



中国科学院大学

University of Chinese Academy of Sciences

硕士学位论文

太赫兹量子级联激光器频率梳的色散研究

作者姓名：周康

指导教师：黎华 研究员

中国科学院上海微系统与信息技术研究所

学位类别：工学硕士

学科专业：微电子学与固体电子学

培养单位：中国科学院上海微系统与信息技术研究所

2019 年 4 月

Research on Dispersion in Terahertz Quantum Cascade Laser
Frequency Combs

A thesis submitted to the
University of Chinese Academy of Sciences
in partial fulfillment of the requirement
for the degree of
Master of Science in Engineering
in Microelectronics and Solid State Electronics

By

Kang Zhou

Supervisor: Professor Hua Li

Shanghai Institute of Microsystem and Information Technology,
Chinese Academy of Sciences

April, 2019

中国科学院大学 研究生学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文是本人在导师的指导下独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的研究成果。对论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明或致谢。

作者签名：周康

日期：2019.4.28

中国科学院大学 学位论文授权使用声明

本人完全了解并同意遵守中国科学院大学有关保存和使用学位论文的规定，即中国科学院大学有权保留送交学位论文的副本，允许该论文被查阅，可以按照学术研究公开原则和保护知识产权的原则公布该论文的全部或部分内容，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存、汇编本学位论文。

涉密及延迟公开的学位论文在解密或延迟期后适用本声明。

作者签名：周康

日期：2019.4.28

导师签名：黎华

日期：2019.4.28

摘要

太赫兹量子级联激光器(THz QCL)是一种电泵浦、易集成、高功率的半导体激光器,非常适合作为THz频率梳的光源。由于其在光谱学和高分辨中具有重大应用前景,THz QCL频率梳需要越来越宽的频谱范围以及更稳定的工作特性,因此群速度色散(group velocity dispersion, GVD)对THz QCL频率梳的影响则越来越不容忽视。本文将基于THz QCL的有源区增益、波导结构、材料等方面对不同结构的THz QCL频率梳的GVD进行了系统的研究以及数值计算,同时进行了大量实验,很好的验证了计算结果,最后设计了一种色散补偿结构以减小THz QCL频率梳的GVD,有助于实现更宽、更稳定的频率梳。相关研究结果及创新点如下:

(1)研究了双面金属波导结构THz QCL频率梳色散的机理以及形成因素,主要由器件的增益、波导损耗、以及材料吸收导致。基于德鲁德(Drude)模型计算了器件各层材料的折射率实部和虚部与频率的关系,从而可以利用有限元法准确的计算在一段频谱范围内双面金属波导结构THz QCL的波导损耗; THz QCL的增益由有源区的能级决定,在基于传输矩阵方法(TMM)计算得到有源区能级分布后,利用费米黄金定则可以计算得到器件有源区的增益,但由于增益钳制效应会限制有源区的增益,我们首先充分考虑有源区能级结构,详细计算了11条能级带来的子带电子跃迁吸收,再结合波导损耗和镜面损耗,计算得到器件的阈值增益,使得器件的增益计算更加符合实际工作状态;归因于一阶或二阶电子偶极矩或势能中的非谐波项,材料吸收则通过剩余射线带理论计算得到;最后利用Kramers-Kronig关系,计算得到器件的增益和波导损耗、材料吸收引起的色散。仿真结果表明器件的总色散主要由钳制后的增益决定,尽管器件的波导损耗数值上相比增益损耗较小,但是波导损耗,子带电子跃迁吸收等将通过增益钳制影响器件的总色散。

(2)通过修正双面金属波导结构THz QCL的色散模型,研究了100 μm 、150 μm 、200 μm 三种脊宽下半绝缘等离子体结构THz QCL的色散。研究表明由于半绝缘等离子体结构相比于双面金属波导结构限制电磁场的能力更弱,波导损耗对增益的影响更加显著。通过研究脊宽对波导损耗的影响,发现过窄的波导无法提供良好的本征模,从而导致了波导损耗曲线的震荡,同时这种震荡经过增益钳制,导致了较强的GVD;通过实验测试3种THz QCL,都具有相同的阈值电

流密度，表明器件在材料生长和工艺上具有统一性，然而 $100\text{ }\mu\text{m}$ 和 $200\text{ }\mu\text{m}$ 的THz QCL的拍频信号线宽和稳定性都差于 $150\text{ }\mu\text{m}$ 的THz QCL，基于此，利用两个 $150\text{ }\mu\text{m}$ 脊宽的THz QCL实现了双光梳功能，这很好的验证了器件GVD的计算结果。

(3)研究了一种基于Gires-Tournois干涉仪(GTI)的色散补偿结构。通过在波导上刻蚀出一个合适宽度的空气间隙，即可在THz QCL末端形成GTI结构。这种结构工艺简单，设计灵活，同时能很好的与THz QCL集成，有助于片上系统集成。通过控制空气间隙的厚度以及位置，可以有效的控制GTI的前端面反射率，GTI的后端面反射率则由器件的结构决定。计算结果表明，该结构的色散具有一定的周期性，其色散的最大值与其长度的平方成反比，通过控制空气间隙厚度可以有效的控制该结构引起的色散，从而实现色散补偿结构。

关键词： 太赫兹，量子级联激光器，色散

Abstract

The electrically-pumped terahertz quantum cascade laser (THz QCL) which is characterized by higher output power and wide frequency coverage is one of the most powerful THz sources in the frequency range between 1 and 5 THz. The THz QCL is also an ideal candidate for achieving frequency comb operation in terahertz regime. Due to its important applications in high resolution spectroscopy and metrology, the frequency comb with a series of equally-spaced frequency lines has been extended to cover the full electromagnetic spectral range. And the group velocity dispersion (GVD) is the key factor for the broadband frequency comb. In this thesis the GVD of THz QCL, including gain, waveguide, and material dispersions, is numerically evaluated. The results of experiences verify the simulated results. And a dispersion compensator is designed to make a low and flat GVD that is beneficial for achieving a broadband and stable frequency comb operation. Main research results and innovations are as follows:

(1) The GVD in metal-metal waveguide THz QCLs is calculated by taking into account the dispersion from material, waveguide, and laser gain. Based on the Drude model, each layer's refractive index including real and imaginary part is calculated that helps to investigate the relationship between waveguide loss and a broad frequency range by using finite element method (FEM). The energy levels of THz QCL's active region decide the laser gain which could be calculated which are calculated by the transmission matrix method (TMM), then the gain of active region is got based on Fermi's gold rule. But according to the gain clamping effect, the intersubband absorption needs to be study in consideration of the influence of eleven energy level. Both losses are combined and a mirror loss is added in order to get the precise clamped gain. And the material loss is calculated by the reststrahlen band due to lattice vibrations appears as absorption bands in the infrared region attributed either to a first- or second-order electronic dipole moment or to anharmonic terms in the potential energy. The GVD from material, waveguide, and laser gain are calculated by Kramers-Kronig relationship between the real part and the imaginary part of refractive index. Both GVD are added to get total GVD and the result shows total GVD is dominated by the contribution from the gain GVD, but the gain GVD is strongly affected by the waveguide loss which leads GVD that doesn't

show big variations.

(2) By fixing the model of metal-metal waveguide THz QCL's GVD, the ridge width effect on comb operation in single plasmon waveguide THz QCL based on 100 μm 、150 μm 、200 μm ridge width THz QCL. The work presents that due to a narrow waveguide in single plasmon waveguide compared with metal-metal waveguide, there is an oscillating behaviour in the frequency-dependent waveguide loss. And the unexpected oscillation also leads to an oscillating feature in the clamping gain. That makes the 100 μm ridge laser having strong GVD. The results of inter-mode beat note mapping and single-shot spectra that 150 μm ridge show much narrow inter-mode beat note than other two ridges prove the simulations, although the L-I-V characteristics for the three lasers confirm uniform threshold current density which indicates that the material growth and device fabrication processes are uniform.

(3) For dispersion compensator structure, we investigate a design of the THz QCL based on Gires-Tournois interferometer (GTI). The GTI structure is coupled into a QCL gain cavity by using etching process to get a air gap that is more flexible and feasible. By conducting the length and position of the air gap, the developed numerical simulation shows that by carefully designing the geometry of GTI, the dispersion of a THz QCL can be compensated for achieving broadband terahertz frequency combs.

Keywords: Terahertz, Quantum cascade laser, Dispersion

目 录

第1章 绪论	1
1.1 引言	1
1.2 选题的背景及意义	3
1.3 国内外本学科领域的发展现状与趋势	4
1.4 本文的主要工作	7
第2章 双面金属波导结构THz QCL的色散	9
2.1 引言	9
2.2 器件色散的计算	9
2.2.1 波导损耗	11
2.2.2 材料吸收	15
2.2.3 子带电子跃迁吸收	15
2.2.4 有源区增益	19
2.2.5 器件总的色散	20
2.3 小结	21
第3章 半绝缘等离子体结构THz QCL的色散	23
3.1 引言	23
3.2 器件脊宽对色散的影响	24
3.3 不同脊宽器件的测试	27
3.3.1 器件的功率-电流-电压测试	28
3.3.2 器件的拍频信号测试	30
3.3.3 器件的光谱测试	32
3.3.4 器件双光梳的实现	35
3.4 小结	37
第4章 THz QCL的色散补偿结构设计	39
4.1 引言	39
4.2 基于Gires-Tournois干涉仪的结构设计	39
4.3 基于Gires-Tournois干涉仪的色散计算	41
4.4 小结	42
第5章 总结与展望	43
参考文献	45
作者简历及攻读学位期间发表的学术论文与研究成果	51
致谢	53

第1章 绪论

1.1 引言

光学频率梳是一种频谱上由一系列等间距且具有相干关系的频率分量组成的激光源^[1-3]。由于其高频率稳定性和低相位噪声，频梳在高分辨成谱、绝对频率测量、激光测距等领域具有重要应用^[4,5]。2005年，有关频梳的研究工作获得诺贝尔物理学奖。之后，国际上关于各个频段的频梳研究逐渐成为热点。在可见光和近红外波段，频梳技术已经相当成熟，基于双频梳的高精度快速成谱技术也已经得到成熟应用。然而，在太赫兹（THz）波段，由于缺乏高效的THz辐射产生技术，THz频梳的研究还处于起步阶段。而太赫兹（THz）波是指频率位于100 GHz到10 THz（波长从3毫米到30微米），介于毫米波和红外光之间的电磁波谱。由于处于电子学和光子学的交叉区域，THz辐射同时具有光 and 波的特性。比如像光一样，THz光视距传播且具有非离化的特性；像微波一样，THz波能够穿透不同的非导电材料，如衣物、纸张、木头、塑料、陶瓷等。正是由于THz辐射具有这些特性，研究宽谱THz频率梳在物理学、材料科学、生命科学、天文学、信息和科技等方面具有重大应用前景^[3,4,6,7]。

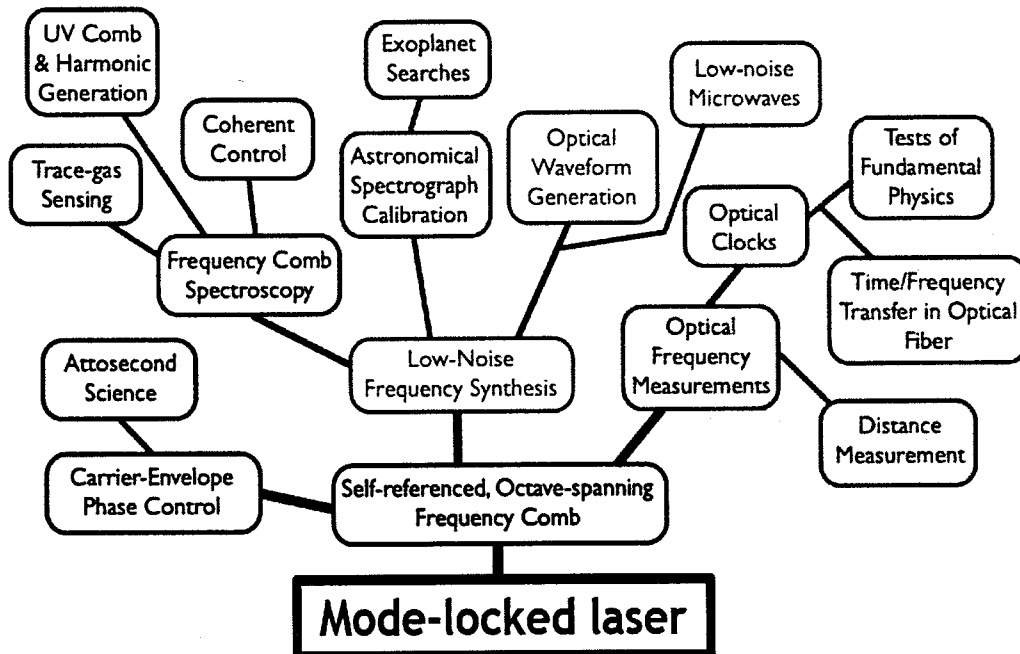


图 1.1 基于光学频率梳的发展与应用。随着锁模激光器的发展，光学频率梳在微量探测、光学时钟、低噪声通信、天文学等领域有着重要的应用^[3]

频梳在科学和应用方面都有重要价值,如图1.1所示。采用锁模激光频梳可以实现阿秒超短脉冲,从而应用于阿秒科学研究;频梳可以用于低噪声频率合成,从而应用于高分辨光谱测量、相干控制、气体检测;频梳还可以用作光学时钟、频率测量和测距等^[3]。如图1.2所示,一个理想的频率梳可以视为多个连续波工作且相位锁定的激光器组成(彩色线条),同时如果采用主动锁模技术,即利用一个额外的连续波工作激光器(图1.2红色虚线),可以使得频率梳纵模之间相位完全锁定,使得频率梳功能更加稳定,或者基于被动锁模技术,即在谐振腔内利用一个饱和吸收体也可以实现对相位调制和锁定^[1,8]。频梳的频率可以由以下公式 $\nu_n = f_0 + n \times f_r$ 完全描述,其中 f_0 为载波包络补偿(carrier envelope offset, CEO)频率, n 为模式指数, f_r 为重复频率(或频梳的模式间距)。

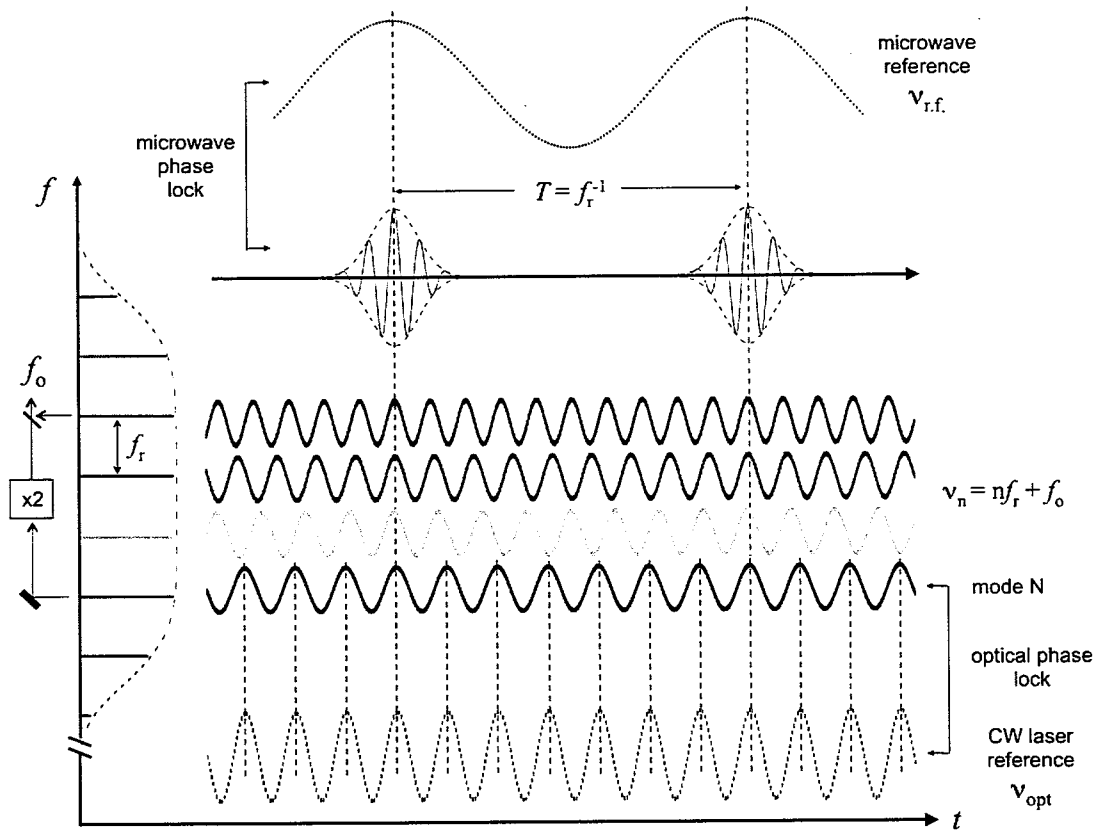


图 1.2 彩色线条为频率梳输出的时域波形,由一系列完全锁相的连续波组成,其中载波频率 f_0 可以用二次谐波的外差探测得到,基于主动锁模技术,通过一个额外的信号源(红色虚线)可以使得频率梳的纵模相位完全锁定^[3]

推动光学频率梳发展的关键器件就是光源。在1964年,在著名的贝尔实验室,科学家Hargrove基于He-Ne激光器成功实现主动锁模,便为光学频率梳的诞生种下了种子^[9]。在20世纪70年代末,在Hänsch的利用皮秒锁模激光器完成双光子光谱实验后,光学频率梳这个“种子”便开始萌发^[10]。在接下来的20多年

的历史里关于光学频率梳的问题一直没有得到解决^[11]。直到1998年，Hänsch课题组用飞秒锁模激光器实现了频率梳^[12-14]。2005年，Hänsch和Hall两人也因为其在光学频率梳上开创性工作而获得诺贝尔物理学奖。

