

硅基光源的研究进展

沈浩 李东升 杨德仁

Research progress of silicon light source

Shen Hao Li Dong-Sheng Yang De-Ren

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 204208 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.204208

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.204208>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I20>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

硅基槽式微环谐振腔型偏振解复用器全矢量分析

Full-vectorial analysis of a polarization demultiplexer using a microring resonator with silicon-based slot waveguides

物理学报.2015, 64(19): 194207 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.194207>

硅基光子集成研究进展

Research progress of silicon-based photonic integration

物理学报.2014, 63(10): 104218 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.104218>

基于 Add-drop 型微环谐振腔的硅基高速电光调制器设计

Design of a high-speed silicon electro-optical modulator based on an add-drop micro-ring resonator

物理学报.2013, 62(19): 194210 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.194210>

基于热膨胀效应的可调光功率分束器设计

Design of tunable optical power splitter based on thermal expansion effect

物理学报.2013, 62(2): 024218 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.024218>

TE-TM 模变换型光波导隔离器的理论研究

Operation principle of optical waveguide isolator based on TE-TM mode conversion

物理学报.2012, 61(16): 164201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.164201>

专题: 硅基光电子物理和器件

编者按 半导体科学技术的出现和发展为人类社会的生产和生活带来前所未有的变革. 半导体科学技术是信息产业的核心和基础, 是推动传统工业转型升级的物质支撑, 是支撑经济社会发展和保障国家安全的战略性、基础性和先导性基石. 特别是作为半导体技术之一的微电子技术, 不但自身是一个庞大的产业, 它还作为核心部件在不断推动其他科技应用的迅速发展, 从国防科技、现代工业到日常生活, 各个领域无不渗透着半导体微电子技术. 半导体科学技术已经成为一种既代表国家现代化工业水平又与人民生活息息相关的基础性高新技术, 我们无法想象如果它在将来停止继续往前发展了会怎么样? 随着晶体管的不断缩小, 芯片集成度的不断提高, 晶体管间的电互连面临包括散热、串扰、延迟在内的一系列问题, 成为限制集成电路进一步发展的主要阻力. 最新的 14 nm 工艺, 金属导线的最小间距只有 52 nm, 线宽只有几个纳米, 已经非常接近物理极限. 在同一芯片上集成光子学器件和电子学器件用光互连代替电互连的光电集成技术有望解决这一难题, 硅基光互连具有高速、高带宽、低功耗、可集成等特点. 光互连的实现还将为进一步集成量子器件提供必要条件. 目前硅基光电探测器、电光调制器、波分复用器、光波导等都已成功实现, 但由于硅的间接带隙特点导致真正能够实用的硅基光源仍悬而未决. 实现硅基发光器件成为实现硅基光电集成技术最具挑战和最重要的目标. 本刊组织的“硅基光电子物理和器件”专题从理论设计高效发光硅锗超晶格, 包括量子效应低维硅, 硅基稀土掺杂, 硅中缺陷发光和硅基锗材料在内的各种硅基发光材料制备、高迁移率锗沟道器件、硅基 IV 族异质结构发光器件和硅基 III-V 族量子点激光器等几个方面对各种硅基光源目前面临的问题和未来的发展方向进行系统的介绍和总结, 推动国内硅基发光器件的研究进展, 以期在国际上首先实现可实用的硅基发光器件.

(客座编辑: 中国科学院半导体研究所 骆军委, 李树深)

硅基光源的研究进展*

沈浩 李东升[†] 杨德仁

(浙江大学材料科学与工程学院, 硅材料国家重点实验室, 杭州 310027)

(2015 年 7 月 7 日收到; 2015 年 8 月 14 日收到修改稿)

随着人们对大容量、高速和低成本的信息传播的要求越来越迫切, 近年来硅基光电子学得以蓬勃发展, 但硅基光源一直没有得到真正的解决, 成为制约硅基光电子学发展的瓶颈. 硅的间接带隙本质给高效硅基光源的实现带来很大困难, 实用化的硅基激光是半导体科学家长期奋斗的目标. 本文分别介绍了硅基发光材料、硅基发光二极管和硅基激光的研究进展, 最后总结了目前各种硅基光源面临的问题和未来的发展方向.

关键词: 硅基发光材料, 硅基发光二极管, 硅基激光, 光电集成

PACS: 42.82.-m, 42.70.-a, 85.60.Jb, 42.55.Px

DOI: 10.7498/aps.64.204208

1 引言

在 20 世纪, 硅材料对人类的生产和生活都产生了巨大的影响, 通过半导体集成电路构成了现代信息产业发展的基石. 40 多年来, 集成电路遵循

“摩尔定律”飞速发展, 特征尺寸不断缩小, 已经从最初的微米级缩小到 14 nm, 很快将达到 10 nm; 相应地, 电路内金属互连的结构复杂程度越来越高, 互连技术正朝着高速率和高密度集成发展, 以满足目前大容量和高速率传输的需要. 然而, 随着晶体管特征尺寸的不断减小, 电互连面临着信号延迟

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2013CB632102) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: mselds@zju.edu.cn

大、传输带宽小、信号串扰大、功耗大、加工困难、成本高等局限^[1],集成度提高的速度减慢甚至趋于停滞.为此,将微电子和光电子结合起来,充分发挥硅基微电子先进成熟的工艺技术、高密度集成、价格低廉以及光子极高带宽、超快传输速率和高抗干扰性的优势,硅基光电子学已经成为信息技术发展的必然和业界的普遍共识,被认为是片上光互连最具有潜力的方案^[2-4].

我们知道,想要实现光互连替代电互连有赖于基础光电子器件的突破.当前光通信的一个发展趋势是实现集成化,类似于集成电路,将光通信系统集成在单一光电子芯片上,只有集成化才能实现高密度、低成本、低能耗,满足信息社会信息急速膨胀的需求^[5].近些年,硅基光电集成取得了一系列令人振奋的成果,如硅基光波导^[6-8]、光开关^[9-11]、调制器^[12-15]以及探测器^[16-18]均已实现,但真正能够实用的硅基光源仍悬而未决.这主要由于硅是间接带隙半导体,辐射复合过程需要声子的参与,因而发光效率很低.但人们一直没有放弃追寻提高硅基发光效率的方法,近年来在硅基发光上取得了一系列突破,包括材料和器件的制备以及理论的完善.如2005年成功得到全光硅拉曼激光^[19,20],2012年实现室温电致Ge激光器^[21,22],2015年又突破了硅上GeSn激光^[23]以及2010年硅上III-V激光的一系列新进展^[24-28].

2 硅基发光材料

自1990年Canham^[29]报道了室温下多孔硅可以发出较强的可见光以来,硅基材料的发光效率得到了极大的提高.目前主要的硅基发光材料有量子效应低维硅、硅中杂质和缺陷发光、利用能带理论设计直接带隙材料和硅基化合物半导体材料.下面主要介绍几类常见的硅基发光材料.

2.1 量子效应低维硅

多孔硅大多是用电化学腐蚀硅片得到的^[30,31],表面含有孔洞和硅纳米晶粒.室温下多孔硅的发光波段较宽,已经覆盖了从红外到紫外的范围^[32],而且随着表面硅纳米晶粒尺寸减小其发光峰位也逐渐蓝移.自20世纪90年代以来,多孔硅的发光研究历经20多年,取得了一系列理论和实验上的成果.关于多孔硅的发光机理主要有以下三种:

- 1) 量子限制发光中心模型^[33];
- 2) 与氧相关的缺陷发光模型^[34];
- 3) 量子限制-发光中心模型^[35].

硅纳米晶(silicon nanocrystal, Si NC)一般指直径在几个纳米范围内的硅晶体颗粒,和多孔硅一样可以发出较强的可见光,研究者对硅纳米晶的光致发光和电致发光均做了一定研究.硅纳米晶根据制备方式的不同,可以分为独立的(freestanding)纳米晶和薄膜基质中的纳米晶.

一般独立的硅纳米晶主要是采用等离子体增强分解硅烷(SiH_4)来制备,同时可以进行硼(B)、氮(N)和磷(P)的掺杂.浙江大学杨德仁课题组在这一方面也做了许多有创新性的工作,其研究了杂质和表面对硅纳米晶体颗粒光学行为的影响,结合计算和实验,首次明确了掺入的B和P杂质在硅纳米晶体颗粒中(包括表面)最有可能存在的形态,并自洽地解释了掺B或P对硅纳米晶体颗粒的红外吸收和发光的影响^[36-38].之前研究人员对Mn杂质的研究主要着眼于它对硅纳米晶体颗粒磁学性质的影响.而杨德仁等的工作则着眼于光学性能,阐明了Mn杂质对硅纳米晶体颗粒的光学带隙和光吸收的影响^[39];Cl, F, C和N等是在硅纳米晶体颗粒合成或处理过程中经常遇到的杂质,他们还研究了Cl, F和C杂质在硅纳米晶体颗粒表面的覆盖影响硅纳米晶体颗粒光吸收和发光的机理^[40-43];确定了N在硅纳米晶体颗粒中存在的形态及位置,进而展示了掺N的硅纳米晶体的吸收和发光光谱^[44].同时系统研究了表面初始被氢或氯钝化的硅纳米晶体颗粒在表面改性后所导致的硅纳米晶体颗粒的表面成键情况,以及所形成的表面效应对硅纳米晶体颗粒的光学性能的影响^[45,46].这些工作为研究硅纳米晶体颗粒的杂质和表面效应的影响打下基础.除了采用分解 SiH_4 方法之外,还可以通过等离子体刻蚀^[47]、光刻等^[48]方法直接在硅片表面形成硅纳米晶结构.

而薄膜基质中纳米晶发光的研究相较于独立纳米晶发光更加广泛.为了在薄膜中获得硅纳米晶,一般可以采用离子注入^[49]、化学气相沉积(CVD)^[50,51]和物理气相沉积等^[52,53]先制备硅组分富集的薄膜,再通过后续高温热处理使富余的硅析出.基质的选择也多种多样,可以是氧化硅、氮化硅和碳化硅等成本较低且与现行集成电路工艺兼容的薄膜材料.但上述的一些方法制备出来的硅纳

米晶通常尺寸分布都比较宽,不利于其发光的研究和应用,进而又发展了一些尺寸可控的硅纳米晶制备方法,如可以先制备 $\text{SiO}_x/\text{SiO}_2$ 超晶格结构,然后通过高温退火使很薄的富硅层 SiO_x 发生相分离,这样获得的硅纳米晶尺寸受 SiO_x 厚度限制^[54].硅纳米晶的发光同样可以用量子限制模型来解释,但其表面效应不能忽视.上述的薄膜基质的作用都是类似的,起到势垒层的作用,可以限制载流子在纳米硅表面的作用,但是电子和空穴的注入势垒不一致.图1分别给出了氧化硅、氮化硅和碳化硅三种不同基质的能带结构简图^[55,56].从图中可以看出氮化硅和碳化硅较氧化硅基质电子和空穴的注入相对容易且更平衡;但是势垒高度降低会造成对载流子限制作用的减弱,从而使部分载流子逃逸出势阱而不参与辐射复合^[56].故而在制备器件时对薄膜基质的选择需要谨慎.

2.2 硅基稀土掺杂

众所周知,稀土材料具有独特的4f能级系统,内部跃迁辐射复合发光受基体和温度等外因影响较小,通常呈尖锐的特征峰;且能级结构丰富可以发出不同波长的光满足不同需要,所以很早就开展了硅基稀土元素的发光研究^[57,58].其中,稀土元素中的Er是自由的 Er^{3+} 时,根据偶极选择定则其辐射跃迁是禁戒的.而掺进基体中时,受晶格场作用 Er^{3+} 能级发生劈裂从而4f能级之间可以发生跃迁,如图2(a)所示^[59].可以看出 Er^{3+} 的第一激发态跃迁至基态辐射出波长为 $1.53\text{ }\mu\text{m}$ 的近红外光,正好位于石英光纤的最低损耗窗口内,因而引起了人们相当广泛的研究兴趣.目前对掺铒的富硅氧化硅/氮化硅薄膜和铒的硅酸盐化合物这两种体系研究较多.

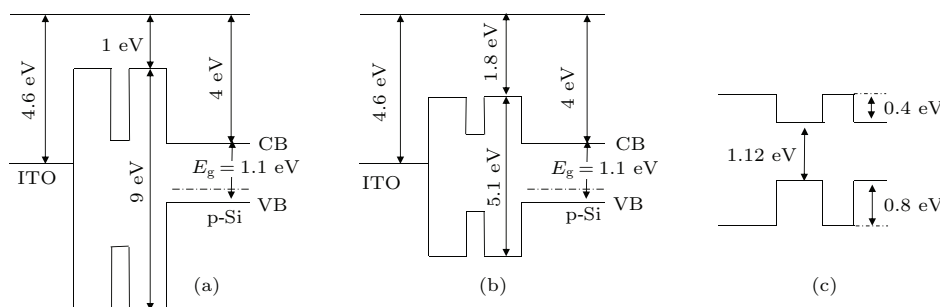


图1 硅纳米晶嵌入氧化硅、氮化硅^[56]、碳化硅^[55]基质中的能带结构示意图 (a) $\text{SiO}_2/\text{Si NC}/\text{SiO}_2$; (b) $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{Si NC}/\text{Si}_3\text{N}_4$; (c) $\text{SiC}/\text{Si NC}/\text{SiC}$

Fig. 1. Band diagram of SiO_2 , Si_3N_4 ^[56], SiC ^[55] with buried Si NC: (a) $\text{SiO}_2/\text{Si NC}/\text{SiO}_2$; (b) $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{Si NC}/\text{Si}_3\text{N}_4$; (c) $\text{SiC}/\text{Si NC}/\text{SiC}$.

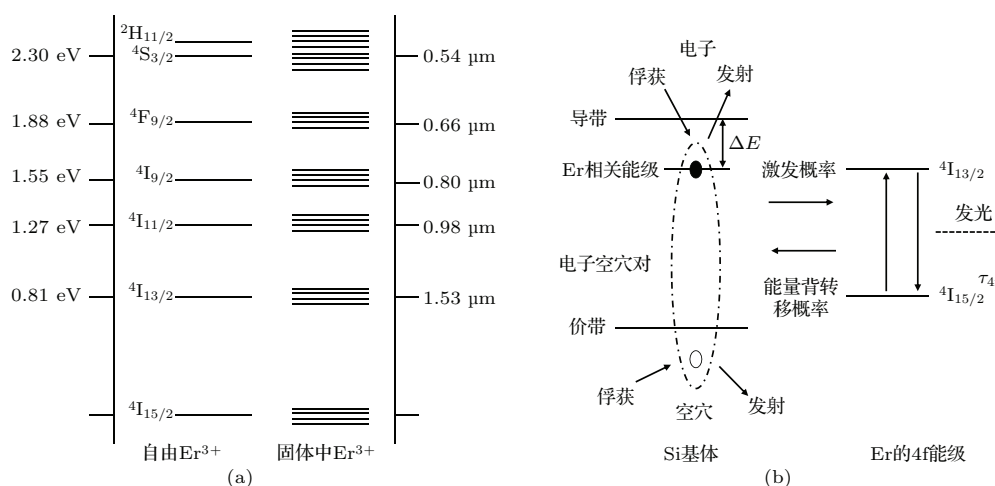


图2 (a) 自由 Er^{3+} 和掺入固体中 Er^{3+} 能级图^[59]; (b) Si中 Er^{3+} 能量传递过程^[60]

Fig. 2. (a) Schematic energy level diagram of Er^{3+} for a free ion and for an ion in a solid^[59]; (b) schematic diagram of energy transfer processes^[60].

当把铒掺杂入Si或SiO₂中时,以掺入Si为例^[60],结合图2(b),Er³⁺在Si中会形成浅施主能级,位于导带(CB)下约0.15 eV位置.当用光激发时,会在铒相关能级形成束缚激子,激子复合后将能量传递给Er³⁺使之激发,从而再跃迁回至基态辐射出光.同时激发态的Er³⁺也可以将能量传回给Si,使价带(VB)上电子跃迁至Er相关能级,而自身发光猝灭,这即是能量背转移过程,这一过程需要声子辅助,从而温度越高越显著.另外,激发的Er³⁺还可以将能量传递给自由电子或空穴而退激发,即俄歇复合退激发,这一过程在自由载流子浓度较高时更为显著.从以上描述可以看出,Er³⁺掺杂于基体中会有严重的温度猝灭,同时掺杂浓度会受到固溶度的限制,且掺杂浓度过高会有非光学活性铒析出导致浓度猝灭现象^[61].

将铒直接掺进固体硅基体中存在难以克服的缺陷,自1994年Kenyon等^[62]发现在嵌有纳米硅的SiO₂基体中未观测到铒的特征吸收峰,且采用Er³⁺的非共振激发光也能观测到较强的Er³⁺发光,他们将此归因于基体中的纳米硅吸收了能量后传给Er³⁺,即纳米硅敏化Er³⁺发光.由于纳米硅的吸收截面比Er³⁺高得多,且纳米硅的吸收是连续的光谱,因而Er³⁺发光效率得到较大提高,大大推动了硅基掺铒材料的实用化.近些年,富硅基体中掺铒(氧化硅^[63],氮化硅^[64]和氮氧化硅^[65])得到了广泛的研究.这些富硅基体通过高温热处理析出的纳米硅与Er³⁺发生作用^[66],将能量传递给Er³⁺,见图3的耦合示意图.研究认为,纳米硅和Er³⁺之间的能量传递机理主要是Förster机理^[67].而根据Förster机理,能量传递效率和距离的六次方成反比,所以只有在很小的范围内,硅纳米晶才能与Er³⁺有较强的耦合效应,该范围内的Er³⁺浓

度很小,所以导致耦合效率不高,也就限制了发光效率的进一步提高.

上面提到的纳米硅可以传递吸收能量给Er³⁺来敏化其发光,但是传递距离有限,故而研究人员尝试寻找新的敏化剂. Savchyn等^[68]研究发现,在600 °C热处理的掺铒富硅氧化硅薄膜中虽然并未析出硅纳米晶,但在非共振波长激发下仍观测到了Er³⁺发光,他们将此归因于薄膜中的发光中心起到了类似硅纳米晶的作用.同时,他们发现随热处理温度提高,发光中心逐渐消失,纳米硅逐渐析出,该过程见图4的示意图.发光中心为原子尺度,密度可以比硅纳米晶高很多,所以深入研究发光中心对Er³⁺的敏化作用很关键. Kanjilal等^[69]和Jin等^[70]都发现Si=O是主要的敏化中心.另外, Yerci等^[71]发现在掺铒富硅氮化硅薄膜内发现带尾态可以起到敏化剂作用; Steveler等^[72]指出热处理温度低于1000 °C都是带尾态起主要敏化作用,只在高于1100 °C时纳米硅才开始占据主导.

在掺铒体系中,受固溶度的限制,铒掺杂浓度一般低于10²⁰ cm⁻³,且浓度过高会出现浓度猝灭现象^[61],这会限制材料获得大的光学增益,因此人们转向铒的化合物,如氧化铒和硅酸铒等.在铒的化合物中,Er作为组成元素,浓度提高两个数量级,且大大减少了Er³⁺之间的团聚. Miritello等^[73]证实几乎所有的Er³⁺都具有光学活性,且制备过程可以与标准的互补金属氧化物半导体(CMOS)工艺兼容,这就为硅酸铒作为新的硅基光源打下了坚实基础. 2004年, Isshiki等^[74]采用溶胶凝胶法制备出了一种新的Er硅酸盐化合物,发现该材料缺陷较少,且在1528 nm处有较强的室温光致发光,但采用的是共振波长激发,铒的吸收截面很小致使发光效率必然受到限制. Miritello等^[73]利用射频磁控溅射制备了Er-Si-O/Si多层结构,证实可以形成纳米硅,且能够传递能量给Er³⁺实现敏化发光,从图5(a)中的光致激发谱(PLE)可以看出敏化效果较好.

铒硅酸盐化合物中Er的浓度很高,Er-Er之间距离很近,因此合作上转换效应很严重.人们希望通过加入与Er离子半径相近的钇(Y)和镱(Yb)来稀释Er,从而降低硅酸铒中的合作上转换. Wang等^[75]研究发现,当Er:Yb=1:19时,光致发光强度比纯Er₂SiO₅提高了约两个数量级. Wang等^[76]采用4能级模型计算了Er-Y硅酸盐化合物的光

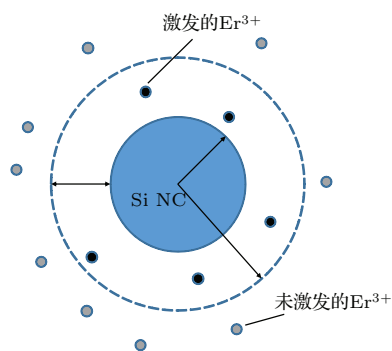


图3 硅纳米晶与Er³⁺的耦合示意图^[66]

Fig. 3. The scheme of the coupling effect between Si nanocrystals and Er³⁺^[66].

增益和 Er^{3+} 浓度、波导长度的关系,如图5(b)所示,发现理论上在1 mm波导长度下能够获得高于10 dB的光增益;但实验上一直制备不出理论上预期的高增益,Wang等^[77]认为是波导中传输损耗

很大,高达8 dB/cm.令人振奋的是,2012年Yin等^[78]制备出单晶的钇氯硅酸盐化合物纳米线,由于是单晶结构,表面的缺陷很少,这样传输损耗大大减小.此外,尽管Er浓度很高,但是荧光寿命高

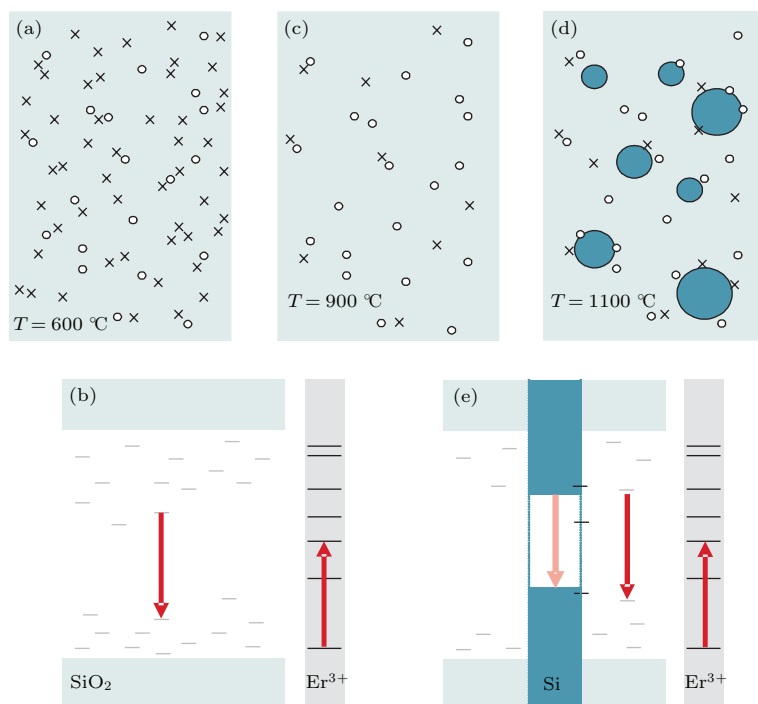


图4 掺钇富硅氧化硅中的 Er^{3+} 激发示意图 (a) 低温下热处理显示较多的富硅相关的发光中心(小叉)和 Er^{3+} (小圆圈); (b) 能带图; (c) 中等热处理温度下发光中心密度降低; (d) 显示高温热处理下析出硅纳米晶(深色大圆圈); (e) 对应的能带图, 标出了硅纳米晶的有量子限制的禁带, 对敏化 Er^{3+} 有较弱作用^[68]

Fig. 4. Schematic representation of the Er^{3+} excitation processes in Er-doped Si-rich SiO_2 samples: (a) at low annealing temperatures, showing a high concentration of excess-Si related LCs indicated by crosses, as well as Er^{3+} ions, indicated by open circles; (b) the corresponding schematic band diagram, indicating the SiO_2 valence band and conduction band, LC-related electronic levels in the band gap indicated by the horizontal lines, as well as the Er^{3+} energy levels (LC-mediated excitation is indicated by the vertical arrows); (c) at intermediate annealing temperatures, showing a reduced concentration of LCs; (d) at high annealing temperatures, showing the formation of Si nanocrystals (dark circles); (e) the corresponding band diagram, indicating the presence of Si nanocrystals with a quantum confined band gap. A weak exciton-mediated contribution to the Er excitation is indicated by the light vertical arrow^[68].

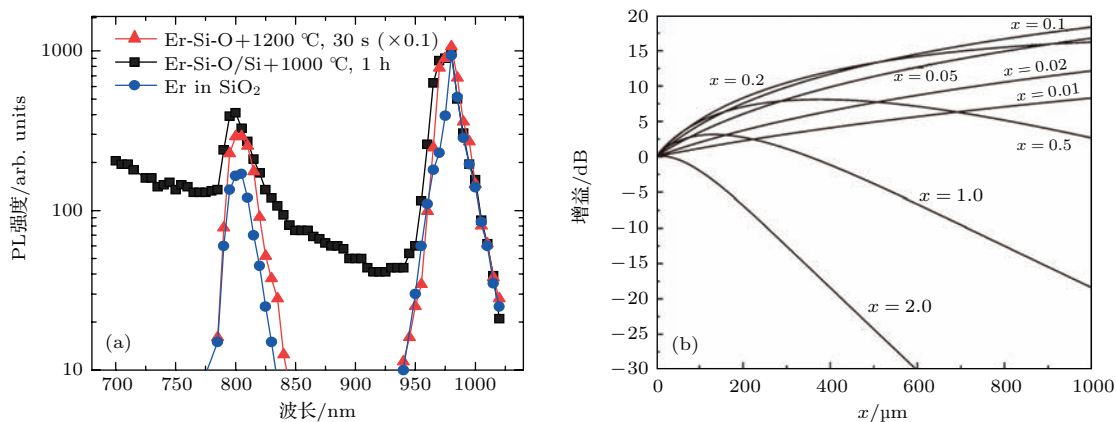


图5 (a) 三种材料的光致激发谱^[73]; (b) Er/Y比不同的硅酸盐化合物不同波导长度下的光增益^[76]

Fig. 5. (a) PLE spectra for the three materials^[73]; (b) optical gain as a function of waveguide length for different Er^{3+} concentration^[76].

达 540 μs , 比文献 [79] 中报道的数十微秒高一个数量级, 这将可能在较低的抽运光功率下就实现较高增益, 2014 年他们报道了这种纳米线的增益达到了 30 dB [80]. 尽管这种单晶纳米线带来的结果令人振奋, 但是这种纳米尺度的粒径导致它的尺寸难以精确控制, 以及如何与光纤的耦合等都是需要考虑的问题.

2.3 硅中缺陷发光

等电子缺陷中心是利用缺陷活性中心发光的典型实例. 在硅中掺入与硅同族 (IV 族) 的元素, 从而形成一个较为复杂的杂质——缺陷组合体, 该组合体由于分子极性可以俘获一个载流子, 然后形成带电中心; 该中心可以俘获电性相反的载流子, 形成束缚激子, 而正是这种束缚激子提高了间接带隙材料的发光能力. 由于通常只能在极低温情况下获得很低的发光效率, 故而近年来利用等电子中心提高硅基材料发光能力的方法研究较少. 2013 年, 日本的 Michio 等 [81] 在掺氮的 CZ 硅中注入 Al^{3+} , 然后 N 通过与 Al 形成 Al-N 等电子陷阱, 从而发射出 1.223 eV 的近红外辐射, 并发现 N 浓度介于 4×10^{13} 和 $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 时随 N 浓度增加辐射强度也增加.

自从 Drozdov 在 20 世纪 70 年代发现硅中的位错可以在极低温度下辐射出由 D1 到 D4 峰的四个光致荧光特征峰组成的近红外光以来, 硅中的位错发光也一度受到广泛关注. 主要由于位错发光波段处于红外, 特别是其 D1 峰位于 1.5 μm , 对应石英光纤最低损耗窗口 [82–86]. 目前, 向硅中引入位错方法多样, 主要有塑性变形、氧沉淀引入、离子注入、硅片键合、硅锗错配和激光照射. 浙江大学杨德仁课题组 [87–89] 则创造性地采用电子束辐照方法, 成功在硅中诱生位错, 详细地研究了这种位错的生成性能及物理结构, 获得了室温下 D1 的光致发光和电致发光. 同时设计实验对硅中位错特征光谱信号的物理机理进行了探讨, 推动了硅中缺陷发光研究.

更加令人振奋的是在 2011 年, Ohtsu 课题组提出 Dressed 光子-声子辅助激发载流子的概念, 成功制备了硅基 PN 结发光器件, 器件的外量子效率高达 15%, 功率转换效率为 1.3% [90].

2.4 硅基锗材料

Ge 和 Si 同属 IV 族半导体, 禁带宽度比 Si 小,

对应于通信波长, 吸收系数大, 迁移率高, 而且和目前硅基集成的 CMOS 工艺良好兼容, 所以一直以来人们没有放弃利用 Ge 来制备高效硅基光源. 尽管 Ge 也是间接带隙半导体, 但是其直接带隙与间接带隙的能谷差只有 140 meV ($E_L = 0.66 \text{ eV}$), Ge 的 Γ 能谷中仍有少量电子占据, 并且这部分电子具有极高的辐射复合概率. 近年来, 研究者提出通过能带工程可以有效增加 Γ 能谷中的电子, 这就使变间接带隙为直接带隙成为可能.

2007 年, Liu 等 [91] 在硅上外延锗薄膜, 由于退火后热失配产生了张应变, 可以降低 Γ 和 L 能谷之间的差值, 0.25% 的张应变如图 6 (b) 所示; 当应用张应变配合 n 型掺杂时, 可以进一步增加使 Γ 能谷电子的填充概率, 0.25% 的张应变结合 10^{19} cm^{-3} 的 n 掺杂如图 6 (c) 所示, 从而大大提高直接带隙发光并可能获得增益. 另外, 从理论上计算得出当受到的张应变为 2% 时, 锗就变为直接带隙材料, 带隙

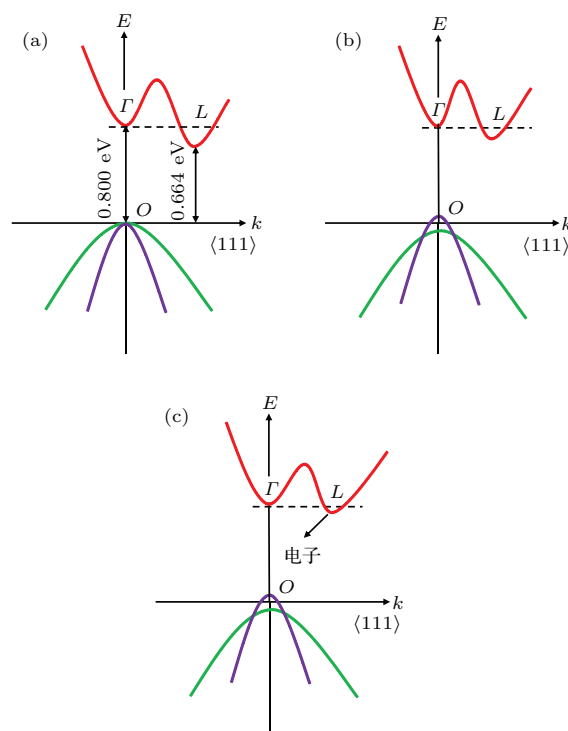


图6 锗的各种带隙结构 (a) 体型 Ge 材料, 直接带隙和间接带隙差 136 meV; (b) 通过 0.25% 张应变的 Ge 材料进一步降低了差值; (c) 0.25% 张应变加 n 型掺杂的 Ge 材料的 L 能谷填满电子 [91]

Fig. 6. Schematic band structure of (a) bulk Ge, showing a 136 meV difference between the direct gap and the indirect gap; (b) the difference between the direct and the indirect gaps can be decreased by tensile strain; (c) the rest of the difference between direct and indirect gaps in tensile strained Ge can be compensated by filling electrons into the L valleys. [91].

为 0.5 eV [92]. 但是实验上想要获得如此高的张应变比较困难, 而且如此大的张应变也会使晶体质量无法保证, 难以获得比较低的外延位错密度; 而且张应变很大时, 发光峰位也移至 2300 nm 作用, 不再满足光通信低损耗波段的要求. 正因为单靠张应变很难使锗变为直接带隙材料, 故而人们又引入 n 型掺杂, 发现 0.25% 的张应变和 $7.6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 的 n 型重掺可以得到准直接带隙的 Ge [91], 比没有 n 型掺杂的样品效率提高 14 倍 [93].

为了利用 Ge 材料优良的光电性质, 除了设法在 Si 上外延锗之外, 人们还希望通过 Ge 与 IV 族其他元素合金化来得到直接带隙材料, 如 GeSn, SiGeSn [94,95] 和 SiGeC 等. 这类材料大多也是间接带隙材料, 但它们存在合金散射的作用, 这一过程可以在价带导带间跃迁时保存动量, 这一过程比声子辅助过程稍强点, 但仍然很弱 [96]. 某些特定元素比例的 IV 族合金可以得到直接带隙材料, 如 $\text{Sn}_{0.15}\text{Ge}_{0.85}$, 直接带隙能量为 0.346 eV, 比间接带隙材料的 0.441 eV 还低 [97], 但是对应的辐射波长已经移至 3.5 μm , 如果应用于通信波段, 需要通过其他手段对波长进行调节. 此外, 由于 Sn 在 Ge 中固溶度很小并且容易在表面偏析, 所以生长 GeSn 合金需要在低温进行, 增加了器件的制备难度 [96].

2.5 半导体硅化物

20 世纪 90 年代末期, 一些硅化物材料也被证实是半导体, 如 $\beta\text{-FeSi}_2$, CrSi_2 和 MnSi_2 等 [98,99]. 其中, $\beta\text{-FeSi}_2$ 一度也被认为是有前景的硅基光源. 1997 年, Leong 等 [100] 在《Nature》上报道了基于 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的发光二极管(LED). $\beta\text{-FeSi}_2$ 辐射波长在 1.5 μm 左右, 所以曾一度受到广泛关注, 但是, 在室温下的载流子迁移率很低且不平衡, 所以调制速度将会很慢, 限制了其应用.

3 硅基 LED

获得硅基发光材料, 只是完成了硅基光电集成中光源需求的第一步. 有了稳定、高效发光的材料, 并对其发光理论和制备工艺有了一定的掌握后, 更为关键的是需要设计和制备出能用来在硅片上实现大规模集成, 且制备过程与 CMOS 工艺兼容、发光效率高且强度大、工作方式是电抽运且功耗较低容易实现激光的器件. 硅基发光二极管比硅基激

光器要容易实现. 下面先详细介绍几种硅基 LED 器件.

3.1 硅 p-n 结二极管

尽管由于硅是间接带隙材料而一直认为不适合用作光源材料, 但是澳大利亚 Green 研究小组 [101] 发现如果对接高纯单晶硅进行有效的改性也可以获得较高的发光效率. 他们以区熔法生长的高质量单晶硅为基底, 利用蚀刻技术把硅表面加工成一种周期性的锯齿状光学图形, 要求能使入射角小于全反射角, 这样几乎所有辐射复合产生的光都可以输出, 器件结构如图 7 (a) 所示. 此外, 还对器件进行了高质量的热氧化和表面钝化, 这样可以有效地减少载流子的非辐射复合速率, 从而明显地提高发光效率.

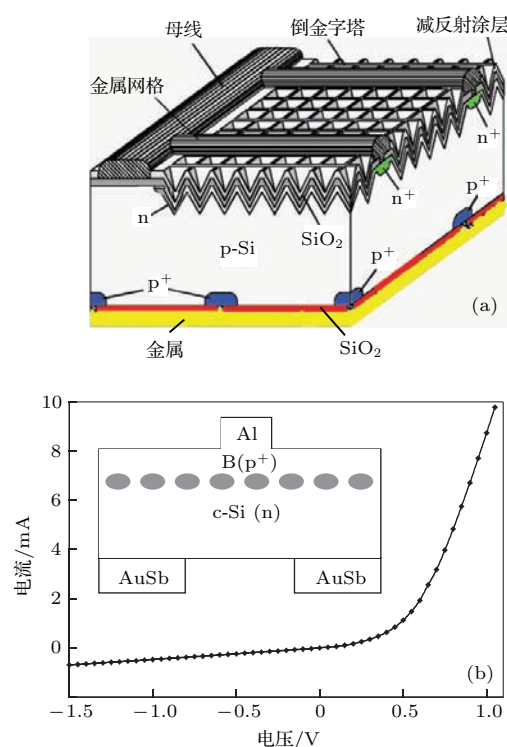


图 7 (a) 高效的体硅 LED 示意图; (b) 室温下器件的 I - V 曲线, 插图是器件结构示意图

Fig. 7. (a) Schematic of high-efficiency silicon light-emitting diode; (b) the current-voltage plot for the device measured at room temperature, inset is a schematic of the LED device.

直接运用体硅来制备 p-n 结 LED 的另一种思路是利用硅中的缺陷发光, 最具代表性的工作是 2001 年 Ng 等 [86] 在《Nature》上发表的通过高剂量的硼离子注入 n 型单晶硅内形成了位错环, 位错环改变了 Si 的能带结构, 且对载流子具有二维量子

限制作用, 从而在室温下也观测到了较强的电致发光. 器件简单示意图见图 7(b) 中的插图, 开启电压也较小. 这种引入位错环来限制载流子是为了阻挡载流子扩散发生非辐射复合, 制备方法比通过表面织构化来增强发光要简单, 正偏压下器件的外量子效率达到了 0.2%, 且响应时间也得到提高, 为 $18\ \mu\text{s}$ 左右^[85]. 值得关注的是, 该器件并没有出现常见的温度猝灭现象, 甚至温度升高效率也有少量提高, 对此他们研究发现由于位错环的存在抑制了载流子扩散, 从而非辐射复合也就不随温度升高而增强, 且辐射复合速率几乎与温度无关, 这就消除了温度猝灭现象^[102].

上面这两种都是 21 世纪初的成果, 经过 10 余年的飞速发展有关硅 p-n 结 LED 又有了一些新的

突破. 东京大学的 Ohtsu Motoichi 课题组^[90] 在 2011 年提出 dressed 光子 (DPs) 概念, 并利用这种 dressed 光子-声子辅助激发成功实现了 Si 发近红外光、红光、绿光和蓝光^[103–105]. DPs 指的是在向纳米粒子照射光线时, 光子和纳米粒子的电子发生耦合, 就像“衣服”一样附着在纳米粒子表面的光子, 与 DPs 耦合后的电子会形成离散的声子能级, 这些能级为导带电子向价带跃迁提供了一个桥梁, 如图 8 中 (d) 所示. 制备 DPs 辅助激发的 LED 也较简单, 器件结构如图 8(a), 在形成 p-n 结时, 向掺杂 B 的 p 层通以电流, 利用焦耳热来退火, 同时施以光照, 受到照射的 B 纳米粒子形成 DPs, 耦合后形成声子能级并发生受激辐射现象, 这就是发射的光与选用的照射光波长几乎一致的原因.

