

密级： 保密期限：

北京邮电大学

博士学位论文



题目：低维异质结构与新型 III-V 族
半导体发光器件的研究

学 号：2014010306

姓 名：刘昊

专 业：电子科学与技术

导 师：任晓敏

学 院：光电信息学院

(信息光子学与光通信研究院)

2019年6月7日

中国·北京

密级： 保密期限：

北京邮电大学

博士学位论文



题目：低维异质结构与新型 III-V 族
半导体发光器件的研究

学 号：2014010306

姓 名：刘昊

专 业：电子科学与技术

导 师：任晓敏

学 院：光电信息学院

(信息光子学与光通信研究院)

2019年6月7日

独创性（或创新性）声明

本人声明所呈交的论文是本人在导师指导下进行的研究工作及取得的研究成果。尽我所知，除了文中特别加以标注和致谢中所罗列的内容以外，论文中不包含其他人已经发表或撰写过的研究成果，也不包含为获得北京邮电大学或其他教育机构的学位或证书而使用过的材料。与我一同工作的同志对本研究所做的任何贡献均已在论文中作了明确的说明并表示了谢意。

申请学位论文与资料若有不实之处，本人承担一切相关责任。

本人签名： 刘晔 日期： 2019年6月7日

关于论文使用授权的说明

本人完全了解并同意北京邮电大学有关保留、使用学位论文的规定，即：北京邮电大学拥有以下关于学位论文的无偿使用权，具体包括：学校有权保留并向国家有关部门或机构送交学位论文，有权允许学位论文被查阅和借阅；学校可以公布学位论文的全部或部分内容，有权允许采用影印、缩印或其它复制手段保存、汇编学位论文，将学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索。（保密的学位论文在解密后遵守此规定）

本人签名： 刘晔 日期： 2019年6月7日

导师签名： 张明敏 日期： 2019年6月7日

低维异质结构与新型 III-V 族半导体发光器件的研究

摘 要

半导体低维异质结构早已成为构筑高性能半导体发光器件的基石，该领域的前沿创新研究经久不衰地持续了几十年，但研究热点已从早期的二维的量子阱、超晶格转变至一维的量子线（或更广义的纳米线）和零维的量子点。特别是，基于自组织量子点的新型半导体发光器件因电注入工作容易、具备某些特有的优异性能譬如高温稳定性并且具有重要的应用前景而尤为受到关注。然而，目前绝大多数量子点发光器件譬如量子点激光器依赖分子束外延（MBE）生长，金属有机化学气相沉积（MOCVD）生长量子点激光器的进展则大幅滞后且与 MBE 生长存在显著差距，仅有少数几个国外研究组掌握 MOCVD 生长量子点激光器的核心技术，鉴于 MOCVD 所拥有的半导体器件产业化优势，在国内深入系统开展量子点激光器的 MOCVD 生长研究具有十分重要的意义。除激光器外，基于半导体低维异质结构的发光器件中另外一种重要的类型是超辐射发光二极管（超辐射管），当前基于半导体低维异质结构的超辐射管作为光纤陀螺等系统的光源对于系统性能的提高起着不可替代的作用，开展超辐射管的研究对光纤陀螺等实际应用具有重要价值。此外，半导体低维异质结构除了前述的几种整数维度外，近年来本实验室提出了能级弥散这一新颖的概念，继而发展出分数维度电子态系理论，即半导体异质结构中不仅仅存在前述的三维、二维、一维、零维等整数维度，还存在着介于这些整数维度之间的分数维度，譬如介于二维与三维之间、介于一维和二维之间等等。分数维度理论的提出者还发现，这一理论有望引入超辐射管中并充分发挥其优势——分数维度半导体异质结构较整数维度异质结构会显著提升超辐射管的性能，并且此发现已经得到初步的实验证实，这样就亟需运用分数维度电子态系理论指导超辐射管的设计与性能优化。

基于上述这一科学认知，为验证分数维度电子态系理论在超辐射管中的优越性，进而运用该理论指导超辐射管的设计与优化，我们首先需要进行相应的典型整数维度超辐射管的制备，掌握超辐射管的制备工艺等，从而为进一步研制分数维度超辐射管打下基础。本论文以半导体低维异质结构为出发点，依托科技部国际合作项目以及国家自然科学基金项目，在分数维度电子态系理论方面取得了新的进展，在

实验方面重点围绕 III-V 族量子阱和量子点展开,进行了二维的量子阱、零维的量子点等整数维度下激光器及超辐射管的研究工作,这既为 MOCVD 生长量子点器件积累了技术经验,也为后续进行分数维度(譬如从二维到三维、从零维到三维等)超辐射管或其他相关器件的研究奠定了基础。本论文已开展的研究工作以及主要的结果如下:

1. 研究了在应用不同线型(指数线型和洛伦兹线型)的弥散允率密度函数的情形下电子态密度曲线的变化。针对指数线型和洛伦兹线型两种弥散线型对电子态密度进行了计算分析,对于不同的弥散宽度值绘制了电子态密度曲线,并进一步阐述了实际情况中可能的复合弥散线型,为基于能级弥散的分数维度理论的进一步发展提供了支持。

2. 制备了基于典型量子阱的激光器与超辐射管,包括 $1.3\mu\text{m}$ 波段 InP 基量子阱以及 $1.1\mu\text{m}$ 波段 GaAs 基 InGaAs 量子阱,取得了一些重要的实验结果,为进一步制备性能更加优异的介于二维到三维间的分数维度超辐射管奠定了基础。

(1) 采用 InGaAsP 啁啾量子阱作为有源区,进行了激光器和超辐射管的制备。脊宽 $10\mu\text{m}$ 、腔长 2mm 的激光器阈值电流密度为 $0.8\text{kA}/\text{cm}^2$,同样脊宽与长度采用弯曲波导的超辐射管在 350mA 时功率为 5.9mW ,光谱半宽为 27nm 。

(2) 采用 AlGaInAs 量子阱作为有源区,进行了激光器和超辐射管的制备。脊宽 $10\mu\text{m}$ 、腔长 2mm 的激光器阈值电流密度为 $460\text{A}/\text{cm}^2$,同样脊宽与长度采用弯曲波导的超辐射管功率达到 30mW 以上,光谱半宽在 10nm 左右。

(3) 利用 MOCVD 进行了 InGaAs 多量子阱器件结构的生长,然后制备了相应的发光器件,发光波长位于 $1.1\mu\text{m}$ 处。脊宽 $10\mu\text{m}$ 、腔长 2mm 的激光器阈值电流密度为 $450\text{A}/\text{cm}^2$ 。在超辐射器件制备中,我们比较了不同波导形状(弯曲、倾斜等)对于超辐射的影响,脊宽 $10\mu\text{m}$ 、长度 2mm 的采用倾斜基础上弯曲波导的超辐射管功率达到 20mW 以上,光谱半宽在 10nm 左右。

3. 制备了基于典型量子点的激光器与超辐射管,在器件性能优化方面进行了深入的探索并取得了重要的进展,为进一步制备性能更加优异的介于零维到三维间的分数维度超辐射管提供了技术支撑。此外还在硅衬底上生长了高质量的多层量子点,为后续利用 MOCVD 生长硅衬底上的分数维度器件打下了一定的基础。

(1) MOCVD 生长并制备了 GaAs 基 InAs 量子点激光器。首先利用 MOCVD 开展 InAs 量子点的生长条件优化, 比较了单层/多层、InGaAs 底层/盖层、V/III 等对于量子点的影响, 利用优化后的条件生长出了光致发光波长接近 $1.3\mu\text{m}$ 的多层量子点, 量子点密度达到 $4 \times 10^{10}/\text{cm}^2$ 。之后利用此多层量子点作为有源区进行了激光器结构的生长并制备了量子点激光器, 在分别采用无偏角及 2° 偏角的衬底上均实现了量子点激光器的室温连续激射, 激光器的脊宽均为 $10\mu\text{m}$, 腔长均为 2mm 。由于器件工作在激发态, 波长明显短于 $1.3\mu\text{m}$ 。无偏角衬底上的激光器阈值电流密度为 $700\text{A}/\text{cm}^2$, 激射波长位于 $1.19\mu\text{m}$ 处; 2° 偏角衬底上的阈值电流密度为 $950\text{A}/\text{cm}^2$, 激光器波长位于 $1.16\mu\text{m}$ 。

(2) 基于 MBE 工艺, 制备了两种不同外延结构的 InAs/GaAs 量子点激光器和超辐射管, 其中基于第一种外延结构制备的激光器激射波长位于 $1.3\mu\text{m}$ 处, 阈值电流密度低至 $117\text{A}/\text{cm}^2$; 采用弯曲波导的超辐射管在室温脉冲条件下工作, 发光波长位于 $1.3\mu\text{m}$ 处, 光谱宽度在 20nm 以上, 功率达到 10mW 以上。基于第二种外延结构制备的激光器激射波长位于 $1.27\mu\text{m}$, 阈值电流密度低至 $118\text{A}/\text{cm}^2$; 采用直波导镀膜的超辐射管在室温连续电流下工作, 发光波长位于 $1.27\mu\text{m}$, 光谱宽度在 10nm 左右, 功率在 3mW 以上。

(3) 生长了 Si 衬底上 InAs/GaAs 多层量子点。利用 MOCVD 设备在获得高质量 Si 基 GaAs 外延层的基础上, 对 Si 上多层量子点的生长进行了优化实验。将 GaAs/Si“三步法”异变外延生长技术与 GaAs 基多层量子点生长技术相结合, 生长出了发光波长位于 $1.3\mu\text{m}$ 波段的 Si 基 InAs/GaAs 多层量子点, 通过原子力显微镜测试发现生长出的量子点形貌很好, 密度较高, 可达 $5 \times 10^{10}/\text{cm}^2$, 通过光致发光谱测试发现其发光性能较好。

关键词: 能级弥散, 分数维度电子态系理论, 量子阱, 量子点, 激光器, 超辐射管

STUDY ON LOW-DIMENSIONAL HETEROSTRUCTURES AND NEW TYPE III-V SEMICONDUCTOR LIGHT-EMITTING DEVICES

ABSTRACT

Semiconductor low-dimensional heterostructures have been the cornerstone for structuring high-performance semiconductor light-emitting devices for a long time. The frontier innovations in this field have lasted for decades, but research hotspots have been transferred from early two-dimensional quantum wells and superlattices to the one-dimensional quantum wires (or more general nanowires) and zero-dimensional quantum dots. In particular, novel semiconductor light-emitting devices based on self-organized quantum dots have received particular attention due to their ease of electrical injection, unique performance such as high temperature stability and important application prospects. However, most quantum dot light-emitting devices such as quantum dot lasers rely on molecular beam epitaxy (MBE) growth technique. The progress of metal-organic chemical vapor deposition (MOCVD) growth of quantum dot lasers is greatly delayed and there is a significant gap between MBE and MOCVD growth technique. Only a few foreign research groups have mastered the core technology of MOCVD growth of quantum dot lasers. In view of the advantages of MOCVD in industrialization of semiconductor devices, it is of great significance to carry out in-depth systematic research on MOCVD growth of quantum dot lasers in China. Then, in addition to the laser, another kind of significant light-emitting device based on semiconductor low-dimensional heterostructures is superluminescent diode. As the light source of the fiber optic gyroscope system, the superluminescent diode plays an irreplaceable role in improving the performance of the system. Therefore, the research of superluminescent diode is of great value for practical applications such as fiber optic gyroscopes. In addition, semiconductor low-dimensional heterostructures contain not only the

aforementioned integer dimensionalities, in the recent years, the novel concept of energy level dispersion was proposed by our laboratory and then developed into the theory of fractional dimensionality in electron-states-architectures, that is, there are not only the above-mentioned integer dimensionalities: three-dimensional, two-dimensional, one-dimensional, zero-dimensional, but also exist the fractional dimensionalities between these integer dimensions, for example, between two and three dimensionalities, between one and two dimensionalities, and so on. After the theory of fractional dimensionality was put forward, the founder of the theory found that this theory has the potential to be applied in the performance improvement of superluminescent diodes, and this finding has been confirmed by preliminary experiments, so it is urgent to use the theory of fractional dimensionality in electron-states-architectures to guide the design and performance optimization of the active region of the superluminescent diodes.

Based on the above scientific cognition, in order to verify the superiority of the theory of fractional dimensionality in electron-states-architectures in the superluminescent diodes, and then use this theory to guide the design and optimization, we firstly need to carry out the fabrication of corresponding typical integer-dimensional superluminescent diode to master the fabrication process of superluminescent diodes, etc., so as to lay the foundation for further development of fractional-dimensional superluminescent diodes. This paper takes the low-dimensional heterostructures of semiconductor as the starting point, relies on the international cooperation project of the ministry of science and technology and the national natural science foundation of China, was guided by the original theory of fractional dimensionality, and focused on the expansion of III-V quantum wells and quantum dots. The research work of lasers and superluminescent diodes in integer dimensions such as two-dimensional quantum wells and zero-dimensional quantum dots, which has accumulated technical experience for MOCVD growth quantum dot devices, and also laid the foundation for subsequent fractional dimensionalities (such as from two-dimensional to three-dimensional, from zero-dimensional to three-dimensional) superluminescent diodes and

other related devices. The research work and main results of this paper have been carried out as follows:

1. The variation of density of electronic states in the case of applying different linetypes(exponential linetype and Lorentz linetype) of divergent state permissibility density functions were investigated. The density of electronic states was calculated and analyzed for the two dispersion functions of exponential linetype and Lorentz linetype, and the curves of of density of electronic states were plotted with different energy level dispersion width values, futhermore, the composite dispersion linetypes in the actual situation were expounded, which provides a support for the further development of the fractional dimensionality theory based on energy level dispersion.

2. Lasers and superluminescent diodes based on typical quantum wells were fabricated, including 1.3 μm -band InP-based quantum wells and 1.1 μm -band GaAs-based InGaAs quantum wells, and we have obtained some important experimental results. The fabricated devices laid the foundation for further fabrication of the fractional-dimensional superluminescent diode between two-dimensional and three-dimensional with better performance.

(1) The InGaAsP quantum well layers were used as the active region, and the lasers and superluminescent diodes were fabricated. The threshold current density of the laser with a ridge width of 10 μm and a cavity length of 2mm is 0.8kA/cm², and the superluminescent diode with the same ridge width and length using the bent waveguide has a power of 5.9mW at 350mA and a full width at half maximum(FWHM) of 27nm.

(2) The AlGaInAs quantum well layers were used as the active region, and the lasers and superluminescent diodes were fabricated. The threshold current density of the laser with a ridge width of 10 μm and a cavity length of 2mm is 460A/cm², and the superluminescent diode with the same ridge width and length using the bent waveguide has a power more than 30mW, and the FWHM of the spectrum is about 10nm.

(3) GaAs-based InGaAs quantum well light-emitting devices was grown and fabricated. The growth of the InGaAs multiple quantum well device structure was carried out by MOCVD, and then the corresponding light-

emitting devices were fabricated, and the emission wavelength was around $1.1\mu\text{m}$. The threshold current density of laser with a ridge width of $10\mu\text{m}$ and a cavity length of 2mm was $450\text{A}/\text{cm}^2$. In the fabrication of superluminescent devices, we compared the effects of different waveguide shapes (bent, tilted, etc.) on superluminescent diode. The superluminescent diode power of the curved waveguide with a ridge width of $10\mu\text{m}$ and a length of 2mm is more than 20mW and the FWHM is around 10nm .

3. Lasers and superluminescent diodes based on typical quantum dots were fabricated, and in-depth exploration as well as important progress in optimization of device performance was made, which provided technical support for further fabrication of fractional-dimensional superluminescent diodes between zero-dimensional and three-dimensional. And high-quality multi-layer quantum dots have been grown on the silicon substrate, which lays a foundation for the subsequent use of MOCVD to grow fractional-dimensional devices on silicon substrates.

(1) GaAs-based InAs quantum dot lasers were grown and fabricated by MOCVD. Firstly, the growth conditions of InAs quantum dots were optimized. The effects of single layer/multilayer, InGaAs underlayer/capping layer, V/III on quantum dots were compared. Using the optimized growth conditions, multi-layer quantum dots photoluminescence wavelength closed to $1.3\mu\text{m}$ were grown, the density was up to $4 \times 10^{10}/\text{cm}^2$, then the multi-layer quantum dots were used as active regions of the laser structure and quantum dot lasers were fabricated. We achieved quantum dot lasers that can operate at room temperature under continuous current on both exact and 2° miscut substrates. The lasers have a ridge width of $10\mu\text{m}$ and a cavity length of 2mm . Due to the excited state lasing, the lasing wavelength of the quantum dot lasers is shorter than $1.3\mu\text{m}$. The threshold current density of the laser on the exact substrate is $700\text{A}/\text{cm}^2$ and the lasing wavelength is $1.19\mu\text{m}$; the threshold current density of the laser on the 2° miscut substrate is $950\text{A}/\text{cm}^2$ and the lasing wavelength is $1.16\mu\text{m}$.

