hbar^2 \beta^2}{2m_c} = h_c (E^* - E') \quad (1.2-43)$$

式中， E_c 为本征导带底， m_c 为本征导带电子有效质量， h_c 为与带尾形状有关的拟合因子。

可以用前面所述求单个束缚态跃迁矩阵元方法得出重掺杂下的跃迁矩阵元，只需将由式（1.2-41）所表示的包络函数的共轭复数代替式（1.2-38）中的 Ψ_{env}^* ，然后，在所有波矢量方向上对所有局域波函数中心位置积分，求平均而得出 M_{env} ，所要求的矩阵元同样可表示为

本征带间跃迁矩阵元 M_{bb} 与 M_{cnv} 之积。

图 1.2-4 画出了净受主浓度为 $1.2 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ 的 GaAs 半导体的 $|M_{cnv}|^2 (1 + \rho_c / \rho_v)^{-1}$ 与从本征价带顶向上算起的空穴能量 ($E'' - E_v$ 取正值) 的关系 (ρ_c 和 ρ_v 是后面将谈到的导带和价带的态密度)。图 1.2-4 中虚线表示有效质量小的轻空穴, 实线表示有效质量大的重空穴。显然, 在同样光子能量下, 轻空穴的跃迁几率比重空穴大, 图中画出了三种不同光子能量的情况。随着 ($E'' - E_v$) 的增加, 参与跃迁的空穴移向空穴态密度逐渐减少的杂质带顶, 因而参与跃迁的空穴能量范围变宽, 表现在图 1.2-4 中的曲线随 ($E'' - E_v$) 的增加而变平坦。随着参与跃迁的空穴移向杂质带顶, 激励空穴跃迁所需的光子能量也可以相应减少。反过来说, 随着与跃迁有关的空穴能量的增加而逐渐接近本征价带顶, k 选择定则也逐渐得到加强。

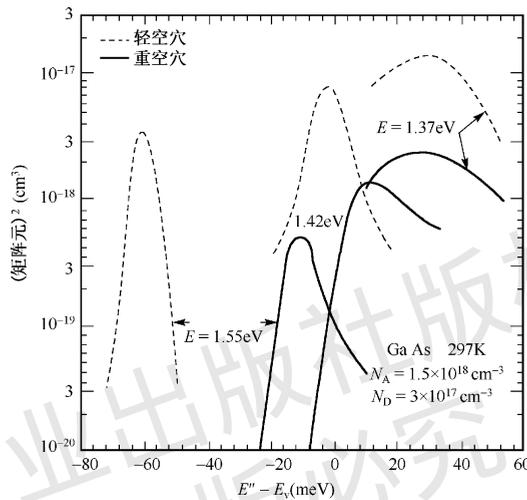


图 1.2-4 GaAs 中由价带至导带的光跃迁包络矩阵元与价带内始态能量的关系

对半导体重掺杂必然会造成大的晶格畸变, 只是早期同质结半导体激光器为实现粒子数反转条件而不得已为之。在现在的半导体光发射器件中只是在 P 型限制层上外延一重掺杂 P 型 (P^+) 层, 以便与 P^+ 层上的金属层形成良好的欧姆接触, 而不涉及光跃迁的过程。

1.3 光子密度分布与能量分布^[6, 2]

既然半导体光电子学涉及的是电子与光子的相互作用, 则了解二者的态密度及其能量分布是基本的, 这关系到电子在半导体能带间的跃迁速率。本节和 1.4 节将分别阐述光子和电子的态密度及其能量分布。与电子相互作用的光场, 即使是单色性好的激光, 光子随能量仍分布在一个有限的光谱范围内。在此用黑体辐射理论分析光子密度分布。

将黑体辐射作为辐射场来分析两能级系统中的量子跃迁特点是由爱因斯坦所确立和被广泛采用的方法。分析表明, 将黑体辐射作为辐射场来分析其与具有能带结构的半导体中电子相互作用所得到的规律并不失其普遍意义。

对于黑体辐射, 要推导的物理量是单位体积、单位频率间隔内的光子数, 即光子密度分布, 这就是普朗克研究黑体辐射时早已得出的黑体辐射公式。在研究光与电子相互作用的问题中所感兴趣的是辐射场某一振荡模式中的辐射 (光子) 密度。在此, 我们将考虑两个通常

使用的描述，即每个模中的辐射密度和单位振荡频率带宽中总的辐射密度。对于后者，在所考虑的辐射腔（谐振腔）中就可包含多个振荡模式。研究黑体辐射能量密度所常用的方法是在辐射场内取出一个立方体来计算该体积内单位体积的态密度。可以用不同的推导方法来得到相同的态密度，差别在于对立方盒内辐射场的特点及形成稳定振荡所需边界条件的处理不同。下面我们用一种结合激光器常用的驻波条件来推导光子态密度。

设辐射腔为一边长为 L 的立方光学谐振腔，取 $L \gg \lambda$ ，从而就会有多个允许的振荡模式在腔内存在。光子在谐振腔内能产生稳定振荡的所谓谐振条件（驻波条件）要求光子在腔内来回一周的光程应等于所传播的平面波波长 λ 的整数倍，可以用波数 k 来表示这三维空间的驻波条件，即

$$k_x = \frac{m\pi}{L}; \quad k_y = \frac{p\pi}{L}; \quad k_z = \frac{q\pi}{L} \quad (1.3-1)$$

式中， m 、 p 和 q 均为正整数，因此每个模所占体积为 $(\pi/L)^3$ 。在以 k_x 、 k_y 和 k_z 为直角坐标系所表示的 k 空间内，代表每一个状态（或模式）的点表示为

$$\mathbf{k} = a\mathbf{k}_x + b\mathbf{k}_y + c\mathbf{k}_z \quad (1.3-2)$$

式中， \mathbf{a} 、 \mathbf{b} 和 \mathbf{c} 分别为三个坐标轴上的单位矢量，在 k 空间中，波数从 $k \rightarrow k + \delta k$ 的球壳体积为 $4\pi k^2 \delta k$ ，因式 (1.3-1) 中 m 、 p 和 q 取正整数，所以我们只需考虑 $1/8$ 球壳内的 k 态数，其值为

$$\begin{aligned} \frac{1}{8} \text{球壳内的态数} &= \frac{1}{8} (4\pi k^2 \delta k) / \left(\frac{\pi}{L} \right)^3 \\ &= \frac{k^2 L^3}{2\pi^2} \delta k \end{aligned} \quad (1.3-3)$$

考虑到光场有 TE 与 TM 两个偏振态，故 $1/8$ 球壳内的总态数应是式 (1.3-3) 的两倍。同时，光子态密度是体积 $V = L^3$ 中单位体积中的态数，因此，光子态密度为

$$dN(k) = \left(\frac{k}{\pi} \right)^2 \delta k \quad (1.3-4)$$

实际上，这里所讨论的并不是一个空腔，而是具有折射率为 \bar{n} 的半导体材料，而在半导体中色散又往往是不能忽略的，所以介质中的波数 k 及其微分 δk 可写为

$$k = \frac{2\pi\bar{n}\nu}{c} \quad (1.3-5)$$

$$\delta k = 2\pi \frac{\bar{n}}{c} \left[1 + \frac{\nu}{\bar{n}} \frac{d\bar{n}}{d\nu} \right] \delta \nu \quad (1.3-6)$$

式中， ν 为光子谐振频率，式 (1.3-6) 方括号内的因子表示折射率色散。还可用光子的能量 $E = h\nu$ 来表示 k 与 δk

$$k = \frac{2\pi\bar{n}E}{hc} \quad (1.3-7)$$

$$\delta k = 2\pi \left[\frac{\bar{n} + E d\bar{n} / dE}{hc} \right] \delta E \quad (1.3-8)$$

将式 (1.3-5) 和式 (1.3-6) 代入式 (1.3-4) 即得

$$dN(\nu) = \frac{8\pi\bar{n}^3\nu^2}{c^3} \left[1 + \frac{\nu}{\bar{n}} \frac{d\bar{n}}{d\nu} \right] d\nu \quad (1.3-9)$$

每个态的平均光子数或每个态为光子所占据的概率服从玻色-爱因斯坦分布:

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp[h\nu_i / (k_B T)] - 1} \quad (1.3-10)$$

式中, k_B 为玻耳兹曼常数。由式 (1.3-9) 和 (1.3-10) 就可给出光子密度分布或单位体积内频率在 ν 与 $\nu + d\nu$ 之间的光子数:

$$dD(\nu) = \frac{8\pi\bar{n}^3\nu^2}{c^3} \cdot \frac{1 + (\nu/\bar{n})(d\bar{n}/d\nu)}{\exp[h\nu/(k_B T)] - 1} d\nu \quad (1.3-11)$$

为了与普朗克黑体辐射公式一致, 常将 (1.3-11) 的光子密度分布以光子能量分布形式给出, 为此, 将普朗克常数 h 引入式 (1.3-11) 后得出:

$$dD(h\nu) = \frac{8\pi\bar{n}^3\nu^2}{hc^3} \cdot \frac{1 + (\nu/\bar{n})(d\bar{n}/d\nu)}{\exp[h\nu/(k_B T)] - 1} h d\nu \quad (1.3-12)$$

有时也把光子密度分布式 (1.3-11) 表示为单位体积内在能量 E 和 $(E+dE)$ 之间的光子数

$$dD(E) = \frac{8\pi\bar{n}^3 E^2}{h^3 c^3} \cdot \frac{1 + (E/\bar{n})(d\bar{n}/dE)}{\exp[E/(k_B T)] - 1} dE \quad (1.3-13)$$

式中, $dE = h d\nu$ 。如果令 $P(E)$ 表示单位体积、单位能量间隔内的光子态密度, 显然有

$$P(E) = \frac{8\pi\bar{n}^3 E^2}{h^3 c^3} \cdot \frac{1 + (E/\bar{n})(d\bar{n}/dE)}{\exp[E/(k_B T)] - 1} \quad (1.3-14)$$

而通常采用的是单位体积、单位频率间隔内的光子能量密度, 则由式 (1.3-12) 有

$$P(h\nu) = \frac{8\pi\bar{n}^3 h\nu^2}{c^3} \cdot \frac{1 + (\nu/\bar{n})(d\bar{n}/d\nu)}{\exp[h\nu/(k_B T)] - 1} \quad (1.3-15)$$

1.4 电子态密度与占据几率^[1, 8]

在半导体导带中的电子和价带中的空穴分布通常可表示为某一能量下电子或空穴的态密度 $\rho(E)$ 与该能态为电子所占据的几率 $f(E)$ 之积, 这类似于上一节所讨论的光子态密度分布。下面还将发现, 在推导电子态密度分布过程中还有一些与前面对光子态密度分布的推导相似之处, 所不同的是电子属费米子, 它受泡利不相容原理所制约。因此, 电子与光子不同, 它服从费米-狄拉克统计分布。

在纯半导体中, 单位能量间隔的态密度是从电子波函数得来的。在 1.2 节中已经谈到, 本征半导体能带的电子波函数是一个波矢为 k 的平面波。和光子能态一样, 半导体中电子的

每一能态也对应着某特定波矢为 k 的波函数的驻波图案。这样，我们可以再一次在半导体中隔出一个边长为 L 的立方体，在该立方体中波矢为 k 的平面波得到稳定驻波图案所需要满足的条件同样为

$$k_x = \frac{m\pi}{L}, \quad k_y = \frac{p\pi}{L}, \quad k_z = \frac{q\pi}{L} \quad (1.4-1)$$

在 k 空间的每一电子态同样占据 $(\pi/L)^3$ 的体积，在 $k \rightarrow k + \delta k$ 的能量间隔内单位体积的电子态数同样由厚度为 δk 的 $1/8$ 球壳体积与 $(\pi/L)^3$ 之比求得

$$dN(k) = \rho(k)\delta k = \left(\frac{k}{\pi}\right)^2 \delta k \quad (1.4-2)$$

显然式 (1.4-2) 中的 $\rho(k)$ 具有 k 空间态密度的物理意义。和光子具有两个偏振态一样，在式 (1.4-2) 中已经计入了电子所具有的两个自旋态。由能带论指出，晶体中电子与自由电子的差别在于晶体中的电子有与自由电子质量不同的有效质量。为了用能量而不用 k 来表示电子的态密度，我们利用电子动量 $P = \hbar k$ 与其能量的关系 $E = P^2/2m$ ，以导带底为坐标原点，分别写出导带电子能量 E_c 和价带空穴能量 E_v 的表达式：

$$E_c = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad (1.4-3)$$

$$-(E_v + E_g) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} \quad (1.4-4)$$

式中， m_e 和 m_h 分别代表导带电子和价带空穴的有效质量， E_g 为禁带宽度。从式 (1.4-3) 或式 (1.4-4) 分别所得到的 k 和 δk 代入式 (1.4-2) 中，便得到导带态密度 ρ_c 或价带态密度 ρ_v

$$\rho_c = \frac{m_e(2m_e E_c)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \quad (1.4-5)$$

$$\rho_v = \frac{m_h[2m_h(-E_g - E_v)]^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \quad (1.4-6)$$

由图 1.2-1 可以看出，具有金刚石结构的 Ge、Si 和具有闪锌矿结构的 GaAs 等 III-V 族化合物半导体的能带结构中，除了重空穴带外，还有轻空穴带，两者在价带顶是重合的。轻空穴的有效质量小于重空穴的有效质量，因此轻空穴带的态密度与重空穴带相比非常小。图 1.4-1 是根据式 (1.4-5) 和式 (1.4-6) 画出的典型半导体导带和价带态密度。在所有直接带隙跃迁的 III-V 族化合物半导体中，导带电子的有效质量几乎比价带重空穴小一个数量级，例如在 GaAs 中有 $m_e = 0.067m_0$ ， $m_h = 0.55m_0$ 。因为态密度正比于有效质量的 $3/2$ 次方，所以价带态密度与导带相比要大 25 倍。

