

## 基于耦合介质纳米线的深亚波长局域波导\*

岳嵩 李智<sup>†</sup> 陈建军 龚旗煌

(北京大学物理系, 人工微结构和介观物理国家重点实验室, 北京 100871)

(2010年9月8日收到; 2010年11月2日收到修改稿)

提出了一种基于耦合介质纳米线的深亚波长局域波导, 通过两根紧邻的高折射率介质纳米线的耦合, 该波导可以将光场有效束缚在纳米线之间的低折射率纳米缝隙中. 计算模拟的结果表明, 该波导的有效模场面积达到  $\lambda_0^2/200$ , 比单根纳米线波导小一个数量级, 这种深亚波长的模场束缚能力可以与表面等离子体混合波导相比拟. 计算模拟的结果还表明, 纳米线可能带有的低折射率氧化膜、低折射率衬底的存在, 以及纳米线间尺寸存在的一定差异对于该波导结构的实际应用都不会产生很大的影响. 由于介质波导理论上的传输长度为无穷大, 因此这种深亚波长局域的耦合介质纳米线波导有可能在未来的集成光子学回路中获得广泛应用.

**关键词:** 介质波导, 亚波长局域, 表面等离子体波导, 纳米线

**PACS:** 42.82.Et, 78.67.Uh, 73.20.Mf

## 1. 引言

未来的信息处理及通讯技术要求同时具有更高的集成度和更快的处理速度. 由于光作为信息载体时拥有带宽大、响应快、可并行处理等优点, 其速度远远优于现有的电子学体系, 这使得人们倾向于用集成光子学回路作为未来的信号处理系统<sup>[1,2]</sup>. 但是由于传统的光子学器件受到光的衍射极限限制, 其特征尺寸都处于光波长及以上的量级, 无法实现器件的小型化, 不能实现高密度集成. 存在于金属/介质界面上的表面等离子体, 是光场和金属中自由电子耦合的集体振荡, 由于其拥有超衍射极限的亚波长光场局域能力, 近年来受到了广泛关注<sup>[3-7]</sup>. 作为集成光子学回路中的基本器件, 不同形式的表面等离子体光波导也被人们广泛提出<sup>[8-15]</sup>. 然而由于金属的欧姆损耗, 波导中表面等离子体的传输长度有限, 通常光场的局域越强, 传输长度越短, 这也极大限制了表面等离子体器件的实际应用. 为了平衡局域和损耗之间的矛盾, Oulton 等人提出了一种新的表面等离子体混合波导<sup>[16,17]</sup>, 该波导由金属膜和一根悬浮在金属膜上方的半导体纳米线构成, 利用金属膜等离激元模式与纳米线

介质波导模式的耦合, 形成了一种新的表面等离子体混合模式, 该模式同时拥有强的模式束缚 ( $\lambda_0^2/400 - \lambda_0^2/40$ ) 和较长的传输长度 (40—150  $\mu\text{m}$ ), 成为目前报道的性能最好的表面等离子体波导. 受到这种混合波导的启发, 本文提出了一种基于纯介质的深亚波长局域波导, 通过两根介质纳米线的耦合, 这种波导结构也可以实现深亚波长的模场束缚 ( $\lambda_0^2/200 - \lambda_0^2/20$ ), 并且由于不存在金属的欧姆损耗, 其理论上的传输长度为无穷大. 该波导可以方便地利用半导体纳米线实现, 其同时拥有的强光场局域能力和长传输长度为大规模集成的光子学回路提供了新的基本构架.

