

文章编号: 2095-4980(2013)01-0016-05

太赫兹量子级联激光器有源区增益分析和设计

段素青, 楚卫东, 杨宁, 李艳芳

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

摘要: 太赫兹量子级联激光器(QCL)有源区设计主要包括啁啾超晶格、束缚-连续态跃迁和共振声子等模式。本文利用密度矩阵方法模拟太赫兹 QCL 光增益谱的基本特征, 特别是通过分析太赫兹 QCL 光增益特性与子带寿命的依赖关系, 理解太赫兹 QCL 对超晶格子带间非辐射跃迁寿命的要求。进而根据这些要求给出一种基于束缚-连续态跃迁和共振声子混合模式的太赫兹 QCL 有源区设计方案, 利用纵光学声子共振帮助缩短束缚-连续态跃迁模式中下辐射态寿命。

关键词: 太赫兹; 量子级联激光器; 光增益; 有源区设计

中图分类号: TN248.4

文献标识码: A

Design of the active region gain of the terahertz quantum cascade lasers

DUAN Su-qing, CHU Wei-dong, YANG Ning, LI Yan-fang

(Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China)

Abstract: Current active region designs of terahertz Quantum Cascade Lasers (QCL) include chirped superlattice, bound-to-continuum transition and resonant phonon modes. The density matrix method is employed to study the properties of gain of THz QCL, especially the dependences of the QCL's gain on the inter-subband transitions' lifetimes. Based on the analysis, an active region design of THz QCL based on bound-to-continuum transition with resonant phonon scattering extraction is presented, employing the longitudinal optical phonon scattering to shorten the lifetime of the lower radiation level of QCL.

Key words: Terahertz; quantum cascade lasers; gain; design of the active region

太赫兹技术在波谱分析和成像^[1]、新一代雷达^[2]和通信、生物医学和医疗诊断、环境监测、射电天文学等领域具有广阔的应用前景,但由于在过去很长的时间里缺乏高效的太赫兹源和太赫兹探测技术,太赫兹波段目前仍是人类尚未充分认知和利用的波段。近年来,随着人们关注程度的提高,与太赫兹源相关的技术有了飞速进步,包括自由电子激光器^[3]、以回旋管为代表的真空电子学太赫兹源,包括耿氏振荡器在内的电子学太赫兹源,以及包括量子级联激光器在内的半导体太赫兹源都得到了很大的发展。

量子级联激光器(QCL)是一种借助载流子在超晶格结构中的共振隧穿和子带间跃迁实现光增益的单极相干光源,其最早的思想可追溯到 20 世纪 70 年代,前苏联 R Kazarinov 和 R Suris 指出利用多量子阱的光子辅助隧穿过程可实现光增益^[4]。到 20 世纪 80 年代, F Capasso 等人提出利用超晶格中电子顺序共振隧穿过程实现红外半导体激光器的设想^[5],即量子级联激光器的理论雏形。1994 年,第 1 支中红外 QCL(工作波长 4.2 μm)在 Bell 实验室制备成功^[6],到 2002 年,第 1 台太赫兹 QCL 得以实现^[7]。目前中红外 QCL 的研究已获得了引人注目的成果,器件连续波功率已达瓦级,脉冲功率可达 10 W 甚至更高,工作温度已达到室温。对于太赫兹 QCL,由于两辐射态间能差很小,电子的选择性注入和粒子数反转条件的获得比中红外 QCL 更难,因此目前工作温度与器件功率仍不能与中红外 QCL 相比。但随着太赫兹 QCL 有源区设计的改进和器件工艺的进步,低温下的单管功率已可达到约 200 mW,最高工作温度可达到 200 K 左右。最近,已相继有实验组证明太赫兹 QCL 的工作温度可以超过 $\hbar\omega/k_B$ ^[8],相信通过进一步寻找优化的有源区设计或新型的材料体系,最终有可能实现室温工作的太赫兹 QCL。目前太赫兹 QCL 有源区电子结构设计主要包括啁啾超晶格模式、束缚-连续态跃迁模式^[9]、共振声子模式^[10]等。有关太赫兹量子级联激光器的更详细介绍可参见 B S Williams 的综述文章^[11]。虽然目前实验中太赫兹 QCL