除了态密度外，决定载流子在半导体能带中分布的另一个因素是电子态为电子或空穴所占据的几率，即前面曾

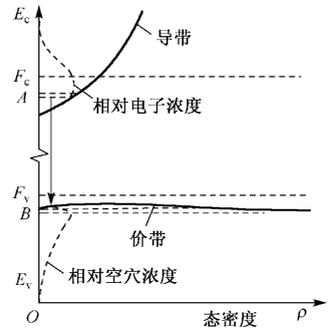


图 1.4-1 半导体中典型的电子态密度与能量的关系

提到的费米-狄拉克分布函数。正确的理解是由式 (1.4-5) 和式 (1.4-6) 所表示的都只是允许电子存在的状态密度, 只有考虑了费米-狄拉克分布函数后才是能带中确定的电子或空穴分布情况。费米-狄拉克分布函数是用费米能 F 作为参数来描述的, 它反映了电子微观系统的热平衡情况。当导带与价带之间处于严格的热平衡状态时, 就可用统一的费米能级来描述在一定能量范围内导带与价带电子的分布。而当向能带中注入载流子时, 原来的平衡就会受到扰动与破坏, 这就意味着导带与价带之间不再存在统一的费米能级。如果注入速率不是太大, 虽然被注入带与相对的另一带之间不存在平衡, 但每个带中的载流子却仍处在准平衡的状态。因此, 对每个带来说, 可以用各自的费米能级 F_c 和 F_v 来描述导带与价带载流子的分布, 我们称 F_c 和 F_v 为准费米能级。那么, 导带和价带中某一能量 E_c 和 E_v 为电子所占据的几率分别为

$$f_c = \left[1 + \exp\left(\frac{E_c - F_c}{k_B T}\right) \right]^{-1} \quad (1.4-7)$$

$$f_v = \left[1 + \exp\left(\frac{E_v - F_v}{k_B T}\right) \right]^{-1} \quad (1.4-8)$$

显然, 当导带与价带处于平衡时有 $F_c = F_v = F$, 而且, $1 - f_c$ 代表导带某能级 E_c 未被电子占据的几率, $1 - f_v$ 表示价带某能级 E_v 为空穴所占据的几率。和前面由光子态密度与玻色分布函数之积给出单位体积、某一频率间隔内的光子数的概念一样, 电子态密度与相应的费米-狄拉克分布函数之积就表示单位体积内某一特定能级上的电子数。因而, 导带中总的电子浓度为

$$n = \int \frac{\rho_c(E_c)}{1 + \exp[(E_c - F_c)/(k_B T)]} dE_c \quad (1.4-9)$$

价带空穴浓度为

$$p = \int \frac{\rho_v(E_v)}{1 + \exp[(F_v - E_v)/(k_B T)]} dE_v \quad (1.4-10)$$

在高注入速率或重掺杂情况下, 态密度随能量的分布与式 (1.4-5) 和式 (1.4-6) 表示的不同, 随机分布的杂质电荷与自由载流子电荷所造成的晶格场的波动, 使导带底和价带顶将出现能带尾态, 如图 1.4-2 所示。由于半导体介电常数一般较高 (参看第 2 章表 2.3-1), 而且载流子 (特别是电子) 的有效质量较小, 因此, 局部杂质态的玻尔半径 $a^* = 4\pi\epsilon\hbar^2/(m^*e^2)$ 比氢原子半径大得多。例如, 在 GaAs 中束缚电子和空穴的 a^* 分别为 100\AA 和 10\AA 。当杂质原子之间的距离 r_s 与 a^* 之比 $r_s/a^* \approx 3$ 时, 可以认为杂质电离能减少到零, 出现与本征能带衔接的杂质带, 形似导带或价带向带隙内产生一个拖尾 (即带尾), 这时电导率迅速增加, 产生所谓“金属性”导电。计算和测量表明, 在 GaAs 中当施主杂质与受主杂质浓度分别达到 $2 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ 或 $4 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ 时, 就会出现能带尾态效应。一些文献在不同的假设条件下给出了不同的带尾模型, 从而也就给出了带尾对载流子密度分布的不同影响。例如, 凯恩 (Kane) 假设杂质随机分布引起的电势涨落具有高斯几率分布, 其均方根值 V_{rms} 为

$$V_{\text{rms}} = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \right) \left[2\pi(N_D^+ + N_A^-) L_S \right]^{1/2} \quad (1.4-11)$$

式中, N_D^+ 和 N_A^- 分别为电离的施主和受主浓度, L_S 为自由载流子不受电离杂质电荷影响的平均距离, 称为屏蔽长度, V_{rms} 给出带尾深度 η 为

$$\eta = 2^{1/2} V_{rms} \quad (1.4-12)$$

这样, 凯恩对 n 型掺杂半导体给出的导带有效态密度为

$$\rho_{eff}(E_c) = \left\{ \frac{m_c(2m_c)^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3} \right\} \eta^{1/2} y\left(\frac{E_c}{\eta}\right) \quad (1.4-13)$$

式中, $y(x)$ 为凯恩函数, 定义为

$$y(x) = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^x (x-z)^{1/2} \exp(-z^2) dz \quad (1.4-14)$$

由式(1.4-13)可以看出, 当 $E_c > \eta$, 因 $y(E_c/\eta) \approx (E_c/\eta)^{1/2}$, 这时式(1.4-13)就与式(1.4-5)相同; 而当 $E_c < 0$ 时, $y(E_c/\eta) \approx \exp(-E_c^2/\eta^2)$, 从而出现尾态。

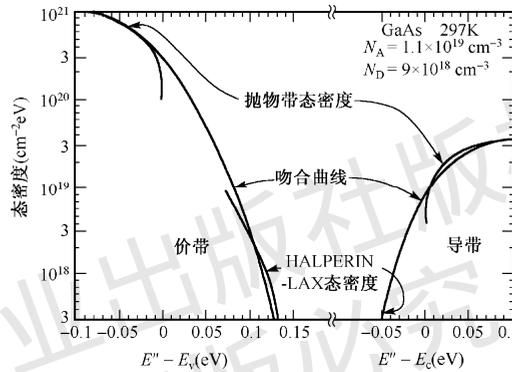


图 1.4-2 净受主浓度为 $2 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ 的 GaAs 中导带与价带态密度

在凯恩的这个带尾模型中, 由于将所有尾态无区别对待, 带尾只是带边的随机滑移。然而, 当滑移幅度大时, 易出现很靠近杂质电荷团的小区域, 在此区内不再有大量密布的载流子态, 而使该区对带尾不产生明显的贡献, 这等效于减少了尾深, 因此凯恩模型对尾深作了过高的估计。

哈尔普林 (B.I.Halperin) 和拉克斯 (M.Lax) 考虑了上述深势阱处载流子局部化的影响而提出了对尾深合理减少的模型。他们对宽度为 πL_s (L_s 为屏蔽长度) 势阱中的载流子能态用阱中的最低态进行归一化, 提出了一个比凯恩高斯带尾形式复杂得多的能带尾态密度的表达式, 在此不列出其繁琐的数学形式, 只是将其结果与凯恩带尾曲线一并示于图 1.4-3 中。该图是由黄振嘉 (C.J.Huang) 在比较以上两种模型的基础上, 对半补偿重掺杂 p 型半导体分析计算得出的。由图看出, 哈尔普林-拉克斯带尾与凯恩带尾相比, 尾深有明显减少, 特别是有效质量小的导带, 其态之间的间隔较大, 因而导带尾深减少幅度较大, 这是比较符合实际的。

之后, 还有一些学者对带尾作了进一步研究, 如斯特恩 (Stern) 将凯恩高斯带尾与哈尔普林-拉克斯带尾进行衔接; 还有人将图 1.4-3 中的哈尔普林-拉克斯带尾与本征抛物线带尾进行衔接等。

经许多实验测量发现, 带尾中的态密度按指数曲线变化, 即

$$\rho_c \propto \exp\left(\frac{E_c}{E_t}\right) \quad (1.4-15)$$

$$\rho_v \propto \exp\left(\frac{-E_g - E_v}{E_t}\right) \quad (1.4-16)$$

式中， E_t 也被定义为尾深，可以通过经验确定。

不管何种带尾模型，带尾的存在总是增加该电子能带上可能的态数。恩格尔 (Unger) 指出，对某一给定的费米能级 F ，由于带尾的存在所增加的注入载流子总量相当于温度从 T 增加到 $[T^2 + (E_t/k_B)^2]^{1/2}$ 所引起的载流子增量，其中 k_B 为玻耳兹曼常数。在 1.2 节中已经谈到带尾对电子跃迁概率的影响，以后还将看到，带尾将对半导体激光器的增益、阈值和光谱特性等产生影响。达到“重掺杂”所要求的掺杂浓度与所掺杂质是施主还是受主有关，同时由于价带空穴与导带电子相比有较大的有效质量，因而空穴杂质带有较深的带尾，因此在与主带相衔接后显得突出，这在图 1.4-2 中已能看出当掺受主杂质浓度约为 10^{18} cm^{-3} 时，杂质带尾已处于价带较深的位置。

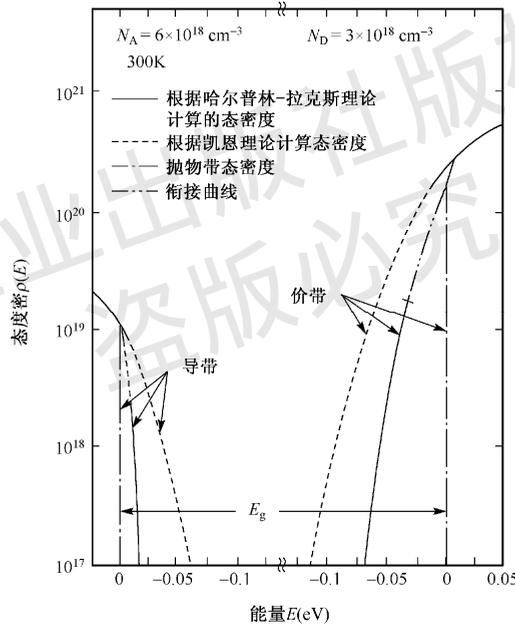


图 1.4-3 几个不同模型态密度的比较

1.5 跃迁速率与爱因斯坦关系

前面几节我们分别讨论了影响电子在半导体能带之间跃迁速率的有关因素，这一节将具体分析与半导体光电子器件工作原理有关的三种跃迁过程（受激吸收、受激发射和自发发射）的跃迁速率以及联系这几种跃迁速率的爱因斯坦关系。

首先扼要地讨论一下影响以上三种跃迁速率的因素：

(1) 与跃迁有关的电子能级的情况。显然电子在半导体能带之间的跃迁只能始于电子的占有态而终止于电子的空态，因此跃迁速率应正比于与跃迁有关的初态被电子占据的几率和跃迁终态被空着的几率。

(2) 在受激发射与受激吸收跃迁中，跃迁速率应正比于激励该跃迁过程的入射光子密度。为产生受激跃迁，需使入射光子的能量大于或等于与跃迁有关的两能级之间的能量差。如果激励这种跃迁过程的入射光是光谱很纯的单色（或单模）光，则跃迁速率比例于单频中的光子密度。然而，多数实际情况是作用在这种过程中的光子有一定的能量范围，或光子的振荡频率分布有一定的宽度，则电子在能带之间的跃迁速率将比例于式（1.3-15）所表示的单位能量间隔中的光子密度 $P(h\nu)$ 。

(3) 单位能量间隔中参与跃迁的电子态密度，这对激励光为多模时固然重要，但即使是单色光，也同样应该考虑在单位能量间隔中参与光跃迁的电子态密度。因为某一特定能量的光子能使半导体能带中一定能量范围内的电子跃迁。按照量子力学原理，光子与电子相互作用时间越短或相互作用过程越快，则跃迁所涉及的能量范围就越宽。因此，在有多对能级参与跃迁的情况下，有必要在总的跃迁速率表达式中引进有关电子的态密度。用 $\rho_{\text{red}}(h\nu)$ 表示单位能量间隔中，两自旋方向之一的电子参与光跃迁的密度。 $\rho_{\text{red}}(h\nu)$ 是受选择定则限制的。严格的 k 选择定则要求导带中每一能级只能与价带中具有同样电子自旋的一个能级相关。因此 $\rho_{\text{red}}(h\nu)$ 具有折合态密度的意义，并表示为

$$\rho_{\text{red}}(h\nu) = \frac{\delta N}{2(\delta E_c + \delta E_v)} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_c} + \frac{1}{\rho_v} \right)^{-1} \quad (1.5-1)$$

式中， $\delta N/2$ 是两个自旋方向之一的电子态数的增量，这对导带与价带都是相同的； δE_c 和 δE_v 分别为导带与价带中的能量增量，在此能量范围内有相同的态数以保证跃迁在相等 k 值下进行； ρ_c 和 ρ_v 分别为由式（1.4-5）和式（1.4-6）表示的电子和空穴的态密度。以后将看到，即使实际上不可能存在严格的 k 选择定则，但这并不影响目前的讨论。