(2) Based on MBE technology, we utilized two different epitaxial structures of InAs/GaAs quantum dots to fabricate lasers and superluminescent diodes. The lasing wavelength of the laser based on first

epitaxial structure was $1.3\mu\text{m}$, the threshold current density was as low as $117\text{A}/\text{cm}^2$. The superluminescent diode with bent waveguide operated under pulse condition with an emitting wavelength around $1.3\mu\text{m}$, a spectral width of above 20nm and an output power above 10mW . The lasing wavelength of the laser based on second epitaxial structure was $1.27\mu\text{m}$, the threshold current density was as low as $118\text{A}/\text{cm}^2$. The superluminescent diode with anti-reflection coating and straight waveguide operated at room temperature under continuous current with an emitting wavelength around $1.27\mu\text{m}$, a spectral width of about 10nm and an output power above 3mW .

(3) InAs/GaAs quantum dot multilayers on the Si substrate were grown. Based on the high-quality Si-based GaAs epitaxial layer, the growth of multilayer quantum dots on Si was optimized by MOCVD equipment. The GaAs/Si "three-step" epitaxial growth technique was combined with the GaAs-based quantum dot multilayer growth technique to grow Si-based hetero quantum dots multilayers with an emission wavelength of $1.3\mu\text{m}$. The dots have a good morphology and high density up to $5 \times 10^{10}/\text{cm}^2$, which was found by atomic force microscopy, and a good luminescence performance measured by photoluminescence spectrograph.

KEY WORDS: energy level dispersion, theory of fractional dimensionality in electron-states-architectures, quantum well, quantum dot, laser, superluminescent diode

目 录

摘 要.....	I
ABSTRACT	IV
目 录.....	IX
第一章 绪论.....	1
1.1 研究背景	1
1.2 研究现状简介	2
1.2.1 能级弥散理论	2
1.2.2 III-V 族量子点激光器	3
1.2.3 III-V 族量子阱及量子点超辐射管	4
1.2 论文的结构安排	6
参考文献	7
第二章 理论基础与实验技术.....	11
2.1 半导体低维异质结构及器件的理论基础.....	11
2.1.1 半导体低维结构.....	11
2.1.2 半导体激光器的基本理论 ^[5]	13
2.1.3 半导体超辐射管的基本理论.....	14
2.2 半导体 III-V 族材料外延技术.....	18
2.2.1 金属有机化学气相沉积.....	18
2.2.1 分子束外延	20
2.3 半导体材料表征技术	21
2.3.1 X 射线衍射	21
2.3.2 光致发光	22
2.3.2 原子力显微镜	23
2.3.2 其他表征技术	24
2.4 器件制备及测试技术	25
2.4.1 激光器/超辐射管制备工艺	25
2.4.2 激光器/超辐射管测试技术.....	28
2.5 本章小结	28
参考文献	29
第三章 能级弥散理论中弥散线型的分析研究	31

3.1 能级弥散理论介绍	31
3.2 能级弥散理论中不同弥散线型的计算	32
3.2.1 指数线型时的电子态密度	32
3.2.2 洛伦兹线型时的电子态密度	34
3.2.3 实际情况中可能的复合弥散线型	37
3.3 弥散电子态密度曲线在分数维度电子态系理论中的运用	38
3.4 本章小结	39
参考文献	39
第四章 III-V 族量子阱材料及器件研究	41
4.1 InP 基量子阱材料的结构及器件	41
4.1.1 InP 基 InGaAsP 量子阱激光器及超辐射管	41
4.1.2 InP 基 AlGaInAs 量子阱激光器及超辐射管	48
4.2 GaAs 基量子阱材料的外延及器件	52
4.2.1 GaAs 基 InGaAs/GaAs 量子阱结构外延	52
4.2.2 GaAs 基 InGaAs/GaAs 量子阱激光器	53
4.2.3 GaAs 基 InGaAs/GaAs 量子阱超辐射管	55
4.3 本章小结	60
参考文献	60
第五章 III-V 族量子点材料及器件研究	61
5.1 GaAs 基 InAs 量子点结构的生长及优化	62
5.1.1 量子点生长的优化方法	62
5.1.2 量子点器件有源区的生长	66
5.1.3 量子点器件 AlGaAs 上限制层的生长	68
5.2 GaAs 基 InAs 量子点器件	69
5.2.1 MOCVD 生长的量子点激光器	69
5.2.2 MBE 生长的量子点激光器及超辐射管	76
5.3 硅基 InAs 量子点材料的生长研究	84
5.3.1 硅基 GaAs 材料的异变外延	85
5.3.2 硅基 InAs 量子点的生长	88
5.4 本章小结	96
参考文献	97
第六章 总结与展望	101
6.1 总结	101
6.2 展望	102

附录.....	104
致谢.....	106
攻读博士学位期间发表的学术论文及申请的专利.....	107

第一章 绪论

1.1 研究背景

随着信息产业的快速发展,光通信以其大容量、高速率等优势已经在通信领域中作为骨干通信网络,光信息处理以其处理速度快、能耗低等优势也已经成为信息处理系统中发展的一大趋势。无论是对于光通信还是光信息处理而言,光源都是不可或缺的。自1963年阿尔费罗夫等发明双异质结构^{[1][2]},并于1970年基于这一结构实现半导体激光器的室温连续激射^[3]以来,半导体激光器这一光源得到了长足的发展,各种半导体激光器层出不穷,尤其是随着低维结构的发展,基于半导体低维异质结构的各种光电器件被广泛地研究,半导体发光器件譬如半导体激光器尤为突出,包括量子阱激光器^[4]、量子点激光器^[5]、量子级联激光器^[6]、纳米线激光器^[7]等等,其中,III-V族InP基和GaAs基的量子阱器件的研究最早也最成熟,尤其是以InP基InGaAsP量子阱激光器为代表,已经广泛应用于光通信系统中,GaAs基InGaAs量子阱激光器则广泛用于固体激光器或者光通信系统中掺铒光纤放大器的泵浦源。当前InP基1.3 μm 波段激光器采用InGaAsP量子阱作为有源区,而InP基器件成本较高,并且由于InGaAsP材料和InP材料的折射率差比较小,往往此类激光器对有源区载流子的限制会不足,自由载流子吸收较高,导致激光器对温度往往比较敏感,而GaAs基量子点则是实现1.3 μm 激光器的一种有效方式,并且具有低成本、高温稳定性等优势,因此受到了广泛的研究。当前MBE生长的GaAs基InAs量子点激光器已经研究较为成熟^{[8][9]},MOCVD生长的量子点激光器也有一些报道^{[10][11][12]},然而由于生长机制以及低温限制层生长困难等原因^[11],MOCVD生长1.3 μm 波段GaAs量子点激光器存在着困难,但是MOCVD在工业化生产等方面较MBE优势更大,一旦MOCVD生长量子点的技术成熟,对于量子点器件的产业化大有裨益,因此深入探索量子点器件的MOCVD生长有着现实的应用价值。不仅如此,当前随着光电集成的发展,硅基器件受到了越来越多的关注,在光电集成系统中,硅基光源成为亟待解决的问题,而将III-V族量子点与硅基结合,是解决这一问题的一个有效的手段,因此使用MOCVD生长量子点也将对之后利用MOCVD生长硅基量子点激光器奠定基础,从而降低光电集成的成本。就III-V族光源而言,不仅仅是激光器,超辐射发光二极管(超辐射管,SLD)也逐渐受到研究者的关注,超辐射管作为宽带半导体光源,其光学性质介于发光二极管和激光器之间,同时具有高功率和宽光谱的特征,其独特的光学特性使得它在应用于光纤陀螺(fiber optic

gyroscope, FOG) 系统时可以有效地抑制系统误差, 是该陀螺的核心器件。FOG 是基于萨格纳克(Sagnac)效应的新型角速度传感器, 已经被广泛应用于当今的惯性导航系统中。超辐射管作为光纤陀螺的核心器件, 其性能指标直接影响了 FOG 的精度^[13], 譬如发光功率会影响光纤陀螺的系统精度和灵敏度, 其出射光功率越大系统信噪比越高, 精度和灵敏度也就越高; 宽光谱可以降低光纤中因瑞利散射和克尔效应引起的相干误差, 进一步降低噪声等。此外, 超辐射管在医学成像领域也有着广泛的应用, 作为光学相干断层成像(OCT)系统的光源^{[14][15]}, 其功率、谱宽等性能决定着成像的分辨率, 超辐射管性能的提升, 将大大有利于提高 OCT 系统的分辨率, 具有重要的实际意义。

此外, 本实验室的任晓敏教授于 2012 年提出了能级弥散的概念^[16]。这一新颖概念的提出, 发轫于对维度转变临界值的思考, 继而发展成为分数维度电子态系理论^{[17][18]}, 即不仅仅存在前述的三维、二维、一维、零维等整数维度, 还存在着介于这些整数维度之间的分数维度, 譬如介于二维与三维之间、介于一维和二维之间、介于零维和一维之间等等。分数维度理论提出后, 任晓敏教授发现, 这一理论有可能在超辐射管的性能提升方面获得应用, 并且此发现已经得到了中国科学院半导体研究所初步的实验证实, 这样就需要进一步进行实验来对分数维度理论进行验证, 其具体方法可以是: 在分数维度的指导下, 进行超辐射管的设计与制备, 将其与整数维度的超辐射管进行对比, 从而验证分数维度理论在超辐射管中的优越性。而在进行基于分数维度理论的超辐射管制备之前, 我们首先需要进行相应的整数维超辐射管的制备, 譬如典型的量子阱或者量子点超辐射管的制备, 从而掌握超辐射管的制备工艺等, 为进一步研制分数维度超辐射管奠定基础。

综上所述, 进行 III-V 族低维异质结构以及其对应的激光器和超辐射管相关的研究具有重要意义。

1.2 研究现状简介

1.2.1 能级弥散理论

如前所述, 能级弥散是任晓敏教授于 2012 年提出的一个新概念^[16], 这一概念的含义是: 电子能级具有一定程度的弥散性, 这里所述的弥散既包括由于晶格热振动、多电子效应等带来的非本征弥散, 也包括能级本身所具有的反映宏观/微观程度的本征弥散。在能级弥散理论中, 任晓敏教授定义了能级弥散函数, 该函数的平方表示弥态允率密度函数, 后者在整个能量域内的积分值为 1, 此即弥态允率密度函数的归一化。这样一来, 原来的电子所处的能级便不再是一个特定的值, 而是有着一定的允率或几率分布。那么原来所认为的能带理论便发生了变

化,原来人们认为,能带实质上是排列即为密集的一系列分立能级组成,由于能级之间的间隔特别小,排列非常紧密,可以认为是连续分布。而引入能级弥散概念之后,原来所认为的固体材料能带中能态的连续分布便不再是近似的,而是真正的连续。从电子能级弥散这一概念便可引出许多新颖的概念,譬如原来只有整数维度(三维的体材料、二维的量子阱、一维的量子线、零维的量子点)的概念,在引入能级弥散后,便引出了分数维度的概念等,并且可进一步衍生发展成为分数维度电子态系理论^{[17][18]}。除上述分数维度电子态系理论外,将能级弥散概念引入到量子力学中还会使得现有量子力学的相关内容得到拓展与改变。在本论文中,我们主要考虑能级弥散本身以及由能级弥散发展成的分数维度理论,其他更为深入的理论拓展暂未涉及。

1.2.2 III-V 族量子点激光器

1982年,日本东京大学的 Arakawa 等^[5]提出了量子点激光器,并预测量子点激光器的阈值电流具有温度不敏感性,其阈值电流的温度的变化幅度要远低于普通的量子阱激光器。上世纪九十年代以来,随着外延生长技术以及制备工艺的提高,开始有许多采用自组织方法生长的量子点激光器的报道。1994年,德国与俄罗斯的合作研究者利用 MBE 生长了在低温下激射的 InGaAs/GaAs 量子点激光器^[19]。1998年,美国的 Huffaker 等人使用 MBE 生长量子点,研制出了室温 1.31 μm 脉冲基态激射的量子点激光器,器件端面镀上了高反膜,激光器的阈值电流密度为 270A/cm²^[20]。1999年,美国的 Lester 等人首次制备出阈值电流密度低于量子阱激光器的量子点激光器,他们使用单层 InAs 量子点作为有源区,将量子点生长在 InGaAs 量子阱中,即阱中点结构,制备出了阈值电流密度低至 26A/cm² 的量子点激光器,激光器的激射波长为 1.25 μm ^[21]。继而,该研究组同样采用阱中点的结构,通过调节量子点的生长条件,在 2000 年制备出 1.3 μm 室温脉冲激射的量子点激光器,阈值电流密度为 42.6A/cm²^[22]。

此后研究者们重点围绕 1.3 μm 室温连续激射量子点激光器开展研究。2004年,英国的 Huiyun Liu 等人采用高温的 GaAs 间隔层,利用 MBE 生长,量子点生长温度为 510 $^{\circ}\text{C}$,间隔层生长温度为 580 $^{\circ}\text{C}$,生长并制备出了 1.3 μm 室温连续激射的量子点激光器,阈值电流密度为 39A/cm²,且在温度升高到 105 $^{\circ}\text{C}$ 时激光器仍然可以连续激射^[8]。2005年,该研究组又通过腔面镀高反射膜,实现了室温连续激射的极低阈值的量子点激光器,阈值电流密度为 17A/cm²,在室温下激光器输出功率超过了 100mW,并且在 100 $^{\circ}\text{C}$ 时仍可以在基态连续激射^[9]。

近些年来, GaAs 基量子点激光器的发展已经较多,而随着硅基光电集成的发展,研究者们开始研究硅基发光器件,而由于量子点在硅基集成方面具有位错不敏感的优势,受到了研究者的青睐,硅基量子点发光器件迅速发展起来。

2011年,英国伦敦大学学院的 Huiyun Liu 研究组报道了他们在 4° 偏角的硅衬底上,使用 MBE 生长 GaAs 成核层, InGaAs/GaAs 超晶格位错阻挡层等以减少穿透位错,并在其上继续生长了量子点器件结构,最终成功制备出了室温脉冲激射的硅基量子点激光器,激射波长在 $1.3\mu\text{m}$ 处,宽接触激光器的阈值电流密度为 $725\text{A}/\text{cm}^2$,输出光功率达到 26mW ^[23]。2016年该研究组同样在 4° 偏角的硅衬底上,利用 AlAs 成核层以及 InGaAs/GaAs 超晶格位错阻挡层,生长了低位错密度的 GaAs 层,并在其上面继续生长了量子点,制备成功了硅基量子点激光器,阈值电流密度低至 $62.5\text{A}/\text{cm}^2$,室温下输出功率超过了 105mW ,并且在 120°C 下依然可以工作,通过对此器件进行可靠性测试,发现其外推失效时间超过 10 万小时^[24]。2017年,该研究组采用 MOCVD 在无偏角硅上生长的 GaAs 作为衬底,然后再利用 MBE 在其上面生长 InGaAs/GaAs 超晶格以及量子点器件结构,制备出了阈值电流密度为 $425\text{A}/\text{cm}^2$,激射波长在 1292nm 的室温连续工作的量子点激光器,并且在温度升高到 102°C 时,此激光器依然可以激射^[25]。

2016年,美国圣塔芭芭拉大学的 John E. Bowers 研究组首先在无偏角的硅衬底上制备了量子点激光器,采用 MOCVD 在硅衬底上生长的硅上 GaP 作为衬底,然后使用 MBE 生长量子点器件结构,制备出阈值电流密度在 $862\text{A}/\text{cm}^2$,功率高达 110mW 的宽接触量子点激光器,当采用该结构制备成脊型激光器时,阈值电流低至 30mA 且器件在 90°C 下还可激射^[26]。之后,2017年该研究组又报道了室温下阈值电流低至 6.2mA ,输出功率可达 185mW 的量子点激光器,且通过在 35°C 下 1500 小时的可靠性测试,推断此硅基量子点激光器的失效时间在百万小时以上^[27]。

2018年,日本东京大学 Arakawa 研究组利用 MBE,在无偏角的硅衬底上只利用 MBE 就生长了量子点激光器,首先在硅上采用 AlGaAs 作为成核层,然后生长 GaAs 缓冲层,再利用 InGaAs/GaAs 的应变超晶格阻挡位错,之后生长量子点器件结构,制备出了室温下脉冲工作的量子点激光器,激射波长在 1250nm ^[28]。2019年,该研究组又在无偏角的硅衬底上制备了具有高特征温度并且可以在高温下连续工作的量子点激光器。该激光器在 101°C 下还可连续工作,工作波长位于 $1.27\mu\text{m}$ ^[29]。

1.2.3 III-V 族量子阱及量子点超辐射管

上世纪 80 年代,量子阱 SLD 出现,并迅速代替了体材料从而发展成为了 SLD 的主流。但由于量子阱本身光学性质的限制,其发光谱往往比较窄,发光谱的展宽通常需要啁啾结构来实现。1990年,美国加州理工学院的研究者采用了 InGaAs/GaAs 多量子阱结构,实现了谱宽 35nm 、功率达 6mW 的 SLD^[30],其主要特点是采用了吸收窗口来抑制激射。1996年,台湾的研究者 Ching-Fuh Lin 等

