

Y1435042



南京大學

研究生畢業論文

(申請博士學位)

論文題目 硅基三维微腔的光发射与
光调制

作者姓名 陈 三

学科专业名称 凝聚态物理

研究方向 光电子材料与器件

指导教师 陈坤基 教授

2007年01月17日

南京大学研究生毕业论文中文摘要首页用纸

毕业论文题目: 硅基三维微腔的光发射与光调制

凝聚态物理 专业 2003 级博士生姓名: 陈 三

指导教师(姓名、职称): 陈 坤 基 教授

摘要

随着社会的发展,以电子作为信息载体,硅微电子器件为支撑的通讯方案越来越不能满足人们对信息存储,处理,传输,获取的超高速、超大容量、超低功耗、超高稳定性及高保密的需求。用光子作为信息的载体,采用光通讯将是下一代通讯的解决方案。当前的光通讯光子器件主要是基于 III-V 族材料,制备方法与硅微电子工艺不相兼容,很难实现与硅微电子器件的单片集成。因此研究和制备光子器件,尤其是硅基光子器件具有非常重要的意义。但是硅的间接带隙的能带特性和弱的光电效应,被认为不适合光电子方面的应用。最近 Nature 上连续报道了硅拉曼脉冲、连续激光器,及 1.5GHz 硅的光调制器,激起了硅基光电子器件研究的热潮,推动了硅基光电子学的发展。硅基光电子器件的最终成功将会导致光通讯领域的一场革命。

微腔是光子器件中的关键部件,微腔发光二极管,微腔激光器和微腔增强光探测器等都采用了微腔结构,因此研究微腔的特性是光电子学的重要课题。本文我们分别制备和研究了一维、二维和三维硅基微腔的特性,获得了一维微腔对发光媒质发光特性的显著改善。为了克服自上而下方法制备微腔的缺点,我们提出共形生长的方法制备了二维和三维限制光学微腔,微腔光谱上观测到一系列分立的发光峰,这些腔模式具有明显的腔横向尺寸依赖性。采用了变收集半角的方法,给出了这些分立的发光峰来自于横向限制的直接证据。我们计算了这些横向限制模式位置,计算值与测量值一致。

我们下一步的目标将是缩小微腔的横向尺寸，提高横向限制，获得高的品质因子，制备真正的单模微腔，并最终实现硅基单光子源。

(一) 采用 PECVD 的方法制备了不同组分的非晶氮化硅薄膜，控制氨气和硅烷的流量比为 0.5, 1, 2, 4, 6, 8, 获得折射率从 1.9 到 2.8, 光学带隙从 2.0 到 3.7eV 的不同化学配比的非晶氮化硅薄膜。发光特性表明薄膜的组分不同，他们的光致发光光谱明显不同，即发光谱形，峰位，强度不同，硅的含量较高时，强度较弱，在 750nm 附近有一较宽的发光带，具有明显的双峰结构。当硅的含量降低时，发光峰发生蓝移，发光带蓝移到 550nm 左右，强度也由弱变强，然后再变弱，双峰高斯拟合表明，短波长峰相对强度的增加导致整个发光带的蓝移。PECVD 淀积 a-Si/a-SiN 超晶格，经激光限制晶化制备 nc-Si/a-SiN 超晶格，拉曼谱和剖面 TEM 证实了纳米晶硅的存在，其尺寸与设计尺寸一致。

(二) 利用传输矩阵方法设计、在 PECVD 系统中制备了一维光子晶体微腔，我们的有源发光媒质发光带在 700nm 附近，因此我们把微腔的共振波长设计在 710nm。剖面 TEM 照片表明样品具有平直，清晰，陡峭的界面，各子层的厚度与设计厚度相同。透射光谱中观测到 710nm 处微腔的共振模式。分别把 a-SiN 发光层和 nc-Si/a-SiN_z 超晶格材料嵌入光子晶体微腔中，我们的光致发光强度增加近 100 倍，发光谱线宽由 200nm 左右减小到 10nm，极大地改善了它们的发光特性。

(三) 采用共形生长的方法，在图形衬底上共形淀积了二维光学微腔。用光学显微镜，原子力显微镜，扫描电子显微镜，及剖面透射电子显微镜证明了共形生长的发生。横向限制导致光致发光谱共振峰分裂成三个共振峰：二维微腔共振峰分别为 1.592 eV, 1.613 eV 和 1.651 eV 对应 M_{000} , M_{010} 和 M_{020} 模式；准三维微共振峰分别为 1.618 eV, 1.628 eV 和 1.650, 分别为 M_{000} , M_{010} (M_{001}) 和 M_{011} ，利用改变收集半角的 PL 谱测量方法给出了直接证据，并根据限制模式能量公式计算了他们的能量，与光致发光谱上的峰位符合的相当的好。

(四) 分别采用传统的自上而下的方法制备的微柱微腔和共形生长的方法制备真正意义上的三维限制光学微腔。研究了我们的微腔样品光发射特性，获得了对有源层的调制效应明显不同于二维微腔的调制，在不同横向尺寸的三维微腔光发射谱中观测到一系列分立的共振模式，这些模式具有明显的尺寸依赖性。该方法制备的

三维腔可实现更高的横向限制，获得高的自发辐射耦合因子，在研究物质与光的强耦合相互作用，高效发光二极管及低阈值激光器有很大的应用前景。

南京大学研究生毕业论文英文摘要首页用纸

THESIS: Light-Emission and Optical Modulation of Si Based Three
Dimensional Microcavity

SPECIALIZATION: Condensed Matter Physics

POSTGRADUATE: Chen San

MENTOR: Prof. Chen Kunji

Abstract

The current widely adopted communication project in which electrons serve as the carriers of information and Si microelectronic devices as hardware support has not met the present needs for information storage, process, transmission and acquirement with super-high speed, super-large capacity, super-low power consumption, super-high stability and super-high secrecy, and optical communication will be the next generation scheme in which photons serve as the carriers of information to replace the communication project based on electrons. The current photonic devices used in optical communication system are mainly based on III-V group materials. The fabricating method is not compatible with Si microelectronic technology and it is very difficult to realize monolithic integration. So it is very important to study and fabricate photonic devices, especially Si based photonic devices. Because of indirect bandgap characteristics and weak electro-optic effects, Si is thought to be not suitable for optoelectronic application. Recently, Si Raman pulsed and continuous-wave laser reported in succession by Nature and Si 1.5GHz optical modulation was realized. These achievements again prove the huge potential of Si in electro-optic application.

Microcavity is the key element of photonic devices. Microcavity light-emitting

diodes, laser and microcavity enhanced optical detectors are all adopted microcavity structures. It is an important subject of optoelectronics to study characteristics of microcavities. In this thesis, we fabricate and study light-emitting properties of one-dimensional, two-dimensional and three-dimensional microcavities. One-dimensional microcavity remarkably improved photoluminescence characteristics of luminescent media. In order to overcome shortcomings of up-bottom method for fabricating micro-pillar, we proposed the conformal deposition method for fabricating multidimensional confinement optical microcavity, and observed a series of discretized resonant peaks from the photoluminescence spectra and the splitting of resonant peaks showed distinct dependence of lateral size. Variable collecting half-angle photoluminescence spectra gave the direct evidence for these peaks that are attributed to the lateral optical confinement. We calculated these confined mode and calculated values had a well agreement with the ones measured.

1. We fabricated a series of amorphous silicon nitride films with different nitrogen contents by controlling the flux ratio of ammonia versus silane in the PECVD system. The optical bandgap, refractive indices, absorptive coefficient and thickness of these films were obtained from transmission spectra. Photoluminescence measurements showed that they had different light-emission characteristics, namely, spectral shape, peak position and intensity were different. With the increase in nitrogen contents, luminescence peaks shifted to short wavelength, while intensity increased first, then decreased. We also deposited a-Si/a-SiN superlattices and n-Si/a-SiN superlattices fabricated by radiating a-Si/a-SiN with 248nm KrF excimer laser. Raman spectra and cross-section TEM confirmed existence of n-Si in the a-Si layers and its size was same as the thickness of a-Si layer.

2. One-dimensional photonic crystal microcavity was fabricated in the PECVD system. The cross-section TEM photographs showed that the samples had flat, clear, and abrupt interfaces, and the thickness of each sublayer was consistent with one designed. From the transmission spectra, we can observe the cavity resonant mode. Due to enhancement of radiative transition with frequency at cavity resonant frequency and

prohibition of radiative transition off cavity resonant frequency, intensity of light-emission from a-Si and nc-Si/a-SiN superlattices were enhanced up to two orders of magnitude and linewidth was narrowed to several nm, and spectral purity was significantly improved.

3. We adopted the conformal deposition method for fabricated two-dimensional and three-dimensional confinement optical microcavity directly on the patterned substrates with one-dimensional periodic stripes and slots and two-dimensional hole arrays. Micrographs proved that conformal deposition on these patterned substrates occurred. From the photoluminescence spectra, we observed a series of resonant peaks caused by lateral confinement. These discretized peaks were denoted as M_{000} , M_{010} and M_{020} for two-dimensional microcavity and M_{000} , M_{010} (M_{001}) and M_{011} for quasi-three dimensional microcavity. Variable collecting half-angle photoluminescence spectra gave direct evidences of lateral confinement modes. Also calculated modes showed a well agreement with ones on spectra.

4. Two methods were adopted to fabricate micro-pillar microcavity: conventional one in which planar microcavity was first deposited and then lithography and RIE were used to fabricate micro-pillar microcavity, conformal deposition method proposed by us. We fabricated the true three-dimensional confinement microcavity in which three-dimensional confinement were provided by longitudinal DBRs and lateral DBRs. This kind of lateral optical confinement was different from optical confinement provided by total internal reflection of interface between pillar and air. A series of discretized photoluminescence peaks were found in PL spectra, and they showed distinct dependence of lateral size of microcavity. This kind of microcavity fabricated by conformal deposition method can provide higher lateral confinement, has higher coupling factor of spontaneous emission and shows a huge prospect in studying the strong coupling between light and matter, in high efficiency light-emission diodes and in low-threshold lasers.

第一章 绪 论

1.1 固态光学微腔

1.1.1 光学谐振腔

激光器是上个世纪 60 年代人类科学技术史上一项重大的发明。它使人们操纵和控制分子和原子的发光过程成为可能，从而获得高方向性，高单色性，高亮度，高功率和能量的可压缩性的相干光源。激射波长从红外、可见光和紫外以至 X 射线和 γ 射线。激光科学技术的兴起和发展极大地推动了现代科学技术和产业的发展。使人类对光的本质，光与物质的相互作用的认识和对光的利用达到了一个崭新的水平。

激光器的诞生可追溯到 1917 年爱因斯坦提出的受激辐射概念，它是现代激光技术最重要的理论基础。爱因斯坦从量子论的观点出发提出，辐射场与原子的相互作用包含：原子的自发辐射跃迁，受激辐射跃迁和受激吸收跃迁三种最基本的过程。

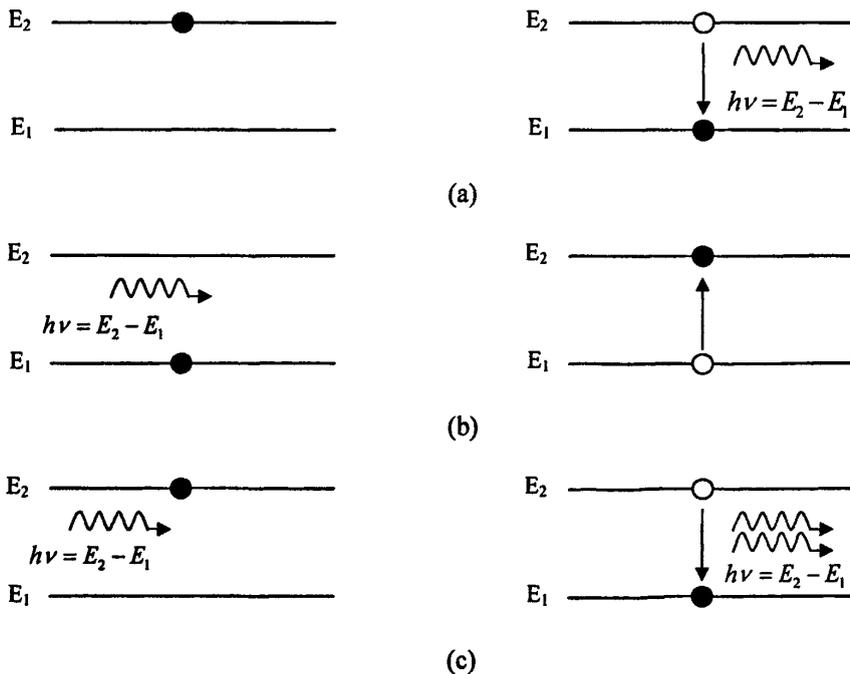


图 1.1 原子的自发辐射，受激吸收，受激辐射示意图

(a) 自发辐射 (b) 受激吸收 (c) 受激辐射

此后，量子力学的建立和发展进一步完善了爱因斯坦的受激辐射理论，使人们对微观粒子的能级结构、跃迁和光子辐射等问题有了更深入的认识，为激光器的产生进一步奠定了理论基础。20世纪50年代以后，量子电子学对电磁辐射与各种微观粒子系统的相互作用研究，并研制出许多微波器件。这些科学理论和技术都为激光器的发明创造了条件。

1951年，美国物理学家珀塞尔和庞德在实验中成功地实现了粒子数反转，并获得了每秒50千赫的受激辐射。稍后，美国物理学家查尔斯·汤斯以及苏联物理学家马索夫和普罗霍洛夫先后提出了利用原子和分子的受激辐射原理来产生和放大微波的设计。1954年，前面提到的美国物理学家汤斯终于制成了第一台氨分子束微波激光器，开创了利用分子和原子体系作为微波辐射相干放大器或振荡器的先例。1958年，汤斯与阿瑟·肖洛将微波激光器与光学、光谱学的理论知识结合起来，提出了采用开放式谐振腔的关键性建议，同时期，巴索夫和普罗霍洛夫等人也提出了实现受激辐射光放大的原理性方案。1960年，美国休斯公司实验室的年轻物理学家西奥多·梅曼用一个高强度闪光灯管来激励红宝石水晶里的铬原子实现了受激光放大，向世人演示了世界上第一台红宝石固体激光器。同年12月，出生于伊朗的美国科学家贾万等人成功地制造并运转了全世界第一台气体激光器——氦氖激光器。1962年，三个不同小组的科学家几乎同时发明了半导体激光器。1966年，科学家们又研制成了波长可在一段范围内连续调节的有机染料激光器。此外，还有输出能量大、功率高，而且不依赖电网的化学激光器等相继问世。因为激光器的种种突出特点，被广泛应用于科研、工业、农业、军事、医学、精密测量和探测、通讯与信息处理、乃至日常生活等各个领域之中，并在许多领域引起了革命性的突破。

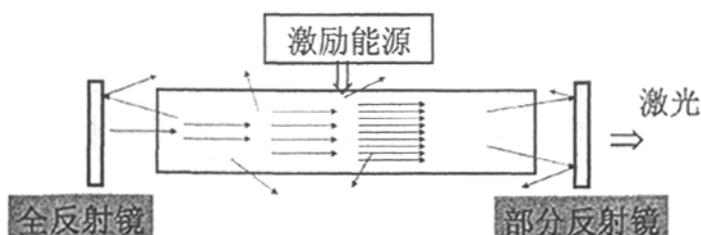


图 1.2 激光原理图

如图 1.2 为激光的原理图，要实现光的受激放大，激光器必须具备三个主要的组成部分：

1. 激活物质 即被激励后能发生粒子数反转的工作物质，具备有亚稳态能级，也称作激光工作物质。如氖、氩、CO₂、红宝石及钕玻璃，半导体材料等。

2. 激励装置 能使激光工作物质发生粒子数反转分布的装置，称为激励装置。如各种激光器的电泵浦，光泵浦装置等。

3. 光学谐振腔能提供光学正反馈作用的光学装置。通常由两个反射镜及其所包围的空间构成，反射镜可以是平面镜或球面镜，分别放置在激光工作物质两端。两块反射镜之间的距离为腔长。其中一个镜面反射率接近 100%，称为全反镜；另一个镜面是半反射镜。反射率为 40%~60%，激光由此镜输出，故称输出镜。两者有时也分别称为高反射镜和低反射镜。

谐振功能 谐振腔中包含了能实现粒子数反转的激光工作物质。它们受到激励后，许多原子将跃迁到激发态。但经过激发态寿命时间后又自发跃迁到低能态，放出光子。其中，偏离轴向的光子会很快逸出腔外。只有沿着轴向运动的光子会在谐振腔的两端反射镜之间来回运动而不逸出腔外。这些光子成为引起受激发射的外界光场。促使已实现粒子数反转的工作物质产生同样频率、同样方向、同样偏振状态和同样相位的受激辐射。这种过程在谐振腔轴线方向重复出现，从而使轴向行进的光子数不断增加，最后从部分反射镜中输出。所以，谐振腔是一种正反馈系统或谐振系统。

谐振腔的另一功能是对激光波形加以选择，使输出激光具有一定的纵模和横模。在谐振腔的反馈过程中，光只能沿谐振腔的轴向传播，因此激光具有很高的方向性。又由于谐振腔中两个反射镜之间距离不同，光在腔内不断地反射，得到加强。而其它波长的光在腔内很快被衰减掉，谐振腔就可以选择一固定波长，说明激光具有单色性。而激光的亮度高是由光放大产生的。

1.1.2 固态光学微腔的出现

在1946年，Purcell 就从理论上提出了限制在微腔中光场的光子态密度改变的效应，并预言了腔对自发辐射速率有增强和抑制的作用。在原子物理中，把受激原子放在腔长只有mm量级的金属平板谐振腔中，研究原子与腔内真空电磁场间的强耦合台相互作用，由此开辟了一门新学科—腔量子电动力学。但有关微腔方面的实验研究，

是在80年代初D. Kleppner提出利用微谐振腔可控制自发辐射,极大地降低激射阈值,可望实现无阈值激光器的观点。一般情况,微腔要求至少有一维的尺寸在光波长的量级。微腔的引入,可以使凝聚态物质中腔量子电动力学效应得以实现,如Yokoyama等分析了无阈值激光器的动力学特性并展示了弛豫振荡的消失; Yamamoto 等人通过把微腔的谐振波长调至发光峰值波长实现了自发辐射的显著增强; Yokoyama和DeMartini 等观察到了微腔中自发辐射寿命改变效应。对微腔物理的研究,使人们对物质与光场的相互作用有了更深的认识。不仅如此,利用微腔效应人们已经研制出各种新型光电子器件,如微腔激光器、微腔发光二极管等。微腔器件具有高效率、低功耗、超小型化、高度集成和响应速度快等特点,反映了信息时代光电子器件的发展趋势。微腔是尺寸在波长量级的谐振腔。微腔引起广泛的关注,是因为:

制备超小体积,低功耗的激光器,用于大规模光电集成。

因为自发辐射耦合到单激射模具有高的自发辐射因子,可实现零阈值激光器。

用于电子和光子态的强耦合现象等基础物理的研究。

垂直腔面发射激光器 (Vertical Cavity surface Emitting Laser, VCSEL) 是微腔应用的一个成功的范例。通常比较常见的半导体激光器是边缘发射激光器,如图 1.3 所示,因镜面垂直于 P-N 结,故称为边缘发射激光器,它采用晶体的自然解理面作为谐振腔的两个反射镜面,发射的激光束平行于 P-N 结,两个镜面的反射率由 P-N 结的折射率与空气的折射率差确定,即发射率比较低,要获得大的光增益,这就要求光增益介质的长度较大,从而导致阈值电流大。因为激光束边缘出射,激光器与光纤,波导,光调制器只能够侧向耦合。利用半导体 Si 工艺,只能实现激光器阵列的一维集成,限制了其集成度。垂直腔面发射激光器是指从垂直于衬底面出射激光的半导体激光器。谐振腔的上下反射镜是由折射率不同的半导体材料或介电材料交替生长所构成的布拉格反射器组成的。下反射镜反射率接近 100%,而上反射镜反射率大于 98%。由于腔长仅为微米量级,所以纵模间隔很大,在增益带宽范围内只能有一个振荡模式,是一种很好的动态单纵模激光器。激光束由垂直于衬底面发射出,具有对称性很好的高斯光束。

VCSEL 与传统边发射激光器不同的结构带来了许多优势:小的发散角和圆形对称的远、近场分布使其与光纤的耦合效率大大提高,现已证实与多模光纤的耦合效率竟能大于 90%; VCSEL 的光腔长度极短,导致其纵模间距拉大,可在较宽的

温度范围内实现单纵模工作，动态调制频率高；腔体积减小使得其自发辐射因子较普通端面发射激光器高几个数量级，这导致许多物理特性大为改善；可以在片测试，极大地降低了开发成本；出光方向垂直衬底，可实现高密度二维面阵的集成；最吸引人的是它的制造工艺与发光二极管（LED）兼容，大规模制造的成本很低。

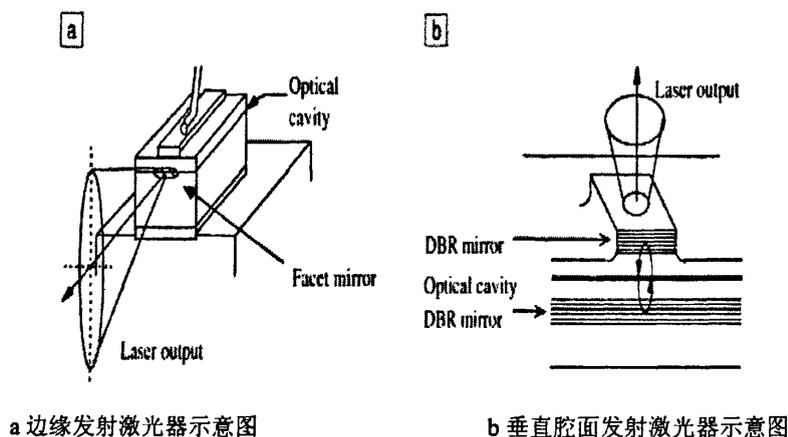


图 1.3 两种半导体激光器示意图

为了实现激光的单纵模工作，人们通过缩短谐振腔长度的方法来增大模式间隔，使得增益光谱范围内仅有一个腔共振模式，从而达到单模工作。因为谐振腔激光出射端面反射镜反射率较低，不能够无限制的缩短腔的长度，腔长度的缩短将导致工作物质增益的降低，进而引起激光阈值的升高。为了降低阈值，必须提高激光器出射端面反射镜的反射率。而且为了提高光子器件的集成度，我们必须减小激光器的体积。这就要求缩短谐振腔的长度。VCSELs 具有以下优点：

1. 多层高反射镜对垂直激光是必要的；
2. 超低阈值电流
3. 高的激光束质量，与光纤的单模耦合；
4. 受温度影响小，工作波长稳定；
5. 单片集成反射镜；
6. 平面工艺，高密度阵列，单片集成；
7. On-wafer 检测，尺寸小，成本低；
8. 波长可调谐。

1.2 固体光学微腔的研究现状及其应用

1.2.1 VCSEL 的研究水平及应用

塑料光纤在 650 nm 处吸收最小, 因此该波段的 VCSEL 可作为基于塑料光纤的数据通信的光源。目前该波段的 VCSEL 尚处于研究阶段。最近, M.Zorn 等人采用了氧化层限制电流注入结构, 使器件的输出功率和温度特性都有了很大改善, 激射波长在 650 nm 的器件最高输出功率超过 4 mW, 最高使用温度达到 65℃; 激射波长在 670 nm 的器件最高输出功率 10 mW, 最高使用温度 87℃[4]。

850 nm VCSELs 技术已经相当成熟。因其优异的性能, 850nm 的 VCSELs 已经垄断了单通道短距离光互连的市场, 如 IEEE 802.3 千兆以太网 1000 Base-Sx 系列标准中就采用低成本 850nm VCSELs 光源。

850 nm VCSEL 的成功, 使人们极力去开发适合长距离、低损耗光纤通信的 1.3 和 1.55 微米波长的 VCSELs。其中 1.3 微米是硅基光纤的最小色散窗口, 而 1.55 微米波段则是硅基光纤的最小损耗窗口。

近年来通过引入各种新技术、新工艺和开发新材料, 在长波长的 VCSELs 取得了很大进展。Gerhard Boehm 等人通过掩埋隧道结(BTJ, Buried Tunnel Junction)技术, 制备了波长范围 1.3~2 μm 的 InP 基的器件, 激射波长 1.3 μm 时最大功率为 0.43 mW; 激射波长 1.55 μm 时最大功率为 7mW, 80 °C 时最大功率为 0.5 mW, 最高使用温度 110℃, 单模调制频率达到 10 Gbit/s [6]。

GaAs 基的 InGaAsN 是一种性能良好的长波长通信用材料。InGaAsN / GaAs 导带差大于 300meV, 可有效地把电子限制在势阱中, 因此可显著的提高器件特征温度 T_0 (超过 150 K)。调整 InGaAsN 中 In 与 N 的含量, 可以得到与 GaAs 晶格匹配的直接带隙材料或应变量子阱材料, 而其波长范围可从 1.0 μm 覆盖到 2.0 μm。美国圣地亚国家实验室的 J.F.Klem 等人报道了室温下连续工作的器件, 工作波长为 1247~1289 nm, 微分效率最高达到 0.24 W/A, 最高激射功率 2.1 mW, 连续波激射最高温度 105℃[7]。

1.2.2 微腔发光二极管

发光二极管(LED)因为其高的发光效率被广泛应用于显示、照明, 通讯和传感器等领域, 现在器件的内量子效率实际上已接近于100%。然而由于半导体材料很高的折射率, 我们很难得到大的提取效率。对标准的立方形状的二极管, 因为内全反射使大部分发射光限制在器件内部。为了克服这个问题, 主要采用两种方法, 即通过优化器件的几何形状来增加发射光的溢出角或采用共振结构迫使辐射光耦合到溢出角。后一种方法称为微腔发光二极管(MCLED)或共振腔发光二极管(RCLED)。在MCLED中, 发射体被放入厚度为发射波长量级的光学微腔中, 光学腔与发射光共振, 自发辐射过程被修饰, 内发射不再是各向同性, 这会导致高方向性、高亮度和高LED发射谱纯度。如果适当调谐微腔, 将会更多的发射光进入到溢出角, 从而提高提取效率。对近场辐射图形的控制使得这种共振腔二极管尤其适用于高亮度和高发射方向方面的应用, 例如打印、条形码读入器、大面积显示和光通讯等。MCLED的提取效率反比与有效腔长度, 一个理想的由低折射率材料和光学厚度为 $\lambda/2$ 的腔, 提取效率接近于1。而为获得高的内量子效率, 要求腔的光学厚度大于一个波长和高的折射率。应当注意光场在布拉格发射镜大的穿透深度将导致有效腔长度的显著增加, 这样会降低光的提取效率。

1990年单反射镜微腔发光二极管首先被制备成功, 为提高器件的性能, 人们采用了双镜面结构。第一个电流注入的微腔发光二极管由Scgubert等在AsGa材料中实现的, 紧接着Nakayama成功制造了有机聚合物发光二极管。

1.2.3 微碟激光器

它是一种形如碟型的微腔激光器, 最早由贝尔实验室开发成功。其内部为采用先进的蚀刻工艺蚀刻出的直径只有几微米、厚度只有100nm的极薄的微型圆碟, 圆碟的周围是空气, 下面靠一个微小的底座支撑。由于半导体和空气的折射率相差很大, 微碟内产生的光在此结构内发射, 直到所产生的光波积累足够多的能量后沿着它的边缘折射, 这种激光器的工作效率很高、能量阈值很低, 工作时只需大约100 μ A的电流。

自从McCall等人1992年报道了用低温光抽运InGaAsP系材料制造的微腔激光器以来, 半导体微碟激光器先后在GaAlAs/GaAs、GaN/AlGaIn、InGaN/GaN等多种新材料体系中以脉冲室温电抽运和连续室温电抽运和连续室温光抽运等多种工作

方式实现了激光发射。美国加利福尼亚大学、伊利诺伊州 Northwestern 大学、贝尔实验室、俄勒冈大学、日本 Yokohama National 大学和朝鲜科学与技术高级研究院等均开展了 InGaAs / InGaAsP 量子阱的研究和量子级联微碟激光器的开发和研究，并已取得了很大的进展。

在国内首次研制出直径分别为 $8\mu\text{m}$ 、 $4.5\mu\text{m}$ 和 $2\mu\text{m}$ 的光泵浦 InGaAs / InGaAsP 微碟激光器。其中， $2\mu\text{m}$ 直径的微碟激光器在 77K 温度下的激射阈值功率为 $5\mu\text{W}$ ，是目前国际上报道中的最好水平。此外，他们还在国内首次研制出激射波长为 $1.55\mu\text{m}$ ，激射阈值电流为 2.3mA ，在 77 K 下激射直径为 $10\mu\text{m}$ 的电泵浦 InGaAs / InGaAsP 微碟激光器以及国际上首个带有引出电极结构的电泵浦微柱激光器。值得一提的是，这种微碟激光器具有高集成度、低阈值、低功耗、低噪声、极高的响应、可动态模式工作等优点，在光通信、光互连、光信息处理等方面的应用前景广阔，可用于大规模光子器件集成光路，并可与光纤通信网络和大规模、超大规模集成电路匹配，组成光电子信息集成网络，是当代信息高速公路技术中最理想的光源；同时，可以和其他光电子元件实现单元集成，用于逻辑运算、光网络中的光互连等。

1.2.4 量子点微腔激光器

1975 年 Dingle 和 Henry 提出利用量子尺寸效应来提高激光器的性能。如果载流子平移自由度数低于 1，态密度出现奇异，这会导致光吸收或光放大（增益）的增加。量子点激光器预期的优点：

1. 低的透明电流-有源层中增益克服损失时的电流密度；
2. 大的材料增益-放大的光发射强度以指数形式增加；
3. 大的特征温度-温度增加时阈值电流的稳定性。特征温度越高，阈值电流的稳定性越高。
4. 大的微分增益；
5. 小的谱移因子和啁啾
6. 通过调节量子点尺寸和组分，可以在较宽的波段调谐发射波长；
7. 非常低的阈值电流密度，高量子效率和小的内部损失。
8. 量子限制可抑制非平衡载流子的扩散和非辐射复合。提高辐射硬度，抑制解

理面过热和提高镜面的损伤阈值。

1996 年实现了第一个 QD VCSELs [8, 9], 器件参数比量子阱器件的差。1997 年 QD VCSELs 取得了突破, 获得了非常低的电流密度 170 A/cm^2 , 转换效率 (电能转换成光能) 接近 16%, 该结构具有 10 微米的出光孔 [10]。如果继续减小氧化孔径, 可进一步降低阈值电流密度。1 μm GaAs QD VCSELs 最大输出功率接近 2.6 mW cw (25°C), 转换效率为 40%, 可与现在商用的 VCSELs 相比较。

近来把 InGaAsN 嵌入到 GaAs 材料中成功制备了基于 GaAs1.3 μm VCSELs [11, 12]。氮的引入会给量子点器件带来更大的灵活性。氮, 磷和铟组分的引入会把量子点激光器波长扩展到 1.55-1.60 μm 。直到目前为止, 量子点阵列作为增益介质的微腔激光器性能仍然比不上量子阱微腔激光器, 这主要是因为量子点增益曲线大的均匀展宽和不均匀展宽。例如被报道的量子点垂直腔面发射激光器的最低电流阈值为 $200\mu\text{A}$ [13], 而最好的量子阱垂直腔面发射激光器的阈值为 $36\mu\text{A}$ [14, 15]。然而量子点三维势阱使载流子被局域在量子点内, 这样可以阻止载流子在微腔侧壁的非辐射复合 [16, 17], 提高量子效率。微腔激光器是当代半导体研究领域的热点之一, 它采用了现代超精细加工技术和超薄材料加工技术, 具有高集成度、低噪声的特点, 其功耗低的特点尤为显著, 100 万个激光器同时工作, 功耗只有 5W。