## 2. 理论模型

作为对照, 我们首先给出文献[16]中表面等离子体混合波导的结构, 如图1(a)所示, 一根直径为  $D$  的高折射率半导体纳米线 ( $\text{GaAs}$ ,  $\epsilon = 12.25$ ) 悬浮在半无穷厚的金属 ( $\text{Ag}$ ,  $\epsilon = -129 + 3.3i$ ,  $\lambda_0 = 1550 \text{ nm}$ ) 上方, 间隔为  $g$ , 纳米线周围是低折射率介质 ( $\text{SiO}_2$ ,  $\epsilon = 2.25$ ). 对应的表面等离子体混合模式的典型场分布如图1(b)所示, 该模式下偏振主要沿垂直于金属表面方向, 而光场主要分布在纳米线

\* 国家自然科学基金 (批准号: 10804004, 10821062, 90921008) 和国家重点基础研究发展计划 (973 计划) (批准号: 2007CB307001, 2009CB930504) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: lazyli@pku.edu.cn

与金属膜之间的低折射率缝隙中. 当纳米线直径为 200 nm 时, 该模式束缚得最好, 若缝隙宽度为 2 nm, 模式的有效模场面积只有  $6 \times 10^{-3} A_0$  ( $A_0 = \lambda_0^2/4$ , 为自由空间衍射极限的模场面积), 此时对应的传输长度约为 30  $\mu\text{m}$ . 考虑到表面等离子激元混合波导实现深亚波长束缚的关键是通过介质纳米线波导模式与表面等离子激元模式的耦合使光场局域到低折射率纳米缝隙中, 因此我们设想, 利用两根靠得很近的高折射率纳米线波导间的耦合有可能实现类似效果, 同时由于采用纯介质材料, 这种波导的传输长度在理论上将是无穷大.

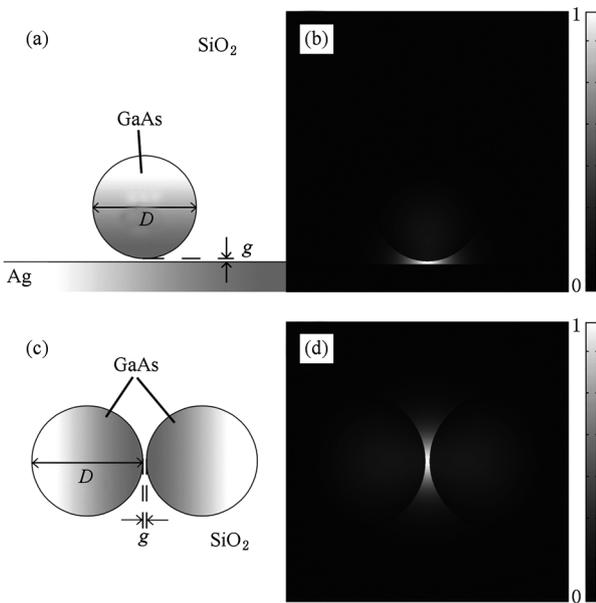


图1 表面等离子激元混合波导的(a)波导结构示意图和(b)典型模场分布(归一化能流分布,  $D = 300 \text{ nm}$ ,  $g = 10 \text{ nm}$ ); 耦合介质纳米线波导的(c)结构示意图和(d)典型模场分布(归一化能流分布,  $D = 300 \text{ nm}$ ,  $g = 10 \text{ nm}$ )

为了验证以上设想并与表面等离子激元混合波导结构作对比, 我们首先通过计算模拟研究了如图 1(c) 所示的耦合纳米线波导结构, 该结构同样采用高折射率的 GaAs 纳米线和低折射率环境介质  $\text{SiO}_2$ , 两根纳米线的直径为  $D$ , 间距为  $g$ . 与文献 [16] 相同, 我们在计算模拟中也采用了有限元方法. 有限元方法是在频域内解 Maxwell 方程的一种数值方法, 拥有精度高、可靠性好等优点, 并且能够处理复杂几何与复杂边界条件, 是近年来得到广泛应用的一种数值方法. 我们使用商用软件 COMSOL Multiphysics v3. 5a 的 RF 模块, 利用垂直波混合模式分析, 得到了考虑的波导结构所支持的本征模