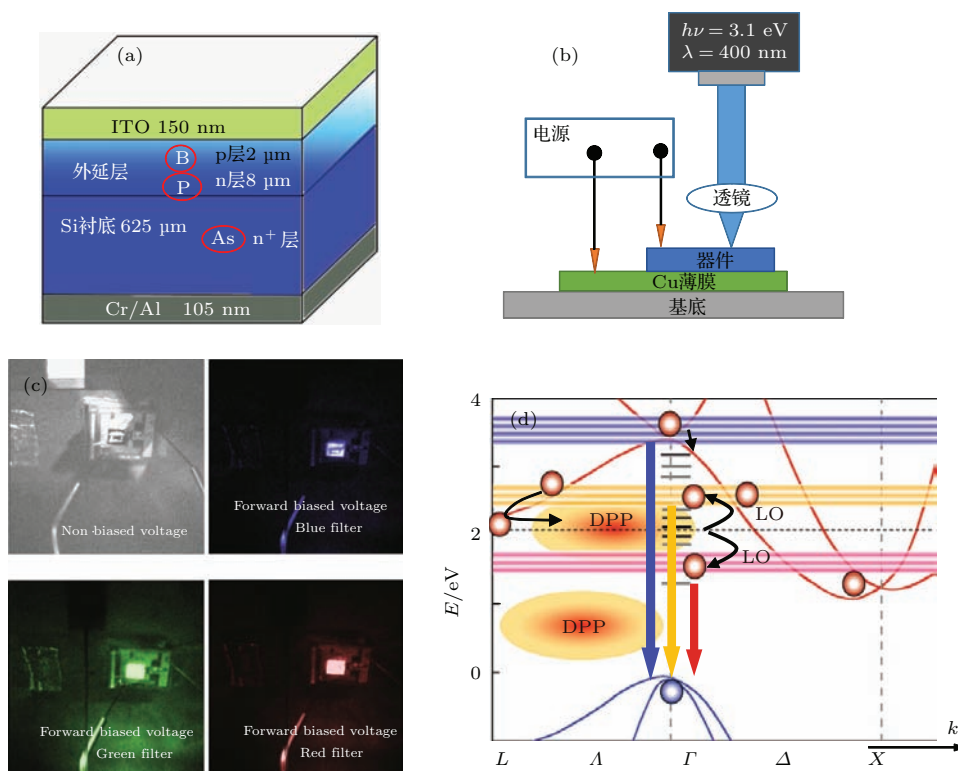


图 8 (a) 硅 p-n 结 LED 器件结构示意图; (b) 器件的 DPs 辅助热处理过程, 通以电流并加光照; (c) 发出蓝绿红不同颜色的 LED; (d) Si 能辐射出可见光的能带结构图, 蓝橙红三种水平实线对应于 3.1, 2.1 和 2 eV 三种光的 DPs 形成的声子能级^[106]
Fig. 8. (a) Structure scheme of Si LED with a p-n homojunction; (b) experimental setup for dressed-photon-assisted annealing process; (c) photographs of device emitting light at room temperature, captured with a CCD camera; (d) schematic diagram of light emission in visible region from Si. Red and blue curves represent the energy levels of the conduction and valence bands. Blue, orange, and gray thick horizontal lines represent the phonon levels corresponding to 3.1, 2.1, and 2.0 eV, respectively^[106].

3.2 纳米硅 LED

早在 1995 年, Canham 课题组^[107] 就制备出开启电压低于 3.5 V 的基于多孔硅的器件; 接着 1996

年, Hirschman 等^[108] 报道了与双极性晶体管集成、可寻址的多孔硅发光器件, 实现了全硅基光电集成的原型, 这在当时引起轰动. 但是多孔硅发光稳定性和机械性能较差, 难与 CMOS 工艺兼容. 所以人们将目光投向同样具备量子限制效应的纳

晶硅LED. 目前, 独立的硅纳米晶选择能带匹配的有机层制备的LED器件, 达到了8.6%的外量子效率^[109], 另外通过控制Si NC的尺寸可以得到发光波长可调的LED^[110]. 但这些尺度很小的纳米晶制备较为困难, 且制备的器件工艺与CMOS兼容较差. 与独立的硅纳米晶相比, 富硅薄膜中得到的Si NC发光研究更为广泛^[111–113]. 这类富硅薄膜材料的发光特性和硅纳米晶的浓度、尺寸及退火温度关系密切, 而控制这些变量的工艺也较为复杂, 此外纳米硅发光峰位一般小于900 nm, 在通信窗口之外, 因此在硅基光电集成中应用有限.

3.3 硅系薄膜LED

富硅薄膜中一般存在较多缺陷, 一些具有光学活性的缺陷可以作为发光中心参与发光. 氧化硅中缺陷发光研究较早, 在可见光波段主要是非桥氧空穴中心(non-bridging oxygen hole center, NBOHC)^[114]和双键硅(two-coordinated silicon, ($=\text{Si}-\text{O})_2\text{Si}:$)^[115]. 研究人员发现氧化硅中的缺陷浓度和硅的含量直接相关, 因此Kim等^[116]通过调剂氧化硅薄膜中离子注入硅的剂量来调节薄膜中不同缺陷态浓度, 从而实现了发光峰位的调节. 但是制备的LED效率仍很低, 2013年Juvert等^[117]制备的MOS型发光器件功率效率仅为 $(2.6 \pm 0.3) \times 10^{-5}$.

在对氮化硅薄膜研究时发现缺陷主要有两类, 即带尾态和禁带中间态(K 中心). 导带带尾态由Si—Si反键态或Si—N反键态构成, 价带带尾态则由Si—Si成键态和 $=\text{N}^-$ 中心组成; 禁带中间态则由硅的悬挂键组成^[118]. Kinster等^[119]通过调节氮化硅薄膜中Si/N比实现光致发光从可见到近红外波段的调节. 基于氮化硅的LED也早已制备成功^[120–122], 但是有关电致发光的来源仍未解决, 且电致发光峰位较难调节, 另外发光效率也不够高. 杨德仁课题组^[123]通过对氮化硅薄膜器件电致发光峰位以及不同注入电流/电压下器件的载流子输运机理变化的详细研究, 发现其中较短波长的发光峰是由局域于 K 中心的电子和位于 $=\text{N}^-$ 带尾态的空穴复合产生的, 而较长波长的峰则是由位于导带带尾态的电子和局域在 $\equiv\text{Si}^0$ 中心的空穴之间复合产生. 此外, 还提出了薄膜中激子与局域表面等离子体(LSPs, 采用Ag纳米颗粒)之间耦合模型^[124], 并通过优化银纳米颗粒的尺寸实

现了氮化硅薄膜器件发光效率近一个数量级的提升^[125–128]. 器件发光波长的调制也通过调节Ag纳米颗粒尺寸和注入电流/电压得以实现^[123,129]. 值得一提的是2011年, Monroy等^[130]在氮化硅薄膜体系中用飞秒激光器抽运实现了 52 cm^{-1} 的光增益, 但是和纳米硅发光同样存在发光波段位于1320和1550 nm的两个通信窗口之外的问题.

3.4 硅基掺铒和铒硅酸盐化合物LED

前面已经说过, Er是有效的发光中心, 且 $1.54\text{ }\mu\text{m}$ 发光波段对应于光通信波段, 但是常用的掺铒基体, 包括氧化硅^[131,132]、氮化硅^[64,133]、氮氧化硅^[65]和碳化硅等, 禁带宽度都很大, 载流子难以有效注入, 所以制备的器件多是单极型. 这种单极型器件中, Er^{3+} 和纳米硅的激发都是通过热载流子碰撞离化, 这种方式下纳米硅的敏化效果并不好, 也就限制了硅基掺铒器件的发展. 2010年, Yerci等^[134]利用掺铒富硅氮化硅薄膜制备了开启电压小于5 V的MOS型LED, 他们认为器件是双极型的, 载流子是通过P-F发射模型注入有源层并被带尾态俘获, 这些俘获的载流子复合后将能量传递给 Er^{3+} 敏化其发光, 这一注入方式极大地降低了器件的开启电压; 但是Cueff等^[135]进一步研究发现, 尽管氮化硅或富硅氮化硅基体由于缺陷辅助增强了导电能力, 如图9(a)所示, 但是外量子效率比 SiO_2 基体的2%下降了3—4个数量级, 如图9(b)所示.

硅酸铒的电致发光器件由于其介质本质注入电流较为困难, 直到2009年北京大學秦國剛研究組才第一次實現硅酸鈣的電致發光器件^[138]. 他們在硅酸鈣兩側引入富硅氧化硅層(SRO), SRO中的纳米硅增強了載流子注入, 但開啟電壓仍高達19.5 V. 第二年, 他們製備了富硅硅酸鈣(SRES)的器件, 開啟電壓大大降低, 圖9(c)對比了摻鉕富硅氧化硅(Er: SRO)、硅酸鈣和SRES的電致發光譜, 器件結構如插圖所示^[136]. 2012年, 北京大學的Wang等^[137]製備了硅酸鈣鐳(EYS)的LED, 圖9(d)為其電致發光譜. 器件中的 SiN_x 層對器件穩定工作很重要, 電壓隨測量時間有略微升高說明EYS層或 SiN_x 層有電荷積累. 儘管實現了硅酸鈣的電致發光, 但是效率仍較低, 工作電壓也過大, 距離實用化還有很長的路要走.

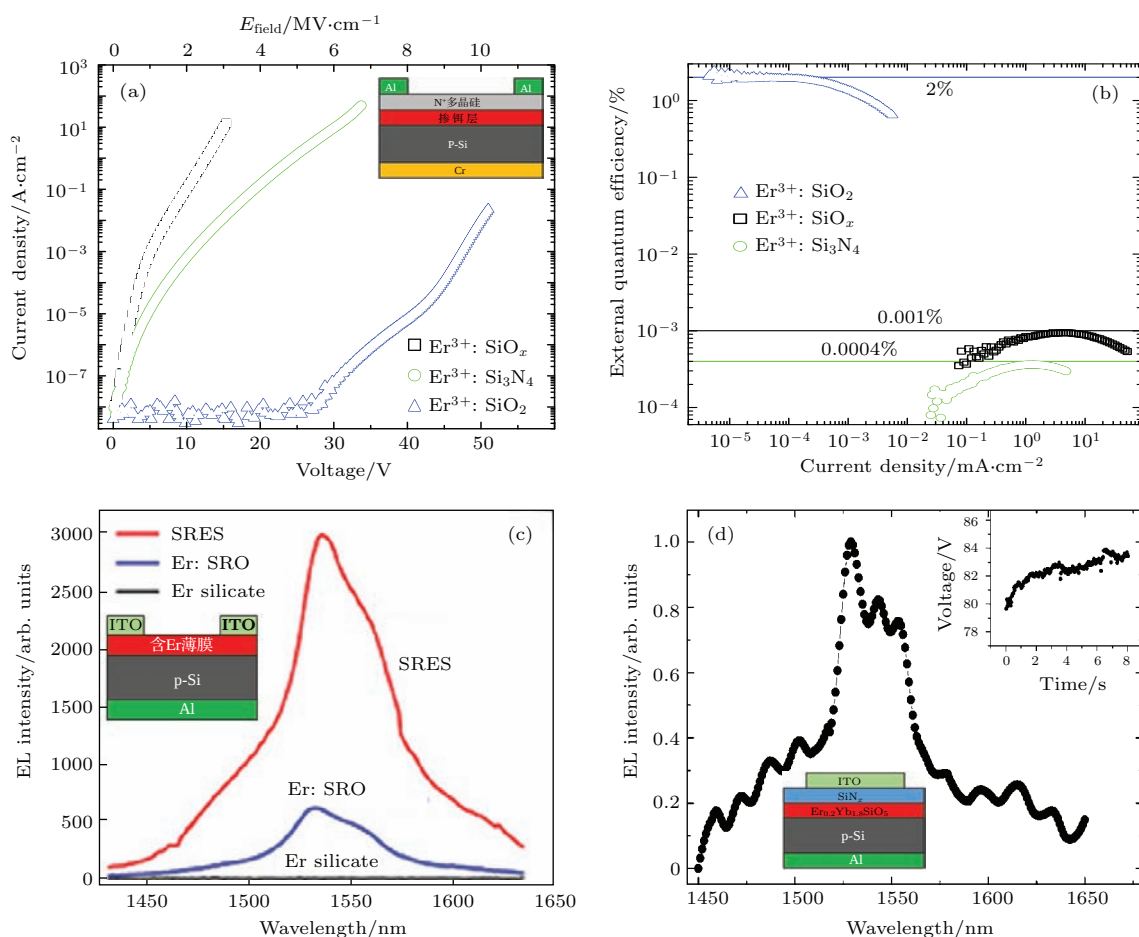


图9 (a) 不同基体材料掺铒的 I - V 曲线, 插图为器件结构; (b) 为不同基体的外量子效率 [135]; (c) 三种不同材料的 EL, 插图为器件结构 [136]; (d) 硅酸铒镱 LED 的电致发光谱, 左插图为器件结构图, 右插图为电压随测量时间变化图 [137]

Fig. 9. (a) Current density as a function of the applied voltage for Er³⁺:SiN_x, Er³⁺:Si₃N₄, and Er³⁺:SiO₂, inset is scheme of the device's geometry; (b) EQE for the near-infrared emission (1.3–1.6 μm) as a function of injected current for the three investigated light emitting devices [135]; (c) room temperature EL spectra at a forward-biased voltage of 10 V, inset is scheme of the device's geometry [136]; (d) the EL spectrum of the ErYb silicate MIS device under a constant current of 3 μA, the left inset shows a schematic cross section view of the ErYb silicate MIS device, the right shows the voltage variation versus the measurement time of the EL spectrum [137].

3.5 硅基锗 LED

近几年, 有关硅基 Ge 器件的研究取得了长足进展. 随着 Si 上外延高质量 Ge 薄膜的实现 [139], n 型重掺杂也成功实现 [93], 2009 年三个研究小组同时独立制备出 Ge 的发光二极管 [140–142]. 中国科学院半导体研究所成步文小组采用的 pin 结构, 加上 1.1–2.5 V 的正向偏压, 观测到了 1560 nm 左右的 Ge 直接带隙发光; 麻省理工学院的小组也采用了 pin 结构, 他们在 Ge 中引入 0.2%–0.25% 的张应变, 发射波长在 1600 nm 左右; 斯坦福大学的小组使用 n⁺p 结, 引入 0.2% 的张应变, 实现 1600 nm 左右波段发光. 近两年, 有关 Si 上 Ge 量子点和 GeSi/Ge 量子阱发光二极管也取得了一定进

展 [143,144], 这类器件可以观测到 Ge 材料的直接带隙发光, 但是对工艺要求很高, 晶体的质量有待进一步改善.

4 硅基激光器

硅基激光器是整个科学界和产业界孜孜不倦探索多年的一个前沿课题, 高效的硅基激光器决定着硅基光电集成能否实现, 因此硅基激光器的研制十分紧迫. 要想实现能够真正应用的硅基激光, 得满足激光器工作的 3 个条件: 1) 制备出具备光增益, 且易实现粒子数反转的硅基材料; 2) 能够有合适结构形式的光学谐振腔; 3) 能够在电抽运下实现受激辐射. 下面简单介绍几种硅基激光器的进展.

4.1 纳米结构硅激光器

自2000年Pavesi等^[145]报道了镶嵌在二氧化硅中的纳米硅的光增益, 实验中采用Pump & Probe方法来测纳米硅的光增益, 测得净增益值约 $100\text{ cm}^{-1} \pm 10\text{ cm}^{-1}$, 与直接带隙的半导体量子点处于同一量级. 之所以能获得增益, 和纳米硅的表面态密切相关. 接着, 在2005年, Cloutier等^[146]在SOI的单晶硅上刻蚀了一种周期性的纳米孔阵列结构, 纳米孔的直径约110 nm, 结构如图10(b)和图10(c), 在514.5 nm的连续Ar离子激光抽运下得到了1.278 μm 的连续光, 10 K下的光致发光谱如图10(a)所示. 研究发现, 能产生这种受激辐射的原因是周期性的阵列产生了高密度的A型缺陷中心, 这些缺陷作为光激活中心发生粒子数反转从而产生光增益, 但是只在很低温度下才能观测到这种受激辐射, 此外工作方式仍是光抽运. 故而室温下连续(CW)激光仍是挑战.

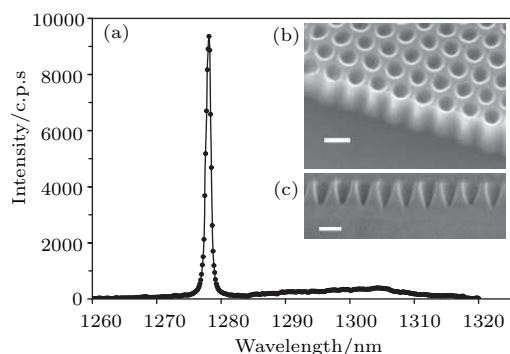


图10 (a) 514.5 nm 激发下的光致激发谱; (b) 纳米孔阵列的表面; (c) 截面 SEM 照片^[146]
Fig. 10. (a) The emission spectrum from the nanopatterned SOI excited by 514.5 nm Ar laser; (b) the surface and; (c) cross-sectional view of the nanopatterned SOI observed under a scanning electron microscope^[146].

4.2 硅拉曼激光器

硅中受激拉曼散射(SRS)是一种非线性光学现象, 只有入射光强度超过一定的阈值才会出现较强的拉曼散射光, 即Si吸收了高能的光然后输出激光. 2005年, Intel公司的Rong等^[19]报道了第一个波长可调的全硅拉曼激光器; 紧接着又通过改善器件结构实现了连续的拉曼激光输出^[20]. 2007年, 他们又采用高 Q 值环形谐振腔并优化pin结构, 得到了25 V偏压下20 mW的低阈值和50 mW的高输出功率^[147], 器件的示意图和截面扫描电镜图

(SEM)分别见图11(a)和图11(b). 尽管关于Si拉曼激光器取得长足进展, 但是由于不能实现电抽运, 极大地限制了其进一步的应用.

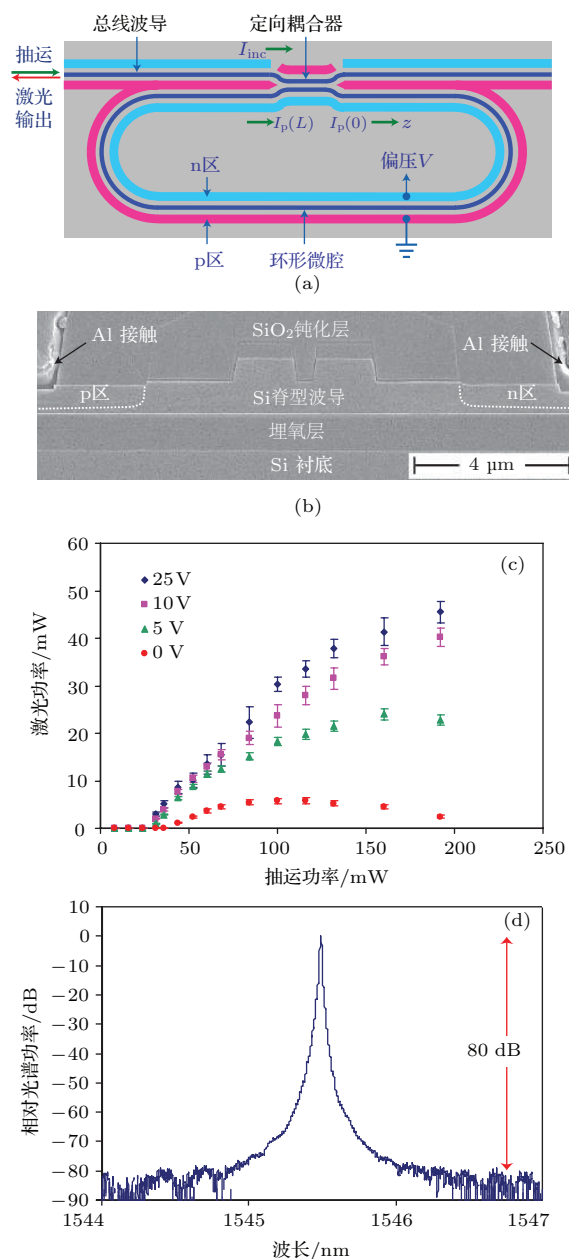


图11 低阈值硅环装拉曼激光器 (a) 硅pin结拉曼激光器示意图; (b) 器件的截面扫描电镜图片; (c) 激光输出功率和抽运功率不同偏压下关系; (d) 高分辨光谱显示单模抑制比高达80 dB^[147]

Fig. 11. Low-threshold Si Raman racetrack ring laser: (a) Schematic of a device with a pin junction design; (b) SEM cross-section of a directional coupler and pin junction region; (c) laser output power against coupled input pump power, showing a higher output power achieved at a higher reverse bias on pin junction for a 3 cm cavity, the error bars here are derived from different measurement traces; (d) high-resolution spectrum showing a low threshold Si Raman racetrack ring laser with a side-mode suppression ratio of over 80 dB^[147].

4.3 锗硅激光器

2010年, 硅上外延Ge激光器终于取得突破, MIT的Kimerling小组^[22]研制成功第一个室温下工作的光抽运的Ge激光器, 且发光波段位于通信窗口, 这一成果令人振奋. 他们基于的原理仍是结合张应变和n型重掺杂增加电子在直接带隙的填充概率, 进而增强直接带隙的发光效率, 实现激光. 他们在硅上选择性的外延一层锗波导, 见图12下插图, 热失配产生0.24%的张应变结合 $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 的n型掺杂, 得到直接带隙约0.76 eV的Ge. 从图12中可以看出阈值在6.0 μJ 左右, 值得说明的是发光效率随光注入增加和温度升高而增强, 这在硅上Ge发光二极管上也有发现^[141], 理论认为是由于焦耳热使 Γ 能谷的费米-狄拉克分布重叠更大从而增强辐射复合概率. 两年后, 他们又率先成功实现了室温下的电抽运Ge激光器^[21].

前面说过, 除了在硅上外延Ge之外, 关于Ge与其他四族元素合金化也取得一定进展. 2015年, Wirths等^[23]利用与CMOS兼容工艺的减压CVD方法在Si上制备出了GeSn的激光, 实验上发现Sn的浓度达到12.6%时, GeSn材料变为直接带隙, 如图13(a)中所示, 且并没有引入机械应力. 当用脉冲光抽运时, 升高抽运能量密度可以观察到明显的

输出阈值, 这是典型的激射行为^[148]. 但是温度高于90 K时发光会猝灭, 见图13(b), 此外还有待实

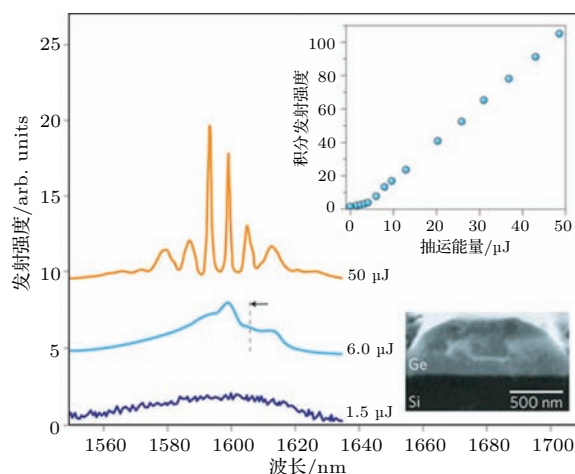


图12 光抽运的室温下连续硅上Ge激光器, 显示了不同抽运能量下的光致激光谱, 箭头指示了最大光增益波长; 上插图显示积分发射强度和抽运能量关系, 下插图显示Ge波导的SEM照片^[22]

Fig. 12. Optically pumped Ge-on-Si laser demonstrating CW operation at room temperature. Edge-emission spectra of a Fabry-Pérot Ge waveguide under three different levels of optical pumping from a Q-switched laser at 1064 nm with a pulse duration of 1.5 ns and at a repetition rate of 1 kHz is shown. The arrow indicates the peak optical gain wavelength. Top inset: integral emission intensity from the waveguide facet versus optical pump power, showing the lasing threshold. Bottom inset: cross-sectional SEM image of the Ge waveguide^[22].

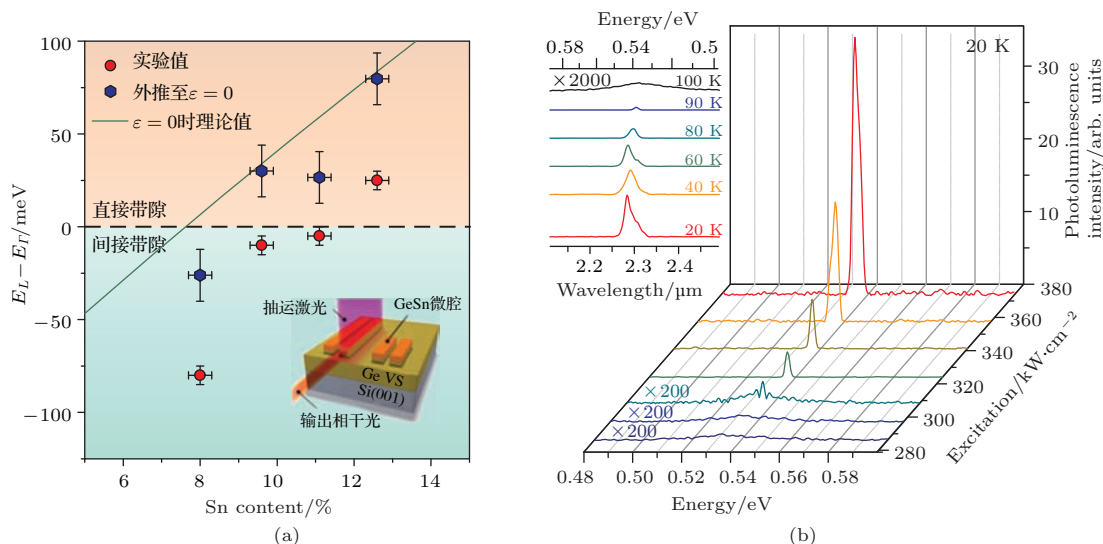


图13 (a) 间接带隙和直接带隙能量差($E_L - E_T$)随Sn浓度的变化, 插图为硅上GeSn激光的示意图; (b) 20 K下该激光(12.6% Sn)随抽运能量密度变化的PL光谱, 左侧小图为1000 kW/cm^2 抽运能量密度下该激光随温度(20—100 K)变化的PL光谱^[23]

Fig. 13. (a) $E_L - E_T$ as a function of Sn concentration, the pump laser homogeneously excites the waveguide cavity, and the light emitted from one of the etched facets is demonstrated (inset); (b) power-dependent photoluminescence spectra of a 5- μm -wide and 1-mm-long Fabry-Pérot waveguide cavity fabricated from sample E ($d_{\text{GeSn}} = 560 \text{ nm}$, 12.6% Sn). Inset: temperature-dependent (20–100 K) photoluminescence spectra at 1000 kW/cm^2 excitation density^[23].

现电抽运. 虽然作者得到的激光峰位在 $2.3\ \mu\text{m}$, 并不直接对应低损耗窗口, 但是这给硅基发光提供了另一平台. 此外, 这一波段激光还可以运用在气体探测和医疗诊断等方方面面.

4.4 硅基 III-V 族混合集成激光器

前面介绍的几种 Si 基激光器尽管都取得了不少进展, 基于 Ge 的电抽运激光也已经实现, 但是它们由于各种条件限制, 大多是光抽运, 且阈值功率很大, 这在硅基光电集成中难以实际应用. III-V 族化合物用作发光材料历史悠久, 光电性能优秀, 所以一种想法是采用外延或者键合等工艺将 III-V 族化合物和其他光电器件混合集成在硅片上 [24,149–156], 作为目前的过渡. 但是 III-V 族化合物与 Si 晶格常数失配较大, 致使在硅上难以获得高质量的外延层. 2005 年, 密歇根大学的 Bhattacharya 研究组 [157] 获得了室温下直接生长在 Si 上的 InGaAs 量子点激光器; 2006 年, Intel 和加州大学圣塔芭芭拉分校联合研制成功 AlGaInAs 和硅片键合的激光器 [155]; 2014 年, Chen 等 [24,158] 研制成功在高达 $111\ ^\circ\text{C}$ 下工作的硅片上 InAs/GaAs 量子点激光器. 目前存在的问题是 Si 上外延 III-V 族化合物及键合工艺与 CMOS 工艺不兼容, 且键合次品率较高, 另外高温下 III-V 族元素会逐渐扩散至硅层, 如何减轻这种扩散带来的影响仍需进一步研究.

5 总结与展望

虽然近些年来, 硅基光源取得了巨大进展, 但仍面临着很多挑战. 首先, 关于材料的理论设计虽然较为清楚, 但是制备高质量的光源材料仍然复杂, 如何简化工艺降低成本需要进一步研究; 其次必须找到工艺简单、成本低廉、电抽运和低功耗的激光光源, 容易实现单片集成的纳米硅、硅拉曼激光等面临着难以电抽运和发光效率低下的问题, 而混合集成和外部光源耦合虽然发光效率高, 但是工艺复杂且不兼容、集成度低且成本高昂. 此外, 在硅基掺铟体系中如何减轻自由载流子吸收提高增益也需要在能量传递机理和优化器件结构上下功夫; 硅基 Ge 光源的 Ge 是由间接带隙变为直接带隙, 发光特性还需深入了解, 设计激光器时需考虑 Ge 的高折射率 ($n = 4.3$) 给输出光耦合带来的困难.

综合来看, 目前仍是 III-V 族化合物和硅混合集成激光器最接近实际应用, 研究人员也在积极解决存在的一些问题; 此外, 硅基 Ge 光源也是能够取得较大突破的方向之一, 近年也进展颇多; 掺铟硅基和硅酸铟材料仍是重要的一个方向, 另外基于表面等离子体激元和 dressed 光子器件也值得关注.

参考文献

- [1] Krishnamoorthy A V, Ho R, Zheng X, Schwetman H, Lexau J, Koka P, Li G, Shubin I, Cunningham J E 2009 *Proc. IEEE* **97** 1337
- [2] Arakawa Y, Nakamura T, Urino Y, Fujita T 2013 *IEEE Commun. Mag.* **51** 72
- [3] Soref R 2006 *IEEE J. Sel. Top. Quant.* **12** 1678
- [4] Masini G, Colace L, Assanto G 2002 *Mater. Sci. Eng. B* **89** 2
- [5] Lim A E, Song J, Fang Q, Li C, Tu X, Duan N C K, Tern R P, Liow T 2014 *IEEE J. Sel. Top. Quant.* **20** 1
- [6] Mashanovich G Z, Milošević M M, Nedeljkovic M, Owens N, Xiong B, Teo E J, Hu Y 2011 *Opt. Express* **19** 7112
- [7] Vlasov Y, McNab S 2004 *Opt. Express* **12** 1622
- [8] Lee K K, Lim D R, Kimerling L C, Shin J, Cerrina F 2001 *Opt. Lett.* **26** 1888
- [9] Pathak S, Yu H, van Thourhout D, Bogaerts W 2014 *11th IEEE International Conference on Group IV Photonics IEEE Paris, France, August 27–29, 2014* p237
- [10] Yao J, Sun Z, Zhong L, Natelson D, Tour J M 2010 *Nano Lett.* **10** 4105
- [11] Tanabe T, Notomi M, Mitsugi S, Shinya A, Kuramochi E 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 151112
- [12] Reed G T, Mashanovich G, Gardes F Y, Thomson D J 2010 *Nat. Photon.* **4** 518
- [13] Liao L, Liu A, Rubin D, Basak J, Chetrit Y, Nguyen H, Cohen R, Izhaky N, Paniccia M 2007 *Electron. Lett.* **43** 1196
- [14] Xu Q, Schmidt B, Pradhan S, Lipson M 2005 *Nature* **435** 325
- [15] Liu A, Jones R, Liao L, Samara-Rubio D, Rubin D, Cohen O, Nicolaescu R, Paniccia M 2004 *Nature* **427** 615
- [16] Oehme M, Werner J, Kasper E, Jutzi M, Berroth M 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 71117
- [17] Yu Z, Aceves-Mijares M 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 81101
- [18] Michel J, Liu J, Kimerling L C 2010 *Nat. Photon.* **4** 527
- [19] Rong H, Liu A, Jones R, Cohen O, Hak D, Nicolaescu R, Fang A, Paniccia M 2005 *Nature* **433** 292
- [20] Rong H, Jones R, Liu A, Cohen O, Hak D, Fang A, Paniccia M 2005 *Nature* **433** 725
- [21] Camacho-Aguilera R E, Cai Y, Patel N, Bessette J T, Romagnoli M, Kimerling L C, Michel J 2012 *Opt. Express* **20** 11316
- [22] Liu J, Sun X, Camacho-Aguilera R, Kimerling L C, Michel J 2010 *Opt. Lett.* **35** 679

- [23] Wirths S, Geiger R, von den Driesch N, Mussler G, Stolica T, Mantl S, Ikonik Z, Luysberg M, Chiussi S, Hartmann J M 2015 *Nat. Photon.* **9** 88
- [24] Chen S M, Tang M C, Wu J, Jiang Q, Dorogan V G, Benamara M, Mazur Y I, Salamo G J, Seeds A J, Liu H 2014 *Electron. Lett.* **50** 1467
- [25] Justice J, Bower C, Meitl M, Mooney M B, Gubbins M A, Corbett B 2012 *Nat. Photon.* **6** 610
- [26] Yang H, Zhao D, Chuwongin S, Seo J, Yang W, Shuai Y, Berggren J, Hammar M, Ma Z, Zhou W 2012 *Nat. Photon.* **6** 615
- [27] Liu H, Wang T, Jiang Q, Hogg R, Tutu F, Pozzi F, Seeds A 2011 *Nat. Photon.* **5** 416
- [28] Chen R, Tran T D, Ng K W, Ko W S, Chuang L C, Sedgwick F G, Chang-Hasnain C 2011 *Nat. Photon.* **5** 170
- [29] Canham L T 1990 *Appl. Phys. Lett.* **57** 1046
- [30] Jung K H, Shih S, Kwong D L 1993 *J. Electrochem. Soc.* **140** 3046
- [31] Cullis A G 1991 *Nature* **353** 335
- [32] Cullis A G, Canham L T, Calcott P D J 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 909
- [33] Buda F, Kohanoff J, Parrinello M 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 1272
- [34] Prokes S M 1993 *Appl. Phys. Lett.* **62** 3244
- [35] Qin G G, Jia Y Q 1993 *Solid State Commun.* **86** 559
- [36] Pi X, Chen X, Yang D 2011 *J. Phys. Chem. C* **115** 9838
- [37] Chen X, Pi X, Yang D 2010 *J. Phys. Chem. C* **115** 661
- [38] Ma Y, Chen X, Pi X, Yang D 2012 *J. Nanopart. Res.* **14** 1
- [39] Chen X, Pi X, Yang D 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 193108
- [40] Wang R, Pi X, Yang D 2013 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15** 1815
- [41] Ma Y, Pi X, Yang D 2012 *J. Phys. Chem. C* **116** 5401
- [42] Ni Z, Pi X, Yang D 2012 *RSC Adv.* **2** 11227
- [43] Ma Y, Chen X, Pi X, Yang D 2011 *J. Phys. Chem. C* **115** 12822
- [44] Pi X, Chen X, Ma Y, Yang D 2011 *Nanoscale* **3** 4584
- [45] Pi X D, Wang R 2014 *Chin. Phys. B* **23** 076102
- [46] Wang R, Pi X, Yang D 2012 *J. Phys. Chem. C* **116** 19434
- [47] Valenta J, Juhasz R, Linnros J 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 1070
- [48] Priolo F, Gregorkiewicz T, Galli M, Krauss T F 2014 *Nat. Nanotechnol.* **9** 19
- [49] Wang Y Q, Smirani R, Ross G G 2004 *Nanotechnology* **15** 1554
- [50] Pei Z, Su A Y, Hwang H L, Hsiao H L 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 63503
- [51] Kim T, Park N, Kim K, Sung G Y, Ok Y, Seong T, Choi C 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 5355
- [52] Kang Z T, Arnold B, Summers C J, Wagner B K 2006 *Nanotechnology* **17** 4477
- [53] Orii T, Hirasawa M, Seto T 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 3395
- [54] Zacharias M, Heitmann J, Scholz R, Kahler U, Schmidt M, Bläsing J 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 661
- [55] Rui Y, Li S, Xu J, Song C, Jiang X, Li W, Chen K, Wang Q, Zuo Y 2011 *J. Appl. Phys.* **110** 64322
- [56] Lin G, Pai Y, Lin C, Chen C 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 263514
- [57] Ennen H, Pomrenke G, Axmann A, Eisele K, Haydl W, Schneider J 1985 *Appl. Phys. Lett.* **46** 381
- [58] Ennen H 1983 *Appl. Phys. Lett.* **43** 943
- [59] Adeola G W, Rinnert H, Miska P, Vergnat M 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 53515
- [60] Taguchi A, Takahei K 1998 *J. Appl. Phys.* **83** 2800
- [61] Priolo F, Franzò G, Pacifici D, Vinciguerra V, Iacona F, Irrera A 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 264
- [62] Kenyon A J, Trwoga P F, Federighi M, Pitt C W 1994 *J. Phys.: Condens. Matter* **6** L319
- [63] Jambois O, Gourbilleau F, Kenyon A J, Montserrat J, Rizk R, Garrido B 2010 *Opt. Express* **18** 2230
- [64] Ramírez J M, Cuffe S, Berencén Y, Labbé C, Garrido B 2014 *J. Appl. Phys.* **116** 83103
- [65] Xu L, Jin L, Li D, Yang D 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 71101
- [66] Garrido B, García C, Seo S Y, Pellegrino P, Navarro-Urrios D, Daldosso N, Pavesi L, Gourbilleau F, Rizk R 2007 *Phys. Rev. B* **76**
- [67] de Dood M J A, Knoester J, Tip A, Polman A 2005 *Phys. Rev. B* **71** 115102
- [68] Savchyn O, Ruhge F R, Kik P G, Todi R M, Coffey K R, Nukala H, Heinrich H 2007 *Phys. Rev. B* **76** 195419
- [69] Kanjilal A, Rebohle L, Voelskow M, Skorupa W, Helm M 2008 *J. Appl. Phys.* **104** 103522
- [70] Jin L, Li D, Xiang L, Wang F, Yang D, Que D 2013 *Nanoscale Res. Lett.* **8** 366
- [71] Yerci S, Li R, Kucheyev S O, van Buuren T, Basu S N, Dal Negro L 2010 *IEEE J. Sel. Top. Quant.* **16** 114
- [72] Steveler E, Rinnert H, Devaux X, Dossot M, Vergnat M 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 221902
- [73] Miritello M, Lo Savio R, Iacona F, Franzò G, Irrera A, Piro A M, Bongiorno C, Priolo F 2007 *Adv. Mater.* **19** 1582
- [74] Isshiki H, de Dood M J A, Polman A, Kimura T 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 4343
- [75] Wang X J, Wang B, Wang L, Guo R M, Isshiki H, Kimura T, Zhou Z 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 71903
- [76] Wang X J, Yuan G, Isshiki H, Kimura T, Zhou Z 2010 *J. Appl. Phys.* **108** 13506
- [77] Wang L, Guo R, Wang B, Wang X, Zhou Z 2012 *IEEE Photon. Technol. Lett.* **24** 900
- [78] Yin L, Ning H, Turkdogan S, Liu Z, Ning C 2012 *CLEO: Science and Innovations* California, United States, May 5–12, 2012 h3D-h4D
- [79] Lo Savio R, Miritello M, Piro A M, Priolo F, Iacona F 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 21919
- [80] Liu Z, Zhao G, Yin L, Ning C Z 2014 *CLEO: Science and Innovations* California, United States, May 4–9, 2014 M4H
- [81] Tajima M, Kamata Y 2013 *Jpn. J. Appl. Phys.* **52** 86602
- [82] Milosavljević M, Lourenço M A, Gwilliam R M, Home-wood K P 2011 *J. Appl. Phys.* **110** 33508
- [83] Yu X, Song L, Yang D, Kittler M, Rozgonyi G A 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 211120