1.3 硅基三维微腔研究的意义及我们的思路

1.3.1 硅基光电子研究的意义

硅是地球上最丰富的元素, 是超过 2500 亿美元半导体工业的基础, 在我们生活的方方面面扮演着重要的角色, 可以说硅对人们生活的影响已经超过了钢铁的影响, 是硅集成微电子元器件创造了当今的信息时代。在过去的几十年里, 半导体技术是电子和通讯领域的核心, 微电子电路的高密度集成度和高速工作一直是科学家追求的目标。为了获得高密度集成, 必须缩小晶体管的尺寸, 当尺寸减小到纳米量级, 经典物理已无能为力, 必须用量子理论来描述这些器件, 通过研究材料的量子性质, 这些器件会更有效和具有更多功能。但是器件的缩小除了产生量子效应, 还会导致信号的同步对器件的尺寸越来越敏感, 这将限制传统的电互连, 同时还会导致器件的功耗增加。当工作频率大于 500 MHz, 因为相互干扰, 在电路板上高密度芯片与

芯片的互联会使得芯片的功能失效，因此科学家的目光从电子转向了光子，用光子作为信息的载体。用光子传递信息有如下优点：（1）光在介电材料中的传播速度要远大于电子在金属导体中的传播速度；（2）光能够传输大量的信息，光纤通讯系统的带宽在 THz 量级，而传统的电子系统仅为几百 KHz；（3）而且光子之间没有相互作用，会避免传递信息之间的相互干扰和减少能量损失；（4）保密程度高。

在下一代光电子超芯片，电子和光子同时参与信息的传输和处理，这就要求光子材料必须能够与如今的标准电子电路集成在同一块芯片上，即实现光子和电子器件集成在同一硅晶片上。不幸的是，到目前为止 III-V 光电子材料很难集成在硅芯片上。最近的芯片之间及芯片内部的光通讯的发展，急需高效，低成本的光功能元件，如光发射器件，探测器件，和光调制器等。

硅是最常用、成本最低的半导体材料，但由于它的发光性能差，迄今人们还未能用它制造出激光器。目前光电子领域使用的激光器是由砷化镓或磷化铟等材料制作的，不仅成本高，而且难以集成到硅芯片中。如果能直接用硅制造激光器，就有可能生产出速度更快的新型光电子运算装置或通信设备。

近来硅基调制器和激光器等光电子器件取得了突破性进展，再一次证明了硅在光电子领域巨大的潜力。因此研究硅基光电子器件，及其与微电子电路的单片集成有着非常重要的理论研究意义和巨大的应用前景。

1.3.2 硅基单片集成的关键部件

Light Source*	Silicon Laser and/or III-V
Guide Light	Si-on-Insulator (SOI) WG
Fast Modulation	Si MOS Capacitor Device
Light Detection	Si Based Photodetector
Low-cost Assembly	Si Passive Alignment
Intelligence	Si CMOS Circuitry

表 1.1 硅单片集成的关键部件

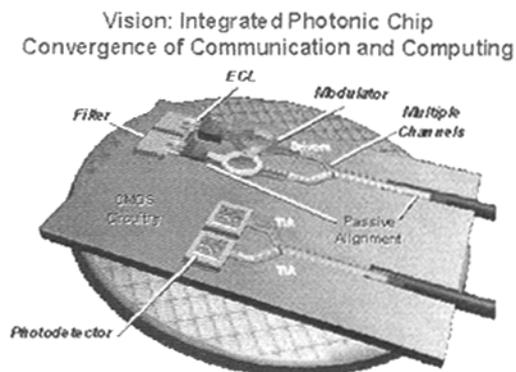


图 1.4 集成光子芯片示意图

由于硅基光子集成中的关键技术与微电子相容,微细加工设备与工艺技术的高度发展为硅基光子器件集成提供了完善技术平台,各种光子器件,光集成芯片迅速涌现。表1.1给出了硅基单片集成的关键光子器件。图1.4中给出了集成光子芯片的示意图。硅基光电子器件中除了硅光源以外,其他部件基本上成熟,可被用于单片集成。

硅基光源: 在过去的几十年来,科研工作者致力于不同的方法去克服硅的发光效率低的缺点。多孔硅强的可见光发射[18]的发现激起了对低维硅系统和它们的发光性质的研究。由于化学特性和机械特性不稳定及控制纳米晶尺寸的困难,科学家同时探索其他的方法制备低维硅材料来提高发光效率。Pavesi [19]小组利用离子注入到超纯的石英衬底或生长在Si衬底上的 SiO_2 ,然后通过热退火制备镶嵌在 SiO_2 中的硅纳米晶。强的光致发光,峰位在800nm被观测到。采用变条带的方法获得了 100cm^{-1} 的光增益,其增益值可与III-V族半导体量子点的增益值相比拟,然而纳米硅大的尺寸分布仍旧是阻碍发光效率提高的一个关键问题。Si/宽带隙绝缘体,尤其是Si/ SiO_2 超晶格也受到的广泛的关注。Lockwood [20] 小组研究了Si/ SiO_2 超晶格的发光特性,并观察到PL的量子限制效应。

最近的发现表明纳米硅具有光增益[19, 21],但是仍存在许多问题,如光谱的线宽较大,方向性不高,低的发光效率和较低的光提取效率,使得制备硅材料发光器件非常困难。

2005年,英特尔公司研究人员首次演示了硅可用来放大外部光源、利用拉曼效应(Raman effect)产生连续的激光光波。2006年来自英特尔公司和美国加州大学圣芭芭拉分校的研究人员成功研发了世界上首个采用标准硅工艺制造的电泵浦混合硅

激光器 (Hybrid Silicon Laser)。这项技术的突破标志着用于未来计算机和数据中心的低成本、高带宽硅光子学设备产业化的最后障碍之一已经被解决。研究人员已经能够将磷化铟的发光属性和硅的光路由整合到单一混合芯片中。当给磷化铟施加电压的时候,光进入硅片的波导,产生持续的激光束,这种激光束可驱动其他的硅光子器件。这种基于硅片的激光技术可使光子学更广泛地应用于计算机中,因为采用大规模硅基制造技术能够大幅度降低成本。这一技术使未来的计算机内部可采用低成本、万亿比特量级的光学‘数据通路’,并使高性能计算应用迎来新时代。

1.3.3 硅基三维微腔

除了上面所述的通过能带工程的方法来改善硅的发光特性,另一重要的途径是利用微腔效应。光学微腔是研究光与物质相互作用最基本的工具。它通过改变周围电磁场的分布,从而改变电磁跃迁几率。三维微腔可以实现真正意义上的单模工作,具有很高的自发辐射耦合因子,用于制备高效的微腔发光二极管,低阈值甚至是零阈值微腔激光器及单光子源等。

单光子源:有效固体单光子源的制备是量子通讯和量子信息处理领域关键有源器件。固体单光子源能够使发射体,例如分子[22],色心[23],半导体纳米晶[24]或自组织量子点[25-32]每次发射一个光子。基于单量子点微柱微腔的单光子源首先被提出[33]。

目前这方面的研究主要集中在固态器件,尤其是镶嵌在 GaAs 中的自组织 InAs 量子点,作为单光子反射体,这种结构有许多优点,例如大的量子限制能量和高的辐射效率等。工作温度通常在低温状态下,当温度增加到 10-20K 时性能会稍微降低,增加到 50K 时,谱线会被展宽。在实验中通常采用超短脉冲激光来激发量子点,尽管看起来电激发更实用[34],但是光激发可以更好地控制能级之间的跃迁和获得更好的器件性能。在这种器件中共振激光脉冲会在量子点中激发出电子-空穴对,因为库仑相互作用,发射波长依赖于量子点中的电子-空穴对数目[35]。实际上激光脉冲激发的电子-空穴对不止一个,但是最后一个电子-空穴对会以特定的波长发射光子,我们可以从谱上把它与其他的光子分离出来。而且如果激光被调谐到与量子点中的激发态吸收共振,激光器激发产生大于一个电子-空穴对的几率会被大大抑制。共振激

发也会使得电子-空穴对很快地处于它们的最低能级，利用这种方法单光子源产生双光子的几率降低了一个量级[36]。量子点被引入到微腔中，由于 Purcell 效应自发辐射会被增强。利用这种方法可以缩短自发辐射的寿命，提高发射光子耦合到单腔模的效率。分子束外延生长的 InAs 量子点被嵌入两个布拉格反射镜之间，然后反应离子束刻蚀形成小的微柱微腔，它可以提供三维光限制，具有分立的模式。这种结构大大提高了效率[37]，同时两光子产生的几率减小了 40 倍[38]。前面所研究的单光子源主要由 III-V 族材料构成，要最终实现基于硅光电子单片集成的光量子计算和量子通讯，必须制备和集成硅单光子源。

基于光学微腔的理论研究和器件方面的应用主要是 III-V 族材料，尤其是微腔光源：微腔激光器、共振微腔发光二极管。三维微腔存在如下问题：

1. III-V 族材料制备的微腔很难实现与硅基微电子器件的单片集成，阻碍了他们的应用和光电集成的发展。
2. 三维光子晶体微腔制作工艺复杂，很难获得高品质因子的光子晶体微腔。而且在光子晶体中引入缺陷比较困难。
3. 微球、微盘、微环微腔利用全内反射原理实现三维限制，有其自身的不足，存在耦合与提取效率低的问题。而且很难实现与微电子器件的单片集成。
4. 微柱微腔微加工方法，制作复杂，很难制作高品质因子的微柱微腔，刻蚀过程中在微柱的侧壁引入缺陷，这些缺陷会引起载流子的非辐射复合降低材料的发光效率，和引起注入载流子的损失，粗糙的侧壁也会引起光散射损失，微柱的形状也会引起衍射损失。因为微腔利用侧壁的全内反射原理提供横向限制，不是严格的三维限制微腔。

为了克服上述微腔存在的不足，我们提出了一种共形生长的方法来制备二维、三维限制光学微腔。直接在图形衬底上淀积样品，侧壁和图形顶部的生长的 DBRs 提供三维光限制。利用这种方法可以制备高的耦合因子的三维微腔，可用于低阈值激光器，高效发光二极管，及研究光与物质的强耦合现象。

1.4 本论文的主要内容

本文研究了硅基一维微腔，二维微腔和三维微腔光发射和光调制特性。利用我们制备氮化硅薄膜的优势，淀积了不同组分的氮化硅薄膜用于制备我们的光学微腔样

品。为获得这些薄膜的光学参量，利用透射谱方法得到了它们的折射率、厚度、吸收系数，淀积速率等参量。并把具有较宽光发射带的氮化硅材料嵌入到微腔中作为光学探针来研究微腔的模式和光调制特性。

我们提出了共形生长的方法制备了二维限制光学微腔，和真正意义上的三维限制微腔。如今研究最多的微柱微腔并不是严格的三维限制微腔，横向限制来自于微柱的全内反射，这需要满足全反射条件，即仅部分辐射受到横向限制。而我们的共形生长的微腔依靠 DBRs 来提供三维限制。从腔的光发光谱上观测到腔的三维限制模式，并且这些模式具有明显的尺寸效应。我们计算了这些横向限制模式位置，计算值与观测值符合得相当好。

第二章 光学微腔理论基础

利用传输矩阵的方法分别计算了 DBRs 的发射谱和透射谱，在忽略 DBRs 子层本身的吸收情况下，高折射率 a-SiN (2.8) 和低折射率 a-SiN (1.9) 构成的 6 周期 DBRs 的反射率可以达到 90% 以上，透射率低于 10%；同样也计算了上下 6 周期 DBRs 的半波长微腔的透射谱和反射谱，反射率接近 100%。还计算了与周期方向不同角度时的透射谱和反射谱，随着角度的增加，周期结构的带隙发生蓝移，微腔的共振模式也朝短波方向移动。在本章的第二部分给出了三维微柱微腔的模式理论，该模型中把微柱微腔看作波导，从 Maxwell 方程出发求解这种结构的三维限制模式，这种方法不能给出解析形式的解，需借助于数值计算。从三维限制导致波矢的量子化，根据波矢分量的不连续性，定义微柱微腔的模式，物理图象清晰，直观。

第三章 构建硅基光学微腔的 DBRs 和发光层的制备及光学参量

为制备微腔样品的 DBRs 和发光媒质，需要折射率不同的材料来构建微腔的反射镜，并且这些材料具有较小的吸收系数，而发光媒质发光较强，有较宽的发射带。为此，利用我们制备氮化硅薄膜的优势，通过控制硅烷和氨气的流量比制备了不同组分的非晶氮化硅薄膜。利用透射谱方法获得了非晶氮化硅薄膜的折射率、光学带隙，厚度，吸收系数等光学参量，这些参数是我们制备氮化硅光学微腔的所必需的。同时研究了薄膜的发光性质，发现组分不同，他们的光致发光特性明显不同，即发光谱形，峰位，强度不同，当氮的含量增加时，发光峰发生蓝移，强度也由弱变强，

然后再变弱。

第四章 硅基一维微腔中 SiN_x 薄膜和 nc-Si 量子点的发光特性

制备了一维光子晶体微腔，剖面 TEM 照片表明样品具有平直，清晰，陡峭的界面，各子层的厚度与设计厚度相同。透射光谱表明腔共振模式在 710nm 附近，与设计模式位置一致。由于一维光子晶体微腔对氮化硅光发射的调制，获得 a-SiN 发光层和 nc-Si / a-SiN_z 超晶格材料发光强度增加近两个数量级，谱的线宽从 200nm 缩窄到 10nm 以下，有效提高了光谱的纯度。

第五章 利用“共形生长”技术研究光学微腔的横向限制效应

采用共形生长的方法，在图形衬底上共形淀积了二维限制光学微腔。用光学显微镜，原子力显微镜，扫描电子显微镜，及剖面透射电子显微镜证明了共形生长的发生。横向限制导致光致发光谱共振峰分裂成三个共振峰：二维微腔模式分别为 M_{000} , M_{010} 和 M_{020} ；准三维微腔模式分别为 M_{000} , M_{010} (M_{001}) 和 M_{011} ，利用改变收集半角的 PL 谱测量方法给出了直接证据，并根据限制模式能量公式计算了他们的能量，与光致发光谱上的峰位符合得相当好。

第六章 硅基三维微腔的光调制特性

采用了两种制备微柱微腔的方法：传统的先制备平板微腔，然后采用微加工方法制备微柱微腔，即自上而下的方法；另外采用了我们提出的共形生长的方法制备了三维限制光学微腔，纵向和横向由 DBRs 提供三维限制，与传统的依靠微柱界面的全内反射提供三维限制不同。我们的三维微腔样品具有明显不同于平板微腔的光调制特性。该方法制备的三维腔可实现更高的横向限制，获得高的自发辐射耦合因子，在研究物质与光的强耦合相互作用，高效发光二极管及低阈值激光器方面有很大的应用前景。

第七章 总结与展望

总结本文的主要内容和创新点，并对今后的工作进行展望。

参考文献

- [1] N.G. Basov, O.N. Krokhin, and Y. M. Popov, *JETP Lett.* **40** 1320 (1961)
- [2] H. Soda, K. Iga, C. Kitahara, and Y. Suematsu, *Jpn. J. Appl. Phys.* **18** 2329 (1979)
- [3] R.D. Burnham, D.R. Scifres, and W. Streifer, U.S. Patent No. 4,309,670 (1982)
- [4] M. Zorn, A. Knigge, U. Zeimer, et al., *J.Crystal Growth*, **248**, 186, (2003).
- [5] Jiang Wen Jang, Chen Lung Chien, Wu Meng Chyi, et al. *J.Solid state Electron.* **46**, 2287(2002)
- [6] G. Boehm, M. Ortsiefer, R. Shau, et al., *J.Crystal Growth*, **251**, 748 (2003)
- [7] J. F. Klem, D. K. Serkland, K M. Geib. *Proc.SPIE*, **46**, 137 (2002)
- [8] R. Schur, F. Sogawa, M. Nishioka, S. Ishida, and Y. Arakawa, *Jpn. J. Appl. Phys., Part 2: Lett.* **35**, L357 (1997)
- [9] H. Saito, K. Nishi, I. Ogura, S. Sugou, and Y. Sugimoto, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 3140 (1996)
- [10] J.A. Lott, N.N. Ledentsov, V.M. Ustinov, A.Yu. Egorov, A.E. Zhukov, P.S. Kop'ev, Zh.I. Alferov, D. Bimberg, *Electron. Lett.* **33**, 1150 (1997)
- [11] K.D. Choquette, J.F. Klem, A.J. Fischer, O. Blum, A.A. Allerman, I.J. Fritz, S.R. Kurtz, W.G. Breiland, R. Sieg, K.M. Geib, J.W. Scott, R.L. Naone, *Electron. Lett.* **36**, 1388 (2000)
- [12] G. Steinle, H. Reichert, A.Yu. Egorov, *Electron. Lett.* **37**, 93 (2001)
- [13] Z. Zou, D.L. Huffaker, S. Csuzak, D.G. Deppe: *Appl. Phys. Lett.* **75**, 22 (1999)
- [14] D. L. Huffaker, D.G. Deppe: *Appl. Phys. Lett.* **71**, 1449 (1997)
- [15] A.E. Bond, P. D. Dapkus, J.O'Brien: *IEEE Photonics Technol. Lett.* **10**, 1362 (1998)
- [16] J. M. Gerard, O. Cabrol, B. Sermage, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 1113 (1996)
- [17] C. Weisbuch, J. Rarity (Eds.): *Microcavities and Photonic Bandgaps: Physics and Applications*, NATO ASI Ser. E **324** (Kluwer, Dordrecht 1996)
- [18] L. T. Canham, *Appl Phys Lett*, 1990, **57**(10): 1045
- [19] L. Pavesi, L. D. Negro, C. Mazzoleni, G. Franzò, F. Priolo, *Nature*, 2000, **408** (6811): 440
- [20] Z. H. Lu, D. J. Lockwood, J. M. Baribeau, *Nature*, **378**, 6554:(1995)
- [21] Khriachtchev L, Räsänen M, Novikov S, Sinkkonen J, *Appl Phys Lett*, **79**, 1249 (2001)
- [22] T. Basche, W. E. Moerner, M. Orrit, H. Talon: *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1516 (1992) ; C. Brunel, B.

- Lounis, Ph. Tamarat, M. Orrit: *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2722 (1999) ;B. Lounis, W.E. Moerner: *Nature* **407**, 492000)
- [23] C. Kurtsiefer, S. Mayer, P. Zarda, H. Weinfurter: *Phys. Rev. Lett.* **89**, 290 (2000) ; R. Brouri, A. Beveratos, J.-Ph. Poizat, Ph. Grangier: *Opt. Lett.* **25**, 1294 (2000); A Beveratos, S. Kuhn, R. Brouri, T. Gacoin, J.-Ph. Poizat, P. Grangier: *Eur. J. Phys. D* **18**, 191 (2002)
- [24] P. Michler, A. Imamoglu, M. Mason, P. Carson, G. Strouse, S. Buratto: *Nature* **406**, 968 (2000)
- [25] E. Moreau, I. Robert, J. M. G´erard, I. Abram, L. Manin, V. Thierry-Mieg, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 2865 (2001)
- [26] C. Santori, D. Fattal, J. Vuckovic, G. Solomon, Y. Yamamoto: *Nature* **419**, 594 (2002)
- [27] E. Moreau, I. Robert, L. Manin, V. Thierry-Mieg, J. M. G´erard, I. Abram, *Physica E* **13**, 418 (2002)
- [28] M. Pelton, C. Santori, J. Vuckovic, B. Zhang, G. S. Solomon, J. Plant, Y. Yamamoto: *Phys. Rev. Lett.* **89**, 233602 (2002)
- [29] P. Michler, A. Kiraz, C. Becher, W. Schoenfeld, P. M. Petroff, L. Zhang, E. Hu, A. Imamoglu: *Science* **290**, 2282 (2000)
- [30] C. Santori, M. Pelton, G. Solomon, Y. Dale, Y. Yamamoto: *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1502 (2001)
- [31] E. Moreau, I. Robert, L. Manin, V. Thierry-Mieg, J. M. G´erard, I. Abram: *Phys. Rev. Lett.* **87**, 18 3601 (2001)
- [32] Z. Yuan, B. E. Kardynal, R. M. Stevenson, A. J. Shields, C. J. Lobo, K. Cooper, N. S. Beattie, D.A. Ritchie, M. Pepper: *Science* **295**, 102 (2002)
- [33] J. M. G´erard, B. Gayral: *J. Lightwave Technol.* **17**, 2089 (1999)
- [34] J. Kim, O. Benson, H. Kan, and Y. Yamamoto, *Nature* **397**, 500 (1999)
- [35] C. Santori, G.S. Solomon, M. Pelton, and Y. Yamamoto, *Phys. Rev. B* **65**, 073310 (2002)
- [36] C. Santori, M. Pelton, G.S. Solomon, Y. Dale, and Y. Yamamoto, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1502 (2001)
- [37] M. Pelton, C. Santori, J. Vuckovic, B. Zhang, G. S. Solomon, J. Plant, and Y. Yamamoto, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 233602 (2002)
- [38] J. Vuckovic, D. Fattal, C. Santori, G. S. Solomon, and Y. Yamamoto, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 3596 (2003)

第二章 光学微腔理论基础

2.1 一维微腔理论设计

一维微腔是光子晶体的一种特例，因此它的设计可从光子晶体角度来考虑。光子晶体是一种介电材料在空间周期排列构成的复合结构，其周期长度在光波长量级。由于周期结构对光波的布拉格散射，导致光子带隙结构的产生，即某一波段的光在此晶体中的传播被禁止。如果在这种本征的光子晶体中引入缺陷，则在光子带隙中出现缺陷态，这些缺陷模式会被局域在缺陷附近。这种包含缺陷的光子晶体形成了光子晶体微腔，缺陷模式对应光子晶体微腔的腔共振模，腔的长度与共振波长在同一个数量级。

为设计一维光子晶体微腔，我们需要掌握腔共振波长位置与分布布拉格反射镜子层厚度的关系，及获得一定的反射率至少需要多少周期的布拉格反射镜。利用传输矩阵的方法计算了光子晶体的透射谱和反射谱，从谱中可得到有关光子晶体微腔的反射率，腔共振模的位置。

利用传输矩阵，腔的透射率和反射率可以表示为[1]：

$$\begin{aligned} r &= \left| T_{21}^N / T_{22}^N \right|^2, \\ t &= \left| T_{11}^N - T_{12}^N T_{21}^N / T_{22}^N \right|^2 \end{aligned} \quad (2.1)$$

r 和 t 分别表示微腔样品的反射率和透射率， T_{xy} 为传输矩阵元，传输矩阵表达式为

$$T^N = Q_{N,N+1} \prod_{l=N}^1 P_l(d_l) Q_{l-1,l} \quad (2.2)$$

其中 d_l 和 N 表示第 l 层的厚度和介电多层膜总的子层数，矩阵 P 和 Q 的形式为

$$\begin{aligned} P_l(d_l) &= \begin{pmatrix} e^{ik_l d_l} & 0 \\ 0 & e^{-ik_l d_l} \end{pmatrix}, \\ Q_{l,l-1} &= \begin{pmatrix} 1/2 + k_{l-1}/2k_l & 1/2 - k_{l-1}/2k_l \\ 1/2 - k_{l-1}/2k_l & 1/2 + k_{l-1}/2k_l \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

k_l 是第 l 层中光的波矢。根据上面的公式，我们首先计算了DBRs的反射谱和透射谱，样品的结构示意图如图2.1左图周期性结构表示一维光子晶体，红色代表低折射率子层，绿色为高折射率层，右图为一维掺杂光子晶体，与左图不同的是在光子晶体中引入了一个缺陷，该缺陷层可以在折射率、厚度不同于本征光子晶体的参数，或这两个参数都不同于本征光子晶体的参数。

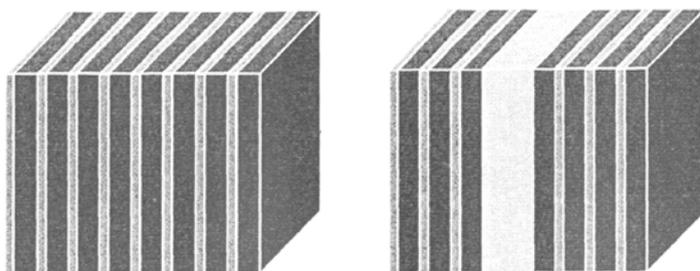


图2.1一维本征光子晶体和掺杂光子晶体示意图

样品的结构参数是6周期高低折射率调制的一维周期结构，不同组分的非晶氮化硅材料制备光子晶体两种高低折射率子层，他们的参数列在表格2.1中。从表格中可以看

	Refractive index	Effective Thickness	Optical gap
$\lambda/4$ α -SiHx	1.9	93nm	3.8eV
$\lambda/4$ α -SiHy	2.8	63nm	2.0eV
$\lambda/2$ α -SiHz	2.1	169nm	2.5eV

表2.1 微腔样品的光学参数

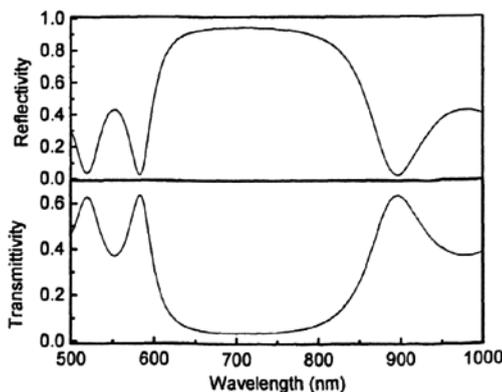


图2.2 6周期DBRs的反射谱和透射谱

到, 选用的非晶氮化硅的厚度为设计共振波长 $\lambda = 710\text{nm}$ 的四分之一, 折射率分别为 1.9 和 2.8, 光学带隙是 3.8 和 2.0 eV, 厚度分别是 93 nm 和 63 nm。在表格第三行中, 给出了微腔有源层参数分别是折射率 2.1, $\lambda/2$ 腔长 169 nm, 和光学带隙 2.5 eV。

根据上面的参数, 我们计算了 6 周期一维光子晶体布拉格反射镜的反射谱和透射谱如图 2.2 所示, 其中在计算的过程, 忽略了材料的吸收。从上面的曲线中, 在反射谱的 710 nm 附近有一 250 nm 宽的反射极大的平台, 最高反射率为 90% 以上; 在透射谱的 710 nm 附近有一 250 nm 宽的透射极小的平台, 最低透射率为 10%, 该波段为一维光子晶体的禁带, 利用光子晶体带隙高的反射率或低的透射率作为微腔的分布布拉格反射镜。

上面计算是沿着周期方向的反射谱和透射谱, 我们同时还计算了光子晶体其他方向上的反射谱和透射谱, 分别是相对于光子晶体周期排列方向的 $10^\circ, 20^\circ, 30^\circ, 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ$ 。如图 2.3 所示:

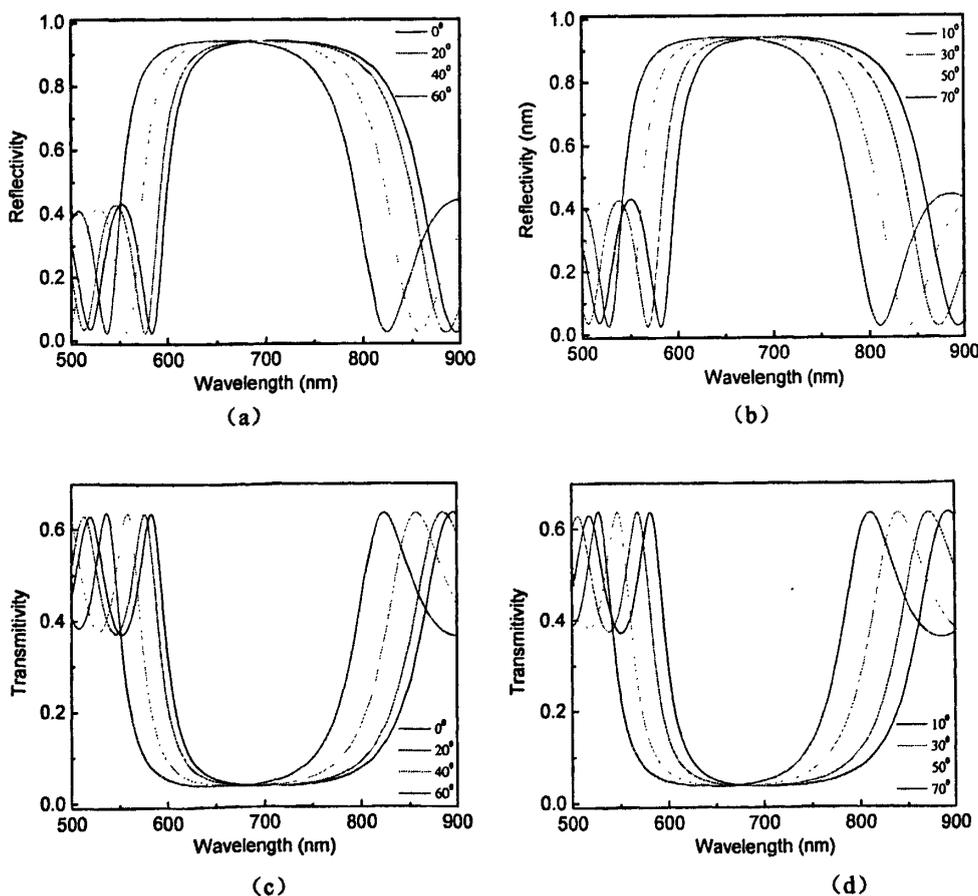


图 2.3 6 周期光子晶体在不同角度时的反射谱和透射谱

图 a 中给出 0° , 20° , 40° , 60° 时的反射谱, 图 b 中给出 10° , 30° , 50° , 70° 时的反射谱, 从图中可看出, 随着角度的增加, 光子晶体的带隙向短波长移动, 即发生了蓝移, 而且随着角度的增加, 蓝移加快, 从图中可以明显看出这种趋势。带隙发生蓝移的过程中, 我们还发现禁带宽度略有减小, 而最大反射率基本上保持不变。图 c 和 d 分别是与 a 和 b 图中相应角度的透射谱, 从透射谱中我们也可以发现这种变化趋势。

图 2.4 中给出了掺杂的一维光子晶体微腔的反射谱和透射谱, 该掺杂光子晶体微腔的结构是缺陷两侧是具有 6 个周期的, 相对于缺陷对称的一维光子晶体, 即缺陷构成腔, 而两侧的一维光子晶体作为微腔的分布布拉格反射镜, 缺陷的光学厚度是光子晶体子层厚度的两倍, 即 $\lambda/2$, λ 是光子晶体频隙中心对应的波长。与本征光子晶体相比, 透射谱和反射谱发生了明显的变化, 缺陷的引入, 在光子晶体禁带中引入了光子晶体缺陷态, 该缺陷态是光子晶体微腔的共振态, 在反射谱中对应高反射带中的反射极小和透射谱中透射极大。与图 2.3 相比光子晶体的禁带宽度变大, 最大反射率几乎为 1, 透射率接近于 0, 这是因为光子晶体周期数增加导致的。此外在透射谱中, 带隙两边的透射峰分裂成两个小峰, 在反射谱相应的位置也发生了分裂, 这种现象是由于缺陷的引入导致的。微腔的反射谱和透射谱随角度的变化将在第四章中给出。