利用两种不同厚度（啁啾）的 GaAs 量子阱研制成功了谱宽达到 60nm，功率达到了 5mW 的 GaAs/AlGaAs 量子阱 SLD^[31]，1997 年，该研究组进一步优化了 GaAs 阱的厚度，通过选择 2nm、3.3nm、5.6nm、12.5nm 这四种厚度的 GaAs 量子阱层作为啁啾结构有源区，制备出了谱宽达到了 91.5nm，并且光谱宽度较为平坦的超辐射管^[32]。1999 年，日本东京理工学院的 Yamatoya 等采用 InGaAsP/InP 应变啁啾多量子阱结构以及锥形波导结构，实现了 1.55 μm 波段谱宽为 60nm 且功率接近 1W 的 SLD^[33]。2001 年，该研究组又实现了同一波段下室温下输出功率高达 210mW，7 $^{\circ}\text{C}$ 时输出功率达 330mW 的高功率超辐射管^[34]。2000 年，台湾的 Bing-Ruey Wu 等人利用两层 8.7nm 的 InGaAs 量子阱和三层 6nm 的 InGaAsP 量子阱作为有源区，制备出了具有超宽光谱的超辐射光，光谱宽度接近 300nm，覆盖了从 1.3 μm 到 1.58 μm 的波段^[35]。2004 年，华中科技大学的 Hong Ma 等人利用张压应变结合且厚度不同的 InGaAsP 作为有源区，采用 7 $^{\circ}$ 的倾斜脊型波导以及掩埋的端面窗口，并且端面蒸镀减反射膜，实现了偏振度小于 1dB 的超辐射管，且光谱宽度为 55nm 功率超过了 16mW^[36]。2005 年，英国的 Burow 等人使用三层 7nm 的 InGaAs 量子阱，同时采用大光腔结构，结合端面镀膜技术，制备了脉冲功率达到 1.3W 以上的超辐射管，连续电流下功率达到 67mW，发光波长在 980nm，光谱纹波小于 0.1dB^[37]。

近些年来，量子阱的 SLD 已经成熟并且已经商用化，更多的研究者开始关注量子点 SLD，因此近十余年来，超辐射管相关的研究大多集中在量子点超辐射管方面，但是量子阱 SLD 中有些参数如光谱调制系数、偏振消光比等还有提高的空间。1999 年，中科院半导体所王占国院士组首次提出了量子点 SLD 的概念^[38]，理论上证明了由于量子点大小分布的非均匀特性，量子点 SLD 的发光谱比量子阱 SLD 更宽。2004 年，该研究组报道了发光波长位于 1 微米波段的量子点 SLD^[39]，该 SLD 采用倾斜波导结构，在室温下连续输出功率达到了 200mW，谱宽 60nm，这说明了量子点 SLD 相比较于量子阱在谱宽功率上具有优势。之后国际上许多研究组开始了量子点 SLD 的制备，量子点 SLD 也迅速地发展起来。2006 年美国新墨西哥大学的研究者采用多区结构研制成功了谱宽达 150nm 功率超过 1mW 的 1.3 微米量子点 SLD，输出功率超过了 1mW^[40]。2007 年，美国里海大学的 Hery Susanto Djie 等人采用 InGaAs/GaAs 量子点结构，在芯片上集成了一个光吸收器用以抑制光学反馈和振荡，最终制备了高光谱型且谱宽为 135nm、发光中心波长为 1210nm 的超辐射管，但是连续电流下功率很低（微瓦级）^[41]。至 2015 年，英国谢菲尔德大学的 Richard Hogg 研究组利用混合量子阱和量子点结构实现了 1.2 μm 波段的超宽 SLD^[42]，室温下输出功率达 2.4mW，光谱宽度达到了 290nm。相较于上一小节所述的硅基量子点激光器而言，硅基超辐射管的研

究较少, 2014 年, 英国伦敦大学学院的研究组分别实现了 Ge 上和 Si 上的量子点超辐射管。其中 Ge 基 SLD 谱宽达到了 60nm, 功率达到了 27mW, 中心波长在 1252nm, 且温度从 20°C 升高到 100°C 时, 光谱宽度很稳定^[43]; Si 基 SLD 谱宽达到了 114nm, 功率达到了 2.6mW, 中心波长在 1255nm^[44]。

1.3 论文的结构安排

本论文以半导体低维异质结构为出发点, 依托科技部国际合作项目以及国家自然科学基金项目, 重点围绕分数维度原创理论与 III-V 族量子阱和量子点展开, 全文总共分为六章, 每一章的具体内容如下:

第一章为绪论, 简要介绍本论文的研究背景, 然后介绍了能级弥散、量子点激光器、超辐射管的研究现状, 最后简要概述本论文的结构框架和章节安排。

第二章主要介绍理论基础和实验技术, 理论基础包括半导体低维结构的基本理论, 激光器及超辐射发光管的基本理论; 实验技术包括半导体材料的外延技术(金属有机化学气相沉积和分子束外延技术), 半导体材料表征技术(X 射线衍射、光致发光、原子力显微镜等), 器件制备及测试技术(器件制备工艺、器件测试相关技术等)。

第三章是能级弥散理论及相关介绍。在这一章中, 我们对能级弥散理论做了介绍并分析计算了不同线型(指数线型和洛伦兹线型)的弥态允率密度函数对于电子态密度曲线的影响, 绘制了不同线型下电子态密度的曲线, 并进一步阐述了实际情况中可能的复合弥散线型, 介绍了弥散电子态密度曲线在分数维度电子态系理论中的运用。

第四章是 III-V 族量子阱材料及器件的研究, 这一章中我们基于典型量子阱进行了激光器与超辐射管的制备工作。首先介绍了 InP 基 InGaAsP 量子阱器件的结构, 然后较为详细地描述了相关器件的制备工艺, 进而对制备的激光器和超辐射管进行了测试; 除 InP 基的量子阱器件外, 还进行了 GaAs 基的 InGaAs 量子阱及器件的研究, 首先是 InGaAs 量子阱器件结构的外延, 然后将外延片制备成激光器和超辐射管管芯, 并进行了相关测试。

第五章是 III-V 族量子点材料及器件的研究, 这一章中我们进行了 InAs 自组织量子点的生长并且基于此典型量子点进行了激光器与超辐射管的制备工作。本章的研究内容包括 GaAs 基 InAs 量子点材料的外延生长、GaAs 基量子点激光器及超辐射管的研究以及硅基 InAs 量子点材料的外延生长研究。首先是 GaAs 基单层/多层 InAs 量子点的 MOCVD 生长, 分析了各种生长条件对于 InAs 量子点的影响, 包括生长温度、五三族比、InGaAs 底层和盖层等; 然后是 GaAs 基 InAs 量子点器件结构的外延, 包括 AlGaAs 上限制层的生长、接触层的生长, 每层的

掺杂等。然后我们进行了 GaAs 基 InAs 量子点激光器及超辐射管的制备工作，包括利用 MOCVD 生长的量子点激光器、利用 MBE 生长的量子点激光器以及量子点超辐射管等。此外，我们还进行了硅基 InAs 量子点材料的外延生长，在 GaAs 多层量子点优化的基础上，我们首先进行了硅上 GaAs 的异变外延，采用三步法在硅上进行了高质量 GaAs 层的外延，然后将多层 InAs 的自组织生长与硅基 GaAs 异变外延相结合，进行了硅基高质量多层 InAs 量子点的生长研究，比较了不同生长时间下硅基 InAs 量子点的发光性能、量子点形貌等，生长出了高质量的硅基多层量子点结构。

第六章对全文的工作进行了总结，并对未来的工作进行了展望。

参考文献

- [1] Alferov Z I, Kazarinov R F. Double heterostructure laser[J]. Authors Certificate, 1963 (27448).
- [2] Kroemer H. A proposed class of hetero-junction injection lasers[J]. Proceedings of the IEEE, 1963, 51(12): 1782-1783.
- [3] Alferov Z I. AlAs-GaAs heterojunction injection lasers with a low room-temperature threshold[J]. Sov. Phys. Semicond., 1970, 3: 1107-1110.
- [4] Weisbuch C, Dingle R, Gossard A C, et al. Optical characterization of interface disorder in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs multi-quantum well structures[J]. Solid State Communications, 1981, 38(8): 709-712.
- [5] Arakawa, Y., and Hiroyuki Sakaki. Multidimensional quantum well laser and temperature dependence of its threshold current[J]. Applied Physics Letters 40.11 (1982): 939-941.
- [6] Faist J, Capasso F, Sivco D L, et al. Quantum cascade laser[J]. Science, 1994, 264(5158): 553-556.
- [7] Huang M H, Mao S, Feick H, et al. Room-temperature ultraviolet nanowire nanolasers[J]. science, 2001, 292(5523): 1897-1899.
- [8] Liu H Y , Sellers I R , Badcock T J , et al. Improved performance of 1.3 μm multilayer InAs quantum-dot lasers using a high-growth-temperature GaAs spacer layer[J]. Applied Physics Letters, 2004, 85(5):704-706.
- [9] Liu H Y , Childs D T , Badcock T J , et al. High-performance three-layer 1.3- μm InAs-GaAs quantum-dot lasers with very low continuous-wave room-temperature threshold currents[J]. IEEE Photonics Technology Letters, 2005, 17(6):1139-1141.
- [10] Kaiander I N, Sellin R L, Kettler T, et al. 1.24 μm InGaAs/GaAs quantum dot laser

grown by metalorganic chemical vapor deposition using tertiarybutylarsine[J]. Applied physics letters, 2004, 84(16): 2992-2994.

[11] Tatebayashi J, Ishida M, Hatori N, et al. Lasing at 1.28 μm of InAs-GaAs quantum dots with AlGaAs cladding layer grown by metal-organic chemical vapor deposition[J]. IEEE Journal of selected topics in quantum electronics, 2005, 11(5): 1027-1034.

[12] Guimard D, Ishida M, Bordel D, et al. Ground state lasing at 1.30 μm from InAs/GaAs quantum dot lasers grown by metal-organic chemical vapor deposition[J]. Nanotechnology, 2010, 21(10): 105604.

[13] 章燕申, 张春熹, 蒋军彪等, 光电子学与光学陀螺仪, 2017.

[14] Wolfgang Drexler, James G. Fujimoto, eds. Optical coherence tomography: technology and applications (Second Edition). Springer, 2015.

[15] Ko T H, Adler D C, Fujimoto J G, et al. Ultrahigh resolution optical coherence tomography imaging with a broadband superluminescent diode light source. Optics Express, 2004, 12(10): 2112-2119.

[16] Ren X. Theoretical investigation on the continuous evolution of the electron-gas dimensionality: from bulk materials to quantum dots[C]//Asia Communications and Photonics Conference. Optical Society of America, 2012: PAF4A. 6.

[17] Ren X. Modification of the theory on the energy-level dispersion and the continuity of the electron-gas dimensionality (invited talk/plenary session)[C]//21st International Symposium on Nanostructures: Physics and Technology (Nano). St. Petersburg. 2013: 347-349.

[18] Ren X. Novel understanding of electron states architecture and its dimensionality in semiconductors[J]. Optics and Photonics Journal, 2013, 3(02): 322.

[19] Kirstaedter N, Ledentsov N N, Grundmann M, et al. Low threshold, large T0 injection laser emission from (InGa) As quantum dots[J]. Electronics Letters, 1994, 30(17): 1416-1417.

[20] Huffaker D L, Park G, Zou Z, et al. 1.3 μm room-temperature GaAs-based quantum-dot laser[J]. Applied Physics Letters, 1998, 73(18): 2564-2566.

[21] Liu G T, Stintz A, Li H, et al. Extremely low room-temperature threshold current density diode lasers using InAs dots in $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ quantum well[J]. Electronics Letters, 1999, 35(14):1163.

[22] Stintz A, Liu G T, Li H, et al. Low-threshold current density 1.3- μm InAs quantum-dot lasers with the dots-in-a-well (DWELL) structure[J]. Photonics Technology Letters IEEE, 2000, 12(6):591-593.

- [23] Wang, Ting, Huiyun Liu, Andrew Lee, Francesca Pozzi, and Alwyn Seeds. 1.3- μm InAs/GaAs quantum-dot lasers monolithically grown on Si substrates[J]. Optics express 19, no. 12 (2011): 11381-11386.
- [24] Chen S , Li W , Wu J , et al. Electrically pumped continuous-wave III–V quantum dot lasers on silicon[J]. Nature Photonics, 2016.
- [25] Chen S, Liao M, Tang M, et al. Electrically pumped continuous-wave 1.3 μm InAs/GaAs quantum dot lasers monolithically grown on on-axis Si (001) substrates[J]. Optics express, 2017, 25(5): 4632-4639.
- [26] Liu A Y, Peters J, Huang X, et al. Electrically pumped continuous-wave 1.3 μm quantum-dot lasers epitaxially grown on on-axis (001) GaP/Si[J]. Optics letters, 2017, 42(2): 338-341.
- [27] Jung D , Zhang Z , Norman J , et al. Highly reliable low threshold InAs quantum dot lasers on on-axis (001) Si with 87% injection efficiency[J]. ACS Photonics, 2017 5(3): 1094-1100.
- [28] Kwoen J, Jang B, Lee J, et al. All MBE grown InAs/GaAs quantum dot lasers on on-axis Si (001)[J]. Optics express, 2018, 26(9): 11568-11576.
- [29] Kwoen J, Jang B, Watanabe K, et al. High-temperature continuous-wave operation of directly grown InAs/GaAs quantum dot lasers on on-axis Si (001)[J]. Optics express, 2019, 27(3): 2681-2688.
- [30] Chen T R , Eng L , Zhuang Y H , et al. Quantum well superluminescent diode with very wide emission spectrum[J]. Applied Physics Letters, 1990, 56(14):1345.
- [31] Lin C F , Lee B L , Lin P C . Broad-band superluminescent diodes fabricated on a substrate with asymmetric dual quantum wells[J]. IEEE Photonics Technology Letters, 1996, 8(11):1456-1458.
- [32] Lin C F, Lee B L. Extremely broadband AlGaAs/GaAs superluminescent diodes[J]. Applied physics letters, 1997, 71(12): 1598-1600.
- [33] Yamatoya T , Mori S , Koyama F , et al. High Power GaInAsP/InP Strained Quantum Well Superluminescent Diode with Tapered Active Region[J]. Japanese Journal of Applied Physics, 1999, 38(Part 1, No. 9A):5121-5122.
- [34] Yamatoya T, Sekiguchi S, Koyama F, et al. High-power CW operation of GaInAsP/InP superluminescent light-emitting diode with tapered active region[J]. Japanese Journal of Applied Physics, 2001, 40(7A): L678.
- [35] Wu B R , Lin C F , Laih L W , et al. Extremely broadband InGaAsP/InP superluminescent diodes[J]. Electronics Letters, 2000, 36(25):2093.

- [36] Ma H, Chen S, Yi X, et al. High power polarization-insensitive 1.3 μm InGaAsP-InP quantum-well superluminescent emission diodes grown by MOVPE[J]. Semiconductor science and technology, 2004, 19(7): 823.
- [37] Burrow L, Causa F, Sarma J. 1.3- μm ripple-free superluminescent diode[J]. IEEE Photonics Technology Letters, 2005, 17(10):2035-2037.
- [38] Sun Z, Ding D, Gong Q, et al. Quantum-dot superluminescent diode: A proposal for an ultra-wide output spectrum[J]. Optical and quantum Electronics, 1999, 31(12): 1235-1246.
- [39] Zhang Z Y, Wang Z G, Xu B, et al. High-performance quantum-dot superluminescent diodes[J]. IEEE Photonics Technology Letters, 2004, 16(1): 27-29.
- [40] Xin Y C, Martinez A, Nilsen T A, et al. 1.3 μm quantum dot multi-section superluminescent diode with extremely broad bandwidth ($\gg 150 \text{ nm}$)[C]//2006 Conference on Lasers and Electro-Optics and 2006 Quantum Electronics and Laser Science Conference. IEEE, 2006: 1-2.
- [41] Djie H S, Dimas C E, Wang D N, et al. InGaAs/GaAs quantum-dot superluminescent diode for optical sensor and imaging[J]. IEEE Sensors Journal, 2007, 7(2): 251-257.
- [42] Chen S, Li W, Zhang Z, et al. GaAs-based superluminescent light-emitting diodes with 290-nm emission bandwidth by using hybrid quantum well/quantum dot structures[J]. Nanoscale research letters, 2015, 10(1): 340.
- [43] Jiang Q, Tang M, Chen S, et al. InAs/GaAs quantum-dot superluminescent diodes monolithically grown on a Ge substrate[J]. Optics express, 2014, 22(19): 23242-23248.
- [44] Chen S, Tang M, Jiang Q, et al. InAs/GaAs quantum-dot superluminescent light-emitting diode monolithically grown on a Si substrate[J]. Acs Photonics, 2014, 1(7): 638-642.