1.2 选题的背景及意义

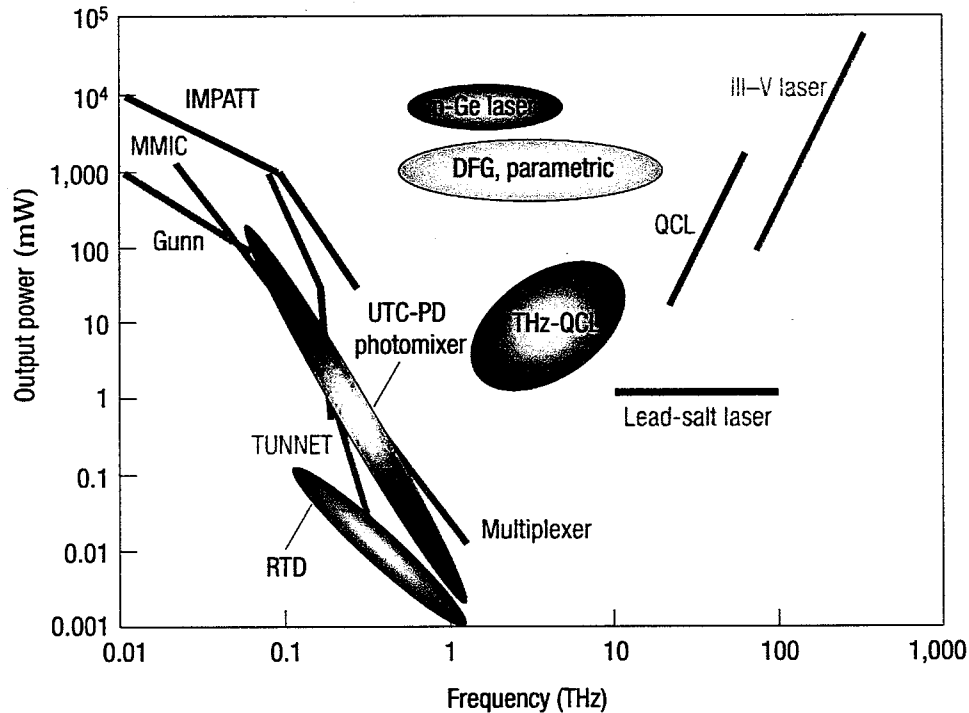


图 1.3 不同固态THz源的比较：输出功率和频率的变化曲线。在低频段，基于光电二极管的器件依然是主流的辐射源；在高频端，QCL由于其功率、可调谐等特性无异是最好的辐射源^[15]

相比于飞秒激光器，太赫兹源的起步较晚。图1.3比较了不同的固态THz源的输出功率随频率的变化曲线^[15]。我们可以发现在低频端（<1THz），倍频链和单行载流子光电二极管（UTC-PD）是比较好的THz辐射源，输出功率在微瓦和几个毫瓦之间。但是在高频端（1-5 THz），量子级联激光器（QCL）由于其高功率、可调谐等特性无异是最好的THz辐射源^[16]。QCL是一种基于子带间电子跃迁的新型中远红外半导体激光器。与传统的带间半导体激光器不同，QCL的激射频率不由半导体材料的带隙决定，而是由多量子阱结构子能级的能级差决定，原则上与所选择的半导体材料无关^[17]。QCL的原型概念早在1971年就由前苏联科学家Kazarinov和Suris提出来了^[18]。经历了20多年，美国贝尔实验室Capasso研究组于1994年才研制出了世界上第一个中红外QCL^[2]。不同有源区

结构设计的THz QCL器件性能差异很大。比如说共振声子结构由于声子跃迁需要消耗大量的电压差，所以器件的工作电压一般比较大，所产生的焦耳热也很大，大多数情况下并不适合连续波工作^[19]。但是共振声子结构由于可以有效地抑制高温下电子的反注入，所以具有比较好的温度特性。另外一种重要的有源区结构是束缚态到连续态跃迁结构^[20]。由于其采用微带输运以实现下激光能级电子的快速抽取，所以器件的工作电压可以大幅降低以减少器件本身的焦耳热。因为焦耳热小，所以束缚态到连续态跃迁结构更适合连续波工作。

在THz波段，由于THz频率对应的子能级差很小（10 meV左右），实现THz QCL激射远比中红外QCL要难得多，主要是在粒子数反转和波导限制两方面^[21]。2002年，意大利和英国的科学家克服了上述困难，采用啁啾超晶格有源区和半绝缘等离子波导结构实现了THz QCL激射，激射频率为4.4 THz，工作温度50 K，输出功率10 mW^[22]。尽管目前THz QCL的低温工作环境一定程度限制了其应用，但是便携式的闭循环制冷器可以很大程度上满足THz QCL的低温和制冷量的要求。随着THz QCL的发展，基于THz QCL频率梳的研究也逐渐展开。2012年，第一个基于QCL结构的频率梳被Hänsch课题组实现，虽然频率在中红外频段，但是表明基于QCL结构的频梳是可行的^[8]。2014年，ETH的Faist课题组利用多有源区堆叠结构，研制出了激射频率达到一个八度的宽度，从1.64 THz到3.35 THz，光学频率梳宽度达到624 GHz，线宽仅为980 Hz的THz QCL^[23]。

1.3 国内外本学科领域的发展现状与趋势

在频率梳研究中，最关键的科学问题之一就是群速度色散（group velocity dispersion, GVD），尤其在频谱宽度较大时，色散会导致相邻频率齿间距随频率的变化而发生变化，从而无法保证频率梳的工作模式，因此，在THz QCL频率梳的设计中，色散效应不可以忽略^[2,16,24]。由于当光通过某一介质时，不仅会发生折射，也有可能被吸收或者放大，这就使得介质的折射率与频率相关，从而导致不同频率的光在同一介质中群速度不相同，便引起群速度色散^[25,26]。如图1.4所示，左图a表现了理想谐振腔和具有色散谐振腔在频谱上的区别，黑色实线表示理想频率梳的频谱，红色实线表示由于色散影响后的频谱，相比于理想谐振腔，由于色散的影响，非理想的谐振腔的重复频率不在固定；右图b比较了三种不同色散情况下（分别为 $30000 \text{ fs}^2\text{mm}^{-1}$ 、 $-500 \text{ fs}^2\text{mm}^{-1}$ 、 $-30000 \text{ fs}^2\text{mm}^{-1}$ ），重复频率漂移与模数之间的关系，可以发现在色散较小的时候，整个频谱的重复频率漂移都在0附近，这也是理想的状态，但是在色散较大的时候，离中心频

率越远的模式，其频率漂移也就越大^[27]。

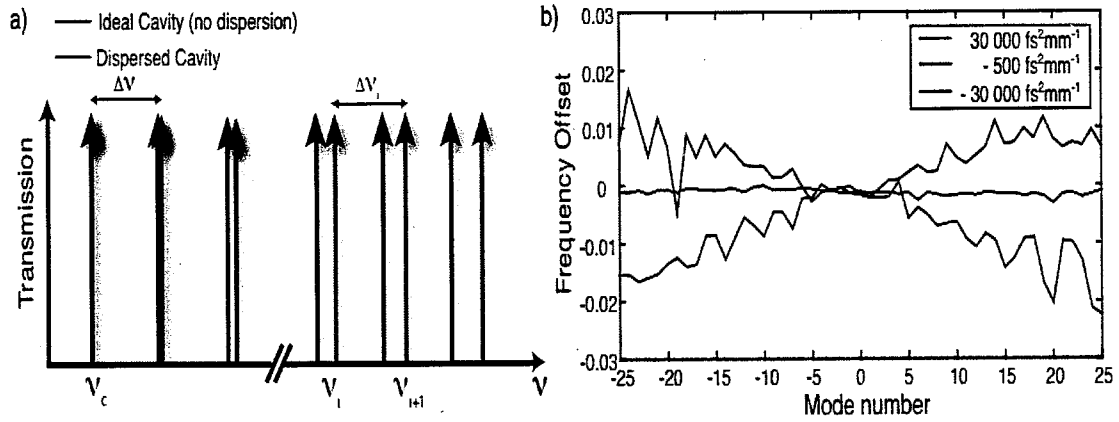


图 1.4 左图a黑色实线表示理想频率梳的频谱，红色实线表示由于色散影响后的频谱；右图b表示在三种不同色散情况下，模式的漂移与模式数目的关系，色散越大，频谱越宽时，频率的漂移越严重^[27]

早在1972年，科学家便开始研究材料中的色散^[25]。随后的数十年里，对于不同结构的激光器，对于色散产生的影响研究逐渐开展^[28-30]。在2009年，奥地利的科学家则证明了QCL的增益会引起了十分强的GVD，并且在增益最大的频点出发生符号的反转^[31]。2012年，Jerome Faist课题组比较了在InGaAs/InAlAs结构中，较窄的增益谱和较宽的增益谱引起GVD的差别，可以发现较宽的增益谱会引起较大的GVD，由于其器件波导设计的优越，在发光区域色散控制较好，因此当时没有进行深入研究^[8]。2014年，在其课题组研究的THz QCL频率梳中，表明了在QCL器件的色散主要由增益介质、子带的电子跃迁吸收、波导损耗引起^[23]。在2015年，其课题组基于密度矩阵传输模型，对色散对THz QCL频率梳产生的影响作出了详细的研究，其计算得到的GVD最大值达到 $30000\text{ fs}^2\text{mm}^{-1}$ ^[27]。由于THz QCL器件巨大的色散限制了其实现宽谱频率梳功能，因此在器件设计时往往针对色散进行优化，降低器件的色散或者采用色散补偿结构限制色散。

在光学频率梳还未诞生前，由于色散对于光脉冲信号的宽度产生了极大的影响，色散补偿结构便已经开始研究了。早在1969年，科学家便利用衍射光栅完成了色散补偿，压缩了脉宽^[33]。衍射光栅由于是多层异质结构，不同频率的光会在不同的深度发生发射，通过设计适当的层数与厚度，便可以研究出具有负色散的衍射光栅，从而补偿了色散^[32]。图1.5展现了两种光栅的显微成像，其中图a为一种2400 line/mm的透射体光栅，基于重铬酸盐制成，图b则是一种1780 line/mm的表面反射光栅，基于多层介质设计得到^[32]。具有随后的数十年，基

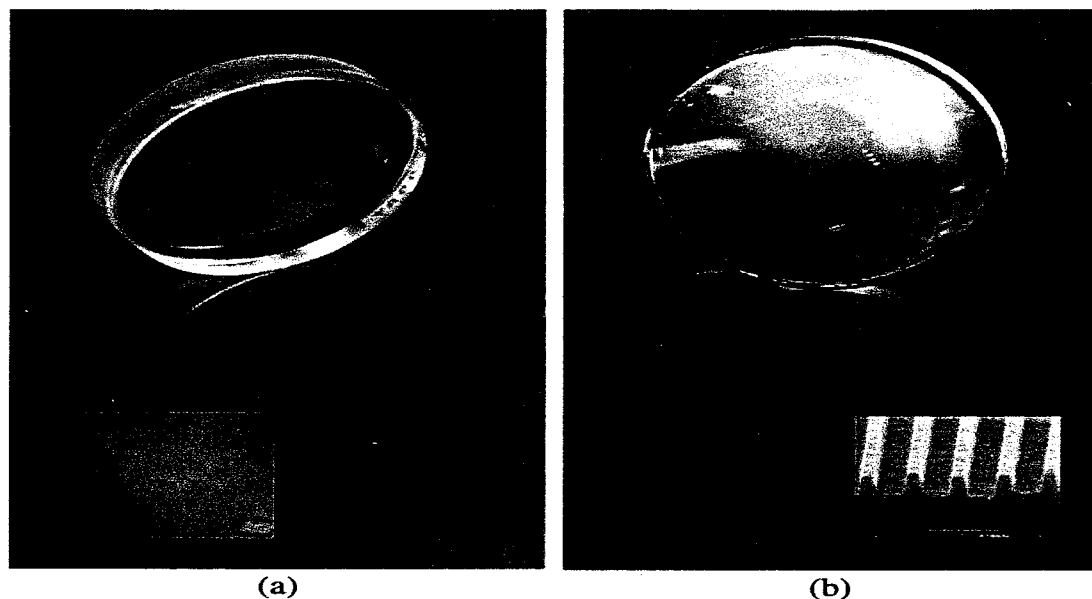


图 1.5 左图a为一种体光栅，基于重铬酸盐制作的2400 line/mm的透射光栅显微镜图像；右图b为一种表面反射光栅，具有1780 line/mm的多层介质光栅的表面轮廓^[32]

于衍射光栅的色散补偿原理，许多新型的色散补偿结构在许多激光器中得到了应用，例如基于一对棱镜^[34,35]，或者是利用啁啾结构的反射镜^[36-39]。但不管色散补偿的结构如何变化，其核心在于使得补偿结构的群速度变化与色散的变化相反，从而抑制色散产生的影响。对于THz QCL，在2014年，美国MIT的Qing Hu课题组在波导内设计了一种类似于啁啾反射镜（DCM）的结构^[40]，如图1.6 b所示，不同频率的光在DCM中传输距离不同，其中频率低的光传输距离更远，频率高的光在DCM前表面就被反射，利用这种原理补偿了器件的群速度色散，研制出的THz QCL激射频率为3.5 THz，频率梳带宽约为500 GHz，共有70个模式。基于光学分立器件的原理，Gires-Tournois干涉仪也常被用来设计称为色散补偿结构^[41-44]，在2016年，Jerome Faist课题组对色散补偿结构作出了讨论，并提出了GTI的方式补偿色散。同年，该课题组利用GTI原理完成对器件的色散补偿，使得频率梳的宽度达到70 cm^{-1} ，其结构如图1.6 a所示，通过在器件的末端生长额外的材料来形成GTI结构，通过控制材料类型从而使得前表面反射率较低，后表面通过镀金使得反射率达到100%^[45]。法国巴黎高等师范学院的Sukhdeep Dhillon课题组则利用刻蚀工艺在THz QCL上刻蚀出一个空隙，通过调整空隙的位置和长度，在QCL的一段形成了GTI结构，有效的实现了色散补偿，将THz脉冲的宽度从16 ps减小到了4 ps^[46]。相比于MIT课题组提出的啁啾反射镜结构，GTI结构在工艺和设计上更加灵活，但是在色散补偿范围小于啁啾反射镜结构。而在飞秒激光器应用相对成熟的衍射光栅，其频率覆盖范围更

大，并且属于波导外，因此使用灵活方便，但是如果这种器件设计在太赫兹波段，其工艺要求以及设计更加复杂，且无法有效的集成到QCL器件上，提高了片上系统集成的难度。

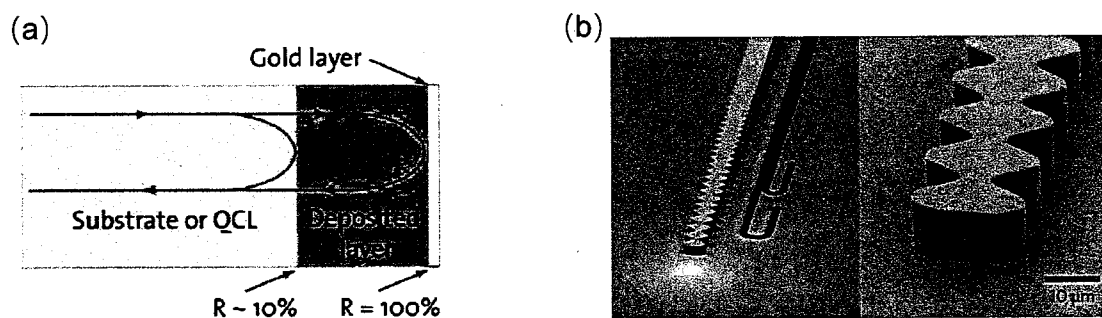


图 1.6 左图a为Jerome Faist课题组研制的基于GTI结构THz QCL色散补偿结构，通过在QCL一个端面外生长材料形成GTI结构；右图b为Qing Hu课题组通过刻蚀工艺，直接在THz QCL波导上设计的DCM结构，利用不同频率的光在其传输距离的差异实现了色散补偿^[40,45]

在国内，开展THz QCL研究工作的主要有中科院上海微系统与信息技术研究所、中科院北京半导体所、中科院紫金山天文台以及中科院上海技术物理研究所。但研究THz QCL频梳的单位目前只有上海微系统所曹俊诚研究组。中科院半导体所近年实现了高功率连续波工作THz QCL器件^[47]。紫金山天文台与荷兰、美国MIT合作将THz QCL作为本地振荡源应用于外差探测^[48]。技术物理所与法国十一大、英国利兹大学合作在单模、面发射THz QCL方向做出了出色的工作^[49]。在2017年，本课题组万文坚等采用气源分子束外延技术生长了束缚态向连续态跃迁的有源区材料，通过半绝缘等离子体波导工艺制作了THz QCL器件，实现了频率梳功能，激射频率为4.2 THz，频谱宽度为330 GHz^[50]。到目前为止，国内还没有研究机构开展针对THz QCL频率梳的色散研究工作。本论文将在一定程度上增强国内QCL研究工作的多样性。

1.4 本文的主要工作

长期以来，中国科学院上海微系统与信息技术研究所太赫兹固态技术重点实验室就致力于THz QCL器件的设计、优化、工艺以及测试。其中在2017年，课题组结合微波调制技术，实现超宽动态范围的匀质、宽谱THz QCL频梳，频率连续覆盖范围达到330GHz,比传统的束缚态到连续态跃迁THz QCL的频谱覆盖宽度大一倍。最近，课题组在THz QCL频率梳的设计与应用进行了更加深入的研究。本论文主要研究的THz QCL器件基于束缚态到连续态跃迁和共振声子

散射结合的有源区结构，该结构具有阈值电流小，光功率高等优点。然而由于器件的增益、波导损耗、材料吸收引起的GVD，严格的限制了其频率梳的频谱宽度以及模式的稳定性。在此基础上，我们采用数值方法计算了不同结构THz QCL的增益、波导损耗、材料吸收引起的GVD，并将模拟结果与实验测试结果进行比较。另外，本论文在基于准确的GVD计算后，计算了一种可集成于THz QCL的色散补偿结构引起的色散。

在本文的第二章中，我们详细计算了双面金属波导结构THz QCL的色散。其主要原因由有源区增益、波导损耗、材料吸收三部分引起。首先基于Drude模型，我们计算了器件各部分材料的复折射率与频率的关系，基于此，利用有限元法（FEM）我们仿真得到了波导损耗与频率的关系；利用剩余射线带理论模型，我们计算出有源区材料GaAs的吸收曲线；有源区增益可以由费米黄金定则计算得到，考虑到增益钳制效应，我们考虑来十一条能级吸收的影响，结合波导损耗、镜面损耗重新修正了有源区增益。有源区增益、波导损耗、材料吸收会引起系统复折射率虚部变化，通过Kramers-Kronig关系我们可以将系统复折射率的实部与虚部联系起来，从而得到器件增益、波导损耗、材料吸收引起的GVD。在第三章中，我们修正了色散模型使其用于半绝缘等离子体波导结构THz QCL的色散研究。由于半绝缘等离子体波导结构限制电磁场的能力较弱，波导几何尺寸对器件的色散有着重要影响。我们计算了不同脊宽下THz QCL的色散，同时与相应的实验数据进行了比较，器件拍频信号的实验数据很好的证明了我们的GVD计算，同时分析实验数据后基于 $150\text{ }\mu\text{m}$ 脊宽的THz QCL，我们实现了双光梳，进一步证明了该器件频率梳的功能。在文中第四章，我们介绍了一种基于GTI的色散补偿结构，。该结构利用刻蚀工艺，可以直接设计在器件波导上，便于系统集成。同时利用数值方法，计算了该结构在不同前表面反射率下的色散，以便用于THz QCL的色散补偿。