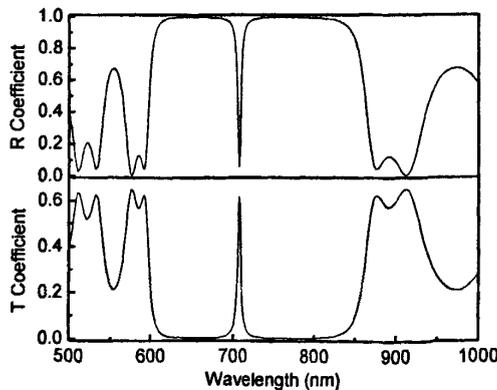


图 2.4 光子晶体微腔的反射谱和透射谱

2.2 微柱微腔的模式理论基础

当前被广泛研究的是微柱微腔，设计微柱微腔的目的在于获得最大的耦合因子，即耦合到腔共振模式的自发辐射占全部自发辐射的比例，从而获得最大的光提取效率，提高发光二极管的效率，获得低阈值甚至零阈值的激光器，制备单光子器件；另一个目的在于获得超小的模式体积和高的品质因子，用于研究光与物质的强耦合现象。

为研究上述性质，首先必须清楚微柱微腔的模式结构。模式的获得主要通过测量和理论计算。如采用通常的透射谱或反射谱方法测量，因微柱微腔横向尺寸很小，很难实现光的有效耦合和探测。文献[2]提出在微腔中插入发光媒质作为光学探针，采用微荧光光谱的方法，来研究微腔的模式结构，解决了光耦合的困难。

文献[3, 4]研究了微柱微腔的模式，其中引入了理想的微柱形状和分布发射体，而实际上并不是理想的柱形。精确求解这种复杂结构模共振的唯一方法是数值解 Maxwell 方程。其中最常用的方法是有限时域差分方法 (FDTD)，1966 年是 Yee 提出[5]。这种方法最基本的思想是把 Maxwell 微分方程离散化。任意场量 $F(x, y, z, t)$ 可表示为 $F^n(i, j, k, n) = F(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t)$ ，为坐标增量 $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ 和时间增量 Δt 的函数。电场和磁场分量在空间和时间上相差半个步长。为了模拟无限空间中电磁场的传播特性，在边界处放置无反射的吸收体截断计算网格区域，从而减小计算量。

这种方法可以模拟任意形状的三维微腔结构的模共振[6]。文献[7]利用该方法计算了微柱微腔的模式，得到了低阶模的场强分布图，并比较了理想微柱与实际微柱场分布的差异。还计算了理想与实际微柱腔品质因子对横向尺寸的依赖。

FDTD 计算方法对计算机的要求比较高，计算时间较长。Yamamoto 小组在 Panzarini 和 Andreani [8]基础上提出了一种近似模型，其中假定场可表示为两部分函数的乘积 $E(r, \theta, z) = E_r(r, \theta)E_z(z)$ 。 $E_r(r, \theta)$ 依赖于横向座标 r 和 θ ，而 $E_z(z)$ 仅是 z 的函数。

对于函数 $E_z(z)$ ，可通过传输矩阵方法[9]确定。一平面波垂直入射到平板微腔，任一点前向传播的平面波和背向传播的平面波振幅构成一个包含两个元素的矢量，界面一侧的场矢量 \vec{v} 通过另一侧场矢量 \vec{v} 乘以一适当的转移矩阵得到： $\vec{v}' = M\vec{v}$

$$M = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + \frac{k_2}{k_1} & 1 - \frac{k_2}{k_1} \\ 1 - \frac{k_2}{k_1} & 1 + \frac{k_2}{k_1} \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

其中 k_1 和 k_2 分别是界面两侧的波矢量。在同一种介质中传播长度 l 用传输矩阵描述为

$$M = \begin{bmatrix} e^{ikl} & 0 \\ 0 & e^{-ikl} \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

这样任意两点的场可通过一系列传输矩阵的乘积相联系： $M = M_n M_{n-1} \cdots M_2 M_1$ 从而获得纵向场的分布。

下面从 Maxwell 方程出发，求解微柱微腔的横向限制模式。电磁波在真空和介质中的传播可用 Maxwell 方程来描述，各向同性介质中 Maxwell 方程可表示为：

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{H} &= \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \\ \nabla \times \vec{E} &= -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \\ \nabla \cdot (\varepsilon \vec{E}) &= 0 \end{aligned} \quad (2.6)$$

对上面第二个方程两边取旋度，并把第一个方程代入可得

$$\nabla^2 \vec{E} - \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = -\nabla \left(\frac{1}{\varepsilon} \vec{E} \cdot \nabla \varepsilon \right) \quad (2.7)$$

各向同性介质 $\nabla \varepsilon = 0$ ，假定电场解的形式为 $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}) e^{i\omega t}$ ，则上面的等式可改写为

$$\nabla^2 \vec{E} - k^2(\vec{r}) \vec{E} = 0 \quad (2.8)$$

其中 $k^2(\vec{r}) = \omega^2 \mu \varepsilon(\vec{r}) \left[1 - \frac{i\sigma(\vec{r})}{\omega \varepsilon} \right]$ 。 $\sigma > 0$ 表明介质存在损耗，相反 $\sigma < 0$ 为增益介质，

为了简化求解，我们假定 $\sigma = 0$ ，即为理想的介电材料，则 $k^2 = \omega^2 n^2 / c^2$ ，其中 n, c 分别为材料的折射率和真空中的光速。

圆形截面微柱微腔的折射率 $n(r)$ 为柱对称，因此 Maxwell 方程写成柱坐标形式可方便求解。在柱坐标系中，电磁场分量为 $E_r, E_\phi, E_z, H_r, H_\phi$ 和 H_z 。由于单位矢量

\bar{a}_r 和 \bar{a}_ϕ 不是常数矢量, 这些分量的波方程变得非常复杂。而 z 分量的波方程仍旧保持很简单的形式

$$(\nabla^2 + k^2) \begin{Bmatrix} E_z \\ H_z \end{Bmatrix} = 0 \quad (2.9)$$

其中 ∇^2 是 Laplacian 算符, 在柱坐标系中其形式为, E_z

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2.10)$$

求解柱形结构中波的传播问题通常先求解出 E_z 和 H_z 的形式, 然后用 E_z 和 H_z 来表示

E_r, E_ϕ, H_r 和 H_ϕ 。

沿波导传播的电磁波电场和磁场分量取如下形式

$$\begin{bmatrix} \bar{E}(\bar{r}, t) \\ \bar{H}(\bar{r}, t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{E}(r, \phi) \\ \bar{H}(r, \phi) \end{bmatrix} \exp [i(\omega t - \beta z)] \quad (2.11)$$

把电场, 磁场表达式带入 Maxwell 方程中, 并写为分量形式

$$\begin{aligned} i\omega\epsilon E_r &= i\beta H_\phi + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} H_z \\ i\omega\epsilon E_\phi &= -i\beta H_r - \frac{\partial}{\partial r} H_z \\ i\omega\epsilon E_z &= -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} H_r + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rH_\phi) \\ -i\omega\mu H_r &= i\beta E_\phi + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} E_z \\ -i\omega\mu H_\phi &= -i\beta E_r - \frac{\partial}{\partial r} E_z \\ -i\omega\mu H_z &= -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} E_r + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rE_\phi) \end{aligned} \quad (2.12)$$

场其他分量可写为 E_z 和 H_z 函数

$$\begin{aligned}
 E_r &= \frac{-i\beta}{\omega^2 \mu \varepsilon - \beta^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} E_z + \frac{\omega \mu}{\beta} \frac{\partial}{r \partial \phi} H_z \right) \\
 E_\phi &= \frac{-i\beta}{\omega^2 \mu \varepsilon - \beta^2} \left(\frac{\partial}{r \partial \phi} E_z - \frac{\omega \mu}{\beta} \frac{\partial}{\partial r} H_z \right) \\
 H_r &= \frac{-i\beta}{\omega^2 \mu \varepsilon - \beta^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} H_z - \frac{\omega \mu}{\beta} \frac{\partial}{r \partial \phi} E_z \right) \\
 H_\phi &= \frac{-i\beta}{\omega^2 \mu \varepsilon - \beta^2} \left(\frac{\partial}{r \partial \phi} H_z + \frac{\omega \mu}{\beta} \frac{\partial}{\partial r} E_z \right)
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

只要求出电磁场 z 分量 E_z 和 H_z ，利用上述等式可得到电磁场的其他分量的解。下面重点求解电磁场 z 的表达式

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \begin{Bmatrix} E_z \\ H_z \end{Bmatrix} = 0 \tag{2.14}$$

假定分量 E_z 和 H_z 取如下形式

$$\begin{Bmatrix} E_z \\ H_z \end{Bmatrix} = \psi(r) \exp(\pm i l \phi) \tag{2.15}$$

其中 $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ ，把上述场分量代入方程得

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \left(k^2 - \beta^2 - \frac{l^2}{r^2} \right) \psi = 0 \tag{2.16}$$

该方程为 Bessel 微分方程，方程的解称为 l 阶 Bessel 函数。如果 $k^2 - \beta^2 > 0$ ，Bessel 微分方程的通解为

$$\psi(r) = c_1 J_l(hr) + c_2 Y_l(hr) \tag{2.17}$$

$h^2 = k^2 - \beta^2$ ， c_1 和 c_2 是常数； J_l 和 Y_l 分别是 l 阶第一类 Bessel 函数和第二类 Bessel 函数。如果 $k^2 - \beta^2 < 0$ ，Bessel 微分方程的通解为

$$\psi(r) = c_1 I_l(qr) + c_2 K_l(qr) \tag{2.18}$$

$q^2 = k^2 - \beta^2$ ， I_l 和 K_l 分别是 l 阶第一类 Bessel 函数和第二类 Bessel 函数。

折射率阶跃圆形波导示意图如下图所示，芯折射率 n_1 ，半径 a ；包层折射率 n_2 ，半径为 b 。通常包层足够厚，使得 $r = b$ 处限制模场为零。

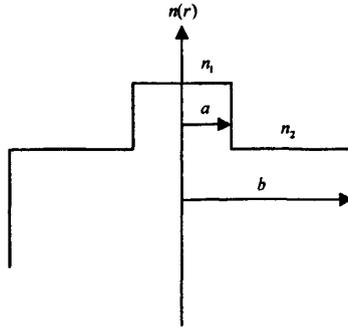


图 2.5 圆形波导折射率分布图

对于波导模式传播, β 必须大于 $n_2\omega/c$, 保证在包层中是倏逝波, 即能量是沿波导轴向传输的, 而在径向没有能量流动。在包层中 ($r > a$), 限制模式电磁场 z 分量可表示为

$$\begin{aligned} E_z(\vec{r}, t) &= CK_l(qr) \exp[i(\omega t + l\phi - \beta z)] \\ H_z(\vec{r}, t) &= DK_l(qr) \exp[i(\omega t + l\phi - \beta z)] \end{aligned} \quad r > a \quad (2.19)$$

C 和 D 是两个任意常数, q 由下式给出

$$\begin{aligned} q^2 &= \beta^2 - n_2^2 k_0^2 \\ k_0 &= \frac{\omega}{c} \end{aligned} \quad (2.20)$$

在芯层中 ($r < a$), 限制模式电磁场 z 分量可表示为

$$\begin{aligned} E_z(\vec{r}, t) &= AJ_l(hr) \exp[i(\omega t + l\phi - \beta z)] \\ H_z(\vec{r}, t) &= BJ_l(hr) \exp[i(\omega t + l\phi - \beta z)] \end{aligned} \quad r < a \quad (2.21)$$

A 和 B 是两个任意常数, h 由下式给出

$$h^2 = n_1^2 k_0^2 - \beta^2 \quad (2.22)$$

$h^2 > 0$ 和 $q^2 > 0$ 可以导出如下关系

$$n_1 k_0 > \beta > n_2 k_0 \quad (2.23)$$

这是限制模式存在的必要条件。把限制模式场 z 分量代入其他场分量表达式得芯层 ($r < a$):

$$\begin{aligned}
 E_r &= \frac{-i\beta}{h^2} \left[AhJ'_i(hr) + \frac{i\omega\mu l}{\beta r} BJ_i(hr) \right] \exp[i(\omega t + l\phi - \beta z)] \\
 E_\phi &= \frac{-i\beta}{h^2} \left[\frac{il}{r} AJ_i(hr) - \frac{\omega\mu}{\beta} BhJ'_i(hr) \right] \exp[i(\omega t + l\phi - \beta z)] \\
 E_z(\bar{r}, t) &= AJ_i(hr) \exp[i(\omega t + l\phi - \beta z)] \\
 H_r &= \frac{-i\beta}{h^2} \left[BhJ'_i(hr) - \frac{i\omega\varepsilon_1 l}{\beta r} AJ_i(hr) \right] \exp[i(\omega t + l\phi - \beta z)] \\
 H_\phi &= \frac{-i\beta}{h^2} \left[\frac{il}{r} BJ_i(hr) + \frac{\omega\varepsilon_1}{\beta} AhJ'_i(hr) \right] \exp[i(\omega t + l\phi - \beta z)] \\
 H_z(\bar{r}, t) &= BJ_i(hr) \exp[i(\omega t + l\phi - \beta z)] \\
 J'_i(hr) &= dJ_i(hr)/d(hr), \varepsilon_1 = \varepsilon_0 n_1^2
 \end{aligned} \tag{2.24}$$

包层 ($r > a$):

$$\begin{aligned}
 E_r &= \frac{-i\beta}{q^2} \left[CqK'_i(qr) + \frac{i\omega\mu l}{\beta r} DK_i(qr) \right] \exp[i(\omega t + l\phi - \beta z)] \\
 E_\phi &= \frac{-i\beta}{q^2} \left[\frac{il}{r} CK_i(qr) - \frac{\omega\mu}{\beta} DqK'_i(qr) \right] \exp[i(\omega t + l\phi - \beta z)] \\
 E_z(\bar{r}, t) &= CK_i(qr) \exp[i(\omega t + l\phi - \beta z)] \\
 H_r &= \frac{i\beta}{q^2} \left[DqK'_i(qr) - \frac{i\omega\varepsilon_2 l}{\beta r} CK_i(qr) \right] \exp[i(\omega t + l\phi - \beta z)] \\
 H_\phi &= \frac{i\beta}{q^2} \left[\frac{il}{r} DK_i(qr) + \frac{\omega\varepsilon_2}{\beta} CqK'_i(qr) \right] \exp[i(\omega t + l\phi - \beta z)] \\
 H_z(\bar{r}, t) &= DK_i(qr) \exp[i(\omega t + l\phi - \beta z)] \\
 K'_i(hr) &= dK_i(hr)/d(hr), \varepsilon_2 = \varepsilon_0 n_2^2
 \end{aligned} \tag{2.25}$$

这些场量必须满足边界条件，即在 $r = a$ 切向场分量在界面两侧连续，可得到如下方程组

$$\begin{aligned}
 AJ_i(ha) - CK_i(qa) &= 0 \\
 A \left[\frac{il}{h^2 a} J_i(ha) \right] + B \left[-\frac{\omega\mu}{h\beta} J'_i(ha) \right] + C \left[\frac{il}{q^2 a} K_i(qa) \right] + D \left[-\frac{\omega\mu}{q\beta} K'_i(qa) \right] &= 0 \\
 BJ_i(ha) - DK_i(qa) &= 0 \\
 A \left[\frac{\omega\varepsilon_1}{h\beta} J'_i(ha) \right] + B \left[\frac{il}{h^2 a} J_i(ha) \right] + C \left[\frac{\omega\varepsilon_2}{q\beta} K'_i(qa) \right] + D \left[\frac{il}{q^2 a} K_i(qa) \right] &= 0
 \end{aligned} \tag{2.26}$$

使得 A, B, C 和 D 为非零解，则要求系数矩阵为零。那么波导模式必须满足如下表达式，并由此表达式求出传播常数 β

$$\left(\frac{J'_l(ha)}{haJ_l(ha)} + \frac{K'_l(qa)}{qaK_l(qa)} \right) \left(\frac{n_1^2 J'_l(ha)}{haJ_l(ha)} + \frac{n_2^2 K'_l(qa)}{qaK_l(qa)} \right) = l^2 \left[\left(\frac{1}{ha} \right)^2 + \left(\frac{1}{qa} \right)^2 \right] \left(\frac{\beta}{k_0} \right)^2 \quad (2.27)$$

在平板波导中，传输模式分为两类：TE 和 TM 模。而在圆形波导中，一般模式的各个分量不再为零，不是 TE 和 TM 模，仅当 $l=0$ 时，为 TE 和 TM 模。 $l \neq 0$ 时，用 EH 和 HE 来表示波导的传导模式。

EH 模：

$$\frac{J_{l+1}(ha)}{haJ_l(ha)} = \frac{n_1^2 + n_2^2}{2n_1^2} \frac{K'_l(qa)}{qaK_l(qa)} + \left(\frac{l}{(ha)^2} - R \right) \quad (2.28)$$

HE 模：

$$\frac{J_{l-1}(ha)}{haJ_l(ha)} = -\frac{n_1^2 + n_2^2}{2n_1^2} \frac{K'_l(qa)}{qaK_l(qa)} + \left(\frac{l}{(ha)^2} - R \right) \quad (2.29)$$

其中

$$R = \left[\left(\frac{n_1^2 - n_2^2}{2n_1^2} \right)^2 \left(\frac{K'_l(qa)}{qaK_l(qa)} \right)^2 + \left(\frac{l\beta}{n_1 k_0} \right)^2 \left(\frac{l}{(ha)^2} + \frac{l}{(qa)^2} \right) \right]^{1/2} \quad (2.30)$$

对于方形波导，直接的解析分析是不可能的，Marcatili 提出了一种近似的解析解。假设纵向电磁场分量表达式可分离变量

$$\psi_z(x, y, z) = X(x)Y(y)e^{i(\omega t - \beta z)} \quad (2.31)$$

波方程可表示为

$$\begin{aligned} \frac{1}{X} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \frac{1}{Y} \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + K^2 &= 0 \\ K^2 &= (n^2 k_0^2 - \beta^2)^{1/2} \end{aligned} \quad (2.32)$$

场量表达式代入微分方程得

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{1}{X} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + K_x^2 \right\} + \left\{ \frac{1}{Y} \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + K_y^2 \right\} &= 0 \\ K^2 &= K_x^2 + K_y^2 \end{aligned} \quad (2.33)$$

方程的解为

$$\begin{aligned} X(x) &= A_1 \cos K_x(x + \phi_x) + A_2 \sin K_x(x + \phi_x) \\ Y(y) &= B_1 \cos K_y(y + \phi_y) + B_2 \sin K_y(y + \phi_y) \end{aligned} \quad (2.34)$$

于是得到电场的 z 分量表达式

$$E_z(x, y, z, t) = A \cos K_x(x + \phi_x) \cos K_y(y + \phi_y) e^{i(\alpha x - \beta z)} \quad (2.35)$$

同样可得到磁场的 z 分量及电场磁场的其他分量形式。该波导支持一系列分离模式，可用 E_{pq}^x 和 E_{pq}^y 表示不同的波导模式。 E_{pq}^x 表示 x 方向为主要偏振方向，而 E_{pq}^y 表示 y 方向为主要偏振方向。 p 和 q 分别为场在 x 和 y 轴方向波腹极大值数目。与 E_{pq}^x 和 E_{pq}^y 相联系的场分量分别为

$$\begin{aligned} E_{pq}^x &\rightarrow \{E_x, E_y, E_z, H_z, E_y \cong 0, H_x = 0\} \\ E_{pq}^y &\rightarrow \{E_y, H_x, E_z, H_z, E_x \cong 0, H_y = 0\} \end{aligned} \quad (2.36)$$

上面所述的方法是把微柱微腔看作短的柱形波导，从 Maxwell 方程组出发求解该波导结构的限制模式，优点是通过数值计算能够得到模式的能量，场的空间分布，但是这种方法比较复杂，需借助于计算机，而且物理图象不清晰。文献中[10]类比量子点三维限制导致电子态的三维量子化，三维半导体微腔纵向 DBRs 和横向折射率不连续形成三维光限制，从而导致腔本征模式波矢量子化和能量量子化。方形微柱微腔的波矢和能量表示为：

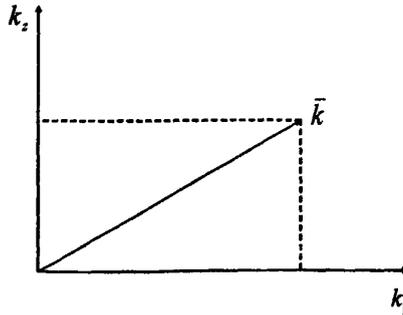


图 2.6 波矢的直角坐标图

$$\begin{aligned} \bar{k}_\eta &= \bar{k}_x + \bar{k}_y \\ k_{x,y} &= (m_{x,y} + 1) \frac{1}{L} \\ m_{x,y} &= 0, 1, 2, \dots \\ E_{ph} &= \frac{\hbar c}{n} \sqrt{k_0^2 + k_x^2 + k_y^2} \end{aligned} \quad (2.37)$$

其中 $\hbar c k_0 / n$ 没有刻蚀微腔的腔共振能量， k_0 纵向波矢分量。 $k_{x,y}$ 和 L 分别是横向 x, y

方向波矢分量和微柱横向尺寸。三维限制光学微腔模由 $M_{m_x m_y m_z}$ 描述, m_z 是垂直方向量子数, m_x 和 m_y 为横向量子数, 每个量子数表示在给定方向波节的数目。对于圆柱形微柱微腔模式能量表达式为

$$E_{ph} = \frac{\hbar c}{n} \sqrt{k_0^2 + \frac{x_{n_\phi n_r}^2}{R^2}} \quad (2.38)$$

$x_{n_\phi n_r}$ 是 n_ϕ 阶 Bessel 函数第 n_r 个零点, R 是微柱的半径。下面给出不同的限制模式能量与横向尺寸关系

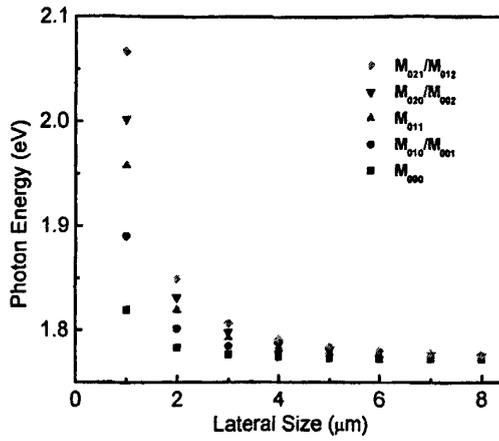


图 2.7 方柱形微柱微腔模式-横向尺寸关系图

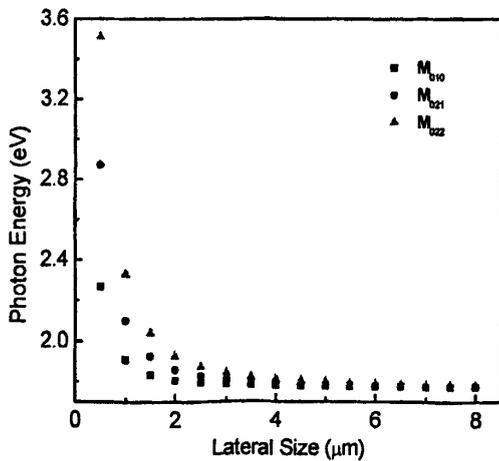


图 2.8 圆柱形微柱微腔模式-横向尺寸关系图

从上图中可知随着微柱横向尺寸的减小, 模式的分裂增大。对于特定的模式随

着横向尺寸的减小模式能量的蓝移迅速增加。从图中我们还可发现具有同样横向尺寸的圆柱形微柱微腔和方形微柱微腔，圆形微柱微腔模式分裂间距大，并且蓝移大。

2.3 本章小结

利用传输矩阵的方法分别计算了 DBRs 的发射谱和透射谱，在忽略 DBRs 子层本身的吸收情况下，高折射率 a-SiN (2.8) 和低折射率 a-SiN (1.9) 构成的 6 周期 DBRs 的反射率可以达到 90% 以上，透射率低于 10%；同样也计算了上下 6 周期 DBRs 的半波长微腔的透射谱和反射谱，反射率接近 100%。还计算了与周期方向不同角度时的透射谱和反射谱，随着角度的增加，周期结构的带隙发生蓝移，微腔的共振模式也朝短波方向移动。在本章的第二部分给出了三维微柱微腔的模式理论，该模型中把微柱微腔看作波导，从 Maxwell 方程出发求解这种结构的三维限制模式，这种方法不能给出解析形式的解，需借助于数值计算。由于三维限制导致波矢的量子化，根据波矢分量的不连续性，来定义微柱微腔的模式，物理图象清晰，直观。

参考文献

- [1] J Zi, Wan J and C Zhang, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 2084 (1998)
- [2] J. M. Gerard, D. Barrier, J. Y. Marzin, R. Kuszelewicz, L. Manin, E. Costard, V. Theiry-Mieg, T. Rivera, *Appl. Phys. Lett.*, **69**, 449 (1996)
- [3] R. E. Howard, *IEEE Trans. Electron Dev.*, **ED-28**, 1378 (1981)
- [4] T. Baba, T. Hamano, F. Koyama, K. Iga, *IEEE J. Quantum Electron*, **27**, 1347 (1991)
- [5] K. S. Yee, *IEEE T. Antenn. and Propag.*, **AP- 14**, 302 (1966)
- [6] O. Painter, J. Vuckovic, A. Sherer, *J. Opt. Soc. Am. B*, **16**, 275 (1999)
- [7] Y. Xu, R. K. Lee, A. Yariv, *Phys. Rev. A.*, **61**, 033807 (2000)
- [8] G. Panzarini, L. C. Andreani, *Phys. Rev. B.*, **60**, 799 (1999)
- [9] G. Bjork, H. Heitmann, Y. Yamamoto, *Phys. Rev. A.*, **47**, 4451 (1993)
- [10] J. P. Reithmaier et al., *PRL* **80**, 378 (1997)

第三章 构建硅基光学微腔的 DBRs 和发光层的制备及光学参量

3.1 引言

利用等离子体增强气相化学淀积方法制备的氢化非晶氮化硅, $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ 被广泛地应用在微电子和光电子领域, 如器件封装的钝化层[1], $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ 薄膜晶体管的栅介质层[2], 在 MNOS 非挥发存储器中的储存电荷层, 热电子注入层[3], 光发射器件的辐射元件[4, 5]。通过调节氮的含量, 可以获得光学带隙从 1.9-5eV 可调的不同组分的非晶氮化硅[6]。同时, 增加氮的含量, 室温下辐射效率增强几个数量级, 光发射带向高能量侧移动, 因此氮化硅在光发射器件方面具有很大的应用前景。

在本章中, 我们利用 PECVD 方法, 通过改变氮气和硅烷的流量比值制备了不同组分的非晶氮化硅薄膜, 透射谱测量得到了非晶氮化硅薄膜折射率 (从 1.9 到 2.8), 光学带隙 (从 2.1 到 3.7), 厚度等光学参数。光致发光谱表明, 氮的含量对于样品的发光特性影响很大, 即谱形明显不同, 随着氮含量的增加, 发光强度由弱变强, 然后变弱, 而发光带逐步向短波方向移动。

3.2 $a\text{-SiN}_x$ 的制备和组分分析

为了获得氢化非晶氮化硅 ($a\text{-SiN}_x\text{:H}$) 薄膜样品, 我们使用硅烷 (SiH_4) 和氨气 (NH_3) 作为反应气源, 在等离子增强化学气相淀积 (PECVD, Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition) 系统中制备一系列的不同化学配比的 $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ 样品。

PECVD 生长系统如图 3-1 所示。反应室结构为平板电容耦合 (Capacitively-couple) 方式。所使用的射频 (rf, Radio Frequency) 功率电源的工作频率为 13.56 MHz。反应气体流量通过质量流量计精确控制, 在生长过程中, 衬底放在接地的阳极上, 衬底温度通过自动温控装置来控制。系统的真空机组为两级方式, 包括旋片机械泵和机械增压泵。

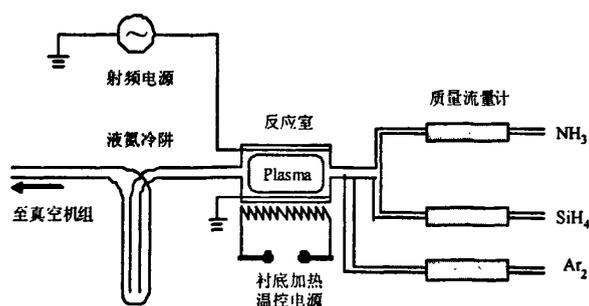


图 3.1 PECVD 生长系统示意图

根据不同的实验要求,我们选用了不同的衬底材料,包括熔融的石英玻璃(Fused Quartz Glass), 7059 玻璃(Corning 7059 glass), 单晶硅片(Wafer)和双面抛光单晶硅片(Polished Wafer)。

为了获得不同组分的 $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ 样品的生长速率, 光学带隙, 吸收系数, 折射率和发光性质, 我们制备了一系列不同化学配比的 $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ 样品。把清洗干净的石英衬底, 7059 玻璃, 单晶硅片, 双面抛光硅片放入生长腔中, 对系统进行预真空处理, 使生长腔的本底气压小于 40 mTorr, 然后用 Ar^+ 等离子体, 30W 功率对衬底处理 5 分钟, 处理过程中腔内气压维持在 230 mTorr。这样做的目的是为了提在高衬底上的成膜质量。通过固定硅烷气体的流量 6 sccm, 改变氨气的流量分别为 3sccm, 6sccm, 12sccm, 24sccm, 36sccm, 48sccm 淀积 6 种不同硅氮比的非晶氮化硅薄膜样品。生长过程中衬底温度维持在 250°C , 功率为 30W, 反应室中通入 Ar 气辅助腔内反应气体等离子体辉光放电, 使得腔内气压在改变氨气流量前后维持在 280 mTorr, 单层 $a\text{-SiN}_x\text{:H}$ 生长时间为 1.5 个小时。其化学反应室如下。



在反应室内, 外加交变的射频电场使得硅烷, 氨气和氩气的混合气体变为等离子体, 它们在衬底表面反应生成含氢的非晶氮化硅薄膜, 通过改变氨气的流量, 也就改变了 x 值, 我们就获得了不同氮组分的非晶氮化硅, 从而得到不同光学性质的样品。

傅立叶红外谱表明在氮组分较低的非晶氮化硅中, 氮原子与三个硅原子成键

[7-9], 氮组分较高时, 每个氮原子的最近邻有两个硅原子和一个氢原子, 这些结构的变化影响了薄膜的电学性质和光学性质。峰波数随着氮组分的增加而从 840 cm^{-1} 增加到 900 cm^{-1} 。x 值低于 0.2 时, SiN 键可分解成 750 cm^{-1} 和 840 cm^{-1} 两个峰[10]。对于大 x 值, SiN 键吸收带可以分解为 840 cm^{-1} 和 960 cm^{-1} 两个吸收带。低 x 值 $750\text{-}800 \text{ cm}^{-1}$ 吸收带由分散在 Si 网格中孤立的 SiN 引起的, SiN 键仅有 Si 作为其最近邻和次近邻[11,12]。 840 cm^{-1} 和 960 cm^{-1} 两个吸收带比较复杂, Lucovsky 等认为 840 cm^{-1} 吸收带来自于 SiN 键其中 N 原子至少有一个 H 原子作为其次近邻; 而 Della Sala 等认为 840 cm^{-1} 和 960 cm^{-1} 两个吸收带分别由 $\text{Si}_3\text{-SiN}$ 和 $\text{N}_3\text{-SiN}$ 键引起的[13]。SiH 伸缩吸收 $2000\text{-}2200 \text{ cm}^{-1}$, 当 x 增加时, 峰位朝高波数移动, 在以前的文献报道中, SiH 吸收带可分解为 2000 cm^{-1} 和 $2100\text{-}2200 \text{ cm}^{-1}$ 两个分量。 2000 cm^{-1} 吸收带归因于没有 N 原子作为最近邻的孤立的 SiH 键的振动吸收, 它的强度随着 x 的增加而单调地减少。相反, $2100\text{-}2200 \text{ cm}^{-1}$ 吸收带随着 x 增至 0.5 而增加, 这表明有更多的 N-SiN 键形成[14,15], 当 x 大于 0.5 时, 这个带减小, 并伴随着 NH 键密度的迅速增加[16]。SiN, SiH 吸收峰的移动被认为是其键长的变化引起的。如果 $\text{H}_2\text{-Si}$ (Si_2) 键密度随着 x 值增加, $\text{H}_2\text{-Si}$ (SiN) 键也将会形成, 吸收峰位于 2140 cm^{-1}