第二章 理论基础与实验技术

在详细介绍能级弥散及分数维度理论之前，我们需要先对传统的低维异质结构进行介绍，并且在进行器件研究之前，我们首先需要了解相关的理论基础与实验技术。因此本章中我们将介绍半导体 III-V 族低维异质结构的基本理论、半导体激光器及超辐射管的基本理论，还将介绍半导体材料的外延技术（包括金属有机化学气相沉积和分子束外延技术），半导体材料相关表征技术（X 射线衍射、光致发光、原子力显微镜等），器件制备及测试技术（器件制备工艺、器件测试相关技术等）。

2.1 半导体低维异质结构及器件的理论基础

半导体同质结构指的是同种材料组成的结构，通常特指禁带宽度相同，但是由于掺杂类型不同或者虽然掺杂类型相同但是掺杂浓度不同的同一种半导体材料组成的晶体结构。半导体异质结构指的是由两种带隙宽度不同的单晶材料组成的晶体结构，例如 GaAs/AlGaAs、InAs/GaAs 等，这些异质结构中，有两种半导体材料，其禁带宽度不同^[1]。

2.1.1 半导体低维结构

半导体低维结构是指相对于体材料（三维）维度更低的结构，包括量子阱（二维）、量子线（一维）、量子点（零维）等。量子阱是指材料在一个方向上的尺寸很小，电子在该方向上的运动受到了限制，也就是说，电子只在两个方向上的运动是自由的。同理，量子线是指电子在两个方向上的运动受到量子约束，只在一个方向上可以自由运动，而量子点是指三个方向上都存在着量子效应，电子在三个方向上的运动都受到了约束^[2]。

将所有边界条件设定为无限深势阱这一边界条件时，三维结构（体材料）导带的电子态密度表达式为^[3]

$$\rho_c^{3D}(E) = 8 \times \frac{(m_n^*)^3 \sqrt{2(E - E_c)}}{\pi^2 \hbar^3} \quad (2.1)$$

上式中， m_n^* 是电子的有效质量， E_c 是导带边界处的能量值。

二维结构（量子阱）的电子态密度表达式为^[3]

$$\rho_c^{2D}(E, L_z) = 4 \times \sum_n \frac{m_n^*}{\pi \hbar^2 L_z} \Theta(E - E_n) \quad (2.2)$$

上式中, $\Theta(E - E_n)$ 为阶跃函数, 表示能量高于 E_n 时值为 1, 小于 E_n 时值为 0, E_n 表达式为

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m_n^* L_z^2}, \quad n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (2.3)$$

一维结构(量子线)的电子态密度表达式为^[3]

$$\rho_c^{1D}(E, L_y, L_z) = 2 \times \sum_{m,n} \frac{\sqrt{2m_n^*} \Theta(E - E_{mn})}{L_y L_z \pi \hbar \sqrt{E - E_{mn}}} \quad (2.4)$$

上式中, E_{mn} 为

$$E_{mn} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_n^*} \left[\left(\frac{m}{L_y} \right)^2 + \left(\frac{n}{L_z} \right)^2 \right], \quad m, n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (2.5)$$

零维结构(量子点)的电子态密度表达式为^[3]

$$\rho_c^{0D}(E, L_x, L_y, L_z) = \sum_{l,m,n} \frac{2}{L_x L_y L_z} \delta(E - E_{lmn}) \quad (2.6)$$

上式中, $\delta(E - E_{lmn})$ 为冲激函数, 表示在能量不等于 E_{lmn} 处, 电子态密度为 0, E_{lmn} 为

$$E_{lmn} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_n^*} \left[\left(\frac{l}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{m}{L_y} \right)^2 + \left(\frac{n}{L_z} \right)^2 \right], \quad l, m, n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (2.7)$$

图 2-1 展示了上述几种维度的形状以及电子态密度曲线示意图^[4], 由图中可以清楚地看到, 体材料中电子的态密度曲线为抛物线, 量子阱中电子的态密度曲线为台阶状, 量子线中电子的态密度曲线为锯齿状, 量子点中电子的态密度曲线为冲激状。

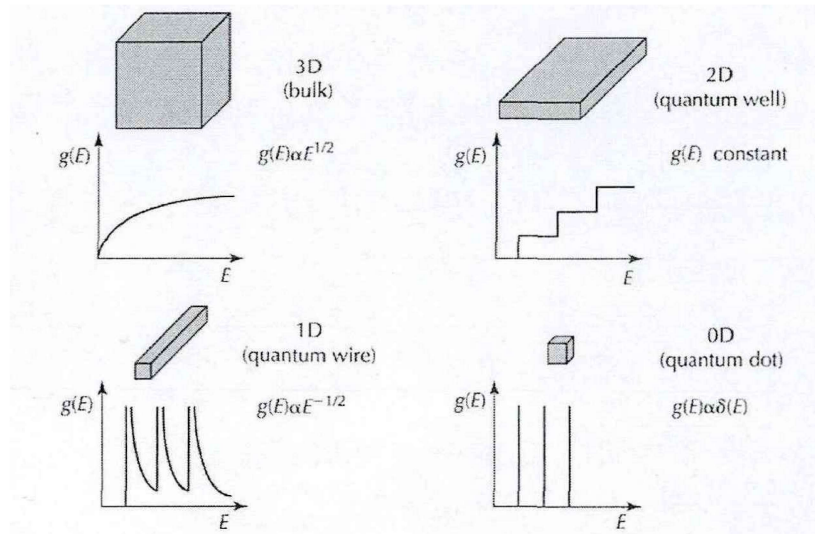


图 2-1 体材料、量子阱、量子线、量子点的形状和态密度曲线示意图^[4]

2.1.2 半导体激光器的基本理论^[5]

我们知道，激光器工作需要三个要素，包括：增益介质、泵浦源（粒子数反转）以及光学谐振腔。当然半导体激光器也不例外，对于本文中所涉及的半导体激光器而言，增益介质指的是半导体受激发射物质，就是有源区内的量子阱或者量子点，泵浦源就是注入的电流，谐振腔则是由两个自然解理面组成。

对于（100）衬底上的外延样品而言，解理面为（011）或者（0 $\bar{1}$ 1）。当光束垂直入射到腔面上时，光的反射率 R 为

$$R = \left(\frac{n_r - 1}{n_r + 1} \right)^2 \quad (2.8)$$

在上式中， n_r 是指半导体的折射率，1是空气的折射率，例如当 n_r 为3.6的时候，计算可以得到反射率 R 为32%。这一反射率足够为半导体激光器中提供反馈作用，因此半导体激光器无需镀高反膜便能实现高效率发光。

FP腔的透过率为

$$\frac{I_t}{I_0} = \frac{T_1 T_2 G_{s0}}{(1 - G_{s0} \sqrt{R_1 R_2})^2 + 4 G_{s0} \sqrt{R_1 R_2} \sin^2(n_r k L)} \quad (2.9)$$

$$G_{s0} = \exp(2g_E L) = \exp(gL) \quad (2.10)$$

上式中， I_0 为入射的光强， I_t 为透过的光强， $T_1 T_2$ 分别是两个腔面光强的透射率， R_1 、 R_2 分别是两个腔面光强的反射率， n_r 为折射率， k 为波数， L 为腔长， g 为增益。

对于式 2.9 而言，激光振荡条件为在没有入射光强的时候，器件有出射光，即式 2.9 右项分母为零，这就需要满足如下要求：

$$1 - G_{s0} \sqrt{R_1 R_2} = 0 \quad (2.11)$$

$$\sin(n_r k L) = 0 \quad (2.12)$$

式 2.12 成立的条件是 $n_r k L = n\pi$ ，由 $1 - G_{s0} \sqrt{R_1 R_2} = 0$ 且 $G_{s0} = \exp(2g_E L) = \exp(gL)$ 得到，光功率增益系数 $g = \frac{1}{L} \ln \frac{1}{\sqrt{R_1 R_2}}$ ，由于激光器内部存在损耗，损耗系数记为 α_i ，则激光器激射时的阈值增益为

$$g_{th} = \alpha_i + \frac{1}{L} \ln \frac{1}{\sqrt{R_1 R_2}} = \alpha_i + \frac{1}{2L} \ln \frac{1}{R_1 R_2} \quad (2.13)$$

半导体激光器具有许多特性，首先注入到激光器的电能转换为激光的功率效率为

$$\eta_p = \frac{\text{激光输出功率}}{\text{所消耗电功率}} = \frac{P_{out}}{IV + I^2 R} \quad (2.14)$$

上式中, P_{out} 为激光器的输出功率, I 为激光器的工作电流, V 为激光器 pn 结的正向压降, R 为串联电阻, 包括激光器的体电阻和电极接触电阻。

激光器的内量子效率定义为

$$\eta_i = \frac{\text{单位时间内有源区发出的光子数}}{\text{单位时间内有源区内注入的电子-空穴对数}} \quad (2.15)$$

由于激光器中有缺陷、杂质等的存在, 有源区内注入的载流子不会完全复合产生光, 因此 $\eta_i < 1$ 。

激光器的外微分量子效率定义为

$$\eta_d = \frac{(P_{out} - P_{th})/h\nu}{\frac{I - I_{th}}{e}} = \frac{\frac{P_{out}}{h\nu}}{\frac{I - I_{th}}{e}} = \frac{P_{out}}{(I - I_{th})V} \quad (2.16)$$

从上式中可以看出, 外微分量子效率实际上是 P-I 曲线 I_{th} 以上的线性部分的斜率, 因此外微分量子效率也称为斜率效率。

2.1.3 半导体超辐射管的基本理论

超辐射管与激光器类似, 相比较于激光器, 其没有足够的腔面反馈, 即缺少了谐振腔这一要素, 因此无法产生激光振荡, 输出的光不是受激辐射光, 而是经过放大的自发辐射光。相比于激光器而言, 超辐射管一般具有较宽的光谱, 相比于发光二极管 (LED) 而言, 超辐射管的功率又较大, 所以超辐射管是介于激光器跟 LED 之间的一种光源, 兼具宽光谱和大功率两个特性, 在光纤陀螺^[6]、光学相干断层扫描^{[7][8]}、光学传感^{[9][10]}等领域有着广泛的应用。超辐射管相对于激光器最主要的区别是其内部没有光学谐振, 因此往往需要对器件的端面进行处理以抑制激光振荡, 避免产生激光, 现在常用的做法有: 吸收区^[11]、倾斜波导^[12]、弯曲波导^[13]等或者以上几种方式的组合, 并常常在端面蒸镀减反射膜。

在本论文中, 我们制备的超辐射器件主要采用了弯曲的脊型波导形状, 其俯视示意图及截面示意图如图 2-2 所示, 直条部分与弯曲部分的长度分别为 L_1 、 L_2 , 弯曲波导端面法线夹角设为 θ , 对于脊型波导而言, 由于脊型两侧的沟槽停止在有源区的上方, 在纵向上对光场的限制依靠的自然是器件结构中的上下限制层, 在横向上则依靠脊型波导的等效折射率与两侧的等效折射率之差对光场起到限制作用^{[14][15]}, 因此等效折射率差越大, 限制作用越强, 我们将等效折射率之差设为 Δn , 先不考虑真实器件的折射率, 不妨假设波导两侧等效为空气, 即等效折射率为 1。下面我们就该弯曲波导的损耗随着脊宽、弯曲角度以及折射率差的变化做简要仿真分析。

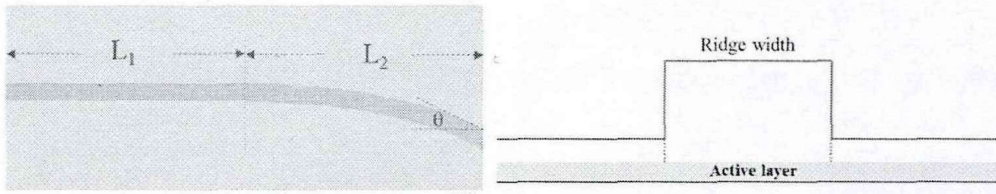


图 2-2 脊型波导俯视及截面示意图

我们设定 $L_1=1\text{mm}$ 、 $L_2=1\text{mm}$ ， $\Delta n=0.005$ （即脊型波导等效折射率为 1.005），光的波长为 $1.31\mu\text{m}$ ，当 $\theta=10^\circ$ 时，我们来看波导宽度的变化所带来的弯曲波导的损耗情况变化规律，图 2-3 展示了 $2\mu\text{m}$ 、 $5\mu\text{m}$ 、 $10\mu\text{m}$ 、 $20\mu\text{m}$ 这四种脊宽下的弯曲波导损耗，可以看出 $2\mu\text{m}$ 的时候损耗很大，脊宽增加到 $5\mu\text{m}$ 时，损耗减小，继续增加到 $10\mu\text{m}$ ，弯曲损耗继续减小，然后将波导宽度增加到 $20\mu\text{m}$ ，我们发现，此时的损耗相对 $10\mu\text{m}$ 而言又增大了，这说明波导宽度太宽或者太窄均会使得损耗增大。

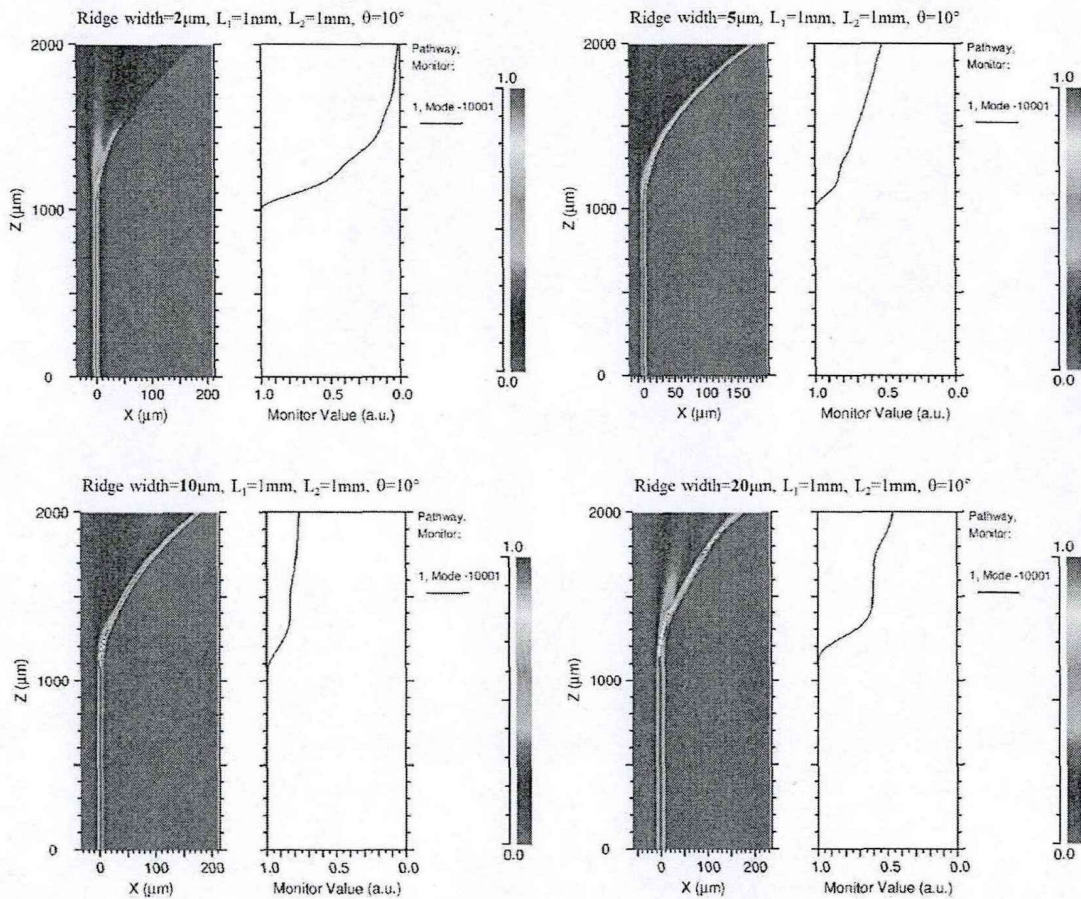


图 2-3 不同宽度下弯曲波导的损耗

进一步地，我们又比较了在同样的脊宽下，随着弯曲角度的增加，弯曲波导损耗的变化，我们依旧选取 $L_1=1\text{mm}$ 、 $L_2=1\text{mm}$ ， $\Delta n=0.005$ ，光的波长为 $1.31\mu\text{m}$ ，然后设定波导宽度为 $10\mu\text{m}$ ，变化弯曲角度 θ 的值，使其从 6° 增加到 12° ，间隔为