第2章 双面金属波导结构THz QCL的色散

2.1 引言

本章主要介绍了群速度色散的基本概念以及其数理模型。基于此，我们将讨论双面金属波导结构THz QCL的色散，主要由波导损耗、材料吸收、有源区增益引起，并通过增益钳制效应修正有源区增益。同时，该模型不仅适用于双面金属波导结构，针对其它结构的THz QCL,只需对部分参数进行修正即可。

2.2 器件色散的计算

介质的色散是在介质中传播的电磁波的相速度与群速度取决于电磁波频率的现象，这种依赖性主要来自电磁场与介质电子的相互作用，相关的定量测量就是群速度色散（GVD）。量化GVD的现代方法是围绕某个中心频率 ω_0 ，基于波数 k 的泰勒展开（每单位长度光谱相位的变化）作为角频率 ω 的函数^[29,30,51]，如式（2.1）所示：

$$k(\omega) = k_0 + \frac{\partial k}{\partial \omega}(\omega - \omega_0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 k}{\partial^2 \omega}(\omega - \omega_0)^2 + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 k}{\partial^3 \omega}(\omega - \omega_0)^3 + \dots \quad (2.1)$$

其中式中常数项表示一个固定的相移，一阶项一般定义为电磁波的群速度，表示波的整体形状（称为波的调制或包络）在空间中传播的速度,等于波数对频率微分后的倒数：

$$V_g(\omega) = \frac{\partial k}{\partial \omega} = \frac{c}{n(\omega) + \omega \frac{\partial n(\omega)}{\partial \omega}} \quad (2.2)$$

其中 k 表示波矢， $n(\omega)$ 表示折射率与角频率的关系。式（2.1）中的二阶微分项则表示每单位长度的群延迟色散（GDD），也就是GVD。三阶和更高阶的项表示高阶色散，只有当处理非常宽的光谱时才会考虑高阶色散，然而此时泰勒展开并不适用，通常在数值模拟中，直接使用与频率相关的相位变化表在处理高阶色散时更加方便。在本文针对THz QCL的色散研究中，不会考虑到高阶色散的影响。

式（2.2）表明如果折射率 n 不时一个常数，而是一个与频率相关的量，意味着波的群速度也将是一个与频率相关的量，便产生了GVD。通常情况下，可以使用式（2.3）来表征一个器件的GVD：

$$GVD = \frac{\partial}{\partial \omega} \frac{1}{V_g(\omega)} \quad (2.3)$$

可以发现, 计算GVD的关键便是得到与频率相关的折射率函数 $n(\omega)$ 。当电磁波通过某种介质的时候, 与在真空传播不同的是, 电磁波的一部分可能会被吸收或者放大, 这时需要用复折射率 $\tilde{n} = n + ik$ 来定义这种情况。其中实部 n 表示折射率, 虚部 k 定义为消光系数, 如式(2.4)所示, 其中 $\alpha(\omega)$ 表示损耗或者增益, 当描述损耗时, k 为正值, 描述增益时, k 为负值。

$$k = \frac{\alpha(\omega) \times \lambda}{4\pi} \quad (2.4)$$

再根据Kramers-Kronig关系, 可以用式(2.5)将实部和虚部联系起来。Kramers-Kronig关系式是一种双向数学关系, 常用于计算物理系统中的虚部和实部, 对应于稳定系统, 因果关系意味着分析性条件, 同样的, 分析性条件意味着相应稳定物理系统的因果关系^[52]。其中等式右边中的积分项表示由于消光系数 k 导致折射率 n 的变化, 等式右边的常数项 n_0 表示不考虑消光系数时的折射率。

$$n(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\omega' k(\omega') - \omega k(\omega)}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' + n_0 \quad (2.5)$$

可以发现, 若一个系统中存在与频率相关的增益或者损耗, 便会有消光系数, 通过式(2.5)可以得到其引起的折射率实部的变化, 根据式(2.2)(2.3), 这种变化将会引起GVD, 同时依赖于频率关系。对于一个THz QCL频率梳, 其关键参数重复频率 $f_{rep} = c / 2n_G^{eff}l$, 其中 n_G^{eff} 表示器件的等效折射率, l 表示器件的腔长。对于一个理想的频率梳, 其重复频率为一个定值, 但实际由于GVD的影响, 等效折射率是一个与频率相关的量, 那么重复频率也会随着频率发生变化, 从而破坏了器件的稳定性^[53]。

$$GVD = \left\{ \frac{|\Delta n_G^{eff}|}{c} \frac{1}{2\pi \bullet f_B} \right\} \quad (2.6a)$$

$$\Delta n_G^{eff} \approx \frac{n_G^{eff}}{f_B} \Delta \quad (2.6b)$$

通过式(2.6)可以计算由于GVD导致的第 m 个模式发生的频率漂移 Δ , 其中 $f_B = m \bullet f_{rep}$, 表示第 m 个模式与中心模式的频率间隔, Δn_G^{eff} 表示由于GVD引起的等效折射率变化。图2.1给出了当GVD等于 $10 \times 10^5 \text{ fs}^2/\text{mm}$ 时, 第 m 个模式发生的频率漂移。可以发现, 随着THz QCL频率梳的频谱越来越宽, 即 m 越大时, 发生的频率漂移 Δ 会越来越大, 从而使得器件的稳定性越来越差, 呈现出二次函数的关系, 最终甚至使得器件失去频率梳的功能。

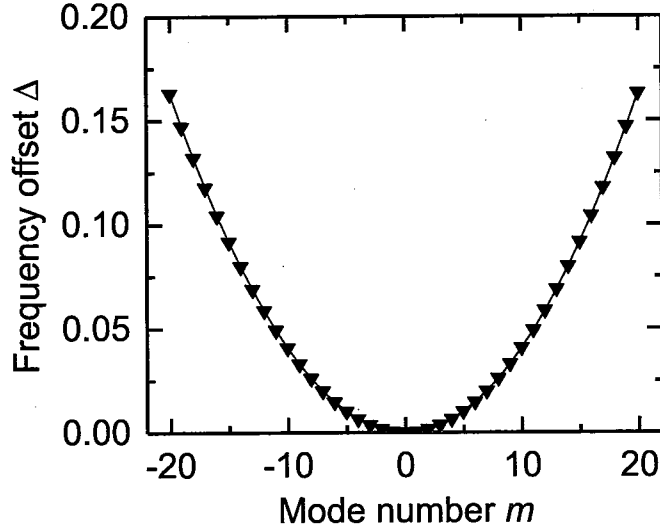


图 2.1 由于GVD引起的频率偏移 Δ 与模式数目 m 的关系，频谱越宽 m 越大， Δ 越大

本章节首先对双面金属波导结构THz QCL的GVD进行数值仿真。器件的有源区结构如参考文献Wan et al.^[50]所示，采用的是束缚态到连续态跃迁和共振声子的混合结构，这种结构工作电压低，阈值电流低，更适合连续波工作^[54]。材料为GaAs/AlGaAs体系，按照生长方向从下至上一个周期的厚度为：4.1/3.8/1/23.6/1/13.8/2.1/11.8/3.1/9.6/3.1/8.7/3.1/7.7/3.1/17.2/3.4/14.8 nm。器件的腔长为6 mm，激射频率为4.2 THz。我们将计算由器件的波导损耗、材料吸收、有源区增益三个因素引起的GVD，其中考虑到增益钳制效应，有源区增益会被子带电子跃迁吸收、波导损耗、镜面损耗所钳制。

2.2.1 波导损耗

THz QCL器件的波导损耗与其波导结构密切相关。目前主要采取的结构是半绝缘表面等离子体波导结构和双面金属波导结构^[55]。相比与半绝缘表面等离子体波导结构，由于波导层过于狭窄，双面金属波导结构的THz QCL远场信号质量较差，但是其基模的频率范围更宽，波导损耗更加稳定^[56,57]。因此我们首先利用有限元法(FEM)软件COMSOL对采用双面金属波导结构的THz QCL进行研究。在计算电磁学中，为了求解麦克斯韦方程组，有各种各样的方法，主要有时域全波算法和频率全波算法，其中时域全波算法又有时域积分法(FIT)和时域微分法(FDTD)，对于不同的电尺寸结构，不同的算法仿真速度和精度不同。一般而言，对于电大尺寸(仿真模型电尺寸大于50小于500倍波长)，时域全波算法求解速度更快，需要消耗的计算机硬件资源也更少，但是时域全波算法的需要有严格的电磁波衰减条件；频谱全波算法最具代表性的就是有FEM，通过将

数学模型离散化,可以得到相应的数值模型,随后求解离散后的方程,得到数值解并进一步分析。由于FEM的通用性,其应用范围不仅仅限制在麦克斯韦方程,理论上任何偏微分方程都可以用FEM求解。同时,相比于FIT算法,FEM在网格离散化采用的是三角形(二维)/四面体(三维)结构,而FIT采用的是四边形(二维)/六面体(三维),因此FEM求解的精度要好于FIT。需要注意的是,FEM属于频域算法,因此在计算单一频点时速度较快,而在宽谱的情况下,需要在频域上进行采样后多次运算才能得到仿真结构,而FIT属于时域算法,求解完成后通过傅立叶变换即可得到一个宽谱范围内的结果。为了解决FEM在宽谱范围内求解速度慢,需要的硬件资源大等缺点,我们将在COMSOL软件中进行建模后,采用Livelink for MATLAB功能,在MATLAB中实现仿真求解,从而最大化利用有限的计算机资源。材料中的电子对电磁波的传输有着重要的影响。对于宽谱范围内的仿真,为了获得更加精确的结果,我们需要先计算得到材料的参数与频率的关系后,再对波导进行分析,从而得到更为准确的波导损耗。

我们首先基于德鲁德 (Drude) 模型计算器件各个部分的复折射率与频率的关系。Drude模型在1900年由Paul Drude提出,随后在1905年由Hendrik Antoon Lorentz进行拓展,因此也被称为Drude-Lorentz模型,用来解释电子在材料中的传输性能^[58]。它假设固体中电子的微观行为可以由经典的动力学理论研究,忽略了电子和离子之间或电子之间的任何长程相互作用,自由电子与其环境唯一可能的相互作用是通过与较重的、相对固定的正离子之间来回反弹。如式(2.7)式(2.8)所示,介质的介电常数将修正为复介电常数,其实部和虚部与频率密切相关。其中 ϵ_∞ 为高频下的相对介电常数,N为电子浓度,t表示电子弛豫时间, m^* 为有效质量。

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1 + i\epsilon_2 \quad (2.7a)$$

$$\omega_p = \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m^*} \quad (2.7b)$$

$$\epsilon_1 = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p t^2}{1 + \omega^2 t^2} \quad (2.8a)$$

$$\epsilon_2 = \frac{\omega_p t}{\omega(1 + \omega^2 t^2)} \quad (2.8b)$$

对式(2.7)式(2.8)求解后,我们可以得到器件每层材料的复折射率实部折射率 n 和虚部消光系数 k 可以写成式(2.9)

$$n = \sqrt{\frac{\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} + \epsilon_1}{2}} \quad (2.9a)$$

$$k = \sqrt{\frac{\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} - \epsilon_1}{2}} \quad (2.9b)$$

以有源区为例，基于式 (2.9)，图2.2给出了有源区复折射率的实部（红色实线）和虚部（蓝色虚线）随频率的变化。随着频率的升高，有源区复折射率实部逐渐上升，最后将趋近于其极限折射率，有源区复折射率虚部逐渐下降，最后将趋近于0。

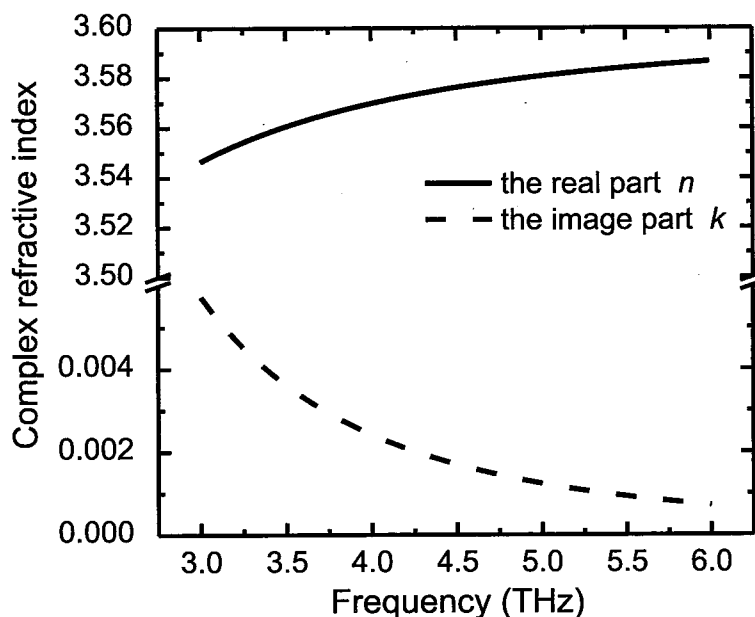


图 2.2 基于Drude模型，计算得到的有源区复折射率随频率变化关系

对器件每层材料利用Drude模型计算得到复折射率与频率的关系后，我们利用有限元法计算软件COMSOL Multiphysics进行建模仿真。COMSOL Multiphysics是以FEM为基础，通过求解偏微分方程或偏微分方程组来实现对物理现象的仿真，起源于MATLAB软件的Toolbox。该软件具有用途广泛、灵活、易用等特点，经过多年发展，软件已经拥有结构力学模块、化学工程模块、热传递模块、地球科学模块、射频模块等多个模块以及大量外接接口，可以有效的进行多物理场建模仿真。

在这里我们使用COMSOL Multiphysics中的射频模块，以及Livelink For MATLAB功能，对器件的波导结构进行建模仿真。仿真模型从下至上分别为：下电极（Au，1 μm 厚），衬底（Si，150 μm 厚），下接触层（50 nm厚），有源区（10 μm 厚，脊宽为150 μm ），上接触层（50 nm厚），上电极（Au，1 μm 厚）。其中在仿真设置时，Au层将被设置为完美电导体，即当电场传递至Au层时，会被完全反射，从而确保电场被限制在两个Au层中，同时器件的外围空间设置为完美

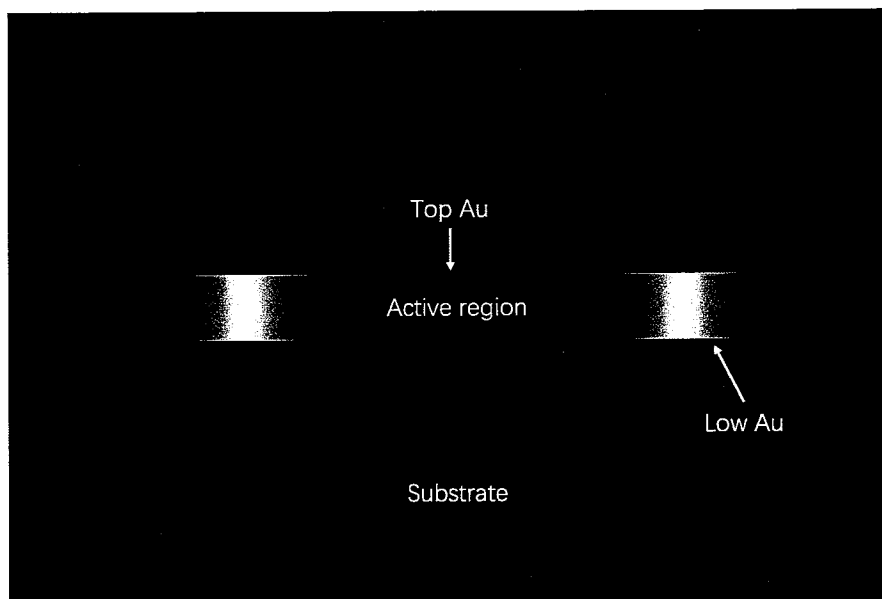


图 2.3 利用有限元法仿真得到4.2 THz下器件的电场 E_y 分布

匹配层，即电场传递至此时，将被完全吸收，从而确保不存在外界的反光过程，更加符合实际情况。如图2.3所示，我们给出了器件在4.2 THz时仿真得到的电场分量 E_y 的分布，电磁场被很好的限制在了有源区内，限制因子接近1。需要注意的是，随着频率的变化，同一几何结构的波导并不能在任何频率上提供良好的本征模。图2.4给出了3.9 THz~4.45 THz频率范围内波导损耗 α_w （图2.4 a）以及波导等效折射率（图2.4 b）与频率的关系。在波导通带频率范围内，随着频率的增加，波导损耗将逐渐下降，等效折射率逐渐上升，趋近于器件的主要构成材料GaAs的折射率3.6。合理的设计器件波导结构不仅能够提供更宽的通带范围，同时波导损耗更低更平滑，器件的工作频率范围更宽。

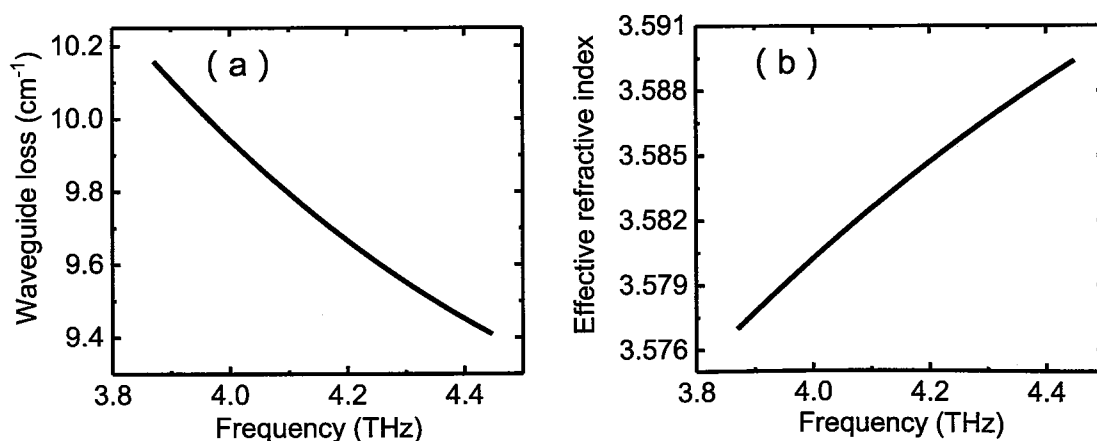


图 2.4 (a)为波导损耗与频率的关系；(b)为了基于波导损耗计算得到的波导等效折射率实部与频率的变化关系

2.2.2 材料吸收

归因于一阶或二阶电子偶极矩或势能中的非谐波项，光学吸收由于晶格振动出现在红外区域的吸收带（波长范围为几十微米），即剩余射线带区域 (rest-strahlen band)。在剩余射线带区域，电磁场与基本的晶格振动相互作用，从而产生两种效应：(1)由于晶格振动的产生或湮灭引起的电磁波吸收或增强；(2)通过晶格电子发生电磁波的散射^[59]。例如在GaAs材料中，一阶偶极矩会对具有零 k 矢量的光学模式(长波光声子)产生非常强的吸收，这会使得电磁场发生增强或损耗，同时使得电磁波散射。在这里，我们使用Balkanski模型，将相对介电常数 $\epsilon(\omega)$ 写为：