- [84] Kveder V, Badylevich M, Schrter W, Seibt M, Steinman E, Izotov A 2005 *Phys. Status Solidi A* **202** 901
- [85] Kveder V, Badylevich M, Steinman E, Izotov A, Seibt M, Schroter W 2004 *Appl. Phys. Lett.* **84** 2106
- [86] Ng W L, Lourenco M A, Gwilliam R M, Ledain S, Shao G, Homewood K P 2001 *Nature* **410** 192
- [87] Xiang L, Li D, Jin L, Wang S, Yang D 2013 *J. Appl. Phys.* **113** 33518
- [88] Xiang L, Li D, Jin L, Pivac B, Yang D 2012 *J. Appl. Phys.* **112** 63528
- [89] Xiang L, Li D, Jin L, Yang D 2012 *Solid State Commun.* **152** 1956
- [90] Kawazoe T, Mueed M A, Ohtsu M 2011 *Appl. Phys. B* **104** 747
- [91] Liu J, Sun X, Pan D, Wang X, Kimerling L C, Koch T L, Michel J 2007 *Opt. Express* **15** 11272
- [92] Liu J, Cannon D D, Wada K, Ishikawa Y, Danielson D T, Jongthammanurak S, Michel J, Kimerling L C 2004 *Phys. Rev. B* **70** 155309
- [93] Sun X, Liu J, Kimerling L C, Michel J 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 11911
- [94] Kouvetakis J, Kouvetakis J, Tolle J, Tolle J, Menendez J, Menendez J D, Costa V R D 2007 *4th IEEE International Conference on Group IV Photonics IEEE Tokyo, Japan, September 19–21, 2007* p1
- [95] Soref R, Kouvetakis J, Tolle J, Menendez J, D Costa V 2007 *J. Mater. Res.* **22** 3281
- [96] Sturm J C 1998 *MRS Bull.* **23** 60
- [97] He G, Atwater H A 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 1937
- [98] Filonov A B, Migas D B, Shaposhnikov V L, Borisenko V E, Henrion W, Rebien M, Stauss P, Lange H, Behr G 1998 *J. Appl. Phys.* **83** 4410
- [99] Lange H 1997 *Phys. Status Solidi B* **201** 3
- [100] Leong D, Harry M, Reeson K J, Homewood K P 1997 *Nature* **387** 686
- [101] Green M A, Zhao J, Wang A, Reece P J, Gal M 2001 *Nature* **412** 805
- [102] Lourenco M A, Milosavljevic M, Gwilliam R M, Homewood K P, Shao G 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 201105
- [103] Yamaguchi M, Kawazoe T, Ohtsu M 2014 *Appl. Phys. A* **115** 119
- [104] Motoichi O 2012 *Nanophotonics* **1** 83
- [105] Wada N, Tran M A, Kawazoe T, Ohtsu M 2014 *Appl. Phys. A* **115** 113
- [106] Tran M A, Kawazoe T, Ohtsu M 2014 *Appl. Phys. A* **115** 105
- [107] Loni A, Simons A J, Cox T I, Calcott P, Canham L T 1995 *Electron. Lett.* **31** 1288
- [108] Hirschman K D, Tsybeskov L, Duttagupta S P, Fauchet P M 1996 *Nature* **384** 338
- [109] Cheng K, Anthony R, Kortshagen U R, Holmes R J 2011 *Nano Lett.* **11** 1952
- [110] Maier-Flaig F, Rinck J, Stephan M, Bocksrocker T, Bruns M, Kübel C, Powell A K, Ozin G A, Lemmer U 2013 *Nano Lett.* **13** 475
- [111] Anopchenko A, Marconi A, Wang M, Pucker G, Bellutti P, Pavesi L 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 181108
- [112] Berencn Y, Carreras J, Jambois O, Ramirez J M, Rodriguez J A, Domnguez C, Hunt C E, Garrido B 2011 *Opt. Express* **19** A234
- [113] Huh C, Kim K H, Kim B K, Kim W, Ko H, Choi C J, Sung G Y 2010 *Adv. Mater.* **22** 5058
- [114] Vaccaro L, Cannas M, Radzig V, Boscaino R 2008 *Phys. Rev. B* **78** 75421
- [115] Skuja L 1998 *J. Non-Cryst. Solids* **239** 16
- [116] Kim H B, Kim T G, Son J H, Whang C N, Chae K H, Lee W S, Im S, Song J H 2000 *J. Appl. Phys.* **88** 1851
- [117] Juvert J, Gonzalez Fernandez A A, Morales-Snchez A, Barreto J, Aceves M, Llobera A, Domnguez C 2013 *J. Lightwave Technol.* **31** 2913
- [118] Robertson J, Powell M J 1984 *Appl. Phys. Lett.* **44** 415
- [119] Kistner J, Chen X, Weng Y, Strunk H P, Schubert M B, Werner J H 2011 *J. Appl. Phys.* **110** 23520
- [120] Huang R, Wang D Q, Ding H L, Wang X, Chen K J, Xu J, Guo Y Q, Song J, Ma Z Y 2010 *Opt. Express* **18** 1144
- [121] Cen Z H, Chen T P, Liu Z, Liu Y, Ding L, Yang M, Wong J I, Yu S F, Goh W P 2010 *Opt. Express* **18** 20439
- [122] Pei Z, Chang Y R, Hwang H L 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 2839
- [123] Li D, Wang F, Yang D, Que D 2012 *Opt. Express* **20** 17359
- [124] Wang F, Li D, Yang D, Que D 2012 *Nanoscale Res. Lett.* **7** 669
- [125] Li D, Wang F, Yang D 2013 *Nanoscale* **5** 3435
- [126] Wang F, Li D, Yang D, Que D 2013 *Opt. Express* **21** 846
- [127] Wang F, Li D, Jin L, Ren C, Yang D, Que D 2013 *Opt. Lett.* **38** 2832
- [128] Wang F, Li D, Yang D, Que D 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 31113
- [129] Wang F, Li D, Jin L, Ren C, Yang D, Que D 2013 *Opt. Express* **21** 1675
- [130] Monroy B M, Crgut O, Gallart M, Hnerlage B, Gilliot P 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 261108
- [131] Ramírez J M, Ferrarese Lupi F, Jambois O, Berencén Y, Navarro-Urrios D, Anopchenko A, Marconi A, Prtljaga N, Tengattini A, Pavesi L, Colonna J P, Fedeli J M, Garrido B 2012 *Nanotechnology* **23** 125203
- [132] Irrera A, Iacona F, Franzò G, Miritello M, Lo Savio R, Castagna M E, Coffa S, Priolo F 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 54302
- [133] Rebohle L, Berencén Y, Wutzler R, Braun M, Hiller D, Ramírez J M, Garrido B, Helm M, Skorupa W 2014 *J. Appl. Phys.* **116** 123104
- [134] Yerci S, Li R, Dal Negro L 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 81109
- [135] Cuff S, Manel Ramírez J, Kurvits J A, Berencén Y, Zia R, Garrido B, Rizk R, Labbé C 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 191109
- [136] Yin Y, Xu W J, Wei F, Ran G Z, Qin G G, Shi Y F, Yao Q G, Yao S D 2010 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **43** 335102
- [137] Wang B, Guo R M, Wang X J, Wang L, Hong L Y, Yin B, Gao L F, Zhou Z 2012 *Opt. Mater.* **34** 1371
- [138] Yin Y, Sun K, Xu W J, Ran G Z, Qin G G, Wang S M, Wang C Q 2009 *J. Phys.: Condens. Matter* **21** 12204

- [139] Luan H, Lim D R, Lee K K, Chen K M, Sandland J G, Wada K, Kimerling L C 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 2909
- [140] Sun X, Liu J, Kimerling L C, Michel J 2009 *Opt. Lett.* **34** 1198
- [141] Cheng S, Lu J, Shambat G, Yu H, Saraswat K, Vuckovic J, Nishi Y 2009 *Opt. Express* **17** 10019
- [142] Hu W, Cheng B, Xue C, Xue H, Su S, Bai A, Luo L, Yu Y, Wang Q 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 92102
- [143] Liu Z, Hu W, Li C, Li Y, Xue C, Li C, Zuo Y, Cheng B, Wang Q 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 231108
- [144] Liu Z, Hu W, Su S, Li C, Li C, Xue C, Li Y, Zuo Y, Cheng B, Wang Q 2012 *Opt. Express* **20** 22327
- [145] Pavesi L, Dal Negro L, Mazzoleni C, Franzo G, Priolo F 2000 *Nature* **408** 440
- [146] Cloutier S G, Kossyrev P A, Xu J 2005 *Nat. Mater.* **4** 887
- [147] Rong H, Xu S, Kuo Y, Sih V, Cohen O, Raday O, Paniccia M 2007 *Nat. Photon.* **1** 232
- [148] Samuel I D, Namdas E B, Turnbull G A 2009 *Nat. Photon.* **3** 546
- [149] Tanabe K, Watanabe K, Arakawa Y 2012 *Sci. Rep.* **2** 349
- [150] Tanabe K, Guimard D, Bordel D, Iwamoto S, Arakawa Y 2010 *Opt. Express* **18** 10604
- [151] Liang D, Fiorentino M, Okumura T, Chang H, Spencer D T, Kuo Y, Fang A W, Dai D, Beausoleil R G, Bowers J E 2009 *Opt. Express* **17** 20355
- [152] Fang A W, Lively E, Kuo Y, Liang D, Bowers J E 2008 *Opt. Express* **16** 4413
- [153] Liang D, Bowers J E 2008 *J. Vac. Sci. Technol. B* **26** 1560
- [154] van Campenhout J, Rojo Romeo P, Regreny P, Seassal C, van Thourhout D, Verstuyft S, Di Cioccio L, Fedeli J, Lagahe C, Baets R 2007 *Opt. Express* **15** 6744
- [155] Fang A W, Park H, Cohen O, Jones R, Paniccia M J, Bowers J E 2006 *Opt. Express* **14** 9203
- [156] Roelkens G, van Thourhout D, Baets R, Smit M 2006 *Opt. Express* **14** 8154
- [157] Mi Z, Bhattacharya P, Yang J, Pipe K P 2005 *Electron. Lett.* **41** 742
- [158] Chen S M, Tang M C, Wu J, Jiang Q, Dorogan V G, Benamara M, Mazur Y I, Salamo G J, Seeds A J, Liu H 2014 *Electron. Lett.* **50** 1467

SPECIAL ISSUE—Physics and devices of silicon photonics

Research progress of silicon light source*

Shen Hao Li Dong-Sheng[†] Yang De-Ren*(State Key Laboratory of Silicon Materials, Department of Materials Science and Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)*

(Received 7 July 2015; revised manuscript received 14 August 2015)

Abstract

To meet the requirements for high speed, low cost, and more information capacity, silicon photonics has been booming in recent years. Silicon photonics covers a very wide field. For the silicon photonics, researchers have successfully achieved silicon-based optical waveguides, switches, modulators, and detectors. But the problem of silicon based light source has not been really resolved, which has become a primary bottleneck for further developing the silicon photonics. The momentum of a phonon is required to allow an electron to transit from the minimum of the conduction band to the maximum of the valence band in Si because of the indirect bandgap. This two-particle process with a low probability makes it difficult to achieve high-efficiency silicon-based light source by itself.

However, much effort has been made to characterize and understand the light-emission phenomena of silicon-based devices. Also, more attempts were made to enhance the emission efficiency of silicon. Practical silicon lasers are very important for silicon photonics and have been a long goal for semiconductor scientists. A number of important breakthroughs in the past decade have focused on silicon as a photonic platform thanks to the efforts of scientists.

In this review, we introduce the recent progress of silicon-based luminescence materials, silicon light emitting diodes and silicon lasers. In the first part of this paper, common types of silicon-based light emitting materials, including porous silicon, silicon nanocrystals, rare earth-doped silicon, silicon defect emission, germanium on silicon and semiconducting silicides are comprehensively reviewed. Among them, the quantum effects and surface effects of low-dimensional silicon can greatly enhance the light emission efficiency. The erbium atoms in silicon-based rare earth materials can produce the light emission at communication wavelength band independently of the host. The transition from the lowest excited state to the 4f ground state yields light at 1.54 μm . Moreover the emission energy is independent of the temperature due to the inner atomic transition. Group IV materials grown on silicon such as Ge and GeSn alloy can change from indirect bandgap into direct bandgap by introducing mechanically strain and modifying the component. Strong enhancement of photoluminescence and net gain emerging from the direct transition are very significant for fabricating the devices.

In the second part, different light emitting diodes (LEDs) fabricated with above luminescent materials are introduced. The Si PN diodes were once popular at the earlier research stage. One approach was to modify the effective surface on high-purity single crystal silicon and the other idea was to use optically active defects in silicon. Ten years later, silicon LEDs in which the dressed-photon-phonons assisted method is used, made the Si PN diode rejuvenated. LEDs fabricated on nano-structured Si and silicon-based film were limited in the optoelectronic integration since the luminescence wavelength is not corresponding to the low-loss communication region. Although erbium-doped and Er silicate LEDs emit suitable light, their high turn-on voltage and low luminescence efficiency block the practical application. The researches of Ge-on-Si LED mainly focus on modifying the band structure by introducing strain and n-doping.

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2013CB632102).

[†] Corresponding author. E-mail: mselds@zju.edu.cn

In the third part, firstly we summarize the basic rules of the silicon laser. Then, we review the most recent progress in the field. Nanometer Si with periodic array can only behave unambiguous laser action using optical pumping and at very low temperature. Low threshold silicon Raman lasers with racetrack ring resonator cavities can only stop on paper also due to the difficulty in electrical pumping. The Ge-on-Si lasers operating at room temperature by optical and electrical pumping were accomplished in the past 5 years. The GeSn laser that is CMOS-compatible also came into being this year. Although so far, lasing has been implemented only by using pulsed optical pumping and stopped working at 90 K, this first demonstration of lasing in a direct-gap group IV alloy grown on standard silicon substrates is potentially an important step on the way to a platform of fully integrated silicon-based photonics. Hybrid III-V-on-Si lasers are considered as one of the most practical means due to the excellent photoelectric properties and mature preparation technology.

Finally, current problems and future development direction in the silicon light source are also presented briefly.

Keywords: silicon-based luminescence materials, silicon light emitting diodes, silicon laser, optoelectronic integration

PACS: 42.82.-m, 42.70.-a, 85.60.Jb, 42.55.Px

DOI: [10.7498/aps.64.204208](https://doi.org/10.7498/aps.64.204208)

硅基 III-V 族量子点激光器的发展现状和前景

王霆 张建军 Huiyun Liu

Quantum dot lasers on silicon substrate for silicon photonic integration and their prospect

Wang Ting Zhang Jian-Jun Huiyun Liu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 204209 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.204209

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.204209>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I20>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

用于铯原子内态操控的双光子拉曼激光的产生及应用

Generation and application of two-photon Raman laser for manipulation of internal state of Cs atom

物理学报.2015, 64(18): 184209 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.184209>

多横模垂直腔面发射激光器及其波长特性

Multi-transverse-mode and wavelength split characteristics of vertical cavity surface emitting laser

物理学报.2015, 64(16): 164203 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.164203>

基于半导体环形激光器的高速双向双信道混沌保密通信

High speed bidirectional dual-channel chaos secure communication based on semiconductor ring lasers

物理学报.2015, 64(15): 154205 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.154205>

243 nm 稳频窄线宽半导体激光器

A narrow linewidth diode laser at 243 nm

物理学报.2015, 64(13): 134205 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.134205>

双路激光混沌复用系统的混沌同步及安全性能研究

Performance of chaos synchronization and security in dual-chaotic optical multiplexing system

物理学报.2015, 64(12): 124206 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.124206>

专题: 硅基光电子物理和器件

硅基III-V族量子点激光器的发展现状和前景

王霆^{1)†} 张建军¹⁾ Huiyun Liu²⁾¹⁾(中国科学院物理研究所, 北京 100190)²⁾(Department of Electrical and Electronic Engineering, University College London, Torrington Place, London, UK)

(2015年9月7日收到; 2015年9月25日收到修改稿)

本文简要综述了硅基III-V族量子点激光器的研究进展. 在介绍了量子点激光器的优势和发展后, 重点介绍了近年来硅基、锗基III-V族量子点材料生长上的突破性进展及所带来的器件性能的大幅提高, 如实现了锗基和硅基1.3 μm InAs/GaAs量子点激光器的室温激射, 锗基量子点激光器的阈值电流低至55.2 A/cm²并可达到60 °C以上的连续激射, 通过锗硅虚拟衬底, 在硅基上实现了30 °C下以16.6 mW的输出功率达到4600 h的激光寿命, 这些突破性的进展为硅基光电子集成打开了新的大门.

关键词: 半导体激光, 激光材料, 集成光学, 光电子器件**PACS:** 42.55.Px, 42.70.Hj, 42.82.-m, 85.70.-q**DOI:** 10.7498/aps.64.204209

1 引言

随着微电子器件的尺寸日益逼近其物理极限, 摩尔定律很难进一步延续, 硅集成电路的发展面临着巨大的挑战和机遇. 硅基光电子学旨在将光子学器件和电子学器件集成在硅晶片上, 把互补型金属氧化物半导体(CMOS)工艺兼容的激光器、光调制器、光波导和光探测器等组件集成到微电子电路从而实现硅基光电子集成. 它兼具光子学器件的高传输处理速度、高传输带宽和电子学器件的低成本、微尺寸、高集成度等特质, 有望给信息产业领域注入新的生机和活力, 吸引了大量科学家和工程师的研究兴趣^[1]. 然而, 由于硅是间接带隙半导体, 不具有良好的发光特性, 因此实现硅基光电子集成的首要任务是如何实现硅基高效率发光的激光光源. 在过去10多年间, 持续的投入和努力使该领域得到了较快的发展, 如美国麻省理工学院Michel研究组通过引入张应变和重掺杂的方法, 大幅提高了发光效率, 实现了电抽运的硅基锗激光输出^[2]; 德国Grützmacher研究小组在硅基上外延生长了锡含

量高达12.6%的高质量锗锡薄膜, 观察到了光抽运的硅基直接带隙锗锡合金的激光输出^[3]. 然而其发光效率依然没有达到商用水平, 因此在硅基全IV族激光光源方面, 仍需进一步提高锗中的张应变、锗锡合金的薄膜质量及锡的含量, 或者探索巧妙设计的锗/硅超晶格结构^[4]. 而另一方面, III-V族半导体如GaAs, InAs是直接带隙材料, 具有极高的发光效率, 将III-V族材料高质量外延生长在硅衬底上则可获得高效激光光源. 在硅基上生长III-V族材料存在着反向畴、晶格失配和热膨胀系数差异等问题, 可喜的是, 2011年伦敦学院大学Liu等^[5]在锗衬底上成功生长出高质量的InAs/GaAs量子点并实现了1.3 μm 波长量子点激光器的室温连续激射, 而后进一步实现了硅基InAs/GaAs量子点的室温连续激射^[5-8].

2 硅基III-V族量子点激光器

2.1 量子点激光器的主要优势

自从1963年双异质结半导体激光器被提出以来, 量子结构的激光器就引起了广泛的关注和研

† 通信作者. E-mail: wangting@iphy.ac.cn

究^[9,10]. 尤其是在过去的30年, 生长制备技术得到了全面的发展和提高, 如分子束外延技术, 它可把材料生长的精度控制在原子尺度, 已成功地生长制备出高质量的二维量子阱、一维量子线和零维量子点结构. 零维量子点结构能实现三维的量子限制, 被认为是人造原子, 且随着量子点物理尺寸的减少, 量子限制效果会随之增强^[11,12]. 在半导体量子阱激光器中, 注入的载流子会受到热激发而从低能级跃迁到高能级, 例如从基态跃迁到激发态乃至异质结构中, 因此高能级的载流子复合会导致阈值电流的显著升高, 从而降低激光的光电转换效率. 1982年, Arakawa和Sakaki^[12]预测了量子点激光器可以大幅度减少由载流子注入引起的热激发, 考虑到阈值电流和温度之间是幂次方关系, 量子点对于温度的不敏感性可以大幅度提高激光

器的工作温度和器件寿命. 结合高温生长GaAs分隔层和调制掺杂量子点等技术, 量子点激光器的特征温度 T_0 相对于量子阱激光器得到了大幅度提高^[13–16]. 图1显示不同温度下GaAs/InGaAs量子点和量子阱激光器的输出功率随阈值电流的变化^[17]. 由图1可见, 量子阱激光器(图1(b), (c))的输出功率和阈值电流的比值随温度的增加出现大幅衰减, 且最高工作温度只能在85 °C, 而在量子点激光器中(图1(a)), 输出功率和阈值电流的比值在−40—100 °C之间并没有明显变化. 近10多年来, 量子点激光器多个方面的优势, 如低阈值电流密度、高工作温度和调制频率都已成功实现, 目前自组装生长的InAs/GaAs量子点激光器在通信波段已被广泛应用^[18–20].

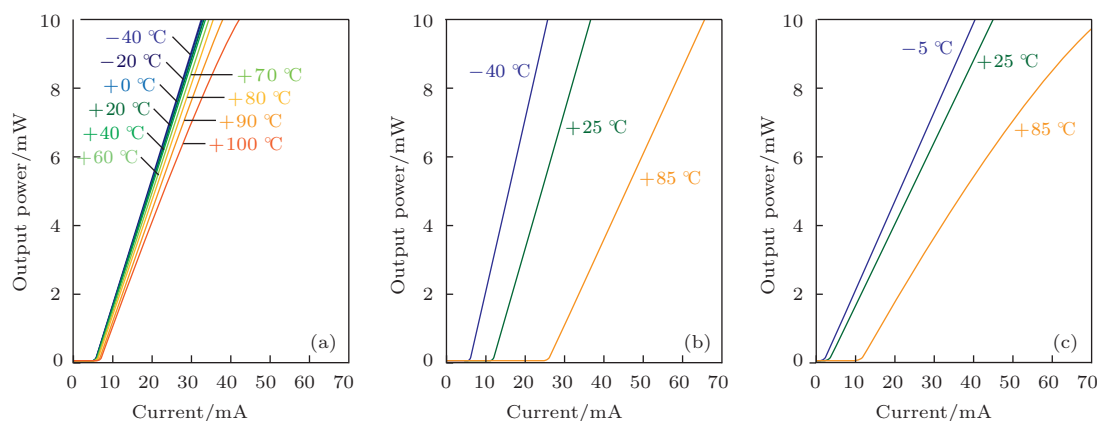


图1 量子点(a)和量子阱激光器(b), (c)的变温测试对比, 量子点激光器对温度变化的敏感度更低, 更稳定^[17]

Fig. 1. Temperature dependent L - I measurements of quantum dot (a) and quantum well (b), (c) lasers. Quantum dot lasers are less sensitive to temperature variations^[17].

2.2 量子点激光器的发展

1994年Hirayama等^[21]首次实现了半导体量子点激光器的制备, 其制备方法是将InGaAs/GaInAsP/InP量子阱通过湿法刻蚀获得了类似于量子点的盒状结构, 然后多层生长覆盖层. 在77 K脉冲模式下, 该激光器激发态激射的阈值电流密度约为7.6 kA/cm²^[21], 高于传统量子阱激光器室温激射的阈值电流密度一个数量级. 在同一年, Kirstaedter等^[22]宣布了自组装生长的InGaAs/GaAs量子点激光器的首次基态激射, 在77 K其阈值电流密度降至120 A/cm², 室温阈值电流密度为950 A/cm². 然而在随后的几年里量子点激光器的性能一直局限于较低的工作温度和

较高的阈值电流. 这主要是由于当时自组装生长的量子点的尺寸不均匀, 从而导致荧光光谱的半高宽增大, 因而发光增益会被宽谱平均分摊, 降低波峰增益. 量子点的发光增益主要决定于量子点的大小、密度、形貌、尺寸均匀性以及堆垛的层数. 1999年, Liu等^[13]实现了1.3 μm量子点激光器室温26 A/cm²的低阈值电流密度, 这是量子点激光器首次超过传统的量子阱激光器. 通过高温生长GaAs分隔层和调制掺杂量子点等技术, 2004年, Liu等^[16]将InAs/GaAs量子点激光器的阈值电流密度进一步降低到19 A/cm²特征温度 T_0 提高到111 K. 图2展示了自1960年以来不同衬底上不同结构的半导体激光器的发展进程, 从异质结到量子阱到量子点, 再到近期的硅基量子点激光器.

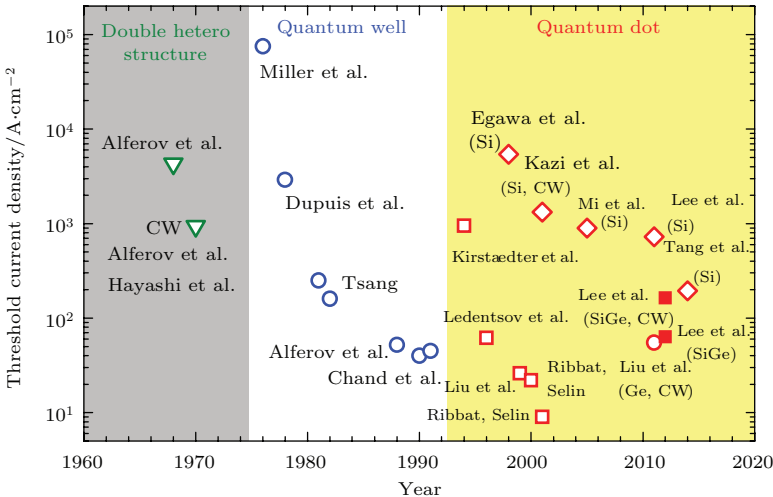


图2 1960年以来不同衬底上不同结构的半导体激光器的发展进程 [23]
Fig. 2. The development of semiconductor lasers since 1960 [23].

表1 硅基 III-V 族激光器的寿命进展
Table 1. The lifetime of III-V lasers on silicon substrate.

年份	技术	阈值电流密度和激光功率	位错密度	器件寿命	文献
1987	GaAs/AlGaAs 自组装量子阱	2 mW	10 ⁷ /cm ²	< 10 s	[24]
1991	InGaAs/AlGaAs 自组装量子阱	2000 A/cm ² , 2 mW	—	10 h	[25]
2000	InGaAs 类量子点	1320 A/cm ² , 0.5 mW	—	80 h	[26]
2001	图形衬底上的 GaAs/AlGaAs 自组装量子阱	810 A/cm ² , 1 mW	2 × 10 ⁶ /cm ²	200 h	[27]
2003	GeSi/Si 衬底上的 GaAs/AlGaAs 自组装量子阱	270 A/cm ² , < 1 mW	2 × 10 ⁶ /cm ²	4 h	[28]
2014	Ge/Si 虚拟衬底上的 InAs/GaAs 自组装量子点	2000 A/cm ² , 16.6 mW	2 × 10 ⁸ /cm ²	4600 h	[29]

表 1 显示了自 1987 年以来硅基 III-V 族半导体激光器的性能提升. 从最初硅基量子阱激光器仅有 10 s 的输出寿命, 历时 27 年于 2014 年在硅基量子点激光器中首次达到了 4600 h 的工作时间. 由表 1 可见, 尽管其位错密度并没有明显减少, 但其性能得到了大幅提升, 说明现有的外延生长技术有效地阻止了位错对发光结构层的影响. 这也是因为量子点的独立特性使得单个有位错的量子点并不会影响其他量子点的光学性能, 从而大幅度减少了位错对其光学特性的影响. 而量子阱器件因为是二维量子薄膜材料, 导致位错很容易在薄膜层里衍生和传递, 从而降低了发光效率.

2.3 硅基量子点激光器的异军突起

众所周知, IV 族材料作为光电器件的主要弊端在于其间接带隙导致的低发光效率 [30]. 在过去的 20 多年里, 科研人员尝试了多方面的手段试图

在硅基结构上实现有效的激光光源如硅拉曼激光器 [31]. 尽管硅拉曼激光已在室温实现了连续激光, 但其光电转化效率很低, 仍然必须依赖于外界的抽运光源 [31], 因而使得使用载流子注入的方式无法实现有效的光电转换, 其光增益不足以达到激光条件. 这就意味着此方法不具有实际应用价值. 其他研究方向, 如低维硅纳米晶体和硅纳米孔状结构也曾被重点研究 [32], 但光增益和损耗问题一直无法得到解决.

2005 年, 通过使用倒装焊技术, 即将 III-V 族量子阱激光器倒装焊到硅衬底上, Intel 联合 UCSB 首次实现了 III-V 族激光器在硅基上的激光 [33]. 尽管此硅基激光器具有高功率、高稳定性及可被进一步集成等优点. 但依然存在着明显的缺点, 如工艺复杂、倒装焊后的器件导热性较差等, 最终导致器件良品率极低, 无法实现大规模量产. 若要实现硅基光电器件的高度集成, 将 III-V 族材料直接通过

外延生长到硅基上应该是最具潜力的方向之一.

硅基 III-V 族材料的外延生长主要受限于 III-V 族和 Si 的极性不同、晶格失配和热膨胀系数差异, 因此相应的会出现反相畴 (APDs)、穿透位错 (TDs) 和微裂缝等问题 [34,35].

反相畴 (APDs): III-V 族材料如 GaAs, InAs 是由两种不同原子构成的晶格, 而 IV 族材料仅有单一原子. 在 IV 族衬底材料的表面上会不可避免地存在原子台阶, 因此在原子台阶处可能产生错误的晶键 (Ga—Ga 或者 As—As), 称之为反向畴. 反相畴是一种平面位错, 会产生非辐射复合中心, 降低器件性能.

穿透位错 (TDs): GaAs 和 Si 有 4.1% 的晶格失配, InP 和 Si 有 7.5% 的晶格失配, 这都会导致外延生长的 III-V 族材料中产生大量应力. 应力弛豫会直接产生高密度的穿透位错, 通常在 $10^{10}/\text{cm}^2$. 这些穿透位错也会形成非辐射复合中心, 大幅减小器件的发光效率和寿命.

微裂缝: III-V 族和 IV 族材料不同的热膨胀系数会产生热应力从而导致进一步的晶格失配, 最终产生微裂缝.

2.3.1 硅基直接外延生长 III-V 族材料

硅基 III-V 族的直接外延生长已经被探讨和研究了 30 多年 [36,37]. 但在这 30 多年的研究中, 硅基的 III-V 族材料的位错密度仍然在 10^6 cm^{-2} 以上. 硅基量子阱激光器都存在着极高的阈值电流和极短的寿命 ($\sim 10 \text{ h}$) [38–41]. 幸运的是, 相对于量子阱, 量子点的光学特性受高位错密度的影响较低, 这意味着使用量子点可能实现高质量的硅基发光器件.

1999 年, Linder 等 [42] 首先报道了在硅衬底上 InGaAs 量子点的自组装生长. 他们首先在 $2''$ 的硅 (100) 衬底上生长 $4 \mu\text{m}$ 厚的 GaAs 缓冲层, 其中包括在 350°C 下生长 30 nm 的形核层, 然后在 780°C 退火 10 min . 然而得到的晶体质量不高, 可以看到极高密度的穿透位错. 在 $1.2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 的位错密度下, 该器件在 80 K 低温下成功实现了脉冲激励, 其阈值电流密度为 $3.85 \text{ kA}/\text{cm}^2$. 2001 年, Kazi 等 [43] 报道了第一个硅基 InGaAs 量子点的连续室温激励. 相对于 Linder 等的方法, 他们在 $2''$ 硅 (100) 衬底上生长了 $1 \mu\text{m}$ 厚的 GaAs 缓冲层, 形核层为 10 nm 的 GaAs (生长温度为 400°C), 且去掉

了缓冲层生长后的高温退火过程, 该器件的阈值电流密度降低至 $1.32 \text{ kA}/\text{cm}^2$. 如图 3 所示, 该硅基 InGaAs 量子点激光器的固定功率输出寿命约为 80 h , 而相同测试条件下量子阱激光器的寿命仅为 20 h , 寿命得到了 4 倍以上的提高 [43]. 2005 年, Bhattacharya 等 [44–48] 报道了 InGaAs 量子点激光器在 $1.1 \mu\text{m}$ 的室温激励, 其阈值电流密度进一步降低到 $900 \text{ A}/\text{cm}^2$, 同时特征温度 T_0 也提高至 244 K .

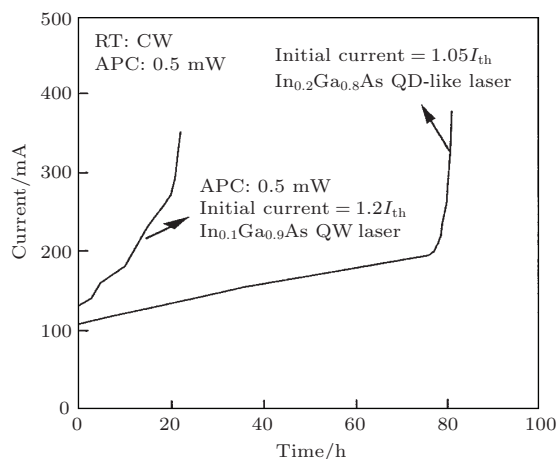


图3 硅基 InGaAs 量子阱和量子点激光器的稳定性对比, 测试条件: 室温、固定输出功率 0.5 mW [43]

Fig. 3. The stability comparison of InGaAs quantum well and quantum dot lasers on silicon substrate. Experimental conditions: room temperature, fixed output power at 0.5 mW [43].

以上研究极大地增强了实现硅基高效 III-V 族量子点激光器的信心, 然而阈值电流依然过高, 且未达到通信波段所需求的 1.3 或 $1.55 \mu\text{m}$ 激励波长, 使得其实用性仍受到很大限制. 2008 年, Li 等 [49] 在 6° 斜切硅 (100) 衬底上实现了室温 $1.3 \mu\text{m}$ InAs/GaAs 量子点的荧光发光, 其室温半高宽为 57 meV , 但没能实现激光激励. 后来, Wang 等 [6,7] 实现了硅基 $1.3 \mu\text{m}$ InAs/GaAs 量子点激光器的室温连续激励. 通过在 400°C 以 0.1 ML/s 的低生长速率生长一个 30 nm 的 GaAs 形核层, 大量的位错会被限制在 50 nm 的 GaAs/Si 界面以内. 该研究表明 GaAs 在硅基的形核温度是减少反相畴和位错密度的关键 [6]. 此外, 在 $1 \mu\text{m}$ 的 GaAs 缓冲层里, 超晶格位错过滤层技术也被用于减少穿透位错. 最后在缓冲层之上生长 5 层 InAs/InGaAs/GaAs 量子点结构用作发光层. 最终他们实现了硅基 $1.3 \mu\text{m}$ 波长量子点激光器的室温激励, 阈值电流密度减

少到 650 A/cm^2 . 此外, 该组还发现 AlAs 形核层比 GaAs 更能减少 GaAs/Si 界面的位错密度和粗糙度, 通过使用 InAlAs/GaAs 取代 InGaAs/GaAs 超晶格位错过滤层, 将位错密度从 10^9 cm^{-2} 减少到 10^6 cm^{-2} [8]. 图 4(a) 为该样品的横截面透射电子显微镜 (TEM) 图, 我们可以看到在 5 层位错过滤层后, 位错密度大幅减少, 在 TEM 中几乎观察不到位错. 图 4(b) 进一步展示了位错密度随位错过滤

层层数的变化, 可以看到五层 InAlAs/GaAs 位错过滤层有效地将位错密度降低至 $5 \times 10^6 \text{ cm}^{-2}$. 通过减少位错密度, 该硅基量子点激光器在室温以 77 mW 的高功率激射, 并且阈值电流密度降低到 194 A/cm^2 . 图 4(c) 显示了该器件的 $L-I$ 图, 可见其最高脉冲工作温度可达 111°C . 此外, 通过采用调制掺杂和侧面镀层等方法有望进一步提高激光器的性能.

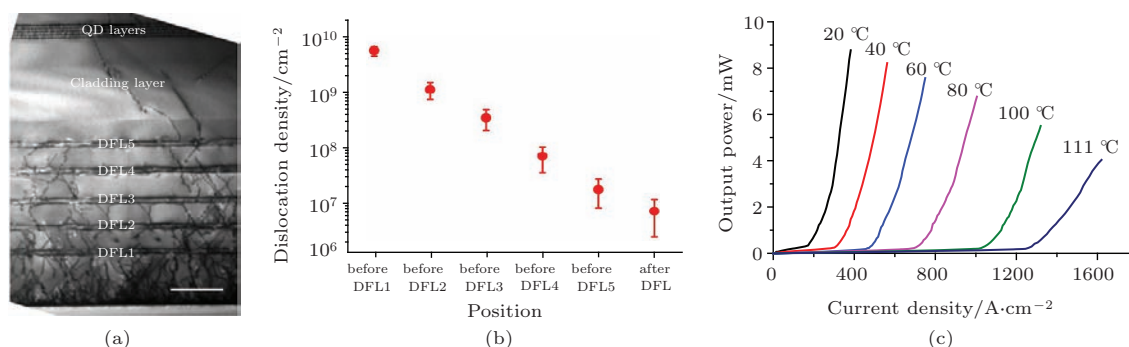


图 4 (a) 硅基量子点激光器的截面 TEM 图, 图中 DFL (dislocation filter layer) 为位错过滤层; (b) 不同层数的 DFL 对位错密度的影响; (c) 不同温度下的激光输出功率随电流密度的变化 [7,8]

Fig. 4. (a) The cross-sectional TEM image of quantum dot laser on silicon substrate (DFL is the dislocation filter layer); (b) the effectiveness of different numbers of DFL; (c) the output power versus current density at different temperature [7,8].

2.3.2 锗衬底上的高性能 InAs/GaAs 量子点激光器

锗和硅具有很好的兼容性, 且现有的 SiGe 技术已经非常成熟, 此外, 锗具有高载流子迁移率 (Ge 具有已知半导体中最高的空穴迁移率) 和在通信波段的高吸收率等优异特性. 因此, 与硅基外延生长一样, Ge 衬底上 III-V 族材料的生长同样引起了人们的研究兴趣. 相对于硅基外延生长, Ge 和 GaAs 的晶格失配 (0.08%) 和热膨胀系数差都很小 [5]. 2010 年, Border 等报道了在 germanium-on-insulator-on-silicon (GeOI) 衬底上 $1.3 \mu\text{m}$ InAs/GaAs 量子点的高质量生长, 并且发现 GaAs 缓冲层中的单层量子点有利于减少反相畴密度, 但是对减少穿透位错并没有明显作用, 因此没能实现激光激射. 一年之后, Liu 等 [5-8] 取得了突破性的进展, 报道了 Ge 衬底上 $1.3 \mu\text{m}$ InAs/GaAs 量子点激光器的室温激射. 此研究工作中, 在生长 GaAs 缓冲层之前, 他们首先生长了一层 Ga 原子的前置层, 该前置层的使用大幅度减少了反相畴的密度, 从而降低了 Ge/GaAs 界面的粗糙度, 大幅提高了晶体质量. 图 5(a), (b), (c) 和 (d) 显示了 As 前置层和 Ga 前置层相应的原子力显

微镜 (AFM) 和截面 TEM 图. 可以清楚地看到, 使用 Ga 前置层其表面平整度和界面质量都得到了大幅度的提高. 图 5(e) 展示了利用该方法生长的 InAs / GaAs 量子点在 $1.305 \mu\text{m}$ 波长连续激射的 $L-I$ 图, 实现了室温 55.2 A/cm^2 的阈值电流密度, 相对于上面提到的硅基量子点激光器其阈值电流密度得到了显著的下降. 此外, 量子点激光器良好的耐高温特性使得其连续激射达到了 60°C .