2°，即弯曲角度分别是 6°，8°，10°，12°。从图 2-4 中能够很明显的看出，随着弯曲角度的增大，最后传输到端面处的光强变小，即波导的损耗增加。

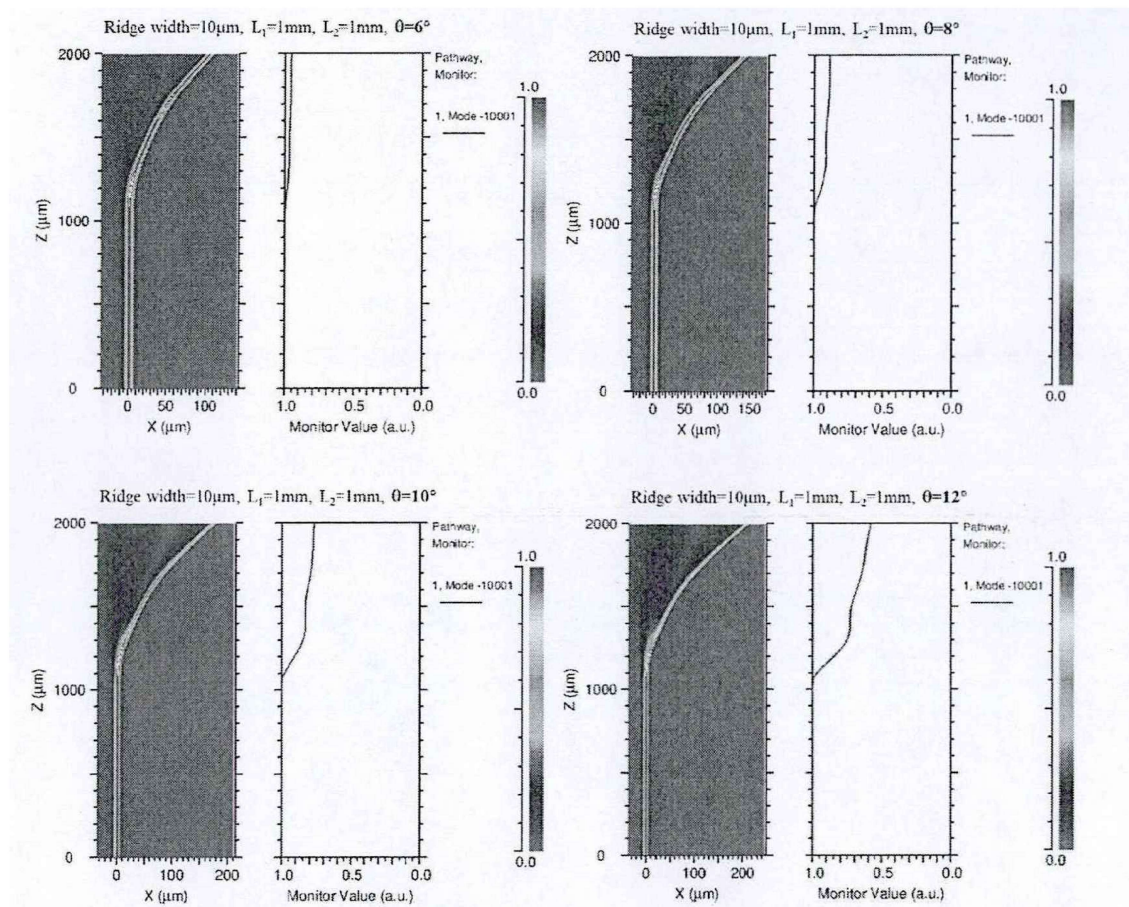
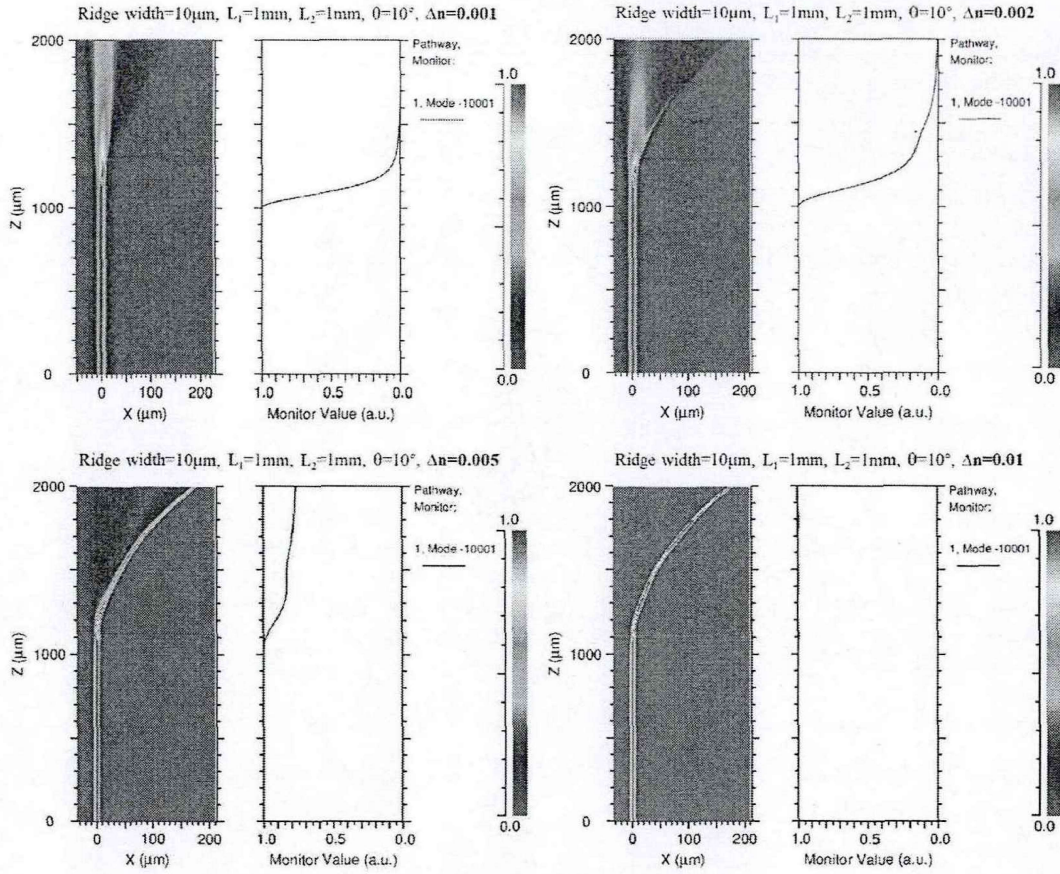


图 2-4 不同弯曲角度下弯曲波导的损耗

除前述波导宽度与角度外，实际上波导的损耗与等效折射率差即 Δn 的关系很大，因此我们在这里比较 Δn 改变时的情形，将 Δn 分别设定为 0.001、0.002、0.005 与 0.01，其他参数我们选取为 $L_1=1\text{mm}$ ， $L_2=1\text{mm}$ ， $\theta=10^\circ$ ，光的波长为 $1.31\mu\text{m}$ ，波导宽度为 $10\mu\text{m}$ 。如图 2-5 所示，可以看出， Δn 为 0.001 和 0.002 的时候，波导的损耗相当大，当 Δn 为 0.005 时损耗减小了很多，当 Δn 增加到 0.01 时，波导的弯曲损耗很小，这说明，在确定了波导宽度和弯曲角度的情况下，提高脊型波导的有效折射率，对于减小弯曲损耗是一个有效的措施，那么对于真实的器件而言，增大脊型波导的折射率需要依靠增加刻蚀深度来实现，这说明在保证器件可靠性的前提下，制备器件时增加刻蚀深度会减小波导的损耗，从而提高器件的功率。

图 2-5 不同 Δn 下弯曲波导的损耗

通过上面的仿真分析了解了弯曲波导的损耗后,接下来为更好地理解超辐射器件内光场的传输,我们在这里介绍一种基于一维传输波的超辐射管器件简单模型^[16]。我们设定器件的前向和后向传输功率分别为 P^+ , P^- ,光的传输方向为 z ,器件的模式增益为 g_{mod} ,内部损耗系数为 α_i ,粒子数反转因子为 n_{sp} ,器件内光的群速度为 $v_{gr} = c/n_{gr}$,器件长度为 L ,那么,可以列出光功率在传输方向上随着传输距离变化的微分方程如下。

$$\frac{dP^+(z)}{dz} = (g_{mod} - \alpha_i) \cdot P^+(z) + \frac{n_{sp}\hbar\omega v_{gr}}{2L} g_{mod} \quad (2.17)$$

$$-\frac{dP^-(z)}{dz} = (g_{mod} - \alpha_i) \cdot P^-(z) + \frac{n_{sp}\hbar\omega v_{gr}}{2L} g_{mod} \quad (2.18)$$

上面的微分方程的解的一般形式为

$$P^+(z) = P_0^+ \cdot G(z) + a \cdot \{G(z) - 1\} \quad (2.19)$$

$$P^-(z) = P_L^- \cdot G(L-z) + a \cdot \{G(L-z) - 1\} \quad (2.20)$$

上式中,下标 0 和 L 表示在 $z=0$ 和 $z=L$ 时的功率,即器件两端的光功率。

$$a = \frac{n_{sp}\hbar\omega v_{gr}}{2L} \frac{g_{mod}}{g_{mod} - \alpha_i} \quad (2.21)$$

$G(z)$ 为增益放大因子,

$$G(z) = \exp\{(g_{mod} - \alpha_i)z\} \quad (2.22)$$

边界条件为

$$P_L^- = R_f \cdot P_L^+ \quad (2.23)$$

$$P_0^+ = R_b \cdot P_0^- \quad (2.24)$$

R_f 和 R_b 分别为器件前端面和后端面的有效模式反射率，利用上面的边界条件，我们能够推导出器件内部腔面处的光功率如下，

$$P_L^+ = a \cdot \frac{1 + G(L)R_b}{1 - G^2(L)R_bR_f} \cdot (G(L) - 1) \quad (2.25)$$

$$P_0^- = a \cdot \frac{1 + G(L)R_f}{1 - G^2(L)R_bR_f} \cdot (G(L) - 1) \quad (2.26)$$

而器件输出的光功率的值则等于内部腔面处的功率中的有效透射部分，即上面的光功率与透射率相乘。为了更加便于计算，我们将增益最大值所在的光谱位置的参数设定为初始参数（加上下标 0），这样，考虑到增益谱内所有对功率有贡献的模式数量 n_{eff} 为自发放大辐射谱的 3dB 带宽与纵模间隔的比值，我们以 $\Delta\lambda_{3dB}$ 表示自发放大辐射谱的 3dB 带宽，纵模间隔为 $\lambda_0^2/(2n_{gr,0}L)$ ，这样得到光功率为

$$P_f = \bar{P} \cdot \frac{1 + G_0(L)R_b}{1 - G_0(2L)R_bR_f} \cdot (G_0(L) - 1) \cdot T_f \quad (2.27)$$

$$P_b = \bar{P} \cdot \frac{1 + G_0(L)R_f}{1 - G_0(2L)R_bR_f} \cdot (G_0(L) - 1) \cdot T_b \quad (2.28)$$

上面的式子中， \bar{P} 为前置因子，

$$\bar{P} = n_{eff}a_0 = n_{eff} \cdot \frac{n_{sp}\hbar\omega_0 v_{gr,0}}{2L} \frac{g_{mod,0}}{g_{mod,0} - \alpha_{i,0}} = \Delta\lambda_{3dB} \cdot \frac{n_{sp}hc^2}{\lambda_0^3} \frac{g_{mod,0}}{g_{mod,0} - \alpha_{i,0}} \quad (2.29)$$

再通过增益随着电流变化的相关模型将注入电流与增益联系起来，这样就可以通过上面的式子计算出超辐射器件功率随着电流变化的曲线。

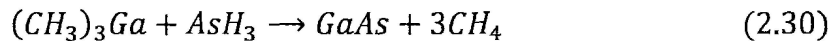
2.2 半导体 III-V 族材料外延技术

2.2.1 金属有机化学气相沉积

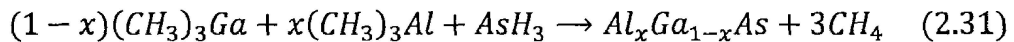
现在晶体生长主要有两种方法，一种是金属有机化学气相沉积（MOCVD），另外一种分子束外延（MBE）。相比较而言，MBE 可以监控晶体原子层生长的过程，可以生长出极为陡峭的界面，在研究领域应用广泛，然而，MBE 需要在极高真空（UHV）下进行生长，UHV 系统昂贵，因此 MBE 系统设备非常昂贵，并且在开关机或者设备维护时需要开腔，这会增加系统的不可重复性程度，使得其在商业化用途中有着很大的局限^[17]。MOCVD，又被称为 MOVPE（金属有机气相外延）、OMVPE（有机金属气相外延）等。同 MBE 相比，MOCVD 的生长

速率更高，界面也足够陡峭，在研究与商业化领域都有着非常广泛的应用。本论文主要采用 MOCVD 生长相关材料及器件结构，同时还涉及到了利用 MBE 生长的器件外延片进行工艺制备。

所有的晶体生长过程都很复杂，当然 MOCVD 也不例外，MOCVD 生长的过程与诸多因素有关，包括热力学、质量运输、表面动力学等^[18]。在生长的过程中，将氢气作为载气，即通过化学纯化或者钽管纯化后，纯化后的氢气进入 III 族源的源瓶中，将 III 族源运输到反应室中。而砷烷或者磷烷等五族源则多是以氢化物的形式（当然也有五族源以有机化合物的形式存在，例如叔丁基砷烷等）直接（或者利用氢气稀释后）进入到反应室中，气体会流向被加热的衬底，然后温度会逐渐升高，在衬底表面发生反应，具体的反应过程相当复杂，包括裂解、吸附、表面扩散、表面反应、气相成核、解吸附等过程。通过控制气态源的流量和通入反应室的时间等可以控制外延层的组分、厚度等等。以 GaAs 为例，使用氢气作为载气，氢气通过盛有三甲基镓（TMGa）的鼓泡瓶，然后氢气便会携带三甲基镓的蒸气进入反应室，同时砷烷（AsH₃）也进入反应室，在一定温度（通常在 600℃ 与 750℃ 之间）的 GaAs 衬底表面，三甲基镓与砷烷发生化学反应：



如果同时通入三甲基铝（TMAI），那么就会得到 Al_xGa_{1-x}As 三元材料，反应如下：



通常情况下 MOCVD 生长的速率与 III 族源通入的流量成正比，而与 V 族源关系不大，除生长温度外，调节生长速率时一般依靠调整 III 族源的流量，生长速率调节范围较广。MOCVD 可以进行大片和多片的生长，容易实现产业化，当前有的商业化 MOCVD 一次可生长百片以上。

本论文中材料生长使用的是 Thomas-Swan CCS-MOCVD 系统，属于低压(LP) MOCVD 设备，低压 MOCVD 反应室相对于常压 MOCVD 反应室而言，其优点包括^[17]：有助于消除反应室内热驱动对流、抑制有害的寄生反应和气相成核、有利于获得陡峭结合改善均匀性、减弱来自衬底的自掺杂、可以使用相对较低的生长温度、可以使用较低蒸气压的金属有机源。在生长过程中，利用干泵（机械泵）将反应室压力抽到 100torr（13.33kPa），石墨舟转速设定为 100r/min。

本论文中采用 MOCVD 进行量子点/阱等典型低维结构的生长时所用的 III 族源为三甲基镓（TMGa）、三甲基铝（TMAI）、三甲基铟（TMIn），所采用的 V 族源为砷烷（AsH₃）、磷烷（PH₃），所采用的掺杂源有硅烷（SiH₄）、二乙基锌（DEZn）。在 III 族源中，三甲基源使用最为频繁，因为它们的蒸气压较高，并且稳定性也比较高，使用前可以在室温下储存很长时间，并且在生长的过程中，不易发生副

反应^[17]。在本文中，生长量子阱、量子点等材料时主要依靠调整生长温度、五三族比、沉积量、生长速率等进行优化。

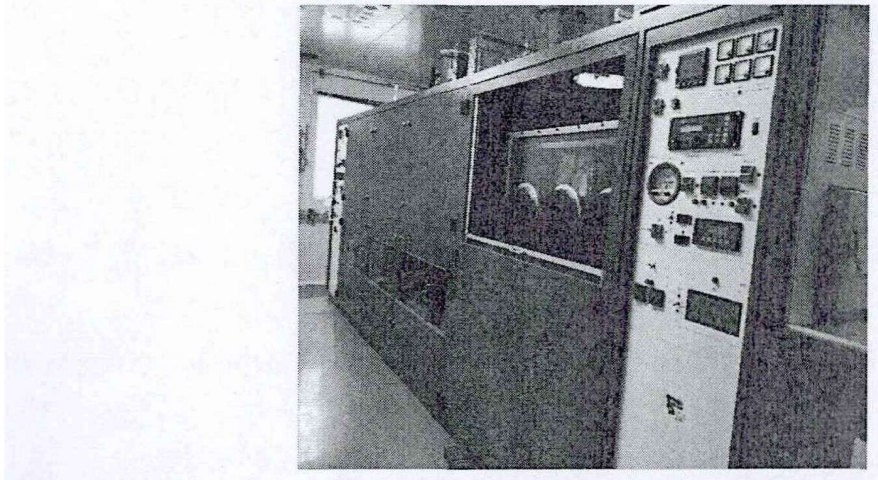
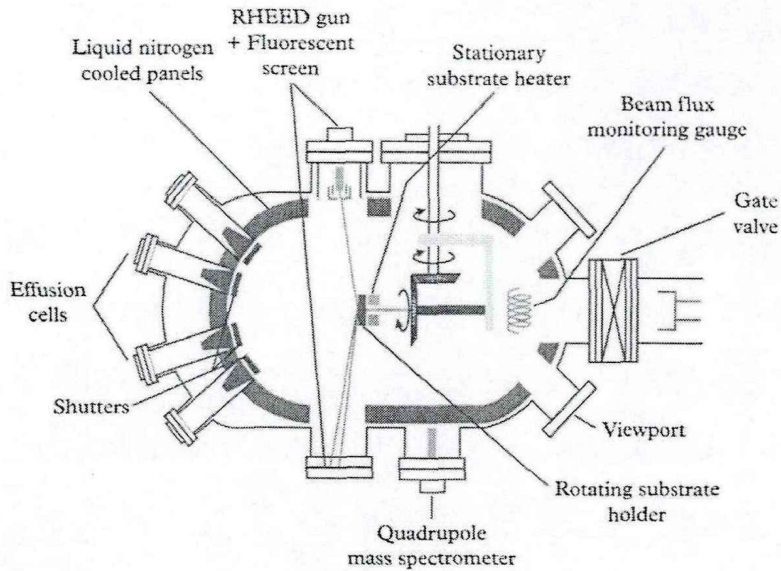