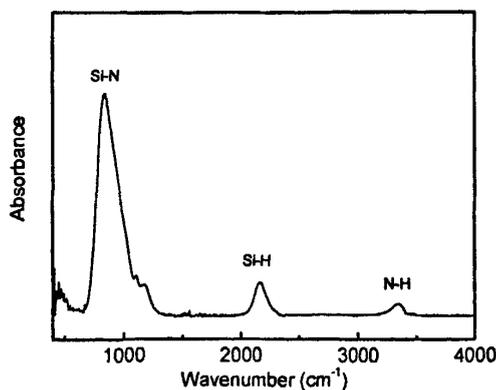


图 3.2 样品 NSN832 的红外吸收光谱

为了研究 a-SiN 薄膜的键合配置和微观结构随着氮含量的演变, 我们对样品进行了 FTIR 测量。利用 Beer-Lambert 定律, 将 FTIR 光谱变换为红外吸收光谱。

图 3.2 是一个典型的原始淀积样品 NSN832 的红外吸收光谱, $1400\text{-}1800 \text{ cm}^{-1}$ 和 $3500\text{-}4000 \text{ cm}^{-1}$ 的噪音信号来源于空气中水分子的振动, 840 cm^{-1} 附近处的强吸收峰对应于 Si-N 伸缩振动模, 对于 SiN 的局域键合配置相当复杂, Lucovsky 等认为 840

cm^{-1} 吸收带来自于 SiN 键其中 N 原子至少有一个 H 原子作为其次近邻; 而 Della Sala 等认为 840 cm^{-1} 吸收带由 $\text{Si}_3\text{-SiN}$ 键引起的[13]。S. Hawegawa 等认为 840 cm^{-1} 吸收带由 $\text{Si-N}(\text{Si}_2)$ 键引起的[14,16]。其它键相关的吸收峰有: 450 cm^{-1} 的 Si-N 对称伸缩振动模、 1180 cm^{-1} 附近的 N-H 摇摆振动模。SiH 伸缩吸收 $2000\text{-}2200 \text{ cm}^{-1}$, 在以前的文献报道中, SiH 吸收带可分解为 2000 cm^{-1} 和 $2100\text{-}2200 \text{ cm}^{-1}$ 两个分量。 2000 cm^{-1} 吸收带归因于没有 N 原子作为最近邻的孤立的 SiH 键的振动吸收, $2100\text{-}2200 \text{ cm}^{-1}$ 吸收带主要是因为 H-Si(Si_3)和 H-Si(SiN_2)键的振动吸收, 在 3350 cm^{-1} 附近的 NH 伸缩振动吸收带呈现出非对称的线型, 在低波数侧吸收带尾一直延伸到 3000 cm^{-1} , 这个非对称线型很可能是 NH 键中的 H 原子与近邻的 N 原子中的孤对电子形成的 H 键造成的, 即 $\text{N-H}\cdots\text{N}$ 。

3.3 透射谱法求 a-SiN_x 的光学参量

为了确定六个不同组分的非晶氮化硅样品的的光学常数, 利用 Lamda 900 紫外可见红外分光光度计, 测量了样品的透射谱, 测量波长范围从 250 nm 到 2500 nm。从透射谱上我们可以发现, 在红外波段, 由于样品和衬底对光的吸收很小, 透射率

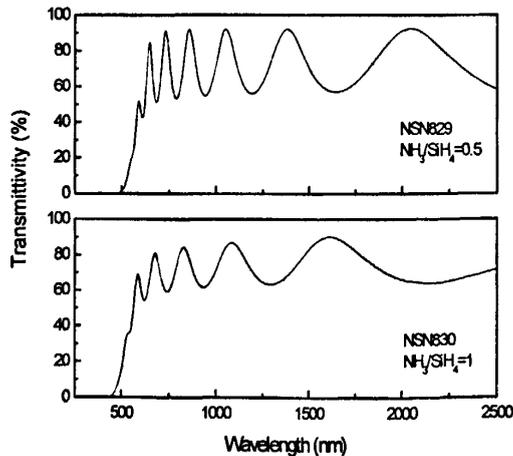


图 3.3 $\text{NH}_3 / \text{SiH}_4$ 比值为 0.5 和 1 薄膜的透射谱

极大和极小值基本上保持不变, 随着波长的缩短, 吸收变大, 因而透射极大值和透射极小值也相应减小。波长继续减小, 达到样品的吸收边, 和低于吸收边, 透射率急剧下降并变为零, 光一部分被反射, 另一部分被样品完全吸收掉。比较图 3.3, 3.4, 3.5, 可以发现随着 $\text{NH}_3 / \text{SiH}_4$ 比值从 0.5 到 8, 透射谱的振荡幅度逐渐减小, 这表

明随着氮含量的增加（或硅含量的减小），样品的折射率减小。而且透射率急剧下降沿也向长波方向移动，这是因为氮含量的增加，使得非晶氮化硅的光学带隙增加。

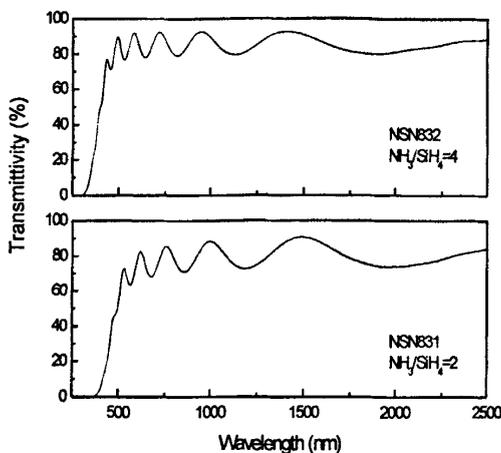


图 3.4 $\text{NH}_3 / \text{SiH}_4$ 比值为 2 和 4 薄膜的透射谱

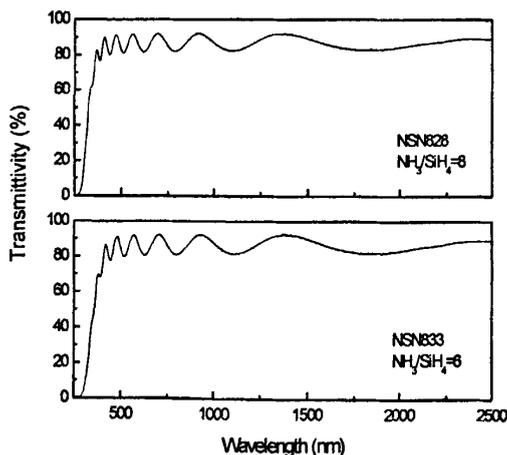


图 3.5 $\text{NH}_3 / \text{SiH}_4$ 比值为 6 和 8 薄膜的透射谱

对于厚度的测量，有很多方法，例如表面轮廓仪，干涉仪测量等，表面轮廓仪是一种机械的方法测量厚度，采用非常尖的探针在样品表面移动，探针起伏的高度差即为被测样品的厚度，但是探针对测量的影响很大，而且如果台阶处不陡峭，起伏平缓，超出探针的扫描范围，这种方法不再适用。而对于干涉仪测量厚度，测量精度与所用光的波长有关，且其精度仅能达到波长量级。折射率和吸收系数可根据透射谱和反射谱利用计算机迭代程序给出[18, 19, 20]。

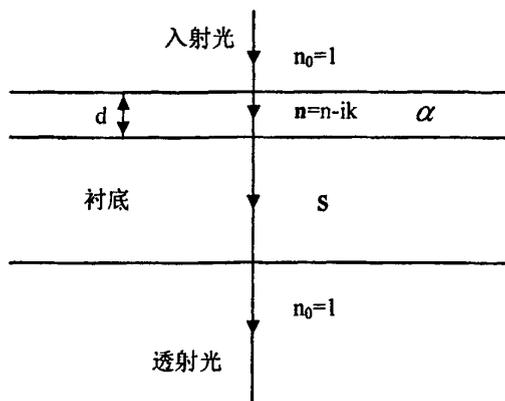


图 3.6 薄膜透射测量示意图

为了定量地确定薄膜的厚度、折射率和吸收系数，利用文献[17]中给出了一种仅用透射谱的简单方法可同时得到厚度、折射率、吸收系数，所得结果可精确到 1%。原理如上图所示，透射光 T 可表示为如下严格的形式

$$T = \frac{A'x}{B' - C'x + D'x^2} \quad (1)$$

其中

$$A' = 16s(n^2 + k^2) \quad (2a)$$

$$B' = [(n+1)^2 + k^2][(n+1)(n+s^2) + k^2] \quad (2b)$$

$$C' = 2[(n^2 - 1 + k^2)(n^2 - s^2 + k^2) - 2k^2(s^2 + 1)]\cos\varphi - 2k[2(n^2 - s^2 + k^2) + (n^2 - 1 + k^2)(s^2 + 1)]\sin\varphi \quad (2c)$$

$$D' = [(n-1)^2 + k^2][(n-1)(n-s^2) + k^2] \quad (2d)$$

$$\varphi = 4\pi nd/\lambda, \quad x = \exp(-\alpha d), \quad \alpha = 4\pi k/\lambda \quad (2e)$$

除强吸收区外，可令 $k = 0$ ，上述表达式简化为

$$T = \frac{Ax}{B - Cx \cos\varphi + Dx^2} \quad (3)$$

其中

$$A = 16sn^2 \quad (4a)$$

$$B = (n+1)^3(n+s^2) \quad (4b)$$

$$C = 2(n^2-1)(n^2-s^2) \quad (4c)$$

$$D = (n-1)^3(n-s^2) \quad (4d)$$

$$\varphi = 4\pi nd / \lambda, \quad x = \exp(-\alpha d) \quad (4e)$$

透射光干涉条纹的极大值和极小值分别表示为

$$T_m = \frac{Ax}{B - Cx + Dx^2} \quad (5a)$$

$$T_n = \frac{Ax}{B + Cx + Dx^2} \quad (5b)$$

T_m 和 T_n 为波长 λ 的连续函数, 因为折射率 $n(\lambda)$ 和 $x(\lambda)$ 是波长的函数, T_m 和 T_n 随波长变化的曲线是透射谱的包络线, 对任意波长 T_m 和 T_n 一一对应。在透明区, 他们的差值反映了样品和衬底的折射率差 $n-s$ 的大小, 在吸收区他们的差值表明样品吸收的强弱。对于透明区样品的吸收系数 $\alpha = 0$, $x=1$, 则公式 5a 和 5b 可简化为

$$T_m = \frac{2s}{s^2 + 1} \quad (6a)$$

$$T_n = \frac{4n^2s}{n^4 + n^2(s^2 + 1) + s^2} \quad (6b)$$

从上式中可分别求出衬底的折射率和样品的折射率。

在弱吸收区和中等吸收区 $\alpha \neq 0$, $x < 1$, 公式 5b 的倒数减去公式 5a 的倒数得

$$\frac{1}{T_m} - \frac{1}{T_M} = \frac{2C}{A} \quad (7)$$

把等式 4 带入上面的等式可求出样品的折射率

$$n = [N + (N^2 - s^2)^{1/2}]^{1/2} \quad (8)$$

其中

$$N = 2s \frac{T_M - T_m}{T_M T_m} + \frac{s^2 + 1}{2} \quad (9)$$

在强吸收区，干涉条纹消失，我们无法从透射谱上独立地求出折射率 n 和 x 值，只能用其他的方法得到。一旦知道折射率值，我们就可以由下式确定样品的厚度 d

$$d = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{2(\lambda_1 n_2 - \lambda_2 n_1)} \quad (10)$$

其中 n_1 和 n_2 是两个相邻干涉极大（或极小）所对应的波长 λ_1 和 λ_2 的折射率。去掉短波长处偏差大的厚度，然后对所得厚度值取平均，为提高所求厚度和折射率的精确度，利用最基本的干涉公式

$$2nd = m\lambda \quad (11)$$

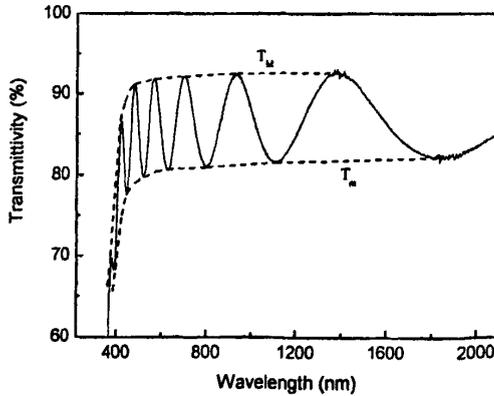


图 3.7 a-SiN 薄膜的透射谱

通过修正 m 的值 (m 取整数或半整数) 来进一步提高厚度和折射率的精度。按照上述方法我们得到了 a-SiN:H 样品的厚度和折射率。图 3.7 是样品 NSN 833 ($\text{NH}_3 / \text{SiH}_4$

= 6) 透射谱, 其中虚线 $T_{m'}$ 和 $T_{m''}$ 分别表示透射极大值和极小值。

表 3.1 给出了 NSN 833 样品透射谱中的一些参数和计算得到的样品的厚度和折射率。

λ (nm)	T_e	T_r	N	n_1	d_1	m	d_2	n_2
1385	0.9269	0.817	2.11453	1.89053		2	732.59867	1.87868
1107	0.9239	0.8155	2.11786	1.89268		2.5	731.10597	1.87698
928	0.9253	0.8123	2.1305	1.90082	731.74965	3	732.31737	1.88818
799	0.9229	0.8098	2.13353	1.90276	744.3924	3.5	734.85531	1.89665
704	0.922	0.8077	2.14011	1.90696	757.05662	4	738.34718	1.90988
629	0.9202	0.8059	2.14208	1.90822	766.50754	4.5	741.66119	1.91971
569	0.9188	0.8029	2.1512	1.914	763.30302	5	743.20626	1.92955
520	0.9148	0.7969	2.16534	1.92291	752.82185	5.5	743.66454	1.93972
					753 nm		737 nm	

表 3.1

按照同样的方法, 得到了其他组分的 a-SiN:H 样品的厚度和折射率, 其具体值由表 S3.1 给出。从表中可以发现, 对于不同的氨气和硅烷流量比, 样品的厚度出现明显的涨落, 造成该现象的原因可能是在生长过程中固定硅烷的流量, 而改变氨气的流量, 为了把腔内总气压维持在 280 mTorr, 改变了 Ar 气的流量, 从而改变了氨气

样品编号	NH ₃ /SiH ₄	厚度 (nm)	折射	生长时间(s)	淀积速率(A/s)
NSN829	0.5	774	2.80	5400	1.43
NSN830	1	684	2.42	5400	1.27
NSN831	2	714	2.11	5400	1.32
NSN832	4	727	1.97	5400	1.35
NSN833	6	737	1.90	5400	1.36
NSN828	8	740	1.86	5400	1.37

表 3.2

分压和 Ar 气分压。在表格最后一列给出了各个样品的淀积速率。样品的折射率随着 NH₃/SiH₄ 流量比的增加而增加, 从 1.86 到 3.8, 这说明了样品中硅氮组分发生了变

化，比值增加样品中的硅组分减小、氮组分增加。

为了确定不同组分的 a-SiN:H 样品的光学能隙，需要将透射谱转变成吸收谱。对透射谱取负对数， $\alpha d = -\ln T = -\ln(I/I_0)$ ，吸收谱除以样品的厚度就可得到材料的吸收系数 α ，根据 Tauc 公式 $(\alpha \hbar \omega)^{1/2} = K(\hbar \omega - E_{op})$ ，以 $(\alpha \hbar \omega)^{1/2}$ 对 $\hbar \omega$ 作图可得一近似直线如下图 3.8 所示，将此直线外推得到它在横轴上的截距，即可求得光学能隙 E_{op} 。从图 3.8 我们可以求出样品 NSN828 的光学能隙约为 3.60eV。利

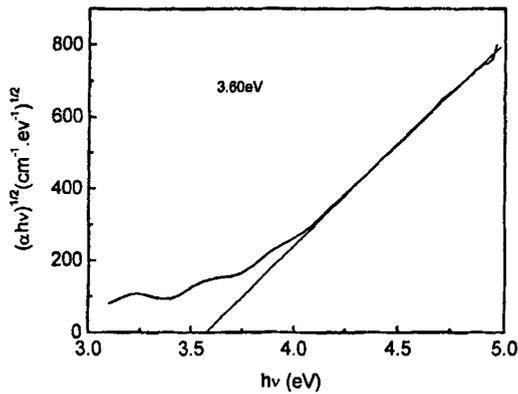


图 3.8 $(\alpha \hbar \omega)^{1/2}$ 与 $\hbar \omega$ 关系图

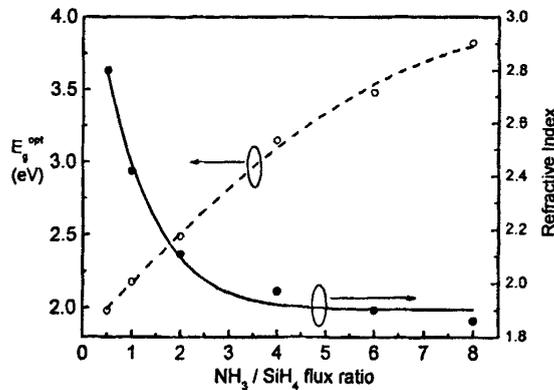


图 3.9 折射率、光学带隙与 NH_3/SiH_4 流量比关系

用同样的方法，也求出了其余五个 a-SiN 样品的光学能隙，图 3.9 给出了样品折射率、光学能隙随着 NH_3/SiH_4 流量比的变化趋势，从图中可以明显看出随着流量比的增加，折射率呈递减趋势从 3.8 降为 1.86，而光学能隙随着流量比的增加而增加，从 2.0eV 增加为 3.6eV。这表明 NH_3/SiH_4 流量比越大，样品中中的氮含量越高。

3.4 a-SiN_x 薄膜光致发光特性

为研究 a-SiN:H 发光特性, 进行了荧光光谱 (PL) 测量。PL 测量在室温下完成,

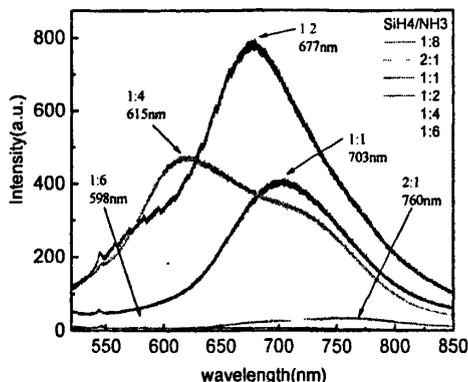


图 3.10 不同组分 a-SiN 光致发光谱

样品的衬底为双抛 Si, 激光拉曼光谱仪 Jobin Yvon Horiba HR800, 激发光源为 488 nm 的 Ar⁺激光。我们测得的 PL 光谱集中在红~红外波段。

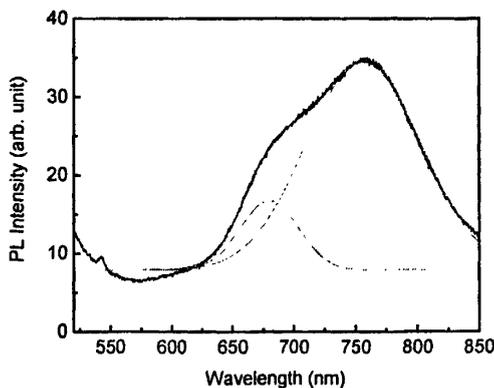
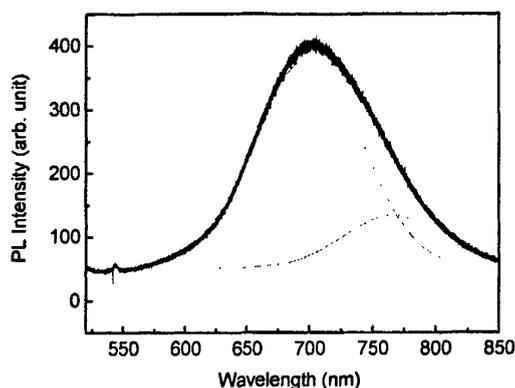


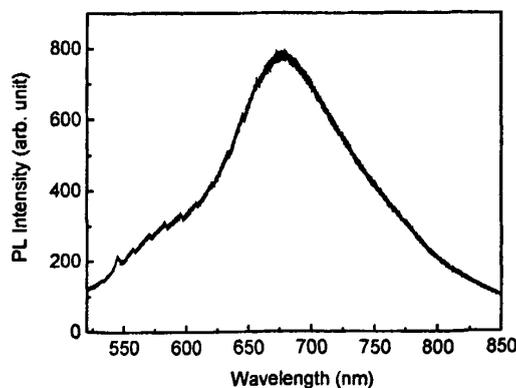
图 3.11 流量比 SiH₄/NH₃ = 2 氮化硅薄膜的发光谱和高斯拟合

图 3.10 给出了不同组分非晶氮化硅薄膜的室温光致发光谱。我们可以看到组分不同, 发光谱形明显不同, 发光峰位不同, 强度不同。图 3.11 给出了 NSN829 样品的荧光光谱。PL 谱上展现出一个比较宽的荧光峰, 明显呈现双峰结构, 为了进一步研究荧光特性, 我们尝试对图 3.11 所示的荧光谱进行高斯拟合, 高斯拟合的效果在图 3.11 中以虚线表示。我们发现该样品的荧光谱可以很好地用两个分别位于 675 nm

和 750 nm 的高斯波形来拟合。半高宽 (FWHM) 分别为 47nm 和 92nm; 文献[21] 中认为 a-SiN_x 中存在两种物相: 纯硅相和氮化硅相, 在原始淀积的样品中并没有观测到发光, 经过高温退火后, 发光峰在 675nm 附近, 作者把该发光峰归结为氮化硅中小的硅团簇发光。但是不同的是我们的原始样品就发光, 并且表现出明显的双峰结构, 随着氮组分的增加, 表现出同时朝短波方向移动。由于非晶氮化硅体系比较复杂, 其发光机制仍然存在非常大的争议, 确切的机制仍不清楚。对于氮化硅的

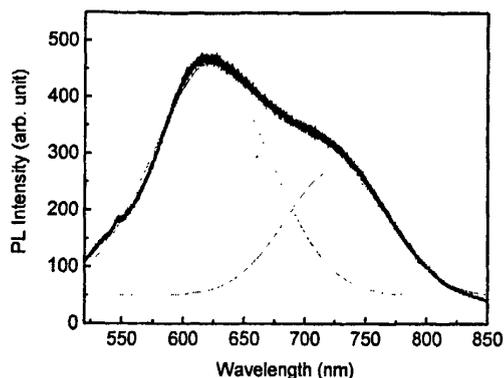


3.12 (a) 流量比 SiH₄/NH₃ = 1 氮化硅薄膜的发光谱和高斯拟合

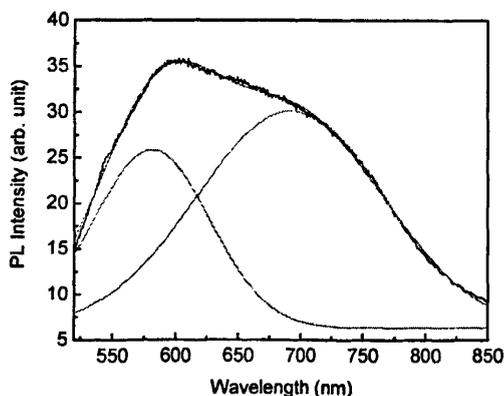


3.12 (b) 流量比 SiH₄/NH₃ = 1/2 氮化硅薄膜的发光谱和高斯拟合

发光机制存在如下的观点：1. 氮化硅的发光来自于其中的缺陷态的发光；2. 带间复合发光；3. 氮化硅中硅团簇的发光；4. 同时存在上面两种以上的发光机制。还有文献报道了与氧有关的发光机制存在。在我们的样品中，观测到两个发光峰，因此我们初步认为存在两种发光机制，短波长发光峰与硅的团簇有关，长波长发光峰与氮化硅中的缺陷有关。图 3.12 给出了其他组分的非晶氮化硅的光致发光谱，并对其进行了高斯拟合。



3.12 (c)流量比 $\text{SiH}_4/\text{NH}_3=1/4$ 氮化硅薄膜的发光谱和高斯拟合



3.12 (d)流量比 $\text{SiH}_4/\text{NH}_3=1/6$ 氮化硅薄膜的发光谱和高斯拟合

3.5 本章小结

采用 PECVD 的方法制备了不同组分的非晶氮化硅薄膜，我们通过控制硅烷和氨气的流量比获得不同光学常数的薄膜，利用透射谱获得了非晶氮化硅薄膜的折射率、

光学带隙，厚度，吸收系数等光学参数，这些参数是我们制备氮化硅光学微腔的所必需的。我们也测量了薄膜的发光性质，发现组分不同，他们的光致发光特性明显不同，即发光谱形，峰位，强度不同，当氮的含量增加时，发光峰发生蓝移，强度也由弱变强，然后再变弱。

参考文献

- [1] C.E. Morosanu, *Thin Solid Films* **65**, 171 (1980)
- [2] M.J. Powell, B.C. Easton, and O.F. Bill, *Appl. Phys. Lett.* **48**, 794 (1981)
- [3] S.M. Paasche, T. Toyama, H. Okamoto, and Y. Hamakawa, *IEEE Trans. Electron Devices* **36**, 2895 (1989)
- [4] D. Kruangam, W. Boonkosum, and S. Panyakeow, *J. Non-Cryst. Solids* **164-166**, 809 (1993)
- [5] F. Giorgis, C.F. Pirri, C. Vinegoni, and L. Pavesi, *J. Lumin.* **80**, 423 (1999).
- [6] F. Giorgis, C.F. Pirri, and E. Tresso, *Thin Solid Films* **307**, 298 (1997)
- [7] R.Karcher, L.Ley, and R. L. Johnson, *Phys. Rev. B* **30**, 1896 (1984)
- [8] S. Hasegawa, T. Tsukao, and P. C. Zalm, *J. Appl. Phys.* **61**, 2916 (1987)
- [9] S. Hasegawa, L. He, T. Inokuma, and Y. Kurata, *Phys. Rev. B* **46**, 12478 (1992)
- [10] S. Hasegawa, H. Anbutsu, and Y. Kurata, *Philos. Mag. B* **59**, 365 (1989)
- [11] G. Lukovsky, J. Yang, S. S. Chao, J. E. Tyler, and W. Cuzbatyj, *Phys. Rev. B* **28**, 3234 (1983)
- [12] S. Hasegawa, M. Matuura, H. Anbutsu, and Y. Kurata, *Philos. Mag. B* **56**, 633 (1987)
- [13] D. Della Sala, C. Coluzza, G. Fortunato, and F. Evangelisti, *J. Non-cryst. Solids* **77/78**, 933 (1985)
- [14] S. Hawegawa, M. Matsuda, and Y. Kurata, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 2211 (1990)
- [15] S. Hasegawa, H. Anbutsu, and Y. Kurata, *Philos. Mag. B* **56**, 633 (1987)
- [16] S. Hawegawa, L. He, and Y. Amano, and T. Inokuma, *Phys. Rev. B* **48**, 5315 (1993)

- [17] R. Swanepoel J. Phys. E: Sci. Instrum., **16**, 1214 (1983)
- [18] S. P. Lyashenko and V. K. Miloslavskii, Opt. Spectrosc. **16** 80-1 (1964)
- [19] J. Wales, G. J. Lovitt and R. A. Hill, Thin Solid Films **1** 137-50 (1967)
- [20] J. Szxyrbowski and A. Czapl, Thin Solid Films, **46** 127-37 (1977)
- [21] Y. Wang et al. Physica E **27**, 284 289 (2005)

第四章 硅基一维微腔中 a-SiN_x 薄膜和 nc-Si 量子点的发光特性

4.1 引言

把光功能元件集成在硅微电子上是材料研究最具挑战的课题。长久以来硅被认为不适合光电子应用，因为间接带隙的特征使发光效率很低，极大地阻碍了光电集成器件的发展和应用。在过去的几十年来，科研工作者致力于不同的方法去克服硅的这种缺点。多孔硅强的可见光发射[1]的发现激起了对低维硅系统和它们的发光性质的研究。Pavesi [2]小组利用离子注入到超纯的石英衬底或生长在Si衬底上的SiO₂，然后通过热退火制备镶嵌在SiO₂中的硅纳米晶。强的光致发光，峰位在800nm被观测到。采用变条带的方法获得了100cm⁻¹的光增益，其增益值可与III-V族半导体量子点的增益值相比拟，然而纳米硅大的尺寸分布仍旧是阻碍发光效率提高的一个关键问题。Si/宽带隙绝缘体，尤其是Si/SiO₂超晶格也受到的广泛的关注。Lockwood[3]小组研究了Si/SiO₂超晶格的发光特性，并观察到PL的量子限制效应。

最近的发现表明硅纳米晶具有光增益[2, 4]，但是仍存在许多问题，这极大阻碍了纳米硅在硅基光电子器件方面的应用。因为光谱的线宽较大，方向性不高，低的发光效率和较低的光提取效率，使得制备硅材料发光器件非常困难。

除了上面所述的通过能带工程的方法来改善硅的发光特性，另一重要的途径是利用微腔[5-14]或光子晶体[15]。光学微腔是研究光与物质相互作用最基本的工具。它通过改变周围电磁场的分布，从而改变电磁跃迁几率。微腔能够修饰光发射的线宽和空间分布，及辐射体辐射寿命等。

在本章中我们从光子晶体的角度设计了一维限制光学微腔，利用传输矩阵的方法计算了一维光子晶体 DBRs 的反射率和透射率，微腔的透射率和反射率，及其光子带隙，缺陷态方向的依赖性。我们采用了 PECVD 方法制备的全 SiN 材料的一维光子晶体微腔，剖面透射电子显微镜照片表明样品的厚度控制良好，层间的界面清晰，陡峭，平直。透射谱上可以看到光子晶体的带隙以及带隙中的缺陷态-腔共振态。微腔的光致发光谱中腔共振峰与透射谱中的透射极大位置相同，说明我们的微腔实现

了选模作用，对比有源层的光致发光谱，我们获得了光致发光强度增强两个数量级，和光谱线宽减小到几个纳米。我们也把 PECVD 生长结合激光晶化方法制备的 nc-Si/a-SiN 超晶格嵌入到光子晶体微腔中，也达到了光谱的增强和谱的纯化。

4.2 硅基 DBRs 和微腔的制备

我们的微腔样品是由不同组分的非晶氮化硅材料制备，非晶氮化硅等离子体增强化学气相淀积方法生长。非晶氮化硅薄膜通过分解硅烷，氨气和Ar的混合气体，其中Ar在混合气体中起到辅助辉光放电和维持总气压恒定的目的及减小淀积速率的目的，以便更好地控制薄膜的厚度。为了确定非晶氮化硅的生长速率和光学参数与 $\text{NH}_3 / \text{SiH}_4$ 流量比的关系，六种流量比的混合气体被用来制备不同组分的非晶氮化硅材料。样品分别淀积在Corning 7059玻璃衬底，Si和石英衬底上，在生长过程中，衬底被加热到 250°C ，淀积功率30W，腔的总气压维持在280mTorr。在制备不同组分氮化硅薄膜过程中，改变氨气的流量，而固定硅烷的流量为6sccm，通过调节Ar的流量