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} \left(1 + \frac{\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2 - i\gamma} \right) = \epsilon_1 + i\epsilon_2 \quad (2.10)$$

其中 ϵ_{∞} 为高频下的相对介电常数， ω_{TO} 为横向光学声子频率 (transverse-optical, TO)， ω_{LO} 为长波长光学声子频率 (long-wavelength longitudinal-optical, LO)， γ 为声子阻尼常数。根据复折射率 $\tilde{n} = \sqrt{\epsilon(\omega)\mu}$ ，对于THz QCL器件，其有源区材料主要为GaAs，其相对磁导率 μ 一般认为等于1，因此将式(2.10)展开后可以得到材料复折射率的实部折射率 n 和虚部消光系数 k ：

$$n = \left[\frac{\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} + \epsilon_1}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.11a)$$

$$k = \left[\frac{\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} - \epsilon_1}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.11b)$$

对于有源区主要成分GaAs材料， ω_{LO} 一般认为等于 290.96 cm^{-1} ， ω_{TO} 等于 267.59 cm^{-1} ，取 $\epsilon_{\infty} = 12.96$ ，最终我们计算得到GaAs材料的复折射率实部与频率的关系如图2.5所示。随着频率的上升，由于剩余射线带的作用，材料的等效折射率越来越大，但是注意到当频率过高时，存在材料存在极限折射率。

2.2.3 子带电子跃迁吸收

在光学中，子带电子跃迁被用于半导体中准二维电子态之间的转换。在半导体中，电子的跃迁可以发生在价带与导带之间（带间），也可以发生在价带或导带内的能级之间（带内）^[60]。而THz QCL器件是一种基于子带间电子跃迁的半导体激光器，其激射频率由多量子阱结构子能级的能级差决定。我们首先利

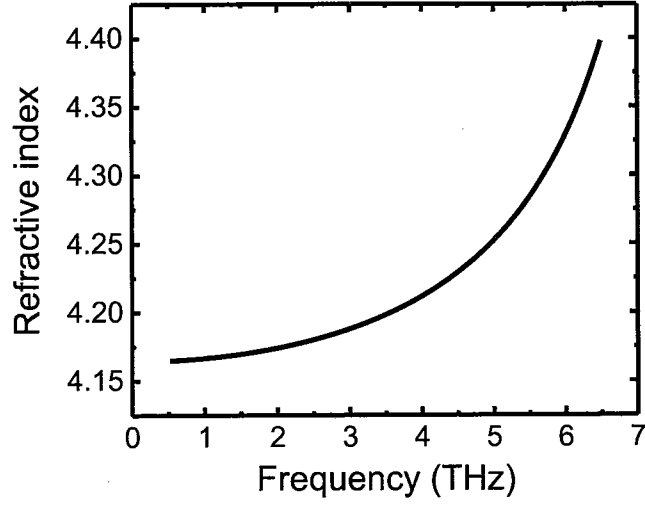


图 2.5 由剩余射线带理论计算得到的材料折射率与频率的关系

用传输矩阵方法(TMM)求解THz QCL器件的能带结构^[61]。对于一维定态薛定谔方程，波函数 $\Psi(x)$ 满足

$$\left[\frac{-\hbar^2}{8\pi^2} \frac{d}{dl} \frac{1}{m^*(l)} \frac{d}{dl} + V(l) \right] \Psi(l) = E \Psi(l) \quad (2.12)$$

其中 $\hbar$ 表示普朗克常数， m^* 表示有效质量， V 表示外加电势， E 为本征能量， l 表示有源区的厚度。如果将有源区 l 离散化为 $N=3500$ 层，那么在任意两个连续的层 j 和 $j-1$ 之间则满足：

$$\Psi_{j-1}(l_{j-1}) = \Psi_j(l_j) \quad (2.13a)$$

$$\frac{1}{m_{j-1}^*} \frac{d}{dl} [\Psi_{j-1}(l_{j-1})] = \frac{1}{m_j^*} \frac{d}{dl} [\Psi_j(l_j)] \quad (2.13b)$$

对于一维定态薛定谔方程，一般认为其解的形式为：

$$\Psi_j(l) = A_j e^{P_j(l)} + B_j e^{-P_j(l)} \quad (2.14)$$

其中

$$P_j(l) = \begin{cases} \Gamma_0 j & j = 0 \\ \Gamma_j(l - l_{j-1}) & j > 0 \end{cases} \quad (2.15a)$$

$$\Gamma_j = i \sqrt{\frac{8\pi^2 m_j^*}{\hbar^2} (E - V_j)} \quad (2.15b)$$

外加电势 V_j 随 l 的变化规律满足 $V(l, \xi) = V(l, 0) - q \cdot l \cdot \xi$ ，其中 ξ 表示外加电场强度， q 表示单位电荷电量。将式(2.13)和(2.14)用矩阵的形式表示：

$$\begin{bmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{bmatrix} = M_j \cdot \begin{bmatrix} A_j \\ B_j \end{bmatrix} \quad (2.16)$$

那么对于整个有源区则有：

$$\begin{bmatrix} A_{N-1} \\ B_{N-1} \end{bmatrix} = M_{N-2} \cdot M_{N-3} \cdots M_1 \cdot M_0 \cdot \begin{bmatrix} A_j \\ B_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix} \quad (2.17)$$

考虑到边界条件 $A_0 = 0$ 以及 $B_{N-1} = 0$ ，从式(2.17)中则可以得到：

$$\alpha_{22}(E) = 0 \quad (2.18)$$

利用上述方法，在外加电场 $\xi = 6 \times 10^5 \text{ V/cm}$ 情况下，给出了一个激射频率在4.2 THz的QCL一个周期的能级结构，如图2.6所示^[50]。激射上能级的电子跃迁到下能级时产生光子，随后经过一系列能级间距较窄的能级后，迅速被抽取到较低能级，再经过共振声子散射过程进入下一个周期。

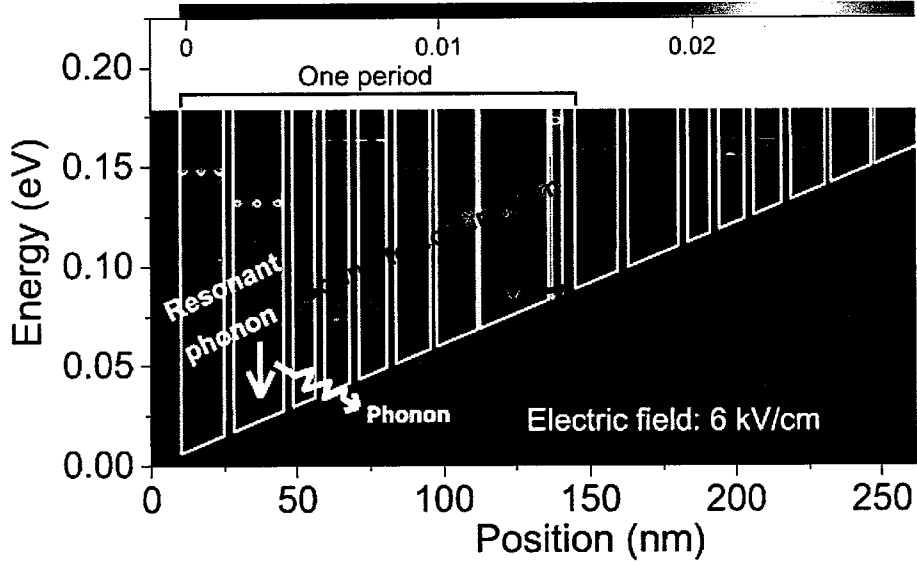


图 2.6 THz QCL的能带结构图，红色为光子散射过程，黄色为共振声子散射过程^[50]

然而能级上的电子不仅会向下跃迁释放能量，同样也能向上跃迁吸收能量，从而存在子带电子跃迁吸收。我们基于费米黄金定则对此进行量化，利用费米黄金定则，散射率可以写为^[60]：

$$R = \frac{1}{T} = \frac{\pi}{2\hbar} \sum |\langle i | H_{int} | f \rangle|^2 \rho(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (2.19)$$

子带电子吸收 α_{2D} 可以写为与频率的函数，每个区域S的能量吸收可以写为：

$$P/S = I\alpha_{2D} \quad (2.20)$$

同时吸收与电场相关，

$$I = \frac{1}{2} \epsilon_0 n_{ref} c \xi^2 \quad (2.21)$$

其中 n_{ref} 表示折射率， c 表示光速。其中只有电场 ξ 的 z 方向分量能够被耦合进子带系统。当电磁场的能量损失和获得的能量平衡时：

$$\alpha_{2D}(\omega) = \frac{2R\hbar\omega}{\epsilon_0 n_{ref} c \xi^2} \quad (2.22)$$

将式(2.20)带入式(2.23)中后可以得到：

$$\alpha_{2D}(\omega) = \frac{\pi\omega}{\epsilon_0 n_{ref} c} \sum_{i,f} |\langle i | H_{int} | f \rangle|^2 \rho(E_f - E_i - \hbar\omega) \delta(k_f - k_i) \quad (2.23)$$

其中 ρ 表示单位面积的状态密度， δ 函数表示电磁场被吸收，对于一个能带模型而言，其子带电子吸收可以表示为：

$$\alpha_{2D}(\omega) = \frac{\pi q^2 \omega}{\epsilon_0 n_{ref} c} z_{ij}^2 n_i \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (2.24)$$

其中 n_i 和 n_j 表示 i 和 j 能级的电子数， z_{ij} 表示 i 和 j 能级的偶极矩阵元， $\delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$ 函数则可以用归一化的洛伦兹线 $\frac{\gamma/\pi}{(E_f - E_i - \hbar\omega)^2 + \gamma^2}$ 取代，其中 γ 表示能级半宽，我们最终得到子带电子吸收的表达式为：

$$\alpha_{2D}(\omega) = \frac{q^2 \omega z_{ij}^2 n_i}{\epsilon_0 n_{ref} c} \frac{\gamma}{(E_f - E_i - \hbar\omega)^2 + \gamma^2} \quad (2.25)$$

对于本文研究的THz QCL器件，激射上下能级为第10条能级(上能级)和第9条能级(下能级)，能量更高的能级上几乎不参与THz QCL中电子的输运过程，因此我们考虑一个周期内的11条能级后，计算得到子带电子跃迁吸收的结果如图2.7所示：

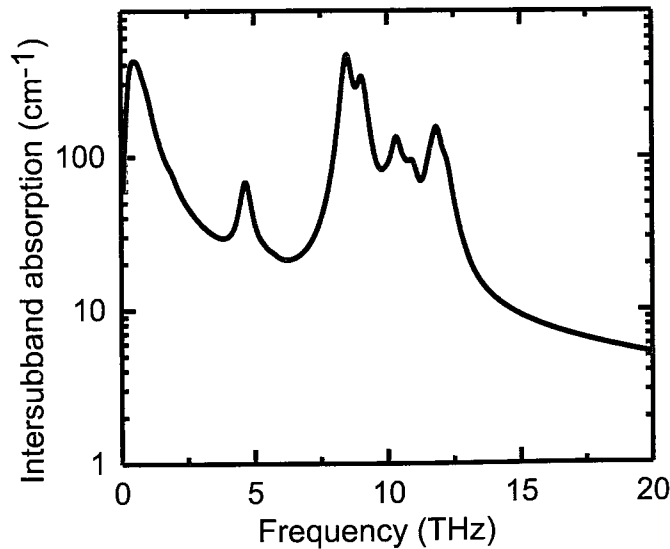


图 2.7 子带电子跃迁吸收与频率的关系

对于THz QCL结构，电子迅速的通过激射上能级跃迁到激射下能级，再通过由一系列能级差十分小的能级组成的过渡带，进入LO声子散射的上能级，通过LO声子散射后进入下一个周期。因此电子主要集中在LO声子散射的上下能级，而GaAs的LO声子散射为35，同时由于过渡带中的能级差十分小，因此子带间电子跃迁吸收主要集中在0~2 THz和8~10 THz。

2.2.4 有源区增益

对于THz QCL器件，其有源区增益介质为GaAs/AlGaAs周期性结构，由于周期性结构和材料缺陷的影响，有源区增益或者有源区材料吸收引起的色散具有空间啁啾。但是，在本工作中，由于THz QCL有源区中绝大部分材料由GaAs组成，所以针对有源区增益或者材料吸收的计算没有考虑空间啁啾行为。根据费米黄金定则和式(2.18)，器件的增益可以写成^[62]：

$$g(\omega) = \frac{2\pi q^2 \Delta n z^2}{\epsilon_0 n_{ref} L \lambda} \frac{\gamma}{(E - \hbar\omega)^2 + \gamma^2} \quad (2.26)$$

式(2.27)中L表示有源区的厚度， λ 表示器件激射频率的波长， Δn 表示激射上下能级的离子数反转，取 $9 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ， z 表示激射上下能级的偶极矩阵元，由TMM方法计算得到， E 表示器件激射频率对应的能量， $\hbar$ 表示约化普朗克常数。最终计算结果如图(2.8)中黑色曲线所示，其最大值对应于器件的激射频率4.2 THz。虽然在通常计算增益引起的色散时，往往把增益看做与损耗无关的量，但在本文的研究中我们将增益认为与损耗相关主要有两个原因：第一，一旦激光器的电流达到阈值电流后，其增益便会被钳制住，而这与损耗密切相关，同时这更能反应出器件的实际工作状态；第二，从式(2.27)中可以发现，未钳制的增益只与有源区的生长厚度、材料等相关，这意味着如果不同的器件采用相同的有源区设计，就会有相同的增益，这明显与实际不吻合，因此在本文中，我们将考虑到损耗对有源区增益影响，也就是增益钳制效应，当增益 $g(\omega)$ 大于阈值增益 $g_{th}(\omega)$ 后，器件的增益会被钳制到阈值增益^[63,64]。器件的阈值增益由子带电子跃迁吸收 α_{2D} 、波导损耗 α_W 、镜面损耗 α_M 三部分组成，如式(2.28)所示^[64]。其中 Γ 为限制因子，表征波导结构将电磁场限制在有源区的能力，在双面金属波导中一般取1。

$$g_{th}(\omega) = \frac{\alpha_W + \alpha_M + \alpha_{2D}}{\Gamma} \quad (2.27)$$

其中波导损耗 α_W 由有限元法计算得到，如图2.4 (a)所示；子带电子跃迁吸收由式(2.27)计算得到，如图2.7所示；镜面损耗由下式计算得到：

$$\alpha_M = \frac{[-\ln(R_1 R_2)]}{2L} \quad (2.28)$$

其中 L 为器件的腔长，对于双面金属波导结构的THz QCL,端面一般与空气接触，因此 $R_1 = R_2 = 0.64$,计算得到镜面损耗 $\alpha_M = 1.6 \text{ cm}^{-1}$ 。最终得到阈值增益如图2.8中蓝色实线所示，钳制后的增益如图2.8中红色实线所示。由于THz QCL器件激励下能级的电子被迅速抽取到更低等级，因此子带电子跃迁吸收峰值频率并不在激励频率上，导致阈值增益的峰值并不对应于器件的未钳制增益的峰值。因此考虑钳制后的增益引起的GVD相比未考虑钳制效应，往往会更大。

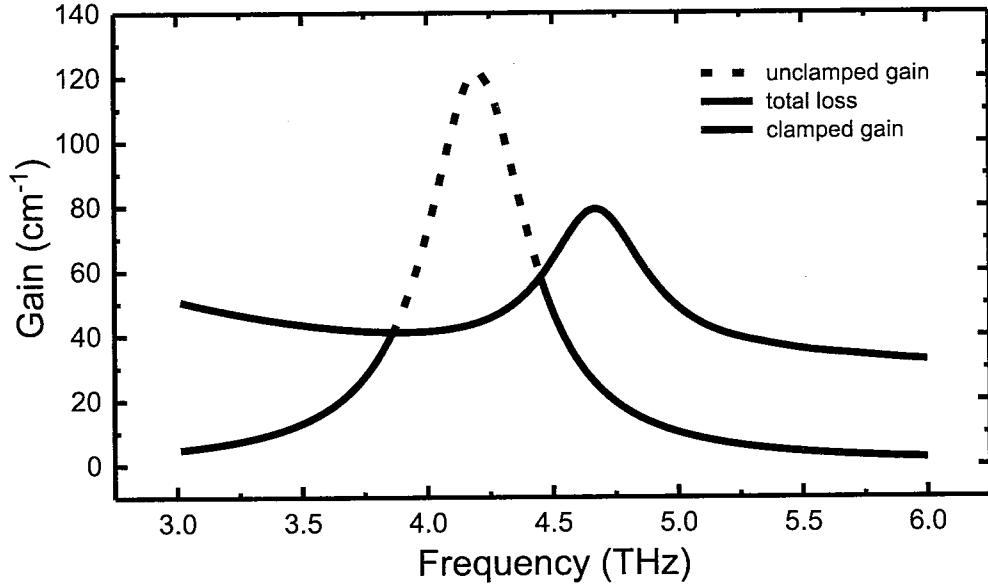


图 2.8 未钳制的增益、阈值增益以及钳制后的增益与频率的关系^[65]

2.2.5 器件总的色散

一般认为THz QCL器件的GVD主要由波导损耗、材料吸收以及有源区增益三部分引起的。将2.2.1、2.2.2和2.2.4节中计算能得到的波导损耗、材料吸收和增益带入式(2.4)中即可求得相应的消光系数，再利用Kramers-Kronig关系即式(2.5)，可求得由于损耗和增益引起的折射率的变化，最后由GVD的定义式(2.2)和式(2.3)即可求得波导损耗、材料吸收、有源区增益引起的GVD(如图2.9中蓝色、黄色、红色虚线所示)，将三者求和即可得到器件总的色散(如图2.9中黑色实线所示)。计算表明，器件总的GVD数值上几乎等于钳制后的增益引起的GVD，由于增益钳制效应，器件在钳制点频率附近有极大的GVD，显著的限制了器件的频谱宽度；波导损耗引起的GVD相对较小，这是由于本文设计的双面金属波导结构其能够形成良好的本征模，但是由于增益钳制效应与波导损耗有关，因此波导结构对于器件的GVD依然有着重要的贡献，同时一个糟糕的波导结构不仅会限制器件的工作频谱宽度，同时会产生巨大的GVD，关于这点会在下一章

中进行详细讨论；器件材料吸收引起的GVD影响相对较小，但是从图2.5可知，如果器件的工作频率过高，GaAs材料吸收引起的GVD将无法忽视，从色散控制的角度上而言，这时需要选择更合适的材料。