图 2-6 MOCVD 设备图

2.2.2 分子束外延

分子束外延 (Molecular beam epitaxy, MBE) 是半导体材料薄膜生长的一种重要方法，起源于上世纪 60 年代，是在超高真空下进行晶体外延生长的一种方法，目前 MBE 已经广泛应用在薄膜生长方面。顾名思义，分子束外延是利用分子 (或原子) 向衬底表面以束流的方式运动，进而在衬底表面进行外延^[19]。如图 2-7 所示，分子束外延设备的生长系统主要由源炉、衬底加热器、束流计等组成，生长腔室一般还会安装高能反射电子衍射仪 (RHEED) 用以进行原位监测，以实时了解晶体的生长状态、结晶状态、平整度等信息。MBE 的生长过程是分子束和晶体表面的反应动力学所控制的生长过程^[20]，而非热平衡的过程，当原子或者分子从源炉蒸发，入射到衬底表面时，这些原子或分子将在衬底的表面发生迁移、分解、吸附、解吸附等动力学过程，该过程的进行受到温度、束流速率等的影响，因此，在 MBE 的生长过程中，衬底温度以及源的束流速率作为重要的生长条件是优化的重点。以 GaAs 衬底上生长 GaAs 为例，在利用 MBE 进行 GaAs 的生长时，会加热分别装有 Ga 和 As 的源炉，Ga 和 As 分别受热蒸发，以束流的形式射向 GaAs 衬底表面，此时，衬底加热器已经将衬底加热到了设定的温度，Ga 和 As 束流在 GaAs 衬底表面发生上述一系列过程，最终在表面外延出 GaAs 层。

总体来讲，MBE 具有以下几个显著的特点^[20]：MBE 是在超高真空环境下进行外延生长，生长的环境中残留气体及杂质少，使得 MBE 外延出的薄膜具有很高的纯度；MBE 外延的温度低，可以有效地降低由于热膨胀而引起的晶格失配；MBE 在进行生长时，可以对源炉中挥发的原子或者分子的束流精确地进行控制，并且生长的速度缓慢，有利于生长超薄层结构例如超晶格等。

图 2-7 MBE 设备示意图^[19]

2.3 半导体材料表征技术

2.3.1 X 射线衍射

X 射线衍射 (X-Ray Diffraction, 简称 XRD), 是用来检测和分析样品晶体结构的一种手段, 其原理是采用 X 射线照射样品, 对得到的衍射图样进行分析, 获得材料的成分、内部原子或分子的结构或形态等信息。本论文中实验所用到的具有高角分辨率的高分辨率双晶 X 射线衍射仪, 我们用其来测试外延薄膜与衬底间的应变、三元合金例如 AlGaAs 的组分、多量子阱的周期厚度等。当 X 射线照射到晶体上的时候, 由于晶体结构的存在, X 射线会产生相干散射和不相干散射, 而相干的散射线会产生干涉, 在相邻散射线光程差为波长的整数倍的方向上, 将出现 X 射线衍射线^[21]。

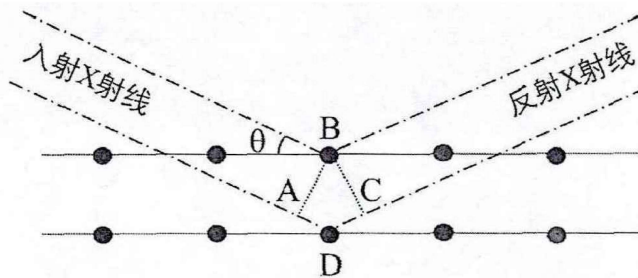


图 2-8 X 射线干涉示意图

如图 2-8 所示, 两束 X 射线的光程差为 $AD+CD=2d\sin\theta$, 当光程差为波长的整数倍的时候, 散射的 X 射线干涉增强, 因此, 干涉加强的条件为:

$$2d\sin\theta = n\lambda \quad (2.32)$$

上式即布拉格方程，上面式子中， d 是晶面间距， θ 是入射线、反射线与晶面之间的夹角，称为掠射角，也可称为布拉格角， 2θ 是衍射角，即入射线与反射线之间的夹角， n 是衍射级数（整数）， λ 是入射的 X 射线的波长。在本论文中，所要测量的 GaAs、AlGaAs 等为闪锌矿结构，其晶面间距为 $d = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$ ，在上面的式子中， a 是晶格常数， h 、 k 、 l 是晶面指数。在本论文中进行测量时，测量晶体的 (004) 晶面的衍射，并且取 1 级的布拉格衍射角， $h = 0, k = 0, l = 4, n = 1$ ，例如在测量 AlGaAs 的晶格常数时，布拉格定理可以写为：

$$\lambda = 2d\sin\theta = 2\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}\sin\theta = \frac{2a}{\sqrt{0^2+0^2+4^2}}\sin\theta = \frac{a}{2}\sin\theta \quad (2.33)$$

如上式，当通过 XRD 测得晶体的布拉格角时，便可以得到晶体的晶格常数，例如常用的半导体材料 InP 的布拉格角为 31.669° ，而我们所用的 X 射线的波长为 1.54056\AA ，将其和布拉格角的值带入到式(2.33)中，便可以计算求得 InP 晶格常数为 5.8686\AA ，同样的，得知了晶格常数也可以反过来计算得出晶体的布拉格角的值。图 2-9 是本论文中 XRD 测试时所使用的 XRD 设备实物图。

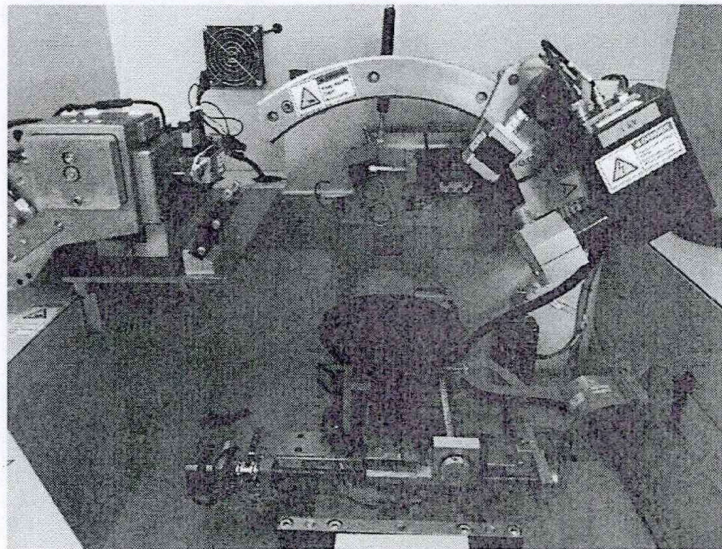


图 2-9 XRD 设备图

2.3.2 光致发光

光致发光 (Photoluminescence)，又称为光荧光，简称 PL，是指物体吸收外部照射进来的光子后重新发出光子的过程。其过程可以简要表述如下：外部的光源照射物体（例如半导体材料），光子将能量传递给价带中的电子，电子吸收光子的能量跃迁至导带，而价带则由于失去了电子而产生空穴；导带的电子会自发地向低能级跃迁，即导带中的电子会跃迁至价带然后与价带中的空穴复合，由于

电子跃迁后能量减少，因此会发射出一个光子，该光子的能量与电子跃迁减小的能量相同，也就是说与导带和价带之间的禁带宽度相同。因此光致发光谱的测试结果可以反映出材料的能带信息，例如 GaAs 材料的禁带宽度为 1.424eV，其光致发光波长在 870nm。而 InP 材料的禁带宽度为 1.344eV，其光致发光波长在 922nm。光致发光谱还可以反映出半导体材料的发光性能、缺陷杂质等信息。

光致发光谱测试系统包括激光光源、共聚焦显微镜、光栅单色仪、探测器等主要部件，当然还有反射镜等其他光学元件。测试样品时，光源一般为激光器，光源发出的光通过显微镜聚焦到样品上，其光斑大小可以调节，样品受到激光的激发，产生光致发光，激发出的荧光通过反射镜、滤光片等进入到单色仪，然后被探测器收集。探测器的种类有许多，诸如硅 CCD、InGaAs 探测器、Ge 探测器等，本文中所测得的 PL 使用的探测器大多为 InGaAs 探测器。

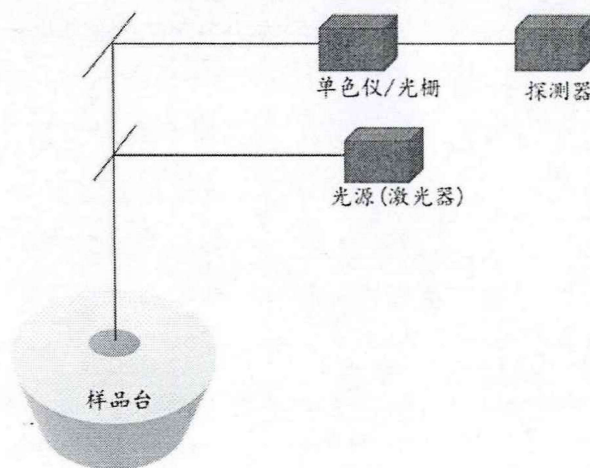


图 2-10 光致发光谱设备示意图

2.3.3 原子力显微镜

原子力显微镜 (Atomic force microscope, 简称 AFM) 是扫描探针显微镜的一种，利用针尖和样品表面原子之间的范德瓦尔斯力来测试表征样品的表面形貌。图 2-11 是 AFM 的工作原理的示意图，如图所示，探针安装在悬臂上，激光照射到悬臂上之后会反射到探测器处，探针在样品表面进行扫描，由于样品表面起伏的存在，探针也会随着表面的起伏而上下移动 (恒力模式)，悬臂也就随着探针的移动而上下摆动，因此反射光束的方向也会变化，反映到探测器上就是探测到的光斑的坐标发生变化，这就能够反映出样品表面形貌的变化。当悬臂轻微移动时，反射光束变化的幅度要远远大于悬臂的摆动幅度，也就是说，信号被放大了，这样，即使探针在垂直于样品表面的方向上有很小的移动，探测器也能够探测到，另外，探针与样品表面的力随着与样品表面的距离变化很敏感，从而导致探测器

接收到的信号发生变化，因此在垂直于样品表面的方向上 AFM 有着很高的分辨率，通常而言，可以达到 1\AA 以下的分辨率。

原子力显微镜测试时分三种模式：接触模式、非接触模式、轻敲模式。接触模式是指探针与样品表面的距离非常近，工作在范德瓦尔斯力曲线的斥力区域。具体来讲，当探针远离样品表面的时候，可以认为此时的探针与样品间没有作用力，当探针逐渐靠近样品表面的时候，会首先受到吸引力，探针弯曲，然后继续靠近使探针与样品表面接触，其作用力变为斥力。由于接触模式下针尖和样品表面一直接触（距离通常小于 1nm ），因而容易受到损坏，同时样品的表面也容易受到探针的影响。在非接触模式下，探针不会和样品表面直接接触，一般工作在范德瓦尔斯力曲线中吸引力的区域，此时，针尖与样品表面的距离相对较远，相互作用力较弱，适合表面较软的样品的测试。探针以一定的频率振荡，当受到样品表面的作用力时，其振荡的振幅、相位、频率等会发生变化，通过对这些信号进行处理，便可获得样品表面的信息^[22]，由于没有一直和样品表面接触，因此探针对样品表面几乎没有影响，可以用来测相对柔软或者粘附性强的样品。轻敲模式介于上述接触模式和非接触模式之间，在轻敲模式下探针并非一直和样品接触，而是间断性地接触，这样既避免了一直和样品接触从而容易造成针尖污染或者样品容易受到探针影响等接触模式下的缺点，又能避免样品表面吸附有液体层时非接触模式无法精确测量的不足。本文中主要利用 AFM 对量子点的形貌进行测试，进行 AFM 测试时所用的工作模式是轻敲模式。

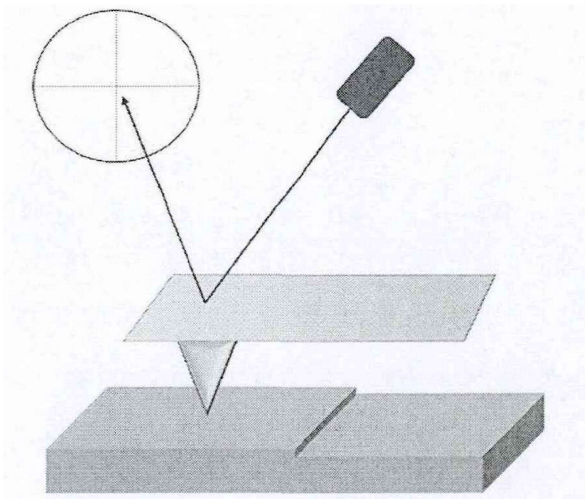


图 2-11 原子力显微镜原理示意图

2.3.4 其他表征技术

其他的测试表征技术还包括电化学电容电压(Ecv)，扫描电子显微镜(SEM)，透射电子显微镜(TEM)等。Ecv 测试技术是为了测试材料中的载流子分布，也就是说可以利用该测试技术来对材料的掺杂情况进行测试，从而可以根据测试结

果来合理地优化生长条件，对掺杂进行控制。SEM 是电子显微镜的一种，首先将电子枪发射的电子束进行汇聚，然后汇聚后的电子束打到样品表面，电子与样品相互作用产生二次电子、背散射电子、X 射线等各种信号，这些信号的强度分布跟样品表面的特征有关，被探测器收集，进行放大、处理等，进而得到能够反映样品表面形貌特征的扫描图像^[20]。TEM 是利用透射电子来对样品内部的结构信息进行测试，电子枪发射的电子经过汇聚后打到样品上，穿透样品，在电子穿过样品的过程中，电子与样品原子之间发生相互作用而被散射，这样，散射电子就会携带样品内部的结构信息，进而对散射电子进行处理，最后成像。由于电子束的穿透能力弱，因此在对样品进行 TEM 测试时，对于较厚的样品首先要进行制样减薄，样品的厚度需要很薄，一般在几十到几百纳米量级。

2.4 器件制备及测试技术

2.4.1 激光器/超辐射管制备工艺

本论文中的器件主要为脊型波导结构的器件，如图 2-12 所示，其优点是易于制备，在这种结构的器件制备过程中，首先需要对外延片进行清洗，之后进行一系列的光刻、腐蚀、淀积等工艺流程，最后制备出脊型波导器件，然后进行解理、装焊、测试等。对于脊型波导器件而言，激光器与超辐射管的制备工艺相同，当然，他们的波导形状与结构设计可能不同。管芯制备完成后，激光器往往无需镀膜或者可以镀高反膜，而对于特定波导形状的超辐射管而言，如果不能有效降低腔面反射，则需要蒸镀减反射膜。

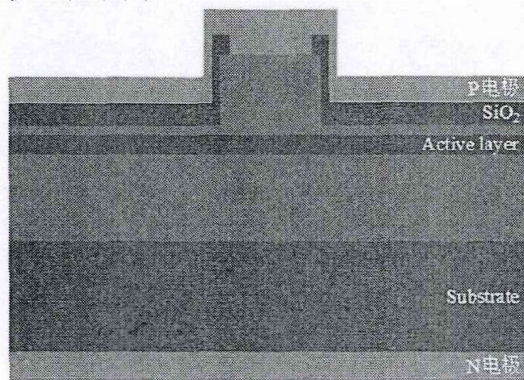


图 2-12 脊型波导器件示意图

器件的具体工艺步骤介绍如下：

1. 对外延品进行清洗

本论文中对外延片清洗的方法为：依次用丙酮、乙醇对外延片进行漂洗，必要时进行超声清洗，以去除其上的有机杂质。然后用去离子水清洗。

2. 光刻

光刻的目的是将光刻版（或称为掩膜版）上的图形转移到晶片上，光刻的基本流程是：首先在晶片表面涂覆上一层光刻胶，然后在热板上进行前烘（前烘的目的是去除光刻胶中的溶剂、增强粘附性、释放光刻胶膜内的应力及防止光刻胶玷污光刻版或者设备等^[23]），然后使用光刻机对晶片进行曝光，紫外光线透过光刻版把版上面的图形投影到晶片表面的光刻胶上，这样就激发了光刻胶的光化学反应，实现了曝光。曝光结束后，需要进行显影（显影是指光刻胶被曝光后，被进入特定溶液中进行选择性腐蚀的过程^[23]），对于正胶而言，光刻胶发生光化学反应后，曝光的区域将被显影液溶解，也就是说，光刻版上的图形就被留存到光刻胶上。显影时，我们将整个晶片浸没在显影液中一定时间，然后取出清洗干净。显影完成后，再次将晶片放置到热板上进行坚膜操作，目的是为了将光刻胶里的溶剂进一步挥发，从而使得光刻胶更加的坚硬，增强对晶片表面的保护作用，以便后续工艺的实施。