的工作温度和功率在不断提升,但对太赫兹 QCL 工作动力学过程的理解仍有很多重要的理论问题没有得到很好的回答,对不同器件光增益特性及器件动力学行为的理论与实验描述仍有争议;对 QCL 载流子输运过程中退相干散射及其对器件性能的影响仍需细致讨论;QCL 中多模光场的相互作用等基本问题也需进一步研究。

太赫兹 QCL 理论设计主要包括作为增益介质的超晶格有源区电子结构设计^[12]和波导设计^[13]两方面。对于有源区结构设计,由于 QCL 的增益建立基于电子隧穿和子带间跃迁过程,因此需要建立太赫兹 QCL 输运和光增益过程的理论模拟和分析手段,给出高性能 QCL 器件对电子子带寿命的依赖关系,分析影响 QCL 子带电子寿命的主要因素,以此为依据,发展精确的计算手段,最终通过子带能级结构和波函数设计给出优化的有源区尺寸方案。本文将介绍基于密度矩阵的太赫兹 QCL 光增益谱模拟方法,给出太赫兹 QCL 对子带非辐射跃迁寿命的依赖关系,以此为基础给出一种基于束缚-连续态跃迁和共振声子混合模式的有源区设计方案。

1 基于密度矩阵的太赫兹 QCL 光增益谱模拟

在太赫兹 QCL 有源区设计中一个关键的步骤是对器件的输运和光增益性质进行模拟,以得到低阈值电流密度、高增益器件对 QCL 电子结构的要求。目前太赫兹 QCL 动力学特性模拟中主要采用的理论方法包括速率方程^[14]、密度矩阵^[15]、格林函数^[16]及蒙特卡罗方法^[17]等。这其中密度矩阵方法可以方便地包含退相干散射对 QCL 性能的影响,且计算过程较简洁,被广泛地用于太赫兹 QCL 的设计阶段。文献[15]利用密度矩阵方法系统地研究了太赫兹 QCL 输运与上辐射态注入效率及子带寿命的关系,讨论了太赫兹 QCL 增益谱线形及线宽的基本特征。在此,利用密度矩阵方法研究 QCL 光增益特性与子带间非辐射跃迁寿命的关系。

以图 1 中最简单的三能级太赫兹 QCL 为例,通过密度矩阵方法计算体系在光场作用下的电极化,就可以获得对 QCL 光增益典型特性的一般认识。当然在真实器件设计中,能级结构不会如此简单,但计算思路是一致的。图 1 中虚线框标识出 QCL 一个基本单元,其中能级 1~3 分别为注入/收集态、下辐射态和上辐射态。上一级注入态(1')与下一级上辐射态(3)由于隧穿耦合会形成 2 个扩展的能级,能级劈裂为 $\Delta E_{1,3}$,这一能级分裂会随外电场或者说外加电压的改变而改变。体系密度矩阵的运动方程可写为:

$$\frac{d}{dt}\rho(1',3,2) = -\frac{i}{\hbar}[H,\rho(1',3,2)] - \frac{i}{\hbar}[H',\rho(1',3,2)] \quad (1)$$

式中:密度矩阵 ρ 的对角项为各能级的电子数; i 是虚数单位; \hbar 是普朗克常数;对于光场作用下的 QCL 系统, H 包含外场下超晶格子带电子哈密顿量及光与电子相互作用的哈密顿量,考虑到太赫兹波的波长及 QCL 的尺寸,一般可采用电偶极近似下的光-物质相互作用哈密顿量来描述太赫兹光场与 QCL 中载流子的相互作用; H' 原则上可以包含各种微扰势对系统的影响,此处不具体讨论 H' 的形式,而将由 QCL 中各种散射简单地描述为子带间跃迁寿命,从而可以直接讨论不同子带间非辐射跃迁对 QCL 增益特性的影响。这样,对图 1 所示 QCL,方程(1)可具体写为:

