

Si/SiGe量子级联激光器研究进展^{*}

韩根全^{1,†} 林桂江² 余金中^{1,2}

(1 中国科学院半导体研究所 集成光电子国家重点联合实验室 北京 100083)

(2 厦门大学物理系 厦门大学半导体光子学研究中心 厦门 361005)

摘要 Si/SiGe量子级联激光器是一种新型的带内跃迁的红外光源,突破了 Si基材料间接带隙特性对光跃迁的限制. Si/SiGe量子级联激光器的开发将为实现太赫兹有源器件的硅基集成产生深远影响. 文章介绍了 Si/SiGe量子级联激光器的工作原理,以及这类激光器在能带设计、材料生长和波导制作方面的最新进展.

关键词 Si/SiGe量子级联激光器,超晶格,太赫兹,子带跃迁

The Si/SiGe quantum cascade laser

HAN Gen-Quan^{1,†} L N Gui-Jiang² YU Jin-Zhong^{1,2}

(1 State Key Joint Laboratory on Integrated Optoelectronics, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China)

(2 Department of Physics and Semiconductor Photonics Center, Xiamen University, Xiamen 361005, China)

Abstract The Si/SiGe quantum cascade laser is a new coherent IR source based on intersubband transitions, which overcomes the limitations imposed by the indirect gap. This laser will have a great impact on the development of terahertz devices and indicates a possible way to integrate active terahertz devices into silicon-based technology. In this paper we will describe the principle and latest progress in the active layer design, materials growth, and waveguide fabrication of this Si-based laser.

Keywords Si/SiGe quantum cascade lasers, superlattice, terahertz, intersubband transition

1 引言

量子级联激光器是利用量子阱中子带之间的跃迁实现光发射,光子能量和禁带宽度无关,当前国际上研究的太赫兹量子级联激光器系指频段处于 1—10 THz (300—30 μm 波长)范围. Si/SiGe量子级联激光器是新型的太赫兹 (1 THz = 10^{12} Hz)光源之一. 尽管太赫兹波在医疗成像^[1] (包括牙齿^[1]、皮肤检测^[2]),环境检测^[3]和气体分子谱^[4]等方面都有着很好的应用前景,但是由于缺乏理想的太赫兹激光光源,太赫兹波仍未被完全开发和认识. 2002年,首次报道了 67 μm AlGaAs/GaAs THz量子级联激光器,大大推动了这一领域的发展. Si/SiGe量子级联激光器是新型的太赫兹激光光源之一.

从 1994年到现在,基于 III-V 族材料的量子级联激光器的研究取得了巨大成就^[5-11]. 波长覆盖中

红外和太赫兹,其中中红外激光器已经实现了室温工作^[12]. 在硅基光电子集成的推动下, Si/SiGe量子级联激光器的开发引起了人们的注意. Si/SiGe量子级联激光器是利用空穴在价带子带间的带内跃迁来实现发光,从而可以克服硅、锗等材料由于间接带隙辐射复合效率低的缺点,实现硅发光.

本文将介绍 Si/SiGe量子级联激光器的工作原理,以及这类激光器在能带设计、材料生长、光谱测量和波导制作方面的最新进展.

2 量子级联激光器的发光原理

量子级联激光器的概念是 1971年由前苏联

* 国家自然科学基金 (批准号: 60576001)资助项目

2005-07-19收到初稿, 2005-12-29修回

† 通讯联系人. Email: hgquan@red.semi.ac.cn

Ioffe研究所的 Kazanoriv 和 Surlis 共同提出来的^[13]. 他们当时设想载流子通过一系列量子阱的光子辅助隧穿机制实现光增益,即在偏压下载流子从一个量子阱的基态通过顺序共振隧穿跃迁到下一个量子阱的激发态并伴随光子的发射.其工作原理如图 1所示.

量子级联激光器和带间 p-n结双极型半导体激光器相比有两个主要的特点:第一是单极器件,只利用电子(或空穴)在导带(或价带)内部子带间跃迁来产生光子;第二是它的级联效应,利用电子或者空穴在多个量子阱中的顺序隧穿来实现光放大.这样发出的光子和半导体的禁带宽度无关,这种结构的激光器是非常理想的长波长激光光源.