通过进一步优化 GaAs/Ge 界面的形核条件, Liu 等实现了 Ge 衬底上的 InAs/GaAs 量子点激光器在 100°C 的脉冲激射. 之后, 他们进一步将在锗衬底上的生长技术推广到硅基 SiGe 虚拟衬底上, 成功实现了硅基 SiGe 虚拟衬底 $1.3 \mu\text{m}$ InAs/GaAs 量子点激光器室温下 63.4 A/cm^2 的阈值电流密度的激射. 相对于倒装焊技术的硅基 InP 激光器 205 A/cm^2 的阈值电流密度 [50], 该方法将硅基激光器的阈值电流密度降低了一半. 通过优化激光器制备的后工艺, 2014 年, UCSB 和英特尔合作在硅基 SiGe 虚拟衬底上进一步实现了 95°C 的连续激射 [51]. 通过增加高反射层, 成功实现了最高 119°C 的连续激射, 其阈值电流密度低至 427 A/cm^2 , 输出功率为 176 mW, 特征温度 T_0 超过 200 K [51,52].

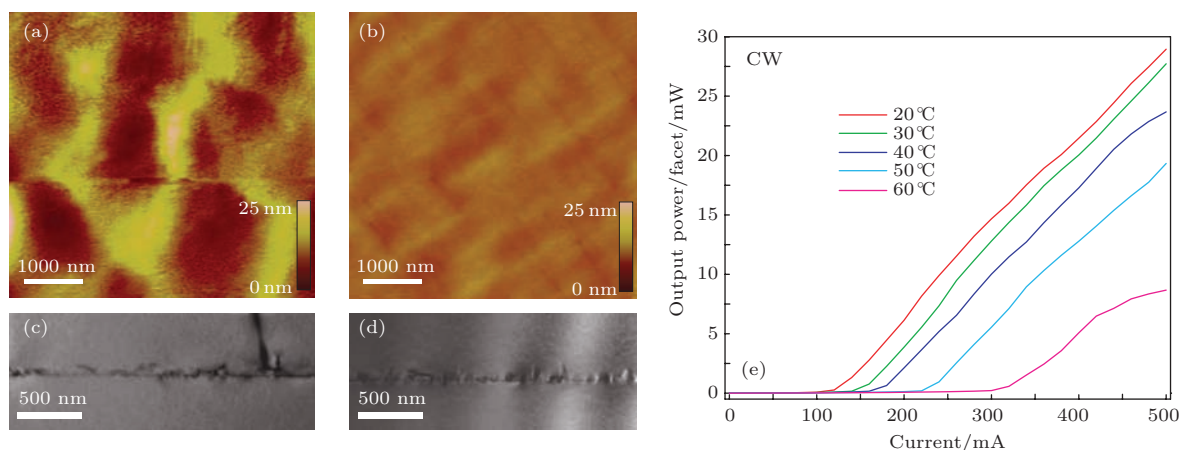


图5 (a), (b) 是 Ge 衬底上生长 $1.2\ \mu\text{m}$ GaAs 缓冲层后的 AFM 图 ($5\ \mu\text{m} \times 5\ \mu\text{m}$), (a) As 前置层, (b) Ga 前置层; (c), (d) 是 GaAs/Ge 界面的 TEM 图, (c) As 前置层, (d) Ga 前置层; (e) 连续电流下的激光输出功率在不同温度的 $L-I$ 图 [5].

Fig. 5. (a) and (b) are the AFM images of $1.2\ \mu\text{m}$ GaAs buffer layer grown on Ge substrates, where (a) is As prelayer, and (b) is Ga prelayer; (c) and (d) are the TEM images of GaAs/Ge interface, where (c) is As prelayer, and (d) is Ga prelayer; (e) the $L-I$ curve of the laser at different temperature under continuous-wave current injection [5].

3 总 结

在过去的 10 多年, $1.3\ \mu\text{m}$ GaAs 衬底量子点激光器对光电领域产生了重要影响. 硅基 III-V 族量子点激光器结合 III-V 族材料的高发光效率和硅材料的成熟工艺、高集成度和低成本等特性, 可能引领未来硅基光电子集成领域的飞速发展. 当然和商业激光器相比, 硅基量子点激光器仍须进一步提高性能. 一方面, 需提高晶体质量, 尤其是如何减少 GaAs/Si 界面的位错密度; 另一方面, 需要通过使用高反射镀层、电极优化等提高后工艺技术, 从而全面提高硅基量子点激光器的输出功率和器件寿命, 同时降低其阈值电流密度. 最终将实现高性能、高良品率和高集成度的硅基量子点激光器, 从而取代现有的外置 III-V 族半导体激光器.

参考文献

- [1] Zhou Z P 2012 *Si-based Optoelectronics* (Beijing: Beijing University Press) (in Chinese) [周治平 2012 硅基光电子学 (北京: 北京大学出版社)]
- [2] Camacho-Aguilera R E, Cai Y, Patel N, Bessette J T, Romagnoli M, Kimerling L C, Michel J 2012 *Opt. Express* **20** 11316
- [3] Wirths S, Geiger R, von den Driesch N, Mussler G, Stolica T, Mantl S, Ikonik Z, Luysberg M, Chiussi S, Hartmann J M, Sigg H, Faist J, Buca D, Grützmacher D 2015 *Nat. Photon.* **9** 88
- [4] D'Avezac M, Luo J W, Chanier T, Zunger A 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 027401
- [5] Liu H, Wang T, Jiang Q, Hogg R, Tutu F, Pozzi F, Seeds A 2011 *Nat. Photon.* **5** 416
- [6] Wang T, Liu H, Lee A, Pozzi F, Seeds A 2011 *Opt. Express* **19** 11381
- [7] Lee A, Jiang A, Tang M, Seeds A, Liu H 2012 *Opt. Express* **20** 22181
- [8] Chen S, Tang M, Wu J, Jiang Q, Dorogan V, Benamara M, Mazur Y, Salamo G, Seeds A, Liu H 2014 *Electron. Lett.* **50** 1467
- [9] Kroemer H 1963 *Proc. IEEE* **51** 1782
- [10] Alferov Z I, Kazarinov R 1963 Patent Number 181737
- [11] Asada M, Miyamoto Y, Suematsu Y 1986 *IEEE J. Quant. Electron.* **22** 1915
- [12] Arakawa Y, Sakaki H 1982 *Appl. Phys. Lett.* **40** 939
- [13] Liu G, Stintz A, Li H, Malloy K, Lester L 1999 *Electron. Lett.* **35** 1163
- [14] Liu H, Hopkinson M, Harrison C, Steer M, Frith R, Sellers I, Mowbray D, Skolnick M 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 2931
- [15] Liu H, Sellers I, Badcock T, Mowbray D, Skolnick M, Groom K, Gutierrez M, Hopkinson M, Ng J, David J 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 704
- [16] Liu H, Sellers I, Gutierrez M, Groom K, Soong W, Hopkinson M, David J, Beanland R, Badcock T, Mowbray D 2004 *J. Appl. Phys.* **96** 1988
- [17] Sugawara M, Usami M 2009 *Nat. Photon.* **3** 30
- [18] Maximov M V, Ledentsov N N 2004 *Dekker Encyclopedia Nanosci. Nanotechnol.* 3109
- [19] Li S, Gong Q, Cao C, Wang X, Yan J, Wang Y, Wang H 2013 *Infrared Phys. Technol.* **60** 216
- [20] Dingle R, Henry C H 1976 Patent Number US3982207A
- [21] Hirayama H, Matsunaga K, Asada M, Suematsu Y 1994 *Electron. Lett.* **30** 142
- [22] Kirstaedter N, Ledentsov N N, Grundmann M, Bimberg D, Ustinov V M, Ruvimov S S, Maximov M V, Kop'ev P S, Alferov Z I, Richter U, Werner P, Gosele U, Heydenreich J 1994 *Electron. Lett.* **30** 1416
- [23] Wu J, Chen S, Seeds A, Liu H 2015 *J. Phys. D* **48** 363001

- [24] van der Ziel J P, Dupuis R D, Logan R A, Pinzone C J 1987 *Appl. Phys. Lett.* **51** 89
- [25] Choi H K, Wang C A, Karam N H 1991 *Appl. Phys. Lett.* **59** 2633
- [26] Kazi Z I, Thilakan P, Egawa T, Umeno M, Jimbo T 2001 *Jpn. J. Appl. Phys.* **40** 4903
- [27] Kazi Z I, Egawa T, Jimbo T, Umeno M 2000 *Jpn. J. Appl. Phys.* **39** 3860
- [28] Groenert M E, Pitera A J, Ram R J, Fitzgerald E A 2003 *J. Vac. Sci. Technol. B* **21** 1064
- [29] Liu A Y, Herrick R W, Ueda O, Petroff P M, Gossard A C, Bowers J E 2015 *IEEE J. Quantum Electron.* **21** 1900708
- [30] Jalali B, Fathpour S 2006 *J. Lightwave Techn.* **24** 4600
- [31] Rong H, Jones R, Liu A, Cohen O, Hak D, Fang A, Paniccia M 2005 *Nature* **433** 725
- [32] Chen X, Li C, Tsang H K 2011 *NPG Asia Materials* **3** 34
- [33] Park H, Fang A W, Kodama S, Bowers J E 2005 *Opt. Express* **13** 9460
- [34] Tanabe K, Watanabe K, Arakawa Y 2012 *Sci. Rep.* **2** 349
- [35] Liang D, Bowers J E 2010 *Nat. Photon.* **4** 511
- [36] Wang W 1984 *Appl. Phys. Lett.* **44** 1149
- [37] Fletcher R M, Wagner D K, Ballantyne J M 1984 *Appl. Phys. Lett.* **44** 967
- [38] Deppe D, Holonyak J N, Nam D, Hsieh K, Jackson G, Matyi R, Shichijo H, Epler J, Chung H 1987 *Appl. Phys. Lett.* **51** 637
- [39] Deppe D, Nam D, Holonyak J N, Hsieh K, Matyi R, Shichijo H, Epler J, Chung H 1987 *Appl. Phys. Lett.* **51** 1271
- [40] Kaliski R, Holonyak J N, Hsieh K, Nam D, Lee J, Shichijo H, Burnham R, Epler J, Chung H 1987 *Appl. Phys. Lett.* **50** 836
- [41] Hall D, Deppe D, Holonyak J N, Matyi R, Shichijo H, Epler J 1988 *J. Appl. Phys.* **64** 2854
- [42] Linder K, Phillips J, Qasaimeh O, Liu X, Krishna S, Bhattacharya P, Jiang J 1999 *Appl. Phys. Lett.* **74** 1355
- [43] Kazi Z I, Egawa T, Umeno M, Jimbo T 2001 *J. Appl. Phys.* **90** 5463
- [44] Mi Z, Bhattacharya P, Yang J, Pipem K 2005 *Electron. Lett.* **41** 742
- [45] Mi Z, Yang J, Bhattacharya P, Huffaker D 2006 *Electron. Lett.* **42** 121
- [46] Yang J, Bhattacharya P, Mi Z 2007 *IEEE Trans. Electron Devices* **54** 2849
- [47] Yang J, Bhattacharya P, Wu Z 2007 *IEEE Photon. Technol. Lett.* **19** 747
- [48] Yang J, Bhattacharya P 2008 *Opt. Express* **16** 5136
- [49] Li L, Guimard D, Rajesh M, Arakawa Y 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 3105
- [50] Tanabe K, Watanabe K, Arakawa Y 2012 *Sci. Rep.* **2** 349
- [51] Liu A Y, Zhang C, Norman J, Snyder A, Lubyshev D, Fastenau J M, Liu A W, Gossard A C, Bowers J E 2014 *Appl. Phys. Lett.* **104** 041104
- [52] Liu A Y, Zhang C, Snyder A, Lubyshev D, Fastenau J M, Liu A W, Gossard A C, Bowers J E 2014 *J. Vac. Sci. Technol. B* **32** 02C108

SPECIAL ISSUE—Physics and devices of silicon photonics

Quantum dot lasers on silicon substrate for silicon photonic integration and their prospect

Wang Ting^{1)†} Zhang Jian-Jun¹⁾ Huiyun Liu²⁾

1) (*Institute of Physics, Chinese Academy Sciences, Beijing 100190, China*)

2) (*Department of Electrical and Electronic Engineering, University College London, Torrington Place, London, UK*)

(Received 7 September 2015; revised manuscript received 25 September 2015)

Abstract

In this article, the recent progress of III-V quantum dot lasers on silicon substrates for silicon photonic integration is reviewed. By introducing various epitaxial techniques, room-temperature 1.3- μm InAs/GaAs quantum dot laser on Si, Ge and SiGe substrates have been achieved respectively. Quantum dot lasers on Ge substrate has an ultra-low threshold current density of 55.2 A/cm² at room temperature, which can operate over 60 °C in continuous-wave mode. Futhermore, by using the SiGe virtual substrate, at 30 °C and an output power of 16.6 mW, a laser lifetime of 4600 h has been reached, which indicates a bright future for the large-scale photonic integration.

Keywords: semiconductor laser, laser material, photonic integration, optoelectronic device

PACS: 42.55.Px, 42.70.Hj, 42.82.-m, 85.70.-q

DOI: 10.7498/aps.64.204209

† Corresponding author. E-mail: wangting@iphy.ac.cn

Si 基 IV 族异质结构发光器件的研究进展

何超 张旭 刘智 成步文

Recent progress in Ge and GeSn light emission on Si

He Chao Zhang Xu Liu Zhi Cheng Bu-Wen

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 206102 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.206102

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.206102>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I20>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

硅基槽式微环谐振腔型偏振解复用器全矢量分析

Full-vectorial analysis of a polarization demultiplexer using a microring resonator with silicon-based slot waveguides

物理学报.2015, 64(19): 194207 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.194207>

铒离子注入绝缘体上 Si 的射程分布研究

Investigation on range distribution of Er ions implanted in silicon-on-insulator

物理学报.2014, 63(17): 176101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.176101>

掺杂对多层 Ge/Si(001) 量子点光致发光的影响

Effect of doping on the photoluminescence of multilayer Ge quantum dots deposited on Si(001) substrate

物理学报.2013, 62(7): 076108 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.076108>

量子阱 Si/SiGe/Si_p 型场效应管阈值电压和沟道空穴面密度模型

Threshold-voltage and hole-sheet-density model of quantum well Si/SiGe/Si_p field effect transistor

物理学报.2012, 61(16): 166101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.166101>

氧化硅缓冲层对于退火形成锗量子点的作用研究

Investigation of Ge quantum dots formation on SiO₂ substratethrough annealing process

物理学报.2011, 60(7): 076103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.076103>

专题: 硅基光电子物理和器件

Si基IV族异质结构发光器件的研究进展*

何超 张旭 刘智 成步文†

(中国科学院半导体研究所, 集成光电子学国家重点实验室, 北京 100083)

(2015年8月19日收到; 2015年9月20日收到修改稿)

Si基光互连具有高速度、高带宽、低功耗、可集成等特点, 有望解决集成电路的集成度在日益提高时电互连带来的问题. 在Si基光互连的关键器件中, 除了Si基光源尚未得到解决, 其他器件都已经实现, 因此Si基可集成高效光源具有十分重要的研究意义. 同为IV族元素的Ge和GeSn因其与Si的可集成性及其独特的能带结构有望成为Si基光电集成回路中的光源. 虽然Ge是间接带隙材料, 但通过引入张应变、n型重掺杂, 或者引入Sn形成GeSn合金等能带工程手段来提高发光效率. 近年来, Si基IV族发光材料和发光器件有许多重要进展, 本文就Si基Ge, GeSn材料发光研究中的几个关键技术节点——应变工程、掺杂技术、理论模型和器件研究——回顾了近几年国际和国内的研究进展, 并展望了Si基IV族激光器的发展趋势.

关键词: Si基, Ge, GeSn, 发光器件**PACS:** 61.72.uf, 42.82.-m, 61.82.Fk, 42.55.Px**DOI:** 10.7498/aps.64.206102

1 引言

1958年, 第一块半导体集成电路的发明为现代信息技术奠定了基础, 其影响力渗透到国民经济和社会的各个领域, 给人类社会带来了前所未有的发展. Si基半导体是现代微电子产业的基石, Si的互补金属氧化物半导体(complementary metal oxide semiconductor, CMOS)工艺技术已经形成一个强大的微电子产业. 随着技术的进步, Si基集成电路集成度越来越高, 性能越来越好. Moore定律指出, 在相同价格下, 集成电路单位面积上的晶体管数量每隔18—24个月增加一倍, 半导体工艺的特征尺寸每18—24个月缩小30%^[1]. 但随着集成度的不断提高, 器件特征尺寸的减小, 一系列问题也随之产生, 例如散热问题严重、电互连的功耗大、RC延迟导致电互连速度受限、小尺寸下的量子限制效应等, 都限制着集成电路的进一步发展^[2]. 以实现Si基光电集成(optoelectronic integrated circuit, OEIC)为目标的Si基光子学(silicon photonics)有

望解决这一难题^[3].

遗憾的是Si本身不具备良好的光学特性, 在光电转换、电光调制、电光转换等方面有自身固有的缺陷, 比如载流子迁移率低、具有高度对称性结构、线性电光系数为零、间接带隙材料、发光效率低. 但是, 十几年来, 经过科学家们的共同努力, Si基光子学已经取得了很大进展, 各种Si基光子学材料的制备和器件的制作都取得了可喜的突破. 目前除了Si基光源外, 人们在Si基光电探测器、电光调制器、波分复用/解复用器领域都有成熟的应用. 因而高效的Si基光源, 特别是Si基激光器, 成为Si基OEIC中最具挑战、也是最重要的目标.

目前, 人们对于Si基光源并没有一个成熟的解决方案. 最初研究人员希望采用Si材料本身做发光源, 通过材料改性、能带工程等方法抑制非辐射复合, 提高辐射复合概率. 比如Si位错环发光^[4]、Si拉曼激光器^[5,6]、掺杂稀土离子等方法^[7]. 但是这些方法或是工艺复杂, 重复性稳定性较差, 或是光抽运运作, 对Si基光互连的贡献较小, 还需要进一步地创新. 此外, 研究人员还希望将发光性能

* 国家重点基础研究发展计划(批准号: 2013CB632103)和国家自然科学基金(批准号: 61176013, 61036003)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: cbw@semi.ac.cn

良好的 III-V 族材料集成在 Si 上, 实现 Si 基高效发光. 近年来随着 III-V 族激光器与 Si 之间的键合技术以及在 Si 衬底上外延 III-V 族材料等技术的快速发展, Si 基键合激光器和 Si 衬底上外延的 III-V 族混合激光器也相继获得成功^[8-10]. 虽然 III-V 族的工艺与 Si CMOS 的工艺兼容性方面存在一定的困难, 但这类激光器对于 Si 基光互连也是一个重要的研究方向.

与此同时, 随着外延技术的突破, 高质量 Si 基 Ge 和 GeSn 材料的成功实现, 为研究人员提供了新思路和新材料来实现 CMOS 兼容的 Si 基高效发光. Ge 是一种准直接带隙材料, 直接带隙只比间接带隙高 136 meV, Ge 的直接带发光波长 (1550 nm) 位于 *C* 带, 这些特点使得 Ge 成为 Si 基 IV 族光源中十分理想的材料. 虽然 Ge 是间接带隙材料, 直接带发光比较弱, 但是理论和实验表明, 通过能带工程, 可以有效改善 Ge 的能带结构, 增强 Ge 的发光性能, 使高效的 Si 基 Ge 直接带隙发光器件成为可能. Sn 与 Si, Ge 同是 IV 族元素, 也兼容 Si 的 CMOS 工艺. α -Sn 是金刚石结构, 其导带底在价带顶之下, 带隙为零, 是一种“半金属”. Ge 中引入 Sn 会使其带隙收缩, 并且 Γ 能谷收缩快于 *L* 能谷, 当 Γ 能谷位于 *L* 能谷之下时, GeSn 合金就会成为一种直接带隙的半导体材料. 因此, GeSn 合金是 IV 材料中很有潜力实现 Si 基激光器的材料.

本文回顾了近几年国际和国内在 Ge 和 GeSn 发光方面的研究进展, 结合本研究组的研究成果, 就 Ge, GeSn 材料发光研究中的一些关键技术节点做了回顾, 并展望了 Si 基 IV 族激光器的发展趋势.

2 Si 基 Ge 材料的发光研究

Ge 是间接带隙材料, 间接带载流子的辐射复合跃迁需要声子的参与, 因此其量子效率比直接带隙材料小 4—5 个数量级; 而且 Ge 的直接带比间接带高 136 meV, 直接带电子数只占总电子数的约 0.01%, 因此 Ge 的发光效率很低.

在 Ge 材料发光的理论研究方面, 早在 2007 年, 麻省理工学院 (MIT) 的 Liu 等^[11] 通过形变势理论计算, 提出了一种提高 Ge 发光的方法: 首先通过引入张应变减小直接带-间接带之间的带阶, 然后通过 n 型重掺杂填充能带以补偿剩余带阶. 在张应变下, Ge 的 *L* 能谷和 Γ 能谷带隙均变小, 而 Γ 能谷带隙对应变更为敏感, 使得 Γ -*L* 带阶减小, 增加直

接带电子的占有概率; 当张应变达到一定程度时, Γ 能谷成为导带带底, Ge 转变为直接带隙材料. 同时, 辅以 n 型重掺杂, 可以增加直接带的电子浓度, 有效增加发光效率. 他们的计算结果显示, 0.25% 的张应变、 $7.6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 的 n 型掺杂的 Ge, 计及自由载流子吸收 (free carrier absorption, FCA), 可以获得最大达到 400 cm^{-1} 的净光增益. 因此, 目前对于增强 Ge 材料发光性能的方法主要就是张应变和 n 型掺杂两个手段, 实验中研究人员也多是通过各种手段来提高张应变和掺杂浓度以达到增强发光的效果.

2.1 应变技术

大量的理论计算表明, 张应变可以对 Ge 进行能带调控, 是提高其发光效率最有效的方法. Dutt 等^[12] 使用了一种基于 $\text{sp}^3\text{d}^5\text{s}^*$ 紧束缚方法的模型计算了 Ge 的电学特性, 提出使 Ge 变成直接带隙的临界张应变为 2.5%, 适当的应变可以大大减小阈值电流. El Kurdi 等^[13] 使用了 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰理论计算了 Ge 的电学特性, 提出使 Ge 变成直接带的临界张应变为 1.9%, 并表明 3% 的张应变、 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 的 Ge 可以获得大于 3000 cm^{-1} 的光增益. 这些关于 Ge 电学性质的计算主要是基于半经验式的方法, 需要很多实验参数和经验公式, 不同参数和公式的选择会导致不同的计算结果. 因此, 许多研究小组希望通过不需要任何经验参数的第一性原理来研究 Ge 的电学特性^[14,15], 从而提高计算的准确性. 北京邮电大学的 Yang 等^[16] 提出不同晶面内的双轴张应变对 Ge 有不同的效果, (001) 面内的双轴张应变容易实现, 并且更容易使 Ge 变成直接带隙材料, 临界张应变为 2.3%. 上海大学的 Liu 等^[17] 在考虑张应变使 *L* 带简并分裂的情况下, 计算得出临界张应变为 2.91%. 虽然第一性原理计算没有借用任何经验参数, 但是交换关联势的选择会明显影响计算结果, 相比半经验式的计算方法, 其计算结果偏大. 由于实验中难以获得如此高的张应变的 Ge 材料, Ge 临界张应变缺少实验数据的支持, 因此难以判断不同计算方法的准确程度. 虽然计算结果不尽相同, 但是不同的计算方法为我们提供了不同的研究视角和方向, 对 Ge 的高效发光具有积极的指导意义.

实验上, 关于 Ge 应变的引入方式近年来取得了很多进展. 2004 年, MIT 的 Liu 等^[18] 系统地研究了在 Si 衬底上不同温度外延的 Ge 薄膜中的热张

应变. 他们发现 Ge 薄膜中的热张应变随着 Ge 外延温度的升高而增加, 800 °C 外延的 Ge 薄膜的张应变为 0.2%. 为了进一步增加热张应变, 他们在 Si 衬底的背面沉积了一层比 Ge 热胀系数更大的 Si 化物 (C54-TiSi₂), 通过这种方法, 将张应变提高到了 0.25%. 2013 年, 我们研究小组^[19]通过对较低温度生长 (600 °C) 的 Ge 薄膜进行 900 °C 短时间的快速退火, 将 Ge 薄膜的应变提高到 0.21%. 利用材料热膨胀系数差这种方法给 Ge 施加张应变简单易行, 并且材料厚度不受外延中临界厚度条件的制约, 但引入的张应变很小, 远远达不到理论上的临界值, 对 Ge 材料的发光效率的提高也有限.

除了利用 Ge 和 Si 的热张应变之差来给 Ge 引入张应变, 在大晶格的材料上进行 Ge 异质外延也是一个常用的方法. 2007 年, 亚利桑那州立大学的 Fang 等^[20]通过化学气相沉积 (CVD) 方法在 GeSn 合金上外延了高质量的 Ge 薄膜, 大幅度地提高了 Ge 中的张应变. 当 Sn 的组分为 13% 时, Ge 中的张应变达到 2%. 而 Stanford 大学的 Huo 等^[21]则在 GaAs 衬底上外延弛豫 InGaAs, 然后再沉积 Ge 薄膜, 并研究了 Ge 的光致发光谱 (PL). 通过改变 In 的组分, 可以调控应变的大小. 当 In 的组分达到 40% 时, Ge 中的张应变竟达 2.33%! 如此大的应变下, Ge 的 PL 发光强度比无应变的 Ge 强 100 倍以

上. 但发光波长为 1670 nm, 和理论值相差很大. 对此, 他们解释形变势理论只适用于小应变情形. 通过异质外延得到的张应变 Ge 材料, 厚度和晶格质量与应力直接相关. 应力越大, 材料的临界厚度越薄, 超过临界厚度, 应变会弛豫, 产生的位错对发光十分不利. 而且要获得高质量的张应变 Ge 薄膜, 对其衬底的晶体质量要求也很高, 这些都限制了它的应用. 另外, 这种异质外延的方法也违背了 Si 基光子学单片集成的初衷, 更多只存在研究上的价值.

通过微机械的方法, 比如在 Ge-on-Si 上沉积一层 SiN_x 等材料作为应力源是一种简便并且和 Si CMOS 工艺完全兼容的方法. 2009 年, 东京大学的 Lim 等^[22]通过在形变衬底上外延的方式在 Ge 中引入了 1.5% 的双轴机械张应变, 并研究证实了双轴张应变可以减小 Ge 直接带隙宽度, 进一步增强直接带隙光发射概率和光增益, 理论计算表明 Ge 在 2% 的双轴张应变下可以达到 1077 cm⁻¹ 的光增益. 2011 年, 美国 Wisconsin 大学的 Sanchez-Perez 等^[23]将 Ge 薄膜转移到柔性聚酰亚胺 (PI) 衬底上并通以高压气体, 获得高达 2% 的双轴张应变, 如图 1(c) 所示. 其发光波长在 1950 nm 左右, 和理论符合得很好. 2012 年, Stanford 大学的 Jain 等^[24]在

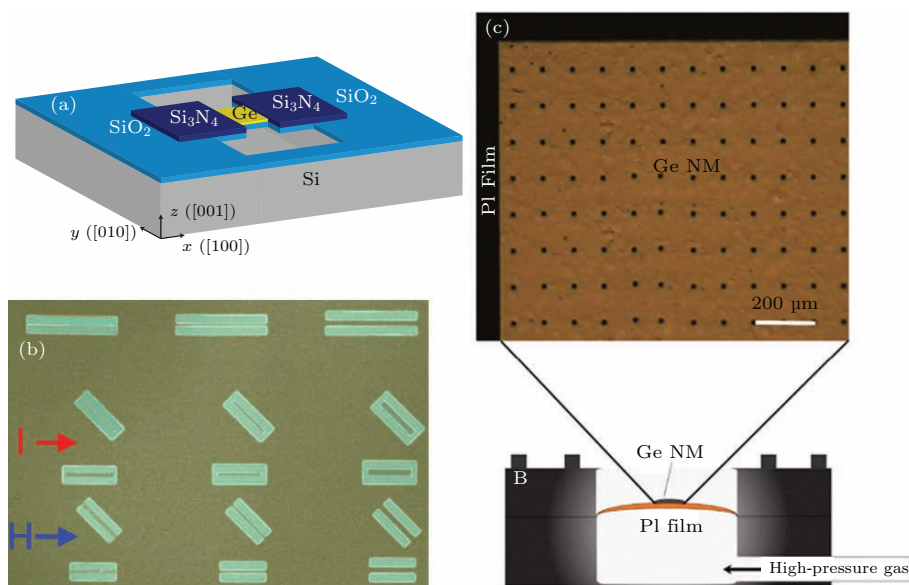


图 1 几种给 Ge 薄膜施加张应变的方法 (a) 将 GOI 下层 Si 腐蚀掉形成空气桥, 并在 Ge 条两侧沉积张应变的 Si₃N₄ 以对其形成拉伸效果; (b) 在 Ge 薄膜上层沉积压应变的 Si₃N₄, 刻蚀出 “I” 或 “H” 形的结构后压应变的 SiN 应变弛豫向四周拉伸; (c) 将 Ge 薄膜转移到柔性 PI 薄膜上并通以高压气体

Fig. 1. Several methods applied tensile strain to Ge: (a) Large tensile-strain Si₃N₄ film was deposited besides patterned GOI and the underlying silicon substrate was selectively removed; (b) large compressive-strain SiN film was deposited on Ge and then patterned into “I” and “H” structure; (c) Ge nanomembranes was transferred and bonded on a flexible film and then mechanically stretched by high-pressure gas.

图形化的GOI上淀积1 μm 的张应变的 Si_3N_4 ,然后将Ge下面的Si腐蚀掉形成悬梁结构,张应变的 Si_3N_4 弛豫收缩后对相邻的Ge造成拉伸,从而在Ge中引入0.82%的双轴应变,如图1(a)所示.与无应变的Ge相比,其PL强度在1550 nm波段提高了130倍,积分强度增加了260倍.2014年,罗马第三大学的Capellini等^[25]在Ge-on-SOI上淀积压应变的 Si_3N_4 ,然后刻蚀成长条状,压应变的 Si_3N_4 应变弛豫向四周拉伸,从而在下层的Ge中引入最大达0.7%的张应变,如图1(b)所示.同时这种条形结构还可以作为Ge的Fabry-Perot (FP) 谐振腔,为Ge激光器的设计和制作提供了便利.虽然微机械法可以获得高质量和高张应变的Ge薄膜,但是其获得的张应变是局域应变,承受应变的面积小,工艺也相对比较复杂,有些方法也难以与目前Si的工艺完全兼容.尽管如此,相比于热张应变Ge和异质外延的张应变Ge,微机械法更具有灵活性和创造性,随着微纳加工技术的不断进步,新结构的不断提出,应变水平仍然具有较大的提高空间,这将会是获得高的张应变材料的重要方法之一.

2.2 n型掺杂

除了张应变,n型掺杂是提高Ge发光的另一种有效方法.通过能带填充原理,n型掺杂提高了Ge中电子的准费米能级,从而更多的电子可以占据更高能级的直接带(Γ 能谷),增强Ge的自发辐射复合速率和光增益.

2009年,MIT的Sun等^[26]研究了不同n型掺杂浓度的Ge薄膜的光致发光.他们观察到了随着n型掺杂浓度的增加,Ge薄膜的直接带隙发光越来越强,如图2(a)所示.并且发光随着温度的增加而增强,这与III-V族材料完全相反.产生这种现象的主要原因是由于Ge直接带隙的发光强度与直接带的电子浓度有着直接关系,通过n型掺杂和热激发都可以提高Ge直接带隙的电子浓度,从而增强Ge的发光.同年,巴黎大学的El Kurdi等^[27]研究了不同掺杂浓度的Ge和GeOI的发光情况,在掺杂浓度为 $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 时,发光强度增强了20倍,如图2(b)所示.

Dutt等^[12]通过研究进一步提出掺杂浓度并不是越高越好,对于一定的应变,存在一个最优的掺杂浓度值.例如,对于应变为0.5%且无损的谐振腔,掺杂浓度从 10^{19} cm^{-3} 提高到 10^{20} cm^{-3} 时,阈

值电流密度从 130 kA/cm^2 减小到 8 kA/cm^2 ,但是当掺杂浓度增加到 $2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 时,阈值电流密度则为 15 kA/cm^2 .从图3(a)可以看到,相比于张应变,掺杂对阈值电流的影响小很多.图3(b)则显示,阈值电流密度随掺杂浓度的提高,开始时减小,但是达到一个最优值后迅速提高.当掺杂浓度达到较高水平时,Ge内部光以及载流子的损耗将会变得非常严重,大大抵消了掺杂对发光的增强效果.其一就是自由载流子吸收(FCA)^[28-31].Liu等^[11]总结前人的工作,提出在 10^{19} — 10^{20} cm^{-3} 范围内,自由载流子吸收系数和电子、空穴的浓度成正比.Carroll等^[32]则在FCA之外提出了一种新的损耗机理,即空穴价带内跃迁(HH-SO),这种吸收机理在高抽运情况下是损耗的主要组成部分(pump-induced absorption, PIA).他们提出,只考虑FCA,会严重高估Ge的净光增益;在注入载流子浓度约 10^{20} cm^{-3} 的情况下,PIA比光增益大了一个量级,因此,不可能在Ge中观察到净光增益.

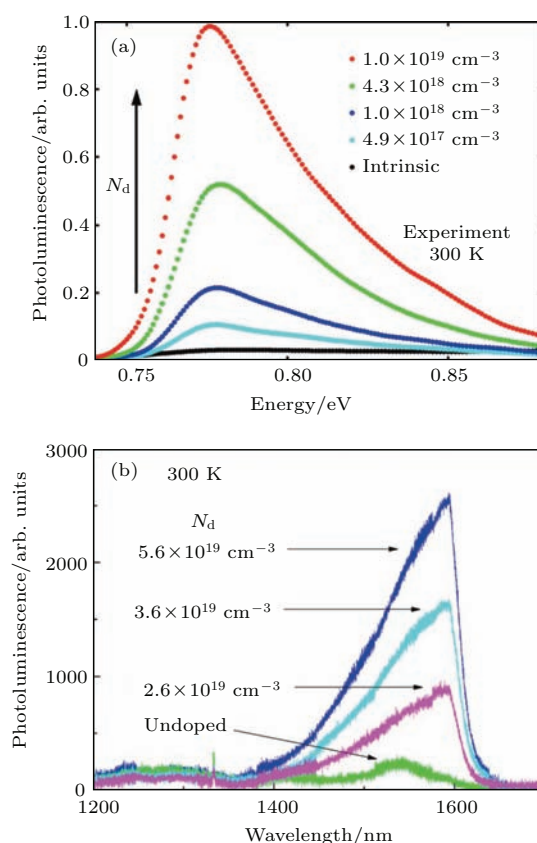


图2 不同掺杂浓度Ge的PL谱,(a)来自于文献^[26],(b)文献^[27]

Fig. 2. Room temperature PL spectra measured from (a) tensile-strained Ge-on-Si^[26] and (b) bulk Ge^[27] with various n-type doping concentrations.

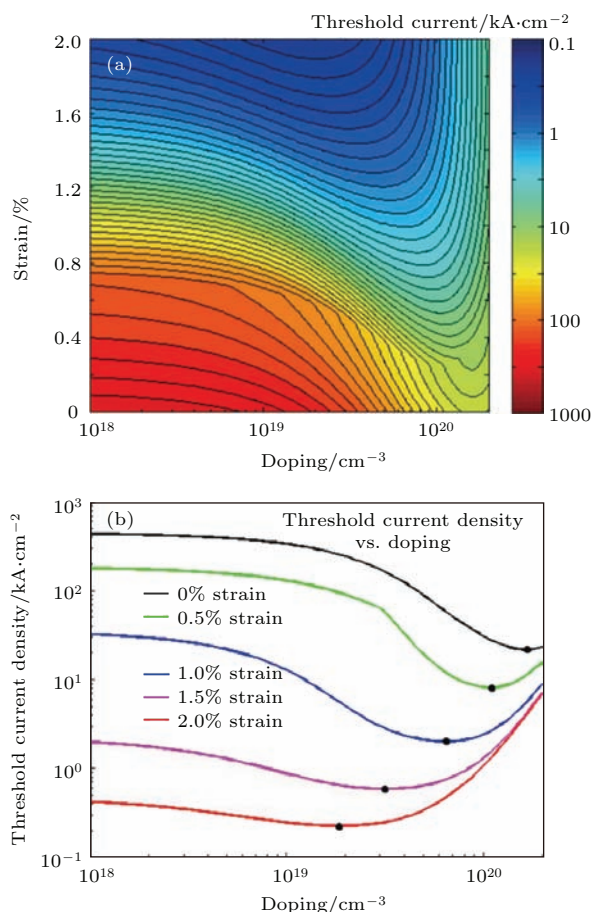


图3 (a) 不考虑谐振腔的损耗时, 阈值电流密度和应变、掺杂浓度的关系; (b) 阈值电流密度和掺杂浓度的关系, 可以明显看出掺杂浓度存在最优值情况

Fig. 3. (a) Threshold current as a function of biaxial tensile strain and n-type doping, assuming a lossless (optical cavity loss=0) cavity lasing at the wavelength of peak net gain; (b) threshold current versus doping for various strain values, showing that an optimal doping value (black dot) always exists.

关于Ge这两种与掺杂相关的损耗机理FCA和PIA, 目前存在较大争议. 如果不考虑PIA, 所有的计算结果都表明Ge可以获得较大的净光增益; 但实验上却难以观察到激射现象, 目前只有MIT和斯图加特大学的研究组观察到Ge的激射现象, 但争议颇多, 因此大家对其理论提出一些质疑. 其中, Carroll提出PIA理论并对MIT观察到的光抽运Ge激射现象提出质疑, 但其实他们的解释也存在争议. Dutt就认为FCA和PIA是同一种机理: 载流子的带内吸收 (intraband absorption). Liu对Newman的工作进行局部拟合, 提出了FCA公式; 而Carroll提出PIA机理并宣称他们的结果和Newman的结果非常契合, 并且二者一些差异可以从其他的方面得到解释. 但总而言之, 目前两个理论尚不能说孰对孰错, 只有通过更多的实验研究

才能对理论进行进一步的检验.

另一方面, 实验上对Ge进行高浓度的掺杂是很困难的. 常用掺杂剂(P, As, Sb)在Ge中的固溶度较低, 限制了掺杂浓度的提高, 目前的报道中, 原位掺杂的浓度在 10^{19} cm^{-3} 左右^[33], CVD原位掺杂P理论上能获得最高掺杂浓度是 $2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 左右^[34]. 因此采用常规的原位掺杂方式得到的载流子浓度还远达不到增强发光的要求. MIT的研究人员采用多层 δ 掺杂技术并进行快速退火^[35], 将掺杂浓度提高到 $4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Arizona大学采用气源分子束外延 (gas-source molecular epitaxy, GSME), 用 $\text{P}(\text{GeH}_3)_3$ 或 $\text{P}(\text{SiH}_3)_3$ 作为掺杂剂, 丙烷或丁烷作为反应气体, 获得了掺杂浓度 $> 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 的n-Ge^[36].