$$\frac{d}{dt}\rho = -\frac{i}{\hbar}\left[\begin{pmatrix} E_{1'} & -\hbar\Omega_{1,3} & 0 \\ -\hbar\Omega_{1,3} & E_3 & ez_{23}\epsilon e^{i\omega t} \\ 0 & ez_{23}\epsilon e^{-i\omega t} & E_2 \end{pmatrix}, \rho\right] + \begin{pmatrix} \frac{\rho_{33} + \rho_{22}}{\tau_{31}} & -\frac{\rho_{1'3}}{\tau_{113}} & -\frac{\rho_{1'2}e^{-i\omega t}}{\tau_{112}} \\ -\frac{\rho_{31'}}{\tau_{113}} & -\frac{\rho_{33}}{\tau_3} - \frac{\rho_{33} - \rho_{22}}{\tau_{st}} & -\frac{\rho_{32}e^{i\omega t}}{\tau_{123}} \\ -\frac{\rho_{21}e^{i\omega t}}{\tau_{112}} & -\frac{\rho_{23}e^{-i\omega t}}{\tau_{123}} & \frac{\rho_{33} + \rho_{33} - \rho_{22}}{\tau_{32}} - \frac{\rho_{22}}{\tau_{21}} \end{pmatrix} \rho \quad (2)$$

式中: E_i 和 Ω_j 为子带能量及相邻单元注入态和上辐射态的能级反交叉; z_{23} 为上下辐射态间的电偶极矩矩阵元; τ_{ij} 为能级间相干散射时间; $\tau_{||j}$ 为退相干散射时间,一般包含由能级的有限寿命造成的能级展宽项(τ_i, τ_j),还可以包含其他机制造成的纯退相干项,文献中一般记作 T_2^* , T_2^* 与能级寿命展宽对退相干时间的贡献有一定区别,具体讨论可参见文献[18]; τ_{st} 表示辐射能级间受激辐射导致的有限寿命。

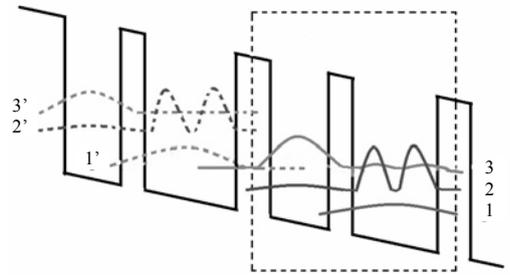


Fig.1 Subband structure of three-level QCL
图 1 三能级 QCL 子带结构示意图

对于系统的稳态, 可令 $\frac{d}{dt}\rho=0$, 从而得到密度矩阵的稳态解, 并进一步求出体系在频率为 ω 的光场作用下产生的电极化^[19-20]:

$$\chi(\omega) = \frac{eZ_{23}}{V\epsilon_0\epsilon} [\rho_{23}(\omega) + \rho_{23}^*(-\omega)] \equiv \chi'(\omega) + i\chi''(\omega) \quad (3)$$

式中 V 为有源区体积。则可求得体系的光增益系数为:

$$g(\omega) = \frac{\omega\chi''(\omega)}{cn_r} \quad (4)$$

2 太赫兹 QCL 光增益谱与子带间非辐射跃迁寿命的关系

图 2 为计算的太赫兹 QCL 光增益谱与子带寿命的关系, 可以看到太赫兹 QCL 器件一般具有较宽的增益谱, 特别是通过对子带间散射的控制能够在一定频率范围内获得较大的增益, 但这同时也可能造成 QCL 较宽的辐射谱, 在对谱线宽度有严格要求的应用中需要利用波导设计等帮助实现器件的单模工作。