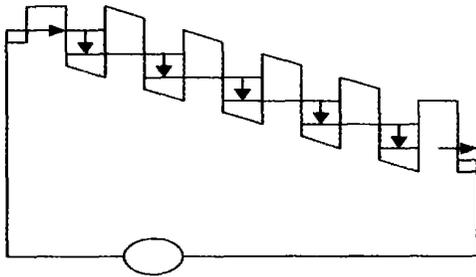


图 1 量子级联激光器示意图

Si与 SiGe合金的电子亲和势相近,异质结的导带带阶对电子几乎不能形成限制,价带带阶则比较大($E_v \approx 0.78 \text{ eV} \cdot x$,其中 x 为合金中 Ge的组分)^[14],因此 Si/SiGe量子级联激光器是利用空穴子带之间的光跃迁来实现发光的.

3 Si/SiGe量子级联激光器

3.1 硅基量子级联激光器的优点和存在的困难

3.1.1 Si/SiGe量子级联激光器的优势

Si/SiGe量子级联结构的优势在于,首先,硅工艺非常成熟,有可能实现太赫兹器件的硅基光电子集成.其次,IV族元素(Si, Ge等)中没有强的极性光学声子的散射作用,从而减少温度对能带寿命的影响.实验和理论验证,当温度升高到 100K的时候,也没有发现子带寿命有明显的降低^[15,16].第三,根据波函数的对称性,电子在导带子能级之间跃迁只能发出 TM模式的光,而空穴在轻空穴子带和重空穴子带之间跃迁可以发出 TM和 TE模式的电磁波^[17],所以 Si/SiGe量子级联激光器更容易做成面发射激光器.

3.1.2 制作 Si/SiGe量子级联激光器存在的困难

III-V族量子级联激光器有源区一般包括 25—40个周期,每个周期又包括有源层和注入层.每个器件都由 380—900层超晶格组成,其中最薄的小于 1nm.这种结构不适合 Si/SiGe量子级联,硅和锗的晶格常数相差 4.17%, Si/SiGe超晶格生长非常困难.生长过程中硅层承受张应力,富锗层承受压应力,当单层厚度超过临界厚度的时候,就会因为应力而产生位错.即使保证每层都不超过临界厚度,应力能也会随着层数增加而积累,使整个结构处于亚稳相,最后出现位错.现在通过在 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 衬底上生长应力对称的超晶格结构,已经基本上解决了材料生长的问题.

另外, Si/SiGe超晶格的带阶出现在价带上,所以量子级联要利用空穴在价带子能级之间的跃迁来实现发光,而价带结构相对复杂,给有源区设计带来了困难.基于以上原因,现在的 Si/SiGe量子级联结构有源区设计都比较简单.

3.2 Si/SiGe量子级联激光器的设计制作

3.2.1 Si/SiGe量子级联激光器能带设计

激光器设计中最重要的是如何获得粒子数反转.对于量子级联激光器,如果激射上下能级分别为 2和 1,则粒子数差可表示为^[18]:

$$n_{21} = n_2 - n_1 = n_2 \left(1 - \frac{1}{2}\right) = \frac{J}{e} z_{21} \left(1 - \frac{1}{2}\right), \quad (1)$$

其中 J 是注入电流密度, n_i 为子能级的粒子数, z_i 表示子能级的寿命.激光器的峰值增益与激射上下能级的粒子数差以及激射能级波函数之间的双极矩阵元有关^[19]:

$$g_{\text{peak}} = n_{21} Z_{21}^2, \quad (2)$$

其中 z_{21} 为激射上下能级波函数之间的双极矩阵元^[20].由此可见,获得粒子数反转的关键是子能级寿命.对于 Si/SiGe量子级联结构,空穴子能级寿命主要由畸变势散射、合金散射、空穴之间的散射等散射过程决定,其具体的计算细节可参阅文献[21].对增益有影响的还有波函数之间的双极矩阵元,其值主要取决于波函数的交叠程度.由此可见,无论是粒子数反转还是激光增益都由超晶格结构(层厚以及 Ge的含量等)和由此决定的能带结构决定.下面简单介绍几种已有的能带结构.