2.3 Ge发光器件的研制

在Si基Ge发光器件的研究方面, 国内外也有许多进展. 2009年, 我们研究小组与Stanford, MIT的研究小组独立研制出Ge发光二极管^[37–39]. Stanford研究小组通过反应等离子体化学气相沉积 (RPCVD) 法制备了 $\text{n}^+\text{-Ge/p-Ge}$ 同质结, 原位掺杂浓度为 $7.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. 我们课题组通过超高真空化学气相沉积方法制备了 $\text{p}^+\text{-Ge/i-Ge/n}^+\text{-Si}$ 结构, Ge的应变变为0.13%, 当正向偏置大于1.1 V时, 在室温下观测到峰值波长在1572 nm附近的电流注入发光, 发光强度与注入电流成正比. MIT的研究小组使用的 $\text{p}^+\text{-Si/i-Ge/n}^+\text{-poly Si}$ 结构, 通过Si-Ge热失配, 在Ge中引入了0.25%的应变, 不过Ge未进行掺杂. 观测到了室温电注入发光, 峰值波长为1600 nm; 小注入时, 发光强度与注入电流0.94次方成正比; 大注入时, 发光强度与注入电流1.48次方成正比. 该研究结果也表明在一定温度范围内, 发光强度随着温度升高而增大, 这和Ge的能带结构、发光机理相符合.

2010年, MIT的Liu等^[40]制备出了第一个Ge-on-Si室温光泵脉冲激光器. 他们在Si衬底上选区外延Ge薄膜, 应变变为0.24%, n型掺杂浓度为 $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. 脉冲周期为1.5 ns的1064 nm抽运光通过透镜聚焦到Ge波导上, 波导两侧都经过抛光处理, 不过波导并没有经过优化, 不是单模工作. 在脉冲功率为50 μJ 的抽运下, 观测到了1599, 1606和1612 nm的激射光, 并观察到FP腔引起的周期振荡, 如图4(a)所示. 这一鼓舞人心的结果表明应变Ge薄膜是极具前景的Si基片上集成

光源材料. 2012年, 该研究组又成功实现了Si基Ge电注入脉冲激光器^[41]. Ge波导同样是通过在Si上选区外延, 使用 δ 掺杂的方法将掺杂浓度提高到了 $4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. 然后对Ge波导结构进行了化学机械抛光, 除去 δ 掺杂的掺杂提供层和选择外延引起的Ge波导表面的不同晶向. 最后在Ge波导上沉积p++的多晶Si. 脉冲电源的脉冲宽度为 $20 \mu\text{s}$ — 100 ms , 占空比为4%. 为了防止器件在大电流注入下过热, 需要外加温控系统将器件温度控制在 15°C . 当注入电流密度大于 280 kA/cm^2 时,

观察到了Ge波导的激射现象, 如图4(b)所示, 并且激射波长随Ge波导厚度的不同而变化. 该Ge激光器的最大光功率在 1 mW 左右. 2015年, 德国Stuttgart大学的研究人员研制出Si基Ge室温电注入连续波长边发射激光器^[42]. 值得注意的是该激光器中的Ge并无任何张应变, 掺杂浓度为 $3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, 采用Si/Ge/Si双异质结结构. 当注入电流大于阈值电流密度 510 kA/cm^2 时, 能够观察到 1682 nm 处线宽为 1.1 nm 的极窄的光谱, 带隙的红移主要是高掺杂引起的, 如图4(c)所示.

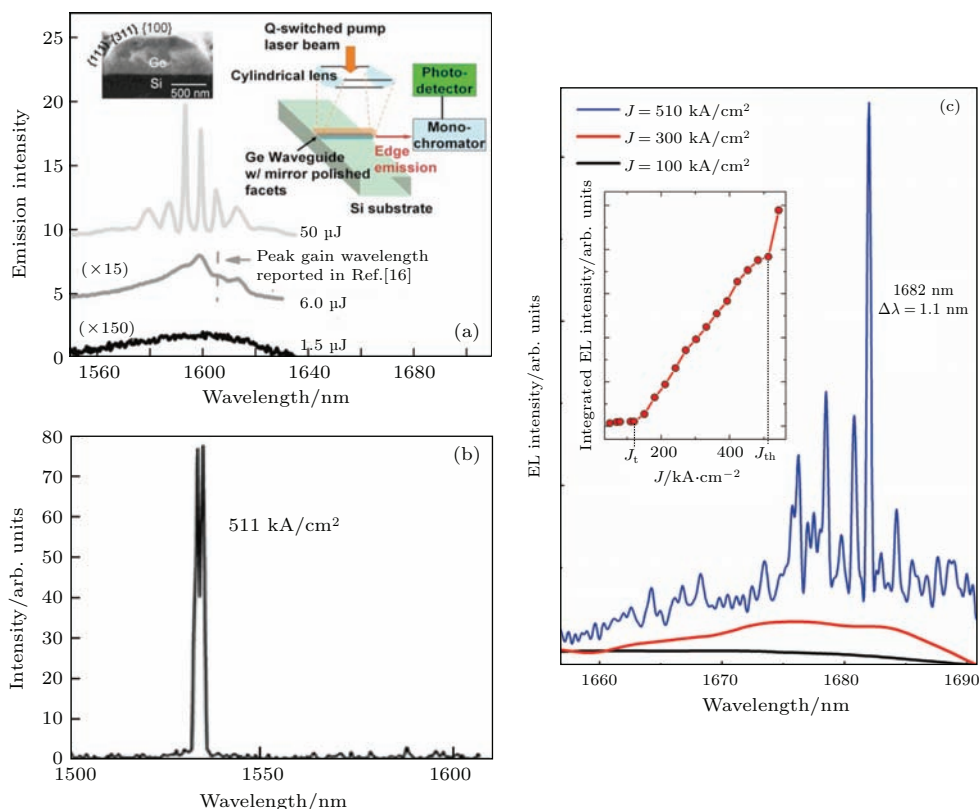


图4 目前为止的三个Ge激光器, 图(a), (b), (c)分别来自文献^[40—42]

Fig. 4. The only three Ge lasers so far from paper ^[40–42].

这一系列的研究成果对Si基Ge发光做出了重要突破, 令人鼓舞. 但是Ge间接带隙的本质限制了其内量子效率, 导致其阈值电流非常大, 比如文献^[42]中阈值电流密度高达 510 kA/cm^2 . 目前的结果离实用化尚有一段距离, 而且很多结果尚存争议. Boucaud认为所谓的Ge激射的PI曲线可以从Planck黑体辐射理论推导出^[43], 在高抽运时, 器件的核心温度达到几百度, 比如抽运光为 15 mW 时器件温度能达到 525°C , 这个温度范围内器件的热辐射甚至完全超过Ge辐射复合发出的光. 实验上分辨热辐射和载流子辐射是极其困难的, 因此更多

的数据需要提供, 比如载流子寿命, 光谱的线宽是否减小等受激辐射特征.

3 Si基锗锡材料的发光研究

锗锡(GeSn)合金材料是近年来出现的新材料, 相对于其他IV族材料其最大的优点在于能带结构可以通过Sn组分得以调控, 理论和实验研究均表明通过引入一定量的Sn组分^[44–46], 材料可由间接带隙转变为直接带隙材料, 有利于发光的实现.

2010年, 亚利桑那大学Mathews等^[47]利用

CVD方法直接在Si衬底上生长得到GeSn合金,并在室温下观察到了可能的直接带PL谱,Sn含量由0变化到3%,发光峰峰位移动了约90 meV. 2011年,他们又报道了GeSn合金进行P重掺后的室温下光致发光测试结果^[48]. 测试表明,相比于未掺杂的GeSn合金,重掺后其发光强度提高了一个量级,这与Ge材料掺杂后发光增强的理论预测相符合. 同时,直接跃迁与非直接跃迁的发光强度比随着Sn含量的提高而增大,进一步说明Sn的引入能够减小 Γ 能谷和 L 能谷间的差距. 随后,他们还制作出了Si/Ge_{1-x}Sn_x PIN异质结光电二极管^[49],并测试了其电致发光光谱和光致发光光谱. 电致发光光谱峰值随注入电流密度的变化表现为超线性,与理论计算值大致符合.

2011年,斯坦福大学Chen等^[50]报道了In-GaAs衬底上无应力不同Sn含量的Ge_{1-x}Sn_x合金的PL谱. Ge_{1-x}Sn_x合金的发光强度随着Sn含量的增加而增强,并且直接带的发光(从 Γ 谷到价

带顶的跃迁发光)不断增强,而间接带发光(从 L 谷到价带顶的跃迁发光)逐渐减弱,直至消失. Sn含量为8.6%的GeSn合金的发光强度比Ge的发光强度提高了约30倍. 分析表明, x 约大于7.1%时,Ge_{1-x}Sn_x合金就可以成为直接带隙,从而能够实现高效发光.

2011年,Kasper等^[51]在有Ge缓冲层的Si衬底上制作出了Sn含量为1.1%的GeSn PIN(p⁺-Ge/i-GeSn/n⁺-Ge)光电二极管,并与类似结构和工艺的Ge PIN光电二极管进行了细致的比较. 器件的电致发光测试结果表明,室温下,GeSn-LED的发光峰值在1590 nm处,相较于Ge-LED的发光峰值,向长波方向偏移了40 nm. 2014年,他们又在Si衬底上制作出了Sn组分为2%和4.2%的GeSn异质结LED^[52],均在室温下观察到了直接带光致发光,同时还发现,发光强度随着Sn组分的增高而增强.

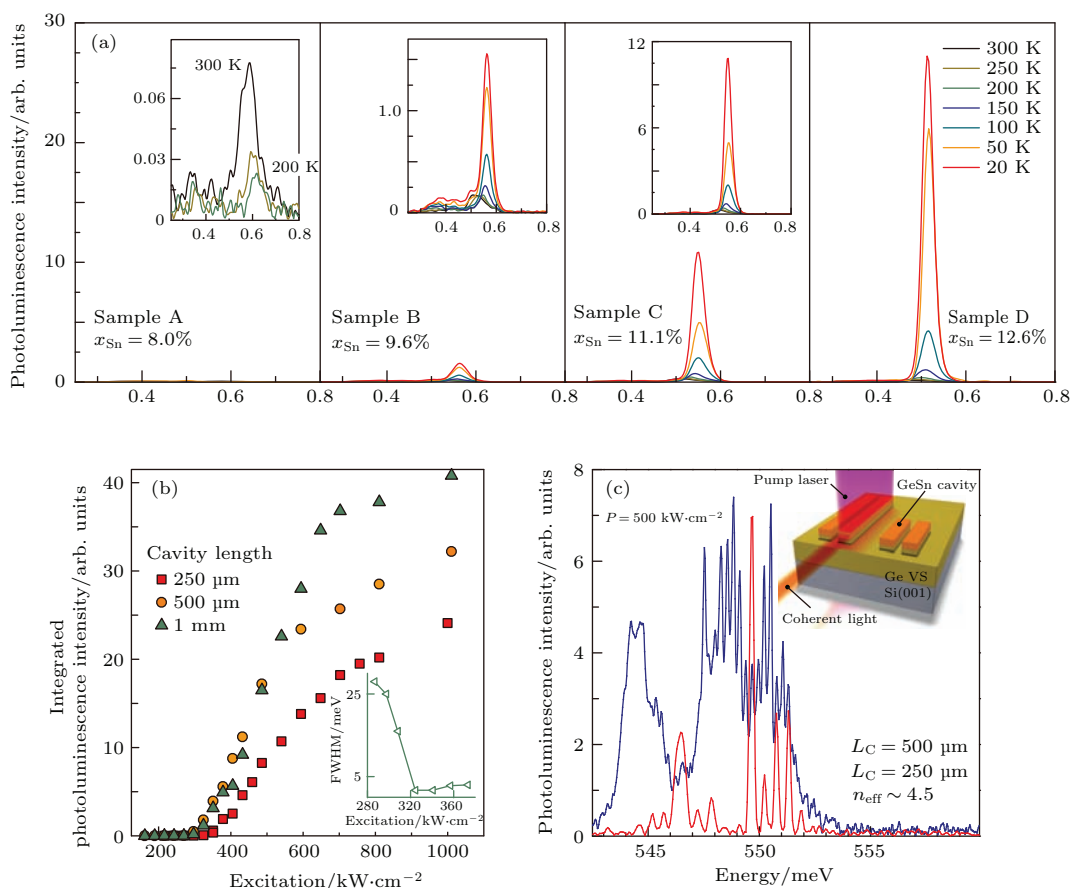


图5 (a) 不同组分GeSn样品不同温度下的PL谱; (b) 不同腔长样品PL积分强度随抽运光功率密度的变化和阈值光功率密度附近PL峰FWHM的变化; (c) 500 kW/cm²的抽运功率密度下的高分辨PL谱

Fig. 5. (a) Temperature-dependent photoluminescence spectra for samples with different Sn contents; (b) integrated photoluminescence intensity as a function of optical excitation and the FWHM around the lasing threshold; (c) high-resolution spectra of 250- and 500- μ m-long waveguides taken at 500 kW/cm².

2015年,来自欧洲的Wirths等^[53]在《Nature Photonics》上报了令人振奋的结果: Si衬底上直接带GeSn合金实现激射. 他们使用RPCVD在有Ge缓冲层的Si衬底上生长了组分在8%—12.6%的部分应力弛豫GeSn合金样品, PL测试结果如图5(a)所示, 发光强度随着Sn组分的增加和温度的降低而增强; 同时发光峰会随着Sn组分的增加而逐渐红移, 表明GeSn合金禁带宽度的减小. 利用改变条长(VSL)方法和F-P腔结构, 成功观察到了光抽运下的GeSn合金激射. 如图5(b)所示, 当光抽运功率超过约325 kW/cm²时, 发光强度明显增强, 发光峰FWHM出现显著降低. 当抽运功率达到1000 kW/cm²时, 90 K下也能观察到明显的激射现象. 此外, 在250和500 μm的波导结构中, 在500 kW/cm²的抽运功率密度下, 观察到了FP振荡(图5(c)), 更加有力地证明了GeSn合金激射的实现.

尽管GeSn合金的激射已经实现, 但若要成功研制出室温下Si基高效发光器件, 仍有很多难题需要解决. 首先, 目前只能使用脉冲光抽运来实现激射, 还需进一步寻找合适的电抽运方式; 其次, GeSn合金激射的临界温度是90 K, 距离期望实现的室温应用, 还有一定差距.

为实现高效的室温下Si基GeSn合金发光, 我们认为应着重考虑以下三方面: 1) 进一步优化GeSn合金生长方法及条件, 提高GeSn合金晶体质量, 减少因缺陷、位错等引起的非辐射复合; 2) 通过有效提高掺杂浓度来实现粒子数反转, 从而实现电抽运激射; 3) 量子阱结构可以有效地限制载流子, 提高材料的载流子注入和发光的效率, 设计合理的SiGeSn/GeSn/SiGeSn多量子阱结构, 以实现Si基高效发光.

4 总 结

Ge和GeSn因其与Si的可集成性及其独特的能带结构有望成为Si基光电集成回路中的光源. 本文就Si基Ge, GeSn材料发光研究中的几个关键技术节点——应变工程、掺杂技术、理论模型、器件研究——回顾了近几年国际和国内的研究进展. 可喜的是Ge激光器和GeSn激光器都已经被成功研制出来, 但是Ge激光器仍然存在很多争议, 需要更多的理论和实验研究去论证和检验. GeSn激光器则获得了业界的认可, 其后续的电抽运GeSn激光

器指日可待! 尽管如此, Ge和GeSn仍然存在一系列的问题尚待解决, 比如高质量的材料外延技术、高浓度的原位掺杂技术、应变的引入和弛豫技术、减小自由载流子吸收和Auger复合等非辐射复合损耗的技术等. 因此, 需要我们在理论计算、材料生长和器件结构设计等方面做更多的工作. 我们相信高效的Si基IV族激光器在众多研究人员的共同努力之下能够发出更耀眼的光芒!

参考文献

- [1] Moore G E 1998 *Proc. IEEE* **86** 82
- [2] Smit M, van der Tol J, Hill M 2012 *Laser Photon Rev.* **6** 1
- [3] Paniccia M 2010 *Nature Photon.* **4** 498
- [4] Ng W L, Lourenco M A, Gwilliam R M, Ledain S, Shao G, Homewood K P 2001 *Nature* **410** 192
- [5] Rong H, Liu A, Jones R, Cohen O, Hak D, Nicolaescu R, Fang A, Paniccia M 2005 *Nature* **433** 292
- [6] Rong H, Jones R, Liu A, Cohen O, Hak D, Fang A, Paniccia M 2005 *Nature* **433** 725
- [7] Fujii M, Yoshida M, Kanzawa Y, Hayashi S, Yamamoto K 1997 *Appl. Phys. Lett.* **71** 1198
- [8] Fang A W, Park H, Cohen O, Jones R, Paniccia M J, Bowers J E 2006 *Opt. Express* **14** 9203
- [9] Wang T, Liu H, Lee A, Pozzi F, Seeds A 2011 *Opt. Express* **19** 11381
- [10] Liu H, Wang T, Jiang Q, Hogg R, Tutu F, Pozzi F, Seeds A 2011 *Nat. Photon.* **5** 416
- [11] Liu J, Sun X, Pan D, Wang X, Kimerling L C, Koch T L, Michel J 2007 *Opt. Express* **15** 11272
- [12] Dutt B, Sukhdeo D S, Nam D, Vulovic B M, Ze Y, Saraswat K C 2012 *IEEE Photon. J.* **4** 2002
- [13] El Kurdi M, Fishman G, Sauvage S b, Boucaud P 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 013710
- [14] Tahini H, Chroneos A, Grimes R W, Schwingenschlög U 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 162103
- [15] Tahini H, Chroneos A, Grimes R W, Schwingenschlög U, Dimoulas A 2012 *J. Phys.: Condens. Matter* **24** 1614
- [16] Yang C H, Yu Z Y, Liu Y M, Lu P F, Gao T, Li M, Manzoor S 2013 *Physica B: Condens. Matter* **427** 62
- [17] Liu L, Zhang M, Hu L, Di Z 2014 *J. Appl. Phys.* **116** 113105
- [18] Liu J, Cannon D D, Wada K, Ishikawa Y, Danielson D T, Jongthammanurak S, Michel J, Kimerling L C 2004 *Phys. Rev. B* **70** 155309
- [19] Liu Z, Cheng B W, Li Y M, Li C B, Xue C L, Wang Q M 2013 *Chin. Phys. B* **22** 116804
- [20] Fang Y Y, Tolle J, Roucka R, Chizmeshya A V G, Kouvetakis J, D'Costa V R, Menéndez J 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 061915
- [21] Huo Y, Lin H, Chen R, Makarova M, Rong Y, Li M, Kamins T I, Vuckovic J, Harris J S 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 011111

- [22] Lim P H, Park S, Ishikawa Y, Wada K 2009 *Opt. Express* **17** 16358
- [23] Sanchez-Perez J R, Boztug C, Chen F, Sudradjat F F, Paskiewicz D M, Jacobson R B, Lagally M G, Paiella R 2011 *PNAS* **108** 18893
- [24] Jain J R, Hryciw A, Baer T M, Miller D A, Brongersma M L, Howe R T 2012 *Nature Photon.* **6** 398
- [25] Capellini G, Reich C, Guha S, Yamamoto Y, Lisker M, Virgilio M, Ghrib A, El Kurdi M, Boucaud P, Tillack B, Schroeder T 2014 *Opt. Express* **22** 399
- [26] Sun X, Liu J, Kimerling L C, Michel J 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 011911
- [27] El Kurdi M, Kociniwski T, Ngo T P, Boulmer J, Débarre D, Boucaud P, Damlencourt J F, Kermarrec O, Bensahel D 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 191107
- [28] Pankove J I, Aigrain P 1962 *Phys. Rev.* **126** 956
- [29] Haas C 1962 *Phys. Rev.* **125** 1965
- [30] Spitzer W G, Trumbore F A, Logan R A 1961 *J. Appl. Phys.* **32** 1822
- [31] Newman R, Tyler W W 1957 *Phys. Rev.* **105** 885
- [32] Carroll L, Friedli P, Neuenschwander S, Sigg H, Cecchi S, Isa F, Chrastina D, Isella G, Fedoryshyn Y, Faist J 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 057402
- [33] Sun X C, Liu J F, Kimerling L C, Michel J 2008 *Sige, Ge, and Related Compounds 3 : Materials, Processing, and Devices* **16** 881
- [34] Brotzmann S, Bracht H 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 033508
- [35] Camacho-Aguilera R E, Cai Y, Bessette J T, Kimerling L C, Michel J 2012 *Opt. Mat. Express* **2** 1462
- [36] Xu C, Senaratne C L, Kouvetakis J, Menéndez J 2014 *Appl. Phys. Lett.* **105** 232103
- [37] Hu W X, Cheng B W, Xue C L, Xue H Y, Su S J, Bai A Q, Luo L P, Yu Y D, Wang Q M 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 092102
- [38] Cheng S L, Lu J, Shambat G, Yu H Y, Saraswat K, Vuckovic J, Nishi Y 2009 *Opt. Express* **17** 10019
- [39] Sun X, Liu J, Kimerling L C, Michel J 2009 *Opt. Lett.* **34** 1198
- [40] Liu J, Sun X, Camacho-Aguilera R, Kimerling L C, Michel J 2010 *Opt. Lett.* **35** 679
- [41] Camacho-Aguilera R E, Cai Y, Patel N, Bessette J T, Romagnoli M, Kimerling L C, Michel J 2012 *Opt. Express* **20** 11316
- [42] Koerner R, Oehme M, Gollhofer M, Schmid M, Kostecki K, Bechler S, Widmann D, Kasper E, Schulze J 2015 *Opt. Express* **23** 14815
- [43] Boucaud P, Kurdi M E, Sauvage S, de Kersauson M, Ghrib A, Checory X 2013 *Nat. Photon.* **7** 162
- [44] Jenkins D W, Dow J D 1987 *Phys. Rev. B* **36** 7994
- [45] D' Costa V R, Cook C S, Birdwell A G, Littler C L, Canonico M, Zollner S, Kouvetakis J, Menéndez J 2006 *Phys. Rev. B* **73** 125207
- [46] Yin W J, Gong X G, Wei S H 2008 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **78** 161203
- [47] Mathews J, Beeler R T, Tolle J, Xu C, Roucka R, Kouvetakis J, Menéndez J 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 221912
- [48] Grzybowski G, Jiang L, Mathews J, Roucka R, Xu C, Beeler R T, Kouvetakis J, Menéndez J 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 171910
- [49] Roucka R, Mathews J, Beeler R T, Tolle J, Kouvetakis J, Menéndez J 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 061109
- [50] Chen R, Lin H, Huo Y, Hitzman C, Kamins T I, Harris J S 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 181125
- [51] Oehme M, Werner J, Gollhofer M, Schmid M, Kaschel M, Kasper E, Schulze J 2011 *IEEE Photon. Tech. L.* **23** 1751
- [52] Oehme M, Kostecki K, Arguirov T, Mussler G, Kaiheng Y, Gollhofer M, Schmid M, Kaschel M, Korner R A, Kitzler M, Buca D, Kasper E, Schulze J 2014 *IEEE Photon. Tech. L.* **26** 187
- [53] Wirths S, Geiger R, von den Driesch N, Mussler G, Stolica T, Mantl S, Ikonik Z, Luysberg M, Chiussi S, Hartmann J M, Sigg H, Faist J, Buca D, Grützmacher D 2015 *Nature Photon.* **9** 88

SPECIAL ISSUE—Physics and devices of silicon photonics

Recent progress in Ge and GeSn light emission on Si^{*}He Chao Zhang Xu Liu Zhi Cheng Bu-Wen[†]

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

(Received 19 August 2015; revised manuscript received 20 September 2015)

Abstract

Si-based optical interconnection is expected to solve the problems caused by electric interconnection with increasing the density of integrated circuits, due to its merits of high speed, high bandwidth, and low consumption. So far, all of the key components except light source of Si-based optical interconnection have been demonstrated. Therefore, the light source has been considered as one of the most important components. Ge and GeSn based on Si have emerged as very promising candidates because of their high compatibility with Si CMOS processing, and the pseudo direct-bandgap characteristic. The energy difference between the direct and indirect bandgap of Ge is only 136 meV at room temperature. Under tensile strain or incorporation with Sn, the energy difference becomes smaller, and even less than zero, which means that Ge or GeSn changes into direct bandgap material. What is more, using large n-type doping to increase the fraction of electrons in Γ valley, we can further increase the luminous efficiency of Ge or GeSn. In this paper, we briefly overview the recent progress that has been reported in the study of Ge and GeSn light emitters for silicon photonics, including theoretical models for calculating the optical gain and loss, several common methods of introducing tensile strain into Ge, methods of increasing the n-type doping density, and the method of fabricating luminescent devices of Ge and GeSn. Finally, we discuss the challenges facing us and the development prospects, in order to have a further understanding of Ge and GeSn light sources. Several breakthroughs have been made in past years, especially in the realizing of lasing from GeSn by optically pumping and Ge by optically and electrically pumping, which makes it possible to fabricate a practical laser used in silicon photonics and CMOS technology.

Keywords: silicon photonics, Ge, GeSn, luminescent device

PACS: 61.72.uf, 42.82.-m, 61.82.Fk, 42.55.Px

DOI: 10.7498/aps.64.206102

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2013CB632103) and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61176013, 61036003).

† Corresponding author. E-mail: cbw@semi.ac.cn

半导体材料基因组计划: 硅基发光材料

骆军委 李树深

Semiconductor Materials Genome Initiative: silicon-based light emission material

Luo Jun-Wei Li Shu-Shen

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 207803 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.207803

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.207803>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I20>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

金属微结构纳米线中等离激元传播和分光特性

Plasmonic propagation and spectral splitting in nanostructured metal wires

物理学报.2015, 64(9): 097803 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.097803>

Au 的金属颗粒对二硫化钼发光增强

PL enhancement of MoS₂ by Au nanoparticles

物理学报.2014, 63(21): 217802 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.217802>

内嵌圆饼空心方形银纳米结构的光学性质

Optical properties of silver hollow square embedded disk nanostructures

物理学报.2014, 63(10): 107803 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.107803>

超小间距纳米柱阵列中的谐振调制

Tuning surface plasmons in nanorod arrays with ultrasmall spacing

物理学报.2013, 62(23): 237806 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.237806>

纳米表面二维周期半圆凹槽增强硅薄膜太阳能电池光吸收

Nano surface two-dimensional periodic half-round grooves enhanced light absorption in silicon film solar cell

物理学报.2013, 62(16): 167801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.167801>

专题: 硅基光电子物理和器件

半导体材料基因组计划: 硅基发光材料*

骆军委† 李树深

(中国科学院半导体研究所, 半导体超晶格国家重点实验室, 北京 100083)

(2015年4月7日收到; 2015年5月12日收到修改稿)

材料基因组计划旨在通过实验、计算和理论的有机整合协同创新, 实现新材料研发周期减半, 研发成本减半, 以期加速在清洁能源、国家安全、人类福利等方面的进步. 半导体材料的研究和发展奠定了半导体科学技术在当前人类社会发展中至关重要的地位, 半导体材料基因组计划的实施将促使半导体科学技术的研究和应用进入一个崭新的时代. 本文基于基因遗传算法理论设计硅基发光材料的研究工作探讨了半导体材料基因组计划的实施构想. 首先简单介绍了硅基发光的应用前景和开发硅基发光材料所面临的挑战. 随后介绍了基于模拟达尔文物种进化的基因遗传算法和高精度高性能的能带结构计算方法, 设定高效带边发光这一目标, 逆向设计拥有直接带隙发光的二维 Si/Ge 超晶格和一维 Si/Ge 核-多壳纳米线, 为实施半导体材料基因组计划提供了一个范例, 显示了材料基因组计划的强大力量和巨大价值. 最后对半导体材料基因组计划的实施提了几点建议.

关键词: 材料基因组计划, 硅基发光, 超晶格, 纳米线**PACS:** 78.67.-n, 73.22.-f, 71.15.-m**DOI:** 10.7498/aps.64.207803

1 半导体材料基因组计划介绍

自20世纪80年代以来, 技术的革新和经济的发展越来越依赖于新材料的出现. 特别是在经过信息技术革命后, 美国政府充分认识到材料革新对技术进步和产业发展的重要作用. 在复兴制造业的战略背景下, 美国总统奥巴马于2011年6月24日在卡内基梅隆大学宣布实施“材料基因组计划”(materials genome initiative, MGI)^[1], 其主要目的是试图把新材料的开发周期缩短一半, 研发成本减半, 以期加速在清洁能源、国家安全和人类福利等领域先进材料的应用, 加强美国在21世纪继续保持的高新技术产业和军用装备的竞争优势. 自从美国提出实施“材料基因组计划”后, 包括中国在内的世界各国政府纷纷跟进, 提出各自的“材料基因组计划”. 在中国“材料之父”师昌绪院士的建言下, 国务院批准设立“新材料专项”(即第18专项), 预期将在该专项的资助下实施中国版的“材料基因组计划”. 2014年12月4日, 美国白宫的官方网站公

布了《材料基因组战略规划》^[2], 本规划是美国国家层面的最高技术投资和发展规划, 是继2001年《美国国家纳米技术战略规划》之后首个国家级的材料技术发展规划. 本规划详细描述了材料基因组计划提出的背景; 材料领域面临的主要挑战; 材料基因组计划预期实现的战略目标; 材料基因组在国家安全、人类福利、清洁能源、基础设施及消费品领域可能带来的巨大成绩. 材料基因组计划的核心内容是通过实验、计算和理论的有机整合协同创新, 实现材料开发过程中各个层面的数据共享, 转变材料研发的模式. 主要基础设施包括计算工具、实验工具、数据数字化以及协作网络四大部分. 正如生物DNA序列数据的开放共享加速了人类基因组计划的进程、促进了生物信息技术产业的形成壮大, 材料基因组计划旨在通过材料数据的私密性和公开性的协调统一, 扩大实验仪器、模拟计算工具、材料基础数据的可获得性, 把先进材料从发现、开发、生产和应用等所有环节的开发速度提高一倍. 数据共享与计算工具的开发对“材料基因组计划”的成功实施起到至关重要的作用, 大规模高性能并行计算

* 量子信息与量子科技前沿协同创新中心(2011计划)、中组部青年千人计划和国家自然科学基金(批准号: 61474116)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: jwluo@semi.ac.cn

机系统的快速发展, 准确预测材料性能的计算模拟工具的开发, 高性能数据库和数据挖掘技术的发明等为“材料基因组计划”的实施提供了坚实的基础. 当前, 新材料的研发主要依靠研究者的科学直觉和“试错法”进行大量的重复实验. 最近, 在工程领域出现了集成材料计算工具与拥有计算和分析的高级信息技术相结合的新材料开发成功范例, 这表明材料基因组计划的实施非常有希望把现有的材料研发周期从20—30年缩短到2—3年^[1]. 材料基因组按照应用或者物理化学特性可以细分为不同的子类^[2,3], 如半导体材料基因组、催化材料基因组、新能源材料基因组、生物材料基因组、超级钢材料基因组、航空材料基因组等.

半导体科学技术在当前人类社会发展扮演着至关重要的作用. 半导体科学技术的进步为全社会带来了互联网的普及和信息产业的发展, 为人类的生活和生产带来了变革. 半导体科学技术是信息产业的核心和基础, 是推动传统工业转型升级的物质支撑, 是促进经济社会发展和保障国家安全的战略性、基础性和先导性基石, 是世界各主要工业国家投巨资竞相发展的高精尖技术. 半导体科学技术还在不断孕育新兴产业, 如新能源、固态照明、移动互联、物联网、大数据、云计算、智能家电等. 半导体科学技术一直在蓬勃发展, 新的材料、思想、技术不断涌现, 如新型二维材料的出现有可能为我们带来更高性能的器件和新的应用技术, 半导体自旋电子学的发展可能应用到新型自旋器件中. 半导体材料的研发奠定了当前半导体技术取得的地位, 半导体材料基因组计划的实施将促使半导体科学技术的研究和应用进入一个崭新的时代. 本文作者之一骆军委曾经作为美国能源部“能源前沿研究中心”逆向设计中心的骨干成员, 过去几年已经在半导体材料基因组方面开展了一些研究工作, 例如对于硅自旋量子比特应用, 基于基因遗传模拟方法逆向设计了硅(Si)量子阱, 使它的谷间能级劈裂提高了一个量级, 这将显著提高硅量子比特的自旋相干时间, 达到可实际应用的水平^[4]; 对于光电集成技术急需解决的硅基发光材料, 基于基因遗传模拟方法逆向设计了直接带隙发光的Si/Ge超晶格^[5]和纳米线^[6], 这也是本文后面部分的主要内容.

2 硅基发光材料的应用

Si是最重要且应用最广的半导体材料, 是微电子工业和太阳能光伏工业的基础材料. 它具有储

量丰富、化学稳定性好、无环境污染、大单晶、高纯度、可掺杂、高传导率、存在高度匹配的本征氧化物绝缘体等优点. 特别是, 拥有高度兼容的高质量本征氧化物SiO₂, 使Si区别于锗(Ge)和砷化镓(GaAs)等其他半导体材料成为半导体行业的基础材料. Si的这些优点确保了半导体微电子技术在过去40年一直遵循摩尔定律的预言持续高速发展. 在硅技术的发展历程中, 科学家们攻克了一个又一个原本被认为不可逾越的关键技术, 例如在互补金属氧化物半导体(CMOS)技术中引入绝缘衬底上生长硅单晶(SOI), SiGe合金和应变硅等不同的硅基材料改良. 光刻的衍射极限触发了深紫外和极紫外光源以及先进的亚波长光刻技术^[7]的研究, 维系了摩尔定律. 当前微电子技术发展所面临的最为关键的障碍是金属互连的物理极限. 把光子学器件和电子学器件集成在同一基片上, 用光互连代替金属互连的光电集成技术被认为是突破金属互连物理极限的一个有效解决方案^[7], 该方案的成功实现还将催生其他的潜在应用. 相对于金属导线, 光数据通信提高了数据速率并避免了电磁干扰问题, 特别地, 它具有响应速度快、传输容量大、存储密度大、处理速度快、可微型化和集成化等优点, 因此光电集成技术可以带来新的功能和实现电路板间、同一板上的芯片间, 甚至同一芯片的不同核间更快的数据通信. 硅基光电集成技术也可以应用于包括光交换阵列和光纤的光电组件在内的光通信其他领域. 相对于其他半导体材料, 硅晶片具有最低生产成本和最高单晶质量, 是发展CMOS兼容的硅光子学工业的最好理由. 一个基本的光子学系统包括了一个激光器、一个光调制器^[8]、一个光波导和一个光探测器等光子学器件. 微电子技术中所有的组件都集成在单个晶片上, 使用并行制造技术同时制作几十亿个单元. 但是, 当前光子学技术中的各个功能单元还不能集成在同一个晶片上, 无法使用并行制造技术进行大规模高效率地制作. 依赖成熟的硅技术把光子学器件和电子学器件集成在同一晶片上, 把CMOS工艺兼容的激光器、光调制器、光波导和光探测器等主要组件整体集成到微电子电路中从而实现光电子集成电路, 是半导体工业的一个长期愿望. 其他的几个关键光子学组件已经取得了巨大进展, 但是硅晶片上激光器^[9]目前还没有实现室温高效发光, 这严重阻碍了硅基光电子集成电路的实现和发展^[7,10].

3 硅基发光材料的挑战

Si 和 Ge 都是间接带隙半导体材料. 电子一般待在导带能量最低处, 即对于 Si 它位于布里渊区的 X 点, 对于 Ge 它位于布里渊区的 L 点. 空穴一般待在价带能量最高处, 它位于 Γ 点, 所以 Si 和 Ge 中电子和空穴的辐射复合不符合光学跃迁所需的动量守恒定律, 需要一个额外的辅助声子来满足动量守恒定律从而实现光学跃迁. 声子辅助的光跃迁是一个二阶微扰过程, 它的发光效率要比一阶光跃迁的直接带隙半导体的发光效率高好几个数量级, 这导致了硅基发光和光电调制器的效率非常低, 严重阻碍了整个硅基光电子集成电路技术的发展. 为了解决光电子集成电路的光源问题, 科学家们进行了长期的研究, 已经提出了三条不同的解决途径来实现硅片上光源 [9–11]. 第一条途径是在硅片上集成高发光效率的直接带隙 III-V 族光源, 第二条途径是稀土 (如铈) 掺杂硅材料或者调控位错和缺陷引起的局域态来实现辐射发光, 第三条途径是基于 Si, Ge 或 SiGe 合金等进行能带工程实现高效的全 IV 族光源. 第一条途径又分为键合 [11] 和直接外延这两种方法. 键合方法 [11] 是在 Si 片上生长几个纳米厚度的非结晶层, 然后把 III-V 族材料长非结晶层上, 从而实现 Si 片上集成 III-V 族发光材料. 直接外延方法是把 III-V 族材料通过外延方法直接生长在 Si 片上. 但是高密度位错和热稳定性成为制约第一条途径 [10,12] 发展的最大障碍. 例如直接带隙 III-V 族材料和 Si 之间存在晶格和热膨胀失配以及极性材料和非极性材料的结合等问题, 导致了每平方米多达 10^8 – 10^{10} 个位错, 这严重降低了它的发光效率. 采用特殊表面处理、应变超晶格、低温缓冲层和图案衬底生长等方法可以把位错密度降到每平方米 10^5 – 10^6 个, 但是仍然要比用于室温连续波长激光器的 InP 和 GaAs 外延晶片的位错密度高两个量级以上. 同时, 稳定性和均匀性的问题仍然没有很好的解决方案, 这将成为阻碍将来实际应用的关键因素 [10]. 第二条途径的主要问题是在单晶硅中的稀土元素的固溶度很低, 而且只有很低比例的稀土杂质具有光学活性, 使它不能成为有效的室温发光中心 [10,13]. 第三条途径是自然之选, 对它的研究可以追溯到硅集成电路的发展初期 [9], 它面临的主要挑战是发光热淬灭和激子辐射复合寿命太长, 这都是由于 Si 基材料的间接带隙发光导致的 [9,14]. 在过去 50 年, 全 IV 族光

源的研究 [9] 主要集中在多孔硅、Si/SiO₂ 超晶格、Si 量子点、Si/Ge 量子阱等系统. 虽然量子束缚效应被认为可以缓解光学跃迁的动量守恒要求, 但是目前还没有在低维硅基量子结构中实现高效的全 IV 族光源. 最近, 本文作者之一骆军委和他的合作者基于基因遗传算法逆向设计了高效的直接带隙发光 Si/Ge 超晶格 [5] 和 Si/Ge 核-多壳量子线 [6], 为实现 CMOS 技术兼容的全 IV 族光源提供了有效方案, 有望早日实现硅光电子集成电路技术. 在本文的剩余部分, 我们将首先分析为什么在低维 Si 量子结构中即使形成了直接带隙, 但它们的发光效率仍然非常低, 不能用作 Si 晶片上的发光器件. 然后我们着重介绍逆向设计高效发光的直接带隙 Si/Ge 超晶格 [5] 和 Si/Ge 核-多壳量子线 [6] 这两项工作.