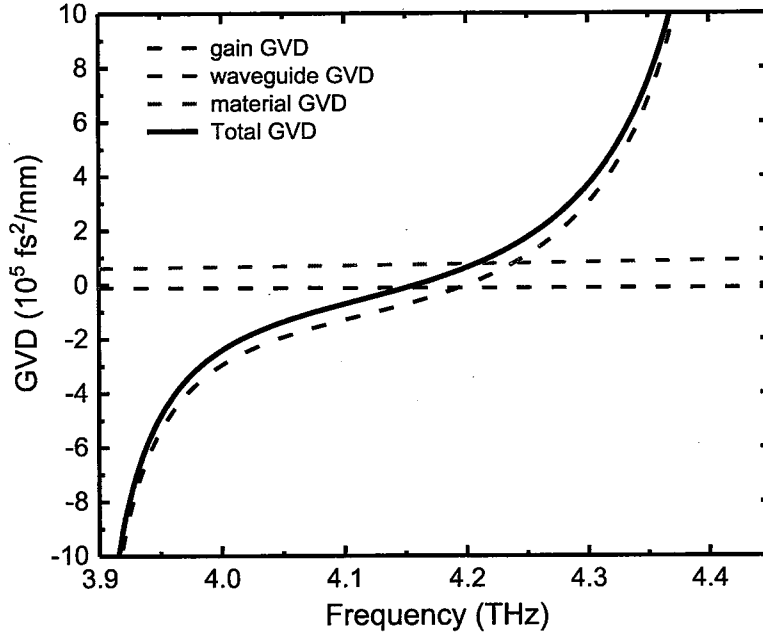


图 2.9 波导损耗、材料损耗、钳制后的有源区增益引起的色散以及器件总的色散与频率的关系^[65]

2.3 小结

在本章中，我们给出了色散的概念，以及其数学表达式。对于THz QCL器件，其色散的主要来源有三部分：波导损耗、材料吸收、有源区增益。我们首先基于Drude模型计算了器件各层材料的折射率与频率的关系，这提高了波导损耗计算结果的准确度，随后利用有限元法对双面金属波导结构进行建模仿真，从而得到波导损耗；材料吸收由剩余射线带理论计算得到，对于THz QCL器件有源区，其材料主要成分为GaAs材料，器件工作频率范围内，其引起的GVD并不是主要成分；器件的增益基于费米黄金定则计算得到，但考虑到THz QCL器件中存在增益钳制效应，我们首先计算了子带电子跃迁吸收和镜面损耗，加上波导损耗后记得得到阈值增益，从而修正了器件的增益。最后我们将波导损耗、材料吸收、有源区增益引起的色散相加即可得到器件总的色散，结果表明器件总的色散与钳制后增益引起的色散相当，同时在钳制点频率附近存在巨大的色散，严重影响了器件的性能。

第3章 半绝缘等离子体结构THz QCL的色散

3.1 引言

我们在上一章中详细讨论了双面金属波导结构THz QCL器件的色散。关于THz QCL波导结构，目前可行的只有双面金属波导和半绝缘等离子体波导两种结构^[45]。双面金属波导结构具有高限制因子，能够在更高的频谱范围内提供本征模，波导损耗引起的GVD较小等优点，但是由于波导层太窄，远小于THz QCL器件激励频率的波长，腔面初光的衍射作用使得远程光束质量较差，并不利于实际应用。如图3.1所示，双面金属波导结构THz QCL的远程光束非常发散，几乎向各个方向发射THz光子，这对THz QCL的实际应用带来了极大的困难。与双面金属波导结构不同，半绝缘等离子体波导结构的下电极在衬底下面，一次波导层更宽，从而具有较好的远程光束质量：在Phi和Theta方向，THz光可以被限制在20-30°的方位内，这对器件未来的应用提供了有利的条件。然而，半绝缘等离子体波导结构的限制因子较低，这意味着波导损耗会阈值增益的影响更大，同时半绝缘等离子体波导能够提供本征模的频率范围也较窄，因此优秀的半绝缘等离子体波导结构的设计对于THz QCL是十分重要的。在本章中，我们将修正双面金属波导结构的色散模型使其应用于半绝缘等离子体波导结构，同时讨论波导结构的脊宽对器件产生的影响，并且进行实验对计算结果进行了验证。

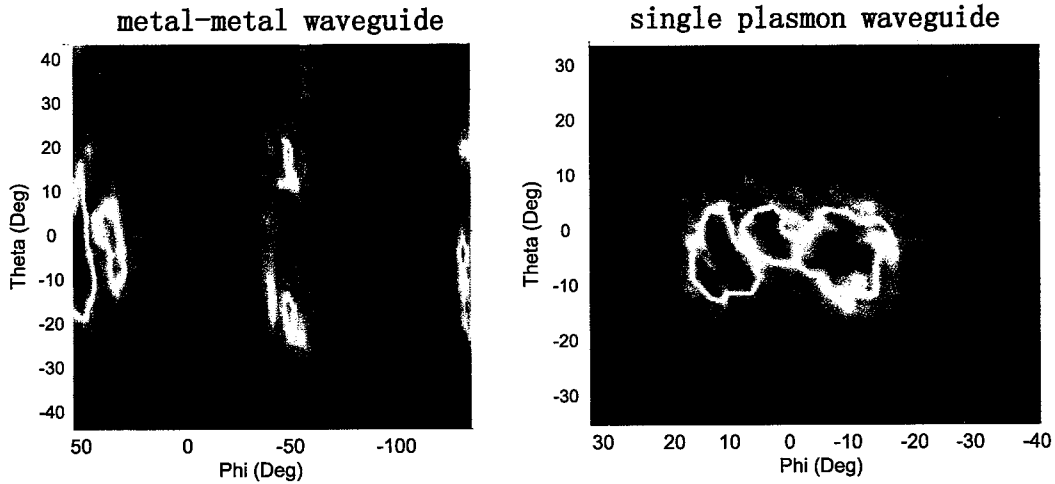


图 3.1 实验测量的双面金属波导和半绝缘等离子体波导THz QCL的远程光束质量。
Phi和Theta分别表示平行于和垂直于激光器有源区生长方向z的两个球面方向的角度

3.2 器件脊宽对色散的影响

由于半绝缘等离子波导结构限制电磁场的能力较弱，因此波导脊宽对于器件的频率梳功能有着重要的影响，波导的损耗、限制因子、高阶模的产生都与脊宽相关^[66-68]。我们首先计算不同脊宽下半绝缘等离子波导结构的THz QCL的色散。本节研究的THz QCL器件腔长都为6 mm,脊宽分别为100 μm ，150 μm 和200 μm 。三种器件都由同一块4英寸的衬底，经过相同的工艺流程制成，即确保了除脊宽外器件其它几何参数以及工艺完全一致。

在第二章中，我们分析了双面金属波导结构THz QCL的色散，对于半绝缘等离子波导结构的THz QCL，该理论依然适用。器件的色散由三部分组成：波导损耗、材料吸收、钳制后的有源区增益。对于波导损耗，首先是建立Drude模型，由于器件的各层材料并未发生变化，因此在2.2.1小节中基于Drude模型的计算结果并不需要修正。再利用有限元法计算不同脊宽的THz QCL在不同频率下的波导损耗，如图3.2 (a)所示。可以发现与100 μm 脊宽的THz QCL器件不同的是，150 μm 和200 μm 器件的波导损耗随着频率增大保持一个良好的单调递增趋势，然而100 μm 器件却在3.6到4.3 THz频率内存在震荡。通过对波导截面二维电磁场的研究，如图3.2 (c)中所示，在3.8和4.0 THz频点下，由于在GaAs衬底内存在高阶横磁模，直接对波导损耗产生了影响，导致了100 μm 器件的波导损耗产生了震荡。对于150 μm 和200 μm 器件，在激射频率范围内则一直保持本征模。

对于器件的未钳制的增益，我们基于费米黄金定则，即式(2.27)计算得到，如图3.2 (b)中灰色实线所示。为了更加符合实际情况，其中离子数反转 Δn 修正为 $2.25 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ 。由于未钳制的增益与脊宽无关，因此3个器件的未钳制增益完全一致。镜面损耗由式(2.21)决定，由于半绝缘等离子波导结构限制电磁场的能力比双面金属波导结构弱，因此其端面反射率 $R_1 = R_2 = 0.32$ ，同时式(2.28)中的限制因子 Γ 由1下降到0.25。最终基于式(2.27)我们计算了三种脊宽下的半绝缘等离子波导结构THz QCL器件钳制后的增益，器件的增益将被钳制在4.05到4.35 THz范围内，在3.3.3小节中的光谱测量很好的验证该结果。图3.2 (b)中给出了未钳制的增益，不同脊宽器件总的损耗(虚线表示)以及钳制后的增益。可以发现，对于100 μm 器件，钳制后的增益也存在类似于波导损耗的震荡，这是由于增益钳制效应，将波导损耗与增益联系起来。同时由于限制因子 Γ 小于1,波导损耗曲线中的震荡会在钳制后的增益曲线中放大，限制因子越小，波导损耗对增益产生的影响越大。

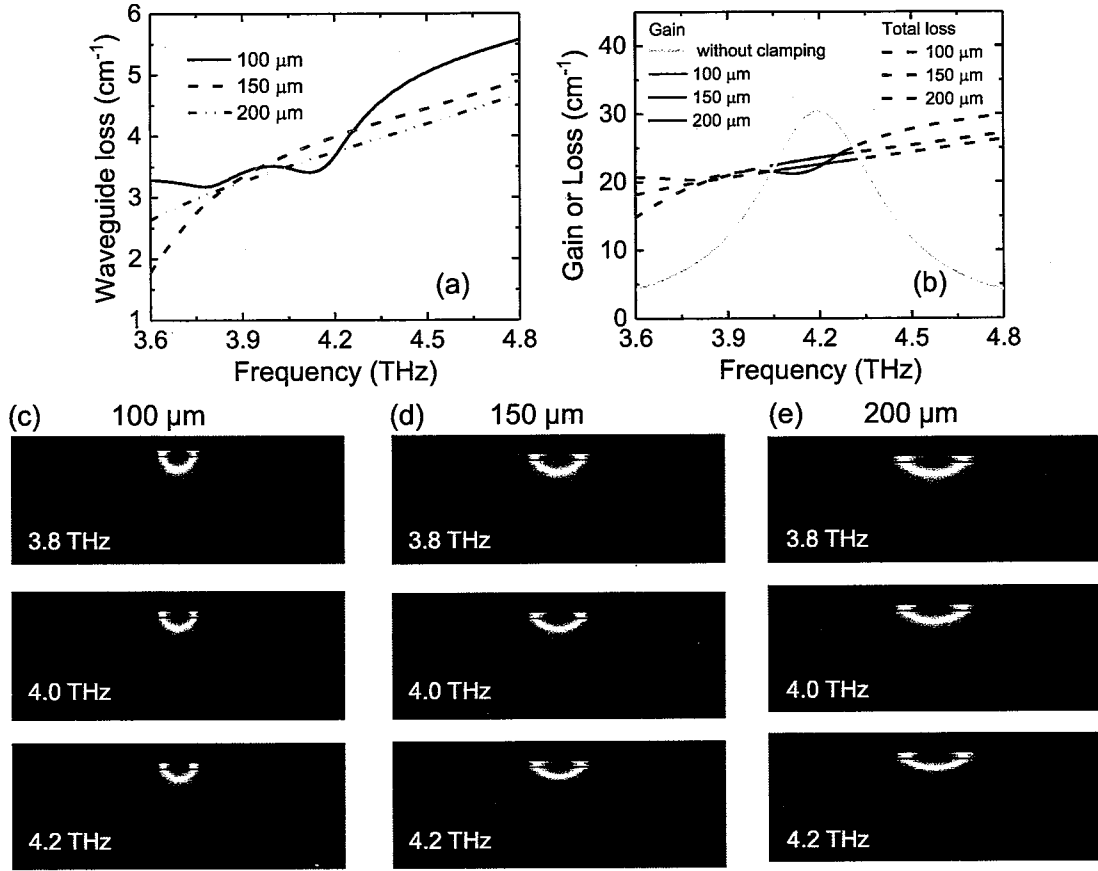


图 3.2 (a) 不同脊宽下半绝缘等离子波导THz QCL的波导损耗与频率的关系；(b) 不同脊宽下计算得到的未钳制增益、钳制后的增益，以及总的损耗与频率的关系；(c),(d)和(e)表示在典型工作频率下三种脊宽的半绝缘等离子波导结构THz QCL器件的二维电场分布^[69]

由于三种脊宽的THz QCL器件有源区的材料并未发生变化，因此2.2.2节中计算得到的材料吸收依然适用。在得到器件的波导损耗、材料吸收和钳制后的有源区增益，利用式(2.2)和(2.3)即可求得三种器件的色散。图3.3 (a)给出了不同脊宽下钳制后的增益引起的色散。由于波导损耗曲线中的震荡，100 μm器件增益引起的GVD比150 μm和200 μm器件斜率更大，数值也更大。而过强、不平滑的GVD会破坏频率梳的纵模从而使得模式的间距不再相等。尽管三种器件增益引起的GVD有明显的差异同时受到波导损耗的影响，但是三种器件波导损耗引起的GVD却没有明显的差异。如图3.3 (b)中所示，三种脊宽器件由于波导损耗引起的GVD都比较平滑同时数值较小。图3.3 (b)中子图放大了三个器件波导损耗引起的GVD，可以发现100 μm器件由于波导损耗的震荡，其引起的GVD依然存在一定程度震荡，这种震荡最终被增益钳制效应放大，从而对增益引起的GVD产生了巨大的影响。图3.3 (b)也给出了基于剩余射线带理论计算得到的有源区GaAs材料吸收引起的GVD。

将有源区增益、波导损耗、材料吸收引起的GVD相加后，便可以得到三种脊宽THz QCL总的色散，如图3.3 (c)中所示。与第二章中双面金属波导结构下THz QCL的色散类似，对于每一个脊宽下，半绝缘等离子结构THz QCL的色散依然主要由钳制后的增益决定。然而100 μm 脊宽的THz QCL的GVD更加糟糕，以至于无法实现频率梳功能，而150 μm 脊宽的THz QCL则表现出较为平滑、数值较小的GVD，是实现频率梳功能的理想脊宽。200 μm 脊宽的THz QCL表现的GVD虽然仅次于150 μm 脊宽的器件，但是在半绝缘等离子波导结构THz QCL，过宽的波导脊宽往往会使得有源区出现高阶模。

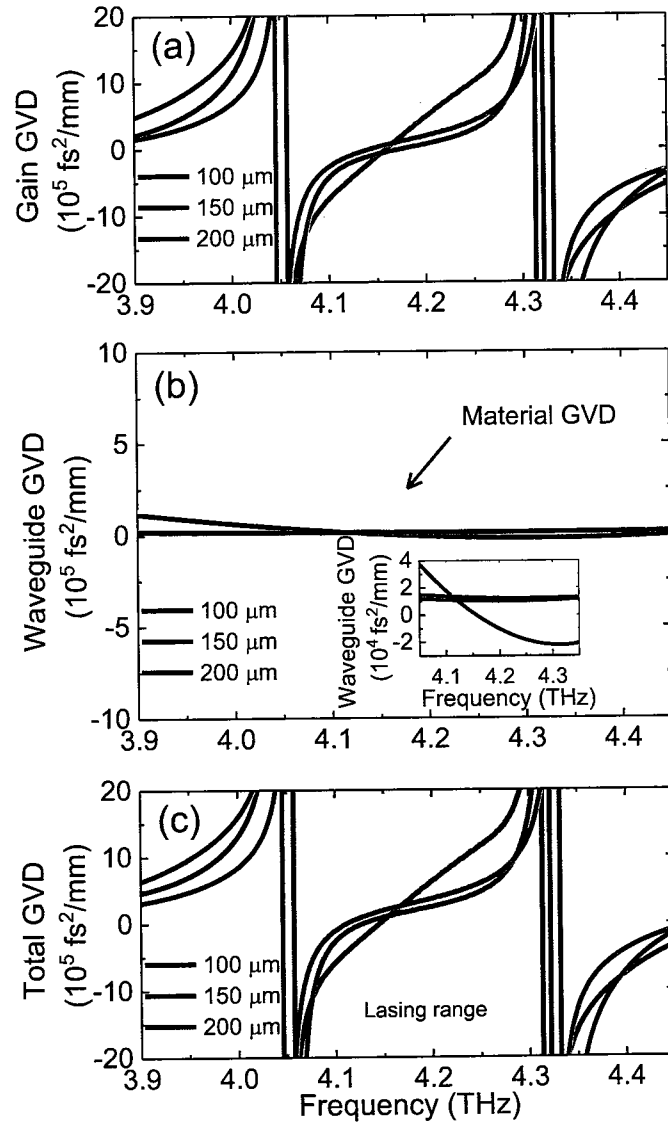


图 3.3 不同脊宽时GVD的计算结果：(a)和(b)分别为钳制后的增益、波导损耗、材料吸收引起的GVD，其中(b)的子图为波导损耗引起的GVD的放大图像；(c)计算得到不同脊宽下THz QCL器件总的色散，其中阴影部分表示激光器的工作频率范围^[69]

3.3 不同脊宽器件的测试

为了进一步验证我们的仿真计算结果，我们将对三种脊宽的THz QCL进行一系列实验，包括功率-电流-电压测试(L-I-V)、拍频信号随电流变化关系(mapping)测试、拍频信号线宽测试(single-shot)、拍频信号的时间稳定性测试(max-hold)以及三个器件的激射光谱测试，其中拍频信号表示谐振腔的往返频率，也就是频率梳模式之间差频，用来表征器件是否实现频率梳功能以及频率梳功能的稳定性^[53,70]。三种脊宽的器件都采用半绝缘等离子体波导结构，如图3.4所示。除脊宽分别为100 μm 、150 μm 、200 μm 外，三个器件的工艺流程、几何参数完全相同。由于THz QCL是一种基于导带子带电子跃迁的器件，其电子辐射跃迁能量由多量子阱各层材料的厚度决定。在典型的束缚态到连续态跃迁结构中，势垒的厚度一般只有几个纳米，有时候甚至小于1 nm。而整个有源区结构由上千层的GaAs/AlGaAs材料构成，总厚度大于10 μm 。因此器件高质量的有源区生长采用分子束外延(MBE)制备，通过精确分析各源材料束流随源炉温度、时间的变化关系；精确控制生长过程中衬底的温度；采用X射线衍射、原子力显微镜(AFM)、扫描电镜(SEM)、透射电镜(TEM)、霍尔测试仪分析外延材料的组分、周期、表面形貌、界面平整度、掺杂浓度等参数，准确评价材料质量等技术实现了高质量的有源区结构生长。

器件的测试主要分为L-I-V测试、拍频信号测试、光谱信号测试三个方面：L-I-V测试利用一组离轴抛物面镜将激光器的光束聚焦到功率计上实现测量；拍频信号测试由高速频谱分析仪测量；光谱信号通过傅立叶变换光谱仪测量，我们将在下面三小节中详细描述实验测试过程。