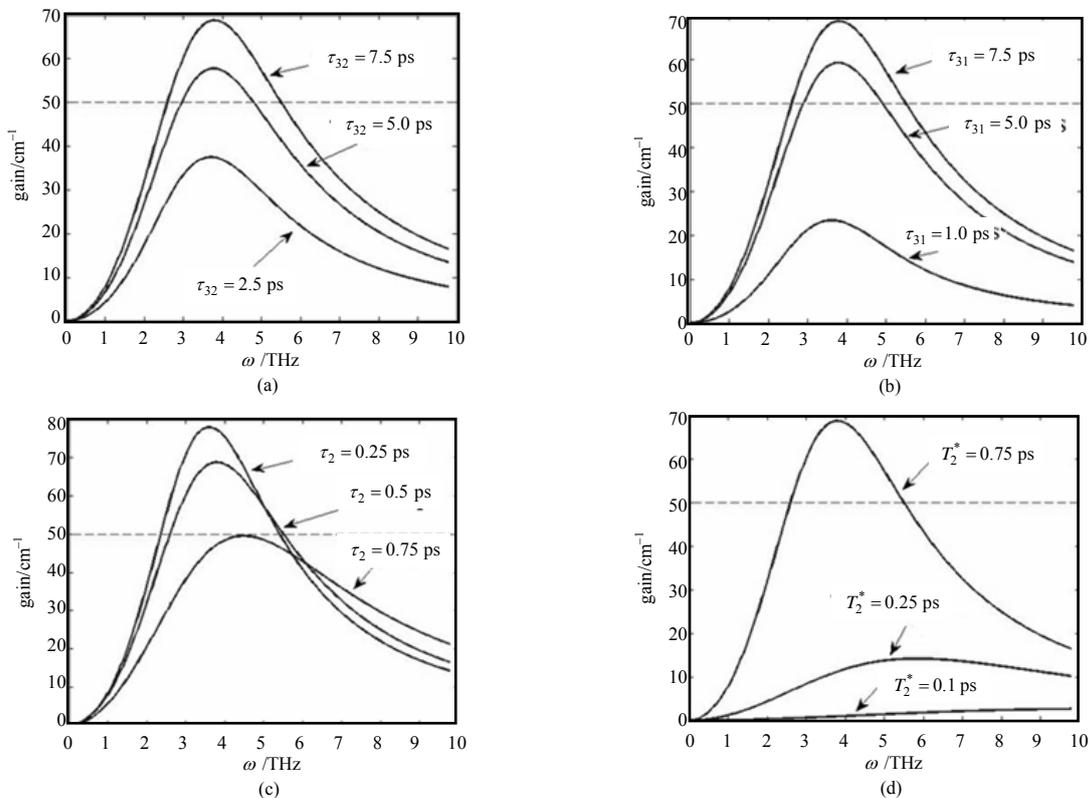


Fig.2 Dependence of gain of THz QCL on the lifetimes of inter-subband non-irradiative transitions

图 2 太赫兹 QCL 光增益与子带寿命的关系

图 2(a)给出太赫兹 QCL 光增益与能级 3 和 2 之间的非辐射散射时间的依赖关系。计算中取 $\tau_{31}=5.0$ ps, $\tau_{21}=0.5$ ps, $T_2^*=0.75$ ps。由图 2(a)可以看出, QCL 的增益随 τ_{32} 的增大而增大。也就是说对于太赫兹 QCL, 两辐射态之间非辐射跃迁概率越小, 体系对光场的增益效果越明显。同样通过对上辐射态与收集/注入态之间的非辐射跃迁(图 2(b))、下辐射态寿命(图 2(c))及退相干时间(图 2(d))的分析, 可以发现: 上辐射态与收集态之间的跃迁越弱, 下辐射态与收集态之间的跃迁越强, 电子的退相干散射越弱, 体系的光增益特性越好。

3 束缚-连续态跃迁与共振声子混合模式太赫兹 QCL 有源区设计

当前常见的太赫兹 QCL 有源区设计主要包括啁啾超晶格、束缚-连续态跃迁及共振声子等。其中共振声子模式太赫兹 QCL 具有最好的温度特性, 目前高工作温度的器件一般采用这种有源区设计, 但相对来说共振声子模式的器件对超晶格生长精度的要求也较高。束缚-连续态跃迁模式的有源区设计具有较好的功率特性, 对生长精

度的要求比共振声子模式低。但由于其下辐射态为位于某微带顶的延展态，随着工作温度的升高，除了上辐射态寿命缩短外，下辐射态寿命也逐渐增加，根据上节对 QCL 增益特性的分析，这样的子带寿命变化会降低器件的增益特性，因而其温度特性一般比共振声子模式的器件差。为改善束缚-连续态跃迁模式 QCL 的温度特性，设计了如图 3 的束缚-连续态跃迁和共振声子混合模式的 QCL 有源区结构。