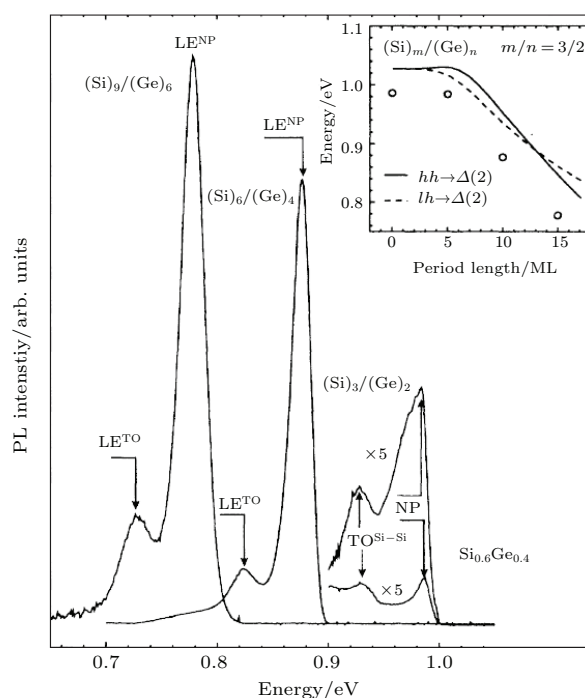


图1 实验测得的 Si₆/Ge₄, Si₉/Ge₆, Si₃/Ge₂ 超晶格的低温 PL 发光强度以及 Si_{0.6}Ge_{0.4} 合金的 PL 发光强度对比. 上标“NP”表示没有声子辅助的直接辐射复合发光, “TO”表示光学声子辅助的复合发光. Si₃/Ge₂ 超晶格和 Si_{0.6}Ge_{0.4} 合金 PL 谱放大了 5 倍 [15]

Fig. 1. Comparison of the experimental measured PL intensity of Si₆/Ge₄, Si₉/Ge₆, Si₃/Ge₂ superlattices as well as Si_{0.6}Ge_{0.4} homogenous alloy at low temperature. The superscript “NP” indicates the non-phonon radiative recombination of exciton, and “TO” the TO-phonon assisted radiative recombination of exciton. The intensity of Si₃/Ge₂ superlattice and Si_{0.6}Ge_{0.4} alloy is zoomed in by 5 times [15].

在 20 世纪八九十年代, 人们发现二维 Si_n/Ge_m 超晶格能够发光, 虽然测得的发光效率非常低, 但是作为兼容硅 CMOS 技术的硅基发光

材料引起了极大的研究兴趣^[15-19]. 根据布里渊区能带折叠理论, 文献[20]在理论上首先提出在某些Si_n/Ge_m超晶格中Si的 Δ 点导带底刚好折叠到超晶格小布里渊区的 $\bar{\Gamma}$ 点, 形成直接带隙. 随着MBE外延生长技术的日益成熟, 高质量Si_n/Ge_m超晶格的制备成为可能, 作为潜在的硅基发光材料吸引了广泛的兴趣^[15-19]. 周期为10个原子层的Si_n/Ge_{10-n}超晶格在超晶格小布里渊区刚好成为直接带隙, 特别是Si₆/Ge₄超晶格一度被认为是发光效率最高的硅基材料. 但是, 如图1(a)所示, Si₆/Ge₄超晶格的直接带隙跃迁光致发光(PL)的发光强度仅仅比声子辅助(LE)的跃迁强度大了10倍左右, 这说明它的发光效率仍然非常低, 不足以用来实现室温发光器件. 经过长期的努力, Si/Ge量子阱的发光效率还是不能进一步突破, 科学家们对它的研究热情在进入21世纪后就随之消退.

为什么间接带隙半导体组成的低维量子结构即使变成直接带隙后发光效率仍然很低? 研究者对这个问题没能理解清楚, 导致文献经常错误地报道一些理论上预言的所谓发光Si纳米材料^[21,22], 这些Si纳米材料通过能带折叠在小布里渊区形成直接带隙, 但是这并没有改变它们低发光效率的本质. 在此, 我们给出具体的解释. 根据布洛赫定理, 周期晶体势场的薛定谔方程解为

$$\phi_{n\mathbf{k}} = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

n 是能带指数, $\mathbf{k}$ 是位于第一布里渊区(约化布里渊区)的波矢, $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 是晶格的布洛赫周期函数. 对于晶格矢量为 $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$ 的原胞(primitive cell), 倒格子矢量为 $(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3)$, 它们满足如下关系:

$$\mathbf{b}_i = 2\pi \frac{\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k}{(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3}, \quad (2)$$

在这里 i, j, k 是1, 2, 3这三个指数的循环置换. 对原胞进行周期性平移, 就可以充满整个晶格形成晶体. 如果晶体中存在缺陷、合金或低维结构等, 破坏了晶格平移对称不变性, 需要一个足够大的超元胞(supercell)来包含低维量子结构. 可以以该超元胞为最小周期单元重新形成新的周期势场, 通过解新的薛定谔方程来得到低维量子结构的能量和波函数特征值. 如果超元胞晶格矢量为 $(\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \mathbf{A}_3) = (m\mathbf{a}_1, n\mathbf{a}_2, l\mathbf{a}_3)$, $n, m, l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $N_{\text{PC}} = |m \times n \times l|$, 那么, 低维量子结构超元胞的布洛赫函数 $\Psi_{i\mathbf{K}}$ 可以用块体材料原胞的布洛赫函数 $\phi_{n\mathbf{k}}$ 进行展开获得,

$$\Psi_{i\mathbf{K}} = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{PC}}}} \sum_n \sum_k^{N_B} C_{i\mathbf{K},n}(\mathbf{k}) \phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (3)$$

其中 $C_{i\mathbf{K},n}(\mathbf{k})$ 为展开系数, $i, \mathbf{K}$ 分别是超元胞的能带指数和第一布里渊区的波矢. (在此需要强调的是, 一般的平面波求解方法选择动能小于截断能的所有 $\mathbf{k}$ 点的平面波作为完整的基函数对 $\Psi_{i\mathbf{K}}$ 进行展开.) 低维量子结构(超元胞 $\bar{\Gamma}$ 点)直接带隙光学跃迁矩阵则为

$$\begin{aligned} & \langle \Psi_{v\bar{\Gamma}} | \hat{\mathbf{p}} | \Psi_{c\bar{\Gamma}} \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N_{\text{PC}}}} \sum_n^{N_B} \sum_{n'}^{N_B} \sum_k^{N_k} \sum_{k'}^{N_k} C_{v\bar{\Gamma},n}^*(\mathbf{k}) \\ & \quad \times C_{c\bar{\Gamma},n'}(\mathbf{k}') \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \mathbf{p}_{nn'}, \end{aligned} \quad (4)$$

其中 $\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \mathbf{p}_{nn'} = \langle \phi_{n\mathbf{k}} | \hat{\mathbf{p}} | \phi_{n'\mathbf{k}'} \rangle$. 如果超元胞周期排列组成的晶体和原胞周期排列组成的晶体是完全相同的, 也就是不存在缺陷等微扰势, 那么超元胞波函数的展开系数 $C_{i\bar{\Gamma},n}(\mathbf{k})$ 不是0就是1, 而且仅仅只有一个系数为1. 超元胞的体积是原胞的 N_{PC} 倍, 倒格子空间则为 $1/N_{\text{PC}}$, 所以原胞布里渊区中的 N_{PC} 个不同 $\mathbf{k}$ 点会折叠到超元胞布里渊区的同一个 $\mathbf{K}$ 点上, 对于超元胞 $\mathbf{K}$ 点上的第 i 个能带的电子态, 如果它对应于原胞布里渊区 $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{G}$ 点的第 n 个能带, 那么它的展开系数 $C_{i\mathbf{K},n}(\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{G})$ 等于1, 其余系数则全为0. 所以, 原胞的非直接带隙能带结构通过能带折叠在超元胞中形成直接带隙的能带结构, 根据(4)式可知, 原胞的非直接带隙性质 $\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = 0$ 导致超元胞的带边光跃迁矩阵元 $\langle \Psi_{v\bar{\Gamma}} | \hat{\mathbf{p}} | \Psi_{c\bar{\Gamma}} \rangle = 0$. 通过能带折叠形成的直接带隙Si基低维量子结构的带间光学跃迁必须满足相应原胞的带间光跃迁动量守恒定律, 量子结构能带折叠并没有改变Si和Ge的间接带隙本质. Si的亚稳晶体结构或者Si的同构异形体的原胞可以看作是一个由多个扭曲的金刚石结构Si原胞组成的超元胞, Si的间接带隙能带折叠到亚稳Si晶体结构的小布里渊区, 变成直接带隙, 所以, 大部分情况下亚稳Si晶体结构的带边光跃迁是禁止的, 即 $\langle \Psi_{v\bar{\Gamma}} | \hat{\mathbf{p}} | \Psi_{c\bar{\Gamma}} \rangle = 0$, 这就解释了为什么直接带隙的Si亚稳晶体的发光效率仍旧非常低, 我们把这样的直接带隙称为准直接带隙. 同理, 对于低维Si量子结构, Si的间接带隙能带结构通过能带折叠在小布里渊区变成直接带隙, 但是Si的间接带隙发光性质并没有改变. 很多人不能理解对一点, 错误地认为只要在小布里渊区得到直接带隙的Si超结构就可以得到直接带隙发光^[21,22].

值得注意的是, 在有效质量或者 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 近似方法中, 低维量子结构波函数 Ψ_i 以块体材料原胞的 Γ 点布洛赫函数为基函数:

$$\begin{aligned}\Psi_i &= \frac{1}{\sqrt{N_{\text{PC}}}} \sum_n^{N_B} \sum_{\mathbf{k}}^{N_k} C_{i,n}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_{n\Gamma}(\mathbf{r}) \\ &= \sum_n^{N_B} f_{i,n}(\mathbf{r}) u_{n\Gamma}(\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (5)$$

其中 $f_{i,n}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}}^{N_k} C_{i,n}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) / \sqrt{N_{\text{PC}}}$, 它是在实空间缓慢变化的包络函数. 如果选择原胞 Γ 点上的所有能带的布洛赫周期函数 $\{u_{n\Gamma}\}$ 组成完备基函数, 那么方程(5)是一个严格解. 但是, 在 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 近似中为了简化计算, 往往只选择带隙附件的3个价带(加上自旋)形成6带理论或者3个价带和1个导带形成8带理论, 这些近似方法往往不能正确描述低维量子结构中的 Γ - X 和 Γ - L 等谷间和能带间的耦合等效效应^[23,24], 从而不能正确处理准直接带隙跃迁问题. 基于有效质量近似理论, 经常有人简单地误认为可以通过增加价带边和导带边包络函数在实空间的重叠程度来提高 Si 量子结构的准直接带隙发光强度.

4 逆向设计直接带隙发光的 Si/Ge 超晶格

事实上我们的确可以通过合金^[25]、界面^[5,6]、量子束缚等^[26]微扰来降低 Si 晶体周期势场的对称性, 引起 Si 量子结构的波函数在(块体原胞)倒格子空间有一定幅度的展开, 也就是不止一个 $\mathbf{k}$ 点的 $C_{i\Gamma,n}(\mathbf{k})$ 系数为非零, 使得原本分别来自 Si 的 Γ 点和 X 点的带边电子态在原胞的倒格子空间产生重叠, 从而导致准直接带隙光学跃迁成为可能, 即 $\langle \Psi_{v\Gamma} | \hat{\mathbf{p}} | \Psi_{c\Gamma} \rangle \neq 0$, 它的光学跃迁强度取决于量子结构价带边和导带边这两个波函数在倒格子空间的重叠程度. 早在 20 世纪 80 年代就报道了 Si_6/Ge_4 应变超晶格可以实现发光, 通过能带折叠在它的超晶格小布里渊区成为直接带隙, Si/Ge 界面可以引起晶体势的变化, 使得超晶格波函数在 Si (原胞) 倒格子空间形成一定幅度的展开, 导致价带和导带边波函数在倒格子空间产生部分重叠形成发光, 但是应变 Si_6/Ge_4 超晶格的准直接带隙光学跃迁矩阵元仍然很小, 不可能通过提高外延生长的晶体质量来突破理论极限实现 Si_6/Ge_4 超晶格的高效发光. 传统试错法的实验研究方法成本非常高, 只能对少量的 Si_n/Ge_m 超晶格进行研究. 事实上, 对于给定周期为 N 个原子层的 Si/Ge 超晶格, 它大概有 2^N 种不同的 Si 和 Ge 组成方式 $[\text{Si}_{n_1}/\text{Ge}_{m_1}/\cdots/\text{Si}_{n_N}/\text{Ge}_{m_N}]_{\infty}$, 其中 $n_1, m_1, \cdots$,

n_N, m_N 表示 1 或者 0. 在这么多的 Si/Ge 超晶格中是否存在未被发现的超晶格, 它的导带和价带波函数在原胞倒格子空间存在非常大的重叠, 从而具备可实际应用的高效发光? 本文作者之一骆军委和他的合作者已经给出了肯定的答案^[5,6], 期待实验上能够制备出理论设计的神奇超晶格.

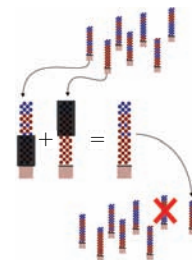


图2 使用基因遗传算法搜索拥有强发光跃迁的 Si/Ge 超晶格示意图

Fig. 2. Schematic diagram of the genetic evolution method to search strong bandgap optical transition Si/Ge superlattices.

为了从天文数字个不同的超晶格中找到发光最强的那一个, 需要一个非常有效的搜索方法结合大规模高性能的能带结构计算方法才能实现这一目标. 骆军委和他的合作者使用了基因遗传算法模拟达尔文的生物进化对所有可能的 Si/Ge 超晶格进行探索^[5], 目标是为了优化 Si/Ge 超晶格这一“物种”, 使它们偏好辐射复合发光. 设定每一代的 Si/Ge 超晶格“居民数”为 100 个, 所有的超晶格都沿 (001) 晶向生长, 周期为 20 个原子层. 使用原子尺度的赝势带结构计算方法来获得超晶格的光跃迁矩阵元. 第一代的 100 个超晶格随机生成, 下一代的新超晶格则由前一代的超晶格进行杂交和变异生成. 如图 2 所示, 在前一代的 100 个超晶格中随机选择两个, 选取其中一个超晶格的上半部分和另一个超晶格的下半部分重新组合(杂交)成一个新的超晶格, 或者从前一代的 100 个超晶格中选择一个, 随机选择其中的 Si 原子层翻转为 Ge 原子层或者反之, 变异成一个新的超晶格. 随后检查这些新生成的超晶格在超晶格小布里渊区是否为直接带隙, 选取其中的直接带隙超晶格, 并计算带边发光跃迁矩阵元. 从这些新生成的超晶格和前一代的超晶格中选择发光强度最大的 100 个超晶格作为新一代的超晶格“人口”, 这样一代一代的遗传下去. 大概经过 100 代的遗传后, 就找到发光最强的超晶格. 为了确保找到的超晶格的确是发光最强的一个超晶格, 即为了得到收敛的结果, 对每一组指定的参数(衬底晶格常数和超晶格周期)重复执行

上述遗传过程三次, 选取其中发光最强的那个超晶格作为最后的结果。

表 1 在 Ge 和 $\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$ 衬底 (001) 面上生长的 Si_6/Ge_4 超晶格和神奇超晶格的跃迁矩阵元, 以及和块体 Ge 的 Γ 点直接带隙跃迁矩阵元进行比较。其中跃迁矩阵元包括平行衬底平面分量 $p_{\parallel}$, 垂直衬底分量 $p_{\perp}$ 以及总和 p , 跃迁矩阵元的单位是原子单位

Table 1. Dipole matrix elements between the conduction band minimum and the valence band maximum of Si_6/Ge_4 and magic sequence superlattices on (001) Ge and (001) $\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$ substrates, compared to the dipole matrix elements of the band gap transition at Γ -point in bulk Ge. We report the dipole matrix elements $p_{\parallel}$ parallel to the substrate growth direction (001) and $p_{\perp}$ perpendicular to (001) between valence and conduction band in atomic units.

SL	Substrate	$ \langle v p_{\parallel} c\rangle ^2$	$ \langle v p_{\perp} c\rangle ^2$	$ \langle v p c\rangle ^2$
Ge	Ge	1.28×10^{-7}	0.185	0.37
Si_6Ge_4	Ge	5.05×10^{-4}	2.72×10^{-5}	5.59×10^{-4}
	$\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$	5.21×10^{-4}	1.21×10^{-4}	7.64×10^{-4}
Magic sequence	Ge	2.46×10^{-2}	3.42×10^{-3}	3.15×10^{-2}
	$\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$	1.81×10^{-7}	1.35×10^{-2}	2.71×10^{-2}

通过以上的基因遗传算法搜索, 骆军委等逆向设计出了几个硅基直接带隙发光超晶格, 这些超晶格具有一个共同的特点, 也就是存在一个神奇的 Si/Ge 排列片段: $\text{SiGe}_2\text{Si}_2\text{Ge}_2\text{Si}$, 然后是 $n = 12-32$ 层的 Ge 原子作为缓冲层构成一个超晶格周期, 这些超晶格命名为 α_n 超晶格。这个神奇的 Si/Ge 片段确保了 α_n 超晶格在二维小布里渊区形成直接带隙, 并且拥有比较大的带边光跃迁矩阵元。为了保证 α_n 超晶格成为直接带隙, 还必须要求 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 衬底的 Ge 含量大于 60%, 如果衬底中 Ge 的含量小于 60%, 那么, 生长在它上面的 α_n 超晶格在二维布里渊区也是间接带隙的, 也就是超晶格的导带在 $\bar{X}$ 点的能量低于 $\bar{\Gamma}$ 点。下面我们将主要讨论 $\text{SiGe}_2\text{Si}_2\text{Ge}_2\text{SiGe}_{12}$ 这个神奇的 α_{12} 超晶格的性质。在图 3 中给出了计算得到的 α_{12} 超晶格的光学吸收谱, 并与文献 [15] 中报道的发光最强的 Si_6/Ge_4 超晶格进行比较。表 1 中列出了 Si_6/Ge_4 超晶格和 α_{12} 超晶格的带边光跃迁矩阵元, 并和 Ge

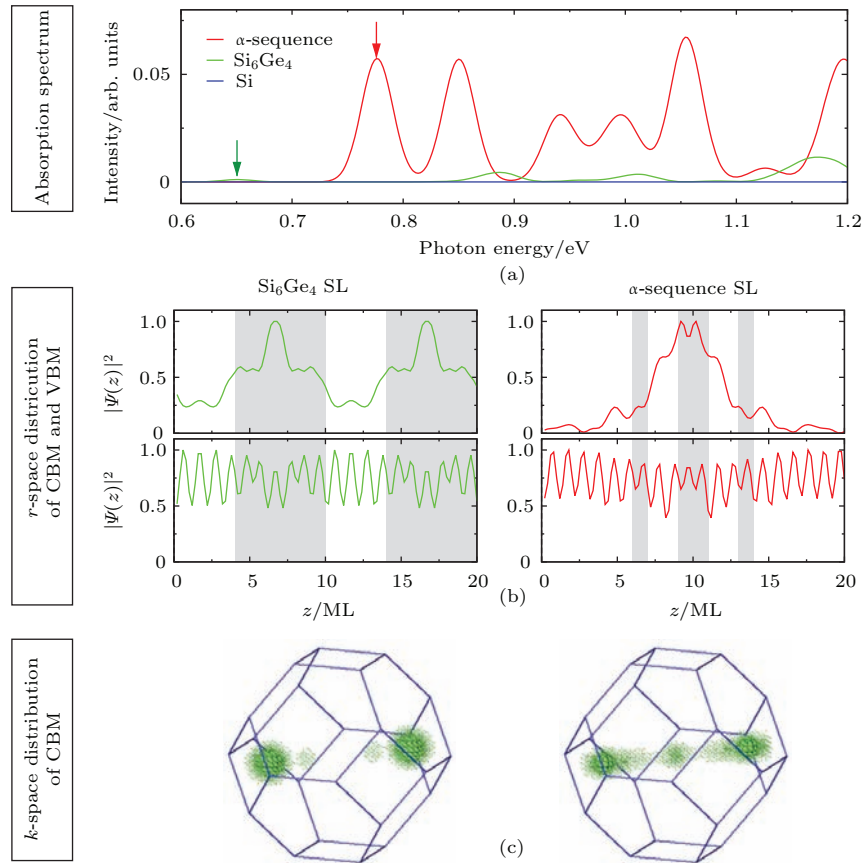


图 3 Si_6/Ge_4 超晶格和我们发现的神奇 α_{12} 超晶格比较 (a) 光学吸收谱, 图中的箭头分别指出了相应超晶格的带隙; (b) 超晶格导带边和价带边波函数在实空间 (沿超晶格生长方向) 的分布; (c) 超晶格导带边波函数在硅原胞倒格子空间的分布

Fig. 3. Comparison between Si_6Ge_4 superlattice and the discovered magic sequence: (a) The direct absorption spectra; (b) the location in real-space of the CBM and the VBM along the growth direction, with silicon layers in gray and Germanium regions in white; (c) the reciprocal space orbital character of the CBM, e.g., the components of the CBM in the zinc blende Brillouin zone.

在 Γ 点的直接带隙跃迁矩阵元进行比较(它和GaAs直接带隙跃迁矩阵元非常接近). 从表1中可以知道, 逆向设计得到的神奇超晶格的光跃迁矩阵元比 Si_6/Ge_4 超晶格大50倍, 甚至达到块体半导体(如GaAs)直接带隙跃迁矩阵元的10%, 所以可以认为 α_{12} 超晶格是真正的直接带隙发光材料, 它的发光强度已经达到了可实际应用的水平. 如图3所示, α_{12} 超晶格的带隙为0.77 eV, 对应的发光波长为1.61 μm , 非常接近光纤通信所需的理想工作波长1.55 μm , 这对于集成光电子技术是一个非常重要的性质.

为什么这些神奇的 α_n 超晶格能够成为直接带隙发光? 在图3中给出了导带边电子态在Si原胞布里渊区的波函数分布, 以及导带边和价带边波函数在实空间的分布. 如前所述, 很多文献把硅基量子结构发光效率的提高归功于价带和导带边波函数在实空间重叠的增大, 但是, 根据图3中 Si_6/Ge_4 超晶格和 α_{12} 超晶格波函数在实空间分布的比较, 我们可以发现这两者的差别并不是很明显, 不足以解释为什么 α_{12} 超晶格的跃迁矩阵元要比 Si_6/Ge_4 超晶格的大50倍. 在图3中给出的 Si_6/Ge_4 超晶格和 α_{12} 超晶格的导带边波函数在Si原胞布里渊区的分布, 我们可以发现它们的差别非常显著, Si_6/Ge_4 超晶格的导带边波函数主要分布在 Δ 点附近, 离开 Δ 点波函数的幅度迅速降低, 特别是在 Γ 点附近波函数几乎衰减到不可见. 把 Γ 点附近的导带边波函数进行求和可以得到大概有1.6%的分量来自 Γ 点附近, 导带边的这部分波函数和价带边的波函数在布里渊区的重叠导致光学跃迁矩阵元成为非零值, 也就是具有一定的发光强度. 但是对于 α_{12} 超晶格, 我们发现导带边波函数除了主要分布在 Δ 点附近外, 在 Γ 点也有一个极大值, 大概有11.5%的波函数分布在 Γ 点附近, 这解释了为什么 α_{12} 超晶格的跃迁矩阵元相对于 Si_6/Ge_4 超晶格能够提高50倍, 成为直接带隙发光.

在以上讨论中, α_n 超晶格中Si原子层和Ge原子层都是纯的Si或者Ge原子, 形成非常理想的Si/Ge界面. 事实上, 目前的外延生长技术还不能达到这样高的水平, 制备出来的超晶格往往存在原子层间的互扩散从而产生SiGe无序合金, 也就是说以目前的技术还不能完全精确地制备出理论设计的 α_n 超晶格. 主要有两种因素可以导致制备出来的超晶格偏离理想的 α_n 超晶格, 即原子层的变异和原子在界面的互扩散. 这两种因素使得到的超晶格偏离了理想的 α_n 超晶格, 这势必会影响

超晶格的发光效率, 但是影响达到多大程度以致超晶格变成不发光? 这个问题必须在投入昂贵的实验制备和研究前得到明确的答案. 为了检查原子层变异对 α_n 超晶格发光效率的影响, 把 $\alpha_{12} = \text{SiGe}_2\text{Si}_2\text{Ge}_2\text{SiGe}_{12}$ 超晶格中缓冲层的某层Ge原

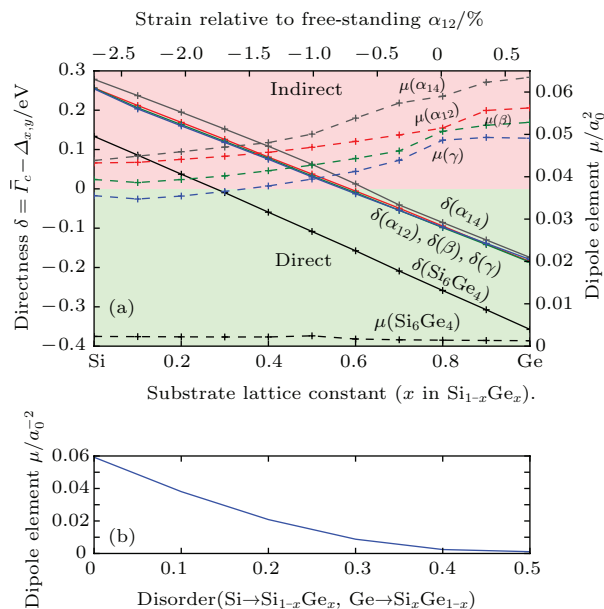


图4 (a) 对于直接带隙发光材料必须满足两个条件: (i) CBM和VBM位于布里渊区的同一个 k 点, (ii) CBM和VBM间的光学跃迁是允许的, 也就是它们间的动量矩阵元很大; 在此给出了几个Si/Ge超晶格的这两个性质, 以及它们随 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 衬底中Ge组分改变的变化, 其中实线代表导带态 $\bar{\Gamma}_c$ 和 $\bar{\Delta}_c$ 间的能级差, 如果条件(i)满足, 那么这个能级差应该是正的; 虚线表示在 $\bar{\Gamma}$ 点CBM和VBM间的光学跃迁矩阵元; (b) 合金效应或原子互扩散引起的无序对超晶格带隙光学跃迁矩阵元的影响. 在此, 合金无序定义为纯的Si(Ge)原子层被 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$)合金替换, x 则为无序参数, 对于 $x=0$ 没有无序, 对于 $x=0.5$ 变成完全无序

Fig. 4. (a) A dipole-allowed direct-gap material must present two distinct and necessary properties: (i) CBM and VBM are at the same location in crystal momentum space, and (ii) the transition between CBM and VBM is optically allowed. These two conditions are illustrated here for several optical friendly superlattices, with respect to the substrate $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$. The solid lines measure the energy difference between the conduction band $\bar{\Gamma}_c$ and $\bar{\Delta}_c$. It is positive only when (i) is satisfied. The dashed line represents the dipole elements between the VBM and conduction band at $\bar{\Gamma}$ -point. (b) Effect of interface mixing on dipole transitions: interface mixing is modeled by replacing pure Si with $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ and Ge with $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ within the magic pattern and its edge (defined as two monolayers). For $x=0$, there is no mixing, and at $x=0.5$, the pattern has disappeared completely, since there is no contrast between Si rich and Ge rich layers.

子变异为Si原子,变异后的超晶格成为 $\text{SiGe}_2\text{Si}_2\text{Ge}_2\text{SiGe}_2\text{SiGe}_9$,命名为 β 超晶格.继续变异可以得到 $\text{SiGe}_2\text{SiGe}_2\text{Si}_2\text{Ge}_2\text{SiGe}_2\text{SiGe}_6$ 这样一个 γ 超晶格.在图4(a)中给出了计算得到的 β 超晶格和 γ 超晶格的带边光跃迁矩阵元,我们可以发现它们的值要比 α_{12} 超晶格小,但是相差不是很大.所以得到的结论是原子层变异虽然对 α_{12} 超晶格的发光效率有一定影响,但是仍然保持了很高的发光效率.为了检查界面处的原子互扩散引起的无序合金对超晶格发光效率的影响,把 α_{12} 超晶格中的Si原子层用 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 合金代替,而Ge层则用 $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ 合金代替.在图4(b)给出了计算得到的合金无序对 α_{12} 超晶格带边光跃迁矩阵元的影响.从图中我们可以清楚地看到,无序合金会减小 α_{12} 超晶格的光跃迁矩阵元,随着合金无序度的增加跃迁矩阵元缓慢减小,在引入10%的合金后 α_{12} 超晶格的发光矩阵元减小到理想超晶格的60%.所以得到的结论是 α_{12} 超晶格的发光效率并不会因为少量无序合金的存在而显著降低,导致超晶格不发光.因此,通过逆向设计得到的神奇 α_{12} 超晶格是实际可制备的发光Si/Ge超晶格.

5 逆向设计直接带隙发光的Si/Ge纳米线

在过去40多年,半导体技术一直在摩尔定律的驱动下不断发展,晶体管技术发生了革命性的变化.晶体管从最初的火柴棒大小,发展到如今10亿个晶体管可以整合在一个一平方厘米的芯片上.随着晶体管的尺寸越来越小,门电压对沟道的控制能力随晶体管的减小在不断下降.根据半导体国际技术路线图(ITRS)^[27],到2023年达到4—6 nm的工艺制程后半导体晶体管将过度到纳米线晶体管技术,实现门电压栅极全方位包裹沟道,使得集成电路继续按照摩尔定律发展下去.为此,我们需要设计和开发硅纳米线发光器件,实现兼容未来纳米线晶体管技术的光电集成芯片.

二维超晶格的制备需要用到条件苛刻的超高真空MBE外延生长技术,而硅纳米线一般可以使用更加简单和低成本的气液固法来制备.基于气液固法生长的Si/Ge核-壳结构纳米线已经达到了很高的控制水平,并由于在纳米晶体管方面的潜在应用价值而吸引了广泛的研究兴趣.最近已经实现了一层一层的生长模式来制备高质量的核-多壳Si/Ge纳米线.这充分说明很快就可以实现在原子

尺度控制纳米结构的生长,从而迈向Si/Ge基纳米线光电集成技术.另外,硅纳米线显示出了在发光器件应用方面的其他潜在优越性质,如可以显著遏制激子的非辐射俄歇复合,硅纳米线和它所处环境的介电差异导致了很强的线性极化各向异性,从而使它成为理想的纳米线光子学平台.

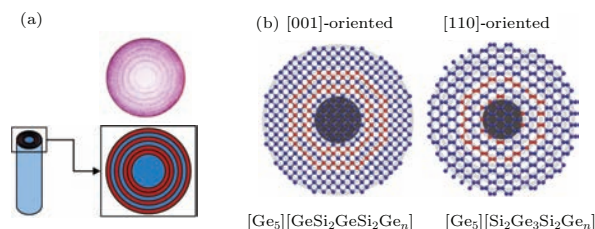


图5 Si/Ge核-多壳纳米线结构示意图 (a) Si/Ge核-多壳纳米线的横截面像洋葱的切面, Si或Ge核外面是Si/Ge交替的多个壳层; (b) 逆向设计的发光Si/Ge核-多壳纳米线, 对于[001]方向纳米线从中心往外分别是5层Ge原子作为核, 随后是 $\text{GeSi}_2\text{GeSi}_2\text{Ge}_n$ 作为壳, 对于[110]方向纳米线从中心往外分别是5层Ge原子作为核, 随后是 $\text{Si}_2\text{Ge}_3\text{Si}_2\text{Ge}_n$ 作为壳

Fig. 5. Schematic configuration of Si/Ge core-shell NWs: (a) The cross-section of Si/Ge core-shell NW is like an onion cross-section, Outside the Si or Ge core is a Si/Ge multishell; (b) inverse designed Si/Ge core-multishell NWs with highest oscillator strength. For [001]-oriented best NW, the NW core is 5 ML Ge and is then a $\text{GeSi}_2\text{GeSi}_2\text{Ge}_n$ multishell, whereas, for [110]-oriented best NW, the NW core is 5 ML Ge and is then a $\text{Si}_2\text{Ge}_3\text{Si}_2\text{Ge}_n$ multishell.

类似逆向设计发光二维Si/Ge超晶格,结合基因遗传搜索算法和原子尺度的验证势能带结构计算的方法,骆军委和他的合作者还逆向设计了发光Si/Ge核-多壳纳米线^[6],得到的纳米线核-壳结构的横截面如图5所示.对于普通的Si核Ge壳或者Ge核Si壳纳米线,价带边波函数主要分布在Ge原子上而导带边的波函数主要分布在Si原子上,这种电子和空穴分离的第二型能带排列有利于增加激子的寿命,但不利于激子的辐射复合发光.量子线只有沿量子线方向存在能带色散关系,来自Ge原胞的 Γ_{8v} 电子态形成了量子线价带边,位于一维布里渊区的 $\bar{\Gamma}$ 点,来自Si原胞的6个 Δ_{6c} 谷中的2个位于[001]晶向量子线的截面,另外4个在[110]晶向量子线中位于它的截面,所以通过能带折叠位于截面上的 Δ_{6c} 谷折叠到一维布里渊区的 $\bar{\Gamma}$ 点. Δ_{6c} 有效质量各向异性又导致位于 $\bar{\Gamma}$ 点的 Δ_{6c} 电子态受到的量子束缚能要小于非 $\bar{\Gamma}$ 点 Δ_{6c} 电子态的值,因此[001]晶向量子线和[110]晶向量子线在一维布里渊区成为直接带隙.对于[111]量子线,没有任何

Δ_{6c} 谷位于量子线的截面上, 所以即使在一维布里渊区它也是间接带隙. 如果要设计发光 Si/Ge 量子线, 就必须排除 [111] 量子线.

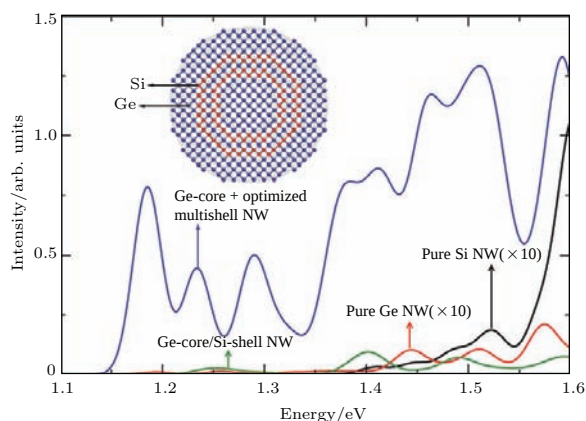


图6 [001] 晶向的纯 Si 纳米线、Ge 核/Si 壳纳米线, 和逆向设计的 $[\text{Ge}_5]\text{GeSi}_2\text{GeSi}_2\text{Ge}_{10}$ 核/多壳纳米线的光学吸收谱. 纳米线各自的带隙用垂直的箭头标识. 对发光强度很弱的纳米线光谱进行了相应的放大

Fig. 6. Absorption spectrum of [001]-oriented pure Si NW, pure Ge NW, (Ge-core)(Si-shell) NW, random alloy NW, and inverse designed $[\text{Ge}_5]\text{GeSi}_2\text{GeSi}_2\text{Ge}_{10}$ core-multishell NW. All these NWs have the same size. The bandgap values are marked with the vertical arrows having consistent color with those of absorption spectra. Some spectra with low intensity (not clearly seen) are amplified.

就像二维超晶格那样, 可以通过搜索 Si/Ge 原子层的神奇组合来得到高效发光的超晶格, 在一维 Si/Ge 纳米线中也可以通过 Si/Ge 界面势来调控晶体势场从而提高它的发光效率. 在纳米线中可以有两种不同方式来进行 Si/Ge 原子层的交替排列, 第一种就是沿纳米线轴方向交替改变 Si 和 Ge 原子层, 另外一种就是沿纳米线的径向方向交替改变 Si 和 Ge 原子层^[6], 形成类似洋葱的切面那样一圈一圈的图案, 每一圈代表一个 Si 层或者 Ge 层. 前一种方式可以理解为在二维超晶格的平面内加一个圆形限制, 也就是纳米线超晶格^[28]. 我们可以预期沿纳米线方向的 Si/Ge 原子层按照二维 α_n 超晶格那样进行排列应该可以得到同样高的发光效率, 具体的相关研究工作正在进行中. 后一种方式就是核-多壳结构, 假定纳米线的核固定为 5 个 Ge 原子层或 Si 原子层, 接下来是 15 个原子层作为纳米线的壳, 它的每层原子不是 Si 就是 Ge, 这样就有 16 个位置可以由 Si 或者 Ge 来进行填充, 所以总共有 2^{16} 种可能的组合方式. 类似二维超晶格中基因遗传算法搜索那样, 在纳米线基因遗传算

法搜索过程中, 100 个随机选择的纳米线作为第一代“居民”, 随后根据基因遗传算法一代一代地繁殖下去, 从而优化纳米线“居民”的发光效率. 发光最强的那个 Si/Ge 核-多壳纳米线在繁殖到 50 代后就出现了, 在随后的 200 代繁殖过程中虽然发光性能好的纳米线占总“人口”的比例越来越高, 但是没有其他纳米线的发光效率强于在 50 代就出现的发光最强纳米线, 这说明了搜索已经是达到收敛, 也就是在所有可能的纳米线中找到了发光最强的纳米线. 从搜索过程中可以知道, Ge 核纳米线的光跃迁矩阵元通常要比 Si 核纳米线大 3—4 倍. 通过基因遗传算法找到的发光最强 [001] 晶向纳米线为 5 层 Ge 原子的核加上 $\text{GeSi}_2\text{GeSi}_2\text{Ge}_9$ 作为纳米线的壳, 也就是 $[\text{Ge}_5]\text{GeSi}_2\text{GeSi}_2\text{Ge}_9$ 纳米线, 它的带边光跃迁矩阵元要比相同大小的纯 Si 纳米线大 3 个数量级, 比相同大小的普通 Ge/Si 核-壳纳米线大 2 个数量级. 在图 6 中比较了它们的光学吸收谱, $[\text{Ge}_5]\text{GeSi}_2\text{GeSi}_2\text{Ge}_9$ 纳米线的光吸收强度要显著大于相同大小的其他普通量子线. 发光最强的 [110] 晶向纳米线为 5 层 Ge 原子的核加上 $\text{SiGe}_3\text{Si}_2\text{Ge}_9$ 作为纳米线的壳, 也就是 $[\text{Ge}_5]\text{SiGe}_3\text{Si}_2\text{Ge}_9$ 纳米线, 它的带边光跃迁矩阵元同样要比相同大小的普通纳米线大 2—3 个数量级. 在图 7 中还比较了几个相同大小的 [001] 晶向纳米线的导带边波函数在倒格子空间的分布. 我们可以发现, 逆向设计的发光核-多壳 $[\text{Ge}_5]\text{GeSi}_2\text{GeSi}_2\text{Ge}_9$ 纳米线的波函数最大值位于 X 点外, 在 Γ 点有一个极大值, 而纯 Si 量子线和普通 Ge/Si 核-壳纳米线在 Γ 点的分布不可见, 这解释了为什么逆向设计的核-多壳纳米线的带边光跃迁矩阵元要比较其他普通纳米线大 2—3 个数量级.