(1)重空穴子能级之间跃迁(HH2 - HH1)

2000年,瑞士科学家首次得到了 Si/SiGe量子级联结构并测量了电致发光谱^[22](图 2).如图 2所

示,他们利用重空穴 HH2和 HH1做激射上下能级.测量的电致发光谱峰值能量为 125meV,属于中红外范围.由于两个重空穴子带 (HH2和 HH1)之间轻空穴子带 (LH)的存在,空穴从 HH2向 LH1快速散射,使得激射上能级 HH2寿命非常短,达不到粒子数反转的要求.

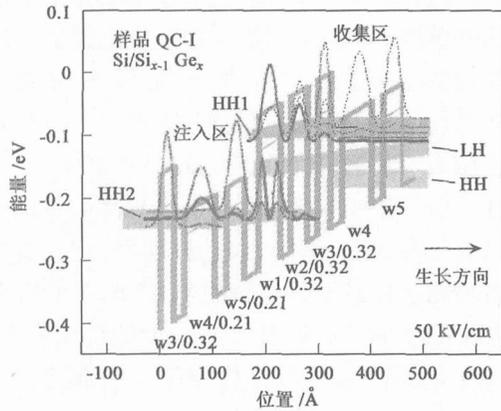


图 2 2000年科学家首次得到的 SiGe量子级联结构的能带图和电致发光谱

Bomann等人针对 Si/SiGe重空穴子能级的非辐射复合寿命太短的特点,设想靠减少 2个激射能级(图 3中的 HH1和 HH2)的交叠程度来增加激射上能级(HH2)的寿命^[23].将 2个激射能级分别限制在 2个不同的量子阱中,通过调节中间硅势垒的宽度来调节激射能级的寿命.研究发现,当中间硅势垒的厚度超过 2.5nm时,激射上能级(HH2)的寿命确实有明显的提高,但这时光学矩阵元又变得太小而不可能实现激光激射.这种结构的关键在于调整硅势垒,选择一个合适的宽度,既能保证激射上能级长的寿命,又能保证激光跃迁矩阵元足够的大.

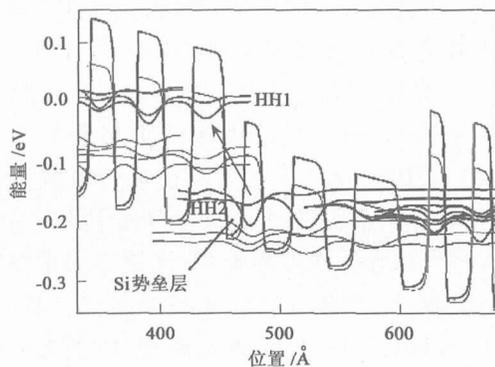


图 3 重空穴作为激射上下能级分别限制在不同的量子阱中

(2)同一量子阱中轻空穴和重空穴之间的跃迁 (LH1 - HH1)

为了得到太赫兹和面发射激光器,有人提出用轻空穴和重空穴做激射上下能级^[25](图 4).用 6 × 6KP微扰理论计算,得到这种结构的激射上下能级之间的能量差只和量子阱中锗的组分有关系,和阱宽无关.理论计算显示,利用轻空穴 LH1的有效质量反转可以得到 LH1和 HH1的粒子数反转.空穴首先注入到 LH1带布里渊区中心,然后弛豫到 k1点,在 k1点发生跃迁到 HH1,然后再弛豫回到 HH1,的布里渊区中心.这样在 k1点形成了粒子数反转,这种结构在 III-V族量子级联激光器中已经得到应用.但是,在 p型 Si/SiGe异质结构中,轻空穴质量反转非常浅(1—3meV),而且是否能得到有效质量反转,严格依赖于合金组分和量子阱宽度.