式, 计算中使用的入射光波长也是 1550 nm. 我们首先对文献中表面等离子激元混合波导的主要计算结果进行了重复, 主要感兴趣的量是模式的有效折射率和有效模场面积. 其中有效折射率  $n_{\text{eff}}$  的定义为模式的传播常数  $\beta$  除以真空波矢  $k_0$ ; 而有效模场面积  $A_m$  的定义为模场的总能量  $W_m$  除以能量密度  $W(\mathbf{r})$  的峰值, 即

$$A_m = \frac{W_m}{\max\{W(\mathbf{r})\}} = \frac{1}{\max\{W(\mathbf{r})\}} \iint_{-\infty}^{\infty} W(\mathbf{r}) d^2\mathbf{r}. \quad (1)$$

计算得到等离子激元混合波导的有效折射率和有效模场面积随纳米线直径的变化分别如图 2(a) 和 (b) 中的空心符号线所示, 与文献 [16] 中的计算结果符合得非常好, 验证了计算方法的可靠性.

### 3. 耦合介质纳米线波导的基本性质

接下来, 我们计算了图 1(c) 中的耦合介质纳米线波导, 结果表明该波导中同样存在一个光场高度局域的模式, 其典型模场分布如图 1(d) 所示. 与表面等离子激元混合模式类似, 该模式的偏振方向主要是沿两根纳米线的中心连线, 而光场主要集中在两根纳米线之间的低折射率纳米缝隙中, 最强点位于波导结构的几何对称中心, 离开中心后场强迅速减小. 计算得到的不同间距  $g$  下该模式的有效折射率和归一化有效模场面积(以  $A_0$  为 1) 随纳米线直径的变化分别如图 2(a) 和 (b) 中的实心符号线所示. 作为参考, 单根纳米线波导(即  $\text{SiO}_2$  介质环境中的单根 GaAs 纳米线) 的相应计算结果在图 2 中以无符号实线给出. 从图中可以看出, 几种波导模式的一个共同特征是: 随着纳米线直径的减小, 模式的有效折射率单调地减小, 而有效模场面积则先减小后增大, 存在一个束缚最好的几何尺寸. 有效折射率的减小是由于波导结构中高折射率介质的减少造成的, 可以预计当纳米线直径趋于 0 时, 模式的有效折射率将趋于环境材料的折射率, 即 1.5. 有效模场面积的变化趋势可以这样理解: 当纳米线尺寸比较大时, 波导模式基本上限制在高折射率的纳米线中, 随着纳米线尺寸的缩小, 存在于纳米线中的模场也受到压缩; 而当纳米线直径缩小到一定尺寸后, 由于衍射极限的限制, 单根纳米线波导的模式将不能再被继续压缩, 随着模式的有效折射率接近环境材料的折射率, 模式将从纳米线中扩散出来,

造成模场面积变大. 对于单根纳米线波导, 最强的光场局域出现在直径为 330 nm 附近, 此时的归一化有效模场面积为 0.11, 当纳米线直径小于 330 nm 时, 光场向纳米线外显著发散. 表面等离子激元混合波导利用介质圆柱波导和平面等离子激元波导的耦合, 使介质波导中发散出来的模场分布受到下方金属表面等离子激元模式的影响, 当圆柱直径约为 200 nm 时, 两种模式耦合最强, 相应的也使其模场面积最小. 我们提出的耦合介质纳米线波导借鉴了表面等离子激元混合波导的耦合思想, 直接利用两根纳米线波导之间的耦合, 从图 2(b) 可以看出, 耦合纳米线波导的模场面积极小值也出现在纳米线直径 200 nm 附近, 说明此时两根纳米线的波导模式之间耦合最强. 从图 2(b) 还可以看出, 间距  $g$  越小, 模式耦合越强, 相应的有效模场面积越小. 具体来看, 当纳米线直径  $D = 200$  nm, 缝隙宽度  $g = 2$  nm 时, 表面等离子激元混合波导与耦合介质纳米线波导的有效折射率分别为 2.06 和 1.80, 归一化有效模场面积分别为  $0.53 \times 10^{-2}$  与  $1.45 \times 10^{-2}$ ; 而直径  $D = 200$  nm 的单根纳米线的有效折射率为 1.506, 归一化有效模场面积仅为 1.07. 以上结果说明, 单根介质纳米线波导受到衍射极限的限制, 不能实现亚波长的束缚; 耦合介质纳米线波导可以实现深亚波长的模场