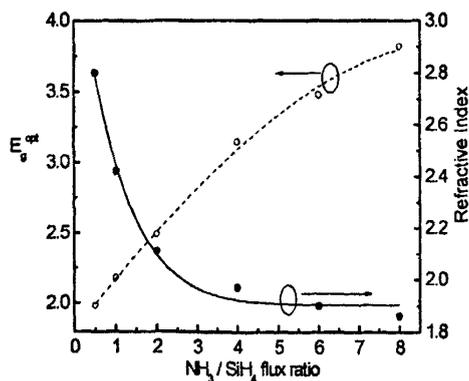


图4.1 折射率、光学带隙与气体流量比的关系

使腔总气压维持在280 mTorr。透射谱和吸收谱被用来确定非晶氮化硅薄膜的光学常数，如表格3.1所示。图4.1中给出折射率、光学带隙与气体流量比的关系曲线，实心和空心圆分别代表光学带隙和折射率的实验值，我们分别用实线和虚线拟合了实验数据。随着N含量的增多，光学带隙增加，而折射率降低。考虑到明显的折射率差和低吸收系数，我们采用了0.5和8的流量比制备一维光子晶体DBRs。在生长的过程中，

反应气体在这两个流量比之间周期性改变，获得一维光子晶体调制结构。为了获得陡峭的界面和需要的化学组分，在改变气体组分的过程中，反应气体在反应腔中的滞留时间远低于子层的生长时间。包含 $\lambda/2$ 腔长有源层对称的上下6周期DBRs的微腔生长条件与光子晶体分布布拉格反射镜条件相同。详细的参数如表格1所示。

如图4.2左图为我们微腔样品的示意图，由不同组分的氮化硅薄膜构成。为了得到微腔样品多层结构的界面陡峭程度，平整度，及其子层的厚度，对样品进行了剖面TEM分析，所示，从图中可以看出照片中子层界面陡峭、清晰、平直。中间最厚的为有源层，颜色深，厚度最薄的为DBRs高折射率子层，另一较厚的颜色浅的为DBRs低折射率子层。各子层的厚度均匀一致，从电镜照片中我们可以计算出各层的厚度，计算结果与所设计的厚度相同。

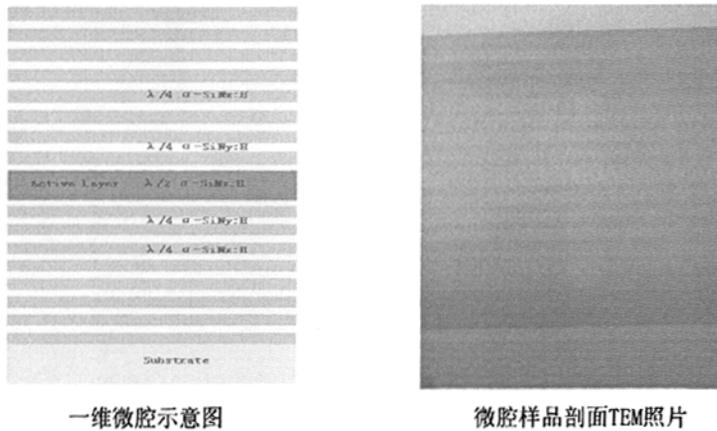


图4.2 微腔样品示意图和剖面TEM照片

4.3 DBRs 和一维微腔的透射谱分析

使用 Perkin-Elmer Lambda 900 分光光度计测量了生长的 6 周期光子晶体布拉格反射镜的透射谱，测量时光垂直于反射镜的生长方向。图 4.3 为所测到的 6 周期光子晶体的透射谱，从谱中我们能看到在 700nm 左右有一透射较小的宽的低谷，大约 250nm 宽，该范围就是光子晶体的禁带，因为短波长材料的吸收较大，左边的透射峰衰减很快。在禁带内最低透射率可达到 3%。

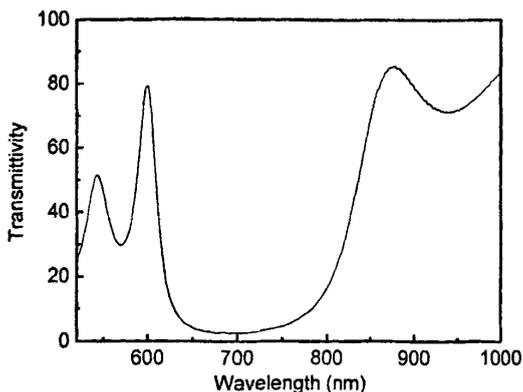


图 4.3 6 周期 DBRs 样品透射谱

我们测量了包含有源层和上下 6 周期 DBRs、对称的微腔样品的透射谱，谱中一宽的，低透射率的区域是一维光子晶体的禁带，在禁带中 710nm 左右有一透射共振峰，该峰对应光子晶体微腔的腔共振态，该透射峰的透射率约为 37.5%，如图 4.4 所示。

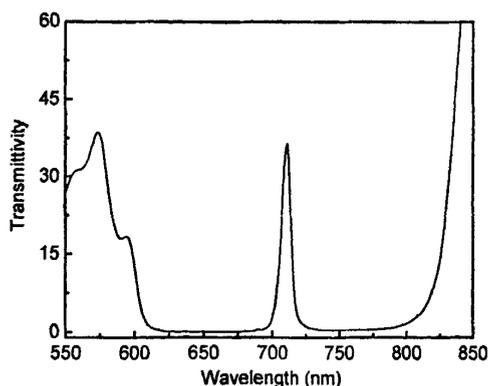


图 4.4 微腔样品透射谱

4.4 一维微腔中 SiNx 薄膜的光发射特性

使用 JY HR800 背散射微区拉曼光谱仪测量我们的光子晶体微腔样品，采用 488nmAr⁺激光器激发样品，激发和探测沿着垂直样品表面方向，通过同一透镜聚焦激发光和接受发射光。激发光被聚焦成约为 3 微米直径的光斑，激光器的输出功率为 25mW，达到样品上的功率约为 2.5mW。如图 3.10 是微腔样品的透射谱和 PL 谱，实线表示 PL 谱，在谱中有一尖锐的窄的发光峰位于 710nm 左右，该位置是微腔的

共振模式。虚线代表微腔的透射谱，微腔的共振 PL 峰与透射谱中的共振透射极小位置基本上一致。在 PL 共振峰两侧有两个强度较小的发光峰，从透射谱中知道，它们对应于光子晶体带边，由于光子晶体带边具有很高的态密度，因此发光较强，对于短波长一侧的发光峰，结构对该波长的光吸收要大于长波长侧对光的吸收，因此左

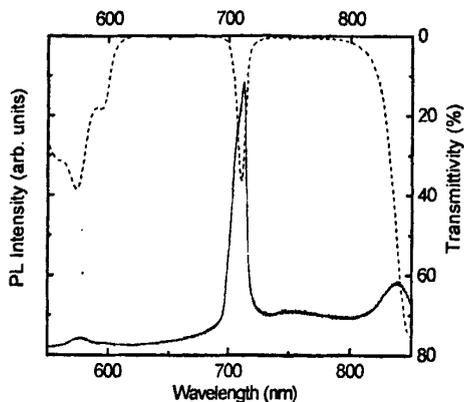


图 4.5 微腔样品透射谱和光致发光谱

边的峰弱，而右边的强。因为带隙中的光子态密度很低，非晶氮化硅有源层的发光被有效的抑制。腔模式处高的态密度，导致该波长的发光共振增强。从 PL 谱中，可以得到腔模的线宽 $\Delta\lambda=11$ nm。为了说明微腔对有源层发光的增强效应，我们把没有嵌入到微腔的 $\lambda/2$ 厚有源层和嵌入到微腔的 $\lambda/2$ 厚有源层的光致发光谱进行了比较，

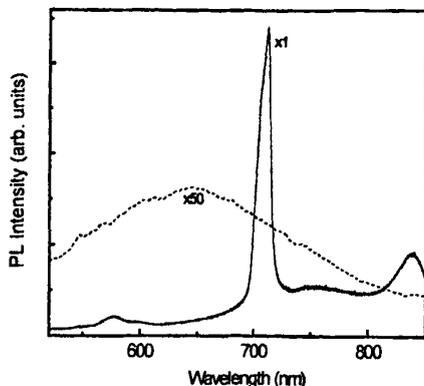


图 4.6 微腔和有源层的光致发光谱

如图4.11所示，虚线代表有源层的光致发光谱，其强度乘以50，而实线代表微腔中有源层的光致发光谱，两者比较可知，微腔导致了有源层发光强度增加近两个数量级，光谱的纯度得到很大提高，由200nm变为11nm的线宽。因而微腔效应在我们的样品中主要体现在两个方面：增强发光强度；使光谱线宽变窄。强度的增强与线宽窄化

是相互关联的，因为光子晶体抑制了其他波长的辐射跃迁，从而导致共振模式的增强。

在拉曼光谱仪上，我们还通过转动样品，测量腔共振模式的角分辨发光谱，由于仪器是背散射配置，激发激光和光发射的探测通过沿着相同的方向，即激发的方位角等于接收的方位角。我们可以看到光致发光谱中腔共振模式强度和线宽发生明显的变化，同时发光峰的位置朝短波方向移动。图4.7是不同角度时的光致发光谱，在 0° 时，共振峰的强度最强，线宽最窄， 10° 时强度减弱，线宽增加。 20° 时强度进一步减弱，线宽也进一步增加。达到 30° 时强度最弱。因为一维光子晶体微腔仅在周期排列的方向提供限制，而其他两个方向是自由的，不受限制。其他方向上模式的光场在此结构中是不稳定的，会造成光损失，导致腔品质因子的降低，因而使得共振峰线宽的增加和强度的降低。图4.8中给出了不同角度时腔共振发光峰的位置，图中明显看出随着角度的增加共振峰朝短波方向移动，从 0° 时的746nm蓝移到 30° 时的726nm，蓝移了20nm。图4.9中给出了共振峰强度、线宽随着角度的变化，强度随着角度的增大而降低，基本上呈线性变化趋势，而线宽则先增加，然后减小，我们认为可能是全反射造成一部分光发射无法被透镜收集到的缘故。

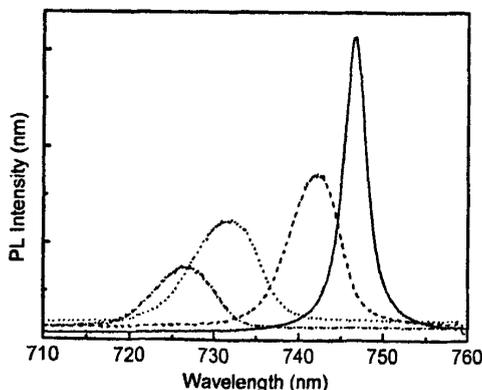


图 4.7 不同收集（激发）角微腔的光致发光谱

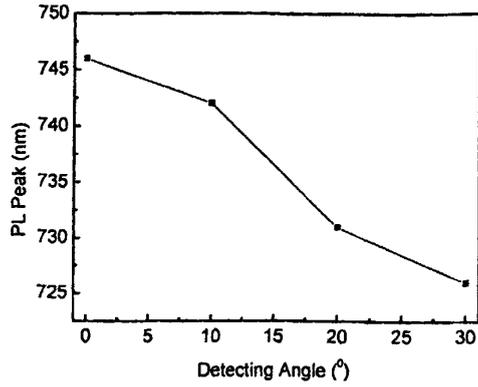


图 4.8 微腔的共振峰位置随角度的变化

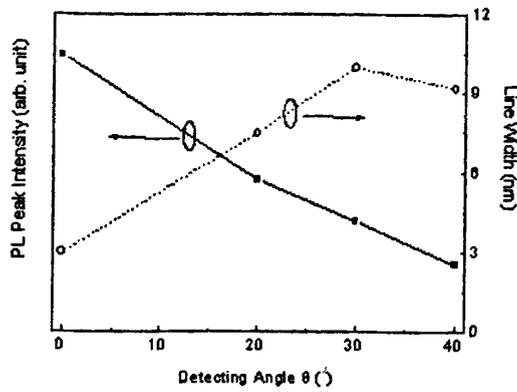
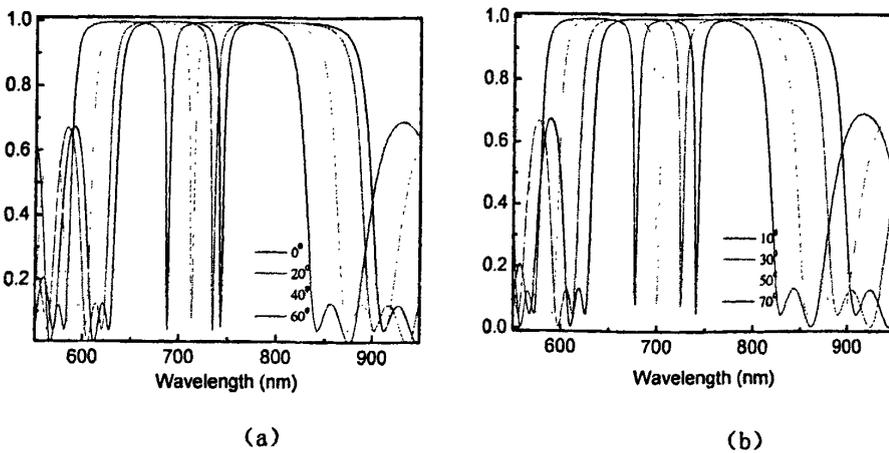


图 4.9 微腔的共振峰强度，线宽随角度的变化



我们用传输矩阵方法计算了微腔的反射谱和透射谱随着角度的变化趋势，与本征光子晶体相同，随角度的增加，带隙发生蓝移，并且随着角度增加蓝移加快，同

时光子晶体带隙的宽度也是逐渐减小，而反射极大和透射极小基本上保持不变。在带隙中腔共振态随着角度的增加，共振态朝短波方向移动，并且角度增大，移动加快。而变化角度时，谱中腔共振态的线宽和透射或反射值并没有发生变化，如图 4.10 所示。在图 4.11 给出了腔共振波长随着角度的变化趋势图，从图中可以明显看出随角度增加，腔共振波长朝短波蓝移。结果与测量结果一致。

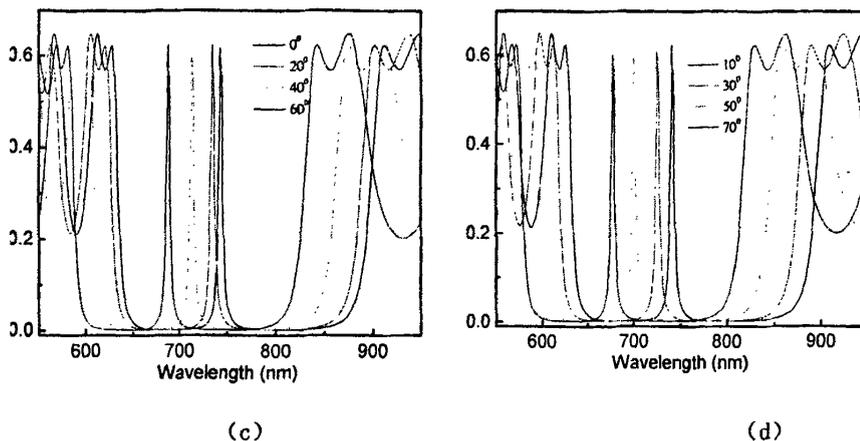


图 4.10 光子晶体微腔反射谱和透射谱随角度的变化

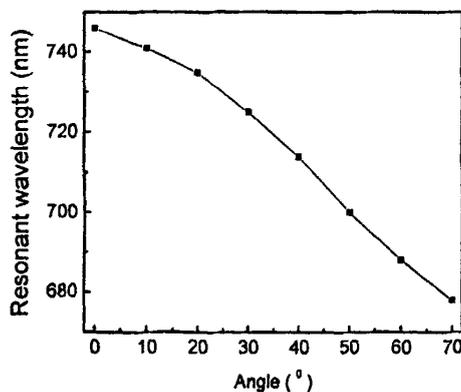


图4.11 共振波长随角度的变化

4.5 一维微腔中nc-Si量子点的光发射特性

我们采用 PECVD 方法制备的 a-Si / a-SiN₂ 超晶格，然后利用激光器辐照原始淀积的样品，晶化 a-Si 层制备 nc-Si / a-SiN₂ 超晶格。实验中我们使用 KrF 准分子脉冲

激光器(pulsed excimer laser)作为激光光源,激光器型号为 COMPLEX-200。其波长 $\lambda = 248\text{nm}$, 脉冲时延 30ns。KrF 准分子脉冲激光器与 Ar^+ 连续激光器相比有很多优点: 首先, 准分子脉冲激光位于紫外光区, 波长短, 易被薄膜材料吸收, 衬底吸收的能

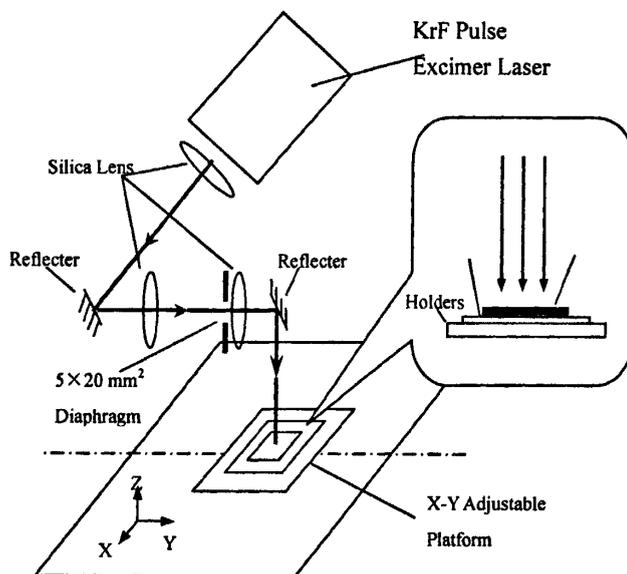
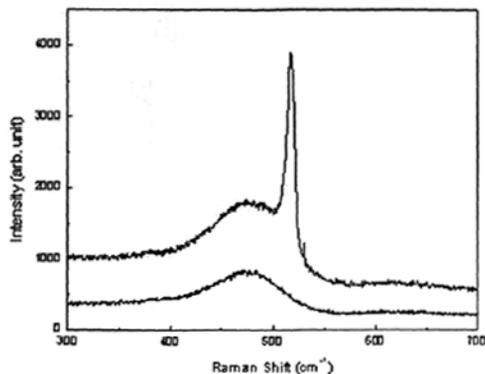


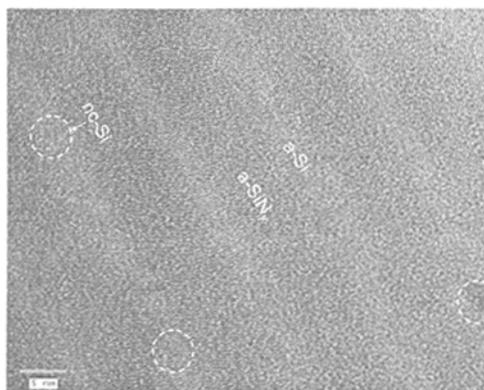
图 4.12 激光晶化实验的改进装置图

量很小, 并且其能量密度高, 可使薄膜表面达到很高温度。其次该方法可方便地实现大面积曝光; 由于曝光时间极短(几十 ns), 几乎不受机械振动的影响; 而且脉冲激光相干性好, 可作为很好的干涉结晶的光源, 实验光路图如图 4.12 所示。生长氮化硅子层时, 氨气和硅烷的流量比是 40sccm/5sccm, a-Si 子层厚度为 4nm, a-SiN 子层厚度为 6nm, 周期为 11.5, 两侧用 a-SiN 覆盖, 整个结构构成二分之一波长微腔的有源层, 248nm KrF 准分子激光器辐照, 形成 nc-Si / a-SiN_z 超晶格, 其中激光光斑为 2mm 乘 4mm, 功率 22mJ。利用激光拉曼谱和剖面 TEM 对样品中的微观结构进行了研究。

图 4.13 给出了原始淀积样品和激光晶化后样品的拉曼谱。在原始淀积样品的拉曼谱上有一较宽位置在 475cm^{-1} 峰, 这是 a-Si 多层结构的 TO 声子散射造成的, 然而经过激光退火后, 在 517cm^{-1} 处有一窄的峰, 这是 nc-Si 的 TO 声子模, 在短波数侧较宽的峰表明结构中形成了 nc-Si, 同时也存在非晶相 a-Si。根据拉曼谱我们可以估算出 nc-Si 的尺寸约为 4nm, 接近于我们所设计的 a-Si 子层的厚度。

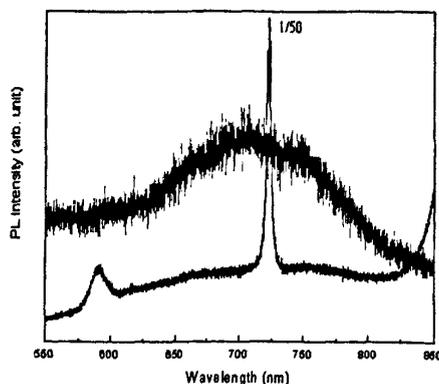


4.13 激光晶化前后超晶格样品的拉曼谱



4.14 激光晶化后超晶格样品的剖面 TEM 照片

图4.14是激光晶化后样品的剖面TEM照片，从照片中我们可以看到明显的晶格像，说明生成了n-Si，与拉曼观测的结构一致。我们还可看到晶化后，界面仍旧保持平坦，陡峭，而且晶化后a-SiN₂没有发生明显的变化。我们也研究了光学微腔对nc-Si / a-SiN₂超晶格的光致发光谱调制作用，nc-Si / a-SiN₂超晶格是采用PECVD方法制备的a-Si / a-SiN₂超晶格，然后利用248nm KrF准分子激光器晶化原始淀积的样品，晶化a-Si层制备nc-Si / a-SiN₂超晶格。利用激光拉曼谱和剖面TEM对样品中的微观结构进行了研究。图4.14是激光晶化后样品的剖面TEM照片，从照片中我们可以看到明显的晶格像，说明生成了nc-Si，与拉曼观测的结构一致。我们还可看到晶化后，界面仍旧保持平坦，陡峭，而且晶化后a-SiN₂没有发生明显的变化。

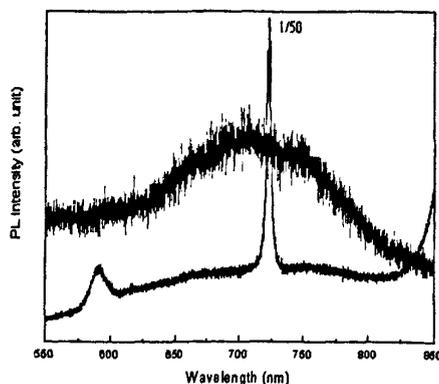


4.15 具有微腔和没有微腔有源层的光致发光谱

我们把 nc-Si / a-SiN₂ 超晶格放入到微腔中，测量了光致发光谱，如图 4.15 所示，具有明显噪声信号的谱线是 nc-Si / a-SiN₂ 超晶格的 PL 谱，这表明发光强度很弱，在 700nm 处有一个较宽的发光峰，约为 150nm。当 nc-Si / a-SiN₂ 超晶格嵌入到微腔中，PL 谱发生了明显的变化，在 725nm 处有一个很窄的，线宽约为 $\Delta\lambda=5$ nm，很强的发光峰，其强度除以 50，与单个有源层相比增强了近两个数量级，线宽也由 150nm 变为 5nm。其原因是光子晶体微腔对腔共振处辐射跃迁的增强和处于禁带内的光辐射跃迁被抑制，从而导致我们观察的光谱的增强和线宽的减小。

4.6 本章小结

采用了 PECVD 方法制备了一维光子晶体微腔，剖面 TEM 照片表明样品具有平直，清晰，陡峭的界面，各子层的厚度基本上与设计厚度相同。透射光谱中可以看到有一个透射极大的共振峰，是微腔的共振模式。利用光子晶体微腔效应：增强共振模式的光辐射跃迁，抑制位于带隙中光辐射跃迁，我们获得 a-SiN 发光层和 nc-Si / a-SiN₂ 超晶格材料光致发光强度增加近两个数量级和发光谱线宽缩窄到几个纳米，提高了谱的纯度。



4.15 具有微腔和没有微腔有源层的光致发光谱

我们把 nc-Si / a-SiN₂ 超晶格放入到微腔中，测量了光致发光谱，如图 4.15 所示，具有明显噪声信号的谱线是 nc-Si / a-SiN₂ 超晶格的 PL 谱，这表明发光强度很弱，在 700nm 处有一个较宽的发光峰，约为 150nm。当 nc-Si / a-SiN₂ 超晶格嵌入到微腔中，PL 谱发生了明显的变化，在 725nm 处有一个很窄的，线宽约为 $\Delta\lambda=5$ nm，很强的发光峰，其强度除以 50，与单个有源层相比增强了近两个数量级，线宽也由 150nm 变为 5nm。其原因是光子晶体微腔对腔共振处辐射跃迁的增强和处于禁带内的光辐射跃迁被抑制，从而导致我们观察的光谱的增强和线宽的减小。

4.6 本章小结

采用了 PECVD 方法制备了一维光子晶体微腔，剖面 TEM 照片表明样品具有平直，清晰，陡峭的界面，各子层的厚度基本上与设计厚度相同。透射光谱中可以看到有一个透射极大的共振峰，是微腔的共振模式。利用光子晶体微腔效应：增强共振模式的光辐射跃迁，抑制位于带隙中光辐射跃迁，我们获得 a-SiN 发光层和 nc-Si / a-SiN₂ 超晶格材料光致发光强度增加近两个数量级和发光谱线宽缩窄到几个纳米，提高了谱的纯度。

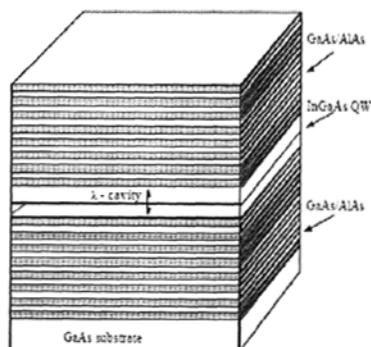
参考文献

- [1] Canham L T., *Appl Phys Lett*, 1045, 57 (1990):
- [2] L. Pavesi, L. D. Negro, C. Mazzoleni, G. Franzò, F. Priolo, *Nature*, 440, 408 (2000):
- [3] Z. H. Lu, D. J. Lockwood, J. M. Baribeau., *Nature*, 258, 378 (1995):
- [4] L. Khriachtchev, M. Räsänen, S. Novikov, J. Sinkkonen, *Appl Phys Lett*, , 79, 1249 (2001)
- [5] G. Bjork, S. Machida, Y. Yamamoto, K. Igeta, *Phys. Rev. A*, 44, 669 (1991)
- [6] T. Baba, T. Hamano, F. Koyama, K. Iga, *IEEE J. Quantum Electron*, 27, 1347 (1991)
- [7] M. Pelton, J. Vockovic, G. S. Solomon, A. Scherer, Y. Yamamoto, *IEEE J. Quantum Electron*, 38, 170 (2002)
- [8] G. Khitrova, H. M. Gibbs, M. Kira, S. W. Koch, A. Scherer, *Naturephysics*, 2, 81 (2006)
- [9] F. D. Martini, M. Marrocco, P. Mataloni, L. Crescentini, R. Loudon, *Phys. Rev. A*, 43, 2480 (1991)
- [10] F. D. Martini, G. Innocenti, G. R. Jacobovitz, P. Mataloni, *Phys. Rev. Lett.*, 59, 2955 (1987)
- [11] G. S. Solomon, M. Pelton, Y. Yamamoto, *Phys. Rev. Lett.*, 86, 3903 (2001)
- [12] I. Wilson-Rae, A. Imamoglu, *Phys. Rev. B*, 65, 235311-1 (2002)
- [13] H. D. Neve, J. Blondelle, R. Baets, P. Demeester, P. V. Daele, G. Borghs, *IEEE Photon. Technol.Lett.*, 7, 287 (1995)
- [14] R. E. Kunz, W. Lukosz, *Phys. Rev. B* 21, 4814 (1980)
- [15] E.Yablonovitch, *Phys. Rev. Lett.* 58, 2059 (1987)

第五章 利用“共形生长”技术研究光学微腔的横向限制效应

5.1 引言

光学微腔是指至少在一个方向上腔尺寸小至与谐振腔光波波长相比拟的光学谐振腔。微腔对光的限制引起了光子态密度(或模式密度)的再分布,按照微腔对光限制的维度可分为一维,二维和三维限制光学微腔.如腔距离为波长量级的平行平面腔称为一维(1D)限制微腔腔。三个方向都为波长量级的腔称为三维限



a 一维限制微腔

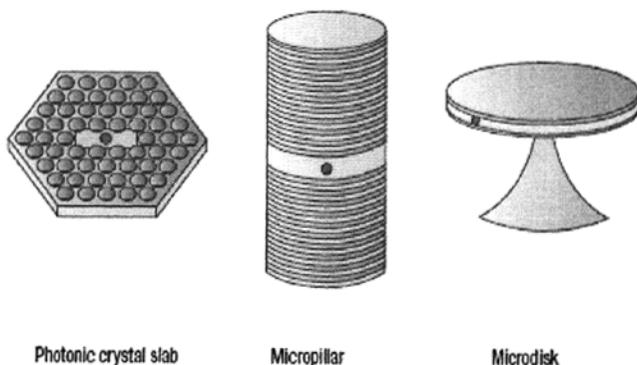


图 5.2 b 高维限制微腔示意图

制微腔(3D)。图5.2中给出了几种不同维度的微腔。图5.2 b中是得到最为详尽研究的

一种结构简单,易于制备的一维限制F-P腔,该结构已被成功应用于竖直腔面发射激光器(VCSEL),共振微腔发光二极管,共振增强光探测器,传感器以及用于腔对自发辐射的修饰,光与物质的强耦合效应等基础物理问题的研究。

光子晶体微腔具有非常小的模式体积和高的品质因子,近年来受到广泛的关注。国际上已有基于平板光子晶体微腔激光,发光二极管等有源器件的报道,在物理基础方面的研究也取得了重要的进展,在光子晶体微腔中观察到了光与物质的强耦合现象。这些进展的取得得益于当今微电子纳电子加工工艺的迅猛发展。图5.2b中微柱微腔和微盘微腔作为两种典型的微腔结构,同样吸引了科学家和工程师的注意力,尤其是微柱微腔以其制作简单,具有极大的理论研究价值和实际应用前景。

生长和纳米加工技术的迅速发展使得制备低维量子结构成为可能,此结构可以很好地控制电子态和光子态。光学微腔被认为是这种进步的重要产物之一[1, 2]。因为它们在基础物理研究和实际应用巨大潜力,光学微腔受到广泛而深入的研究,尤其是III-V 半导体材料微腔。光与电子跃迁的强耦合作用导致了显著的激子-光子相互作用效应[3, 4],在光学微腔中实现了自发辐射的增强和抑制[5-8]。利用三维限制微腔可获得非常高的自发辐射耦合因子[9],从而实现高效微腔发光二极管和零阈值激光器[10]。在低阈值微盘激光器观测到高阶耳语廊模式的激射[11],侧向限制面发射激光器的高阶横向限制模式的激射[12]等。

近年来,国际上研究了侧向限制半导体微腔,光谱中观测到离散的三维横向限制模式,其中竖直方向的限制由DBRs提供,刻蚀柱的侧壁全内反射提供横向限制[13-17]。在这些结构中发射体的自发辐射被耦合到完全分立的限制模式,呈现出有趣的现象,如柱形微腔中量子点寿命的降低[16]和方形微柱微腔中量子阱激子寿命的减小[14]。在强耦合情况下,量子阱激子与零维光子模式的相互作用,激子极化极元呈现出反交叉的色散关系和拉比振荡行为[15, 17]。