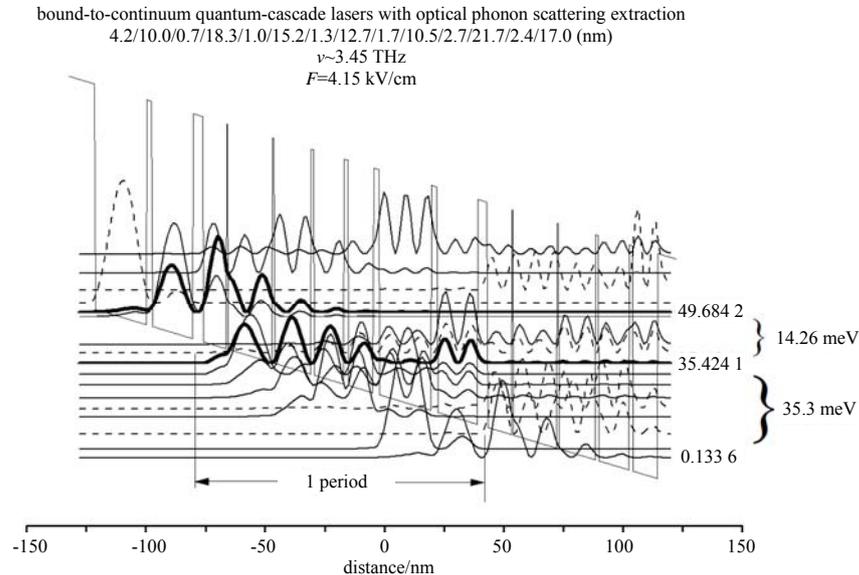


Fig.3 Active region design of a THz QCL based on bound-to-continuum transition with optical phonon scattering extraction

图 3 束缚-连续态转变和共振声子混合模式有源区设计

如图 3 所示，基于束缚-连续态跃迁和共振声子混合模式的 GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As 太赫兹 QCL 有源区一个重复单元由 7 个量子阱组成，势垒/势阱尺寸为 4.2/10.0/0.7/18.3/1.0/15.2/1.3/12.7/1.7/10.5/2.7/21.7/2.4/17.0 nm，其中第 1 个数为势垒宽度。在这一设计方案中，两辐射态仍采用束缚-连续态转变模式，在外场为 4.15 kV/cm 时，计算得到的两辐射能级(图中粗实线)能差为 14.26 meV，约为 3.45 THz。与通常的束缚-连续态转变模式不同的是，在这一设计中连续态所处的窄带底并不直接作为收集/注入态，而是通过另一条与窄带顶能差接近纵光学声子能量的能级作为收集/注入态，利用这一能级与窄带顶附近态的纵光学声子共振可以更有效地缩短下辐射态寿命，从而有可能改善器件温度特性。

4 结论

本文利用密度矩阵方法模拟太赫兹 QCL 光增益谱的基本特征，通过分析太赫兹 QCL 光增益特性与子带寿命的依赖关系，指出：QCL 两辐射态非辐射跃迁越弱，上辐射态与收集态之间的跃迁越弱，下辐射态与收集态之间的跃迁越强，电子的退相干散射越弱，体系的光增益特性越好。在理解太赫兹 QCL 对超晶格子带间非辐射跃迁寿命要求的基础上，给出了一种基于束缚-连续态跃迁和共振声子混合模式的太赫兹 QCL 有源区设计方案，这样的设计利用纵光学声子共振帮助缩短束缚-连续态跃迁模式中下辐射态寿命，有可能帮助改善束缚-连续态跃迁模式太赫兹 QCL 器件的温度特性。

参考文献：

- [1] 吴卫东. 便携式太赫兹波谱仪的概念设计[J]. 信息与电子工程, 2011,9(3):280-282. (WU Weidong. Concept design of portable terahertz wave spectrometer[J]. Information And Electronic Engineering, 2011,9(3):280-282.)
- [2] 林华. 无人机载太赫兹合成孔径雷达成像分析与仿真[J]. 信息与电子工程, 2010,8(4):373-377. (LIN Hua. Analysis and simulation of UAV terahertz wave synthetic aperture radar imaging[J]. Information And Electronic Engineering, 2010,8(4):373-377.)
- [3] 黎明,柏伟,杨兴繁,等. 紧凑型自由电子激光太赫兹源研究进展[J]. 信息与电子工程, 2011,9(3):342-346. (LI Ming, BAI Wei,YANG Xingfan,et al. Development of a compact Terahertz FEL source[J]. Information And Electronic Engineering, 2011,9(3):342-346.)