3. 波导刻蚀/腐蚀

光刻结束后，光刻版上的图形转移到光刻胶上，这时，便可以进行刻蚀工艺，刻蚀出需要的波导结构。波导刻蚀有湿法腐蚀和干法刻蚀两种方法，其中湿法腐蚀是使用化学溶液来腐蚀晶片，而光刻胶保护的区域则不被腐蚀，这样，就腐蚀出了波导结构。腐蚀的深度和速率主要依靠腐蚀溶液的浓度、温度、腐蚀时间等来决定。因此每次湿法腐蚀需要保持稳定的溶液浓度，调整一致腐蚀温度和腐蚀时间。干法刻蚀常用的有电感耦合等离子体刻蚀（ICP）、反应离子束刻蚀（RIE）等，这两种刻蚀方法都是利用设备系统内部所产生的等离子体来实现。本论文中的波导由湿法腐蚀实现，对于 InP 基的结构，在结构中生长有腐蚀截止层，使用 HCl 系腐蚀液对 InP 限制层进行腐蚀，当腐蚀液接触到腐蚀截止层时，由于无法进一步腐蚀 InGaAsP，进一步的纵向腐蚀便会停止。对于 GaAs 基的结构则没有腐蚀截止层，那么就需要根据腐蚀溶液的配比、温度、需腐蚀的深度来进行实验确定需要腐蚀的时间。波导刻蚀完成后，用丙酮将晶片表面的光刻胶洗去，若有残胶则使用氧等离子体刻蚀机进行短时间的刻蚀将胶去除干净。

4. 沉积绝缘介质层

在波导刻蚀完成后，需要在波导及晶片的表面沉积一层绝缘介质，从而起到电学绝缘的作用，同时也可以钝化和保护刻蚀的晶片表面。通常采用的绝缘层由二氧化硅、氮化硅、聚酰亚胺等，本论文中主要采用等离子增强化学气相沉积（PECVD）生长的二氧化硅作为绝缘介质层。

5. 二次光刻

由于在沉积完绝缘层后，整个晶片都被绝缘层盖住，这样自然就没有了电流注入的通道，因此需要进行第二次光刻，在脊型波导上光刻出需要的电极槽图形，

以便后续腐蚀出电极槽，打开电极窗口，为电流注入提供通道。此次光刻的步骤与第一次光刻基本相同，需要注意的是由于电极槽相对波导宽度更窄，在套刻时由于套刻误差的存在，电极槽图形往往不能完全在波导的正中间，这时候就要在开始设计的光刻版图中设计好误差容限，并且在套刻时利用对版标记仔细对版，尽量减小套刻误差。

6. 腐蚀开电极槽

在第二次光刻完成后，电极槽的图形已经由光刻版转移到晶片上，这时，便需要对晶片进行腐蚀，将电极槽内的绝缘介质（二氧化硅）腐蚀掉，打开电极窗口，使得晶片最上层的欧姆接触层暴露出来为后续的电极制备做准备。

7. 三次光刻

电极窗口打开后，后续便可以进行 p 面电极的工艺，但是直接溅射电极会在整个晶片表面都覆盖上金属，不利于之后的 bar 条测试以及管芯解理，因此往往在制备 p 面电极之前再进行一次光刻，界定出电极的区域。该次光刻中显影完成后，电极区域内光刻胶被溶解，区域外光刻胶保留。

8. 溅射金属电极

第三次光刻完成后，便可以进行 p 面电极的制备，本论文中采用磁控溅射来制备 p 面电极，溅射是指借助离子轰击靶材料，然后实现靶材料原子向样品表面的沉积。本论文中溅射的电极种类有 Ti/Pt/Au、Pt/Ti/Pt/Au 等，溅射完成后，对晶片进行剥离，由于电极区域外的金属下方保留着光刻胶，将晶片放入到丙酮中，光刻胶溶解，区域外的金属便脱离晶片表面，电极区域内的金属则依旧会粘附在晶片上。

9. 减薄抛光

为了后续对晶片进行解理，以及减小器件的电阻，需要对晶片进行减薄和抛光。利用金刚砂/刚玉粉等将衬底部分减薄到 120 微米左右，然后使用粒度更小的刚玉粉对衬底背面进行抛光，去除减薄带来的机械损伤。

10. N 面电极

减薄后，在晶片背面溅射/蒸发 N 电极，在本论文中，对于 GaAs、InP 衬底的器件，N 面金属 N 面电极的金属主要为热蒸发的 AuGeNi/Au，热蒸发是指给待蒸发物（金属）提供足够的热量，使其蒸发，之后蒸发的粒子在样品表面凝结，从而形成所需要的薄膜。在少数 InP 器件中，也使用了溅射的 Pt/Au 系金属。AuGeNi/Au 蒸发完成后，将晶片放入快速退火炉中对电极进行合金化处理，减小电阻，实现欧姆接触。

2.4.2 激光器/超辐射管测试技术

器件制备完成后,需要进行测试以表征其性能。我们所测试的器件的特性包括:功率-电流(PI)曲线、电流-电压曲线(IV)、电致发光(Electroluminescence, EL)光谱等。这几项测试均是表征器件性能的重要手段,IV曲线是器件的电流-电压曲线,由此可以判断出器件的开启电压、串联电阻等,若在测试过程中器件的开启电压和正常值的偏差较大,这表明器件中可能存在比如电流泄露、pn结击穿等问题^[24],PI曲线是器件的出光功率随着电流变化的曲线,由此可以判断出激光器的阈值电流、器件的斜率效率等,PI与IV结合可以计算出器件的电光转换效率。由电致发光光谱则可以判断出器件在特定电流下的发光波长、光谱宽度等。

本论文中,器件的IV曲线测试所用的仪器是KEITHLEY高精度源表,源表本身可以输出设定好的电流或者电压,我们设定输出为电流,在输出电流的同时也可以进行电压的测量。进行PI曲线测试时,利用上述源表进行作为电流源,将设定的电流注入到器件中,然后使用积分球对器件进行光功率的测试。在本论文中,所测得的PI曲线主要有两种,一种是在连续电流条件下测得,另外一种是在脉冲电流条件下测得,该测试条件中电流脉宽为0.2ms,占空比为10%,脉冲的重复频率为500Hz。测量EL谱时我们也是使用上述源表作为器件的电源,在器件上输入设定的电流,然后利用透镜光纤跟管芯进行耦合,光纤的另外一端接光谱仪,进行光谱的测试。同样,也可对器件发出的光进行偏振度(Degree of polarization, DOP)测试,这时与上述光谱测试的方法一致,只是将上述光纤换为保偏光纤,将光纤的另一端接入DOP测试仪即可。

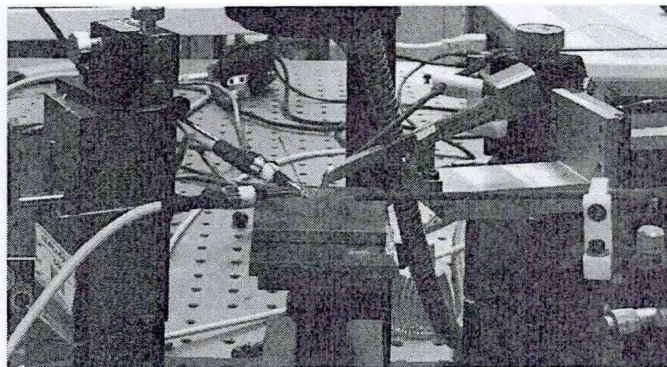


图 2-13 器件测试探针台

2.5 本章小结

本章我们主要介绍了理论基础和实验技术,在理论基础方面,我们简单介绍了半导体低维异质结构的基本概念、激光器及超辐射管的基本理论及简单模型;在实验技术方面,我们介绍了半导体材料的外延技术、表征技术、器件制备及测

试技术。其中外延技术包括金属有机化学气相沉积和分子束外延，表征技术我们主要介绍了 X 射线衍射、光致发光、原子力显微镜等，还详细介绍了器件制备的工艺流程以及器件的 PIV、光谱测试等。

参考文献

- [1] 余金中. 半导体光子学[M]. 科学出版社, 2015.
- [2] 彭英才, 赵新为, 傅广生. 低维半导体物理[M]. 国防工业出版社, 2011.
- [3] Ren X. Novel understanding of electron states architecture and its dimensionality in semiconductors[J]. *Optics and Photonics Journal*, 2013, 3(02): 322.
- [4] Henini, Mohamed, ed. Handbook of self assembled semiconductor nanostructures for novel devices in photonics and electronics[M]. Elsevier, 2011.
- [5] Numai, Takahiro. Fundamentals of Semiconductor Lasers[M]. Springer, Tokyo, 2015.
- [6] Tai S, Kojima K, Noda S, et al. All-fibre gyroscope using depolarised superluminescent diode[J]. *Electronics Letters*, 1986, 22(10):546-547.
- [7] Wolfgang Drexler, James G. Fujimoto, eds. Optical coherence tomography: technology and applications (Second Edition). Springer, 2015.
- [8] Ko T, Adler D, Fujimoto J, et al. Ultrahigh resolution optical coherence tomography imaging with a broadband superluminescent diode light source[J]. *Optics Express*, 2004, 12(10):2112-9.
- [9] Vasa N J, Singaperumal M. Gas sensors based on superluminescent diodes for combustion monitoring[J]. *Applied Optics*, 2009, 48(31):1-5.
- [10] Divya K, Sulochana K, Vasa N J. Superluminescent Diode-Based Multiple-Gas Sensor for NH and H O Vapor Monitoring[J]. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2012, 18(5):1540-1546.
- [11] Kwong N S K, Lau K Y, Bar-Chaim N. High-power high-efficiency GaAlAs superluminescent diodes with an internal absorber for lasing suppression[J]. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1989, 25(4): 696-704.
- [12] Lin C F, Lee B L. Extremely broadband AlGaAs/GaAs superluminescent diodes[J]. *Applied physics letters*, 1997, 71(12): 1598-1600.
- [13] Lin C F, Juang C S. Superluminescent diodes with bent waveguide[J]. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1996, 8(2): 206-208.
- [14] 马春生, 刘式墉. 光波导模式理论[M]. 吉林大学出版社, 2006.
- [15] An Q, Jin P, Wu J, et al. Optical loss in bent-waveguide superluminescent

- diodes[J]. *Semiconductor Science and Technology*, 2012, 27(5): 055003.
- [16] *Handbook of Optoelectronic Device Modeling and Simulation: Fundamentals, Materials, Nanostructures, LEDs, and Amplifiers*, Vol. 1.
- [17] 陆大成, 段树坤. 金属有机化合物气相外延基础及应用[M]. 科学出版社, 2009.
- [18] Stringfellow G B. *Organometallic vapor-phase epitaxy: theory and practice*[M]. Elsevier, 1999.
- [19] Orton J W, Foxon T. *Molecular beam epitaxy: a short history*[M]. Oxford University Press, USA, 2015.
- [20] 罗先刚. 亚波长电磁学: 上册[M]. 科学出版社, 2017.
- [21] 刘粤惠, 刘平安. *X 射线衍射分析原理与应用*[M]. 化学工业出版社, 2003.
- [22] Eaton, Peter, and Paul West. *Atomic force microscopy*. Oxford university press, 2010.
- [23] 顾长志等. 微纳加工及在纳米材料与器件研究中的应用[M]. 科学出版社, 2013.
- [24] 李新坤, 量子点超辐射发光管器件及工艺研究[D], 中国科学院半导体研究所, 2012.

第三章 能级弥散理论中弥散线型的分析研究

3.1 能级弥散理论介绍

由第二章中我们知道，三维结构（体材料）导带的电子态密度表达式为

$$\rho_c^{3D}(E) = 8 \times \frac{(m_n^*)^3 \sqrt{2(E - E_0)}}{\pi^2 \hbar^3} \quad (3.1)$$

上式中， m_n^* 是电子的有效质量， E_0 是能带边界处的能量，例如对于导带而言为 E_c 。那么导带中，二维结构（量子阱）的电子态密度表达式为

$$\rho_c^{2D}(E, L_z) = 4 \times \sum_n \frac{m_n^*}{\pi \hbar^2 L_z} \Theta(E - E_{cn}) \quad (3.2)$$

上式中， $\Theta(E - E_{cn})$ 为阶跃函数，表示能量高于 E_{cn} 时值为 1，小于 E_{cn} 时值为 0， E_{cn} 表达式为

$$E_{cn} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m_n^* L_z^2}, \quad n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (3.3)$$

按照上述理论，由较低维度异质结构向较高维度异质结构转变的特征尺度临界值均在无穷大处，而实验上（以 GaAs 材料系为例）给出的由二维的量子阱异质结构向三维的体材料异质结构转变的层厚度的临界值则在几十纳米左右。基于这一问题，任晓敏教授提出了能级弥散的概念并进行了详细分析^{[1][2][3]}，其核心主旨在于电子能级具有一程度的弥散性，即能级不再是分立的，而是具有能量分布，这样，以往所说的“能带是由许多分立的能级组成，可以看做是连续的”便不再成立，能带成为了实际上的连续。从数学形式上来讲，即定义能级弥散函数（或称能级弥散因子），此函数的平方为弥态允率密度函数（在能量范围内的积分值为 1），那么，引入能级弥散后的电子态密度的分布即为弥态允率密度函数与原分布函数的卷积，这里我们以二维结构即量子阱的电子态密度为例，在无能级弥散的情况下，量子阱中电子态密度如式（3.2）所述，在后续的内容中为方便起见，我们以 $\rho_c(E, L_z)$ 来表示二维材料的电子态密度。在接下来的两节中，我们将描述弥态允率密度函数的线型不同时所带来的二维的电子态密度的变化，并将比较弥散宽度值不同时电子态密度曲线的变化。对于不同的线型，能级弥散概念的提出者任晓敏教授也有过详尽的考虑：能级弥散分为本征弥散与非本征弥散（由晶格热振动、多电子效应等引起），而本征弥散的线型为指数线型，非本征弥散则更有可能为洛伦兹线型或者高斯线型等。因此接下来我们分析弥态允率密度函数的线型时，首要考虑指数线型及洛伦兹线型，在接下来的小节中，我们计

算电子态密度曲线时，先以指数线型进行计算，接着以洛伦兹线型进行计算，最后再考虑可能的复合弥散线型。

3.2 能级弥散理论中不同弥散线型的计算

前述无能级弥散情况下，电子态密度曲线为台阶状，下面以 GaAs 为例，我们对有无能级弥散以及弥散线型不同时导带中的电子态密度进行计算分析。计算中所用的物理参数请见附录，在计算过程中，由于 E_c 的值对于电子态密度的曲线形状没有影响，为方便起见，我们将其设为 0eV 。

3.2.1 指数线型时的电子态密度

图 3-1 是未引入能级弥散时，量子阱的电子态密度曲线，阱的厚度在图中标出，为便于观察，我们将体材料的电子态密度曲线也一起在图中展示，可以看出，量子阱的电子态密度曲线为台阶形状，随着阱厚度的增加，台阶的宽度变小。

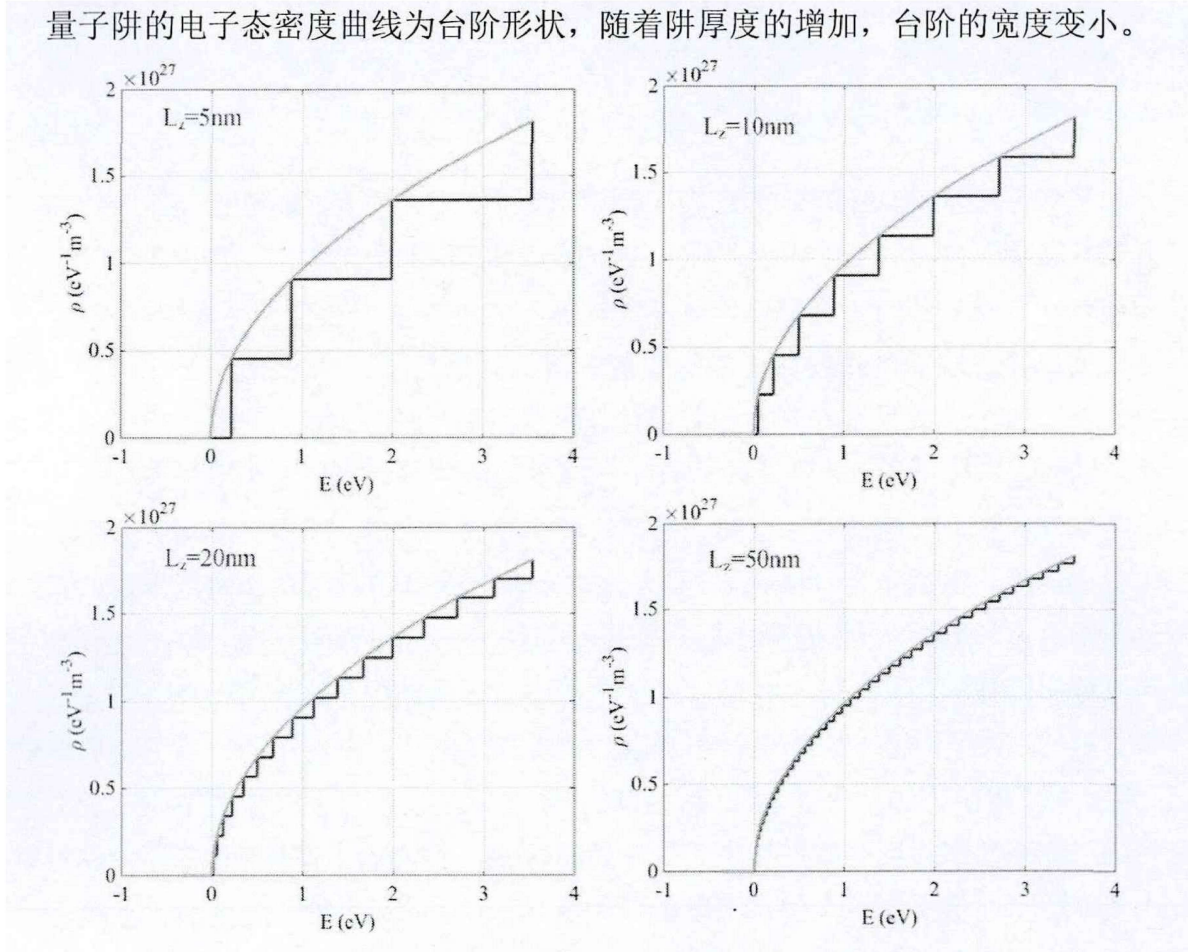


图 3-1 不同 L_z 的情况下电子的态密度曲线

接下来我们引入能级弥散函数 F_D ，那么将原来的能量以 E^* 来表示，引入能级弥散后的能量值以 E 来表示， $|F_D(E, E^*)|^2$ 为弥态允率密度函数，其积分为 1，代表着能量值在整个能量的范围内分布的总的允率或几率为 1。那么我们先以指数线型来表示能级弥散函数以及弥态允率密度函数，将能级弥散函数定义为

$$F_D(E, E^*) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{D}} e^{-\left(\frac{E-E^*}{D}\right)} & E \geq E^* \\ \frac{1}{\sqrt{D}} e^{\left(\frac{E-E^*}{D}\right)} & E \leq E^* \end{cases} \quad (3.4)$$