(4) 决定跃迁速率的第四个因素是跃迁几率系数，这已在 1.2 节中讨论。它们包括受激吸收跃迁几率 B_{12} 、受激发射跃迁几率 B_{21} 和自发发射跃迁几率 A_{21} 。对于严格的 k 选择定则，这些系数描述了在光子能量 $h\nu$ 下所有可能发生的跃迁，因此这些系数的确定需和前面所讨论的那样，从跃迁初态到终态对分布态函数进行积分。然而，不论所涉及的 k 选择定则严格与否，均不影响下面将讨论它们之间的关系——爱因斯坦关系，它反映了热平衡下量子跃迁系统的普遍规律。

基于上面这些讨论，就很容易写出三种跃迁情况的跃迁速率并确定它们之间的相互关系。因所考虑的跃迁量子系统处在热平衡下，则导带与价带的准费米能级应相等，即 $F_c = F_v$ 。因此描述电子占据几率的函数 f_c 和 f_v 就可使用统一的费米能级。若激励该系统的光子能量具有连续谱，则所求的跃迁速率是单位体积、单位能量间隔的速率。对于电子从价带向导带的受激吸收，其跃迁速率为

$$r_{12} = B_{12} f_v (1 - f_c) \rho_{\text{red}}(h\nu) P(h\nu) \quad (1.5-2)$$

而电子从导带向价带的受激发射跃迁速率为

$$r_{21} = B_{21} f_c (1 - f_v) \rho_{\text{red}}(h\nu) P(h\nu) \quad (1.5-3)$$

上述受激吸收几率系数 B_{12} 与受激发射几率系数 B_{21} 有相同的量纲[能量×体积 / 时间], 而单位体积、单位能量间隔的自发发射速率为

$$r_{sp} = A_{21} f_c (1 - f_v) \rho_{red} \quad (1.5-4)$$

式中, A_{21} 为自发发射跃迁几率系数, 它的量纲为[1 / 时间]。

在热平衡情况下, 向上跃迁的速率必须等于向下跃迁的总速率, 即

$$r_{12} = r_{21} + r_{sp} \quad (1.5-5)$$

将式 (1.5-2)、式 (1.5-3) 和式 (1.5-4) 代入式 (1.5-5) 中, 并考虑到热平衡下有 $F_c = F_v$ 所描述的统一费米分布函数, 则有

$$P(h\nu) = \frac{A_{21}}{B_{12} \exp[(E_c - E_v)/(k_B T)] - B_{21}} \quad (1.5-6)$$

由式 (1.3-15), 并令其色散项 $[1 + (v/\bar{n})(d\bar{n}/dv)] = 1$, 再与式 (1.5-6) 比较后得到:

$$\frac{8\pi\bar{n}^3 h\nu^3}{c^3 [\exp(h\nu/(k_B T)) - 1]} = \frac{A_{21}}{B_{12} \exp[h\nu/(k_B T)] - B_{21}} \quad (1.5-7)$$

其中已考虑到在频率为 ν 的光子作用下电子产生共振跃迁 $h\nu = E_c - E_v$ 的情况, 由式 (1.5-7) 显然有

$$B_{12} = B_{21} \quad (1.5-8)$$

$$A_{21} = \frac{8\pi\bar{n}^3 h\nu^3}{c^3} B_{21} \quad (1.5-9)$$

式 (1.5-8) 和式 (1.5-9) 称为爱因斯坦关系, 它和对二能级系统做类似分析所得的结果是一致的。它们表示了热平衡条件下, 自发发射、受激吸收与受激发射三种跃迁几率之间的关系。

因为玻色-爱因斯坦分布函数本身表示每个态(模)中的平均光子数, 所以如果激励跃迁系统的是单色光, 则跃迁速率只是单位体积而不是上面所说的单位体积、单位能量间隔的跃迁速率。此时单位体积的光子数为

$$\phi = \frac{1}{V} \frac{1}{\exp[h\nu/(k_B T)] - 1} \quad (1.5-10)$$

将式 (1.5-10) 代替式 (1.5-7) 的左边后, 同样可以得到 $B_{12} = B_{21}$, 只是自发发射跃迁几率系数变为

$$A'_{21} = \frac{B_{21}}{V} \quad (1.5-11)$$

现在可以将 V 视为有源光学谐振腔的体积。除了上述联系三种跃迁速率的爱因斯坦关系外, 还可以进一步分析这几种跃迁速率之间的关系, 并从这些分析中得出一些对光电子学器件的工作原理和特性具有重要意义的结论。

1.5.1 净的受激发射速率和半导体激光器粒子数反转条件

如果被光子激励的半导体能带系统处在平衡态下, 并且忽略导带电子自发辐射复合的影

响时，则受激发射速率与受激吸收速率是相等的，即有 $r_{21} = r_{12}$ 。但在有电子注入等非平衡条件下，就有可能使 $r_{21} > r_{12}$ ，并令 $r_{\text{净}}$ 为受激发射与受激吸收速率之差，即净的受激发射速率为

$$r_{\text{净}} = r_{21} - r_{12} \quad (1.5-12)$$

将式 (1.5-2) 和式 (1.5-3) 代入式 (1.5-12) 后得到

$$r_{\text{净}} = B_{21}\rho_{\text{red}}(h\nu)(f_c - f_v)P(h\nu) \quad (1.5-13)$$

其中考虑了爱因斯坦关系 $B_{12} = B_{21}$ ，因为在净的受激发射下，必定有 $r_{\text{净}} > 0$ ，即式 (1.5-13) 中必须满足：

$$f_c > f_v \quad (1.5-14)$$

将式 (1.4-7) 和式 (1.4-8) 代入式 (1.5-14)，并考虑到 $E_v = E_c - h\nu$ (E_c 和 E_v 分别为导带和价带电子态能量， $h\nu$ 为光子能量)，则有

$$\exp\left(\frac{E_c - h\nu - F_v}{k_B T}\right) > \exp\left(\frac{E_c - F_c}{k_B T}\right) \quad (1.5-15)$$

或更简单地表示为

$$F_c - F_v > h\nu \quad (1.5-16)$$

对于带间跃迁的受激发射，需满足 $h\nu \geq E_g$ ，故式 (1.5-16) 还可写为

$$\Delta F \geq E_g \quad (1.5-17)$$

式 (1.5-14) 及其演变式 (1.5-16) 和式 (1.5-17) 都可认为是在半导体中产生受激发射的必要条件，也可称为半导体激光器的所谓粒子数反转条件，这是由伯纳德 (Bernard) 和杜拉福格 (Duraffourg) 于 1961 年首先提出的，故也称伯纳德-杜拉福格条件，它是次年出现的半导体激光器得以成功的理论基础。式 (1.5-16) 表明，要在半导体中产生受激发射或形成粒子数反转，就应使其能带系统处于非平衡状态，并使导带与价带的准费米能级之差大于作用在该系统的光子能量。图 1.5-1 形象地描述了这一条件。

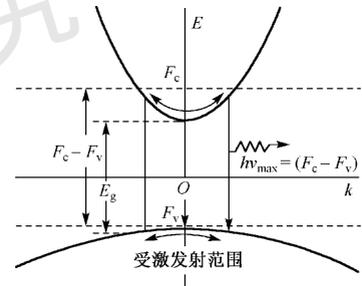


图 1.5-1 伯纳德-杜拉福格条件图示

由式 (1.5-17) 可以看到，如所讨论的半导体材料有确定的禁带宽度 E_g ，则在受激发射发生以前，导带与价带的准费米能级之差 ($F_c - F_v$) 必须大于 E_g ，即 F_c 或 F_v 要进入导带或价带，这在早期的半导体激光器中是通过重掺杂或高注入来满足这一条件的。

式 (1.5-13) 是从严格的 k 选择定则来考虑的，即电子是在导带与价带 k 值相同的一对态之间跃迁而发射 (或吸收) 由它们之间能量差所决定的光子，这种严格的 k 选择定则必然限制着参与跃迁的态数。实际上，由图 1.5-1 也看到，能发射同样能量光子的跃迁初态与终态都存在一个可能的范围。因此，我们只需限定跃迁初态或终态的能量 E_c 或 E_v 和光子能量 $h\nu$ 来重新考虑跃迁几率。例如，对给定的体积 V 、导带能量 E_c 和光子能量 $h\nu$ 的情况下，可以写出导带内单位能量范围的跃迁几率为 $B_{21}(E_c, h\nu)\rho_c(E_c)V$ 。因为 B_{21} 本身包含 V^{-1} ，故实际上所

表示的单位能量的跃迁概率与体积无关。现在，我们就可和前面一样，只需将已经考虑了一个能量范围内的跃迁几率 $B_{21}(E_c, hv)\rho_c(E_c)V$ 代替式 (1.5-2) 和式 (1.5-3) 中的 B_{12} 和 B_{21} ，再对整个 E_c 积分，就可得出相应向上和向下总的跃迁速率，两者之差即为净的总跃迁速率，表示为

$$r_{\text{净}}(hv) = P(hv) \int_{-\infty}^{\infty} B_{21}(E_c, hv) V \rho_c(E_c) \rho_v(E_c - hv) (f_c - f_v) \left(1 + \frac{\rho_v}{\rho_c}\right)^{-1} dE_c \quad (1.5-18)$$

式中 $\rho_c(E_c)$ 表示 ρ_c 为 E_c 的函数、 $\rho_v(E_c - hv)$ 表示 ρ_v 为 $E_v (= E_c - hv)$ 的函数。式 (1.5-18) 可简单表示为

$$r_{\text{净}}(hv) = P(hv) W_{\text{净}}(hv) \quad (1.5-19)$$

式中， $W_{\text{净}}(hv)$ 代表式 (1.5-18) 中的积分值。对于上述存在一个参与跃迁能量范围的情况下，同样可用价带能量 E_v 来表示单位能量间隔的跃迁几率，即 $B_{12}(E_v, hv)\rho_v(E_v)V$ 。此时 ρ_c 以 $E_c = E_v + hv$ 为函数。故还可将系统净的受激发射跃迁速率写为对 E_v 积分的表示式：

$$\begin{aligned} r_{\text{净}}(hv) &= P(hv) \int_{-\infty}^{\infty} B_{12}(E_v, hv) V \rho_v(E_v) \rho_c(E_v + hv) (f_c - f_v) \left(1 + \frac{\rho_c}{\rho_v}\right)^{-1} dE_v \\ &= P(hv) W_{\text{净}}(hv) \end{aligned} \quad (1.5-20)$$

显然，可以从式 (1.5-19) 和式 (1.5-20) 得到和前面同样的受激发射条件，即 $f_c > f_v$ 。

1.5.2 自发发射与受激发射速率之间的关系

自发发射与受激发射有密切的关系。从某种意义上讲，受激发射是放大的自发发射。在激光器中，引起受激发射的光子往往来源于自发发射。以后还要谈到，就在每个激光模式中也包含着一定的自发发射分量，而且模式中自发发射与受激发射比率的大小将直接影响激光器的性能。

考虑到电子在能带之间跃迁有一定的能量范围这一特点，运用和前面求净受激发射速率式 (1.5-18) 和式 (1.5-20) 同样的方法，可以写出总的自发发射速率为

$$\begin{aligned} r_{\text{sp}}(hv) &= \frac{8\pi\bar{n}^3 hv^3}{c^3} \int_{-\infty}^{\infty} B_{21}(E_c, hv) V \rho_c(E_c) \rho_v(E_c - hv) f_c (1 - f_v) \left(1 + \frac{\rho_v}{\rho_c}\right)^{-1} dE_c \\ &= \frac{8\pi\bar{n}^3 hv^3}{c^3} W_{\text{sp}}(hv) \end{aligned} \quad (1.5-21)$$

其中已经利用了式 (1.5-9)。 $W_{\text{sp}}(hv)$ 代表式 (1.5-21) 中的积分值。因此要知道 $r_{\text{净}}(hv)$ 与 $r_{\text{sp}}(hv)$ 之间的关系，只需分析 $W_{\text{净}}(hv)$ 与 $W_{\text{sp}}(hv)$ 之间的关系。显而易见， $W_{\text{净}}(hv)$ 与 $W_{\text{sp}}(hv)$ 的比值为 $(f_c - f_v)/[f_c(1 - f_v)]$ 且与能量无关，其值为 $\{1 - \exp[(hv - (F_c - F_v))/k_B T]\}$ ，这样就可得到

$$W_{\text{净}}(hv) = W_{\text{sp}}(hv) \left[1 - \exp\left(\frac{hv - (F_c - F_v)}{k_B T}\right) \right] \quad (1.5-22)$$

因 $W_{\text{sp}}(hv)$ 总为正值，因此要想得到净的受激发射，需 $W_{\text{净}}(hv)$ 大于零，即要求 $F_c - F_v \geq hv$ 。故式 (1.5-22) 是从另一个方面再一次证明了伯纳德-杜拉福格粒子数反转条件。由式 (1.5-22) 还可看出，当 $hv \approx$ 或者 $< F_c - F_v$ 时，就有 $W_{\text{净}}(hv) \approx W_{\text{sp}}(hv)$ ，这就意味着，在掺杂浓度很高或

泵浦速率很高的情况下，任何波长下的受激发射与自发发射相等。即一个自发发射光子诱发出一个受激发射的光子，这与通常用以解释两能级系统激光器工作原理的情况相同。

对净的受激发射与自发发射速率之间的关系，还可将式 (1.5-4) 与式 (1.5-13) 进行比较，也可得出与上述相同的结论。

1.5.3 净的受激发射速率与增益系数的关系

由式 (1.5-13) 和式 (1.5-18) 可知，当满足粒子数反转条件时，净的受激发射速率有正值，则光波通过处在这种状态的介质时将得到增益或放大。粒子数反转程度越大，它所得到的增益也越大。显然，粒子数反转如变为负值（对应于 $f_c < f_v$ 的情况），增益也就变为负值，此时经过这种介质所传播的光波将经受吸收损耗。这里只讨论净受激发射速率与增益系数的关系，有关激光器的增益特性以后将详细讨论。