束缚, 最小模场面积比单根纳米线的最小模场面积 ( $D = 330$  nm, 归一化有效模场面积 0.11) 小一个数量级. 虽然耦合纳米线波导的模场面积是表面等离子激元混合波导的两倍多, 但考虑到表面等离子激元混合模式的传输长度只有几十微米, 而耦合纳米线波导的传输长度无穷大, 因此在需要长程传输的情况下, 耦合纳米线波导更有优势.

为了进一步说明耦合纳米线波导实现深亚波长束缚的原理, 图 3 具体给出了最强束缚参数下 ( $D = 200$  nm,  $g = 2$  nm) 耦合介质纳米线波导和表面等离子激元混合波导的模场分布图, 以及电场强度沿水平和垂直两个方向的截线图. 在水平方向, 两种波导的模场束缚相当, 场分布的半高全宽约为 57 nm, 接近  $1/30\lambda_0$ , 的确是深亚波长的束缚; 在垂直方向, 强电场集中在低折射率缝隙中, 由于金属的截止作用, 表面等离子激元混合波导只在金属上方有明显场分布, 因此其模场面积大致是耦合纳米线波导的一

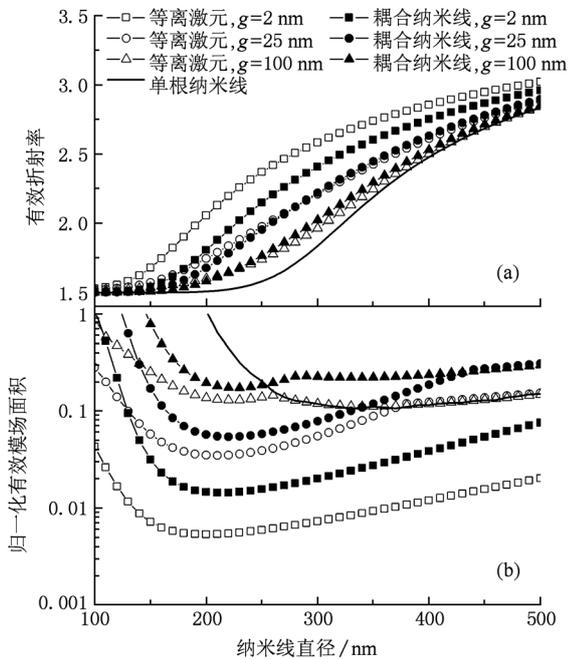


图 2 波导模式的 (a) 有效折射率和 (b) 归一化有效模场面积随几何参数的变化 (实心符号线表示耦合介质纳米线波导, 空心符号线表示表面等离子激元混合波导, 无符号实线表示单根纳米线波导)