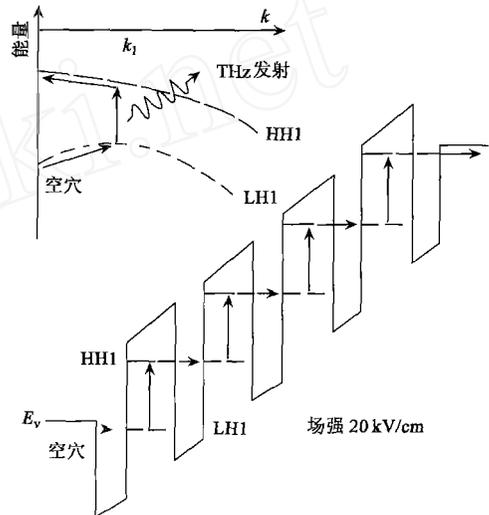


图 4 利用 LH1和 HH1做为激射上下能级

利用这种结构成功的得到了面发射太赫兹的电致发光谱(图 5).实验测量 LH1 - HH1跃迁的特征寿命为 ~20ps,而且随温度变化不明显,这证明空穴在子能级之间的弛豫是由合金散射决定的(不受温度影响).而且太赫兹的光谱在室温下仍可以观测到,这进一步证明了 Si/SiGe量子级联激光器可以高温工作.级联结构的太赫兹发射功率可以由下式计算:

$$P = \frac{1}{e} N h \nu, \quad (3)$$

其中 e 是电子电荷, I 是电流, η 是功率效率(收集效率乘以每个级联周期的量子效率), N 表示量子级联结构的周期数, h 是普朗克常数, ν 是光子频率.利用这个公式可以得到这种结构的最大发射功率能达到

纳瓦量级.

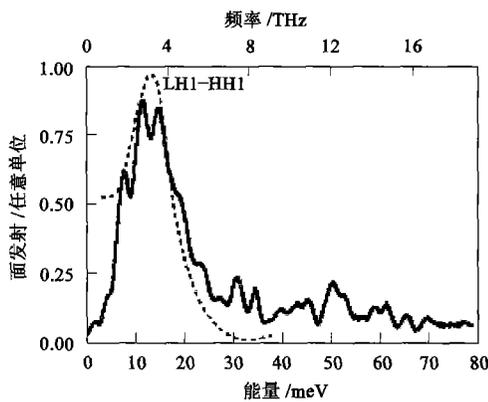


图 5 太赫兹面发射的电致发光谱,虚线和实线分别代表计算值和测量值

这种结构存在的一个问题是,从 HH1 向下个周期的激射上能级 LH1 注入的效率非常的低,可以通过适当减小势垒的宽度来增加注入效率.

(3) 相邻阱间重空穴和轻空穴之间的跃迁 (HH - LH)

相邻阱间 HH1 - LH1 的跃迁也称为对角跃迁. 这种 Si/SiGe 量子级联结构发射波长 (跃迁能量) 可通过偏压电场得到调制. 图 6 所示为作者计算的一个 Si/Si_{0.73}Ge_{0.27}/Si 量子级联结构有源区价带的能带结构,它是在 Kelsall^[26] 等人设计的基础上,进一步考虑通过光学声子实现载流子的转移和重复利用,量子阱中 LH1 和 HH1 能量差约为 49meV,约等于 SiGe 合金光学声子能量,实线箭头表示空穴跃迁过程,虚线箭头表示空穴从 LH1 向 HH1 弛豫.

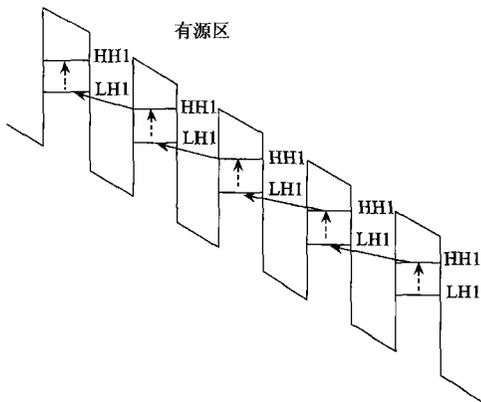


图 6 偏压下相邻阱间 HH1-LH1 的跃迁级联结构的能带

基于这种能带设计, Paul 等在调制掺杂的 Si/SiGe 量子级联结构中,在 4.2K 下,得到面发射的

THz 功率达 50nW,温度为 60K 时,仍有 2nW 的峰值功率,并发现在高于 150K 的温度下仍能得到 THz 的光发射^[27].

3.2.2 Si/SiGe 量子级联结构材料生长

由于 Si 和 Ge 之间存在着 4% 晶格常数差,所以直接在硅衬底上生长 Si_{1-x}Ge_x 会由于应力而出现位错. 即使生长的 Si/SiGe 超晶格结构每层厚度都不超过临界厚度,但是由于应力能的积累,使整个结构处于亚稳态很容易出现位错. 现在 Si/SiGe 量子级联结构材料生长的问题已经通过在 Si_{1-x}Ge_x 衬底上生长应力对称的 Si/Si_{1-y}Ge_y 超晶格解决了.