通常将光波通过粒子数反转区获得的增益表示为

$$F(z) = F_0 \exp(gz) \quad (1.5-23)$$

式中， z 表示光的传播方向， $F(z)$ 表示某一点 z 处单位面积的光子通量， F_0 为光波进入反转区 $z=0$ 时单位面积的光子通量， g 为单位长度的增益或增益系数。将式 (1.5-23) 微分就可看出 g 是单位面积所产生的附加光子通量与总光子通量之比，前者即该体积内净的受激发射速率 $r_{\text{净}}(h\nu)$ ，后者应该是由式 (1.3-15) 表示的光子密度与光波在介质中的传播速度之积，因此有

$$g(h\nu) = \left(\frac{\Gamma \bar{n}}{c} \right) \int_{-\infty}^{\infty} B_{21}(E_c, h\nu) \rho_c(E_c) \rho_v(E_c - h\nu) (f_c - f_v) \left(1 + \frac{\rho_v}{\rho_c} \right)^{-1} dE_c \quad (1.5-24)$$

或写为

$$g(h\nu) = \left(\frac{\Gamma \bar{n}}{c} \right) W_{\text{净}}(h\nu) \quad (1.5-25)$$

式中， Γ 为场限制因子，它是考虑到部分光场扩展出粒子数反转区而造成的损失，相当于光子通量截面增加，净的受激发射速率变为 $\Gamma r_{\text{净}}(h\nu)$ 。 Γ 的明确定义及其对半导体激光器的影响以后将会陆续涉及。在半导体材料中，遵守带间跃迁 k 选择定则的增益系数可以结合式 (1.2-28) 和式 (1.5-13) 依上述同样讨论给出：

$$g(\hbar\omega) = \frac{\pi e^2 \hbar}{m^2 \varepsilon_0 \bar{n} c \hbar \omega} \rho_{\text{red}}(\hbar\omega) |M|^2 (f_c - f_v) \quad (1.5-26)$$

如果考虑光场扩展，在式 (1.5-26) 的分子中同样应该引入 Γ 因子。式 (1.5-24) 或式 (1.5-26) 都说明一个重要的物理概念，即一旦在半导体材料中形成了粒子数反转，该材料才有正的增益系数。因此增益系数并不是半导体材料的固有属性。只有通过外部电子注入满足粒子数反转条件，它才对材料内部产生的光子或外部入射的光子具有增益或放大的能力。

1.5.4 净的受激吸收速率与吸收系数

和净的受激发射速率相反，净的吸收速率就是电子在能带系统中受激吸收速率 r_{12} 与受激

发射速率 r_{21} 之差 ($r_{12} > r_{21}$)。很容易理解，它就是净受激发射速率的负值 $[-r_{\text{净}}(h\nu)]$ ，这对应着激光器泵浦速率低或激励水平在激光阈值以下的情况，此时式 (1.5-22) 中的 $(F_c - F_v)$ 很小，从而 $W_{\text{净}}(h\nu)$ 变为负值，按照前面对增益系数完全类似的推导，可以把吸收系数 $\alpha(h\nu)$ 写为

$$\alpha(h\nu) = \frac{\bar{n}}{c} W_{\text{净}}(h\nu) \quad (1.5-27)$$

式中， c/\bar{n} 仍为介质中的光速。利用自发发射速率 $r_{\text{sp}}(h\nu)$ 与 $W_{\text{sp}}(h\nu)$ 的关系式 (1.5-21)，并将其代入式 (1.5-22) 中，同时考虑到 $(F_c - F_v)$ 很小时可忽略式 (1.5-22) 方括号中的 1，从而给出自发发射谱与吸收谱之间的关系：

$$r_{\text{sp}}(h\nu) \approx \exp\left\{\frac{F_c - F_v}{k_B T}\right\} \frac{cZ(h\nu)\alpha(h\nu)}{\bar{n} \exp[h\nu/(k_B T)]} \quad (1.5-28)$$

式中， $Z(h\nu)$ 代表单位能量间隔内的态密度，为简单起见，不考虑实际存在的色散，则由式 (1.3-13) 可将其表示为

$$Z(h\nu) = \frac{8\pi\bar{n}^3 E^2}{h^3 c^3} \quad (1.5-29)$$

式 (1.5-28) 在泵浦水平未使带间实现粒子数反转以前总是能成立的。因此，可以利用半导体吸收谱的曲线来获得自发发射谱。图 1.5-2 就是利用这种关系对室温下 GaAs 所测得的吸收谱 (见图 1.5-2(a)) 和计算所得到的自发发射谱 (见图 1.5-2(b))，所测样品 GaAs 的空穴浓度为 $1.2 \times 10^{18} / \text{cm}^3$ 。

半导体中的光吸收是一个很复杂的问题，以上所讨论的只是半导体增益介质中有关光吸收的问题，这在半导体激光器中将是一种损耗。除了上述带间吸收外，还有多种机构引起光吸收，诸如自由电子吸收，杂质或缺陷吸收，激子吸收等。除了直接带隙外，间接带隙跃迁也引起光吸收。除内部因素外，温度、压力等外部因素也对光吸收产生影响。有关半导体光吸收机理的分析，将在第 9 章做进一步讨论。

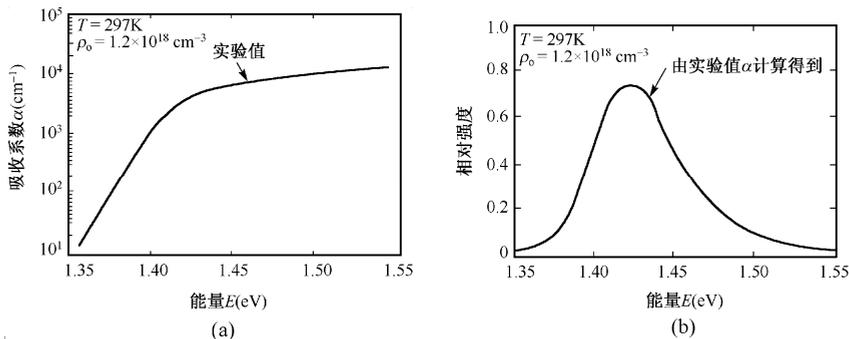


图 1.5-2 (a)空穴浓度 $\rho_0 = 1.2 \times 10^{18} / \text{cm}^3$ 时，GaAs 的吸收系数；(b) 由测得的吸收系数所计算的自发发射谱

1.6 半导体中的载流子复合

在此我们不泛泛讨论半导体物理教科书中已详细论述过的非平衡载流子的复合，而着重

分析与光跃迁有关的和影响半导体光电子器件的载流子复合。在半导体中，电子与空穴的复合以两种形式释放出能量。一种是放出光子，这种形式的复合称为辐射复合，前面讨论的自发发射与受激发射主要指带间直接（不通过任何复合中心）的辐射复合，放出的光子能量近似等于禁带宽度。此外，辐射复合也可能发生在杂质或缺陷中心与主能带之间、施主和受主能级之间，这时所放出的光子能量小于禁带宽度。另一种复合形式是非辐射复合，所释放的能量以声子（一般为多声子）形式放出，或转变为自由载流子的动能，后者就是本节后部分将详细讨论的俄歇（Auger）复合。

1.6.1 自发辐射复合速率

在有非平衡载流子注入时，半导体中的电子和空穴将以一定的几率产生自发辐射复合。对一个完美的半导体有源介质来说，注入的载流子在满足粒子数反转条件时，自发辐射复合将代表总的复合的主要部分。在前面的讨论中，我们只考虑了以某一能量为 $h\nu$ 的光子的自发发射速率。然而，为了对注入载流子浓度做出估计，从而对材料的一些其他性质做出评价，有必要在整个光子能谱范围内得出总的自发发射速率。

首先，我们还是从严格的 k 选择条件得出的自发发射速率的表达式（1.5-4）出发，结合爱因斯坦关系式（1.5-9），对整个可能产生的光子能谱范围写出其总的自发发射速率 R_{sp}

$$R_{sp} = \int_a^{\infty} Z(h\nu)B_{21}(h\nu)f_c(1-f_v)\rho_{red}(h\nu)d(h\nu) \quad (1.6-1)$$

式中， $Z(h\nu)$ 由式（1.5-29）给出， a 为稍低于带隙能量的积分下限。设注入的少数载流子是浓度为 n 的电子，则式（1.6-1）中的 $f_c\rho_{red}(h\nu)d(h\nu)$ 可以用 $dn/2$ 代替（其中因子 $1/2$ 是只考虑一个自旋方向的电子），因而可将式（1.6-1）写为

$$R_{sp} = \frac{1}{2} \int_a^n Z(h\nu)B_{21}(h\nu)(1-f_v)dn \quad (1.6-2)$$

因为 $Z(h\nu)$ 与 $B_{21}(h\nu)$ 实际上随 $h\nu$ 的变化很小而近似认为是常数，因此在积分号内与电子增量 dn 有关的复合时间常数（即自发辐射载流子寿命）可表示如下：

$$\tau = 2[ZB_{21}(1-f_v)]^{-1} \quad (1.6-3)$$

由该式可以看出，当 $f_v \rightarrow 0$ 时，即与导带电子跃迁相关的价带态完全是空着的，这时将有最大的跃迁速率，相应的复合时间常数最小而接近 $1/(ZB_{21})$ 。利用由式（1.5-29）表示的 $Z(h\nu)$ 与由式（1.2-31）表示的 B_{21} ，就可得到 III-V 族化合物半导体非平衡电子的最小复合时间常数：

$$\tau_{min} = \frac{3m_e c \epsilon_0 \lambda_0^2}{4\pi e^2 \bar{n}_g} \cdot \frac{1 + (2/3) \Delta/E_g}{1 + \Delta/E_g} \left(1 - \frac{m_c}{m_0}\right)^{-1} \quad (1.6-4)$$

式中各符号的意义都是所熟知的。作为一个例子，列出 GaAlAs/GaAs 激光器的一些典型数据： $m_c = 0.067m_0$ ， $\lambda_0 = 0.87\mu m$ ，群折射率 $\bar{n}_g = 4.5$ ， $\Delta = 0.33eV$ ， $E_g = 1.42eV$ ，将这些数据代入式（1.6-4）后得出

$$\tau_{min} = 0.25(ns) \quad (1.6-5)$$

前面曾经提到由于轻空穴的有效质量较小，因而轻空穴带的态密度与重空穴带相比也就

很小，因此通常只需考虑非平衡电子与重空穴的复合。但如果价带中的准费米能级足够低而进入轻空穴带，此时轻空穴带的作用就不能忽略，这时由式（1.6-4）所表示的最小复合时间需加倍。同样，如注入的是非平衡空穴，而电子的准费米能级深入导带较高的位置时，也将 τ_{\min} 加倍。

下面我们再来看一下 k 选择定则受到弛豫情况下总的自发发射速率，为此，将式（1.5-21）对自发发射光子能谱范围求积分，即

$$R_{\text{sp}} = \int_{-\infty}^{\infty} Z(h\nu)W_{\text{sp}}(h\nu)d(h\nu) \quad (1.6-6)$$

这可以表示为对光子能量 $h\nu$ 和电子在导带的能量 E_c 的积分：

$$R_{\text{sp}} = \int_a^{\infty} Z(h\nu) \int_{-b}^{-\infty} B_{21}(E_c, h\nu) V \rho_c(E_c) \rho_v(E_c - h\nu) f_c(1 - f_v) \times \left(1 + \frac{\rho_c}{\rho_v}\right)^{-1} dE_c d(h\nu) \quad (1.6-7)$$

还可以表示为对 E_c 和 E_v 积分的形式：

$$R_{\text{sp}} = \int_{-\infty}^{-b-a} \int_{-\infty}^{\infty} Z(E_c - E_v) B_{21}(E_c, E_v) V \rho_c(E_c) \rho_v(E_v) f_c(1 - f_v) dE_c dE_v \quad (1.6-8)$$

式中， a 和 b 是适当选择的常数，使积分终止在禁带之内，以便能概括带尾态的影响。因为在式（1.6-8）的第二个积分中 $\rho_c(E_c) f_c dE_c$ 和 $\rho_v(E_v) (1 - f_v) dE_v$ 分别代表电子与空穴浓度的增量，因而还可将总的自发发射速率表示为

$$R_{\text{sp}} = Z(h\nu) \int_0^n \int_0^p B_{21}(p_p, n_p) V dp dn \quad (1.6-9)$$

式中，表示 B_{21} 的变量 p_p 和 n_p 代表上至 E_c 、下至 E_v 中总的电子和空穴态（不论被占据与否）浓度，包含在积分中小的光子能量范围内，可近似认为 $Z(h\nu)$ 为常数而取出积分号之外。