- [4] Kazarinov R, Suris R A. Possibility of amplification of electromagnetic waves in a semiconductor with a superlattice[J]. *Sov. Phys. Semicond.*, 1971,5(4):797–800.
- [5] Capasso F, Mohammed K, Cho A Y. Sequential resonant tunneling through a multi-quantum well superlattice[J]. *Applied Physics Letters*, 1986,48(7),478–480.
- [6] Faist J, Capasso F, Sivco D L, et al. Quantum cascade laser[J]. *Science*, 1994,264(5158):553–556.
- [7] Rüdiger Köhler, Alessandro Tredicucci¹, Fabio Beltram¹, et al. Terahertz semiconductor heterostructure laser[J]. *Nature*, 2002,417(6885):156–159.
- [8] Kumar S, Chan C W I, Hu Q, et al. A 1.8-THz quantum cascade laser operating significantly above the temperature of $\hbar\omega = k_B$ [J]. *Nature Physics*, 2011,7(2),166–171.
- [9] Scarlari Giacomo, Ajili Lassaad, Faist Jérôme, et al. Far-infrared ($\lambda \sim 87 \mu\text{m}$) bound-to-continuum quantum-cascade lasers operating up to 90 K[J]. *Applied Physics Letters*, 2003,82(19):3165–3165.
- [10] Williams B S, Callebaut H, Kumar S, et al. 3.4-THz quantum cascade laser based on longitudinal-optical-phonon scattering for depopulation[J]. *Applied Physics Letters*, 2003,82(19):1015–1017.
- [11] Williams B S. Terahertz quantum-cascade lasers[J]. *Nature Photonics*, 2007,1(9):517–525.
- [12] 段素青, 楚卫东, 张伟, 等. 太赫兹 QCL 的电子结构计算和设计[J]. *信息与电子工程*, 2011,9(3):336–341. (DUAN Suqing, CHU Weidong, ZHANG Wei, et al. Calculation and design of electronic structures for terahertz Quantum Cascade Lasers[J]. *Information And Electronic Engineering*, 2011,9(3):336–341.)
- [13] 王建, 吴卫东, 章小丽, 等. THz QCL 波导结构研究与光束质量分析[J]. *信息与电子工程*, 2011,9(3):365–368. (WANG Jian, WU Weidong, ZHANG Xiaoli, et al. Research on waveguide structure and analysis of beam quality of THz QCL[J]. *Information And Electronic Engineering*, 2011,9(3):365–368.)
- [14] Khurgin J B, Dikmelik Y. Transport and gain in a quantum cascade laser: model and equivalent circuit[J]. *Optical Engineering*, 2010,49(11):111110-1–111110-9.
- [15] Kumar S, Hu Q. Coherence of resonant-tunneling transport in terahertz quantum-cascade lasers[J]. *Physical Review B*, 2009,80(27):245316-1–245316-14.
- [16] Lee S C, Banit F, Woerner M, et al. Quantum mechanical wavepacket transport in quantum cascade laser structures[J]. *Physical Review B*, 2006,73(24):245320-1–245320-6.
- [17] Borowik P, Thobel J L, Adamowicz L. Monte Carlo based microscopic description of electron transport in GaAs/Al_{0.45}Ga_{0.55}As quantum-cascade laser structure[J]. *Journal of Applied Physics*, 2010,108(7):073106-1–073106-6.
- [18] Callebaut H, Hu Q. Importance of coherence for electron transport in terahertz quantum cascade lasers[J]. *Journal of Applied Physics*, 2005,98(10):104505-1–104505-11.
- [19] Yariv A. *Quantum Electronics*[M]. 2nd ed. New York: John Wiley & Sons, 1975.
- [20] Shimoda K. *Introduction to Laser Physics*[M]. 2nd ed. Berlin: Springer-Verlag, 1983.

作者简介:



段素青(1963–), 男, 山西省朔州市人, 博士, 研究员, 主要研究方向为低维纳米系统的量子输运特性的理论以及材料物性的第一性原理计算. email: duan_suqing@iapcm.ac.cn.

楚卫东(1969–), 男, 山东省定陶市人, 博士, 副研究员, 主要研究方向为半导体低维受限体系的量子现象研究, 在半导体量子点、纳米环等低维结构的量子态设计、光学性质、电输运特性以及光电器件应用等.

杨宁(1980–), 男, 北京市人, 博士, 副研究员, 主要研究方向为包括量子点、量子环的电子和激子性质, 石墨烯等低维纳米结构的电子学特性, 量子级联激光器电子结构和输运特性等.

李艳芳(1971–), 女, 山西省临汾市人, 博士, 副教授, 近年主要从事量子级联激光器波导设计及实验研究.