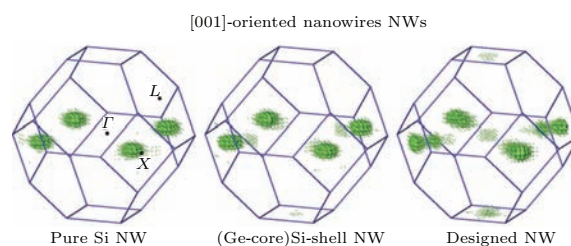


图7 [001] 晶向的纯 Si 纳米线、Ge 核/Si 壳纳米线, 和逆向设计的 $[\text{Ge}_5]\text{GeSi}_2\text{GeSi}_2\text{Ge}_9$ 核/多壳纳米线的导带边波函数在倒格子空间的分布

Fig. 7. The distribution of CBM wave function in the Si FCC Brillouin zone of a pure Si NW, Ge-core/Si-shell NW, and inverse designed optical friendly $[\text{Ge}_5]\text{GeSi}_2\text{GeSi}_2\text{Ge}_9$ core/multi-shell nanowires with the same size.

6 硅基发光材料基因组工作总结

大规模高性能的原子尺度经验势带结构计算方法安装上模拟达尔文物化进化的基因遗传算法引擎,以优化发光效率为目标,逆向设计出Si/Ge直接带隙超晶格,使它们的发光效率达到可实际应用的水平.这些直接带隙超晶格的单个周期Si和Ge的排列顺序为 $\text{SiGe}_2\text{Si}_2\text{Ge}_2\text{SiGe}_n$,其中 $n = 12\text{--}32$,因此这些神奇的超晶格被命名为 α_n ,它应该外延生长在 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($x > 0.6$)合金或者纯Ge衬底的(001)面上以确保在超晶格布里渊区形成直接带隙. α_n 超晶格的带边发光很强,它的带边发光跃迁矩阵元是以前文献中报道的发光最强的 Si_6/Ge_4 超晶格的50倍,达到GaAs等直接带隙半导体发光的10%.可以认为 α_n 超晶格是真正的直接带隙.通过检查超晶格中原子层变异和界面处原子互扩散等无序因素对 α_n 超晶格发光效率的影响,发现 α_n 超晶格在一定范围的无序扰动下仍旧可以保持比较高的发光效率,这说明在实际超晶格制备过程中允许一定程度的误差,确保了使用当前外延生长技术来制备逆向设计的 α_n 超晶格可以获得高发光效率.从光纤的损耗特性来看,光纤通信的理想工作波长是1.55 μm ,而逆向设计的 α_n 超晶格的带隙是0.77 eV,对应的发光波长为1.6 μm ,非常适合用于光纤通信. α_n 超晶格拥有Si/Ge超晶格兼容当前成熟的硅半导体CMOS技术的优势,确保了可以基于当前的半导体技术基础设施来大规模制造未来的光电集成芯片,这将大大降低它的投资和生产成本. α_n 超晶格的这些优越性质为实现光电集成器件提供了必要保障.相应的实验研究正在进行中.

使用相同的基因遗传搜索方法逆向设计了发光效率较高的Si/Ge核-多壳纳米线.逆向设计的发光最强[001]晶向纳米线为5层Ge原子作为纳米线的核加上 $\text{GeSi}_2\text{GeSi}_2\text{Ge}_9$ 作为纳米线的壳,它的带边跃迁矩阵元要比相同大小的纯Si量子线大3个数量级,比相同大小的普通Ge/Si核-壳纳米线大2个数量级.发光最强的[110]晶向纳米线为5层Ge原子作为纳米线的核加上 $\text{SiGe}_3\text{Si}_2\text{Ge}_9$ 作为纳米线的壳,它的带边跃迁矩阵元同样要比相同大小的普通纳米线大2—3个量级.根据国际半导体技术路线图ITRS,在2023年左右半导体晶体管将过渡到纳米线晶体管技术,逆向设计得到的高效发光Si/Ge纳米线提供了兼容的发光器件,为纳米线晶

体管为基础的光电集成技术奠定了基础.纳米线作为光子学平台已经显现出了独特的优异性能^[29],高效发光Si/Ge纳米线的出现提供了更加广阔的应用空间.值得注意的是,当前逆向设计的Si/Ge一维核-多壳纳米线的发光效率要比二维 α_n 超晶格低一个量级,对于实际应用它的发光效率还有待进一步提高,可选的方案包括上文中提到的纳米线方向生长Si/Ge超晶格.具体的研究还有待进一步展开.

开发出兼容硅电子工艺的硅基发光材料是一个长期的梦想,它是决定未来半导体信息产业发展方向的一个关键技术.科学家使用传统的材料开发模式,投入了大量的人力物力从多个方向进行了广泛研究,经过几十年的努力后仍旧没有开发出可实际应用的硅基发光器件.理论工作者发展了固体能带理论和能带间光跃迁矩阵元的理论模型,计算工作者借助现有的可精确计算低维硅量子结构的能带结构的计算工具,把带边光跃迁矩阵元作为衡量半导体发光效率的品质因子,结合模拟达尔文物种遗传的基因遗传算法对天文数字个潜在组态进行高效搜索,在非常短的时间内就找到了可实际应用的硅基发光材料.目前期待实验工作者能够顺利制备出理论设计的新(材料)结构,尽快完成硅基发光材料的验证工作,促进硅基发光相关器件的研制以及推动硅基光电集成技术的发展.这种有机整合了实验、理论、计算的新材料开发模式在此充分显示了它的力量和价值,这正是材料基因组计划追求的新材料开发的全新模式.

7 材料基因组计划的展望

材料基因组计划的核心被定义为实验、计算和理论的有机整合协同创新.从上面的硅基发光材料基因组的研究工作以及其他材料的基因组工作^[30],如硅基自旋量子比特^[4],催化材料^[31]、透明导电氧化物^[32]、太阳能电池材料^[33]、光催化分解水材料^[34]等,我们可以充分领会材料基因组计划的这个核心.材料基因组计划的工作流程大致为,理论工作者提出新的应用并发展计算材料各种性质的物理模型,实验工作者提出新材料的挑战,计算工作者发展精确的高性能计算工具,在深入理解应用对新材料提出的挑战后,从应用对新材料的各种要求中提炼出衡量材料性能的品质因子^[30].这个品质因子对于硅基发光材料是带边跃迁矩阵元,对于硅基自旋量子比特是谷间能级劈裂,对于其他几个列举

的应用可参见文献[30]。然后,使用高性能和高精度计算工具对大批量的材料或者给定组分进行结构搜索,从而根据品质因子筛选出理想材料。把计算数据反馈给实验,实验数据再次反馈给理论和计算进行理论模型和计算工具的再优化,这有助于进一步提高计算工具的精确性,做到计算数据和实验数据的自治相融。依赖相对廉价的计算模拟来进行大规模搜索,把候选的材料范围缩小到一个非常小的范围后交给实验工作者进行有目的的实验制备,实验成功制备出高质量的新材料后进入下一步的器件开发阶段。这样一个全链条的材料基因组新材料开发模式可以显著缩短新材料的开发周期并降低开发成本。

对比传统的试错法材料开发模式和全链条的材料基因组新模式后,我们可以发现找到一个可高精度和快速计算的材料品质因子是各种材料基因组计划的关键。面对不同的应用,品质因子是决然不同的。这需要计算工作者深入了解实验面临的新材料挑战,与实验工作者一起完善品质因子的理论模型和计算方法,这就要求材料基因组项目应该在一个大的实验平台或研究机构中进行实施。

一个共享的数字化数据的基础设施是紧密联系不同学科、领域、方法、层次的研究人员的一个纽带[35]。这个数据库必须是高度标准化的,它不仅可以存储包罗万象的各种数据,而且让研究人员和开发人员便于访问和乐意访问,让使用者意识到工具和数据的存在,同时可以快速准确地检索,提供各种程序语言的统一访问接口。但是创建这个数据库的工作对于包括材料科学与工程等很多学科都是一个巨大的挑战。不同应用的材料具有不同的物理和化学性质,这对于建立一个统一的数据库是一个挑战;还必须平衡安全要求与数据可用性及可发现性;制定描述数据和评估数据质量标准;实现重用单个数据集和数据分析技术的应用;检查大量不同来源的数据聚合;确保数据的正确性和错误数据的可探测性。

固态晶体按照常温下导电性能区分为(金属)导体、半导体和绝缘体。半导体材料按照带隙又可以分为窄带隙半导体(带隙小于1 eV)、一般半导体(带隙宽度为1—3 eV)和宽带隙半导体(带隙大于3 eV)。半导体材料包括普通的IV族元素半导体,III-V族、II-VI族等二元化合物半导体,钙钛矿等三元化合物、CIGS和CZTS等四元化合物和甚至更多元的化合物半导体。半导体材料广泛应用于微电子产业、光电子产业、固体照明产业、半导体显示技

术、各种探测器和夜视仪、太阳能电池光伏产业、潜在的光催化分解水制氢、热电和固体制冷等清洁能源等领域。影响半导体应用的材料物性丰富,物理过程也非常复杂,主要包括半导体掺杂、缺陷、有效质量、带隙、声子、激子、极子、辐射复合发光、非辐射复合发光、自旋-轨道耦合效应、俄歇过程等。这些因素决定了半导体材料基因组计划是一项非常具有挑战的工程。

参考文献

- [1] USA National Science and Technology Council 2011 *Materials Genome Initiative for Global Competitiveness* <https://www.whitehouse.gov/mgi> [2011-6]
- [2] USA National Science and Technology Council 2014 *Materials Genome Initiative Strategic Plan* <https://www.whitehouse.gov/mgi> [2014-1-1]
- [3] Wang S Q, Ye H Q 2013 *Chin. Sci. Bull.* **58** 3623 (in Chinese) [王绍青, 叶恒强 2013 科学通报 **58** 3623]
- [4] Zhang L, Luo J, Andre S 2013 *Nat. Commun.* **4** 2396
- [5] d'Avezac M, Luo J W, Thomas C, et al. 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 027401
- [6] Zhang L, d'Avezac M, Luo J W, et al. 2012 *Nano Lett.* **12** 984
- [7] Tsybeskov B L, Lockwood D J 2009 *Proc. IEEE* **97** 1161
- [8] Reed G T, Mashanovich G, Gardes F Y, et al. 2010 *Nat. Photon.* **4** 518
- [9] Tsybeskov L, Lockwood D J 2009 *Proc. IEEE* **97** 1284
- [10] Liang D, Bowers J E 2010 *Nat. Photon.* **4** 511
- [11] Tanabe K, Watanabe K, Arakawa Y 2012 *Sci. Rep.* **2** 349
- [12] Mi Z, Yang J, Bhattacharya P, et al. 2009 *Proc. IEEE* **97** 1239
- [13] Vinh N Q, Ha N N, Gregorkiewicz T 2009 *Proc. IEEE* **97** 1269
- [14] Priolo F, Gregorkiewicz T, Galli M, et al. 2014 *Nat. Nanotechnol.* **9** 19
- [15] Menczigar U, Abstreiter G, Olajos J, et al. 1993 *Phys. Rev. B* **47** 4099
- [16] Schmid U, Lukes F, Hristensen N, et al. 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 1933
- [17] Zachai R, Eberl K, Abstreiter G, et al. 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 1055
- [18] Weber J, Alonso M I 1989 *Phys. Rev. B* **40** 5683
- [19] Froyen S, Wood D M, Zunger A 1987 *Phys. Rev. B* **36** 4547
- [20] Gnatzmann U, Clausecker K 1974 *Appl. Phys.* **3** 9
- [21] Zhao X, Wei C M, Yang L, et al. 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 236805
- [22] Li D X, Feng J Y 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 243117
- [23] Wang L W, Zunger A 1999 *Phys. Rev. B* **59** 15806
- [24] Luo J W, Chanti A N, van Schilfgaarde M, et al. 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 066405
- [25] Wang L W, Bellaiche L, Wei S H, et al. 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 4725
- [26] Hybertsen M S 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 1514

- [27] International Technology Roadmap for Semiconductors 2013 [http:// public.itrs.net](http://public.itrs.net) [2015-04-01]
- [28] Gudiksen M S, Lauhon L J, Wang J, *et al.* 2002 *Nature* **415** 617
- [29] Yan R, Gargas D, Yang P 2009 *Nat. Photonics* **3** 569
- [30] Curtarolo S, Hart Gus L W, Nardelli M B, *et al.* 2013 *Nat. Mater.* **12** 191
- [31] Greeley J, Jaramillo T F, Bonde J, *et al.* 2006 *Nat. Mater.* **5** 909
- [32] Hautier G, Miglio A, Ceder G, *et al.* 2013 *Nat. Commun.* **4** 2292
- [33] Yu L, Zunger A 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 068701
- [34] Castelli I E, Olsen T, Datta S, *et al.* 2012 *Energy Environmental Sci.* **5** 5814
- [35] McDowell D L, Tinkle S 2013 *Nature* **53** 463

SPECIAL ISSUE—Physics and devices of silicon photonics

Semiconductor Materials Genome Initiative: silicon-based light emission material*

Luo Jun-Wei[†] Li Shu-Shen

(State Key Laboratory of Superlattices and Microstructures, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences,
Beijing 100083, China)

(Received 7 April 2015; revised manuscript received 12 May 2015)

Abstract

The purpose of the semiconductor Materials Genome Initiative is to discover, develop, and deploy new materials in such a way that the research and development period is reduced to a half of original period, and the cost to a fraction of the present cost, thereby speeding up the advance of clean energy source, state security, and human welfare, through the organic integration of experiment, computation and theory. Semiconductors play a key role in developing technologies and industries relating to economy, state security, and human welfare. The implement of the semiconductor materials genome initiative will promote the development of semiconductor science and technology into a new era. In this paper, we present a demo of the semiconductor material genome project through introducing our early work on designing silicon-based light emission materials. We first briefly review the status of development of silicon-compatible light emission and challenges facing it. We then demonstrate the power and value of semiconductor materials genome initiative by presenting our recent work on the inverse design of strongly dipole-allowed direct bandgap two-dimensional Si/Ge superlattices and one-dimensional Si/Ge core/multi-shell nanowires, respectively, from two indirect-gap materials (Si and Ge). We use a combination of genetic algorithms with an atomistic pseudopotential Hamiltonian to search through the astronomic number of variants of $\text{Si}_n/\text{Ge}_m/\cdots/\text{Si}_p/\text{Ge}_q$ stacking sequences. We finally give a short perspective of semiconductor materials genome initiative.

Keywords: Materials Genome Initiative, silicon-based light emission, superlattice, nanowire

PACS: 78.67.-n, 73.22.-f, 71.15.-m

DOI: 10.7498/aps.64.207803

* Project supported by the Collaborative Innovation Center of the Quantum Information and Quantum Technology Frontier (2011 Project), the National Young 1000 Talents Plan, and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61474116).

[†] Corresponding author. E-mail: jwluo@semi.ac.cn

高迁移率 Ge 沟道器件研究进展

安霞 黄如 李志强 云全新 林猛 郭岳 刘朋强 黎明 张兴

Research progress of high mobility germanium based metal oxide semiconductor devices

An Xia Huang Ru Li Zhi-Qiang Yun Quan-Xin Lin Meng Guo Yue Liu Peng-Qiang Li Ming Zhang Xing

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 64, 208501 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.208501

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.208501>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I20>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

非制冷红外探测器读出电路的非均匀性研究

[Non-uniformity study on readout circuit for uncooled IR detector](#)

物理学报.2015, 64(11): 118503 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.118503>

不同退火方式对 Ni/SiC 接触界面性质的影响

[Effect of different annealing treatment methods on the Ni/SiC contact interface properties](#)

物理学报.2015, 64(6): 067303 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.067303>

恒定温度应力加速实验失效机理一致性快速判别方法

[Rapid identification of the consistency of failure mechanism for constant temperature stress accelerated testing](#)

物理学报.2013, 62(6): 068502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.068502>

SOI SONOS EEPROM 总剂量辐照阈值退化机理研究

[Threshold voltage degradation mechanism of SOI SONOS EEPROM under total-dose irradiation](#)

物理学报.2011, 60(9): 098502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.098502>

基于 SOI 技术的单层多晶 EEPROM 和 SONOS EEPROM 抗总剂量辐照特性研究

[Total dose characteristics of single poly EEPROM and SONOS EEPROM on SOI](#)

物理学报.2011, 60(2): 028502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.028502>

专题: 硅基光电子物理和器件

高迁移率 Ge 沟道器件研究进展*

安霞 黄如† 李志强 云全新 林猛 郭岳 刘朋强 黎明 张兴

(北京大学微纳电子学研究院, 微电子器件与电路教育部重点实验室, 北京 100871)

(2015 年 7 月 14 日收到; 2015 年 8 月 28 日收到修改稿)

高迁移率 Ge 沟道器件由于其较高而且更对称的载流子迁移率, 成为未来互补型金属-氧化物-半导体 (CMOS) 器件极有潜力的候选材料. 然而, 对于 Ge 基 MOS 器件, 其栅、源漏方面面临的挑战严重影响了 Ge 基 MOS 器件性能的提升, 尤其是 Ge NMOS 器件. 本文重点分析了 Ge 基器件在栅、源漏方面面临的问题, 综述了国内外研究者们提出的不同解决方案, 在此基础上提出了新的技术方案. 研究结果为 Ge 基 MOS 器件性能的进一步提升奠定了基础.

关键词: 高迁移率沟道, 栅工程, 源漏工程, 金属-氧化物-半导体

PACS: 85.40.-e, 73.40.Cg, 73.30.+y, 73.40.Qv

DOI: 10.7498/aps.64.208501

1 引言

随着集成电路技术的飞速发展, 传统体硅互补型金属-氧化物-半导体 (CMOS) 器件难以解决特征尺寸缩小所带来的问题, 面临着严峻的挑战. 迁移率的提升成为保持晶体管性能的关键因素之一. 应变硅技术作为一种迁移率增强技术, 自 90 nm 技术代开始在工业界中得到广泛应用^[1,2]. 然而, 工业界中采用的应变硅技术为工艺诱导应变技术, 依赖于工艺中应力层的厚度和体积. 随着器件间距 (pitch) 的缩小, 导致引入应力层的体积变得越来越小, 因此减弱了载流子迁移率的提升效果, 使得器件性能难以如预期的提高^[3,4].

为了进一步提升 MOS 器件乃至集成电路性能, 引入高迁移率沟道材料, 如 Ge, III-V 族材料, 成为未来 CMOS 技术发展的必然趋势^[5-8]. Ge 材料具有较高而且更对称的载流子迁移率 (电子迁移率约为 Si 的 2.5 倍、空穴迁移率约为 Si 的 4.4 倍), 并且与硅基 CMOS 工艺兼容, 被认为是高性能 CMOS 器件极具潜力的候选材料, 也成为近年来国际前沿研究热点之一^[5,6]. 目前, Ge PMOS 器件已取得了良好的进展^[6,9-11], 包括新结构如 Ge FinFET 器件的演示. 在 2015 年集成电路技术研讨会 (VLSI) 上, 美国 Purdue 大学^[12] 首次报道了 Ge 3D FinFET 反相器, 展示出了良好的性能. 然而, 对于 Ge 基器件, 栅介质与 Ge 沟道间的界面问题始终是限制其性能提升的关键因素之一, 与 Si/SiO₂ 体系相比, 还有进一步改善的空间. 尤其是对于 Ge NMOS 器件, 由于 n 型杂质在 Ge 中的固溶度较低、激活率较低, 而且扩散速率很快, 因此非常难以形成重掺杂浅结; 同时, 由于费米能级钉扎效应, 导致电子肖特基势垒很大, 使得金属/n-Ge 的接触电阻率较高, 也不利于 Ge NMOS 器件性能的提升. 因此, 高性能 Ge NMOS 器件的实现仍面临着严峻的挑战. 针对上述问题, 本文从栅、源漏方面对 Ge 基器件面临的问题进行了分析, 并对国际上相关研究进展进行了介绍, 在此基础上提出了新的技术方案并进行了实验验证.

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2011CBA00601)、国家自然科学基金 (批准号: 61421005, 61434007, 60806033, 61474004) 和国家科技重大专项 (02 专项) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: ruhuang@pku.edu.cn

2 栅工程研究

与Si/SiO₂体系不同, Ge的自然氧化物GeO₂性质不稳定, 具有水溶性, 而且达到一定温度(约400 °C)时容易和Ge衬底发生反应生成易挥发的GeO. 表面Ge原子容易外扩散, 造成Ge表面形貌变差, 栅介质/Ge沟道界面态密度高, 是影响Ge基器件性能的关键因素之一^[13-17]. 为了有效钝化界面态, 研究者们提出了多种解决方案, 如F^[18,19], Cl^[20,21], S^[22], Si^[23-25]钝化等, 但钝化效果不理想; 为了抑制GeO的生成与挥发, 日本的研究小组^[26-30]提出了高压氧化方法(high-pressure oxidation, HPO), 利用高温高压氧化生成GeO₂, 可有效抑制GeO的生成和挥发. 而且实验结果表明, 高压氧化与后续的低温氧气退火(low-temperature oxygen annealing, LOA)相结合可进一步改善其界面质量, 界面态密度最低可以降至 $10^{11} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$ 以下, 电子和空穴迁移率均可得到显著提升, 峰值迁移率分别可以达到 $1920 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ 和 $725 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$. 但高压氧化工艺条件苛刻, 氧化速率过快, 不适于小等效氧化层厚度(equivalent oxide thickness, EOT)器件的制备. 除高压氧化外, 也有研究者提出了臭氧氧化^[31]、氧等离子体氧化等^[32-33]方法来改善GeO₂及界面质量. 除上述方法外, 采用N₂O等离子体在低温条件下氧化生长高质量GeO₂也是有效方案之一^[34]. 除等离子体的低温特性外, 与O₂分子中O—O键相比(494 kJ/mol), 打断N₂O分子中N—O键所需能量更低(242 kJ/mol)^[35], 因此可在低温条件下

生长GeO₂. 采用N₂O等离子体氧化制备得到的MOS电容C-V特性如图1所示. 实验结果表明, 对于采用N₂O等离子体氧化得到的电容, 100 kHz下扫描得到的C-V曲线中耗尽区驼峰(hump)消失, 而且回滞特性也得到了明显改善, 界面态密度可降至 $3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$ 左右, 说明N₂O等离子体氧化技术可有效降低界面态密度, 改善界面质量.

与氧化物相比, Ge的氮化物具有较好的热稳定性, 而且可有效抑制Ge外扩散, 受到很多研究小组的关注. 最早报道的氮化方案是NH₃退火^[36,37], 但工艺温度偏高(约600 °C才能实现有效氮化), 而且氮含量偏低. 由于等离子体技术在工艺温度、离子活性等方面的优势, 可以在较低温度下实现Ge表面氮化, 而且还可以实现原位淀积高K栅介质, 是一种较有应用潜力的新技术. 基于PECVD系统, 我们提出了氮等离子体表面钝化(nitrogen-plasma-passivation, NPP)技术^[38], 可在低温下实现Ge表面钝化. 图2给出了NPP处理前后样品的X射线光电子谱(XPS)结果. 由图2可以看出, Ge 3d谱致分为三个峰, 分别为Ge-Ge(29.4 eV), Ge-N₄(31.5 eV)和GeO₂(32.9 eV), N 1s谱分为N-Ge₃(397.4 eV)和N-Ge-O(398.2 eV)两个峰, 而O 1s谱则分为GeO₂(532 eV)和N-Ge-O(531 eV)两个峰. 随着NPP处理时间增加, N的成分(Ge—N₄和N—Ge₃键)所占比例逐渐提高, 说明NPP钝化后Ge表面形成了Ge—N键.

经NPP处理后, 样品表面的粗糙度也得到了显著改善, 如图3所示, 这对于提升载流子迁移率非常重要. Ge表面粗糙度Ra由初始的2.4 Å左右降至1.9 Å左右, 这主要归因于Ge—N的形成降低

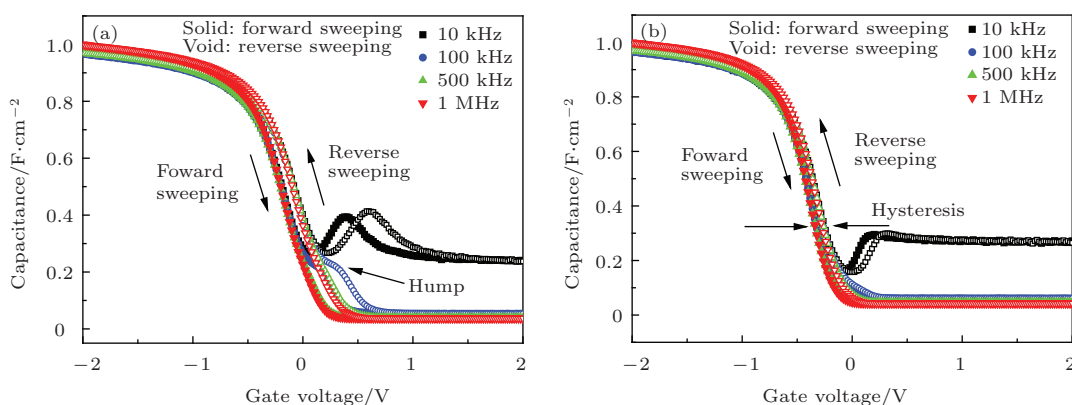


图1 未采用(a)和采用(b) N₂O等离子体氧化得到的样品MOS电容比较

Fig. 1. C-V characteristics of nMOS capacitor sample without (a) and with (b) N₂O plasma oxidation treatment.

了Ge的表面扩散势垒. 同时, 利用高频-低频电容方法对NPP处理前后的界面态进行了提取, 如图4所示. 经2 min NPP处理后, 界面态可以由对照组样品的 $2.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$ 降低到约 $9 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$, 这说明NPP方法可以实现Ge的表面钝化, 可有效降低界面态密度. 然而, 由于PECVD系统对工作压力和温度的限制, 使得NPP钝化条件下极易引入较厚的界面层, 不利于EOT

的缩小. 电感耦合等离子系统(ICP)具有更高的离子活性、可工作在更低温度下, 离子能量更低, 因此可以用于Ge表面氮化, 而且不会引起界面层的生长, 可同时实现界面钝化及对EOT的控制[39]. 另外, 通过在ICP的腔体壁与衬底之间施加加速功率, 可以在Ge表面引入更多的等离子体, 从而使钝化效果更有效, 实验结果也验证了这一点[39]. 将上述方法用于Ge NMOS器件的制备, 所制备出的

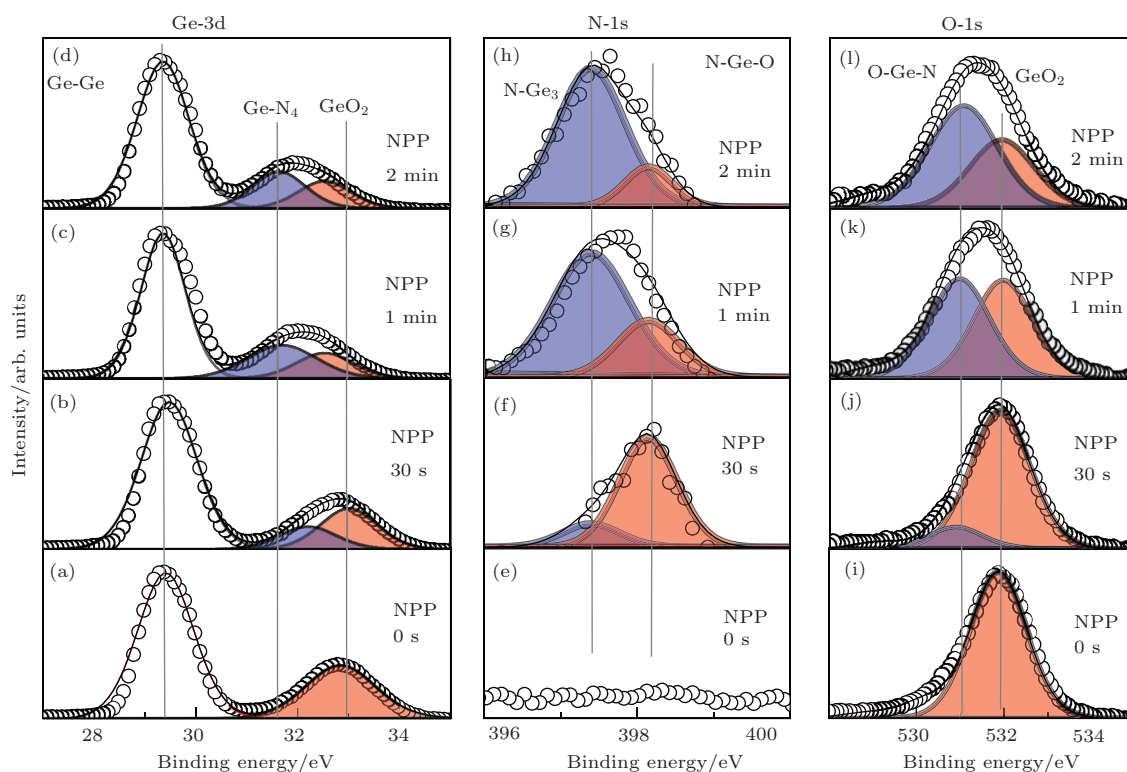


图2 XPS结果 (a)—(d) 为Ge-3d谱, (e)—(h) 为N-1s谱, (i)—(l) 为O-1s谱, NPP钝化时间为0—2 min.

Fig. 2. XPS results: (a)—(d) Ge-3d spectra; (e)—(h) N-1s spectra; (i)—(l) O-1s spectra. The passivation time is between 0–2 min.

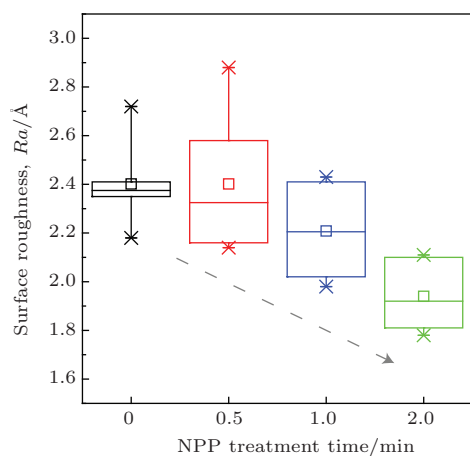


图3 表面粗糙度随NPP处理时间的变化

Fig. 3. The surface roughness as a function of NPP treatment time.

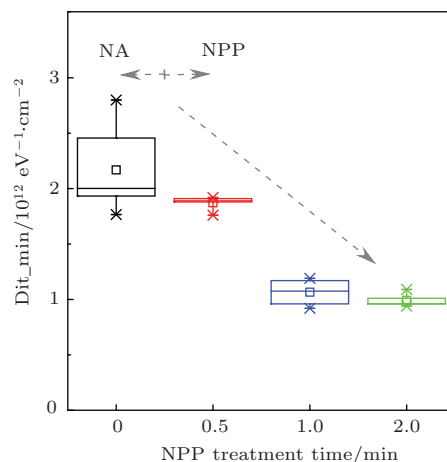


图4 界面态随NPP处理时间的变化

Fig. 4. Dit_{min} as a function of NPP treatment time.

Ge NMOS 器件电子迁移率得到了显著提升, 如图 5 所示. 器件特性充分说明, NPP 钝化可有效抑制界面态, 从而提高了载流子迁移率, 表现出 Ge 材料优异的运输性能.

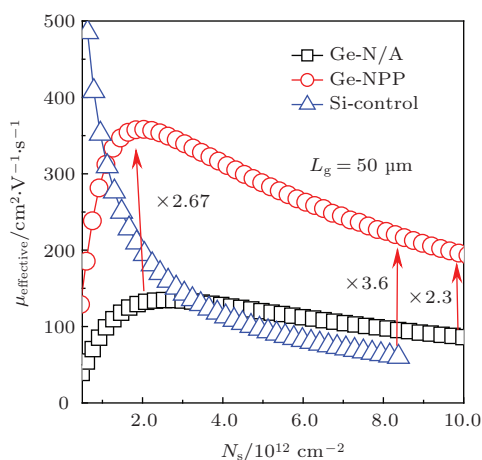


图 5 NPP 钝化得到的 Ge NMOS 器件的载流子迁移率提取结果, Si-control 为对照组 Si 器件

Fig. 5. The carrier mobility of Ge NMOS devices with and without NPP passivation, the electron mobility of the controlled Si devices is also shown for comparison.

对于栅工程, 除要求栅叠层结构具有优异的界面质量以降低界面态密度从而获得较高的载流子迁移率外, 还要求具有良好的 EOT 缩比能力及长期可靠性. 虽然目前 GeO₂ 界面层表现出最高的载流子迁移率, 但其本征的热不稳定性始终是限制其长期可靠性的重要因素. 在 2015 年的 VLSI 会议上, Lu 等 [40] 首次从可靠性角度对不同栅叠层结构 (HPO GeO₂, Y 掺杂的 GeO₂ (Y-GeO₂)) 进行了对比研究. 结果表明, 与 HPO GeO₂ 相比, Y-GeO₂ 虽然其初始界面质量不如 HPO GeO₂, 但施加电应力后, Y-GeO₂ 结构的 Dit 随应力时间的退化远低于 HPO GeO₂, 说明其长期可靠性优于 HPO GeO₂. 需要说明的是, 关于 Ge 基 MOS 器件或栅叠层结构可靠性问题的研究尚处于起步阶段, 相关研究还需进一步开展.

3 源漏工程研究

随着特征尺寸的缩小, 源漏串联电阻对器件性能的影响越来越大. 减小源漏串联电阻的关键是制备重掺杂源漏结. 同时, 为抑制小尺寸器件的短沟效应, 超浅结的实现也是必须的. 但是, Ge 基 MOS 器件中重掺杂超浅源漏结的实现却极具挑战, 尤其是对 NMOS 器件, 主要归因于以下几方面 [41–44]:

首先, 杂质在锗中的固溶度低; 其次, n 型杂质的激活率低; 第三, Ge 中 n 型杂质的扩散速率很快. 另外, 金属与 Ge 接触时, 由于界面处存在较多的界面态使得费米能级被钉扎在价带附近, 空穴肖特基势垒很小, 但电子肖特基势垒很大, 使得金属/n-Ge 的接触电阻率通常比较高 [45–47].

3.1 Ge 中 n 型杂质激活率的提高及扩散的抑制

目前, Ge 中 p 型杂质的激活浓度已经能达到 $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, 但 n 型杂质的激活浓度却被限定在 $2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 左右 [43,48]. 针对上述问题, 研究者们提出了一些改进的方案, 如采用等离子浸没式注入 [49]、激光退火 [50]、闪光退火 [51], P/Sb 共注入 [52]、低温注入 [53]、金属诱导杂质激活 [54]、旋涂掺杂剂等 [55], 可以在一定程度上提高杂质的激活浓度.

影响 Ge 中 n 型杂质激活浓度的一个关键因素就是离子注入过程引入的大量点缺陷 (如空位-间隙对), 这些缺陷不仅会加速杂质原子的扩散, 同时其在 Ge 禁带中会表现为受主态进而补偿施主浓度, 导致 Ge 中 n 型杂质的电激活浓度较低 [43]. 通过采用多次注入多次退火技术 (multiple implantation and multiple annealing, MIMA), 可以有效减少注入引入的缺陷, 并通过退火使大部分的缺陷得到修复, 从而增强 n 型杂质的激活浓度 [56]. 图 6 给出了单次注入和多次注入样品的扩展电阻探针 (spreading resistance profile, SRP) 电学浓度分布图. 从图 6 可以看出, 单次注入样品杂质的电学激活浓度为 $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, 与已报道的采用 RTP 激活所得到的结果一致; 而 MIMA 样品得到的电学激活浓度超过了 $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, 约有一个数量级的提升. 由于杂质激活浓度的提升, 使得金属/Ge 接触电阻率显著降低. 图 7 给出了不同方法得到的 Al/Ti 与 n-Ge 的接触电阻率比较 [50,57–60]. 由图 7 可以看出, 目前文献报道较好的结果是采用激光退火和 P/Sb 共注入的方式, 所获得的电阻率分别下降到了 7×10^{-7} 和 $8 \times 10^{-7} \Omega \cdot \text{cm}^2$ [50,58], 而采用 MIMA 基于 RTP 退火所获得的电阻率低至 $3.8 \times 10^{-7} \Omega \cdot \text{cm}^2$, 是通过增强杂质激活浓度方法获得的最小的接触电阻率 [56]. 同时, 通过 MIMA 技术, 锗 n⁺/p 结的电学性能也得到了明显提升, 如图 8 所示. 采用多次注入方法使 n⁺/p 结的正向电流得到了一个数量级的提升.

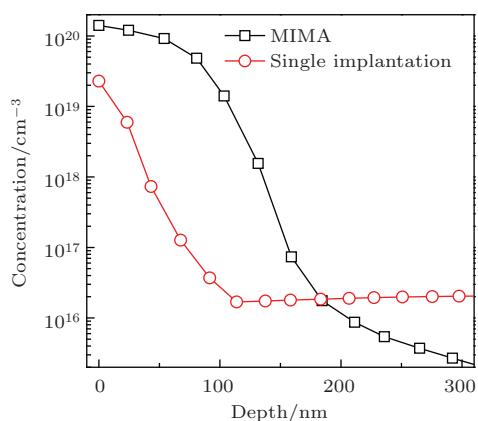


图6 单次注入和多次注入的SRP测试结果

Fig. 6. SRP profile of MIMA and single-implantation samples.

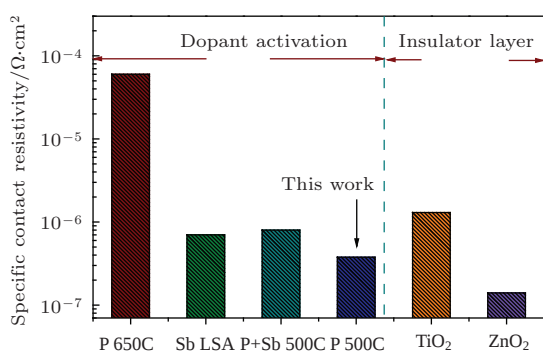
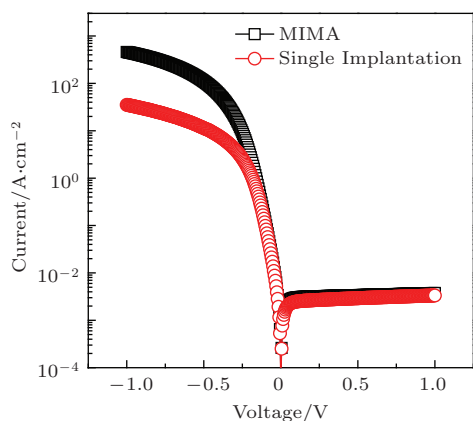


图7 不同实验方法得到的接触电阻率比较

Fig. 7. Comparison of specific contact resistivity achieved by different methods.

图8 单次注入和多次注入方式制备的Ge n⁺/p结的I-V特性比较Fig. 8. The comparison of I - V characteristic of Ge n⁺/p junctions fabricated by MIMA and single-implantation methods.

除上述方法外, 固相外延 (solid phase epitaxy, SPE) 方法可以在较低温度下退火使得预非晶层重新结晶并且获得较好的单晶质量, 有效恢复注入引入的缺陷, 从而可以抑制锗中n型杂质的扩散并提

高n型杂质的激活率, 是一种非常有效的解决方案. 实验结果已验证了这一点^[61].