如果式（1.6-9）中的 B_{21} 不随载流子浓度变化，则可得到一种有用的简单形式。这有两种可能出现的情况，一是玻尔兹曼统计分布能适应的条件，如在轻掺杂和低注入情况下，这时导带电子和价带空穴各自的准费米能级均处于禁带之中，能带系统处于非粒子数反转的正常状况，只要温度恒定，电子和空穴在能带内的分布可以认为是不变的；另一种情况是 B_{21} 与载流子浓度无关而不考虑 k 选择定则，跃迁矩阵元不随跃迁的初态和终态变化。基于上述分析，可以将 R_{sp} 简单表示为

$$R_{\text{sp}} = \beta_r np \quad (1.6-10)$$

式中， β_r 称为自发辐射复合系数，其单位为 (cm^3/s)，当温度一定时它是一个常数。为了求出式（1.6-10）中的自发辐射复合系数 β_r 和相应的复合时间常数，将式（1.6-10）改写为

$$R_{\text{sp}} = \beta_r (n_0 + \Delta n)(p_0 + \Delta p) \quad (1.6-11)$$

式中， n_0 和 p_0 分别为半导体中平衡时的电子和空穴浓度， Δn 和 Δp 分别为非平衡下电子和空穴浓度的增量，在本征半导体中有 $\Delta n = \Delta p$ ，则式（1.6-11）变为

$$R_{\text{sp}} = R_{\text{sp}}^0 + R'_{\text{sp}} \quad (1.6-12)$$

其中 R_{sp}^0 为平衡时载流子的自发辐射速率：

$$R_{\text{sp}}^0 = \beta_r n_0 p_0 = \beta_r n_i^2 \quad (1.6-13)$$

式中, n_i 为本征载流子浓度。而非平衡载流子的自发辐射速率 R'_{sp} 为

$$R'_{\text{sp}} = \beta_r \Delta n (n_0 + p_0 + \Delta n) \quad (1.6-14)$$

其中已利用了 $\Delta n = \Delta p$ 和式 (1.6-13)。在平衡时有 $F_c = F_v$, 由式 (1.5-28) 可得到在整个光子能量范围内 R_{sp}^0 与半导体材料吸收系数的关系:

$$R_{\text{sp}}^0 = \frac{c}{\bar{n}} Z(h\nu) \int_0^\infty \frac{\alpha(h\nu)}{\exp[h\nu/(k_B T)]} d(h\nu) \quad (1.6-15)$$

式中, c/\bar{n} 仍为介质中的光速, $Z(h\nu)$ 仍近似视为常数。因此 R_{sp}^0 可由吸收系数 $\alpha(h\nu)$ 的实验曲线 (见图 1.5-2) 并经过适当积分来求得, 而本征载流子浓度的平方在一定温度时只与禁带宽度有关, 由半导体物理学中熟知的公式给出:

$$n_i^2 = 4 \left(\frac{2\pi k_B T}{h^2} \right)^3 (m_e m_h)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right) \quad (1.6-16)$$

由式 (1.6-13) 可以得出:

$$\beta_r = \frac{R_{\text{sp}}^0}{n_i^2} \quad (1.6-17)$$

其中 R_{sp}^0 和 n_i^2 分别由式 (1.6-15) 和式 (1.6-16) 给出。 β_r 与材料的能带结构有关, 直接带隙跃迁材料有比间接带隙跃迁材料大得多的 β_r 。表 1.6-1 列出了一些直接与间接带隙跃迁半导体材料的 β_r 值。由于测量吸收系数所产生的误差, 表中所列数据的精确度是有限的。

表 1.6-1 几种半导体材料的 β_r 计算值

材料	带隙类型	β_r (cm ³ / s)
Si	间接	1.79×10^{-15}
Ge	间接	5.25×10^{-14}
GaP	间接	6.31×10^{-14}
GaAs	直接	7.21×10^{-10} (实验值 $\sim 10^{-10}$)
GaSb	直接	2.3×10^{-10}
InAs	直接	8.5×10^{-11}
InSb	直接	4.58×10^{-11}

非平衡载流子的自发辐射速率也就是非平衡载流子通过辐射复合衰减的速率, 表示为

$$R'_{\text{sp}} = \frac{\Delta n}{\tau_s} \quad (1.6-18)$$

式中, Δn 为非平衡载流子浓度, 非平衡载流子的自发辐射复合寿命 τ_s 可由式 (1.6-14) 和式 (1.6-18) 给出:

$$\tau_s = [\beta_r (p_0 + n_0 + \Delta n)]^{-1} \quad (1.6-19)$$

在高注入下有 $\Delta n > p_0 + n_0$, 则式 (1.6-19) 变为

$$\tau_s \approx [\beta_r (\Delta n)]^{-1} \quad (1.6-20)$$

相反，在低注入条件下则有

$$\tau_s \approx [\beta_r(p_0 + n_0)]^{-1} \quad (1.6-21)$$

当电子和空穴的准费米能级进入能带，则式(1.6-10)就应做相应的改变。这时必须考虑能带尾态的影响，自发辐射复合系数将与载流子浓度有关，但仍可用与式(1.6-10)相类似的形式表示总的自发发射速率。以掺受主杂质为例，将 R_{sp} 表示为

$$R_{sp} = B(n)n(n + p_0) \quad (1.6-22)$$

式中， $B(n)$ 为与载流子浓度有关的自发辐射复合系数， n 为注入的少数载流子（在此为电子）浓度， p_0 此时等于净的电离受主浓度。罗伯特（Robert）^[11]等比较了自发辐射复合系数 $B(n)$ 与载流子浓度有关的两种模型，即具有抛物线能带、常数矩阵元的 k 选择模型与具有能带带尾的斯特恩模型，其归一化辐射复合系数 $B(n)/B_0$ 与少数载流子浓度的关系如图1.6-1所示，其中 B_0 为 $B(n)$ 按泰勒级数展开后的常数项。由图可以看出，即使在抛物带模型中， $B(n)$ 随载流子浓度的变化仍相当显著，当载流子浓度为 $2 \times 10^{18} / \text{cm}^3$ 时，自发辐射复合系数也比 B_0 下降20%，在斯特恩模型中则下降更多。这是因为在能带尾态中，由于杂质的散射而使载流子跃迁不受 k 选择限制，在低注入下还能具有较高的自发发射速率，但随着尾态的填充，带尾复合的相对贡献减少，从而造成总的辐射复合速率迅速减少。

$B(n)$ 的值能很方便地由实验得出，为了分析 $B(n)$ 的影响，将 $B(n)$ 按泰勒级数展开并取前两项后得到：

$$B(n) = B_0 - B_1 n \quad (1.6-23)$$

将式(1.6-23)代入到式(1.6-22)中，则总的自发发射速率为

$$R_{sp} = (B_0 p_0)n + (B_0 - B_1 p_0)n^2 - B_1 n^3 \quad (1.6-24)$$

因此 R_{sp} 不仅由载流子浓度的线性项和平方项决定，它的立方项还能使 R_{sp} 减少。由式(1.6-24)还看出，在所讨论的p型半导体中，注入载流子浓度平方项的辐射复合系数随净的电离受主浓度 p_0 的增加而减少。因为在实验测量中所得到的自发辐射功率 P 正比于总的自发辐射复合速率，因而 $P/[n(n + p_0)]$ 与 n 的关系曲线和 $B(n)$ 与 n 的关系是完全等效的。所以只要知道每一被测电流 I 所对应的载流子浓度和有源区的掺杂浓度，就可无须任何附加假设而直接从发光二极管的 $P-I$ 曲线求出 $B(n)$ 。还可通过对实验曲线的数值拟合，得出式(1.6-24)中各项的系数。例如，用这种方法得出InGaAsP中的 $B_1 = 1.2 \times 10^{-29} \text{ cm}^6 / \text{s}$ 、 $B_0 = 0.7 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 / \text{s}$ ，这些数据是在忽略了 p_0 并在 -140°C 得到的；同样，对GaAlAs发光二极管在 $p_0 = 2 \times 10^{17} / \text{cm}^3$ 和 26°C 下得出式(1.6-24)中线性项与平方项的辐射复合系数分别为 $1.4 \times 10^7 \text{ cm}^3 / \text{s}$ 和 $0.75 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 / \text{s}$ 。图1.6-2给出了上述InGaAsP和GaAlAs的 $P/[n(n + p_0)]$ 与注入载流子浓度的关系。由图可以看出，InGaAsP的 B_1/B_0 比GaAlAs大，即对应于图1.6-2中有较大的直线斜率。尽管任何涉及某种程度 k 选择的理论都指出上述辐射复合系数与载流子浓度的关系，但还不甚清楚在InGaAsP中为什么有比GaAlAs大的辐射复合系数随载流子浓度的变化。可能的解释是从图1.6-1和图1.6-2的对比来得到的，即在InGaAsP中所观察到的 $B(n)$ 随载流子浓度的显著变化来源于它的带尾中偏离 k 选择程度较大或存在大量的尾态。因为严格的 k 选择只适合于

很纯的、竖直跃迁的半导体，这限制了参与跃迁的态数。但对于存在杂质或缺陷的半导体， k 选择定则将受到某种程度的松弛，这时跃迁矩阵元不完全甚至不取决于跃迁的初态和终态的能量，电子在晶体中受到杂质和缺陷的弹性散射保证其在跃迁过程中的能量与动量守恒。在斯特恩的带尾模型中， k 选择定则将受到很大的松弛，在尾态中载流子快的辐射复合速率使 $B(n)$ 随载流子浓度变化很大。这还可用来解释 InGaAsP 发光二极管与 GaAlAs 相比有低的内量子效率和温度稳定性等性质。

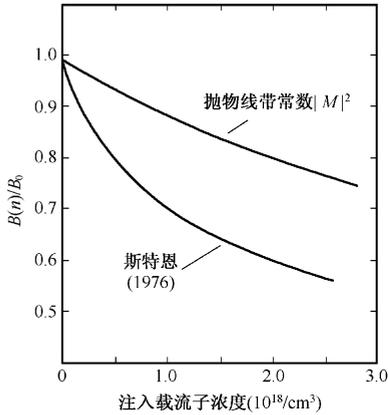


图 1.6-1 辐射复合系数 $B(n)/B_0$

与注入载流子浓度的关系

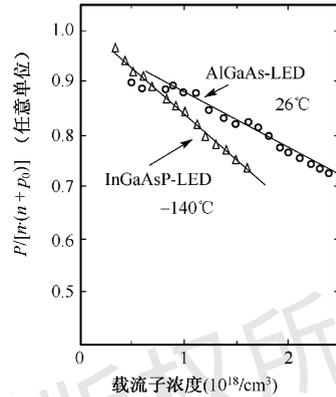


图 1.6-2 InGaAsP 与 GaAlAs 中 $P/[n(n+p_0)]$

与载流子浓度的关系

1.6.2 俄歇 (Auger) 复合^[12]

载流子在半导体能带之间的复合除了产生光辐射外，还可能产生俄歇非辐射复合。这种复合与载流子在表面态、异质界面态的复合影响相同，对半导体激光器、发光二极管的量子效率、可靠性和长期工作的稳定性等都带来不利的影响。而且带间俄歇非辐射复合已成为长波长半导体激光器和发光二极管高效率 and 可靠工作的主要障碍。下面将对俄歇复合的物理本质、复合速度及其影响因素进行较详细的分析。

在讨论俄歇复合以前，有必要介绍一下在俄歇复合中有重要作用的自旋-轨道裂矩。前面曾提到在与光跃迁有关的价带中，除了态密度较高的重空穴带外，还有一个态密度较小的轻空穴带，而且这两个带在价带项是简并的。对能带结构的进一步分析还可发现，重空穴带本身也是二重简并的。在实际晶体中，特别是讨论带间俄歇复合时，还必须考虑某一价电子的自旋磁矩与其他作轨道运动的价电子所产生的磁场之间的相互作用（即自旋-轨道相互作用），其结果是使重空穴带的二重简并解除，而在轻空穴带的下面出现一个自旋-轨道分裂带（或称自旋-轨道裂矩带），其带顶与重空穴带顶之间的能量差 Δ 称为自旋-轨道裂矩能或自旋-轨道裂矩，如图 1.6-3 所示。Ge 和 Si 的 Δ 很小，分别为 0.28eV 和 0.04eV，而 GaAs 的 Δ 为 0.35eV。对与 InP 晶格匹配的 $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ 四元化合物半导体，其自旋-轨道裂矩可表示为^[13]

$$\Delta(y) = 0.11 + 0.31y - 0.09y^2 \quad (1.6-25)$$

下面将看到， Δ 的大小及其与禁带宽度之差在决定俄歇复合速率及其影响时将有重要作用。

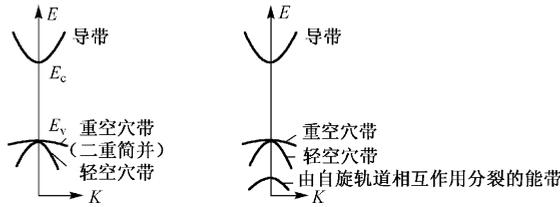


图 1.6-3 存在价带中的自旋-轨道裂矩带

俄歇复合从本质上讲是碰撞电离产生电子-空穴对的逆过程。例如，一个能量大于 1.5 倍禁带宽度的电子能产生电子-空穴对（碰撞电离过程），其逆过程则是将电子与空穴复合的能量转移给导带的其他电子或价带的其他空穴。这与前面所讨论的单纯的电子与空穴复合不同，俄歇复合过程涉及三个载流子，因此是三体复合，复合所放出的能量对另一个电子或空穴是作为附加的动能而出现的。俄歇复合同样需要满足能量与动量守恒，因此和辐射复合一样，在间接带隙半导体中，出现俄歇复合的几率很小。而在直接带隙半导体中，除了能带之间的俄歇复合外，还可能出现与杂质态电子或空穴有关的俄歇复合（或简称杂质俄歇）过程，如图 1.6-4 所示。下面所讨论的只是带间俄歇复合。对半导体光发射器件性能影响较大的主要有两种带间俄歇复合过程，即主要发生在 n 型半导体材料内的 CCHC 过程和主要发生在 p 型半导体中的 CHHS 过程。在 CCHC 中，导带的一个电子（C）与价带重空穴带上的一个空穴（H）复合后，将它们复合所放出的能量和动量转移到导带的另一个电子（C）中，使其进入更高的导带电子能态（C），如图 1.6-5(a)所示。因为这种 CCHC 俄歇复合过程涉及两个导带电子和一个重空穴，因此其复合速率正比于 $n^2 p$ 。而在 CHHS 过程中，一个导带电子（C）与一个重空穴（H）复合后，复合所释放的能量和动量将自旋-轨道裂距带（S）上的一个电子激发至重空穴（H）带中，如图 1.6-5(b)所示。显然这种过程的复合速率正比于 np^2 ， n 和 p 分别为导带电子与价带空穴的浓度。因此，我们可以将俄歇复合速率写为^[14]

$$R_{\text{Auger}} = \begin{cases} c_c n^2 p & \text{(CCHC)} \\ c_p np^2 & \text{(CHHS)} \end{cases} \quad (1.6-26)$$