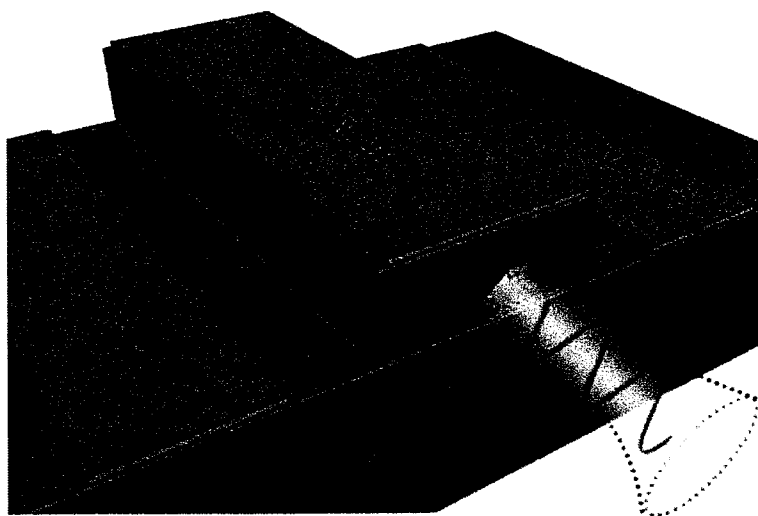


图 3.4 半绝缘等离子体波导THz QCL的结构示意图

3.3.1 器件的功率-电流-电压测试

我们首先对三种脊宽的器件进行L-I-V测试以确认器件的阈值电流和工作电流区域。测试系统如图3.5所示，由于设计的THz QCL器件是低温下工作的器件，需要进行降温制冷。因此器件装在Janis公司提供的特殊定制ST-100恒温器，为了避免机械振动对器件工作产生影响，制冷循环系统采用开循环液氮制冷，搭配恒温器可以使得器件工作时温度保持在15 K。从器件激射出来的THz波有大约 10° 的扩散角，为此我们使用一组焦距为4英寸的离轴抛物面镜来实现聚焦，THz波经过第一个离轴抛物面镜后成为平行光束，再经过第二个离轴抛物面镜后聚焦至功率计，功率计再将光信号转换为电信号。每一个离轴抛物面镜的反射率在90%以上，通过准确的搭建光路可以将光束聚焦至百微米量级。功率计为Ophir公司提供的高灵敏热电偶探头功率计，可探测的最大功率达到3 W，满足实验的要求。



图 3.5 LIV测量实验示意图，整个系统置于密闭环境内并填充氮气降低湿度，THz QCL则工作在连续波模式下

如图3.5所示，整个测试系统被玻璃罩密闭，并充满高纯氮气，测试时环境湿度控制 $RH < 10\%$ ，器件工作时温度控制在15 K，器件的电压电流源为Keysight公司的E3644A直流源，工作在恒压模式，器件电压从0 V逐渐增加到最大6 V，步长为0.05 V。整套测试系统由Labview软件控制，从而实现自动化测试。

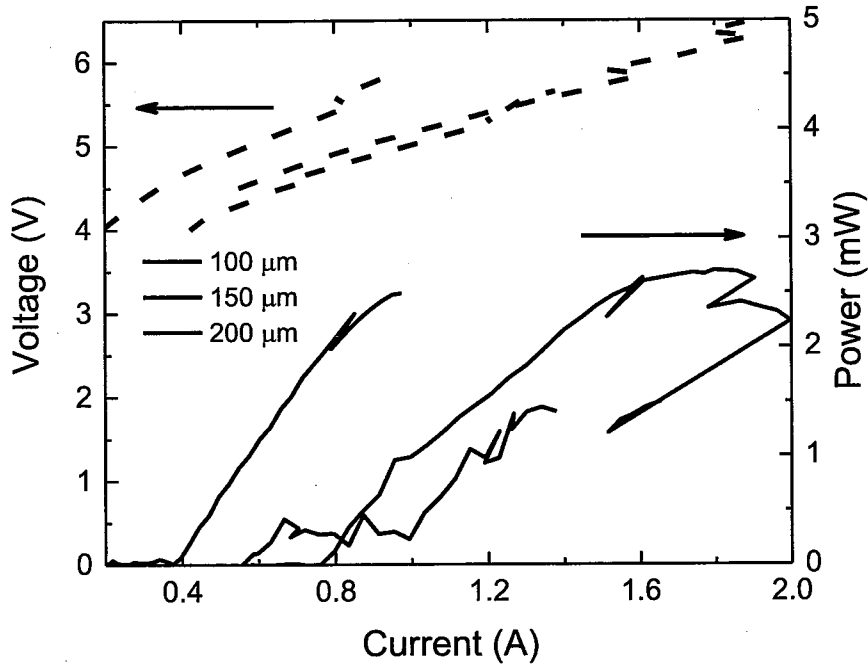


图 3.6 在连续波下测量得到的100 μm (黑色)、150 μm (红色)、200 μm (蓝色)器件的L-I-V曲线，所有测试都在15K下进行^[69]

最终测试结果如图3.6所示，100 μm 、150 μm 、200 μm 器件的阈值电流分别为0.37、0.56和0.76 A，阈值电流密度都为62 A/cm²，这表明三种脊宽的器件在材料生长和工艺等流程上完全一致。器件的最大功率在1到3 mW之间。由于在高电场下，不同阱之间的能级对齐需要更长的时间，因此在高电压下，电流随着电压增大减小，即存在负微分电阻效应(NDR)，例如对于200 μm 脊宽的器件，当工作电流达到1.9 A后，电压的增加反而使得器件工作电流下降，此时器件已经无法正常工作。然而，从图3.6中可以发现，150 μm 脊宽器件的L-I曲线与100 μm 和200 μm 器件的L-I曲线有较大的差别。三种器件虽然来源于同一块晶圆且经过完全相同的工艺流程，但是由于三种器件在晶圆的不同位置，这可能会导致L-I上的差异。虽然器件的L-I曲线会有差异，但是这并不会影响器件的频率梳功能，我们将在下一小节中更为详细的描述。需要注意的是，在我们搭建的L-I-V测试系统中，存在以下几个因素影响最终测试结果^[17]：(1)器件虽然采用半绝缘等离子波导结构，具有良好的远程光束质量，但是离轴抛物面镜不可能完全收集到THz QCL发出的激光；(2)离轴抛物面镜存在吸收折射等损耗；(3)恒温器采用的是聚乙烯窗片，尽管THz在聚乙烯材料中具有较高的透射率，但仍然存在损耗；(4)系统即使置于密闭环境并填充高纯氮气，但无法保证完全杜绝空气(尤其是水汽)的吸收。

3.3.2 器件的拍频信号测试

对于激光器频率梳，基于自探测的拍频信号技术被用于衡量频率梳的稳定性。为了进一步比较三种脊宽THz QCL的稳定性，我们将对器件的拍频信号进行测量，包括：拍频信号与器件工作电流的关系、拍频信号的线宽测量、拍频信号的时间稳定性三个方面。测试系统如图3.7所示。测量时用到的频谱分析仪，来自安捷伦公司的N9020A，其带宽为20 Hz到26.5 GHz。由于100 μm 和200 μm 器件的拍频信号较弱，在测试时还需要使用增益为30 dB的低噪声放大器(Photline公司，型号为DR-AN-20-MO)。直流源为Keysight公司的E3644A直流源，最高提供8 V输出电压；射频偏置模块(Bias-T)为SHF公司的BT45B，能够允许最大16V的直流电压信号、20 kHz到45 GHz的射频信号通过。

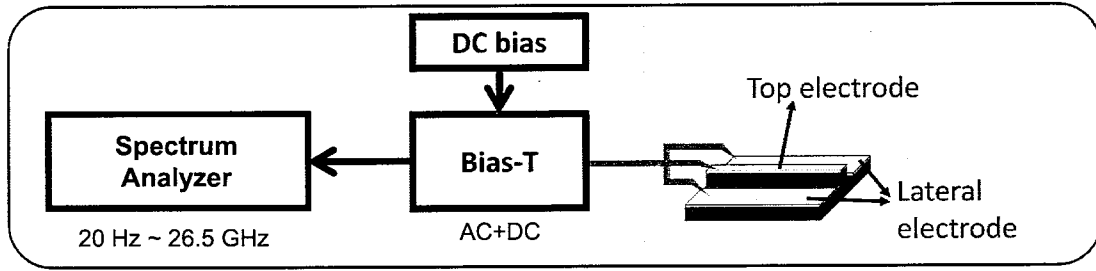


图 3.7 THz QCL器件的拍频信号电学测试原理图

图3.8展示了三种脊宽器件拍频信号与电流的关系以及在几个典型电流密度下拍频信号的线宽。其中图3.8 (a),(b)和(c)分别为100 μm 、150 μm 、200 μm 器件拍频信号与电流的关系，频谱分析仪的RBW设置为300 kHz。可以发现，对于100 μm 、200 μm 脊宽的THz QCL(图3.8 (a)和(c))，只有电流靠近阈值电流时才有较窄的拍频信号，或者靠近负微分电阻区域时(图3.8 (c))。在绝大多数工作电流区域，100 μm 、200 μm 脊宽的THz QCL拍频信号的线宽过宽(百兆赫兹量级)，无法实现频率梳功能。正如同3.2节中仿真结果所预测的，图3.8 (b)展现出150 μm 脊宽的THz QCL即使在较高的工作电流时(95 A/cm^2)都能提供较窄的拍频信号。正由于GVD使得频率梳模式间隔与频率相关，其直接影响了器件实现频率梳功能的稳定性和可靠性。从图3.3 (c)中可以发现150 μm 脊宽THz QCL的GVD更加平滑同时也更加小，因此更适用于实现频率梳功能，同时图3.8中(a)、(b)、(c)验证了这一观点。进一步研究可以发现，在靠近负微分电阻区域时，200 μm 脊宽的THz QCL拍频信号也表现出频率梳特性，这进一步验证了图3.3 (c)中200 μm 脊宽器件的GVD要优于100 μm 脊宽器件。需要注意的是，在仿真计算中我们并没有考虑到工作电流对GVD的影响，目前也没有很好的手段能在仿真时

考虑工作电流同时实验验证。在100 μm 、200 μm 器件测量时，我们使用了一个30 dB的低噪声放大器，这是由于在100 μm 、200 μm 器件的拍频信号过于微弱，如果不使用放大器将无法进行有效的测试。虽然引入放大器会带来一定的噪声影响，但是通过对大量不同器件的测试表明，引入放大器并不会破坏器件的稳定性，也不会影响THz QCL实现频率梳。

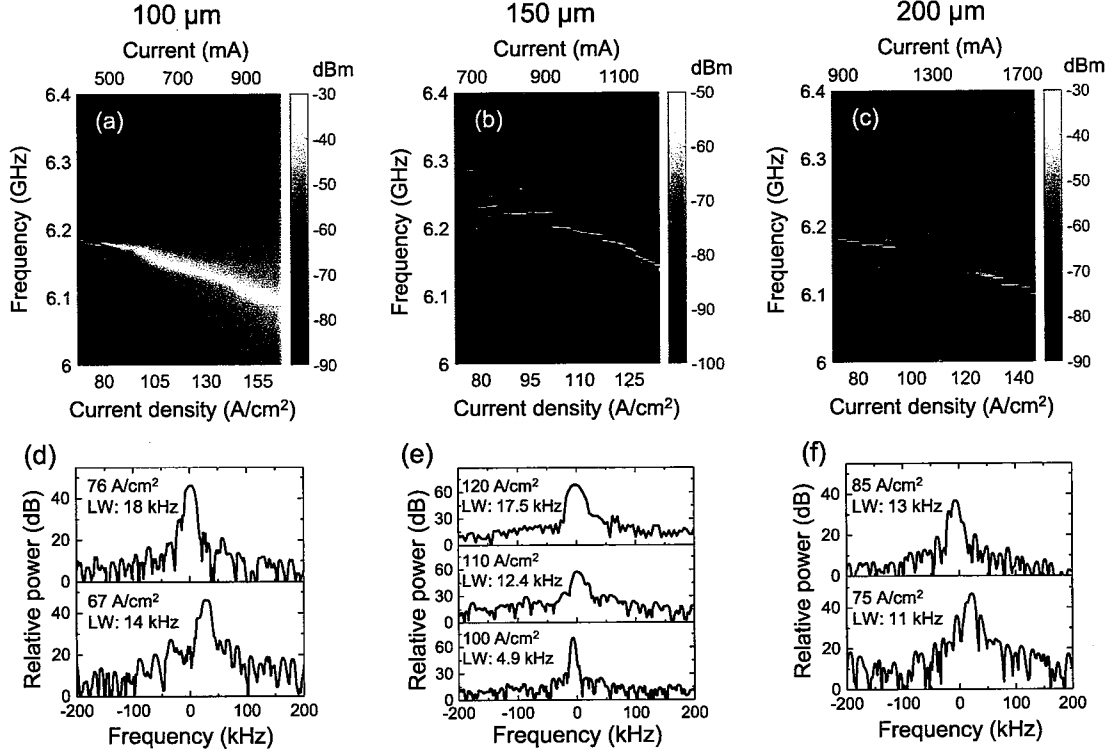


图 3.8 腔长6 mm，三种脊宽THz QCL的拍频信号测试;(a),(b)和(c)为100 μm 、150 μm 、200 μm 器件的拍频信号与电流的关系，分辨率(RBW)设置为300 KHz。其中在100 μm 和200 μm 器件测量时使用了一个增益为30 dB的低噪声放大器(DR-AN-20-MO)；(d),(e)和(f)为100 μm 、150 μm 、200 μm 器件拍频信号的线宽。根据信号的稳定性，RBW被设置为1 kHz和5 kHz，所有器件都工作在连续波条件下，LW表示拍频信号的半峰全宽(FWHM)^[69]

在图3.8 (d)、(e)和(f)中，我们测量了100 μm 、150 μm 、200 μm 器件工作在几个典型电流密度时拍频信号的半峰全宽(FWHM)。注意到FWHM测量仅在器件的拍频信号较窄的工作电流下。当150 μm 脊宽THz QCL工作在电流密度为100 A/cm²时，测得最窄的拍频信号的FWHM仅为4.9 kHz。通过比较分析，可以发现实验数据很好的验证了我们的数值计算结果。所有的测试结果表明对于半绝缘等离子体波导结构THz QCL，脊宽会影响到器件的GVD，进而影响器件实现频率梳。仿真结果表明脊宽在150 μm 的THz QCL更适合实现频率梳功能，这点得到了实验很好的证明。虽然L-I曲线中150 μm 脊宽的THz QCL与100 μm 、

200 μm 器件有较大的差别,但是通过对多个经过相同工艺、不同的150 μm 脊宽的THz QCL进行测试,发现它们的L-I曲线与100 μm 、200 μm 器件较类似,同时也具有更加稳定的拍频信号。

同时,我们利用频谱分析的"max hold"功能测量3分钟内拍频信号的漂移,如图3.9所示。频谱分析的"max hold"功能开启后,在每次扫描后,我们可以追踪信号的最大值。它可以直接反应信号在时间下的稳定性,同时也可以帮助解释长时间工作时器件拍频信号的漂移。需要注意的是,拍频信号漂移的测量也是仅在拍频信号较窄的工作电流下。比较可以发现,150 μm 脊宽THz QCL的拍频信号在整个工作电流下都十分稳定,记录到的最小值为300 kHz,此时器件工作在122 A/cm^2 ,100 μm 脊宽THz QCL的拍频信号,在能够保持较窄拍频信号的工作电流下,具有较大的频率漂移,达到百兆赫兹量级,这也反应出过高的GVD会严重破坏频率梳的稳定性和可靠性。对于200 μm 脊宽的THz QCL器件,较宽的脊宽意味着在相同的电流密度下,器件的工作电流更大,最高达到1.8 A,这意味着器件工作时的热量产生非常大,而THz QCL是一种工作在低温条件下的器件,长时间工作使得温度控制变得十分困难,从而导致了器件工作的不稳定。

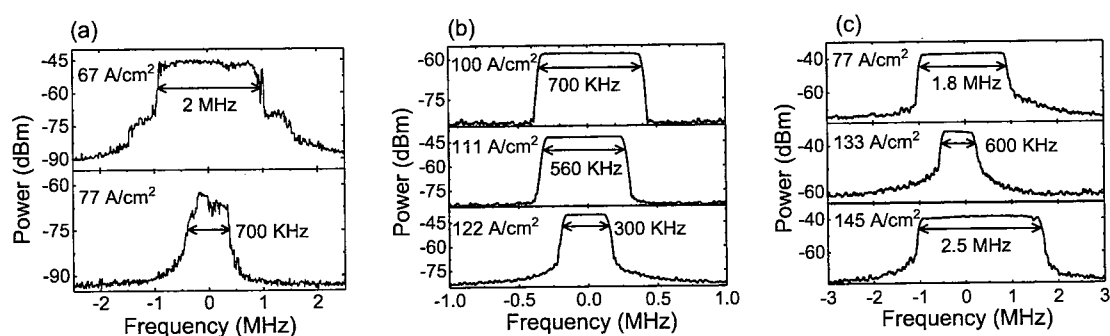


图 3.9 利用频谱分析仪"max hold"功能测量得到的3分钟内拍频信号的漂移

3.3.3 器件的光谱测试

THz QCL器件的光谱测试主要基于远红外傅立叶变换光谱仪(FTIR)。在我们的测试中所采用的傅立叶光谱仪为Bruker公司的远红外FTIR光谱仪(Vertex 80V),如图3.10 (a)中所示。当THz QCL发射出的THz 激光聚焦进入到FTIR后,经过迈克尔逊干涉仪描绘出干涉谱,最后干涉谱经过傅立叶变化生成激光功率谱。本次实验采用的FTIR的光谱范围可达 $54000\text{--}4.5\text{ cm}^{-1}$,光谱精度为 0.1 cm^{-1} ,完全满足测试要求。同时该套设备支持对探测器的更换,从而更好的测试不同光源的光谱信号。