但是侧向限制微腔仍存在一些问题,如微盘微腔,微环微腔,微柱微腔等利用侧壁与空气界面全内反射提供三维限制,对于不满足全内反射的光会从侧壁的各个方向传播出去,而且粗糙的侧壁会引起光的散射损失,在刻蚀过程中会在侧壁引入缺陷,如悬挂键会充当非辐射复合中心,导致有源材料发光效率的降低[18]。

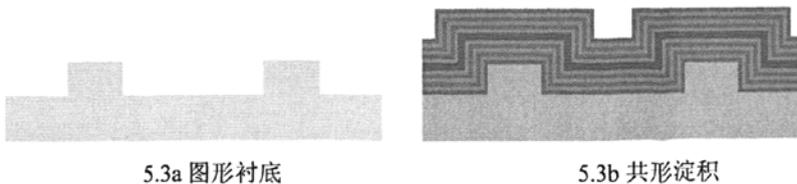
本章中我们采用了共形淀积的方法[19-21]制备了二维限制和准三维限制微腔,

与微柱微腔纵向 DBRs 光限制和侧壁全内反射的横向限制不同，共形淀积使我们的
一维周期长条结构的顶部，侧壁和底部同时生长了上下 DBRs 和腔有源层，长条顶
部的多层结构为我们需要的微腔部分，靠纵向的 DBRs 和侧面的 DBRs 提供二维限
制，沿着长条方向没有限制，对于该方向，我们可以把此结构构成横向 DBRs 限制
的一维脊形波导。二维孔阵列衬底上共形生长的样品，纵向和横向的 DBRs 构成了
准三维限制微腔。

用光学显微镜和扫描电子显微镜对样品的表面形貌进行了表征，给出了共形生
长的直接证据，剖面透射电子显微镜进一步证明了共形生长的发生。为了研究这两
种微结构模式和对光致发光谱的修饰，我们测量它们的发光谱，在光谱上现了一系
列分立的发光峰。这明显不同于一位限制平板微腔的情况。为证明这些分立的共振
峰来源于横向限制我们提出了改变收集半角的方法，直接证明了它们来自于横向限
制。

5.2 共形生长技术制备光学微腔

样品的制备包括衬底图形的制备和 PECVD 淀积两部分，我们制作了两种不同类
型的图形衬底，一种是周期为 2 微米的条槽图形，条宽约为 0.8 微米，槽深 0.6 微米；
另一种是二维圆孔阵列，周期为 2 微米，孔的直径约为 1.2 微米，深 0.6 微米。通过
光刻和反应离子刻蚀制备，在此不作详细的介绍，详细的过程在第五章给出，在此
仅仅给出 PECVD 淀积过程。图 5.3a 为图形衬底的示意图，b 图是共形生长示意图，
其中较厚的蓝色的为有源层，红绿色表示不同折射率的 DBRs 子层。横向限制由侧
壁上的 DBRs 提供。



制备好的图形衬底按照标准的清洗步骤进行清洗，经烘干后放入 PECVD 系统中
进行样品的淀积。我们的微腔样品是基于全硅基非晶氮化硅 (a-SiN) 材料制备而成，

非晶氮化硅由氨气 (NH₃) 和硅烷 (SiH₄) 与氩气 (Ar) 的混合气体在高功率射频信号的作用下分解, 其中 Ar 在混合气体中起到辅助辉光放电和维持总气压不变, 通过改变混合气体的流量比 $R = \text{NH}_3 / \text{SiH}_4$ 来得到不同组分的氮化硅材料。从而获得具有不同折射率的薄膜材料, 用来制备 DBRs 的调制结构和发光较强的氮化硅有源层。在淀积薄膜的过程中, 为了获得质量较好的薄膜, 衬底温度保持在 250 °C, 所用的射频功率是 30W。我们发现通过改变薄膜中的 N/Si 百分比, 相应的光学带隙, 吸收系数以及折射率都会改变。光学带隙与吸收系数相联系, 它们决定了吸收光的波长和对光吸收的强弱, 这是制备光学微腔的 DBRs 所必需考虑的, 光学带隙决定了腔共振波长的短波长极限, 吸收要尽可能小, 以提高腔的品质因子。而对于有源层, 则希望有强的吸收系数, 因强的吸收会有强的光发射。两种材料的折射率差确定了禁带的宽度和获得一定反射率所需的 DBRs 的周期数。我们希望材料的折射率要尽可能的大, 这样较少的 DBRs 周期数就可获得很高的反射率, 而对于不同组分的氮化硅材料, 折射率大意味着一种材料含较多的硅, 另一种含很少的硅, 含硅太多吸收就大, 因此必须对折射率和吸收合理选择, 以得到较高的腔品质因子。

我们的微腔样品有两个具有 6 周期上下 DBRs 及它们之间 1/2 波长的腔构成。DBRs 由两种高低折射率材料交替排列构成, 其中它们的折射率分别为 2.8 和 1.9, 所用的氨气和硅烷混合气体的比例是 0.5 和 8。有源层材料所用气体比例为 2, 折射率为 2.1。我们设计微腔的纵向共振能量约为 1.61eV, 表 5.1 给出了微腔材料的详细的参数。

	Refractive index	Effective Thickness	Optical gap
$\lambda/4$ α -SiHx	1.9	93nm	3.8eV
$\lambda/4$ α -SiHy	2.8	63nm	2.0eV
$\lambda/2$ α -SiHz	2.1	169nm	2.5eV

表 5.1 微腔材料的参数

图 5.4 为有源层光致发光谱, 在 1.77eV 附近有一较宽的发光峰, 发光峰的线宽约为 0.32eV。该发光层与微腔中的有源层相同, 即组分相同, 厚度也一样。这样做的目的是为了同微腔的发光谱相比较, 从中可以看到微腔对有源层光致发光的调制作用。

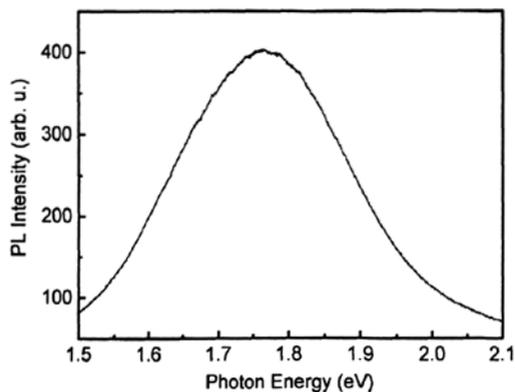
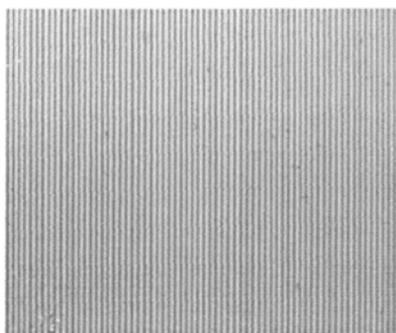
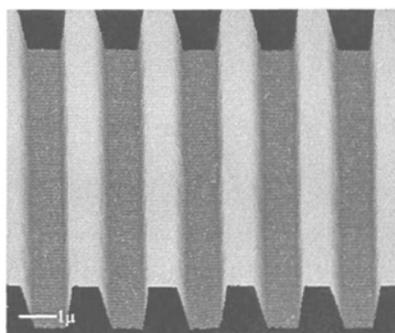


图 5.4 177nm 厚有源层 PL 谱

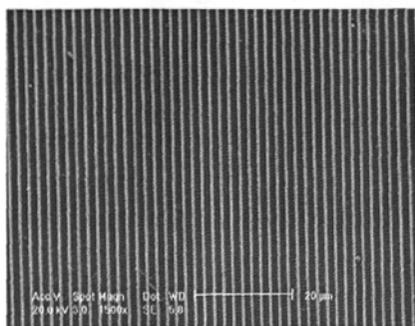
使用 OLYMPUS BX51M 光学显微镜、原子力显微镜和 PHILIPS XL30 扫描电子显微镜观察生长之前的图形衬底的表面形貌和生长后的形貌。图 5.5a 图是没有生长微腔样品之前一维周期结构的光学显微镜照片，其放大倍数是 1000 倍。b 图是其原子力显微镜照片，从图中可以看到一维周期结构的周期长度约为 2 微米，长条宽度约为 0.8 微米，深度为 0.6 微米左右，该周期结构具有良好的周期性，长条侧壁比较光滑，陡直，这是观察 PL 共振峰分裂所必需具备的条件。因为光滑的侧壁可使腔具有很高的横向限制品质因子。粗糙的侧壁会导致光的散射损失，会引起分裂峰的展宽，甚至使分裂消失。c 图是同一衬底的扫描电子显微镜照片，比较 a 和 c 图可发现条槽线度比例不同，这是因为光学显微镜分辨率较低，或调焦没有严格调准，导致光学显微镜照片失真。d 图是生长在图形衬底上的样品的 SEM 表面形貌图，可以看到样品的表面非常粗糙，像竹节似的，



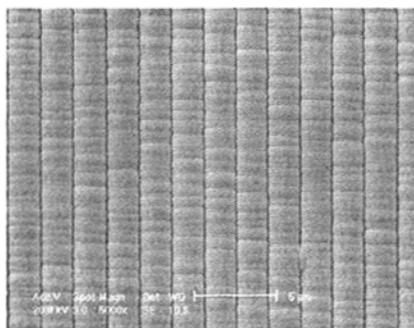
a 1D 图形衬底光学显微镜照片



b 1D 图形衬底原子力显微镜照片



c 1D 图形衬底扫描电子显微镜照片



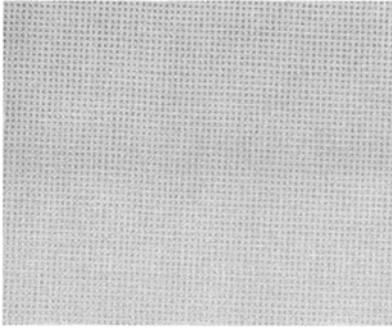
d 1D 共形生长样品扫描电子显微镜照片

图 5.5 1d 周期结构生长前后显微照片

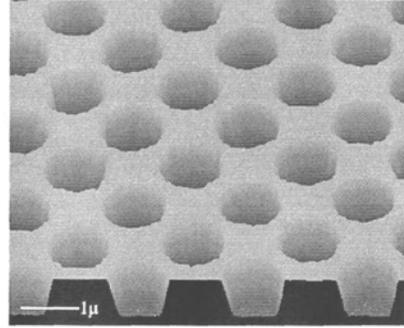
这是由于长条图形衬底的侧壁像锯齿似粗糙不平，侧壁生长使槽基本上变为一条条狭缝从图中可以量出长条的宽度约为 2 微米。由于侧壁粗糙不平，导致光的散射严重，从 PL 谱上没有看到一系列分立的共振峰，即没有因为横向限制导致腔模式的分裂。而对于侧壁比较光滑的样品，我们的确观察到腔模式的分裂，因此侧壁的粗糙程度对于模式的分裂起着非常重要的作用。

图 5.6 给出了我们的具有二维圆孔阵列衬底的样品生长前后的显微照片，a 图是放大倍数为 1000 倍的光学显微镜照片，照片中颜色较深的为圆孔；b 图为原子力显微镜照片，图片中可明显看出衬底表面比较光滑，孔侧壁的相对比较陡直，相对衬底表面较粗糙，根据照片，孔的周期为 2 微米，孔的半径为 0.7 微米，深度约为 0.6 微米。c 图是生长后样品的 SEM 显微镜照片，相对于一维周期结构上生长的样品表面，二维样品表面很光滑，这与二维图形衬底的表面光滑有关。与衬底相同的是生长样品后图形的周期长度没有改变，仍旧是 2 微米，不同的是孔的直径变小了，这表明沿着孔的侧壁发生了生长，在孔的边缘，多层膜样品发生了弯曲，并向孔中延

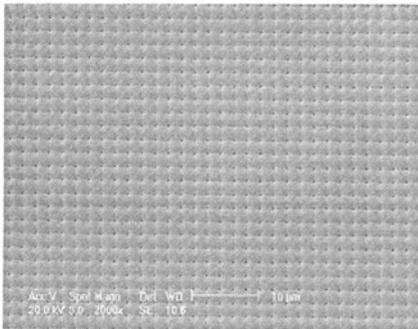
伸。d 图是沿样与样品法线方向 80 度视角观察的 SEM 照片，因为重力的作用，使得样品有较小的滑动，导致照片中的图形发生了变形，从照片中，我们明显发现样品的侧壁有生长发生，并且侧壁被很好地钝化，表面比较光滑。



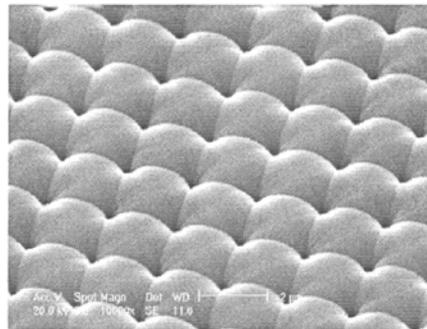
a 2d 周期结构光学显微镜照片



b 2d 周期结构原子力显微镜照片



c 2d 周期结构扫描电子显微镜照片



d 2d 生长样品扫描电子显微镜照片

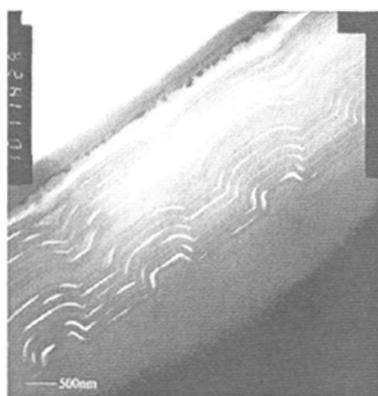
图 5.6 1d 周期结构生长前后显微照片

上面的显微镜照片仅仅给出了生长样品表面形貌，我们对于样品的多层结构之间的界面情况，尤其是沿侧壁生长的 DBRs 和有源层的结构仍然一无所知。这些内部信息的获得须借助于剖面透射电子显微技术。

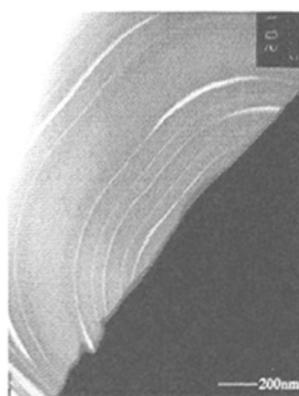
图 5.7 给出了淀积在图形衬底上的氮化硅二维、准三维光学微腔剖面 TEM 照片，从图中可以看到氮化硅多层结构包裹在图形上，形状与衬底图形形似，而且在每处薄膜厚度均匀一致，表明了共形生长的存在。a 图是生长在一维条形结构上的二维限制微腔，6 周期的上下 DBRs 和有源层可从图中明显区别出来，嵌在上下 DBRs 之间有源层的厚度是 177nm。微腔的多层结构与衬底图形有着明显的相似性，尤其是最初生长的几层薄膜，这说明通过共形生长的方法来制备纵向和横向限制是切实可行

的。在图 a 中由于长条的高度不大，因此侧壁生长的可为有源层提供横向限制 DBRs 周期数很少，要获得足够大的横向限制，要求图形的高度足够大，基本上等于整个多层膜的 1/2 厚度是图形的最佳高度。

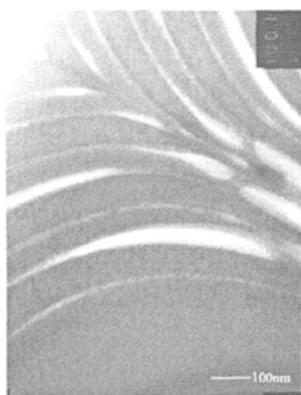
图 5.7 b 中为孔之间平台上的微腔部分，在图片中较厚的有源层，三周期底部 DBRs 和两个周期的顶部 DBRs 可从 TEM 中明显区别出来。平台的中间区域，样品仍旧保持平板微腔的特征，但是在孔的边缘，微腔发生了变形，并延伸到孔中。c 图中为孔中部分样品的剖面 TEM 照片，在孔中我们可以看到两个几乎陡直的 DBRs，它们充当相邻的微腔的反射镜。因此要获得大的横向限制，必须要求图形陡直的侧壁，和足够的高度。



a 二维微腔剖面电子显微镜照片



b 准三维微腔孔之间部分剖面电子显微镜照片



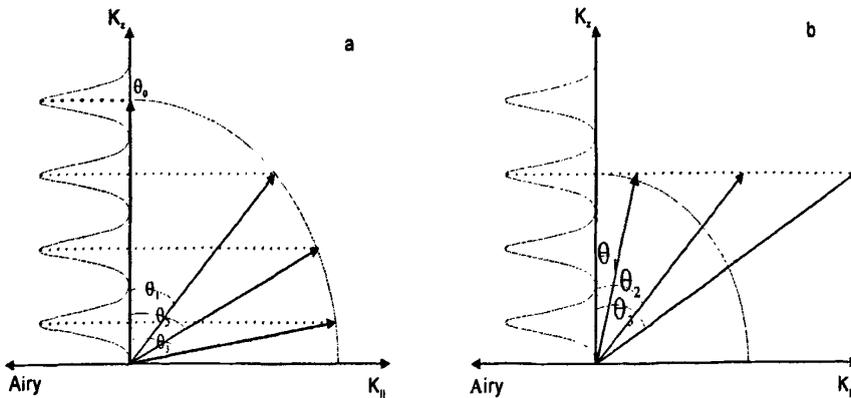
c 准三维微腔孔中部分剖面电子显微镜照片

图 5.7 二维、准三维微腔剖面电子显微镜照片

5.3 横向限制微腔光发射特性研究

在第三章中，一维掺杂光子晶体形成了一维限制 F-P 微腔，腔模式表现出明显的角度依赖性，即腔共振模式随着探测角度的增加发生蓝移。因此根据腔模式的角分布特征，把它们定义为 on-axis 腔模和 off-axis 腔模。在以前的报道中[22, 23]，对于 on-axis 腔模的研究较多，而 off-axis 腔模的影响经常被忽略。对于量子点和分子，也许这是恰当的，因为他们的线宽非常窄。但是一些固态材料作为微腔的有源层，发射线宽很大，必须考虑 off-axis 腔模的影响。

为了解光场的空间分布，我们定性地描述微腔的模式结构。微腔的色散关系可以表示为 $\Phi_T(k, \theta) + \Phi_B(k, \theta) + 4\Phi_C(k, \theta) = 2m_c\pi$ ，其中 $\Phi_T(k, \theta)$ ， $\Phi_B(k, \theta)$ 和 $\Phi_C(k, \theta)$ 代表与上下 DBRs 和有源层有关的相移。为了简化上面的关系是也可表示为 $2kL \cos(\theta) = 2m_c\pi$ ， m 代表腔模阶数， L 是有效腔长。公式变形为 $2k_z L = 2m_c\pi$ ， z 轴是样品表面法线方向。该公式的物理意义是波矢的 z 分量满足上述关系式的为腔模。该表达式有两个方面的含义：波矢 $|\vec{k}|$ 确定的情况下，传播方向可以为任意中方向，只要满足腔色散关系，它们为腔共振模，用 $(\theta_n, n)_k$ 表示。其中 n 取 1 到 m_c 之间的整数。腔模 $(0, n)_k$ 是 on-axis 共振腔模，而其他的是 off-axis 共振腔模。图 5.8 (a) 给出了腔模在波



5.8 波矢空间中腔模和理想的Airy函数

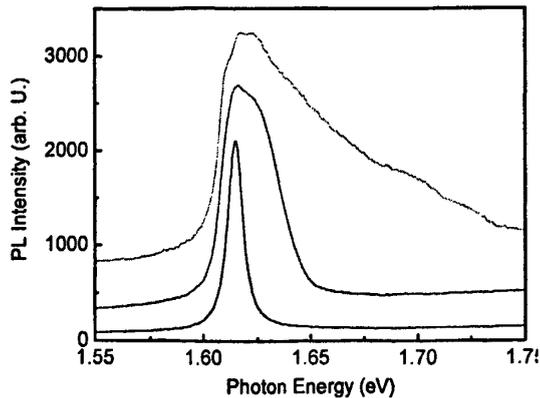
矢空间的分布和 Airy 函数，其中 θ_1, θ_2 和 θ_3 表示不同 off-axis 腔模的传播方向。

色散关系另一种含义是： n 确定的情况下，波矢满足色散关系的模式为腔模，用 $(\theta, k)_n$ 来表示， θ 的取值范围为 $[0, \pi/2)$ 。5.8 (b)，给出了连续 off-axis 模的空间分布。对于 $(\theta_n, n)_k$ 模，沿着微腔法线方向收集光发射信号，如果收集半角较小时，很少的 off-axis 模被收集，当增大收集半角时，被收集的 off-axis 模增加，这仅仅会增强腔共振模的强度，而不会展宽共振峰的线宽，因为这些模具有相同的频率。而对于连续 off-axis modes $(\theta, k)_n$ ，收集半角增大，这些模式会造成共振峰的展宽。如单纵模微腔，就属于第二种情况。

对于一维光子晶体微腔，纵向限制导致纵向波矢 k_0 的量子化，横向是自由的，因而横向平面内波矢分量 k_{\parallel} 可连续取值。一维光子晶体微腔共振模式能量可表示为 [26, 27]:

$$E_{ph} = \frac{\hbar c}{n} \sqrt{k_0^2 + k_{\parallel}^2} \quad (1)$$

其中 $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ 为微腔纵向共振模波矢量。通过利用不同数值孔径的透镜，改变收集半角，测量了一维微腔光致发光谱。首先我们使用了较小数值孔径 0.25（相应的收集半角为 14.5° ）的透镜接收微腔的光发射信号，得到如图 5.9 种黑线所示的 PL 谱，图中的两侧对称的发光峰是腔共振峰；然后变换数值孔径为 0.5（收集半角为 30° ）的透镜探测，PL 谱如图 5.9 种红色的曲线所示，发光峰仍旧呈现出单峰特征，同小的收集



5.9 用不同收集半角得到的光致发光谱

半角得到的 PL 谱相比, 共振峰不在对称, 在高能量侧被展宽了, 这是因为收集半角的增加导致更多的 off-axis 模被收集, 即具有更大平面内波矢 $|\vec{k}_\parallel|$ 的模被收集, 这些模式具有更高的能量, 因此 PL 谱在高能量侧被展宽。进一步增大数值孔径 0.9 (收集半角为 65°), 共振峰在高能量一侧进一步展宽。

我们的二维限制和三维限制微腔, 将导致平面内沿限制方向的某些波矢 k_\parallel 量子化, 不同于横向自由的一维光子晶体微腔平面内波矢 k_\parallel 可连续取值, 而限制将使波矢 k_\parallel 取一系列分立值, 这将在光谱上出现一系列分立的共振峰, 改变收集半角将引起共振峰数目的变化。明显不同于一维限制的单峰结构。

横向限制微腔的腔共振能量可以表示为如下关系式[24, 25]:

$$E_{ph} = \frac{\hbar c}{n} \sqrt{k_0^2 + k_x^2 + k_y^2} \quad (2)$$

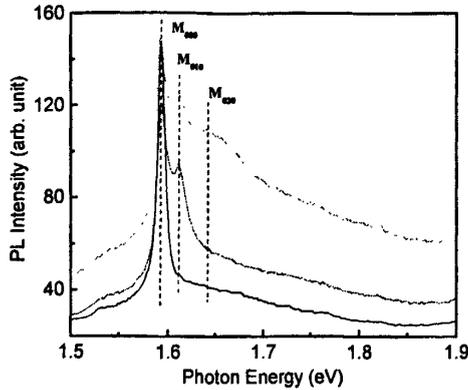
其中 $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ 表示垂直腔的波矢量, 量子化的波矢量分量 k_x 和 k_y 取下面离散数值

$$k_{x,y} = (m_{x,y} + 1) \frac{\pi}{L} \quad (3)$$

这里 L 是横向限制尺寸。我们用符号 M_{m_x, m_y, m_z} 来定量的描述这些光学限制模式, m_z 为纵向量子数, $m_{x,y} = 0, 1, 2, \dots$ 为横向量子数, 每个量子数代表该方向出现电场波节的数目。利用上面的限制模式能量的表达式和横向限制尺寸, 就可确定模式的能量位置, 及其对应的模式。

我们测量了生长在一维周期条槽结构上的共形生长的二维限制微腔光致发光谱, 长条的侧壁 DBRs 提供横向限制, 沿着长条方向是自由的, 因此是二维限制微腔。我们首先采用大的数值孔径的透镜收集光发射信号, 如图 5.10 绿色曲线所示, PL 谱上出现了三个分立的共振峰, 我们认为这是横向限制导致的共振峰的分裂, 为了验证该结论, 采用较小数值孔径的透镜, 发现最高能量的共振峰消失了, 再进一步减小透镜的数值孔径, 结果次高能量的发光峰消失了, 这些共振峰表现出明显的角度依赖性, 如图中红色和黑色曲线所示。共振峰的消失是因为采用较小数值孔径的透镜相当于对谱进行了空间滤波, 没有收集高阶限制模式, 这直接证明了分立峰是由

于腔的横向限制导致的。为进一步证明此结论，利用公式 (2) 计算了三个共振峰的



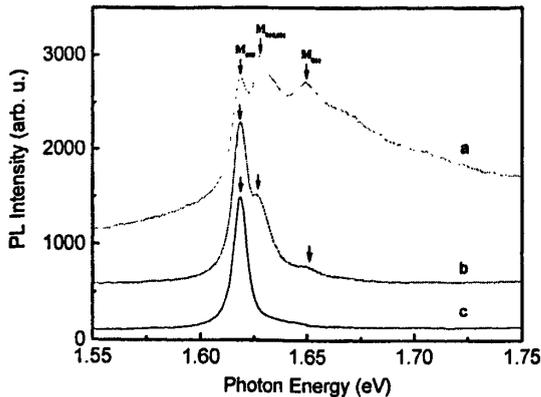
5.10 条宽 0.8 微米 1d 周期结构上二维微腔 PL 谱

能量位置，结果同 PL 谱上共振峰的位置符合的很好，其中横向尺寸是从 SEM 照片中得到的约为 1.8 微米。如表 5.2 所示。

	M_{000}	M_{010}	M_{020}
测量值 (eV)	1.592	1.613	1.651
计算值 (eV)	1.592	1.617	1.658

表 5.2 二维微腔限制模测量值和计算值

利用上述同样的方法，我们得到了准三维微腔的 PL 谱，在光谱上也观察到因为横向限制产生的模式的分裂，如图 5.11 所示。横向限制来自于孔中的 DBRs 限制，



5.11 2d 周期结构上准三维微腔 PL 谱

相邻孔之间光不受限制，因此为准二维限制微腔。考虑到限制部分的尺寸有一个分布，我们取横向限制有效长度是 2 微米，利用公式 (2) 计算了模式的能量位置，与光谱中分立峰的位置符合。模式和能量位置见表 5.3 所示。

	M_{000}	M_{010}	M_{011}
测量值 (eV)	1.618	1.628	1.650
计算值 (eV)	1.618	1.633	1.656

表 5.2 准三维微腔限制模测量值和计算值

5.4 本章小结

与文献报道中制备横向限制微腔的方法不同，采用共形生长的方法，在一维条槽周期结构和二维圆孔正方格子阵列的图形衬底上共形淀积了二维限制和准三维限制光学微腔。用光学显微镜，原子力显微镜，扫描电子显微镜，及剖面透射电子显微镜证明了共形生长的发生。横向限制导致光致发光谱共振峰分裂成三个共振峰：二维微腔模式分别为 M_{000} , M_{010} 和 M_{020} ；准三维微腔模式分别为 M_{000} , M_{010} (M_{001}) 和 M_{011} ，利用改变收集半角的 PL 谱测量方法给出了直接证据，并根据限制模式能量公式计算了它们的能量，与光致发光谱上的峰位符合的相当的好。

参考文献

- [1] E. Burstein and C. Weisbuch, *Confined Excitons and Photons: New Physics and Devices*, Plenum, New York, 1995.
- [2] C. Weisbuch and J. Rarity, *Microcavities and Photonic Bandgaps: Physics and Applications*, Vol. 324 of *NATO Advanced Studies Institute, Series E: Applied Sciences* Kluwer, Dordrecht, 1996.
- [3] C. Weisbuch, M. Nishioka, A. Ishikawa, and Y. Arakawa, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3314 (1992)
- [4] R. Houdré, C. Weisbuch, R. P. Stanley, U. Oesterle, P. Pellandini, and M. Illegems, *Phys. Rev. Lett.*

- 73, 2043 (1994)
- [5] P. Goy, J. M. Raimond, M. Gross, and S. Haroche, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1903 (1983)
- [6] R. G. Hulet, E. S. Hilfer, and D. Kleppner, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2137 (1985)
- [7] G. Björk, S. Machida, Y. Yamamoto, and K. Igeta, *Phys. Rev. A* **44**, 669 (1991)
- [8] T. Yamauchi and Y. Arakawa, *Appl. Phys. Lett.* **58**, 2339 (1991)
- [9] G. Björk, S. Machida, Y. Yamamoto, and K. Igeta, *Phys. Rev. A* **47**, 669 (1993)
- [10] F. De Martini, H. Heitmann, Y. Yamamoto, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 4451 (1988)
- [11] R. E. Slusher, A. F. J. Levi, U. Mohideen, S. L. McCall, S. J. Pearton, and R. A. Logan, *Appl. Phys. Lett.* **63**, 1310 (1993)
- [12] K. L. Lear, K. D. Choquette, R. P. Schneider, Jr., and S. P. Kilcoyne, *Appl. Phys. Lett.* **66**, 2616 (1995)
- [13] J. M. Ge´rard, D. Barrier, J. Y. Marzin, R. Kuszelewicz, L. Manin, E. Costard, V. Thierry-Mieg, and T. Rivera, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 449 (1996)
- [14] J. P. Reithmaier, M. Rohner, H. Zull, F. Scha´fer, A. Forchel, P. A. Knipp, and T. L. Reinecke, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 378 (1997); B. Ohnesorge, M. Bayer, A. Forchel, J. P. Reithmaier, N. A. Gippius, and S. G. Tikhodeev, *Phys. Rev. B* **56**, R4367 (1997)
- [15] J. Bloch, F. Boeuf, J. M. Ge´rard, B. Legrand, J. Y. Marzin, R. Paniel, V. Thierry-Mieg, and E. Costard, *Phys. Rev. E* **2**, 915 (1998)
- [16] J. M. Gerard, B. Sermage, B. Gayral, B. Legrand, E. Costard, and V. Thierry-Mieg, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1110 (1998)
- [17] T. Gutbrod, M. Bayer, A. Forchel, J. P. Reithmaier, T. L. Reinecke, S. Rudin, and P. A. Knipp, *Phys. Rev. B* **57**, 9950 (1998)

- [18] J. M. Gerard, D. Barrier, and J. Y. Marzin, in *Quantum Optics in Wavelength Scale Structures*, edited by J. Rarity and C. Weisbuch, NATO ASI Series Kluwer, Dordrecht, 1996.
- [19] S. Osono, Y. Uchiyama, M. Kitazoe, K. Saito, M. Hayama, A. Masuda, A. Izumi, H. Matsumura, *Thin Solid Films*, **430**, 165–169 (2003)
- [20] Dennis M. Hausmann, Philippe de Rouffignac, Amethyst Smith, Roy Gordon, Douwe Monsma, *Thin Solid Films*, **443**, 1–4 (2003)
- [21] Qi Wang, Scott Ward, Lynn Wedvilas, Brian Keyes, Errol Sanchez and Shulin Wang, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 338 (2004)
- [22] A. Serpenguzel, S. Tanriseven, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 1388 (2001).
- [23] V. Ballarini, G. Bbarucca, E. Bennica, C. F. Pirri, C. Ricciardi, E. Tresso, F. Giorgis, *Phys. E* **16**, 591 (2003).
- [24] J. P. Reithmaier, M. Rohner, H. Zull, F. Schafer, A. Forchel, P. A. Knipp, and T. L. Reinecke, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 378 (1997); B. Ohnesorge, M. Bayer, A. Forchel, J. P. Reithmaier, N. A. Gippius, and S. G. Tikhodeev, *Phys. Rev. B* **56**, R4367 (1997)
- [25] J. Bloch, F. Boeuf, J. M. Gerard, B. Legrand, J. Y. Marzin, R. Planel, V. Thierry-Mieg, and E. Costard, *Phys. Rev. E* **2**, 915 (1998)