式中， c_c 和 c_p 分别为 CCHC 和 CHHS 俄歇复合系数。有一些学者已经从不同的能带结构出发推出了复杂的俄歇复合速率表达式，但对同样的俄歇过程由不同理论所得出的俄歇复合速率差别甚大，甚至达数量级的悬殊。在此不去推导这些复杂的俄歇复合速率的表达式，而只对上述两种影响长波长激光器性能的俄歇复合进行定性的分析。

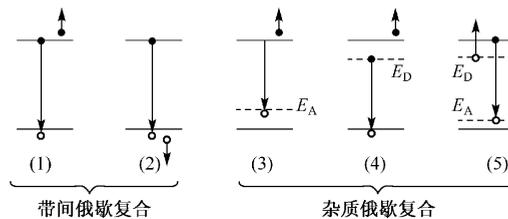


图 1.6-4 在半导体中的带间俄歇复合和杂质俄歇复合过程

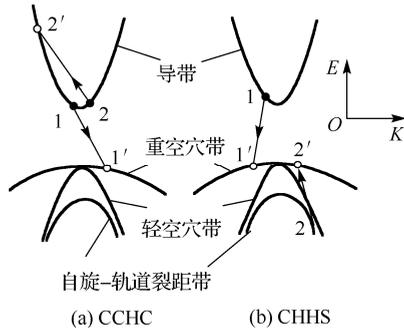


图 1.6-5 半导体中带间俄歇复合 (图中的 1 和 1' 分别代表复合过程的初态和终态; 2 和 2' 分别代表激励过程的初态和终态)

类似于前面求自发发射速率的方法, 先把上述两种带间俄歇复合在热平衡下的复合速率表示为

$$R_{\text{Auger}}^0 = \begin{cases} c_c n_0^2 p_0 & (\text{CCHC}) \\ c_p n_0 p_0^2 & (\text{CHHS}) \end{cases} \quad (1.6-27)$$

式中, n_0 、 p_0 是平衡时的电子、空穴浓度, 在非简并情况下, 显然有 $n_0 p_0 = n_i^2$, n_i 为式 (1.6-16) 所示的本征载流子浓度。前面已提到, 俄歇复合是碰撞电离的逆过程, 碰撞电离的产生率依赖于高能电子的存在, 而高能电子的数量与总的电子或空穴浓度成正比。因此, 把单位时间、单位体积所产生的高能电子或空穴写为

$$G = \begin{cases} g_e n \\ g_h p \end{cases} \quad (1.6-28)$$

式中, g_e 和 g_h 分别为高能电子或空穴的产生系数。在平衡时, 高能电子的产生率应与复合率相等, 利用式 (1.6-27) 就可得到

$$g_e = c_c n_i^2 \quad (1.6-29a)$$

$$g_h = c_p n_i^2 \quad (1.6-29b)$$

在非平衡情况下, 净的俄歇复合率可由式 (1.6-26)、式 (1.6-28) 和式 (1.6-29) 得到

$$R_{\text{Auger}} - G = (np - n_i^2)(c_c n + c_p p) \quad (1.6-30)$$

式 (1.6-30) 实际是总的俄歇复合速率, 可令其为 R_{At} , 它考虑了 CCHC、CHHS, 以及电子和空穴的产生过程对俄歇复合率的贡献。在非平衡情况下有 $n = n_0 + \Delta n$, $p = p_0 + \Delta p$, 并设 $\Delta n = \Delta p$, 因此俄歇复合寿命为

$$\tau_A = \frac{\Delta n}{R_{\text{At}}} = \frac{1}{(p_0 + n_0 + \Delta n)(c_c n + c_p p)} \quad (1.6-31)$$

在小注入情况下有 Δn 或 $\Delta p \ll (p_0 + n_0)$, 则有

$$\tau_A = \frac{1}{(p_0 + n_0)(c_c n + c_p p)} \quad (1.6-32)$$

在本征情况下有

$$\tau_A = \frac{1}{2n_i^2(c_e + c_p)} \quad (1.6-33)$$

按通常的理解, 这种三体复合的俄歇过程出现的几率应比较小, 但当载流子浓度较高时, 由于 $\tau_A \propto 1/n_i^2$, 致使这种复合的影响不能忽略。由式 (1.6-33) 还可以看到, τ_A 的大小取决于俄歇复合系数 c_e 和 c_p , 这是两个最关键的量, 它们可以由理论计算或实验得到。

由图 1.6-5 所示的带间俄歇复合模型可见, 假设载流子服从玻耳兹曼分布, 由贝蒂 (Beattie) 等^[15]建立的微扰理论可以得到

$$g_e = A_e \left(\frac{k_B T}{E_g} \right)^{3/2} \exp \left[- \left(\frac{1+2\mu}{1+\mu} \right) \frac{E_g}{k_B T} \right] \quad (1.6-34a)$$

$$g_h = A_h \left(\frac{k_B T}{E_g} \right)^{3/2} \exp \left[- \left(\frac{2+\mu}{1+\mu} \right) \frac{E_g}{k_B T} \right] \quad (1.6-34b)$$

上两式中的系数 A_e 和 A_h 分别为

$$A_e = B \left\{ \frac{m_e}{m_0} |F_1 F_2|^2 \left/ \left[\varepsilon^2 (1+\mu)^{1/2} (1+2\mu) \right] \right. \right\} \quad (1.6-35a)$$

$$A_h = B \left\{ \frac{m_h}{m_0} |F_1 F_2|^2 \left/ \left[\varepsilon^2 \left(1 + \frac{1}{\mu} \right)^{1/2} \left(1 + \frac{2}{\mu} \right) \right] \right. \right\} \quad (1.6-35b)$$

式中, 常数 $B = 2(2\pi)^{1/2} e^4 m_0 / h^2 \varepsilon_0^2$, ε 为半导体的介电常数, ε_0 为真空中的介电常数, m_e 和 m_h 分别为电子和空穴的有效质量, m_0 为自由电子的质量, $\mu = m_e / m_h$, F_1 和 F_2 为布洛赫函数周期部分的重叠积分, 表示为

$$F_i = \int u_i^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) u_i(\mathbf{k}, \mathbf{r}) d^3 r, \quad i=1, 2 \quad (1.6-36)$$

由式 (1.6-29) 和式 (1.6-34) 可求得俄歇复合系数

$$c_e = \frac{A_e}{N_c N_v} \left(\frac{k_B T}{E_g} \right)^{3/2} \exp \left(- \frac{\mu}{1+\mu} \cdot \frac{E_g}{k_B T} \right) \quad (1.6-37a)$$

$$c_p = \frac{A_h}{N_c N_v} \left(\frac{k_B T}{E_g} \right)^{3/2} \exp \left(- \frac{1}{1+\mu} \cdot \frac{E_g}{k_B T} \right) \quad (1.6-37b)$$

式中, N_c 和 N_v 分别为导带电子和价带空穴的有效态密度。由式 (1.6-34) 和式 (1.6-37) 都可以看到, 碰撞电离和俄歇复合都需要有一定的激活能才能发生。由式 (1.6-34) 可见, 为产生碰撞电离, 依照能量和动量守恒, 电子和空穴的动能必须超过禁带宽度而达到某一阈值 E_T 。在室温下, 对 Ge、Si 和 GaAs 等所测得的这一阈值动能都在 E_g 的 1.5 倍以上。同样, 由式 (1.6-37) 也可以看出, 由于俄歇复合过程的初态和终态不可能都与能带极值重合, 故其动能之和也必须超过一定的阈值 ($E_T - E_g$), 俄歇复合才能发生。阈值能量 E_T 与禁带宽度 E_g 和自旋-轨道裂矩 Δ 的关系被表示为

$$E_T = \frac{2m_{CO} + m_{HO}}{2m_{CO} + m_{HO} - m_e} E_g \quad (\text{CCHC}) \quad (1.6-38)$$

$$E_T = \frac{2m_{HO} + m_{CO}}{2m_{HO} + m_{CO} - m_s(E_T)} (E_g - \Delta) \quad (\text{CHHS}) \quad (1.6-39)$$

式中, m_{CO} 和 m_{HO} 分别为电子和重空穴在带边的有效质量, m_s 为自旋-轨道裂带中空穴的有效质量, 它是 E_T 的函数。由式 (1.6-37)、式 (1.6-38) 和式 (1.6-39) 都可以看出, 禁带宽度越小, 俄歇复合发生的概率就越大。这就是为什么 InGaAsP 为有源材料的激光器中, 由于俄歇过程所造成的非辐射效应对器件性能产生严重影响的原因所在。同时, 随 $(E_g - \Delta)$ 的减小, 发生 CHHS 俄歇复合的阈值能量减小, 而在 $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ 双异质结激光器中, 随着 As 含量 y 的增加 (即对应着激射波长的增加), 由式 (1.6-25) 可见, 自旋-轨道裂矩 Δ 也相应增加, 致使 CHHS 俄歇复合速率增加更大, 这将影响带隙相对小的长波长半导体激光器阈值电流和温度稳定性等特性。表 1.6-2 列出了与 InP 晶格匹配的 $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ 的一些能带参数随组分的变化。在 InGaAsP 中, CHHS 的俄歇复合速率要比 CCHC 俄歇复合高两个数量级左右。在高温下, CCHC 俄歇过程的影响也是很重要的。

由于俄歇复合寿命也是常用来表征俄歇复合速率的一个重要参数, 故结合式 (1.6-29) 和式 (1.6-34) 可得到俄歇复合系数 c_e 和 c_p , 将它们代入式 (1.6-33) 后得到本征半导体的俄歇复合寿命为

$$\tau_A = \frac{1}{2(A_e + A_h)} \left(\frac{E_g}{k_B T} \right)^{3/2} \left[\exp \left(\frac{1+2\mu}{1+\mu} \cdot \frac{E_g}{k_B T} \right) + \exp \left(\frac{2+\mu}{1+\mu} \cdot \frac{E_g}{k_B T} \right) \right] \quad (1.6-40)$$

由式 (1.6-40) 同样可以看出, 为什么在窄带隙有源材料中, 俄歇复合是一个不容忽视的问题。

表 1.6-2 $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ 固溶体的能带参数

y	x	λ (μm)	E_g (eV)	ϵ	m_e/m_0	m_h/m_0	m_s/m_0
0.85	0.386	1.5	0.87	11.1	0.047	0.423	0.176
0.6	0.273	1.3	0.93	10.7	0.057	0.437	0.202
0.43	0.195	1.07	1.06	10.4	0.063	0.438	0.216
0.24	0.109	1.06	1.17	10.0	0.070	0.443	0.233

对于掺杂半导体中的俄歇复合, 也可仿照上述本征情况做出类似的分析^[11]。例如, 在 p 型半导体中, 由电中性条件, 其空穴浓度 $p = n + p_0$, 这里, n 为注入的少数载流子 (在此为电子) 浓度, p_0 等于净的电离受主浓度, 如果忽略 CCHC 与 CHHS 俄歇复合系数的差别, 即 $c_p = c_e = c$, 则可仿照式 (1.6-26) 给出这种情况下的俄歇复合速率:

$$R_{\text{Auger}} = \begin{cases} cn^2(n + p_0) & \text{CCHC} \\ cn(n + p_0)^2 & \text{CHHS} \end{cases} \quad (1.6-41)$$

但如果掺杂浓度比注入载流子浓度小, 则两者都可表示为 cn^3 。如果 p_0 和 n 同数量级或更大, 则式 (1.6-41) 中 CHHS 的影响显得突出, 在 R_{Auger} (CHHS) 中 n 的线性项 cp_0^2n 和平方项 cp_0n^2 是很重要的, 甚至能超过立方项 cn^3 的影响。

1.7 增益系数与电流密度的关系

在式 (1.5-24) ~ 式 (1.5-26) 中, 我们已从量子跃迁速率出发得出了增益系数的表达式, 从而对增益系数有了一些定性的了解。从中可以看到, 一旦在半导体材料中出现了粒子数反转, 即满足 $f_c > f_v$, 则在半导体材料中就有正的增益 (或负的吸收), 受激发射速率将大于受激吸收速率。但是, 粒子数反转条件是靠外加注入电流来实现的。因此, 增益系数并不是半导体材料本身的属性。原则上, 增益系数与电流密度的关系可以通过求解式 (1.5-24) 关于增益系数的积分和式 (1.5-21) 来得到。但实际上, 要比较精确地得到在积分式中出现的有关态密度 ρ_c 和 ρ_v 、爱因斯坦跃迁几率系数 B_{21} 是困难的。为把宏观电流密度与半导体中的微观光子增益过程联系起来, 这一节我们将用一些更熟悉的参数来了解增益过程和对增益系统做出半经验但又符合实际的定量估计, 这对分析半导体激光器的特性具有重要的指导作用。