3.2 肖特基势垒调控技术研究

为降低接触电阻率, 除增大杂质激活浓度外, 还可降低势垒高度. 然而, 对于金属/Ge接触, 由于费米能级被钉扎在锗价带附近, 所形成的电子势垒高达0.58 eV^[45,46], 不利于Ge NMOS器件性能的提升. 尽管关于费米能级钉扎 (Fermi level pinning, FLP) 的机理还在讨论中, 但金属与半导体界面的缺陷态是导致FLP的关键因素, 或源于半导体中的点缺陷, 或源于金属诱致能隙态 (metal induced gap state, MIGS)^[62–65]. 目前报道了通过在金属和Ge之间插入超薄绝缘介质层的方法来抑制MIGS, 减弱费米能级钉扎效应从而降低电子势垒高度, 如插入GeO_x^[66], Al₂O₃^[67], TiO₂^[68], Ge₃N₄^[69], Si₃N₄^[70], Y₂O₃^[71]等. 另外, 也有研究者提出采用S, Se等VI族元素来钝化金属/Ge接触界面的界面态, 亦可缓解费米能级钉扎效应, 降低电子势垒高度^[72–74]. 然而, 上述方法只适用于调节电子势垒高度, 而且插入绝缘介质层引入的隧穿电阻会在一定程度上限制器件的驱动电流.

杂质分凝 (dopant segregation) 通过在金属和半导体界面形成一高浓度的杂质区, 该薄界面层宽度窄, 处于完全耗尽的状态, 并在界面处形成偶极子使半导体表面的能带发生弯曲, 从而实现对肖特基势垒的有效调制. 而且, 通过注入不同类型的杂质可同时实现电子、空穴势垒的调节, 具有工艺简单、与传统CMOS工艺完全兼容等优势, 因而在Si基器件中备受关注^[75–77]. 杂质分凝技术可分为先注入和后注入两种, 二者在硅基器件中均有应用. 而对于Ge基器件, 目前报道侧重于前者, 即IBG (implantation before germanidation)^[78]. 然而, 与Si材料相比, Ge对离子注入损伤更加敏感. 为了避免离子注入对Ge衬底的损伤, Ge基杂质分凝后注入 (implantation after germanidation, IAG) 可以避免IBG方法对衬底表面造成的损伤, 而且将注入退火工艺与锗化物的形成相分离, 工艺更灵活, 是一种非常有效的方法^[79,80]. 对于IAG技术, 后注入工艺 (注入能量、剂量) 及退火工艺 (退火温度、时间) 的选择是IAG技术的关键因素, 其对退火工艺十分敏感, 退火须采用低温工艺, 并且退火时间不宜过长. 通过优化工艺条件, 采用IAG方法实现了Ge基电子、空穴肖特基势垒高度的调控, 最低

可分别降低至 0.1, 0.06 eV [80,81]. 图 9 和图 10 分别给出了 BF_2 注入后、不同二次退火温度下 NiGe/n-Ge 肖特基二极管的 I - V 曲线及电子势垒高度和理想因子. 可以看出, 对于采用 IAG 技术的样品, 在 350—450 °C 间电子势垒高度约为 0.6 eV. 由于电子势垒高度和空穴势垒高度的和约为禁带宽度, 所以, 采用 IAG 技术后, 肖特基二极管的空穴势垒高度仅为 0.06 eV, 非常适合肖特基 PMOS 器件的应用. 而且, 理想因子为 1.03, 说明 NiGe/n-Ge 肖特基二极管的界面特性比较理想. 当二次退火温度升高至 500 °C 以上时, NiGe 薄膜会发生明显的退化, 使得 NiGe/n-Ge 肖特基二极管的界面特性变差, 隧穿电流明显增加. 图 11 则给出了注入 P 杂质后、不同二次退火温度下 NiGe/p-Ge 肖特基二极管的 I - V 曲线. 对于未注入的样品, 由于 NiGe/p-Ge 接触的费米能级被钉扎在 Ge 的价带附近, 空穴势

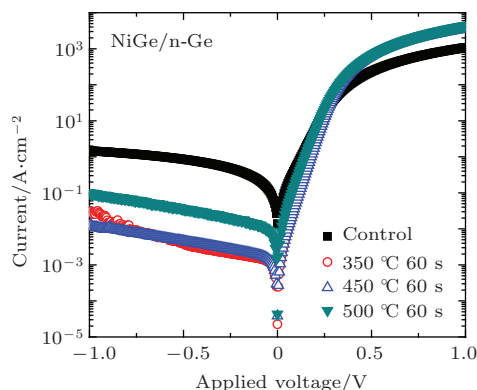


图 9 不同二次退火温度下 NiGe/n-Ge 肖特基二极管的 I - V 曲线比较

Fig. 9. I - V characteristics of NiGe/n-Ge diodes with and without IAG technique. The implantation ions are BF_2 .

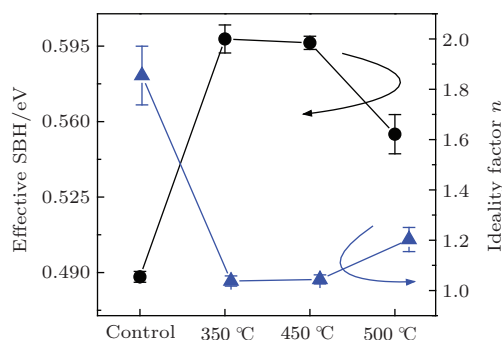


图 10 不同二次退火温度下 NiGe/n-Ge 肖特基二极管电子势垒高度和理想因子

Fig. 10. Effective electron SBH and ideality factor n of NiGe/n-Ge diodes with different drive-in annealing temperature. The optimized SB height is obtained between 350 and 450 °C.

垒非常低, 因而表现为欧姆特性. 注入杂质 P 后, 在 350—550 °C 杂质驱入退火温度范围内, 肖特基二极管的正向电流约有一个数量级的提高, 反向电流出现了大幅度降低. 在 500 °C 时, 注入 P 样品的空穴势垒为 0.56 eV, 即电子势垒降低到 0.10 eV, 如图 11 中的插图所示, NiGe/p-Ge 肖特基二极管实现了欧姆接触特性.

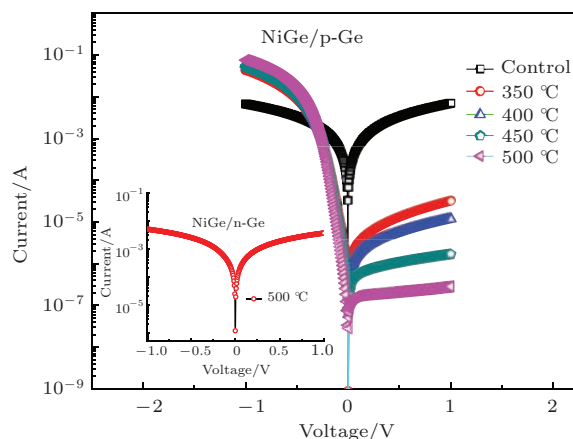


图 11 不同二次温度退火下肖特基二极管 I - V 特性比较, 注入杂质为 P

Fig. 11. I - V characteristics of NiGe/p-Ge (100) diodes with and without IAG technique. (Inset) I - V characteristics of NiGe/n-Ge (100) diodes with IAG technique.

图 12 给出了不同方法获得的 NiGe/Ge 接触的电子势垒高度. 文献 [75, 78] 中通过先注入杂质 P, As, S, 获得的电子势垒高度分别为 0.38, 0.19 和 0.15 eV. 而通过后注入 P 的方法, 获得的电子势垒高度为 0.10 eV. 这表明对于杂质分凝技术, 与先注入方法相比, 后注入方法能更有效地调节肖特基势垒高度. 这主要归于以下几方面. 首先, 对于先注入

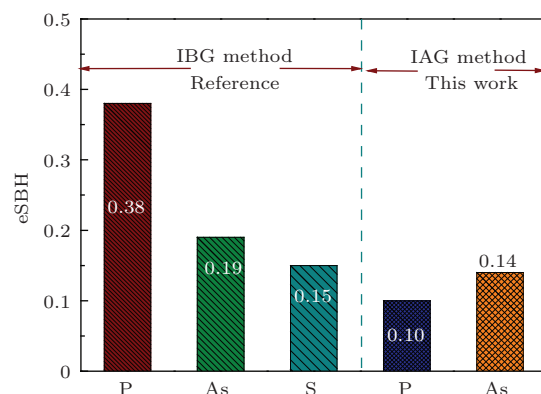


图 12 注入不同杂质所获得的肖特基电子势垒高度比较

Fig. 12. Electron SBH of published data and IAG modulated by dopant segregation with different species.

方法, 杂质在锗化物的形成过程中向锗衬底推进, 因而在 NiGe 形成过程中部分杂质可能扩散到离 NiGe/Ge 界面较远的位置而出现较严重的杂质“拖尾”现象, 导致杂质分凝效果不明显. 其次, 先注入方法容易在锗衬底中引入缺陷, 这些缺陷会加剧注入杂质在锗中的扩散. 由于后注入方法将杂质分凝和锗化物形成两个过程分开, 工艺控制更为灵活, 能有效避免先注入杂质分凝方法的缺点, 所以在锗基 MOS 器件应用中, 后注入杂质分凝方法更具有优势.

如前所述, IAG 方法对热处理工艺十分敏感, 温度不宜太高, 否则会退化 NiGe 薄膜质量, 进而对电学特性产生影响. 实验结果表明, 对于注入 P 杂质的样品, 当退火温度大于 500 °C 时, NiGe 薄膜发生凝聚效应, 表面出现空洞. 为了改善这一问题, 我们提出了 P/Sb 共注入技术^[81]. 结果表明, 对于 P/Sb 共注入的样品, 即使退火温度增加到 600 °C,

NiGe 薄膜表面仍然十分完好, 如图 13 所示. 而且表面粗糙度也优于单注入 P 的样品, 如图 14 所示. 这说明, P/Sb 共注入有助于提升 NiGe 薄膜的热稳定性, 至少可提高到 600 °C, 这主要归因于 Sb 对 Ge 表面的钝化以及对 NiGe/Ge 间应力释放两方面的共同作用^[81]. 同时, 与单纯注入 P 样品相比, P/Sb 共注入样品表现出更好的电学特性^[81], 如图 15 所示. 由图 15 可以看出, 对照组样品(没有注入杂质)的 I - V 曲线表现为典型的欧姆接触特性, 这是由于费米能级钉扎效应被钉扎在锗价带附近导致的; 对于注入 P 样品, 由于杂质 P 在接触界面发生分凝, 肖特基势垒得到有效调制(空穴势垒增加), 进而使反向泄漏电流相对于对照组样品有显著地下降; 而注入 P/Sb 共注入样品, 其反向泄漏电流相进一步减小了约 1 个数量级. 同时, 如图 15(b) 所示, 对于 NiGe/n-Ge 接触, 表现出了更好的欧姆接触特性.

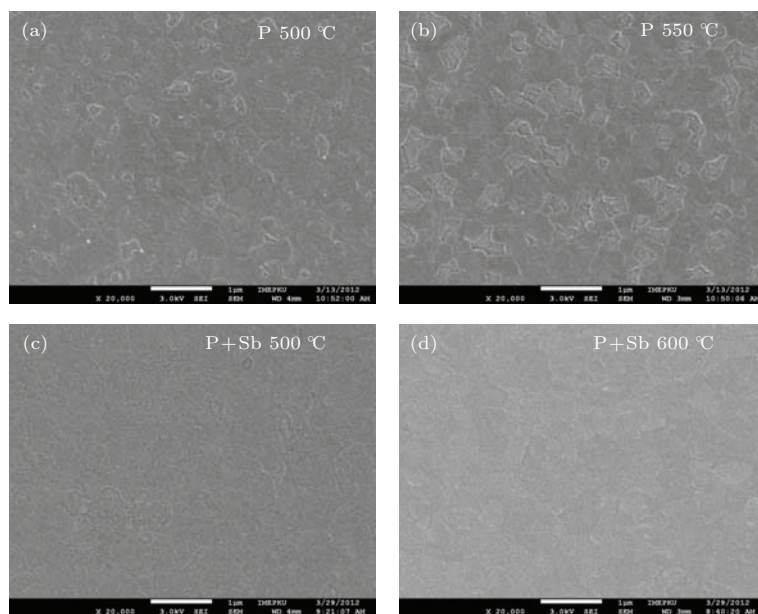


图 13 注入 P 和注入 P+Sb 样品在不同温度退火下的 NiGe 表面形貌

Fig. 13. SEM images of NiGe with implanting P and P + Sb at various post-germanidation annealing temperatures.

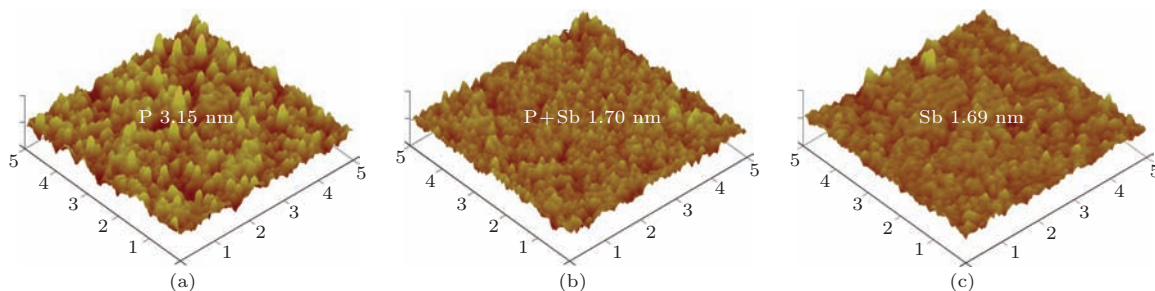
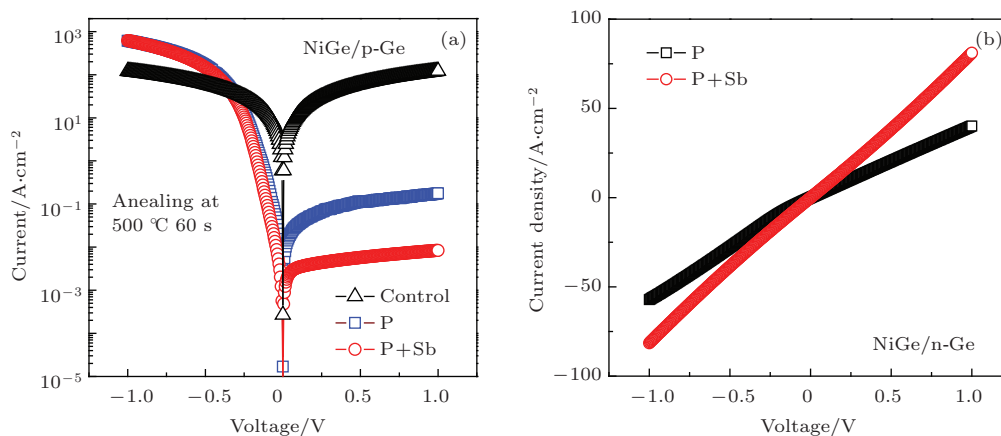


图 14 不同注入条件下 NiGe 薄膜表面粗糙度 (a) 注入 P; (b) 注入 P+Sb; (c) 注入 Sb

Fig. 14. AFM surface morphologies of P, P+Sb and Sb implanted samples after post-germanidation annealing at 500 °C: (a) P; (b) P+Sb; (c) Sb.

图 15 P/Sb 共注入对 NiGe/Ge 二极管的 I - V 特性的影响 (a) NiGe/p-Ge; (b) NiGe/n-GeFig. 15. I - V characteristics of NiGe/Ge diodes with P implantation and P/Sb co-implantation, respectively:

(a) NiGe/p-Ge; (b) NiGe/n-Ge.

3.3 NiGe 薄膜热稳定性改善技术研究

为了降低源漏寄生电阻的影响, 自对准硅化物技术在 Si 基 CMOS 集成电路中得到广泛应用. 同样, 锗化物也是 Ge 基 CMOS 集成技术的关键工艺之一. 与其他金属锗化物相比, NiGe 具有更低的形成温度、更低的电阻率以及锗消耗量小等诸多优势, 因此成为最具发展潜力的锗化物材料 [82,83]. 然而, NiGe 受成核凝聚的影响, 在较低温度下就会发生退化, 薄膜表面形成很多空洞, 进而影响器件性能. 因此, NiGe 的热稳定性问题亟待解决. 目前提出的改善 NiGe 热稳定性方法, 比如插入 Pt [84,85], Ti [86], Yb [87] 或 Pd 等 [88] 金属, 虽然有效但改善效果有限. 针对这一问题, 我们提出了一种简单有效地表面预处理方法: 氟化铵表面预处理 (ammonium fluoride pretreatment, AFP) 方法 [89], 并与文献中常采用的 HCl 和 HF 表面处理方法进行了对比, 结果如图 16、图 17 所示.

由图 16 和图 17 可以看到, 经 AFP 处理后,

NiGe 表面均方根粗糙度明显降低; NiGe 薄膜在 350—600 °C 温度范围内都表现出非常好的薄膜质量, 当退火温度上升到 700 °C 时, NiGe 薄膜发生明显的凝聚, 质量严重退化, 因此, 其热稳定性温度窗口上限至少可提高到 600 °C, 文献报道的反应退火时 NiGe 薄膜的温度窗口上限一般为 500 °C. 而且, AFP 处理后二极管电学特性也得到明显提升. 所以, AFP 表面预处理方法可以简单有效地使 NiGe 薄膜的热稳定性显著提升, 并扩展后续工艺的温度窗口, 这对于 Ge 基器件的集成非常重要. NiGe 薄膜热稳定性的改善主要是盐酸处理和氟化铵水溶液处理的共同作用. 与 HF 表面预处理方法相比, HCl 处理方法可以更加有效地去除 Ge 表面的自然氧化层, 获得平整的 Ge 衬底表面; 氟化铵水溶液的处理可以对 Ge 衬底表面进行有效地钝化, 有以下几方面的作用. 第一, 通过氟化铵水溶液的钝化处理, 可以得到疏水的氢钝化的表面, 减少氧的污染. 在反应退火过程中, 抑制一氧化锗气体的挥发, 减弱

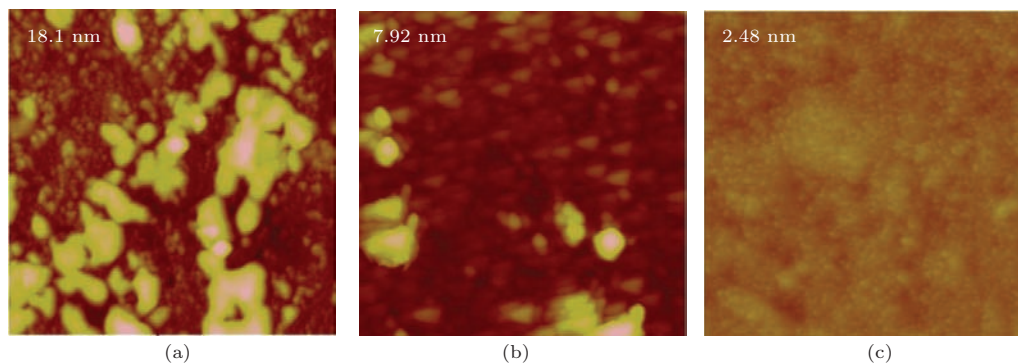


图 16 采用 3 种表面处理方法所生成的 NiGe 薄膜表面形貌 AFM 比较 (a) HCl; (b) HF; (c) AFP

Fig. 16. AFM topography images of NiGe films with different pretreatment methods: (a) HCl; (b) HF; (c) AFP.

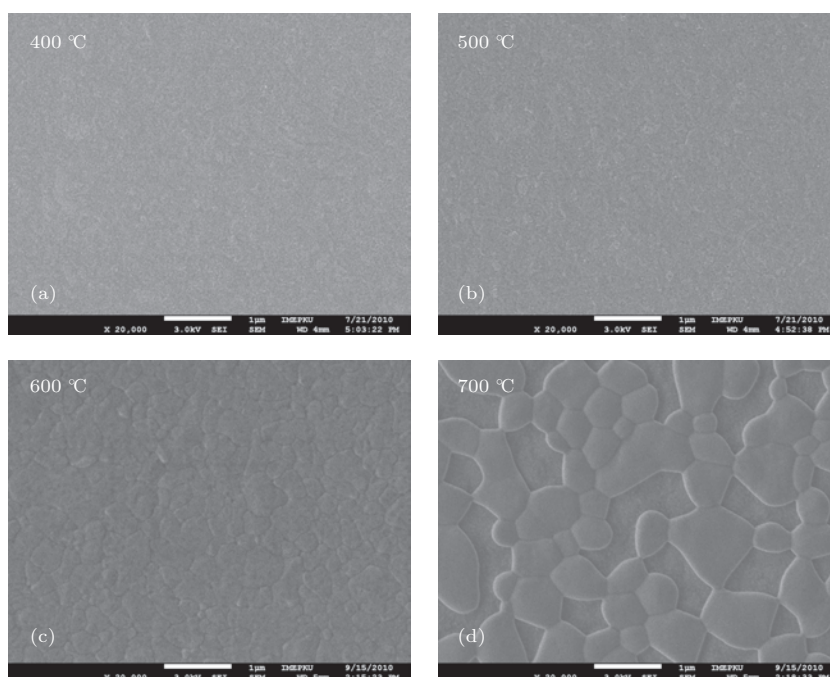


图 17 采用 AFP 表面预处理方法的 NiGe 薄膜在不同反应退火温度下的 SEM 照片

Fig. 17. SEM images of NiGe using AFP at various annealing temperatures.

锗外扩散现象, 界面退化. 第二, 经过氟化铵水溶液处理后, 锗衬底表面会生成化合物 $(\text{NH}_4)_2\text{GeF}_6$, 这会抑制锗表面氧化物的再生长, 从而改善生成的 NiGe 薄膜的质量. 第三, 经过氟化铵水溶液处理的锗衬底, 可以在锗衬底表面引入 F, 对形成的 NiGe 薄膜的晶粒间界进行钝化, 可以阻碍 NiGe 薄膜发生凝聚现象. 因而可以获得非常平整的表面, 提高热稳定性. 因此, 通过 AFP 表面预处理方法, 可以简单有效地改善 NiGe 薄膜的表面形貌并提升其热稳定性, 还可以对 NiGe/Ge 界面进行钝化, 而且该方法与传统 CMOS 工艺兼容, 不会增加工艺复杂性和成本.

4 总 结

随着集成电路技术的发展, 传统硅基 MOS 器件面临着严峻的挑战. 高迁移率 Ge 沟道器件由于其较高而且更对称的载流子迁移率成为国际前沿研究热点之一. 然而, 对于 Ge 基 MOS 器件, 其栅介质/锗沟道界面较差, 杂质在 Ge 中的固溶度较低、杂质激活率较低而且扩散快, 同时由于费米能级钉扎效应导致电子势垒较高, 严重影响了锗基 MOS 器件性能的提升, 尤其是 Ge NMOS 器件.

本文对上述问题进行了分析, 并对国内外研究者们提出的不同技术方案进行了介绍. 在此基础

上, 提出了新的方法, 并进行了实验验证. 结果表明, 新型 NPP 钝化方法可有效抑制 Ge 亚氧化物的生成, 减小界面态密度, 从而可以改善 Ge 器件栅介质/沟道界面质量, 研制出的 Ge NMOS 器件电子迁移率较对照组器件得到了显著提升. MIMA 技术可以有效减少注入引入的缺陷, 从而可以提高 n 型杂质在 Ge 中的激活浓度, 通过工艺优化, 成功将金属/n-Ge 的接触电阻率降低到了 $3.8 \times 10^{-7} \Omega \cdot \text{cm}^2$; 采用杂质后注入的杂质分凝技术, 通过优化的工艺条件, 电子势垒高度、空穴势垒高度分别降至 0.1 和 0.06 eV, 并得到了优化的工艺温度窗口. 研究结果表明, P/Sb 共注入及 AFP 预处理, 不仅有利于提升 NiGe 薄膜的热稳定性, 而且还有利于电学性能的提升, 本文对相关机理进行了分析. 上述研究结果为 Ge 基 MOS 器件的工艺集成设计及性能提升提供了新思路.

参考文献

- [1] Ghani T, Armstrong M, Auth C, *et al.* 2003 *International Electron Devices Meeting* Washington, DC, America, December 8–10, 2003 p978
- [2] Oishi A, Fujii O, Yokoyama T, *et al.* 2005 *International Electron Devices Meeting* Washington, DC, America, December 5–7, 2005 p229

- [3] Kim S D, Jain S, Rhee H, *et al.* 2010 *International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices* Bologna, Italy, Sept. 6–8, 2010 p79
- [4] Yang B, Nummy K, Waite A, *et al.* 2007 *Symposium on VLSI Technology* Kyoto, Japan, June 12–14, 2007 p126
- [5] Claeyes C, Simoen E 2007 *Germanium-Based Technologies: From Materials to Devices* (Amsterdam: Elsevier)
- [6] Mitard J, De Jaeger B, Leys F E, *et al.* 2008 *International Electron Devices Meeting* San Francisco, America, December 15–17, 2008 p873
- [7] <http://www.public.itrs.net> [2015-7-1]
- [8] Heyns M, Alian A, Brammertz G, *et al.* 2011 *International Electron Devices Meeting* Washington, DC, America, December 5–7, 2011 p299
- [9] Duriez B, Vellianitis G, van Dal M J H, *et al.* 2013 *International Electron Devices Meeting* Washington, DC, America, December 9–11, 2013 p522
- [10] Mitard J, Witters L, Loo R, *et al.* 2014 *Symposium on VLSI Technology* Honolulu, Hawaii, America, June 9–12, 2014 p138
- [11] Witters L, Mitard J, Loo R, *et al.* 2015 *Symposium on VLSI Technology* Kyoto, Japan, June 16–18, 2015 p56
- [12] Wu H, Luo W, Zhou H, Si M W, Zhang J Y, Ye P D 2015 *Symposium on VLSI Technology* Kyoto, Japan, June 16–18, 2015 p58
- [13] Bernstein R B, Cubicciotti D 1951 *J. Amer. Chem. Soc.* **73** 4112
- [14] Wang S K, Kita K, Nishimura T, Nagashio K, Toriumi A 2011 *Jpn. J. Appl. Phys.* **50** 10PE04
- [15] Kita K, Wang S K, Yoshida M, Lee C, Nagashio K, Nishimura T, Toriumi A 2009 *International Electron Devices Meeting* Baltimore, America, December 7–9, 2009 p693
- [16] Wang S K, Kita K, Nishimura T, Nagashio K, Toriumi A 2011 *Jpn. J. Appl. Phys.* **50** 04DA01
- [17] Wang S K, Kita K, Lee C, Tabata T, Nishimura T, Nagashio K, Toriumi A 2010 *J. Appl. Phys.* **108** 054104
- [18] Lee D, Lee H, Kanashima T, Okuyama M 2010 *Appl. Surf. Sci.* **257** 917
- [19] Xie R, Yu M, Lai M, Chan L, Zhu C 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 163505
- [20] Kamata Y, Ino T, Koyama M, Nishiyama A 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 063512
- [21] Dei K, Kawase T, Yoneda K, Uchikoshi J, Morita M, Arima K 2011 *J. Nanosci. Nanotech.* **11** 2968
- [22] Frank M M, Koester S J, Copel M, Ott J A, Paruchuri V K, Shang H, Loesing R 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 112905
- [23] Kaczer B, Jaeger B D, Nicholas G, Martens K, Degraeve R, Houssa M, Pourtois G, Leys F, Meuris M, Groesenken G 2007 *Microelectron. Eng.* **84** 2067
- [24] Wu N, Zhang Q, Zhu C, Chan D S H, Du A, Balasubramanian N, Li M F, Chin A, Sin J K O, Kwong D L 2004 *IEEE Electron Device Lett.* **25** 631
- [25] Bai W P, Lu N, Kwong D L 2005 *IEEE Electron Device Lett.* **26** 378
- [26] Crisman E E, Lee J I, Stiles P J, Gregory O J 1987 *Electron. Lett.* **23** 8
- [27] Lee C H, Nishimura T, Saido N, Nagashio K, Kita K, Toriumi A 2009 *International Electron Devices Meeting* Baltimore, MD, America, December 7–9, 2009 p457
- [28] Lee C H, Nishimura T, Tabata T, Wang S K, Nagashio K, Kita K, Toriumi A 2010 *International Electron Devices Meeting* San Francisco, CA, America, December 6–8, 2010 p416
- [29] Lee C H, Tabata T, Nishimura T, Nagashio K, Kita K, Toriumi A 2009 *Appl. Phys. Expr.* **2** 071404,
- [30] Lee C H, Nishimura T, Nagashio K, Kita K, Toriumi A 2011 *IEEE Trans. Electron Devices* **58** 1295
- [31] Kuzum D, Krishnamohan T, Pethe A J, Okyay A K, Oshima Y, Sun Y 2008 *IEEE Electron Device Lett.* **29** 328
- [32] Deng S R, Xie Q, Deduytsche D, Schaekers M, Lin D, Caymax M, Delabie A, van den Berghe S, Qu X P, De-tavernier C 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 052906
- [33] Fukuda Y, Yazaki Y, Otani Y, Sato T, Toyota H, Ono T 2010 *IEEE Trans. Electron Devices* **57** 282
- [34] Lin M, An X, Li M, Yun Q X, Li M, Li Z Q, Liu P Q, Zhang X, Huang R 2014 *Chin. Phys. B* **23** 067701
- [35] Lau W S, Qian P W, Sandler N P, McKinley K A, Chu P K 1997 *Jpn. J. Appl. Phys.* **36** 661
- [36] Chui C O, Kim H, McIntyre P C, Saraswat K C 2004 *IEEE Electron Device Lett.* **25** 274
- [37] Hymes D J, Rosenberg J J 1988 *J. Electrochem. Soc.* **135** 961
- [38] Yun Q X, Li M, An X, Lin M, Liu P Q, Li Z Q, Zhang B X, Xia Y X, Zhang H, Zhang X, Huang R, Wang Y Y 2014 *Chin. Phys. B* **23** 118504
- [39] Lin M, Li M, An X, Yun Q X, Li M, Li Z Q, Liu P Q, Zhang X, Huang R 2013 *Semicond. Sci. Tech.* **28** 085010
- [40] Lu C, Lee C H, Nishimura T, Toriumi A 2015 *Symposium on VLSI Technology* Kyoto, Japan, June 16–18, 2015 p18
- [41] Trumbore F A 1960 *Bell Syst. Tech. J.* **39** 205
- [42] Chui C O, Kulig L, Moran J, Tsai W, Saraswat K C 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 091909
- [43] Chui C O, Gopalakrishnan K, Griffin P B, Plummer J D, Saraswat K C 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 3275
- [44] Kim J, Bedell S W, Sadana D K 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 082112
- [45] Dimoulas A, Tsipis P, Sotiropoulos A, Evangelou E K 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 252110
- [46] Nishimura T, Kita K, Toriumi A 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 123123
- [47] Martens K, Firrincieli A, Rooyackers R, *et al.* 2010 *International Electron Devices Meeting* San Francisco, CA, America, December 6–8, 2010 p428
- [48] Brotzmann S, Bracht H 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 033508
- [49] Thareja G, Chopra S, Adams B, *et al.* 2010 *Device Research Conference* South Bend, Indiana, America, June 21–23, 2010 p23
- [50] Thareja G, Liang J, Chopra S, *et al.* 2010 *International Electron Devices Meeting* San Francisco, CA, America, December 6–8, 2010 p245
- [51] Wündisch C, Posselt M, Schmidt B, *et al.* 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 252107

- [52] Kim J, Bedell S W, Sadana D K 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 082112
- [53] Bhatt P, Swarnkar P, Misra A, Biswas J, Hatem C, Nainani A, Lodha S 2015 *IEEE Trans. Electron Devices* **62** 69
- [54] Park J H, Kuzum D, Tada M, Krishna C S 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 193507
- [55] Jamil M, Mantey J, Onyegam E U, Carpenter G D, Tutuc E, Banerjee S K 2011 *IEEE Electron Device Lett.* **32** 1203
- [56] Li Z Q, An X, Yun Q X, Lin M, Li M, Li M, Zhang X, Huang R 2013 *IEEE Electron Device Lett.* **34** 1097
- [57] Raghunathan S, Krishnamohan T, Saraswat K C 2010 *ECS Trans.* **33** 871
- [58] Thareja G, Cheng S L, Kamins T, Saraswat K, Nishi Y 2011 *IEEE Electron Device Lett.* **32** 608
- [59] Lin J Y, Roy A M, Saraswat K C 2012 *IEEE Electron Device Lett.* **33** 1541
- [60] Manik P P, Mishra R K, Kishore V P, Ray P, Nainani A, Huang Y C, Abraham M C, Ganguly U, Lodha S 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 182105
- [61] Liu P Q, Li M, An X, Lin M, Zhao Y, Zhang B X, Xia X X, Huang R 2015 *Silicon Nanoelectronics Workshop* Kyoto, Japan, June 14–15, 2015
- [62] Claeys C, Firrincieli A, Martens K, Kittl J A, Simoen E 2012 *8th International Caribbean Conference on Devices, Circuits and Systems* Playa del Carmen, Mexico, March 14–17, 2012 p1
- [63] Nishimura T, Kita K, Toriumi A 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 123123
- [64] Brillson L J 2007 *J. Vac. Sci. Techn. A* **25** 943
- [65] Heine V 1965 *Phys. Rev. A* **138** 1689
- [66] Nishimura T, Kita K, Toriumi A 2008 *Appl. Phys. Express* **1** 051406
- [67] Zhou Y, Ogawa M, Han X, Wang K L 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 202105
- [68] Lin J Y J, Roy A M, Nainani A, Sun Y, Saraswat K C 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 092113
- [69] Lieten R, Degroote S, Kuijk M, Borghs G 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 022106
- [70] Kobayashi M, Kinoshita A, Saraswat K, Wong H S P, Nishi Y 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 023702
- [71] Li Z Q, An X, Yun Q X, Lin M, Zhang X, Huang R 2012 *ECS Solid State Lett.* **1** Q33
- [72] Thathachary A V, Bhat K N, Bhat N, Hegde M S 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 152108
- [73] Tong Y, Liu B, Lim P S Y, Yeo Y C 2012 *IEEE Electron Device Lett.* **33** 773
- [74] Ikeda K, Yamashita Y, Sugiyama N, Taoka N, Takagi S 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 152115
- [75] Thornton R 1981 *Electron. Lett.* **17** 485
- [76] Yamauchi T, Nishi Y, Tsuchiya Y, Kinoshita A, Koga J, Kato K 2007 *International Electron Devices Meeting* Washington, DC, America, December 10–12, 2007 p963
- [77] Zhen Z, Qiu Z, Ran L, Ostling M, Zhang S L 2007 *IEEE Electron Device Lett.* **28** 565
- [78] Mueller M, Zhao Q T, Urban C, Sandow C, Buca D, Lenk S, Estevez S, Mantl S 2008 *Mater. Sci. Eng. B* **154** 168
- [79] Li Z Q, An X, Li M, Yun Q X, Lin M, Li M, Zhang X, Huang R 2012 *IEEE Electron Device Lett.* **33** 1687
- [80] Guo Y, An X, Huang R, Fan C H, Zhang X 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 143502
- [81] Li Z Q, An X, Li M, Yun Q X, Lin M, Li M, Zhang X, Huang R 2013 *IEEE Electron Device Lett.* **34** 596
- [82] Lee K, Liew S, Chua S, Chi D, Sun H, Pan X 2004 *Materials Research Society Spring Meeting* San Francisco, CA, America, April 12–16, 2004 pC2.4
- [83] Ashburn S P, Öztürk M C, Harris G, Maher D M 1993 *J. Appl. Phys.* **74** 4455
- [84] Zhang Y Y, Oh J, Li S G, Jung S Y, Park K Y, Lee G W, Majhi P, Tseng H H, Jammy R, Lee H D 2010 *IEEE Trans. Nanotechnol.* **9** 258
- [85] Nakatsuka O, Suzuki A, Sakai A, Ogawa M, Zaima S 2007 *International Workshop on Junction Technology* Kyoto, Japan, June 8–9, 2007 p87
- [86] Zhu S, Yu M, Lo G, Kwong D 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 051905
- [87] Zhang Y Y, Oh J, Li S G, Jung S Y, Park K Y, Shin H S, Lee G W, Wang J S, Majhi P, Tseng H H, Jammy R, Bae T S, Lee H D 2009 *Electrochem. Solid-State Lett.* **12** H18
- [88] Zhang Y Y, Oh J, Han I S, Zhong Z, Li S G, Jung S Y, Park K Y, Shin H S, Choi W H, Kwon H M, Loh W Y, Majhi P, Jammy R, Lee H D 2009 *IEEE Trans. Electron Devices* **56** 348
- [89] Guo Y, An X, Wang R S, Zhang X, Huang R 2011 *IEEE Electron Device Lett.* **32** 554

SPECIAL ISSUE—Physics and devices of silicon photonics

Research progress of high mobility germanium based metal oxide semiconductor devices*

An Xia Huang Ru[†] Li Zhi-Qiang Yun Quan-Xin Lin Meng Guo Yue Liu Peng-Qiang
Li Ming Zhang Xing

(Key Laboratory of Microelectronic Devices and Circuits, Institute of Microelectronics, Peking University, Beijing 100871, China)

(Received 14 July 2015; revised manuscript received 28 August 2015)

Abstract

Germanium based metal oxide semiconductor (MOS) device has been a research hotspot and considered as a potential candidate for future complementary MOS (CMOS) technology due to its high and symmetric carrier mobility. However, the poor quality of gate dielectric/channel interface significantly restricts the performance of germanium based MOS devices. Besides, the solid-solubility and activation concentration of dopants in Ge are both quite low, and the dopants diffuse fast in Ge, which makes it difficult to achieve ultra-shallow junction with high dopant concentration, especially for Ge NMOS devices.

To solve these problems, different techniques are proposed and overviewed. The proposed nitrogen-plasma-passivation method can effectively suppress the regrowth of germanium sub-oxide and reduce the interface state density. Thus the performance of the fabricated Ge NMOS device is significantly improved. To enhance the n-type dopant activation in Ge, the multiple implantation technique and the multiple annealing technique are proposed. High electrical activation over $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ is achieved, and the corresponding contact resistivity is reduced to $3.8 \times 10^{-7} \Omega \cdot \text{cm}^2$. Besides, the implantation after germanide (IAG) technique is first proposed to modulate the Schottky barrier height (SBH). The record-low electron SBH of 0.10 eV is obtained by IAG technique, and the optimized process window is given. In addition, the poor thermal stability of NiGe restricts the further improvement of performance of Ge MOS device. P and Sb co-implantation technique and novel ammonium fluoride pretreatment method are proposed to improve the thermal stability of NiGe. The electrical characteristic of NiGe/Ge diode is also improved simultaneously. The results provide the guidelines for further enhancing the performances of germanium-based MOS devices.

Keywords: high mobility channel, gate engineering, source/drain engineering, metal oxide semiconductor

PACS: 85.40.-e, 73.40.Cg, 73.30.+y, 73.40.Qv

DOI: 10.7498/aps.64.208501

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CBA00601), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61421005, 61434007, 60806033, 61474004), and the National Science and Technology Major Project of the Ministry of Science and Technology of China.

† Corresponding author. E-mail: ruhuang@pku.edu.cn