第六章 硅基三维微腔的光调制特性

6.1 引言

各种半导体微腔结构被用来提供三维光限制。为了显著增强自发辐射，这些腔必须有小的模式体积和相对高的品质因子。微盘微腔由圆盘谐振腔和底座构成，圆盘直径为几个微米，厚度小于1个微米；支撑底座直径小于1个微米，有几个微米高。微盘的模式为耳语廊模。因全内反射，光环绕盘的边缘传播[1-5]。文献[5]报道了InAs量子点微盘（直径为2微米）的品质因子高达12000。然而因微盘表面不完美所造成的散射，光在各个方向会泄漏出去，引起光的散射损失。在制备微盘的过程中会在表面引入缺陷，从而导致非辐射复合，降低有源材料的发光效率。而且我们很难把光耦合到有用的方向。微球微腔如同微盘微腔一样利用全内反射原理把光限制在微球的某一圆平面内。模式为耳语廊模。微球微腔也可以获得非常高的品质因子。微球微腔也存在表面散射损失和有效耦合出来的问题。

近年来，引起广泛关注的是光子晶体带隙材料或称为光子晶体[6-11]。光子晶体是尺寸为光波长量级的介电材料在空间周期性排列结构。光在这种结构中会发生Bragg散射，表现出能带和能隙结构。通过适当的晶体设计，在任意方向某波段的光不能在晶体中传播，该波段成为光子带隙，这类似于半导体中电子的带隙。如同在半导体中，晶体结构中的缺陷将导致带隙中引入局域态。例如光子晶体中的空位被介电材料填充，光被局域在该缺陷位置。这样一个缺陷就构成了一个三维光子晶体光学微腔，并具有很小的模式体积。

实际上，制备高品质因子的三维光子晶体很难尤其是随意引入缺陷。二维光子晶体因易于制备和随意引入缺陷得到深入研究[12, 13]。量子点辐射能够有效耦合到二维光子晶体单缺陷模中[14, 15]。这种结构的缺点是增加辐射模式的耦合，导致极低的品质因子。到目前为止很难同时获得高的品质因子和小的模体积，而且光的提取效率不高。

文献中[16]制备了一种更简单的结构。光子晶体提供某一方向的光限制，而单模波导提供其他两个方向的光限制。例如在脊形波导上刻蚀一排孔就形成这种结构。

另外一种比较简单的方法是平板 DBRs 微腔刻蚀成微柱。该结构构成一短圆柱形波导。通过半导体-空气界面的全内反射来限制光。DBRs 构成一维光子晶体，夹层构成光子晶体的缺陷。

从上世纪 90 年代初就对这种微柱微腔进行了研究，当时的目的是降低激光器的阈值电流[17]。然而实验受到量子阱有源区的限制，载流子在辐射复合之前，有相当多的载流子在微柱刻蚀表面处的缺陷发生非辐射复合。直到自组织量子点生长技术的发展，使得载流子与微柱表面隔离成为可能，腔的模式结构才获得深入的研究[18, 19]。在不同尺寸和横截面的微柱[20]及耦合微柱[21]观测到三维模式。实现了单一三维限制模式的激射[22]。与其它类型的三维微腔相比，微柱微腔主要的优点在于它们的辐射图形[23, 24]。来自于圆柱形微柱微腔基模或最低能量模式的光近似于高斯光束，这样可有效地耦合到光纤，探测器或其他的光学元件。

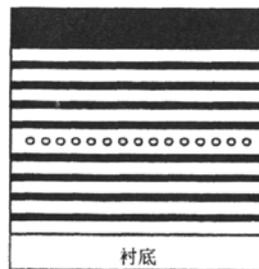
6.2 自上而下方法制备三维限制微腔

6.2.1 自上而下方法

下面以示意图的形式给出微柱微腔的详细制备过程。



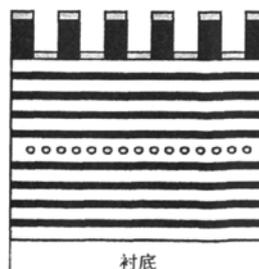
(a) PECVD 方法制备的平板 QDs 微腔



(b) 旋涂光刻胶，前烘



(c) 曝光、显影和坚膜



(d) 蒸铝

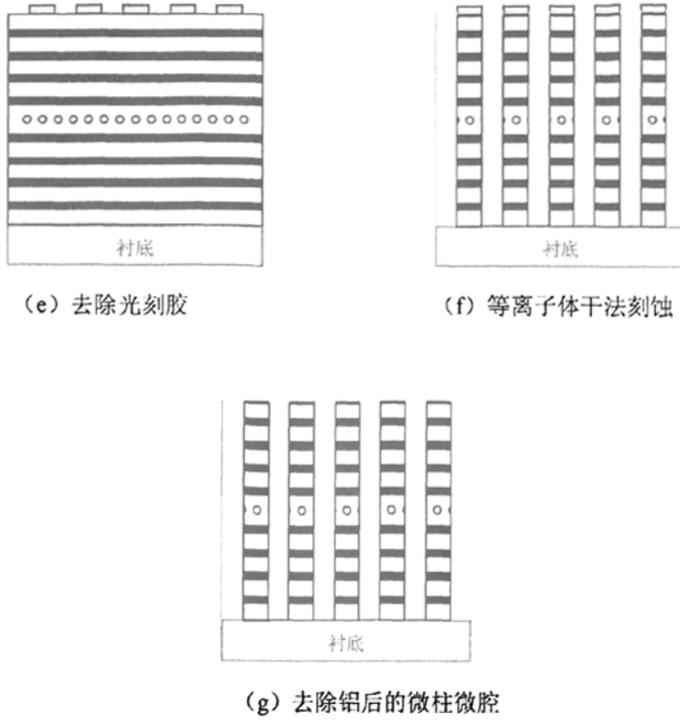


图 6.1 自上而下方法制备微柱微腔过程示意图

在刻蚀的过程中，会引入玷污和缺陷，这些缺陷会造成载流子的非辐射复合，从而降低有源层的发光效率。特别是有源层为体材料和量子阱（或超晶格）载流子会在微柱侧壁缺陷非辐射复合。自组织量子点生长技术的应用，可有效地把载流子限制在量子点中，从而与缺陷分离，但是仍然会引起注入载流子的非辐射复合。为进一步提高微柱侧壁质量，通常还采用湿法腐蚀的方法降低缺陷和提高侧壁的光滑程度。

6.2.2 制备和样品表面形貌分析

用扫描电子显微镜观察微柱微腔的表面形貌。扫描电镜样品要求样品具有好的导电性，我们的样品是不同组分的氮化硅多层薄膜构成，绝缘体，因此在样品表面蒸镀上一层 40nm 厚的一层金膜。图 6.2 (a) 和 (b) 是我们采用自上而下方法制备的微柱微腔的扫描电子显微镜照片，从图中可以看到方形柱和圆形柱的横向尺寸约为 2 微米，柱的侧壁比较陡直，但侧壁较粗糙，柱的台面和衬底很脏，这是因为刻蚀过程中产生的聚合物所致，还有可能是光刻胶没有充分去除。对于圆形图形，形

状没有发生畸变；而方形图形的四个角被圆滑，可能是曝光过程中光的衍射造成的。在照片中，分别有两个黑色的条纹，这是电子束打在样品上时间过长引起的。

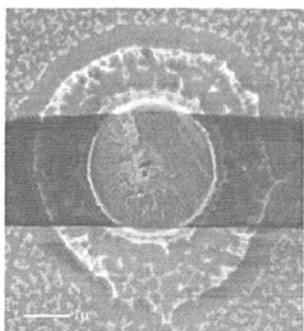


图 6.2 (a) 圆形微柱微腔 SEM 照片

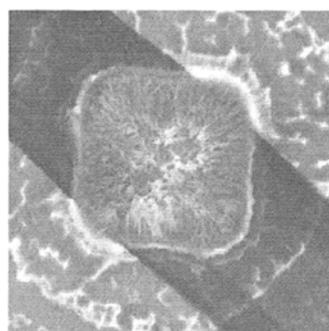


图 6.2 (b) 方形微柱微腔 SEM 照片

6.2.3 三维微腔光发射特性的分析

为研究已制备的微柱微腔的限制模式，对发光谱的调制，及评价该微腔的品质。因透射光谱和通常的光致发光谱很难使探测光有效地耦合到该结构中，同时微区探测也存在一定的难度。一种微区探测行之有效的方法是微柱微腔中引入与腔共振相匹配的具有较宽发射带的发光材料，然后利用电致激发，可探测该结构的模式结构。因为样品不导电，而且对于非晶氮化硅的掺杂效率很低，文献对此的报道比较少，对于我们的样品无法采用该方法。我们采用了微荧光光谱技术，把具有较宽发射谱的非晶氮化硅发光层嵌入到微腔样品中作为光学探针，利用微腔对有源层光致发光谱的调制来探测该微结构所允许的模式。

图 6.3 是采用自上而下方法制备样品的 PL 谱，横坐标对应光子能量，纵坐标为光发射的相对强度。从图中可以看到在 1.8eV 左右有一非对称的较宽的发光峰，此峰的形状与平板微腔采用大的数值孔径的透镜收集得到的发光谱相似，不同的是该发光峰相对于平板情况发生了蓝移，并且在高能量侧，有些台阶。这些台阶对应于微柱微腔的横向限制模式，因为纵向和横向限制品质因子不高，及大的数值孔径透镜的使用导致共振峰的展宽，使限制模式分裂不明显。利用 2.34 式，我们确定了这些峰所对应的的模式，如图 6.4 所示。

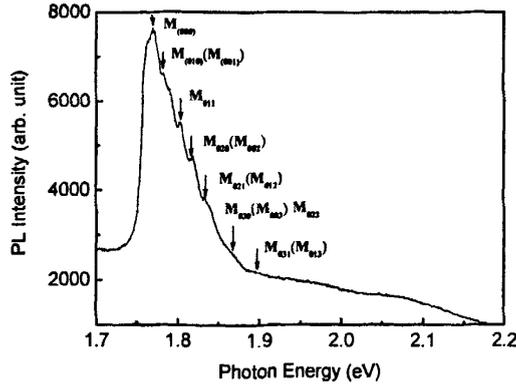


图 6.3. 横向尺寸 2.0 微米方形微柱微腔 PL 谱

模式	M_{000}	$M_{010}(M_{001})$	M_{011}	$M_{020}(M_{002})$
测量值(eV)	1.770	1.783	1.803	1.820
计算值(eV)	1.770	1.786	1.805	1.818
模式	$M_{021}(M_{012})$	$M_{030}(M_{030})$	M_{022}	$M_{031}(M_{031})$
测量值(eV)	1.833	1.860	1.868	1.887
计算值(eV)	1.836	1.860	1.866	1.878

表 6.1 横向限制模测量值和计算值

在表 6.1 中列出了微柱微腔横向限制模式的测量值，该值从图 6.3 光致发光谱中获得，计算值中腔的横向尺寸为 2 微米，有源层的折射率为 2.1。比较测量值和计算值，我们可以发现两者符合的较好。

为了提高微柱微腔侧壁的质量，我们调整了曝光参数，显影及其刻蚀参数。图 6.4 为横向尺寸为 1.8 微米的方形微柱微腔的光致发光谱，在高能量侧，可以看到四个明显的峰和一个台阶，它们对应于微腔的横向限制模式 M_{000} , M_{010} (M_{001}), M_{011} , M_{020} (M_{002}), 其中括号中的模式与外面的模式具有相同的能量，它们是简并的。基模 M_{000} 的强度最强，而且线宽很窄约为 0.0045eV，说明该模式的腔品质因子很高。对于其他三个模式，强度依次减弱，线宽递增。我们认为随着模阶数的增加，模式纵向和横向限制变差，即品质因子减小，导致模式强度变弱和线宽变窄。

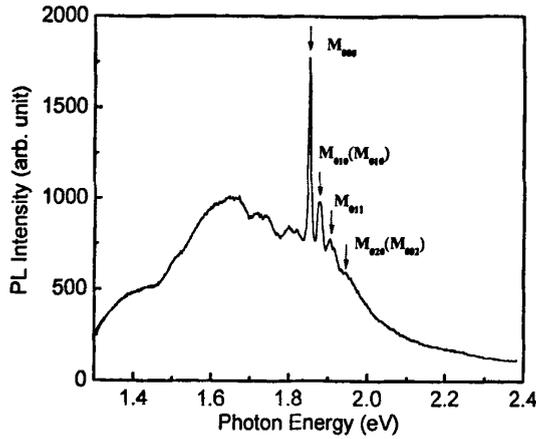


图 6.4 横向尺寸 1.8 微米方形微柱微腔 PL 谱

我们还研究了微柱微腔光致发光的低温特性，该试验是在 Jobin Yvon Horiba HR800 微区拉曼光谱仪配备的液氮冷却的低温设备上进行的，最低冷却温度可达到 $-193\text{ }^{\circ}\text{C}$ ，温度控制精度达到 $0.1\text{ }^{\circ}\text{C}$ 。样品放在低温腔中，腔上有一个玻璃窗口，通过该窗口探测样品。样品台为一可以在 XY 平面内移动的平台。测量过程中，要通过具有一定厚度的玻璃窗口，100 倍透镜焦距太短，无法聚焦在样品上，我们采用了具

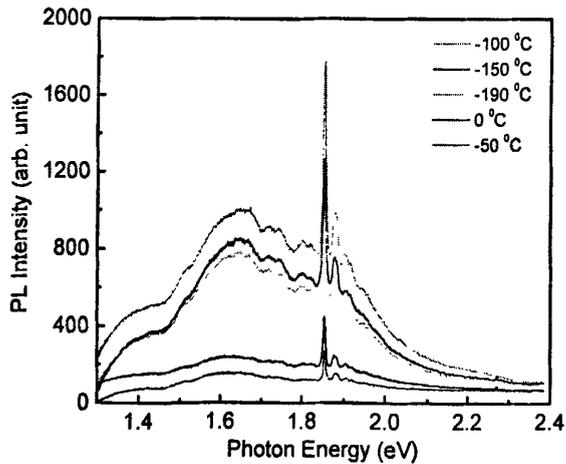


图 6.5. 横向尺寸 1.8 微米方形微柱微腔不同温度的 PL 谱

有较长焦距的 50 倍透镜。该透镜具有较小的数值孔径，导致高阶横向限制模式无法收集到，最重要的是不满足全反射条件的高阶模从侧壁传播出去，因此在 PL 谱中仅能观察到 4 个低阶模，相对图 6.4 的 PL 谱，横向限制模明显减少。同时，采用较小

数值孔径的透镜，也会使各个模式的线宽变窄。

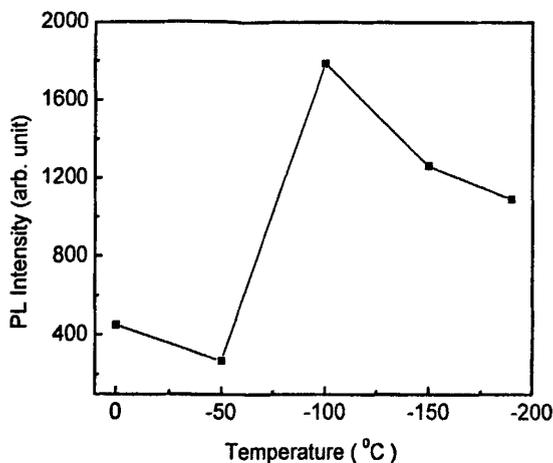


图 6.6. 基模 M_{000} 强度对温度的依赖关系

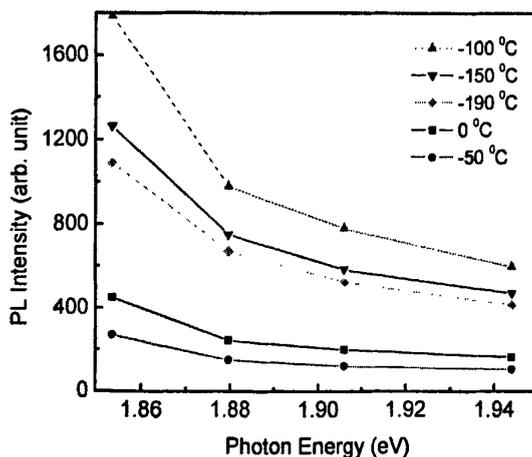


图 6.7 不同横向限制模式强度随温度的变化

图 6.5 给出不同温度下的 PL 谱，从图中可知随着温度的降低，强度的变化呈现出明显的非线性行为：从 0°C 到 -50°C 相对强度降低， -50°C 到 -100°C 增加到最强，并且变化幅度最大，然后随着温度的降低，强度逐渐减小。图 6.6 中给出了基模 M_{000} 在不同低温下的强度变化曲线。图 6.7. 给出模式 M_{000} ， M_{010} (M_{001})， M_{011} ， M_{020} (M_{002}) 在不同温度下强度的变化趋势。在不同的温度下各个模式的线宽基本上相同。对于模式的位置，除了在 -50°C 模式发生蓝移外，基本上不变，如图 6.8 所示。

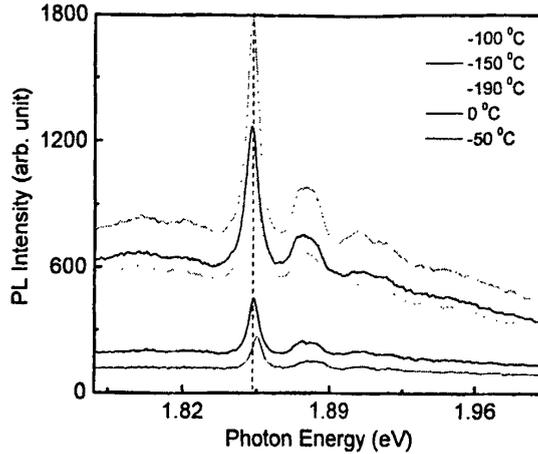


图 6.8 不同温度下横向限制模式位置的变化

6.3 共形生长方法制备三维限制微腔的光调制特性

6.3.1 自下而上方法

为了解决上述问题我们采用了自下而上的共形生长[26, 27, 28]的方法制备三维限制光学微柱微腔。我们首先在衬底上制备出二维微柱阵列，然后直接淀积微腔的多层结构，因共形生长，微柱顶部平台，侧壁和底部都淀积微腔的上下 DBRs 反射镜和有源层。与自上而下的方法相比有如下优点：

1. 简化制备过程。因为在衬底上直接制备微柱图形，仅需对衬底进行刻蚀，容易选取刻蚀气体和确定刻蚀参数，制备过程比较简单。而自上而下的方法刻蚀材料包括 DBRs 和有源层，通常由不同材料构成，需要对刻蚀气体和刻蚀条件进行优化，过程比较复杂。
2. 不会引入缺陷，沾污样品。利用平板微腔制备微柱微腔的过程中，高能离子对样品的轰击，会在柱侧壁产生缺陷，它们作为非辐射复合中心，降低有源层的发光效率。我们的方法是刻蚀过程在淀积微腔之前进行的，因而不会引入刻蚀造成的缺陷和沾污样品。
3. 三维限制。自上而下方法制备的微腔不是真正意义上的三维限制微腔，微柱界面的全内反射提供横向限制，对于不满足全反射条件的辐射会从侧壁耦合到微柱外部，造成光损失和低的自发辐射耦合因子。采用共形生长制备的微腔，纵向与横向的 DBRs 提供三维限制，提高自发辐射耦合因子。利用此方法制备的三维微腔可获得小

的模体积和高的品质因子，用以研究光与物质强耦合现象；制备高效发光二极管，探测器和低阈值的面发射激光器。

下面给出微柱微腔的具体制备方法和步骤：

首先把硅衬底清洗干净，用热蒸发或电子束蒸发在衬底表面镀一层 100 纳米以上的 Al 膜，如图 6.9 的 a 图所示；然后旋涂一层光刻胶，光刻胶的厚薄将影响曝光图形的分辨率，通过调节旋涂机的转速来控制胶的厚薄，如图 b 所示；涂完胶后要
进行前烘，把掩模版压在样品上，并且有图形的一面朝向样品，曝光、坚膜、去铝、去胶和 RIE 刻蚀，如图 c、d 所示，最后去掉剩下的 Al，放在 PECVD 系统中淀积微腔，如图 e、f 所示。下面是制作过程的示意图。

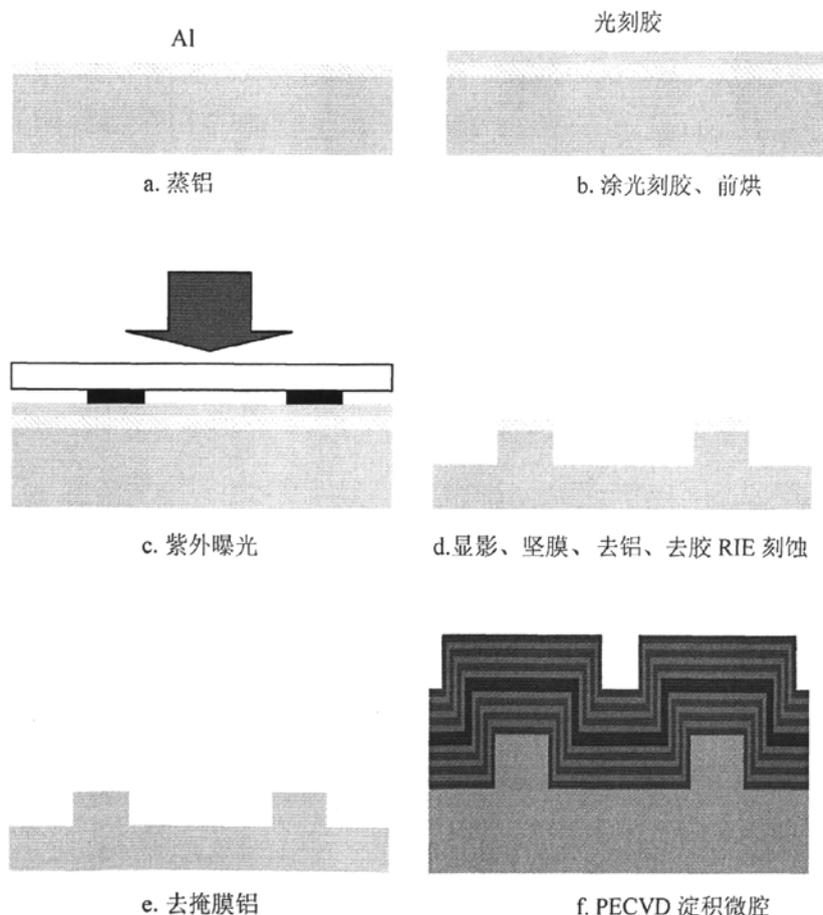


图 6.9 三维限制微腔制备过程示意图

我们也采用了自上而下的方法制备了微柱微腔。利用 PECVD 系统制备了一维限

制的平板微腔，腔共振波长设计在 700nm 附近，然后采用紫外光刻技术来制作 2-8 微米圆形和方形图形。详细步骤和参数如下：

1. 蒸铝：采用热蒸发的方法蒸镀一层约 400nm 厚的铝膜，用做掩蔽刻蚀。
2. 涂胶：干净的平板微腔样品表面上旋涂一层正光刻胶（618#），低转速 900 转/秒 10 秒钟，高转速 4200 转/秒 30 秒钟
3. 前烘：在加热台上 80°C，8-10 分钟。目的是促使胶膜体内溶剂充分地挥发，使胶膜干燥，以增加胶膜与样品的粘附性和胶膜的耐磨性，同时，只有在光刻胶干燥，在曝光时才能充分进行光化学反应。
4. 曝光：利用日本制造的光刻机曝光，把制作好掩模版覆盖在要曝光样品的表面，要把掩模版上有图形的一面朝向样品，用汞灯紫外光进行选择性的照射，使受光照部分的光刻胶发生光化学反应。我们采用的曝光通量为 160mJ/cm²。
5. 显影：把曝光后的样品放入显影液中显影，再放入去离子水中漂洗。溶解未感光部分的光刻胶，留下感光的光刻胶。我们的显影时间是 50 秒。
6. 坚膜：显影时胶膜发生软化、膨胀，所以显影后坚固胶膜。坚膜可以使胶膜与样品之间贴得更牢，同时也增强膜本身的抗蚀能力。80°C，5 分钟。
7. 反应离子刻蚀：采用国产反应离子刻蚀机。使用 CF₄ 作为反应刻蚀气体，流量 40sccm/s，刻蚀功率 100W，时间 8 分钟。
8. 去铝：磷酸水浴 80°C，去除作为掩模的铝金属。

6.3.2 共形生长和表面形貌表征

为提高共形生长三维 DBRs 限制微腔的质量，我们采用了日本生产的 SAMCO RIE-10NR 刻蚀机。RIE-10NR 刻蚀机可以达到 10⁻⁴Pa 的腔本底真空，工作气压为 4Pa，功率可以控制在 ±1W 之内，气体流量可以控制在 0.1sccm 以内。在刻蚀之前，我们用 CHF₃/O₂=30/5sccm，300W，时间 8 分钟空刻腔室，目的是为了清洗反应腔，去除腔壁上的杂质，和腔内的残余空气。对样品的刻蚀，我们也采用气体 CHF₃/O₂=30/5sccm，刻蚀功率 300W，为了获得较高的微台和光滑的侧壁，我们的刻蚀时间为 20 分钟。

我们制备了四种不同尺寸的图形衬底，它们的形状为方形和圆形，尺寸为 1, 2, 3, 4 微米，分别用 OLYMPUS BX51M 光学显微镜和 PHILIPS XL30 扫描电子显微镜

观察图形衬底的表面形貌和微台图形的形貌。光学显微镜配备了 CCD，可以直接获得样品的照片，图 6.10 给出了我们制备图形的光学显微镜照片，显微镜的放大倍数是 1000，为得到清晰和较高分辨率的图片，采用了不同的滤色片，下面的照片颜色不同是因为采用

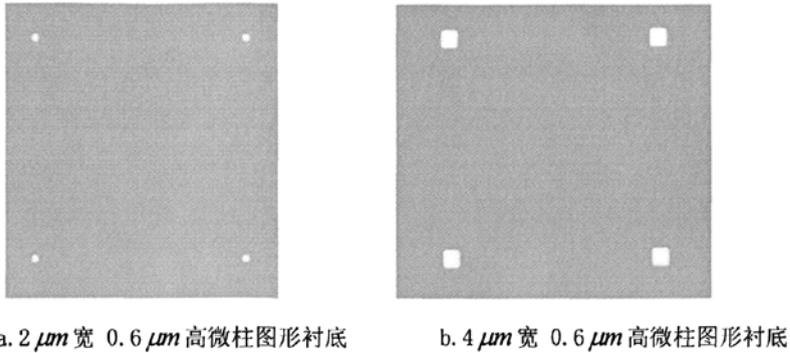
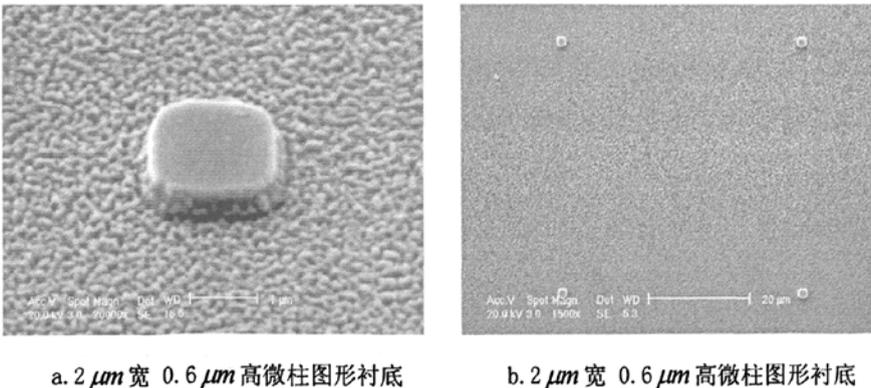
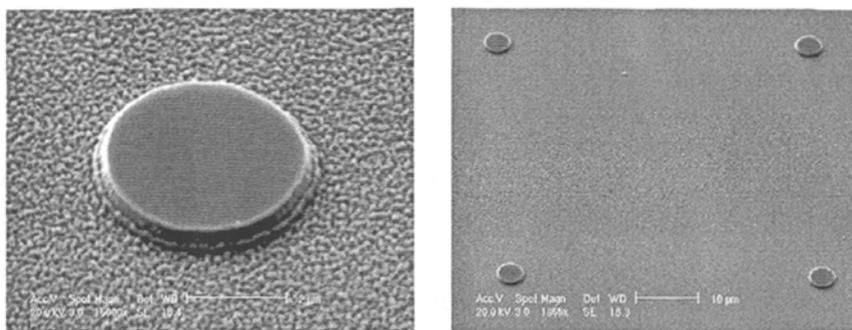


图 6.10 图形衬底的光学显微镜照片

了滤色片和光场强度不同引起的。a 图是 2 微米的微台图形，在照片的角上可以看到 4 个亮点，因为掩模金属没有去除，图形之间的间隔是 50 微米。图 b 是图形为 4 微米宽的衬底。图中可以看出衬底比较干净，图形边缘比较光滑，规则，分辨率不高，因此无法观察到图形侧壁的形貌。

为了能够看到被刻蚀图形的侧壁形貌，我们利用 PHILIPS XL30 扫描电子显微镜对样品进行了表面形貌的表征。图 6.11a 是 2 微米图形的 SEM 照片，放大倍数是 30000

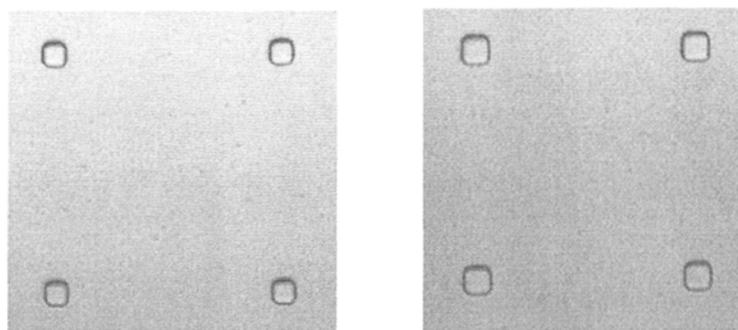




c. 直径 $4\ \mu\text{m}$ 高 $0.6\ \mu\text{m}$ 微柱图形衬底 d. 直径 $4\ \mu\text{m}$ 高 $0.6\ \mu\text{m}$ 微柱图形衬底