为了弄清注入载流子所产生的增益过程, 先分析一下注入半导体中的载流子的行为。注入的载流子在浓度梯度方向上会发生扩散, 在扩散长度以内的载流子在直接带隙材料中将以较大的速率产生受激的或自发的辐射复合; 当然也有部分载流子不可避免地消耗在非辐射复合之中, 如载流子与表面态、异质结界面态的复合和俄歇复合; 在异质结激光器或发光二极管的有源区中的注入载流子还有部分越过异质结势垒而泄漏。与辐射复合相比, 消耗在非辐射复合和泄漏方面的载流子所占比例较小。如忽略这些损耗, 就可将描述载流子变化速率的方程简单地表示为

$$\frac{dn}{dt} = \frac{J}{ed} - R_r(n) \quad (1.7-1)$$

式中, n 为注入的载流子浓度, $R_r(n)$ 为辐射复合速率, d 为有源层厚度, J 为注入电流密度。在稳定情况下, 显然有

$$J_n = edR_r(n) \quad (1.7-2)$$

此时注入的载流子全用来产生辐射复合, 并把这种量子效率为 1 (即每注入一个电子-空穴对即辐射出一个光子) 的电流密度称为名义电流密度, 以 J_n 表示。同时, 习惯上取 $d = 1\mu\text{m}$ 。故 J_n 是在厚度为 $1\mu\text{m}$ 的有源层内全部用来产生辐射复合所需的电流密度。

再进一步分析注入载流子是如何在半导体激光器中产生自发辐射和受激辐射复合的。如图 1.7-1 所示^[16], 当注入电流由零开始增加时, 所注入的载流子也同时增加, 并用来产生自发辐射复合。随着注入载流子浓度的增加, 并达到粒子数反转条件 $F_c - F_v \geq E_g$ 时, 也有少量注入载流子将产生受激辐射复合, 但与自发发射复合相比, 这部分载流子所占比例是很小的。只有当注入载流子浓度进一步增加使粒子数反转达到某一程度, 即达到光子增益与其损耗相抗衡的某一阈值以后, 所注入的电流才主要用来产生受激辐射。这时总的电流 $I = I_{sp} + I_{st}$, 其中 I_{sp} 与 I_{st} 分别为产生自发辐射和受激辐射的电流。由上述分析可知, 在电流密度达到阈值 J_{th} 以前, 可将式 (1.7-2) 近似为

$$J_n = er_{sp} = 1.602 \times 10^{-23} r_{sp} \quad (1.7-3)$$

式中, r_{sp} 为单位体积、单位能量间隔的自发辐射速率, J_n 的单位为 $A/(cm^2 \cdot \mu m)$ 。

自发辐射所产生的光子是受激辐射的“种子”。反过来, 受激发射光子往复穿越半导体增益介质时, 将“诱导”或激励载流子辐射复合, 此为受激辐射复合过程, 由此“克隆”和倍增出新的光子。用总的自发辐射速率所表示的电流密度与增益系数的关系如图 1.7-2 所示。增益系数从某一电流密度 J_i 开始为正值, 此时在增益介质中已开始形成粒子数反转。此后, 随着电流密度的增加, 介质的增益系数相应增加, 当电流密度达到某一阈值 J_{th} 时, 由于增益饱和效应致使增益系数不再随电流密度发生大的变化, 而使增益系数被“钳制”在阈值增益处。因而不处于振荡状态的受激发射光子(如行波半导体光放大器中的光子)增益系数依图中虚线随电流密度线性变化到更高的程度。

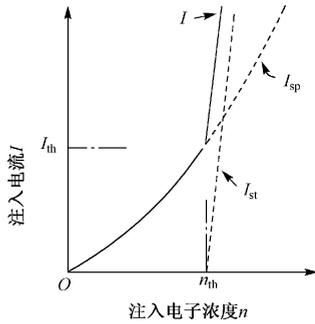


图 1.7-1 半导体激光器中注入电流与注入载流子浓度的关系

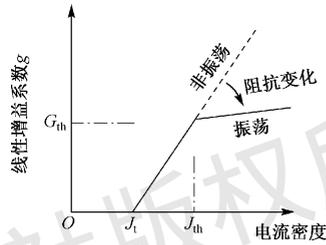


图 1.7-2 半导体激光器增益系数与注入电流密度的关系

在此分析增益系数与电流密度之间的定量关系^[17]。式(1.5-21)中的 r_{sp} 是单位体积、单位能量间隔内的自发发射速率。而实际上, 如图 1.7-3 所示, 式(1.5-21)中 $W_{sp}(h\nu)$ 分布在一个较宽的光子能量范围, 可以将它等效为 $W_{sp}(h\nu)$ 的峰值 $W_{sp}(\max)$ 与等效带宽(即其最大值的一半处的带宽) ΔE 之积, 因此可将名义电流密度 J_n 表示为

$$J_n = d_n e Z W_{sp}(\max) \Delta E \quad (1.7-4)$$

式中, Z 仍由式(1.5-29)给出, e 为自由电子电荷, 为考虑有源层厚度的影响, 其厚度 d_n ($d_n \equiv 1\mu m$) 仍列于表示式中。如果将式(1.5-25)中的 $W_{sp}(h\nu)$ 以其最大值代替, 并引入光场限制因子 Γ (其定义将由式(5.1-1)给出) 则可以得到最大的光谱增益, 即

$$g_{\max} = \frac{\bar{n}\Gamma}{c} W_{sp}(\max) \quad (1.7-5)$$

由式(1.5-22)看出, $W_{sp}(\max)$ 将小于 $W_{sp}(\max)$, 因而可将它们之间的关系表示为

$$W_{sp}(\max) = W_{sp}(\max) / \gamma \quad (1.7-6)$$

式中, γ 为大于 1 的因子, 它取决于自发发射谱的形状和电子与空穴的准费米能级之差 ($F_c - F_v$)。由图 1.7-3 可以看出, γ 随着泵浦(注入)水平的增加(相应 $F_c - F_v$ 增加)而减少, 因而 $W_{sp}(\max)$ 也随之增加。将式(1.7-4)、式(1.7-5)与式(1.7-6)相结合, 就给出单位体积的电流密度 J_n 与最大光谱增益之间的关系为

$$J_n = d_n [ceZ\Delta E\gamma / (\bar{n}\Gamma)] g_{\max} \quad (1.7-7)$$

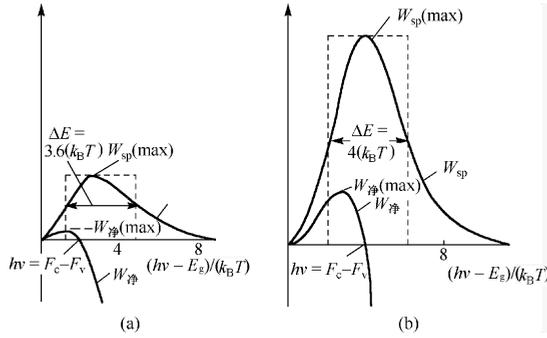


图 1.7-3 在两种不同注入水平下，受激发射速率 $W_{\gamma\text{净}}$ 与自发发射速率 W_{sp} 谱

为方便起见，将等效带宽 ΔE 用熟知的 $k_B T$ 来量度：

$$\Delta E = qk_B T \quad (1.7-8)$$

其中 q 为比 1 大的数。作为一个具体例子，将室温下 GaAs 的带隙、光子能量（或波长）、折射率 \bar{n} 等有关数据代入式（1.7-7）就可得到：

$$\frac{J_n}{g_{\text{max}}} = d_n \left(\frac{T}{300} \right) \times 5.38 \frac{q\gamma}{\Gamma} \quad (\text{A} \cdot \text{cm}^{-1}) \quad (1.7-9)$$

只要 γ 有一个不是太大的合理取值，则式（1.7-9）是一个有用的形式。它至少适合于 $F_c - F_v > E_g + 2k_B T$ 或 $J_n = 4J_t$ (J_t 为透明电流密度) 的情况。超出该范围，增益饱和效应开始起作用，此时增益随电流的变化与半导体的性质或掺杂浓度无明显关系，控制增益的主要因素是线宽和隐含在 $Z(h\nu)$ 中的发射波长。在很强的泵浦水平下，即 $F_c - F_v$ 有较大增加，而引起带宽增加（即 q 值增加），如图 1.7-3(b) 所示。但在一个很大的增益系数范围内， q 的增加为 γ 的减少所补偿，使 $\gamma q \approx 4.5$ ，因而式（1.7-9）变为

$$\frac{J_n}{g_{\text{max}}} \approx d_n \frac{24(T/300)}{\Gamma} \quad (\text{A} \cdot \text{cm}^{-1}) \quad (1.7-10)$$

很纯的半导体有源介质，相当于具有抛物线能带、常数矩阵元和遵循严格的 k 选择的情况。这时的增益-电流关系可以利用严格的 k 选择下的式（1.5-4）对 $h\nu$ 积分以求得总的自发发射速率 R_{sp} ，然后将其代入式（1.7-2）中求出名义电流密度；用式（1.5-13）乘以 \bar{n}/c 可得到单位长度的名义增益。为了得到所关心的峰值增益与电流密度的关系，需要将态密度 $\rho_{\text{red}}(h\nu)$ 、电子占据几率 f_c 和 f_v 代入有关自发发射与受激发射的表示式中，然后进行适当的数值运算，显然这是很复杂的。

斯特恩给出了在严格 k 选择下 GaAs 的峰值增益与电流密度的关系^[18]，如图 1.7-4 所示，这是在样品有源层厚度为 $1\mu\text{m}$ 和几个不同温度下得到的。在相当大的增益范围（ $20 \sim 500\text{cm}^{-1}$ ）内，图中曲线可拟合成增益系数与电流密度之间的线性关系：

$$g = A(J - J_t) \quad (1.7-11)$$

式中， J_t 是增益曲线在电流密度坐标上的截距，对应刚好满足粒子数反转条件 $h\nu = F_c - F_v$ 或增益恰为正值时的电流密度（或称透明电流密度）； A 为 $g \sim J$ 曲线的梯度，即增益因子或增益常数，其近似依 $1/T$ 关系变化。也可将式（1.7-11）表示成相应的增益系数与注入载流子浓度 n 的关系：

$$g = A_0(n - n_t) \quad (1.7-12)$$

式中, n_i 对应着 J_i 的载流子浓度, A_0 为相应的 $g \sim n$ 曲线的梯度常数, 也就是第 5 章将要介绍的微分增益系数。由于通常电流注入效率并不为 1, 注入的载流子不可能完全进入半导体增益区, 因而式 (1.7-11) 与式 (1.7-12) 中的梯度常数不尽一致。

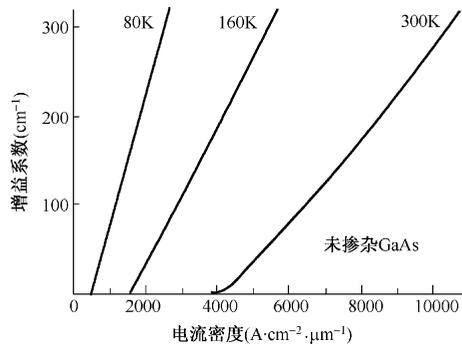


图 1.7-4 纯 GaAs 的峰值增益与电流密度的理论关系

尽管式 (1.7-11) 与式 (1.7-12) 是在所谓严格 k 选择规则下得出的增益-电流的线性近似关系, 但这种简单的关系表达式却被广泛采用。下面的分析将看到, 在实际的增益介质中, 并不存在这种理想的线性关系。如果将式 (1.7-12) 两边取微分, 则 dg/dN 更能反映整个增益系数随注入载流子浓度的变化。 dg/dN 称微分增益, 是一个表征增益介质性能的重要参数, 对半导体激光器的线宽增强因子、调制带宽、量子效率等特性和对半导体光放大器的增益、饱和输出功率等都会产生关键性影响。

上述严格的 k 选择也许并不能代表任何真实的情况, 即使半导体材料足够纯, 注入载流子也将扰动本征抛物线带边, 更何况在掺杂 (特别是重掺杂) 下 k 选择定则所受到的松弛。处理 k 选择受到松弛时增益系数与电流密度的关系问题时, 最简单 (但不精确) 的方法是假设所有能带之间的主要跃迁具有相等的跃迁几率, 再结合一些经验数据和使用有关函数关系的模型, 同样能给出一些有用的结果。这种带间有常数跃迁几率的近似, 既适合于高注入下费米能级进入抛物线能带的情况, 也适合于费米能级处在带尾的情况 (不管载流子大部分在抛物带内或低温下全部处在带尾内)。对于后者, 可以得到一个简单的、适合于半导体激光器工作情况的增益与电流密度的关系。以重掺杂 p 型半导体为例, 价带处于半填充, $f_v = 1/2$; 设导带具有式 (1.4-15) 表示的指数带尾, 电子费米能级处在抛物线导带以下能量为 $-F_c$ 的导带尾内。如果只考虑靠近 F_c 的尾态, 则电子占据几率可近似表示为

$$f_c = \frac{1}{2} + (F_c - E_c) / (4k_B T) \quad (1.7-13)$$

将 $(f_c - f_v)$ 及指数带尾态密度式 (1.4-15) 代入式 (1.5-24) 得到

$$g \propto \left(\frac{F_c - E_c}{k_B T} \right) \exp \left(\frac{E_c}{E_t} \right) \quad (1.7-14)$$