Si_{1-x}Ge_x 衬衬底最初是用来生长高质量的薄膜材料以获得高的电子和空穴的迁移率,现在普遍应用于各种超晶格量子阱材料的生长. 现在生长 Si_{1-x}Ge_x 衬衬底的方法很多,比如组分的线性渐变、组分的阶梯变化、高低温交替结构等等. 但是最常用的还是组分渐变结构,一般是每一微米 Ge 组分变化 10%,然后在顶层生长约 1μm 的均匀层.

应力平衡是指超晶格结构中各层平均应力为零. 在 Si_{1-x}Ge_x 衬衬底上生长 Si/Si_{1-y}Ge_y (y > x) 结构的超晶格,其中 Si 层承受张应力, Si_{1-y}Ge_y 承受压应力. 平均应力为零可以用下式表示^[28]:

$$A_i \cdot t_i = 0, \tag{4}$$

其中 A_i 和第 i 层的弹性常数有关 (A_i = C₁₁ + C₁₂ - 2C₁₂²/C₁₁), t_i 和 t_i 分别表示第 i 层的应力和厚度. 当平均应力为零的时候,整个系统处于稳定状态. 现在利用这种原理可以生长 600 个周期的 Si/SiGe 量子级联结构,彻底解决了材料生长的问题.

3.2.3 Si/SiGe 量子级联激光器波导制作

太赫兹量子级联激光器一个很关键的问题是激光器波导层的制作. 传统的波导要求波导厚度不小于激光在介质中波长的一半 (λ/2). 比如,对于 3THz 的激光器,波导层厚度要不小于 15μm. 这对于晶格失配的 Si/SiGe 量子级联结构几乎是不可能的. 在基于 III-V 族材料的太赫兹量子级联激光器中,上层波导是金属层,利用表面等离子效应将光波限制在半导体和金属界面上. 下层波导用重掺杂的半导体材料,可以将 50% 的导模限制在有源区. 但是对于 Si/SiGe 量子级联激光器,这种重掺杂的半导体结构只能把 20% 的光能限制在有源区,效果很不好.

英国科学家用金属的硅化物代替下层波导的重掺杂半导体结构^[29],将波导损耗降低了 2 个数量

级,成功地阻止了导模向衬底的泄漏.他们先在硅衬底上用化学气相沉淀(CVD)的方法生长一层大约 $0.2\mu\text{m}$ 厚的 WSi_2 多晶薄膜,然后键合一个晶片做为手柄,将背面的硅层磨去,再抛光.再把这种结构做为衬底生长缓冲层均匀层和应力对称的量子级联结构.最上层生长一层重掺杂的接触层.图7为硅化钨波导的模拟结果.利用这种波导结构的器件的电致发光谱的峰值强度明显提高.