那么, 弥态允率密度函数为 $|F_D(E, E^*)|^2$,

$$|F_D(E, E^*)|^2 = \begin{cases} \frac{1}{D} e^{-2\left(\frac{E-E^*}{D}\right)} & E \geq E^* \\ \frac{1}{D} e^{2\left(\frac{E-E^*}{D}\right)} & E \leq E^* \end{cases} \quad (3.5)$$

所以, 对弥态允率密度函数的积分为

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |F_D(E, E^*)|^2 dE &= \int_{-\infty}^{E^*} \frac{1}{D} e^{2\left(\frac{E-E^*}{D}\right)} dE + \int_{E^*}^{\infty} \frac{1}{D} e^{-2\left(\frac{E-E^*}{D}\right)} dE \\ &= \frac{1}{D} \frac{D}{2} e^{2\left(\frac{E-E^*}{D}\right)} \Big|_{-\infty}^{E^*} + \frac{1}{D} \left(-\frac{D}{2}\right) e^{-2\left(\frac{E-E^*}{D}\right)} \Big|_{E^*}^{\infty} \\ &= \frac{1}{2} (1 - 0) - \frac{1}{2} (0 - 1) = 1 \end{aligned} \quad (3.6)$$

符合归一化的条件, 这样, 引入能级弥散后, 前述量子阱的电子态密度函数变为,

$$\begin{aligned} \rho_{c,D}(E, L_z) &= \int_{E_c^*}^{\infty} F_D^2(E, E^*) \rho_c(E^*, L_z) dE^* \\ &= \int_{E_c^*}^{\infty} F_D^2(E, E^*) 4 \times \sum_n \frac{m_n^*}{\pi \hbar^2 L_z} \Theta(E^* - E_{cn}^*) dE^* \\ &= \frac{1}{D} \frac{4m_n^*}{\pi \hbar^2 L_z} \sum_n \left\{ \int_{E_{cn}^*}^E e^{-2\left(\frac{E-E^*}{D}\right)} \Theta(E - E_{cn}^*) dE^* + \int_E^{\infty} e^{2\left(\frac{E-E^*}{D}\right)} \Theta(E - E_{cn}^*) dE^* \right. \\ &\quad \left. + \int_{E_{cn}^*}^{\infty} e^{2\left(\frac{E-E^*}{D}\right)} \Theta(E_{cn}^* - E) dE^* \right\} \\ &= \frac{1}{D} \frac{4m_n^*}{\pi \hbar^2 L_z} \sum_n \left\{ \frac{D}{2} e^{-2\left(\frac{E-E^*}{D}\right)} \Big|_{E_{cn}^*}^E \Theta(E - E_{cn}^*) + \left(-\frac{D}{2}\right) e^{2\left(\frac{E-E^*}{D}\right)} \Big|_E^{\infty} \Theta(E - E_{cn}^*) \right. \\ &\quad \left. + \left(-\frac{D}{2}\right) e^{2\left(\frac{E-E^*}{D}\right)} \Big|_{E_{cn}^*}^{\infty} \Theta(E_{cn}^* - E) \right\} \\ &= \frac{1}{D} \frac{4m_n^*}{\pi \hbar^2 L_z} \sum_n \left\{ \frac{D}{2} \left[1 - e^{-2\left(\frac{E-E_{cn}^*}{D}\right)} \right] \Theta(E - E_{cn}^*) + \left(-\frac{D}{2}\right) (-1) \Theta(E - E_{cn}^*) \right. \\ &\quad \left. + \left(-\frac{D}{2}\right) \left[0 - e^{2\left(\frac{E-E_{cn}^*}{D}\right)} \right] \Theta(E_{cn}^* - E) \right\} \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$= \frac{4m_n^*}{\pi\hbar^2 L_z} \sum_n \left\{ \left[1 - \frac{e^{-2\left(\frac{E-E_{cn}^*}{D}\right)}}{2} \right] \Theta(E - E_{cn}^*) + \frac{1}{2} e^{2\left(\frac{E-E_{cn}^*}{D}\right)} \Theta(E_{cn}^* - E) \right\} \quad (3.8)$$

式 (3.8) 是最后得出的包含指数线型弥态允率密度函数的电子态密度表达式, 接下来, 我们利用该式进行态密度的计算进而绘制出曲线图, 如图 3-2 所示, 是引入指数线型的能级弥散函数后, 阱的厚度设定在 5nm 时, 前述量子阱的态密度曲线的变化, 从图中可以看出, 当引入指数型能级弥散后, 台阶状电子态密度曲线中的台阶不再是直角, 而是变成了曲线, 台阶的棱角被钝化, 即在能量值增加的过程中, 态密度不再突变, 而是缓变, 随着弥散宽度值 D 的增大, 态密度曲线偏离台阶的趋势也在增大, 这在 $D=0.2\text{eV}$ 的时候最为明显, 我们可以明显地看出, 态密度随着能量的增加“蜿蜒”上升。

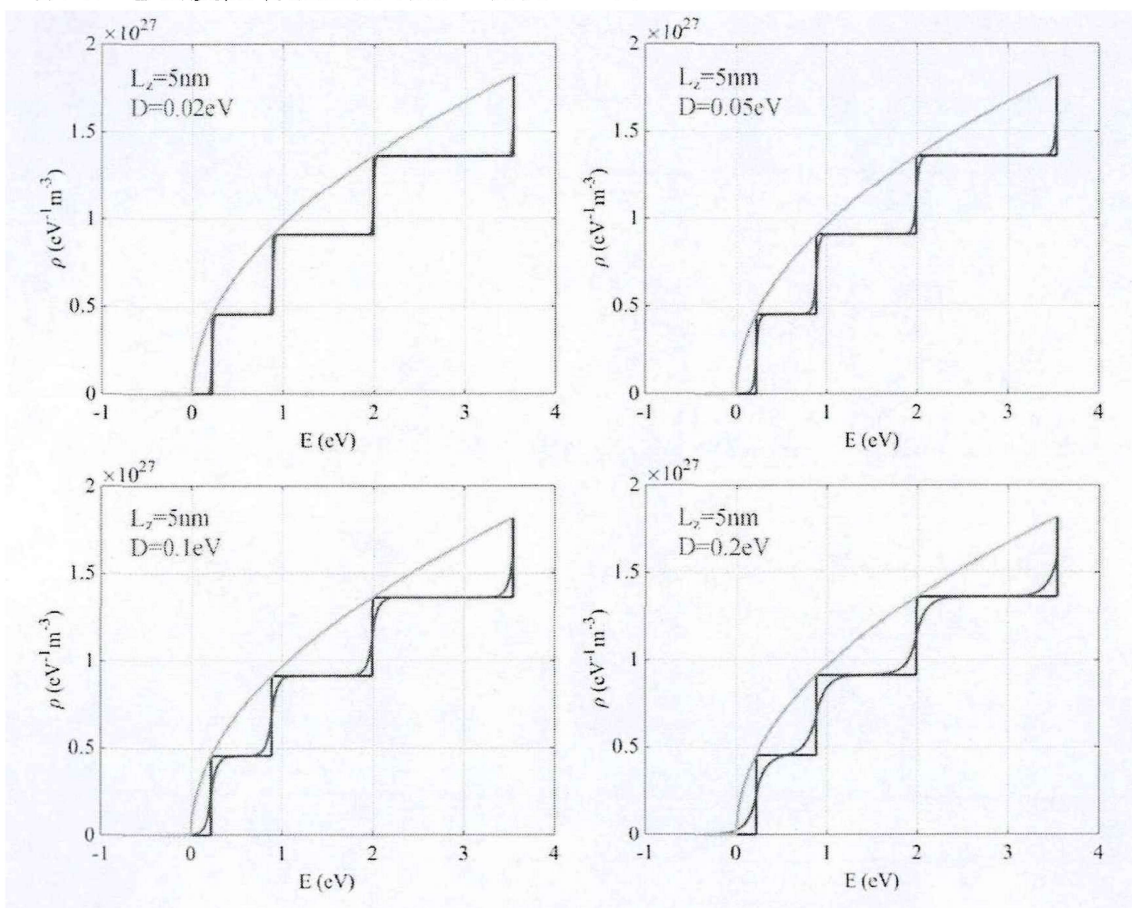


图 3-2 $L_z=5\text{nm}$, 指数线型下不同 D 时的电子态密度曲线

3.2.2 洛伦兹线型时的电子态密度

在上一小节中, 我们对弥态允率密度函数为指数线型时的电子态密度曲线进行了分析计算, 那么实际上, 由于此能级弥散的线型还未得到验证, 其真实的线型还没有被完全确定, 除指数线型外, 其真实的线型也有可能是其他类型, 前面我们提到, 非本征弥散由于是由晶格热振动、多电子效应等引起, 非本征弥散的

弥态允率密度函数可能为洛伦兹线型, 因此这里我们将弥态允率密度为洛伦兹线型的情况做一介绍。此时, 能级弥散函数被定义为

$$F_D(E, E^*) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sqrt{D}} \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{E - E^*}{D}\right)^2}} \quad (3.9)$$

那么对应的弥态允率密度函数为

$$|F_D(E, E^*)|^2 = \frac{1}{\pi D \left[1 + \left(\frac{E - E^*}{D}\right)^2\right]} \quad (3.10)$$

这样, 弥态允率密度函数的积分为

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |F_D(E, E^*)|^2 dE &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\pi D \left[1 + \left(\frac{E - E^*}{D}\right)^2\right]} dE \\ &= \frac{1}{\pi} \arctan\left(\frac{E - E^*}{D}\right) \Big|_{-\infty}^{\infty} \\ &= \frac{1}{\pi} \left(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2}\right) = 1 \end{aligned} \quad (3.11)$$

符合积分值为 1 的归一化条件, 这样, 引入洛伦兹线型的弥态允率密度函数后, 前述量子阱导带的电子态密度函数变为

$$\begin{aligned} \rho_{c,D}(E, L_z) &= \int_{E_c^*}^{\infty} F_D^2(E, E^*) \rho_c(E^*, L_z) dE^* \\ &= \int_{E_c^*}^{\infty} F_D^2(E, E^*) 4 \times \sum_n \frac{m_n^*}{\pi \hbar^2 L_z} \Theta(E^* - E_{cn}^*) dE^* \\ &= \frac{1}{\pi D} \frac{4m_n^*}{\pi \hbar^2 L_z} \sum_n \left[\int_{E_{cn}^*}^{\infty} \frac{1}{1 + \left(\frac{E - E^*}{D}\right)^2} \Theta(E - E_{cn}^*) dE^* \right. \\ &\quad \left. + \int_{E_{cn}^*}^{\infty} \frac{1}{1 + \left(\frac{E - E^*}{D}\right)^2} \Theta(E_{cn}^* - E) dE^* \right] \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{4m_n^*}{\pi \hbar^2 L_z} \sum_n \left[\arctan\left(\frac{E^* - E}{D}\right) \Big|_{E_{cn}^*}^{\infty} \Theta(E - E_{cn}^*) \right. \\ &\quad \left. + \arctan\left(\frac{E^* - E}{D}\right) \Big|_{E_{cn}^*}^{\infty} \Theta(E_{cn}^* - E) \right] \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{4m_n^*}{\pi \hbar^2 L_z} \sum_n \left[\arctan\left(\frac{E^* - E}{D}\right) \Big|_{E_{cn}^*}^{\infty} \right] \end{aligned} \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\pi} \frac{4m_n^*}{\pi \hbar^2 L_z} \sum_n \left[\frac{\pi}{2} - \arctan \left(\frac{E_{cn}^* - E}{D} \right) \right] \\
&= \frac{1}{\pi} \frac{4m_n^*}{\pi \hbar^2 L_z} \sum_n \left[\frac{\pi}{2} + \arctan \left(\frac{E - E_{cn}^*}{D} \right) \right]
\end{aligned} \tag{3.13}$$

从上面推导后的表达式(3.13)可以看出，引入洛伦兹线型的弥态允率密度函数后，最终的电子态密度函数中不再含有阶跃函数，这更为明显地说明该函数中不再具有台阶，当然我们知道前面引入指数线型的电子态密度曲线中实际上也不再含有台阶，只是在表达式中最终没有将阶跃函数省去，从函数的表达式中观察得不太明显。

图 3-3 是引入洛伦兹线型的弥态允率密度函数后，阱的厚度设定在 5nm 时，前述量子阱的态密度曲线的变化，同样地，当引入洛伦兹线型的弥散后，台阶状电子态密度曲线中的台阶不再是直角，而是被钝化了。并且与前一小节中的指数线型比较我们看出，在同样的 $D=0.05\text{eV}$ 下，采用洛伦兹线型弥态允率密度函数的态密度曲线的“蜿蜒”程度与上面采用指数线型时 $D=0.2\text{eV}$ 的“蜿蜒”程度相当，当然这也比较容易理解，因为 D 表示能量的弥散宽度，在同样的 D 的情况下，指数线型能量较洛伦兹线型更为集中，即弥散的程度更小。

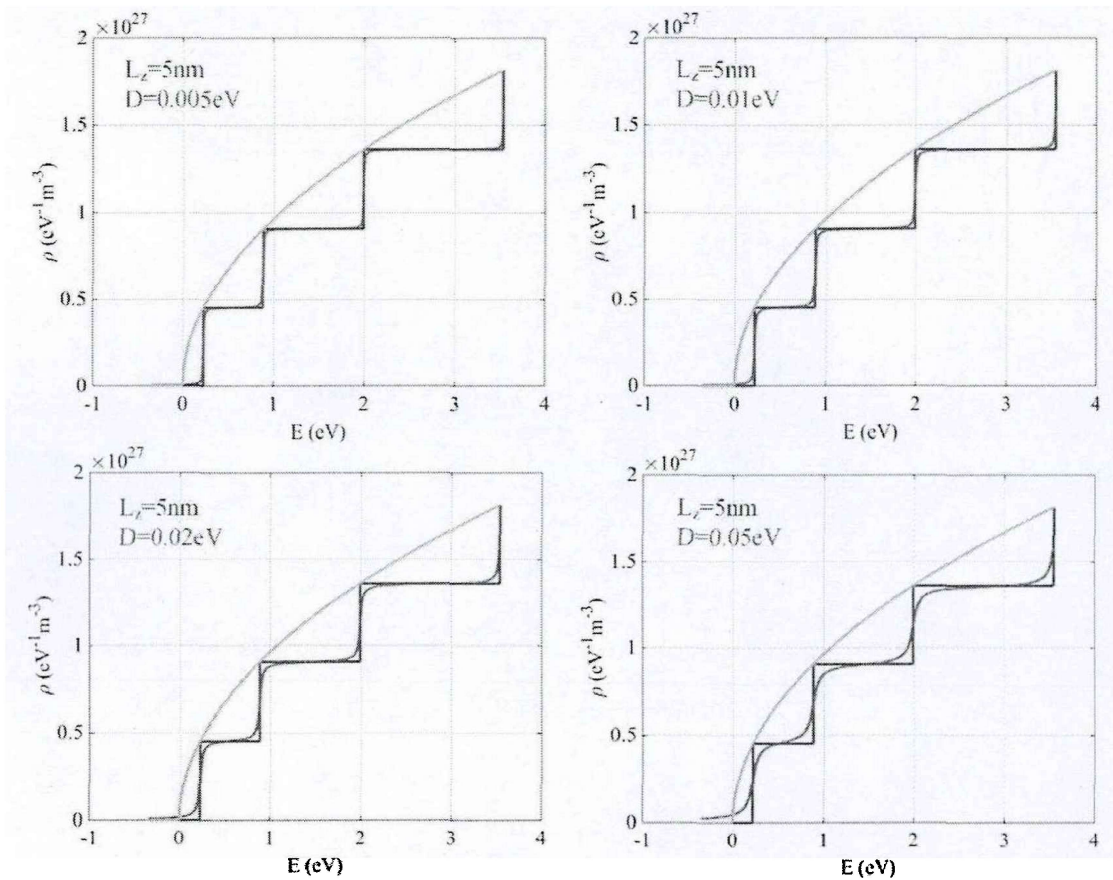


图 3-3 $L_z=5\text{nm}$ ，洛伦兹线型下不同 D 时的电子态密度曲线