可以证明, 当 $E_c = F_c - E_t$ 时, 将得到增益系数的最大值, 即

$$g_{\max} \propto \left(\frac{E_t}{k_B T} \right) \exp \left(\frac{F_c}{E_t} - 1 \right) \quad (1.7-15)$$

对于导带尾态 (相对于抛物带底为负值能量) 上的电子, 其辐射跃迁所产生的光子

能量为 $E_g + E_c$ ， E_g 为本征带隙，在有带尾存在时称它为名义带隙。因此，对应于最大增益系数的光子能量为 $(E_g + F_c - E_t)$ ，可见带尾的影响使 g_{\max} 所对应的光子能量远低于带隙能量。

为了将 g_{\max} 表示为与注入电流相应的注入载流子浓度的关系，并从式 (1.7-14) 和式 (1.7-15) 中消去与带尾无明显关系的 F_c ，为此使用恩格尔 (Unger) 关系^[19]：

$$n = N_c \exp \left(\frac{F_c}{[(k_B T)^2 + E_t^2]^{1/2}} \right) \quad (1.7-16)$$

式中， n 为注入载流子浓度， N_c 为正比于 $[(k_B T)^2 + E_t^2]^{3/2}$ 的导带有效态密度，这样，方程 (1.7-15) 就可表示为

$$g_{\max} \propto \left(\frac{n}{N_c} \right)^b \quad (1.7-17)$$

式中， $b = [(k_B T / E_t)^2 + 1]^{1/2}$ ，带尾深度 E_t 在室温下为 0.01eV。对所考虑的 p 型材料，注入的电子浓度 n 显然正比于电流密度，这就可得到呈超线性变化的 g_{\max} 与名义电流密度的关系为

$$g_{\max} \propto J_n^b \quad (1.7-18)$$

式中， b 值由很低温度下的 1 变到室温下的 3。实验证明，上述超线性关系一直到注入载流子浓度达 $10^{18}/\text{cm}^3$ 时仍能成立。显然带尾的存在使 g_{\max} 随电流密度的变化变得缓慢，式 (1.7-17) 适合于激射谱处在材料增益谱中心的情况。或者说，在激射波长下的光子在一个有限谱宽内能经历最大的增益。例如，用增透或增反来改变半导体激光器的腔面反射率，这时达到阈值所需的增益将变化，激射波长也少许漂移，但仍可用式 (1.7-17) 来计算新情况下的最大增益系数。

另一种情况与上述考虑最大增益系数不同，有时需要知道在某一固定波长下增益随载流子浓度的变化。例如，在瞬态现象中，每个激光振荡模式的频率（或波长）可以认为是不变的。为确定上述这种变化关系，取式 (1.7-14) 中的 E_c 为定值，因而所对应的光子能量 $(E_g + E_c)$ 也为定值，而式中 F_c 却是变量，则利用式 (1.7-16) 所得到的 F_c 随注入电子浓度的变化和式 (1.7-14) 可得到

$$g \propto \ln \left(\frac{n}{n_0} \right) \quad (1.7-19)$$

式中， n_0 是当所考虑的某一尾态与准费米能级相同时（即 $E_c = F_c$ ）的载流子浓度。式 (1.7-19) 所表示的是一种亚线性关系，如图 1.7-5 中的实线所示。为了比较，图中虚线表示最大增益与载流子浓度的关系式 (1.7-17)，两者相切所对应的载流子浓度为

$$\ln \left(\frac{n}{n_0} \right) = \left[\left(\frac{k_B T}{E_t} \right)^2 + 1 \right]^{-1/2} \quad (1.7-20)$$

这意味着，对这一特定的载流子浓度 n ，增益介质激射波长可获得的最大增益。

前面所使用的指数带尾和跃迁矩阵元不随尾态能量而变化的假设是一种简化。斯特恩运用了比较符合实际的哈尔普林-拉克斯带尾模型和随尾态能量变化的矩阵元，对用高浓度 ($10^{18}/\text{cm}^3$) 施主杂质补偿的 p 型 GaAs，对不同温度下的增益系数与电流密度关系进行了理

论与实验研究，结果如图 1.7-6 所示。为便于比较，图中以点划线表示了 300K 下纯 GaAs 的结果。由图可见，在室温下，高掺杂的一般影响是使增益-电流特性偏离线性，即在 $g < 100\text{cm}^{-1}$ 的区域内，增益随电流上升缓慢，而在 $g > 100\text{cm}^{-1}$ 的区域内，与纯 GaAs 相比几乎有相同的、较快的增长速率。其原因是前面曾提到的，当注入电流密度 $J = 4J_t$ 时，增益系数与电流的关系与半导体的性质和掺杂浓度无关，而只取决于发射带宽，当带宽大于 $k_B T$ 时，由于高掺杂而畸变的能带结构虽使带宽增加，但在高温和高电流下，这种带宽增加的影响变得越来越不明显，在室温和增益大于 300cm^{-1} 所对应的电流下，这种影响可以忽略。同时，在高掺杂下也不致由于自由载流子吸收使增益系数明显减少。所有这些都使得高掺杂与纯半导体在高注入电流下有近乎相同的增益特性。

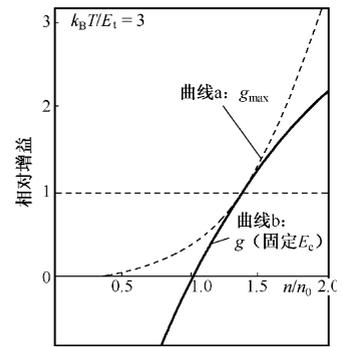


图 1.7-5 相对增益与注入载流子浓度的关系

与图 1.7-4 比较还可看到，高掺杂减少了增益刚好为正值电流密度 J_t ，致使在低电流密度下增益系数仍有有限的增加，这是因为带尾越深，粒子数达到反转所要求的费米能级也越低。由注入载流子所占据的态数也比费米能级位于抛物带内少得多。因此，在重掺杂下 J_t 的减少是由于所要求注入的载流子数减少，另外，斯特恩认为在深尾态上的载流子复合寿命较长。

斯特恩还计算了净受主浓度 $(N_A - N_D) = 4 \times 10^{17} / \text{cm}^3$ 的低掺杂 GaAs 在室温下增益系数与名义电流密度的关系，如图 1.7-7 所示。在各曲线上还标出了大于或小于抛物线带隙的光子能量。各曲线是依式 (1.7-19) 对固定光子能量下得到的，最上面一条是最大增益 g_{max} 的包络线，它与严格 k 选择定则下的纯 GaAs 的增益曲线很相近（参见图 1.7-4），但在电流密度小于 $4000 \text{A} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \mu\text{m}^{-1}$ 时，增益系数并不为零。图 1.7-8 是依据和图 1.7-7 同样的情况但以名义电流为参数的增益系数与光子能量的关系曲线。由图看出，峰值增益（由图中短划线表示）随名义电流的增加而增加，峰值增益的光子能量随电流增加而增加。在带尾区，这种增加的速度缓慢。这种增加电流而增加增益的同时发生波长漂移的现象在半导体激光器和放大器中是常遇到的，也是这些器件需稳定工作的困难之一。

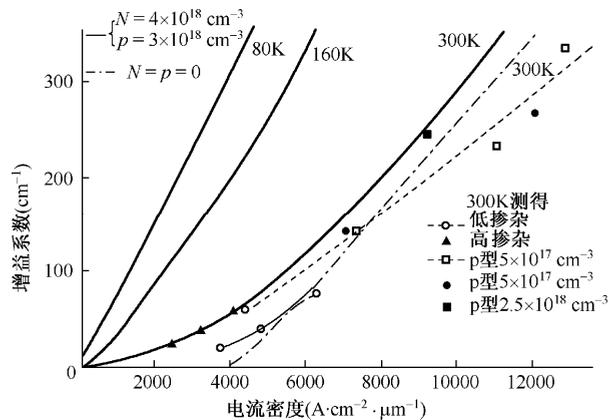


图 1.7-6 在不同温度下增益峰值与注入电流密度的理论关系与实验结果

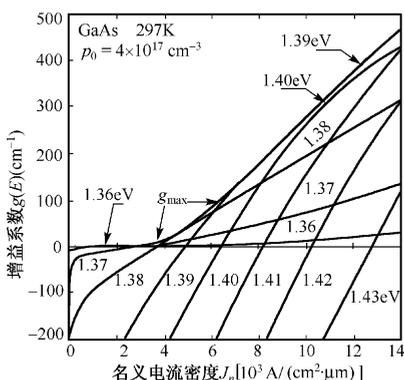


图 1.7-7 所计算的 GaAs 在低掺杂下增益系数与名义电流密度的关系

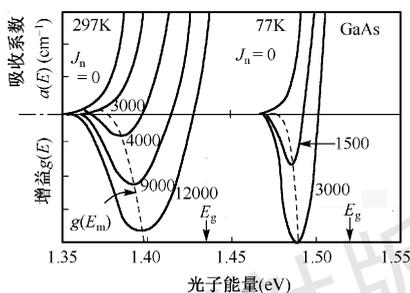


图 1.7-8 计算的 GaAs 增益系数与光子能量的关系，图中 J_n 的单位为 $A \cdot cm^{-2} \cdot \mu m^{-1}$ ， $N_A - N_D = 4 \times 10^{17} cm^{-3}$

思考与习题

1. 在半导体中有哪几种与光有关的跃迁？利用这些光跃迁可制造出哪些类型的半导体光电子学器件？
2. 为什么半导体锗、硅不能用来作为半导体激光器的有源介质，而是常用的光探测器材料？对近年来有关硅基发光或硅基激光的研究前景作一述评。
3. 用量子力学理论证明直接带隙跃迁半导体比间接带隙跃迁半导体的跃迁几率大。
4. 什么叫跃迁的 k 选择定则，它对电子在能带间的跃迁速率产生什么影响？
5. 影响光跃迁速率的因素有哪些？
6. 推导伯纳德-杜拉福格条件，并说明其物理意义。
7. 比较求解电子态密度与光子态密度的方法与步骤的异同点。
8. 在半导体中重掺杂对能带结构、电子态密度、带隙、跃迁几率等带来什么影响？
9. 证明 $(f_c - f_v) / [f_c(1 - f_v)]$ 即为式 (1.5-22) 的 $W_{\text{净}}(h\nu) / W_{\text{sp}}(h\nu)$ 。
10. 什么叫俄歇复合？俄歇复合速率与哪些因素有关？为什么在 GaInAsP/InP 等长波长激光器中，俄歇复合是影响其阈值电流密度、温度稳定性与可靠性的重要原因？
11. 比较严格 k 选择定则与其受到松弛情况下增益-电流特性的区别。
12. 带尾的存在对半导体有源介质增益特性产生哪些影响？
13. 证明式 (1.7-20)。
14. 说明图 1.7-5 和图 1.7-6 所依据的假设有何不同，并说明它们各自的局限性。

参 考 文 献

- [1] (日)白藤纯嗣著,黄振岗、王茂增译. 半导体物理基础, 高等教育出版社, 1983, 第四章.
- [2] (美)H. C. 凯西, M. B. 帕尼什著, 杜宝勋译. 异质结构激光器(上), 国防工业出版社, 1983, 第三章.
- [3] G. H. B. Thompson, Physics of Semiconductor Laser Devices. The Pitman Press, Bath, 1980, pp. 57~78.
- [4] E. O. Kane, Band Structure-Indium Antimonide, J. Physics Chem. Solid, 1, p. 249(1957).
- [5] F. Stern, Band Tail Model for Optical Absorption and for the Mobility Edge in Amorphous Silicon, Phys. Rev., B3, P. 2636 (1971).
- [6] 同[3], pp. 43~51.
- [7] 同[3], pp. 64~78.
- [8] 同[2], pp. 133~145.
- [9] 同[3], pp. 49~550.
- [10] (美)亨利 克雷歇尔, J. K 巴特勒著, 黄史竖译. 半导体激光器和异质结发光二极管, 国防工业出版社, 1983, pp. 27~40.
- [11] Robert Olshansky, et al, Measurement of Radiative and Nonradiative Re-combination Rates in InGaAsP and AlGaAs Light Sources, IEEE J. of Quantum Electron. , 1984, 20(8):838~854.
- [12] 同[1], pp. 170~172.
- [13] D. Z. Garbuzov et al, Recombination Processes in InGaAsP/InP Double Heterostructures Emitting. $\lambda = 1 \sim 1.5 \mu\text{m}$, Soviet Phys. Semiconductor, 1984, 18(6): 65~67.
- [14] Mesumi Takeshima, Analysis of Temperature Sensitive Operation in $1.6 \mu\text{m}$ In_{0.53}Ga_{0.47}As Lasers, J. APPL. Phys. 1984, 56(3): 691~695.
- [15] A. R. Beattie and P. T. Landsberg, Auger Effect in Semiconductors, Proc Roy. Soc. Ser. A, 1959, 249(1256): 16~29.
- [16] Minoru Yamada, Transverse and Longitudinal Mode Control in Semiconductor Injection Lasers, IEEE J. Quantum Electron. 1983, 19(9): 1365~1380.
- [17] 同[3], pp. 78~92.
- [18] F. Stern, Gain Current Relation for GaAs Lasers with n-type and Undoped Active Lasers, IEEE J. Quant. Electron. , 1973, 9: 290.
- [19] K. Unger, Spontaneous and Stimulated Emission in Junction Lasers, I Band with Parabolic State Densities. II Band with Density of States Tails, Zeitschrift für Physik, 1967, 207: 322~341.