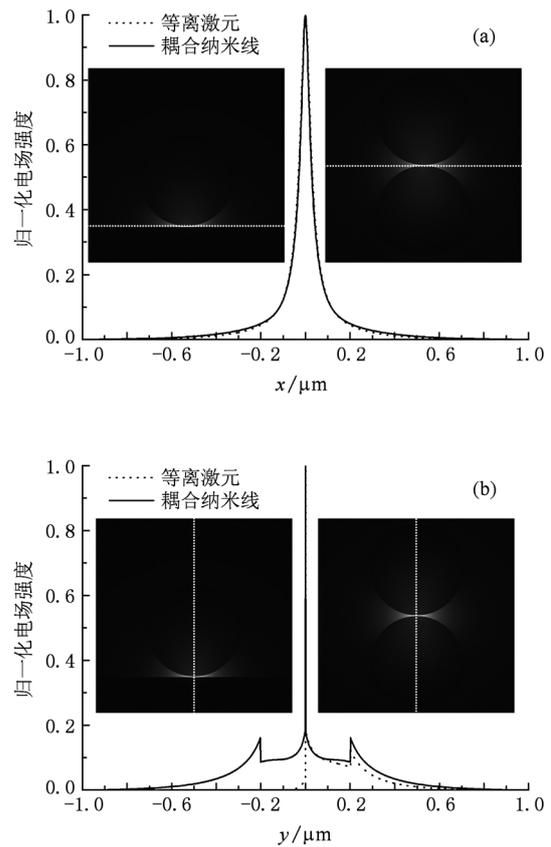


图 3 耦合介质纳米线波导与表面等离子激元混合波导的典型模场分布 (能流图,  $D = 200$  nm,  $g = 2$  nm), 以及沿插图中白色虚线所示方向的归一化电场强度的截线图 (a) 平行于缝隙方向; (b) 垂直于缝隙方向 (插图中耦合介质纳米线波导的放置方向相比图 1 旋转了  $90^\circ$ , 便于与表面等离子激元混合波导比较)

半. 从物理上讲,低折射率缝隙中出现强电场的原因主要是电磁场的连续性边界条件. 根据 Maxwell 方程,电位移矢量  $D = \epsilon E$  的法向分量在边界上连续,因此当从高折射率介质  $\epsilon_2$  进入到低折射率介质  $\epsilon_1$  时,电场强度的法向分量会在界面处有一个跃变:增大  $\epsilon_2/\epsilon_1$  倍,对于偏振方向垂直于界面的模式,这意味着总电场近似增大  $\epsilon_2/\epsilon_1$  倍(如图 3(b)所示). 同时如果低折射率材料存在的空间区域很小(纳米级缝隙),那么该区域中的电场来不及衰减,始终强度很高,这样也就导致了高度的模场束缚. 这种紧束缚模式对偏振有严格要求,即要求电场的主要分量是垂直于缝隙方向的. 在表面等离子混合波导中,电场主要垂直于金属表面,从而满足偏振要求;在耦合介质纳米线波导中,偏振沿纳米线的连心线方向才能实现强束缚. 实际上,在耦合纳米线波导中还存在一个偏振沿平行于缝隙方向的模式,该模式在缝隙中没有强电场,它更接近两根纳米线独立存在时的模式,因此也不能实现紧束缚. 在实际工作中需要我们选择合适的偏振激发以获得紧束缚模式.

#### 4. 耦合介质纳米线波导在实际应用中的几点考虑

从实际应用的角度讲,耦合介质纳米线波导首

先要考虑到的问题是如何在高折射率的纳米线间实现纳米级的低折射率缝隙. 对于折射率约为 3.5 的硅纳米线,由于目前生长出的硅纳米线一般都天然地带有几个纳米的  $\text{SiO}_2$  氧化层<sup>[18,19]</sup>,我们可以直接将两根硅纳米线紧靠在一起,此时氧化层自然构成了低折射率的纳米缝隙,由此得到的波导结构如图 4(a)所示,纳米线直径为  $D$ ,氧化层厚度为  $g/2$ ,则缝隙宽度为  $g$ . 对此结构进行计算模拟发现,可以获得紧束缚模式,典型的模场分布如图 4(b)所示,紧束缚模式的有效折射率和有效模场面积随几何参数的变化分别如图 4(c)和(d)所示. 计算结果表明,该结构由于直接放置在折射率更低的空气中,因此模式束缚比图 2 中放置在  $\text{SiO}_2$  环境介质的情况下更好. 比如在纳米线直径 200 nm,缝隙宽度 2 nm 的时候,归一化有效模场面积仅为  $0.34 \times 10^{-2}$ ,甚至比图 2 中表面等离子混合模式的最小有效模场面积还要小. 而对于折射率同样为 3.5 但表面没有氧化层的 GaAs 纳米线,计算表明我们可以通过将两根高折射率纳米线直接紧靠在一起得到紧束缚模式,此时相当于  $g=0$  nm,相应的有效折射率和有效模场面积随纳米线直径的变化分别如图 4(c)和(d)中空心符号线所示,计算结果与  $g=2$  nm 的情况比较类似,只是有效折射率略大、场局域也