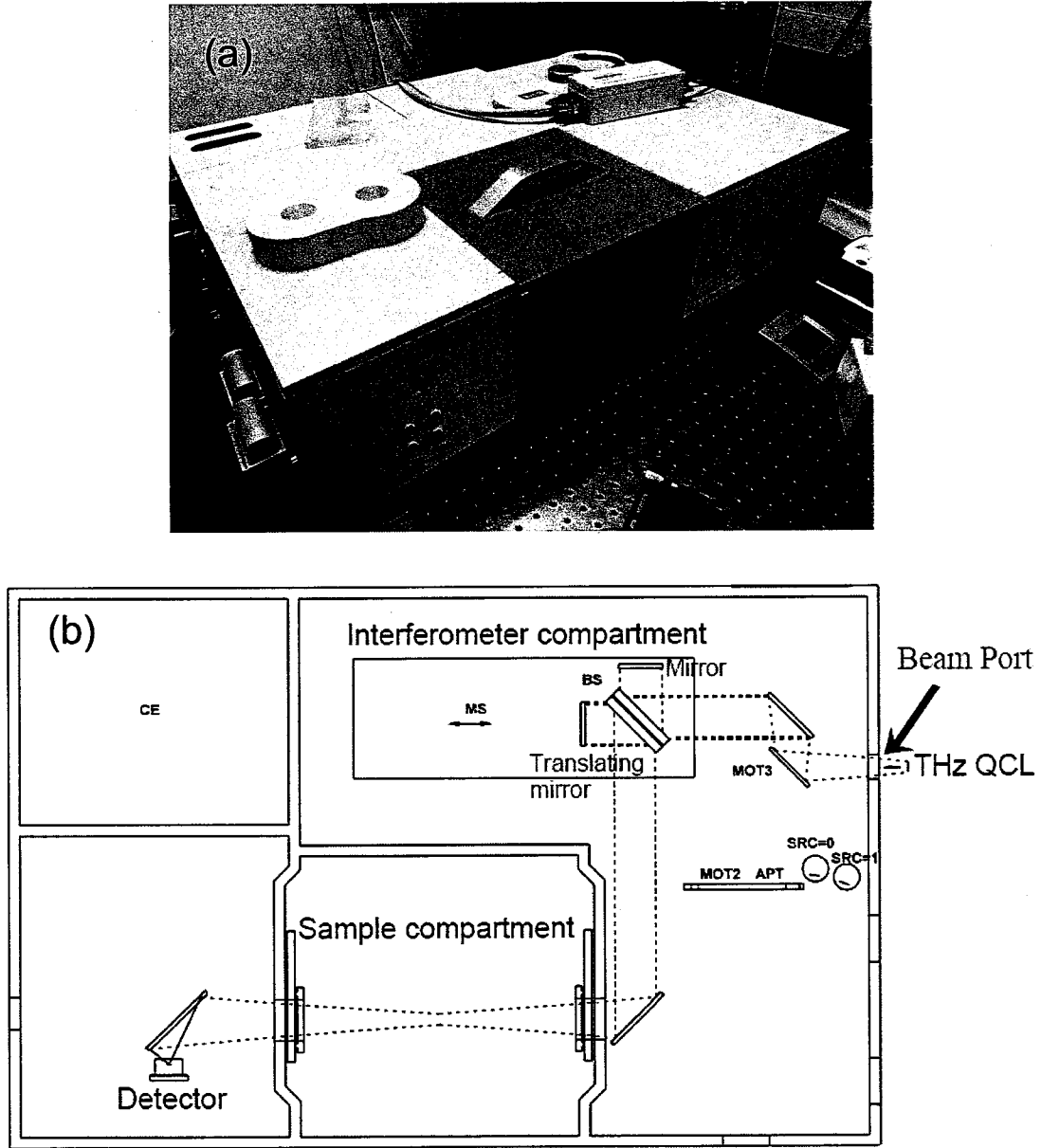


图 3.10 (a)傅立叶变换红外光谱仪系统实物图；(b)FTIR系统的内部光路图

FTIR的内部光路如图3.10 (b)所示，将THz QCL器件的光聚焦到FTIR外部光源窗口，该窗口为聚乙烯材料，保证了THz波较高的透射率。THz光进入内部后经过抛物面镜聚焦，以平行光入射到分束器(BS)中，分束器将THz光分成两束，一束到静止镜(mirror)，一束传到动镜(translating mirror)。其中动镜移动的步长决定了光谱的范围，动镜移动的范围决定了光谱的分辨率。这两束光进行干涉，干涉后的信号最终经过样品室进入探测器，探测器信号然后进傅立叶变化生成光谱。图3.10 (b)中的“SRC=0”和“SRC=1”表示光谱仪自带的光源，在本节测试中并不会开启。需要注意的是，对于不同的光源信号，系统需要进行不同的设置。对于低功率的器件，由于功率较弱，动镜每步进一步需要等待

探测器响应后再步进下一步，系统需要设置为步径扫描模式，该模式下测试时间较长。当THz QCL功率较强时(微瓦量级)，可以采用线性扫描模式，此时动镜不断移动然后扫描出干涉谱。相比于步径扫描模式，线性扫描模式采集图谱速度更快，根据L-I-V测试结果，光谱测试将采用线性扫描模式。另外，如果是测试THz QCL脉冲激射谱时，为了保证探测到正确的THz信号，我们需要将FTIR仪的扫描速率设置慢于THz QCL的脉冲频率，这样可以保证在FTIR扫描的过程中，至少可以探测到一次THz脉冲。在本节中的光谱测试，由于是对连续波光谱测量，也不需要上述设置。

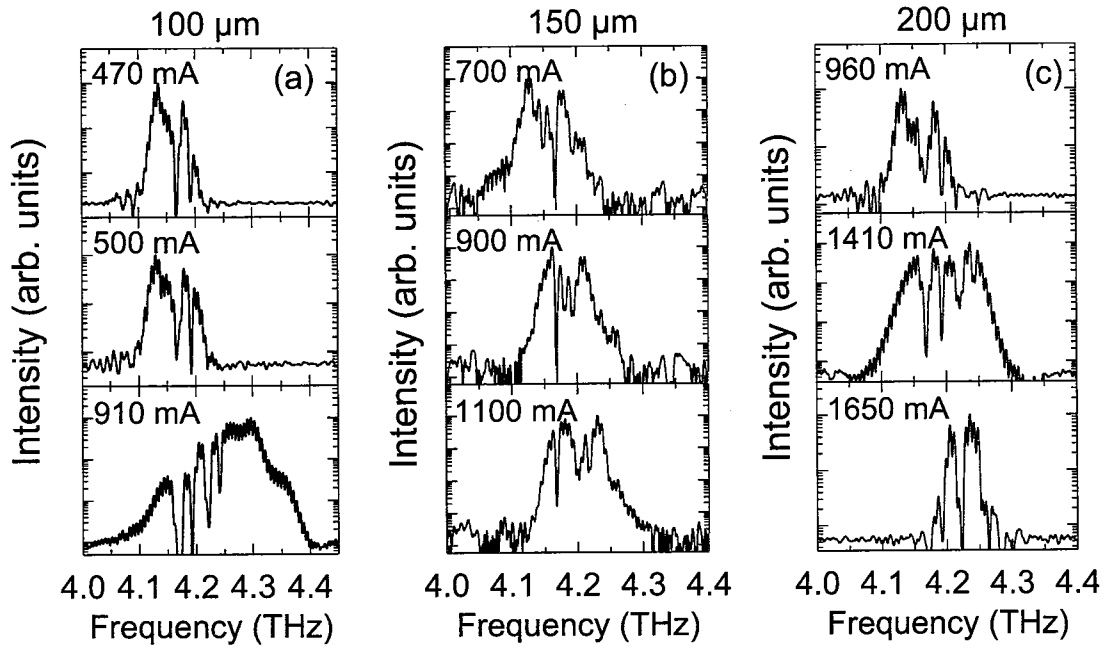


图 3.11 三种脊宽的THz QCL光谱测试，黑色为100 μm ，红色为150 μm ，蓝色为200 μm

三种脊宽的THz QCL光谱的测试结果如图3.11所示，激光器的中心频率都为4.2 THz，随着器件工作电流的上升，器件的光谱存在一定的蓝移现象。仔细比较三种器件的光谱可以发现，虽然100 μm 和200 μm 脊宽的器件在某些电流下的光谱较宽(100 μm 器件在910 mA，200 μm 器件在1410 mA)，但是结合图3.8，此时器件的拍频信号较宽，表明此时器件的光谱较宽，但是纵模之间的间距并不相等，这也意味着通过合理的色散控制，降低100 μm 和200 μm 脊宽器件的总色散后，这两种脊宽的THz QCL器件是可以实现宽的频率梳功能。100 μm 和200 μm 脊宽的器件工作在拍频信号较窄的工作电流时，其频谱宽度仅有150 GHz，而150 μm 脊宽器件的频谱宽度则是200 GHz，同时如果采用RF主动调制技术，150 μm 脊宽器件的频谱宽度可以拓展至330 GHz。

3.3.4 器件双光梳的实现

基于100 μm 、150 μm 和200 μm 脊宽器件的拍频信号测试，可以确认150 μm 脊宽的THz QCL具有更小的GVD以及更稳定的拍频信号，需要注意的是，测试得到器件具有良好的拍频信号，并不代表着器件一定实现了频率梳功能，因为该拍频信号可能只是两个纵模差频或者是噪声等干扰。为了进一步确认器件实现了频率梳功能，器件需要实现双光梳后才能被认为实现了频率梳功能^[71]。双光梳的基本原理图如图3.12所示，当两个重复频率特别靠近，其中心频率一致的频率梳发生混频时，其中一个频率梳的每个纵模将和另外一个频率梳的纵模产生差频，同时在更低频率的频段上产生相同数目的纵模，其频率间隔 $\Delta f_{rep} = f_{rep2} - f_{rep1}$ ， f_{rep1} 和 f_{rep2} 分别为两个频率梳的重复频率。对于本文研究的THz QCL，其激射频率为4.2 THz，重复频率约为6.2 GHz，因此如果实现双光梳后可以在GHz频道内测试到重复频率为兆赫兹量级的频率梳。

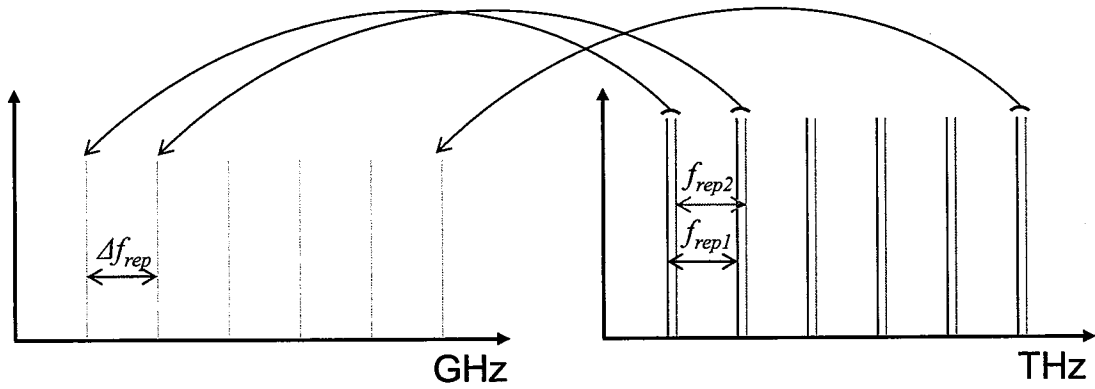


图 3.12 THz双光梳的基本原理图

通过对三种脊宽器件的测试分析，我们选择150 μm 脊宽的THz QCL来实现双光梳。图3.13 (a)中给出了用来实现双光梳功能的两个THz QCL的L-I-V测试，两个THz QCL的脊宽都为150 μm ，腔长为6 mm，但由于工艺误差等因素，两个QCL的重复频率不可能完全一致，但是具有相同的激射频率，符合实现双光梳的基本要求。测试设置与图3.5一致，温度控制在30K。可以发现，相比于图3.6中测试的150 μm 器件，实现双光梳的两个器件的L-I-V行为更类似于100 μm 和200 μm 的器件，说明器件的L-I-V行为不会影响到器件的拍频信号，也不影响到器件实现频率梳功能。图3.13 (b)表示两个激光器分别工作在 961 mA (红色)和 1014 mA (蓝色)时的光谱，工作电流更大的器件相比工作电流小的器件存在一定程度的蓝移现象，这与图3.11的光谱测试结果一致。两个工作频率同为4.2 THz，如果考虑到20 dB的衰减范围，每个器件有17个纵模，如果考虑到10

dB的衰减范围，每个器件则有13个纵模。

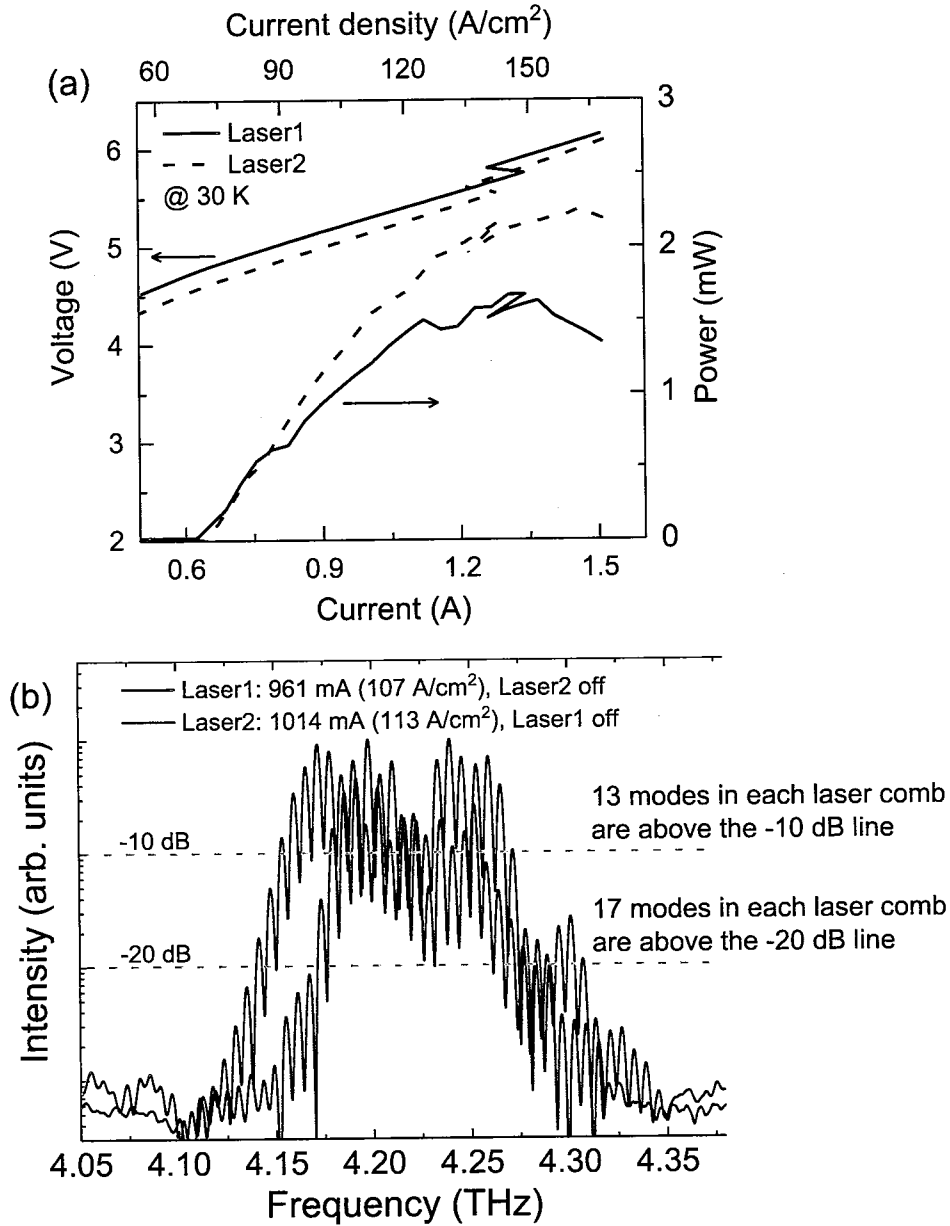


图 3.13 (a)两个用以实现双光梳器件的L-I-V测试；(b)两个器件分别工作在 961 mA(红色)和 1014 mA (蓝色)时的光谱测试，最终结果进行了归一化，灰色虚线分别表示最大值下降-10 dB和-20 dB时的位置

通过将两个器件间隔1.6 mm并排封装在同一热沉上，我们最终实现了双光梳功能，结果如图3.14所示。THz QCL拍频信号的间隔为13.2 MHz(图3.14蓝色)，最终下变频实现双光梳的重复频率为12.8 MHz(图3.14红色)，而图3.9中关于150 μm 器件的"max-hold"测试中，可以发现器件拍频信号最大有700 kHz的漂移，因此两者不完全相等是可以接受的，这是因为在双光梳实验中器件并未被额外的信号源进行锁相处理。下转换的频谱显示一共有13模式，这与器件光谱的测试

吻合(-10 dB时每个器件有12个纵模), 这表明150 μm 脊宽器件成功的实现了双光梳功能, 说明其具备频率梳功能, 而100 μm 和200 μm 脊宽的器件在未进行色散控制前无法实现双光梳功能, 这也证实了我们仿真计算的结果, 器件的GVD过高时会严重限制其频率梳功能。

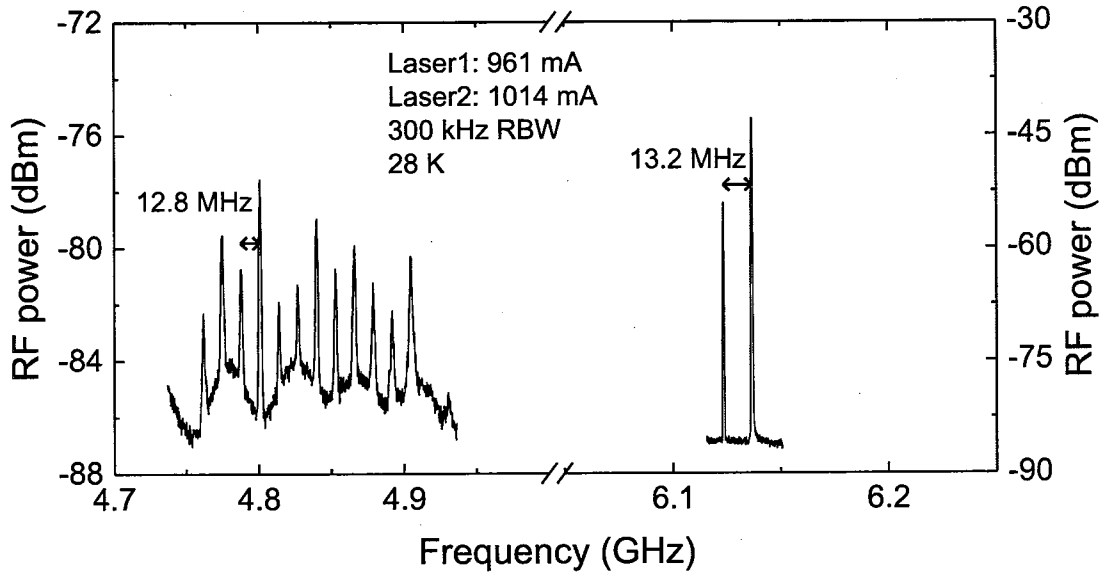


图 3.14 在同一热沉上封装两个6 mm腔长, 150 μm 脊宽的THz QCL, 两个QCL分别工作在961 mA和1014 mA, 工作温度为28K, 器件工作在连续波条件下。其中蓝色为两个器件的拍频信号, 左边红色为下变频后的双光梳信号, 测试所用的RBW为300 kHz^[69]