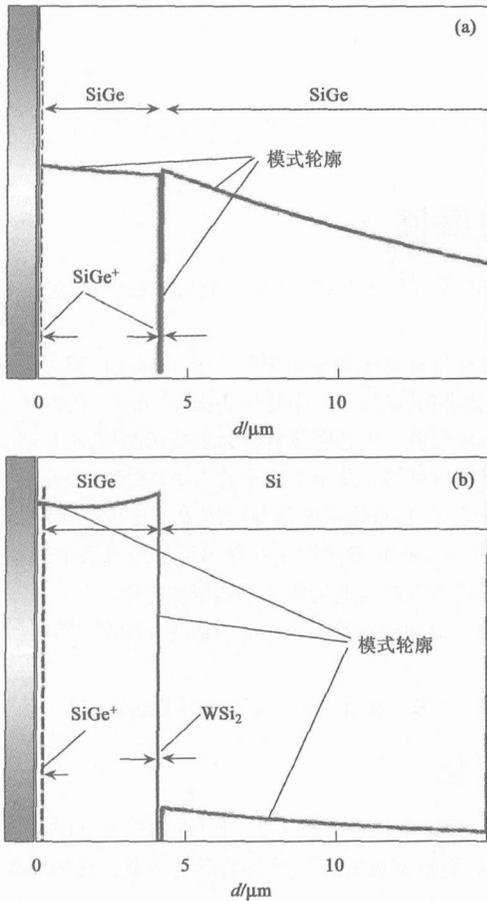


图7 普通重掺杂波导(a)和硅化钨波导(b)对TM模式的太赫兹波限制的模拟结果.顶层接触为A1

4 结束语

本文简要介绍了Si/SiGe量子级联激光器的最新研究进展.Si/SiGe量子级联激光器是硅发光和太赫兹开发的关键问题,现在材料生长和波导的问题已经基本上解决,最重要的还是有源区能带结构的设计问题.从这几年Si/SiGe QCL的研究来看,要实现较大的激射功率和较高温度下的运作,仍有很多问题有待解决:

(1)能带设计问题.虽然相邻阱间重空穴和轻空穴之间的跃迁理论上可以得到粒子数反转,但是

由于阱间跃迁受界面影响比较严重,激射功率很难提高.

(2)关于能级寿命的计算.现在关于各种散射机制(畸变势散射、合金散射、空穴之间的散射、界面散射等)对能级寿命的影响的计算还不是很完善,需要进一步进行模拟计算,这对有源区的能带设计非常关键.

(3)材料生长控制.从(4)式可以看出,超晶格任何参数(Ge组分、层厚等)变化都会引起整个结构的能量积累,从而使整个结构处于亚稳相,所以材料的生长工艺还要进一步提高.

(4)波导设计.硅化钨波导虽然可以提高对太赫兹波的限制,但是制作过程复杂,给器件制作带来了困难,所以有待开发其他的波导结构.

相信随着问题研究的深入,Si/SiGe量子级联激光器从能带设计到器件制作都会进一步的优化,最终会实现实用化的Si/SiGe量子级联激光器.

参考文献

- [1] Amone D D, Ciesla C M, Pepper M, Phys World, 2000, 13: 35
- [2] Woodward R M, Cole B E, Wallace V P *et al* Proc CLEO, Paper CW E4, 2001
- [3] Mittelman D M, Jacobsen R H, Neelamani R *et al* Appl Phys B, 1998, 67: 379
- [4] Keutsch F N, Brown M G, Petersen P B *et al* J. Chem. Phys, 2001, 114: 3994
- [5] Faist J, Capasso F, Sirtori C *et al* Science, 1994, 264: 553
- [6] Sirtori C, Faist J, Capasso F *et al* Appl Phys Lett, 1995, 66: 3242
- [7] Gmachl C, Tredicucci A, Capasso F *et al* Appl Phys Lett, 1998, 72: 3130
- [8] Tredicucci A, Capasso F, Gmachl C *et al* Appl Phys Lett, 1998, 73: 2101
- [9] Colombelli R, Capasso F, Gmachl C *et al* Appl Phys Lett, 2001, 78: 2620
- [10] Beck M, Hofstetter D, Aellen T *et al* Science, 2002, 295: 301
- [11] Kumar S, Williams B S, Kohen S *et al* Appl Phys Lett, 2004, 84: 2494
- [12] Sirtori C, Kruck P, Barbieri S *et al* Appl Phys Lett, 1998, 73: 3486
- [13] Kazarinov R, Suris R A. Sov. Phys Semicond, 1971, 5: 707
- [14] Kasper E. Properties of strained and relaxed silicon germanium. NSPEC 1995
- [15] Pidgeon C R, Murzyn P, Wells J-P R *et al* Physica E, 2002, 13, 904
- [16] Pidgeon C R, Murzyn P, Wells J-P R *et al* Appl Phys Lett, 2002, 80: 1456