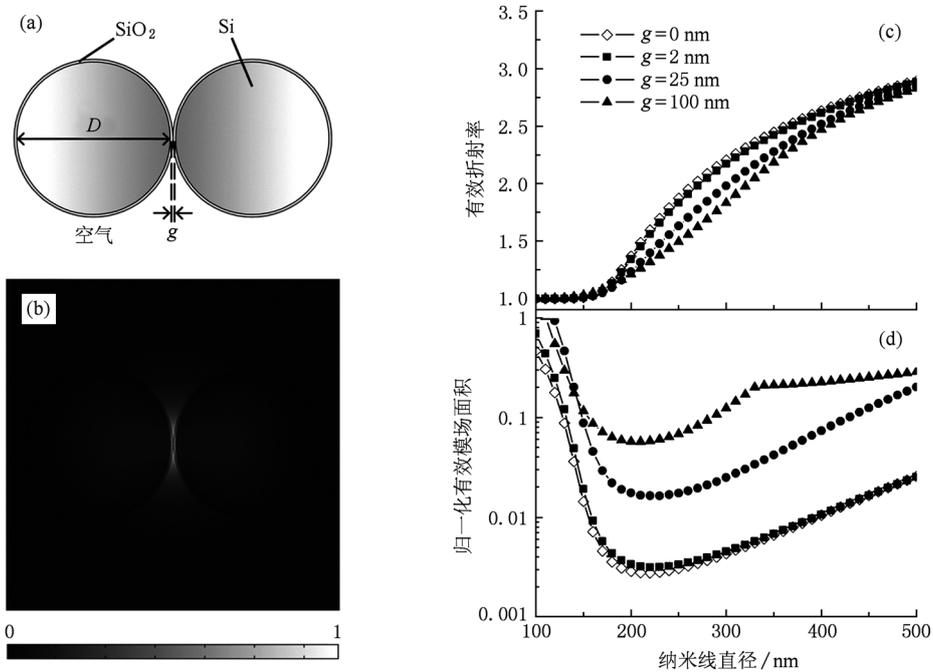


图 4 两根紧靠的带氧化层的悬空硅纳米线构成的耦合介质波导(a)结构示意图和(b)典型模场分布(能流图, $D=300$  nm,  $g=10$  nm). 紧束缚模式的(c)有效折射率和(d)归一化有效模场面积随波导几何参数的变化,实心符号线代表有氧化层的情况,空心符号线代表氧化层厚度为零的情况

略强. 可见, 即使两根纳米线直接紧靠, 我们需要的这种强局域的模式仍然存在, 而且性质不会有根本的改变. 原因是纳米线圆柱形的几何结构使得耦合介质波导结构中接触点只有一点, 因此即使两根纳米线紧靠, 接触点附近也将存在纳米级的缝隙, 从而支持紧束缚模式.

实际应用中, 另一个必须要考虑的问题是衬底的影响, 因为纳米线结构无法悬空存在. 图 5 给出了将图 4 所示的耦合硅纳米线或 GaAs 纳米线波导置于玻璃衬底上之后的计算结果. 可以看出, 在纳米线直径不太小的情况下, 衬底对紧束缚模式的影响很小, 模式的基本性质得到保持, 其有效折射率、

有效模场面积等性质基本不变; 只是当纳米线尺寸缩小到一定程度后, 模场面积迅速变大. 原因是此时模式的有效折射率非常接近衬底折射率, 模式向衬底发生泄露, 相应的截止尺寸大概发生在纳米线直径约 200 nm 处. 从图 5 (d) 的结果来看, 模场面积最小值对应的纳米线直径在截止尺寸以上, 没有受到衬底的明显影响, 比如对于  $g = 2$  nm 的情况, 最小模场面积是在  $D = 230$  nm 处得到, 此时归一化有效模场面积约为  $0.34 \times 10^{-2}$ , 与无衬底时的最小模场面积基本相同. 因此只要我们在截止尺寸以上利用我们提出的波导模式, 就可以同时实现深亚波长的束缚和长距离的传输.