3.4 小结

在本章中, 我们基于双面金属波导THz QCL色散的计算方法, 研究了半绝缘等离子波导结构Thz QCL色散的计算理论, 通过数值仿真计算了波导脊宽对THz QCL器件色散的影响。利用FEM方法仿真表明较窄的脊宽会导致器件衬底中出现高阶模, 破坏了原有的本征模式, 从而使得器件波导损耗发生震荡。通过增益钳制效应, 波导损耗上的震荡会影响到器件的增益。同时由于半绝缘等离子波导结构的限制因子较小, 波导损耗的震荡还会被放大, 加剧了器件钳制后增益引起的GVD。最后计算结果表明器件的色散依然由钳制后的增益决定, 但是波导损耗会对增益钳制产生巨大的影响, 即使波导损耗产生的GVD相对较小。比较100 μm 、150 μm 和200 μm 脊宽的THz QCL器件的色散计算结果, 表明150 μm 脊宽具有更小的GVD, 更适合实现频率梳功能。随后我们进行了一系列实验证明了计算结果。三种脊宽的器件L-I-V测试表明具有相同的阈值电流密度, 说明器件的生长和工艺是统一的, 这表明器件唯一的差别就是脊宽。拍频

信号随电流变化的测试,表明150 μm 脊宽THz QCL具有更窄的拍频信号,验证了我们的计算结果;拍频信号的FWHM测试同样证明了150 μm 脊宽THz QCL拍频信号的线宽远小于100 μm 和200 μm 器件,进一步证实了GVD会破坏频率梳等间距的纵模分布;拍频信号的漂移测试反应出150 μm 脊宽的THz QCL更加稳定,能够在长时间工作下保持频率梳功能。最后,我们对三种脊宽的THz QCL的光谱进行测试,结果表明器件的激射谱在4.05 THz到4.35 THz,这与我们计算增益钳制的范围一致,进一步证明了仿真结果,虽然在某些工作电流下100 μm 和200 μm 器件的激射谱更宽,但是结合拍频信号线宽可以发现此时各个纵模并不是等间距分布。基于拍频信号的测试,我们利用150 μm 脊宽THz QCL成功的实现了双光梳功能,下转换后的频率梳具有12.8 MHz的重复频率。对实验测试结果的分析,表明实验很好验证了我们基于GVD计算的结论,即对于半绝缘等离子波导结构的THz QCL器件,150 μm 脊宽更适合实现频率梳功能。

第4章 THz QCL的色散补偿结构设计

4.1 引言

在前两章中，我们详细分析了两种波导结构THz QCL的色散计算以及带来的影响。过高的色散会破坏频率梳中纵模的等间距特性，限制频率梳的频谱宽度和稳定性。因此需要对器件的色散进行限制，一个设计优秀的激光器本身具有较低的色散特性，但由于结构限制等原因，往往需要额外的结构进行色散补偿，从而降低器件总的色散以实现更宽更稳定的频率梳。色散补偿结构的设计分为波导内和波导外两种。在波导外设计色散补偿结构，也就是利用分立器件来实现色散补偿，已经被广泛的应用在飞秒激光器领域，对于THz QCL器件，为了更好的利用其半导体工艺和便于片上集成等特性，在波导内进行色散补偿结构的设计方案更加优越。在本章中，我们将讨论一种基于Gires-Tournois干涉仪(GTI)结构的THz QCL色散补偿结构，分析并计算其带来的色散，从而用来降低器件总的色散。当然，一个优秀的色散补偿结构设计依然是基于对器件总的色散精确计算之上。

4.2 基于Gires-Tournois干涉仪的结构设计

Gires-Tournois干涉仪(GTI)是一种类似于法布里珀罗(F-P)谐振腔的光学结构，用来产生色散。其基本结构如图4.1所示。一个理想的GTI结构，其前反射镜的反射系数 r_1 非常小(一般小于0.1)，后反射镜的反射系数 $r_2 = 1$ ，同时GTI结构内没有任何的损耗，并且对全波段频率都有统一的反射系数。但是由于谐振腔的影响，反射光的相位与频率相关，这样便形成了色散。对于一个理想的GTI结构，其GVD具有周期性，周期与GTI的长度成反比，为了能够补偿入射光的色散，入射光在GTI中往返一次的时间应该小于入射光的脉冲宽度。对于THz QCL器件，其激光脉冲宽度一般在ps量级，这意味着GTI的长度不宜过长。但是GTI的GVD最大值与GTI的长度成正相关关系，因此如果需要用GTI补偿较大色散的器件，GTI的长度又不宜过短，这对GTI的设计提出了较高的要求。同时，在下面的讨论中我们可以发现，GTI前反射镜的反射系数对GDD同样有较大的影响。

在THz QCL器件上设计GTI结构，传统的方式是在器件的端面生长周期性材料实现GTI结构，这对材料的选择、生长厚度、加工工艺都提出了较高的要求。我们基于文献Lu et al.^[44]，设计了一种更为简便的结构。如图4.2所示。通

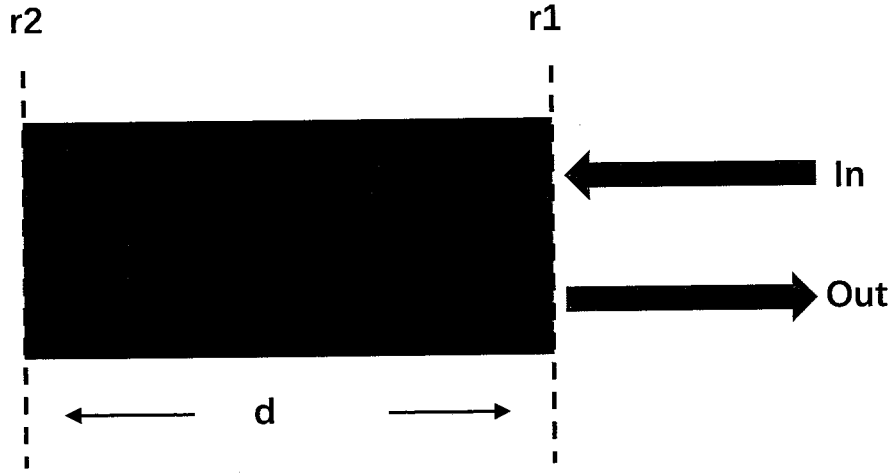


图 4.1 GTI结构的示意图，入射进入GTI结构的光在GTI中谐振后从同一端面出射

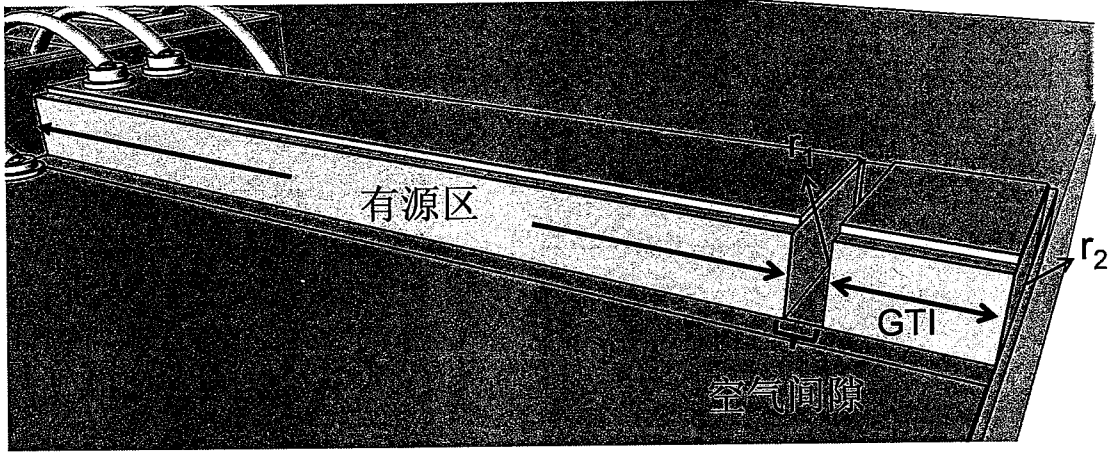


图 4.2 一种基于THz QCL器件的GTI结构，通过在器件的末端刻蚀一个空气间隙，从而使得器件的端面附近形成了GTI结构^[65]

过刻蚀工艺在THz QCL器件一端上刻蚀出一个空气间隙，较短的一端变可以形成GTI结构。需要注意的是，为了不破坏THz QCL的有源区结构，GTI的位置必须靠近器件的端面，这样带来两个好处：(1)避免影响到THz QCL的原有功能，由于GTI的长度(微米量级)远小于THz QCL的腔长(6 mm)，该设计结构不会破坏频率梳功能；(2)由于THz QCL端面的反射率只与结构有关，通过这种设计，将THz QCL的一个端面变为GTI的后反射镜，这样在设计GTI过程中无需担心后反射镜的设计。而GTI结构的前反射镜的反射系数则通过空气间隙的宽度和其位置调整，因此这种设计方案的核心便是合理的控制空气间隙的宽度和位置，从而控制了前反射系数 r_1 和GTI的长度，进而控制GTI引起的GDD。在下一小节中我们将给出GTI的GDD计算模型，并讨论不同前反射系数 r_1 时的GDD变化。

4.3 基于Gires-Tournois干涉仪的色散计算

GTI结构的本质依然是F-P谐振腔，因此其系统的反射系数由下式给出^[72]:

$$r_{GTI} = \frac{r_1 + r_2 e^{-i\omega t_0}}{1 + r_1 r_2 e^{-i\omega t_0}} \quad (4.1)$$

其中 r_1 和 r_2 分别表示GTI的前后端面的反射系数， $t_0 = \frac{2nd}{c}$ 为GTI的往返时间， n 表示GTI结构的折射率， d 为GTI结构的腔长。GTI结构引起的群延迟色散 $GDD = GVD \times d$ 等于GTI相位的二阶微分。可以由式(4.2)和式(4.3)计算得到:

$$\tan \phi_{GTI} = \frac{\text{Im}(r_{GTI})}{\text{Re}(r_{GTI})} = -\frac{-r_2 \sin \omega t_0 + r_2 r_1^2 \sin \omega t_0}{r_2 + r_1 r_2^2 + r_2 \cos \omega t_0 + r_2 r_1^2 \cos \omega t_0} \quad (4.2)$$

$$GDD_{GTI} = \frac{d^2 \phi_{GTI}}{d\omega^2} = \frac{d^2 \tan \phi_{GTI}}{d\omega^2} \frac{1}{1 + \tan^2 \phi_{GTI}} - \frac{2 \tan \phi_{GTI} \times \left(\frac{d \tan \phi_{GTI}}{d\omega} \right)^2}{(1 + \tan^2 \phi_{GTI})^2} \quad (4.3)$$

对于一个理想的GTI结构，其后端面反射系数 $r_2 = 1$ ，带入式(4.2)和式(4.3)后，GTI的GDD则可以写成经典形式:

$$GDD_{GTI} = \frac{-2t_0^2 (1 - r_1^2) r_1 \sin \omega t_0}{(1 + r_1^2 - r_1 \cos \omega t_0)^2} \quad (4.4)$$

可以发现，对于一个理想的GTI结构，其GDD与往返时间的平方成正比，即腔长越长GDD越大，同时考虑到入射光的脉冲宽度仅为ps量级，腔长不宜过长，这THz QCL器件的GTI设计带来了挑战。我们在图4.3中给出了 r_1 分别为0.1、0.4、0.61和0.83时计算得到的GTI结构GDD，其中由于双面金属波导结构的THz QCL端面的反射率更高，因此 $r_2 = 0.83$ ，GTI器件的腔长 $d = 58 \mu\text{m}$ 。需要注意的是，更宽的空气间隙以及更长的GTI结构，不仅无法提供器件所需的GDD，同时会产生耦合腔，使得器件的远程光束出现高阶模式。

分析图4.3中可知，GTI结构的GDD具有周期性，同时随着 r_1 的上升，GTI结构的GDD最大值先增加后减小，由于GTI的长度不变，因此周期未发生改变，但是GDD的峰值和谷值之间的频率间隔变小，这意味着随着 r_1 的增大，GTI结构产生的GDD将变得更不平滑。注意到在双面金属波导结构THz QCL中， r_1 最大值为0.83，此时可以认为空气间隙足够的宽(即THz QCL器件被分立为两个器件)。在精确的计算THz QCL器件的色散后，通过控制空气间隔构造一个能够补偿色散的GTI结构，对于不同的色散类型，对于GTI的需求也不一样。如果器件的GVD过大，同时存在强烈的震荡，则需要一个更短的GTI结构，同时需要调整 r_1 使得GDD足够强；对于一个色散控制已经优秀的器件，我们需要一个更长的GTI，从而提供更为平滑的GDD，实现对器件色散更为精确的控制。

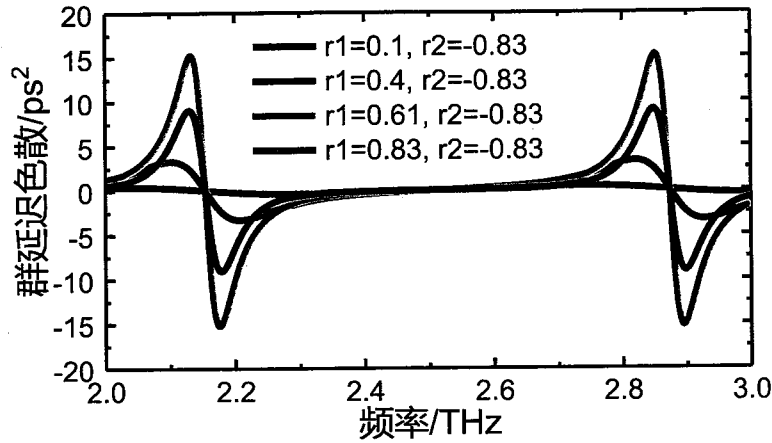


图 4.3 当后端面反射系数为0.83，GTI腔长为58 μm 时，4种不同前端面反射系数情况下GTI结构的GDD与频率的关系^[65]

4.4 小结

由于色散会严重限制THz QCL实现频率梳的频谱宽度和稳定性，因此一个优秀的色散补偿结构是必须的。在本章中我们讨论了GTI结构用作色散补偿的方法。相比于分立器件，GTI更适合在THz QCL器件中充当色散补偿结构。我们给出了一种直接集成在THz QCL波导上的GTI设计方案。该方案通过在THz QCL上刻蚀出一个空气间隙即可在器件的一端形成GTI结构，相比于传统的GTI结构，这种方案工艺上更加简单，设计时仅需要考虑空气间隙的宽度和位置。通过F-P谐振腔的原理，我们给出了GTI结构的GDD计算模型，并讨论在在双面金属波导结构上设计GTI时，不同的前反射系数对GDD的影响，可以发现通过控制空气间隙可以有效的调整GTI结构的GDD，从而实现对THz QCL的色散补偿。

第5章 总结与展望

由于其高频率稳定性和低相位噪声，频率梳在高分辨成谱、绝对频率测量、激光测距等领域具有重要应用。2005年，有关频梳的研究工作获得诺贝尔物理学奖之后，国际上关于各个频段的频梳研究逐渐成为热点。而较高群速度色散则破坏频率梳的稳定性，使得纵模之间的间隔不再等距，同时限制了频率梳的宽度。本文详细介绍了THz QCL频率梳的色散机制，围绕着不同结构THz QCL的色散以及色散的控制，我们做了以下工作：

(1) 双面金属波导结构THz QCL频率梳色散主要由器件的增益、波导损耗、以及材料吸收导致。我们基于Drude模型计算了器件各层材料的折射率实部和虚部与频率的关系，这样再利用有限元法，可以计算在一个较宽频段内双面金属波导结构THz QCL的波导损耗以及等效折射率的变化；THz QCL是一种基于子带间电子跃迁的单极器件，其增益由有源区的能级分布决定，在基于利用传输矩阵方法(TMM)计算得到有源区能级分布后，利用费米黄金定则可以计算得到器件有源区的增益，考虑到增益钳制效应，我们进一步计算了由于11条能带引起的子带电子跃迁吸收，结合波导损耗和镜面损耗，得到了钳制后的有源区增益，使得模拟仿真更加符合THz QCL的实际工作情况；同时由于一阶或二阶电子偶极矩或势能中的非谐波项，我们通过剩余射线带理论计算得到了有源区材料GaAs吸收损耗。最后利用Kramers-Kronig关系后，计算得到了所有的增益和损耗引起的色散。研究结果表明器件的总色散主要由钳制后的增益决定，同时器件的波导损耗，子带电子跃迁吸收等将通过增益钳制影响器件的总色散。

(2) 通过修正双面金属波导结构THz QCL的色散模型，我们研究了半绝缘等离子波导结构THz QCL的色散，讨论了波导脊宽对于器件的影响，通过计算100 μm 、150 μm 、200 μm 三种脊宽下半绝缘等离子体结构THz QCL的色散，发现由于半绝缘等离子体结构相比于双面金属波导结构限制电磁场的能力更弱，波导损耗对增益的影响更加显著。虽然与双面金属波导结构计算结果类似，半绝缘等离子波导结构的色散依然主要由钳制后的增益引起，但是由于增益钳制效应，即使波导损耗引起的GVD并不是主要贡献，但是会对器件增益的GVD产生巨大影响，从而影响到器件总的GVD。通过研究脊宽对波导损耗的影响，发现过窄的波导无法提供良好的本征模，从而导致了波导损耗曲线的震荡，同时这种震荡经过增益钳制，导致了较强的GVD；我们通过实验测试3种THz QCL，L-

I-V测试结果表明都具有相同的阈值电流密度,说明器件在材料生长和工艺上具有统一性,然而100 μm 和200 μm 的THz QCL的拍频信号线宽和稳定性都差于150 μm 的THz QCL,这符合我们对三种器件GVD计算结果,过高的GVD会破坏频率梳纵模的等间距特性,使得拍频信号过宽。同时,我们基于150 μm 脊宽的THz QCL实现了双光梳,证明该器件具备频率梳功能,而没有色散补偿的100 μm 和200 μm 的THz QCL无法实现双光梳,这更进一步证明了150 μm 脊宽的THz QCL具有较低的GVD,符合我们的计算结果。

(3)最后我们研究了一种基于Gires-Tournois干涉仪(GTI)的色散补偿结构。该方案通过在波导上刻蚀出一个合适宽度的空气间隙,即可在THz QCL末端形成GTI结构。通过控制空气间隙的厚度以及位置,可以有效的控制GTI的前端面反射率,而GTI的后端面反射率则由器件的结构决定。该方案相比于传统的GTI色散补偿结构,设计更加灵活简便,工艺实现简单有助于片上系统集成。计算结果表明,该结构的色散具有一定的周期性,其色散的最大值与其长度的平方成反比,通过控制空气间隙厚度可以有效的改变GTI结构的前反射率,从而控制该结构引起的色散,实现器件的色散补偿。但是由于THz脉冲的宽度过小,意味着GTI的长度不能过大,这也是该方案的难点。

我们打算在将来的工作中,进一步的研究QCL器件的色散,尤其考虑工作电流对色散的影响,同时将该计算方案拓展至其它类型的光电器件,例如ICL,并且在控制器件色散的基础上,完成频率梳的相关应用实验,例如双光梳的实现、太赫兹在二维材料中的非线性效应等;基于准确的色散计算下,进一步研究GTI结构的实现和相关工艺研究,从而拓宽频率梳的频谱范围,同时尝试其它类型的色散补偿器件例如布拉格衍射光栅等分立器件,推进THz QCL在光谱学中的应用。