- [17] Lynch S A, Bates R, Paul D J *et al* Appl Phys Lett, 2002, 81: 1543
- [18] Benjamin S, Hu Q. J. Appl Phys, 1997, 90: 5504
- [19] Friedman L, Sun G, Soref R A. Appl Phys Lett, 2001, 78: 401
- [20] Julien F H, Sa'ar A, Wang J *et al* Electron Lett, 1995, 31: 838
- [21] Ikonic Z, Harrison P, Kelsall R W. Materials Science and Engineering B, 2002, 89: 84
- [22] Dehlinger Diehl G L, Gennser U, Sigg H *et al* Science, 2000, 290: 2277
- [23] Bormann I, Brunner K, Hackenbuchner S *et al* Appl Phys Lett, 2003, 83: 5371
- [24] Lynch S A, Bates R, Paul D J *et al* Appl Phys Lett, 2002, 81: 1543
- [25] Bates R, Lynch S A, Paul D J *et al* Appl Phys Lett, 2003, 83: 4092
- [26] Kelsall R W, Ikonic Z, Harrison P *et al* Terahertz Electronics Proceedings IEEE Tenth International Conference, 2002, 9 - 12
- [27] Paul D J, Lynch S A, Ates R B *et al* Physica E, 2003, 16: 147
- [28] Zhang J, Li X B, Neave J H *et al* Journal of Crystal Growth 2005, 278: 488
- [29] Kelsall R W, Ikonic Z, Harrison P *et al* Optical Materials 2005, 27: 851

·物理新闻和动态·

未接触物体间的摩擦

未接触物体间的摩擦,顾名思义就是说两个物体间在没有接触的情况下产生了摩擦.这是一个从未想到过的提法.最近美国 Cornell大学的 S Kuehn教授及其同事们正在进行着这方面的研究.

S Kuehn教授提出了一个问题,即两物体的接触是什么含义?他建议:当两物体表面间相距小于 1 nm时,就可以认为两物体是相接触的.相接触的物体所发生的摩擦作用类似于常用的微型尼龙搭扣,即处于一个物体表面上“突出”的原子去刮擦另一个物体表面上处于“山谷”内的原子.当两个物体表面间相距大于 1nm时所产生的摩擦就称为未接触摩擦. S Kuehn教授的研究组利用一根长 1mm的微小单晶所制作的悬臂去进行实验,该悬臂的厚度只有几千个原子的大小.将悬臂垂直向下地接近样品的表面并让它滑动,这时悬臂的运动将由于摩擦作用而逐渐地缓慢,它的慢化程度是与摩擦力成比例的.实验给出了奇怪的结果,即悬臂与表面间的摩擦力只与样品的化学性质有关.为了进一步研究不同样品的化学性质所导致的摩擦作用,研究组第一次直接地探测到由各种高聚物材料组成的样品中表面分子运动带来的弱电场所导致的摩擦作用.

近年来对于用单分子 MRI(磁共振成像)来测定微小的力提出了要求,而非接触性的摩擦力就成为了阻碍 MRI探测的一个因素.就是在这样的背景下才提出了上述的研究工作.

(云中客 摘自 Physical Review Letters, 21 April 2006)

地球磁场的变化

近年来科学家们都知道,地磁场的强度每十年要降低 0.5%左右.如果这个趋势继续下去,那么每隔三百万年地球的磁场就可能要发生一次反转,即地球上的南极要变为北极,而北极变为南极.地球磁场的这个现象是不是一个必然的规律,对科学家们来说,还是一个未解决的问题.

英国 Leeds大学的 D. Gubbins教授和他的同事们从船舶的航海日记上收集了大量的航行数据,时间从 1590年到 1840年.他们收集了由船上罗盘仪上记录下来的磁场方向的数据.利用这些原始数据可以计算出地磁场的“偶极高斯系数(dipole Gauss coefficient)”,这是一个正比于地磁场偶极矩的参数.通过计算,他们发现,从 1590—1840年间地偶极矩每年只下降 2nT,它要比 1840年后每年下降 15 nT小得多.这个结果表明,从 1590—1840年,地球磁场强度的大小相对来说是比较稳定的,而从 1840年以后,磁场强度就以每百年下降 5%的速率发生变化.为什么会有这样一个差别呢?研究组从地球核心处的磁场结构的变化来探讨这个差别,即 1840年前后地幔边界的变化.他们发现,在 1840年以后,地磁场强度下降变快的原因很可能是在位于南半球的南极洲附近有一个磁通量反转区域,而这个特点在 1590—1840年的数据中并不存在.因此解释和研究这个问题对地球物理学家来说是一项有挑战意义的工作.科学家们相信,我们这个行星内部的磁发动机是要对地球磁场强度的变化负主要的责任,但真正的物理机理目前尚不清楚,也许今后 1000年内可能有地磁场的反转.

(云中客 摘自 Science, 11 May 2006)