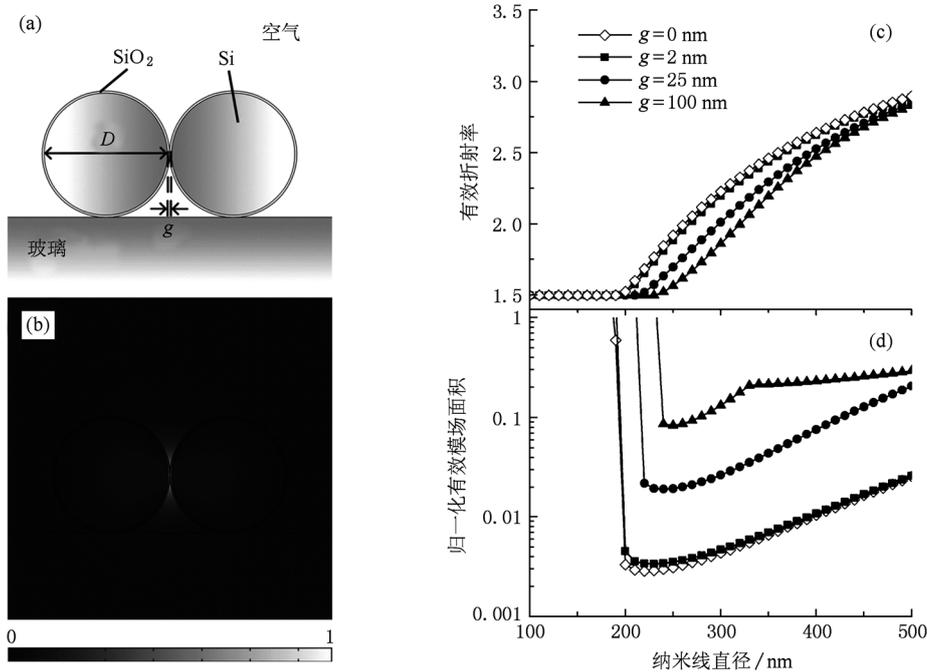


图 5 放置在玻璃衬底上的耦合硅纳米线波导 (a) 结构示意图和 (b) 典型模场分布 (能流图,  $D = 300$  nm,  $g = 10$  nm). 紧束缚模式的 (c) 有效折射率和 (d) 归一化有效模场面积随结构几何参数的变化, 实心符号线表示有氧化层的情况, 空心符号线表示没有氧化层的情况

在实际应用中还应该考虑到, 两根紧靠在一起的纳米线的尺寸很难是完全相同的, 这就需要研究当两根纳米线尺寸不同时, 我们所设想的模式是否还能存在, 并且模式受尺寸的影响究竟有多大. 为此, 我们选取处于玻璃衬底上的两根紧靠的 GaAs 纳米线作为比较. 从图 5 可以看出, 当两根纳米线直径都为 250 nm 时, 紧束缚模式的有效折射率是 1.92, 归一化有效模场面积是  $0.31 \times 10^{-2}$ , 这个工作点离 200 nm 的截止直径还比较远, 工作起来比较可靠. 然后我们固定其中一根纳米线的直径为 250 nm, 当另外一根纳米线直径变为 230 nm 时, 得到的

模式有效折射率与归一化有效模场面积分别为 1.88 和  $0.395 \times 10^{-2}$ ; 而当另外一根纳米线直径变为 270 nm 时, 有效折射率与归一化有效模场面积分别为 2.02 和  $0.421 \times 10^{-2}$ . 从以上结果可以看出, 两根纳米线直径的差异不大时对紧束缚模式的影响也不大, 模场的分布特征基本不变, 有效模场面积变化也不大; 结构对称的波导, 其束缚性能要更好一些; 非对称的波导, 其束缚有所变差, 但是差异也只有 30% 左右. 因此, 只要偏差不是太大, 实际纳米线尺寸的非均匀性对我们提出的耦合介质纳米线波导影响相对较小.