图 6.11 图形衬底的扫描电子显微镜照片

倍，倾斜 80° 度方向观察，图中可看到衬底表面比较粗糙，这是由高能离子对样品的轰击造成的，和刻蚀过程中产生的聚合物。微台台面比较干净光滑，表明受到金属掩模很好的保护，但侧壁比较粗糙。b 图是相同样品，而放大倍数是 1500 倍。c 和 d 图是 4 微米圆形，观察方向同 a, b 图，放大倍数分别是 15000 和 1865 倍。在上面的 SEM 图片中，图形的侧壁，不是严格陡直的。通过优化刻蚀参数，如气源，气体组分，功率，工作气压，偏压等，获得陡直光滑的图形。



a. $3\ \mu\text{m}$ 宽微柱图形衬底

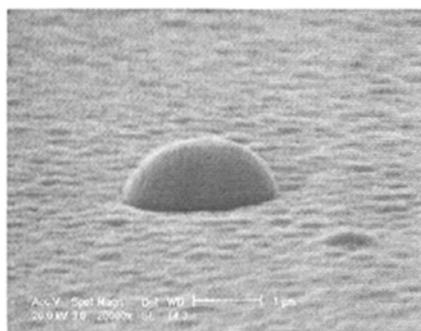
b. $4\ \mu\text{m}$ 宽微柱图形衬底

图 6.12 共形淀积三维限制微腔光学显微镜照片

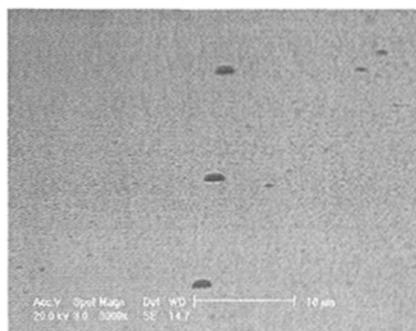
图 6.12 a, b 为共形生长在图形衬底上的三维限制光学微腔的光学显微镜照片，照片放大倍数是 1000 倍，共形淀积后样品仍旧保持原有图形的形状，图形的横向尺寸由原来 3 和 4 微米分别变为 3.5 和 4.5 微米，这说明了共形生长的发生。两个照

片的颜色不同是因为用了不同的滤色片的缘故。

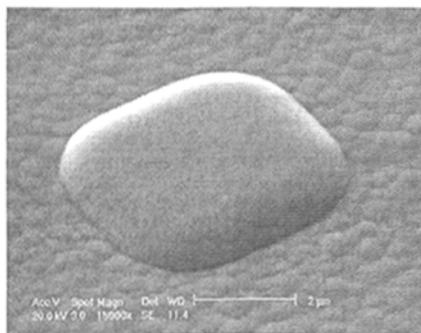
图 6.13 给出了我们在不同图形尺寸的衬底上共形生长的 DBRs 限制的三维微腔的 SEM 照片，从图片中可以看到，微台表面和侧壁很光滑，同前面的衬底的 SEM 照片相比，侧壁在生长过程中被很好地钝化了，决定了微腔具有较高的品质因子，对于 1 微米图形上生长的样品，如图 a 所示，形状发生了明显的变化，由柱形变成一个半球形，这是因为被刻蚀的图形侧壁有一定的坡度，随着生长的进行，微台顶部逐步缩小，因此形成了我们所看到的半球形。从其它尺寸的微台样品也能看到微台顶部缩小的现象。b 图给出了同一样品放大倍数较小的 SEM 照片，在图中可以看到三个相同的半球排成一列。在图 6.13 中我们也给出了其它尺寸的三维限制微腔的 SEM 照片，如图 6.13 中的 c-h 所示。



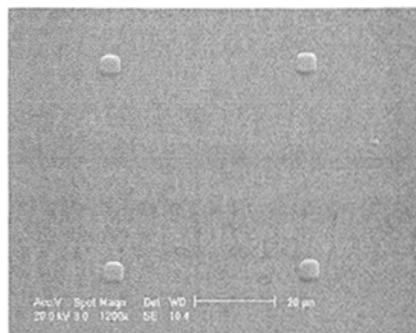
a. 1 μm 宽微台图形衬底上三维微腔



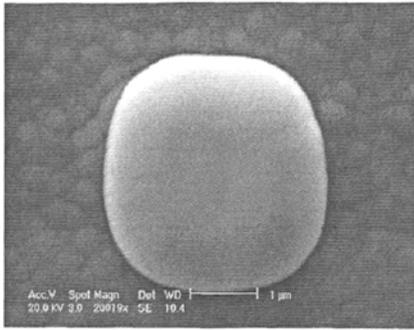
b. 1 μm 宽微台图形衬底上三维微腔



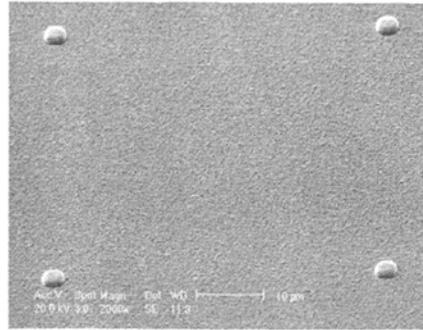
c. 2 μm 宽微台图形衬底上三维微腔



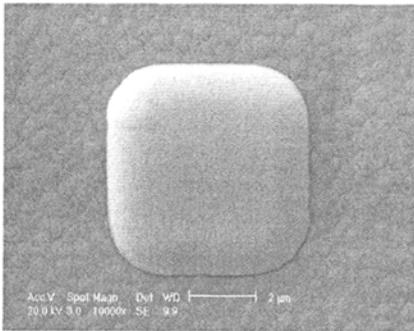
d. 2 μm 宽微台图形衬底上三维微腔



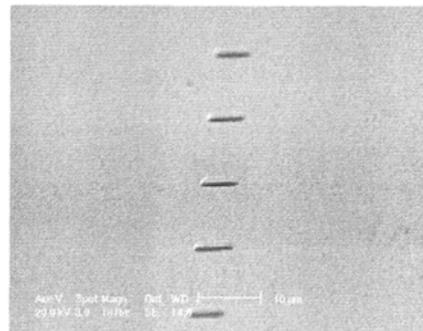
e. $3\ \mu\text{m}$ 宽微台图形衬底上三维微腔



f. $3\ \mu\text{m}$ 宽微台图形衬底上三维微腔



g. $4\ \mu\text{m}$ 宽微台图形衬底上三维微腔



h. $4\ \mu\text{m}$ 宽微台图形衬底上三维微腔

图 6.13 共形淀积三维限制微腔扫描电子显微镜照片

6.3.3 三维微腔光致发光特性的研究

我们测量了上述四种尺寸的微柱微腔的光致发光谱,如图 6.14 a, b, c, d 所示。图中光致发光谱呈现出一系列分立的发光峰,如同前面所描述的一样,横向限制导致纵向腔共振峰的分裂,它们对应不同的横向限制模。与通常方法制备的微柱微腔靠全反射的横向限制不同,我们的微腔样品由微台顶部 DBRs 和沿侧壁生长的 DBRs 提供真正意义上的三维限制。比较四幅图我们可以明显看到模式劈裂程度不同,即 PL 谱上分立发光峰的间隔不同,腔的横向尺寸越大,分立峰的间隔越小,模式的劈裂与腔的尺寸成反比。如同量子点对电子的限制导致电子能级的分裂,而且量子点的尺寸越小,能级的分裂越大,该效应称为电子的量子限制效应或量子尺寸效应。与电子的这种效应类比,我们把

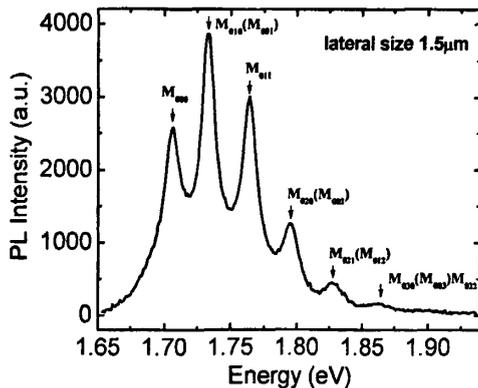


图 6.14 a.1 微米图形衬底上的微腔 PL 谱

三维光学微腔对光子的三维限制而导致光子模式的分立称为光子的量子限制效应或量子尺寸效应。根据 SEM 照片，我们可得到腔部分的横向尺寸分别为 1.5, 2.5, 3.4

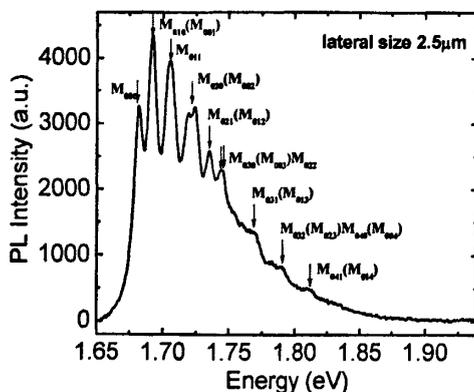


图 6.14 b.2 微米图形衬底上的微腔 PL 谱

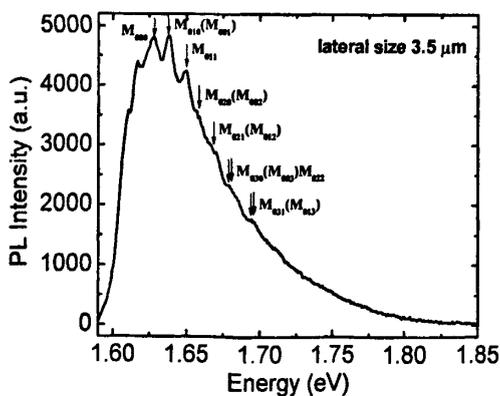


图 6.14 c.3 微米图形衬底上的微腔 PL 谱

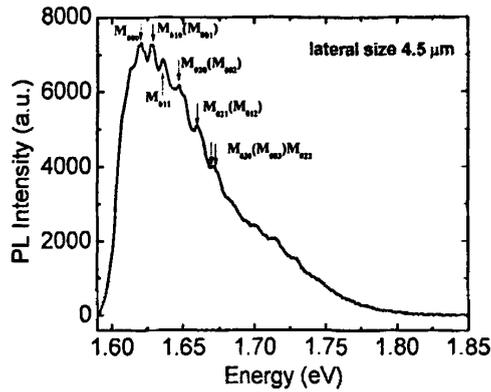


图 6.16 d.4 微米图形衬底上的微腔 PL 谱

图 6.20 不同横向尺寸的三维限制微腔的 PL 谱

和 4.5 微米，然后利用 3.34 式我们确定了各个分立的共振峰所对应的模式，如图中箭头所示。我们对四个不同尺寸的三维限制微腔的六个低阶模式进行了对比，如下表所示。

	M_{000}	$M_{010,001}$	M_{011}	$M_{020,002}$	$M_{021,012}$	M_{022}
$1.5\mu\text{m}$	1.7061	1.7330	1.7635	1.7951	1.8266	1.8628
$2.5\mu\text{m}$	1.6818	1.6916	1.7049	1.7221	1.7353	1.7449
$3.5\mu\text{m}$	1.6273	1.6371	1.6488	1.6571	1.6689	1.6793
$4.5\mu\text{m}$	1.6201	1.6278	1.6354	1.6465	1.6596	1.6700

表格 2. 不同的横向模式位置

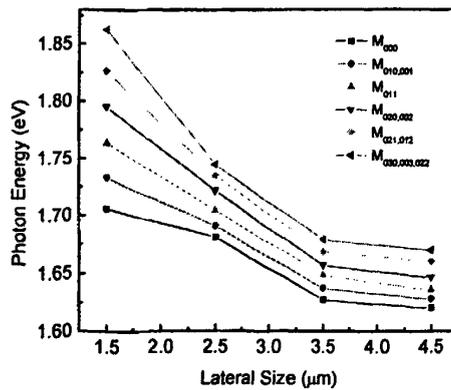


图 6.15 横向限制模与尺寸的关系

6.3.4 横向限制模式光调制特性

为了处理方便，我们仅考虑靠微柱侧壁与空气的界面全内反射提供横向限制，在处理的过程中我们发现，该近似同样适合于我们的共形淀积的三维 DBRs 限制的微腔。我们的微腔样品有三种不同组分的非晶氮化硅薄膜制备而成，其中有源层的折射率为 $n_z = 2.1$ ，构成 DBRs 的两种高低折射率氮化硅材料的折射率分别为 $n_y = 2.8$ 和 $n_x = 1.9$ 。则三种材料与空气的界面的全内反射临界角可以求出

$$\theta_c = \arccos \frac{1}{n} \Rightarrow \begin{cases} \theta_{c1} = \arccos \frac{1}{1.9} \\ \theta_{c2} = \arccos \frac{1}{2.8} \\ \theta_{c3} = \arccos \frac{1}{2.1} \end{cases}$$

轴向波导模式在各子层中都应满足全反射条件，因此相对于侧壁轴向的入射角 θ 应小于最小的临界角

$$\begin{aligned} \theta &< \theta_{c1} \\ \cos \theta &> \cos \theta_{c1} = \frac{1}{1.9} \\ \cos \theta &= \frac{k_z}{\sqrt{k_z^2 + k_{\parallel}^2}} = \frac{k_z}{\sqrt{k_z^2 + k_x^2 + k_y^2}} = \frac{2\pi m / \lambda_0}{\sqrt{\left(\frac{2\pi m}{\lambda_0}\right)^2 + \frac{(m_x + 1)^2 + (m_y + 1)^2}{L^2} \pi^2}} \\ &> \frac{1}{n_x} \\ \frac{2\pi m / \lambda_0}{\sqrt{\left(\frac{2\pi m}{\lambda_0}\right)^2 + \frac{(m_x + 1)^2 + (m_y + 1)^2}{L^2} \pi^2}} &> \frac{1}{n_x} \\ (m_x + 1)^2 + (m_y + 1)^2 &< 4n_z^2(n_x^2 - 1) \left(\frac{L}{\lambda}\right)^2 \end{aligned}$$

在测量样品光致发光谱时要考虑到全反射和透镜的数值孔径，则

$$\begin{aligned} n_z \sin \theta &< NA \\ (\sin \theta)^2 &< \left(\frac{NA}{n_z}\right)^2 \\ (\cos)^2 &> 1 - \left(\frac{NA}{n_z}\right)^2 \end{aligned}$$

$$\frac{2\pi m/\lambda_0}{\sqrt{\left(\frac{2\pi m}{\lambda_0}\right)^2 + \frac{(m_x+1)^2 + (m_y+1)^2}{L^2}}} > 1 - \left(\frac{NA}{n_z}\right)^2$$

$$(m_x+1)^2 + (m_y+1)^2 < 4 \frac{n_z^2 NA^2}{n_z^2 - NA^2} \left(\frac{L}{\lambda}\right)^2$$

最后得到模式所满足的不等式

$$(m_x+1)^2 + (m_y+1)^2 < 4 \frac{n_z^2 NA^2}{n_z^2 - NA^2} \left(\frac{L}{\lambda}\right)^2$$

其中 L, λ 分别为微台的横向尺寸和腔的纵向共振波长。利用上面的不等式，对我们的三维限制微腔样品模式进行了估算，其中 $\lambda = 700nm$ ， $n_z = 2.1$ 和 $NA = 0.9$ 。

当样品 $L = 1.5\mu m$ 时，

$$M_{000}, M_{001}/M_{010}, M_{011}, M_{020}/M_{002}, M_{021}/M_{012}, M_{030}/M_{003}, M_{022};$$

当样品 $L = 2.5\mu m$ 时，可观察到

$$M_{000}, M_{001}/M_{010}, M_{011}, M_{020}/M_{002}, M_{021}/M_{012}, M_{030}/M_{003},$$

$$M_{022}, M_{031}/M_{013}, M_{032}/M_{023}, M_{040}/M_{004}, M_{041}/M_{014}$$

上述结果与光谱上观察到的模式数目一致。

6.4 本章小结

三维限制光学微腔因为小的模式体积，高的自发辐射耦合因子具有巨大的理论研究和器件应用价值。本章中我们采用了两种制备微柱微腔的方法：传统的先制备平板微腔，然后采用微加工方法制备微柱微腔，即自上而下的方法；另外采用了我们提出的共形生长的方法制备真正意义上的三维限制光学微腔，纵向和横向由 DBRs 提供三维限制，与传统的依靠微柱界面的全内反射提供三维限制不同。该方法制备的三维腔可实现更高的横向限制，获得高的自发辐射耦合因子，在研究物质与光的强耦合相互作用，高效发光二极管及低阈值激光器有很大的应用前景。

参考文献

- [1] S. L. McCall, A.F.J. Levi, R. E. Slusher, H.H. Houch, N.A. Whittaker, A.C. Gossard, J.H. English: *Appl. Phys. Lett.* **60**, 289 (1992)
- [2] R.E. Slusher, A.F.J. Levi, U. Mohideen, S.L. McCall, S.J. Pearton, R.A. Logan: *Appl. Phys. Lett.* **63**, 1310 (1993)
- [3] U. Mohideen, W. S. Hobson, S. J. Pearton, F. Ren, R.E. Slusher: *Appl. Phys. Lett.* **64**, 1911 (1994)
- [4] T. Baba, T. Hamano, F. Koya: *IEEE Quant. Electron.* **27**, (1991) p. 1347
- [5] B. Gayral, J.M. G' erard, A. Lema^itre, C. Dupuis, L. Manin, J. L. Pelouard: *Appl. Phys. Lett.* **75**, 1908 (1999)
- [6] P. Michler, A. Kiraz, L. Zhang, C. Becher, E. Hu, A. Imamoglu: *Appl. Phys. Lett.* **77**, 184 (2000)
- [7] J. S. Foresi, P. Villeneuve, J. Ferrera, E. Thoen, G. Steinmeyer, S. Fan, J.D. Joannopoulos, L. Kimerling, H. Smith, E. Ippen: *Nature* **390**, 143 (1997)
- [8] D. Labilloy, H. Benisty, C. Weisbuch, T. F. Krauss, V. Bardinal, U. Oesterle: *Electron. Lett.* **33**, 1978 (1997)
- [9] D. Labilloy, H. Benisty, C. Weisbuch, T. F. Krauss, C. J. M. Smith, R. Houdre, U. Oesterle: *Appl. Phys. Lett.* **73**, 1314 (1998)
- [10] O.J. Painter, A. Husain, A. Scherer, J.D. O'Brien, I. Kim, D. Dapkus: *J. Lightwave Technol.* **17**, 2082 (1999)
- [11] S. Noda, K. Tomoda, N. Yamamoto, A. Chutinan: *Science* **289**, 604 (2000)
- [12] C. J. M. Smith, H. Benisty, D. Labilloy, U. Oesterle, R. Houdre, T. F. Krauss, R. M. De La Rue, C. Weisbuch, *Electron. Lett.*, **35**, 228 (1999)
- [13] O. Painter, R. K. Lee, A. Sherer, A. Yariv, J. D. Obrien, P.D. Dapkus, I. Kim, *Science*, **284**, 1819 (1999)
- [14] C. Reese, C. Becher, A. Imamoglu, E. Hu, B. D. Gerardot, P. M. Petroff, **78**, 2279 (2001)
- [15] T. Yoshie, A. Scherer, H. Chen, D. Huffaker, D. Deppe, *Appl. Phys. Lett.*, **79**, 114 (2001)
- [16] J. S. Foresi, P. R. Villeneuve, J. Ferrera, E. R. Thoen, G. Steinmeyer, S. Fan, J. D. Joannopoulos, L. C. Kimerling, H. I. Smith, E. P. Ippen, *Nature*, **390**, 143 (1997)
- [17] J. L. Jewell, J. P. Harbison, A. sherer, Y. H. Lee, L. T. Florenz, *IEEE J. Quantum Electron*, **27**, 1332 (1991)

- [18] J. M. Gerard, D. Barrier, J. Y. Marzin, R. Kuszelewicz, L. Manin, E. Costard, V. Theirry-Mieg, T. Rivera, *Appl. Phys. Lett.*, **69**, 449 (1996)
- [19] J. P. Reithmaier, M. Rohner, H. Zull, A. Forchel, T. L. Reinecke, *Phys. Rev. Lett.*, **78**, 378 (1997)
- [20] B. Gayral, J. M. Gerard, B. Legrand, E. Costard, V. Theirry-Mieg, *Appl. Phys. Lett.*, **72**, 1421 (1998)
- [21] M. Bayer, T. Gutbrod, J. P. Reithmaier, A. Forchel, T. L. Reinecke, P. A. Knipp, A. A. Dremin, V. D. Kulakovskii, *Phys. Rev. Lett.*, **81** 2582 (1998)
- [22] M. Rohner, F. P. Reithmaier, A. Forchel, F. Schafer, H. Zull, *Phys. Rev. Lett.*, **71**, 448 (1997)
- [23] T. Gutbrod, M. Bayer, A. Forchel, P. A. Knipp, V. D. Kulakovskii, N. A. Gippus, S. G. Tikodeev, *Phys. Rev. B.*, **59**, 2223 (1999)
- [24] H. Rigneault, J. Broudic, B. Gayral, J. M. Gerard, *Opt. Lett.*, **26**, 1595 (2001)
- [25] G. S. Li, W. Yuen, K. Toh, L. E. Eng, S. F. Lim, C. J. Chang-Hasnaun, *IEEE Photon. Tech. Lett.*, **7**, 971 (1995)
- [26] S. Osono, Y. Uchiyama, M. Kitazoe, K. Saito, M. Hayama, A. Masuda, A. Izumi, H. Matsumura, *Thin Solid Films*, **430**, 165-169 (2003)
- [27] Dennis M. Hausmann, Philippe de Rouffignac, Amethyst Smith, Roy Gordon, Douwe Monsma, *Thin Solid Films*, **443**, 1-4 (2003)
- [28] Qi Wang, Scott Ward, Lynn Wedvilas, Brian Keyes, Errol Sanchez and Shulin Wang, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 338 (2004)

第七章 总结与展望

7.1 总结

本论文在 PECVD 系统中制备非晶氮化硅薄膜及由不同组分氮化硅制备的光学微腔结构。提出了共形生长的方法在图形衬底上直接生长二维、准三维和三维 DBRs 限制光学微腔结构。利用光学显微镜、Raman、AFM、SEM、TEM 等手段检测样品的结构性质和形貌；透射和吸收光谱研究了不同组分氮化硅薄膜的折射率、光学带隙和吸收系数；利用微区光致发光谱测量了氮化硅薄膜和微腔的发光特性，结合变收集半角的方法观测到并证明了微腔的横向限制导致的共振模式的分裂，并观测到了模式分裂的尺寸效应。模式能量的计算值与微区光致发光谱测量值相一致。

主要创新点如下：

(一) 提出了利用分布布拉格反射镜 (DBRs) 实现二维、准三维、三维限制光学微腔。在微腔的纵向和横向全部是由 DBRs 提供光限制，这不同于微盘微腔、微环微腔、微球微腔利用全内反射原理实现光的三维限制和微柱微腔由纵向 DBRs 和横向全内反射提供三维限制。实际上，这些微腔并不是严格意义上的三维限制微腔，对于满足全反射条件的模式受到微腔的三维限制，而那些不满足全反射条件的光波，会从各个方向辐射出去，会导致光损失，降低了辐射耦合因子，从而导致激光器阈值的增加和降低发光二极管的效率。

(二) 提出了共形生长的方法制备二维、准三维、三维 DBRs 限制光学微腔。紫外曝光结合反应离子刻蚀方法 (RIE) 在衬底上制备一维条槽周期结构、二维圆孔正方形周期结构和二维圆柱，方柱阵列，然后在 PECVD 系统中直接在图形衬底上淀积生长底部 DBRs、有源层和顶部 DBRs。因为共形淀积，会在衬底图形的顶部，侧壁和底部共形生长上下 DBRs 和有源层。图形顶部和侧壁的 DBRs 提供纵向和横向光限制。

该制备方法简单，因为制备图形衬底仅仅涉及到衬底材料的刻蚀过程，不同于传统的微柱微腔要对不同的材料进行刻蚀，使刻蚀过程比较复杂，而且在刻蚀的过程中会损伤样品的侧壁，引入缺陷，结果导致有源层载流子在这些缺陷发生非辐射复合，降低有源层的内量子效率，而且侧壁的粗糙也会引起光的散射损失。而我们的刻蚀过程是在生长之前进行的，避免了刻蚀对微柱侧壁，特别是有源层的损伤，因而不会引

入缺陷，而且生长过程中也会对侧壁进行很好的钝化。最关键的是共形生长方法可制备真正的三维限制光学微腔。与光子晶体三维微腔相比，制备过程要简单得多。

微区拉曼光谱仪测量了微腔的室温光致发光谱，发光谱中观测到一系列分立的发光峰，确定了它们是微腔的横向限制导致的腔共振峰的分裂。横向限制模式表现出横向尺寸依赖性，横向尺寸越小，共振峰的分裂间距越大，即与尺寸成反比关系。利用限制模式能量模型，计算了限制模式的能量位置，得到的结果与光致发光谱中观测到的结果一致。

(三) 横向限制导致平面内波矢量子化，不同的横向限制模具有不同的量子化平面内波失分量，即限制模具有不同的空间角分布特征。根据这一特点，我们提出了改变收集半角（或光阑孔径）的方法测量微腔的光致发光谱，通过采用不同数值孔径的收集透镜（对应不同的收集半角），使得一些横向限制模可以耦合到收集透镜中，而其他的模式不能耦合到透镜中，这相当于对微腔的光致发光谱进行了空间滤波。采用该方法可以给出横向限制模式最直接的证据。通过逐渐减小收集半角，观测到了高能量共振峰依此消失，只要知道这些共振峰消失对应的收集半角，我们就可以确定这些峰对应的横向限制模式。因而给出横向限制模式最为直接的证据。

(四) 首次实现了全硅基二维、准三维、三维限制光学微腔，观测到光致发光的增强和发光谱的窄化，及横向限制导致的共振发光峰的劈裂，为制备硅基高效发光器件及其低阈值激光器作了初步探索。

7.2 展望

本论文在 PECVD 系统中制备不同组分的非晶氮化硅薄膜，利用微腔效应增强了非晶氮化硅的光致发光强度，获得了线宽很窄的腔共振发光峰。通过直接在图形衬底上生长底部 DBRs、有源层和顶部 DBRs 获得了二维、准二维和三维限制光学微腔。光致发光谱上观测到一系列分立的发光峰-横向限制导致腔共振峰的分裂，并观测到限制模式分裂的尺寸效应。虽然取得了一些结果，但是仍存在许多的问题需要解决，例如腔品质因子不高等。下一步的目标就是：

限制要求图形的
向限制的 DBRs

周期数最大，等于顶部 DBRs 的周期数。图形侧壁的陡峭程度横向限制影响，图形不陡直也会造成侧壁 DBRs 不陡直，会影响横向限制。同样侧壁的光滑程度对腔的品质因子影响很大，越粗糙，光的散射损失越严重，品质因子越低。要获得大的刻蚀深度，我们必须解决刻蚀过程中产生的聚合物，这些聚合物阻碍了刻蚀的进行。

- (2) 进一步缩小微腔的横向尺寸，获得真正的单模微腔。单模微腔使得的辐射耦合因子接近于 1，可以提高发光二极管的效率，制作极低阈值或零阈值的激光器。
- (3) 获得超高品质因子、超小模式体积的三维限制微腔，可以用来研究光子与物质的强耦合效应等腔量子电动力学的基本物理问题。

在微腔中引入量子点，量子阱等低微结构，研究受限电子与受限光子之间的相互作用，改善他们的发光效率，制备高效发光器件等。

致谢

在南京大学求学期间，曾经得到过许许多多老师、同学的热情关怀和无私帮助，在此谨向他们表示衷心的感谢和最诚挚的谢意！

首先，向我的导师陈坤基教授致以衷心的感谢！陈老师治学严谨，学识渊博，待人诚恳，他高屋建瓴的学术眼光、兢兢业业的工作精神，为我树立了榜样。三年来，学习上陈老师对我严格要求，精心指导，并向我提出论文写作的指导意见，帮助确定论文的主题，从论文的主题、内容、到整体的结构都给予了细致、有效的指导。在学术上给我耐心的指导，培养了我的科研兴趣，提高了我的科研能力，引领我走入了科研领域；在做事上，培养了我严谨的态度与执着的追求精神。生活上陈老师亲切、随和、谦逊，始终诲人不倦。在写作过程中，陈老师不惜休息时间，细致、耐心的提出宝贵的修改意见，是论文得以顺利完成。他对我孜孜不倦的耐心教诲和无微不至的关怀令我难以忘怀，受益非浅。这里还要特别感谢黄信凡教授在实验上的指导和帮助，黄老师严谨细致、一丝不苟的作风；忘我的工作精神，是我学习的榜样。

我论文的许多工作是在钱波博士和去美国的魏俊伟硕士共同努力下完成的，在此向他们表示衷心的感谢。

同时，感谢徐骏教授的指导和帮助，马忠元副教授，感谢徐岭副教授，感谢李伟老师在样品制备过程中给予的帮助。还要感谢分析中心程光照教授和陈强老师在拉曼和发光谱测量方面的指导和帮助。

感谢 55 所毛昆纯总工程师和吴会龙主任，为我们制作光刻板过程中占用了他们许多宝贵的时间。

感谢韩培高博士在 TEM 样品的制备给予的帮助，李卫博士，黄锐博士，张贤高博士光刻方面的帮助，感谢王祥博士，余林蔚博士，陈德媛博士，方忠慧博士，夏正月硕士，丁宏林硕士，刘奎硕士，韦德远硕士，姚尧硕士，赵维明硕士，周江硕士，孙萍硕士等实验室所有同学们给予的帮助

在我学习期间，特别感谢我父母给予我的无私帮助、感谢我爱人对我的理解、支持和关心，使我能够安心地完成学业。

攻读博士学位期间发表的学术论文

1. Conformal coverage for two-dimensional arrays of microcavities with quasi-three dimensional confinement by distributed Bragg reflectors
Applied Surface Science (accepted for publication)
San Chen, Bo Qian, Kunji Chen, Wei Li, Peigao Han, Jun Xu, Zhongyuan Ma, Wei Li, XinFan Huang
2. Photoluminescence of nc-Si / SiN superlattices embedded in optical microcavities
半导体学报 27, 22 (2006)
Chen San, Qian Bo, Chen Kunji, Cen zhanhong, Liu Yansong, Han Peigao, Ma Zhongyuan, Xu Jun, Li Wei, Huang Xinfan
3. Modified Photoluminescence by Silicon Based One-dimensional Photonic Crystal Microcavity
Chinese Physics Letters. 22, 230 (2005)
Chen San, Qian Bo, Wei Junwei, Kunji Chen, Jun Xu, Li Wei, Huang Xinfan
4. Silicon Based One-dimensional Photonic Crystal Microcavity
Proc. of SPIE 5774, 279 (2004) (The 5th International Conference on Thin Film Physics and Applications)
Chen San, Qian Bo, Kunji Chen, Jun Xu, Li Wei, Huang Xinfan
5. Angular dependent luminescence behavior in one-dimensional Si-based microcavities
Thin Solid Film (accepted for publication)
B. Qian, S. Chen, D. Y. Chen, J. W. Wei, J. Xu, P. G. Han, W. Li, L. Xu, K. J. Chen
6. Step-by-Step Laser Crystallization of Amorphous Si:H/SiN_x:H Multilayer for Active Layer in Microcavities
Chinese Physics Letters. 23, 1302 (2006)

QIAN Bo, CHEN San, CEN Zhan-Hong, CHEN Kun-Ji, LIU Yan-Song, XU Jun, Ma Zhong-Yuan, LI Wei, HUANG Xin-Fan

7. 硅基一维光子晶体微腔光发射特性的调制

江西科学 **23**, 317 (2005)

钱波, 陈三, 魏俊伟, 陈坤基, 徐骏等

8. Oxygen induced strong green light emission from low-temperature grown amorphous silicon nitride films

Appl. Phys. Lett. **89**, 221120 (2006)

Rui Huang, Kunji Chen, Bo Qian, San Chen, Wei Li, Jun Xu, Zhongyuan Ma, and Xinfan Huang

9. All amorphous SiC based luminescent microcavity

Diamond and Related Materials **14**, 1999 (2005)

J. Xu, J. Mei, D. Chen, S. Chen, W. Li, K. Chen

10. 快速热退火对多层膜光致发光的影响

南京大学学报 **41**, 55 (2005)

马忠元, 韩培高, 黄信凡, 隋妍萍, 陈三, 钱波等

11. Enhanced green to red photoluminescence in thermally annealed of amorphous Si:H/SiO₂ multilayers

Thin Solid Film **515**, 2322 (2006)

Zhongyuan Ma, Peigao Han, Xinfan Huang, Yanping Sui, San Chen, Bo Qian, Wei Li, Jun Xun, Ling Xu, Kunji Chen, Duan Feng