## 5. 结 论

本文提出了一种基于耦合介质纳米线的波导结构,利用高折射率的介质纳米线和低折射率纳米缝隙,这种耦合波导结构可以实现跟表面等离子混合波导相比拟的深亚波长模场束缚,同时,由于该波导由纯介质构成,避免了金属的欧姆损耗,其理论上的传输长度为无穷大. 计算模拟的结果表明,纳米线可能带有的低折射率氧化膜、低折射率衬底的存在、以及纳米线间尺寸存在的一定差异等

实际因素对于该波导的应用都不会产生很大的影响. 由于半导体纳米线一般拥有纳米级的平整表面<sup>[20]</sup>,使得其实际的散射损耗也非常小,因此这种同时具备深亚波长光场局域和超长传输长度的耦合波导结构可以在未来的集成光子学回路中用于芯片间的长距离传输. 由于很多半导体纳米线还是直接带隙的材料并且通常具有较大的非线性系数,因此基于耦合半导体纳米线波导还有可能方便地实现有源器件,并且可能在非线性光学领域找到潜在的应用,从而为未来的集成光子学回路提供一种新的可能的架构方式.

- [1] Hu X Y, Jiang P, Ding C Y, Yang H, Gong Q H 2008 *Nature Photonics* **2** 185
- [2] Zia R, Schuller J A, Chandran A, Brongersma M L 2006 *Materials Today* **9** 20
- [3] Barnes W L, Dereux A, Ebbesen T W 2003 *Nature* **424** 824
- [4] Ozbay E 2006 *Science* **311** 189
- [5] Chen J J, Li Z, Gong Q H 2009 *Chin. Phys. B* **18** 3535
- [6] Gramotnev D K, Bozhevolnyi S I 2010 *Nature Photonics* **4** 83
- [7] Schuller J A, Barnard E S, Cai W S, Jun Y C, White J S, Brongersma M L 2010 *Nature Material* **9** 193
- [8] Bozhevolnyi S I, Volkov V S, Devaux E, Laluet J Y, Ebbesen T W, 2006 *Nature* **440** 508
- [9] Steinberger B, Hohenau A, Ditzbacher H, Stepanov A L, Drezet A, Aussenegg F R, Leitner A, Krenn J R 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 094104
- [10] Grandidier J, Francs G C, Massenot S, Bouhelier A, Markey L, Weeber J C, Finot C, Dereux A 2009 *Nano Letters* **9** 2935
- [11] Chen J J, Li Z, Zhang J S, Gong Q H 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5839 (in Chinese) [陈建军、李智、张家森、龚旗煌 2008 物理学报 **57** 5839]
- [12] Yue S, Li Z, Chen J J, Gong Q H 2010 *Chin. Phys. Lett.* **27** 027303
- [13] Berini P 2000 *Phys. Rev. B* **61** 10484
- [14] Berini P, Charbonneau R, Lahoud N 2007 *Nano Letters* **7** 1376
- [15] Maier S A, Kik P G, Atwater H A, Meltzer S, Harel E, Koel B E, Requicha A A G 2003 *Nature Materials* **2** 229
- [16] Oulton R F, Sorger V J, Genov D A, Pile D F P, Zhang X 2008 *Nature Photonics* **2** 496
- [17] Oulton R F, Bartal G, Pile D F P, Zhang X 2008 *New Journal of Physics* **10** 105018
- [18] Morales A M, Lieber C M 1998 *Science* **279** 208
- [19] Rao C N R, Deepak F L, Gundiah G, Govindaraj A 2003 *Progress in Solid State Chemistry* **31** 5
- [20] Yan R X, Gargas D, Yang P D 2009 *Nature Photonics* **3** 569

# Dielectric waveguide with deep subwavelength mode confinement based on coupled nanowires<sup>\*</sup>

Yue Song Li Zhi<sup>†</sup> Chen Jian-Jun Gong Qi-Huang

(*State Key Laboratory for Mesoscopic Physics and Department of Physics,  
Peking University, Beijing 100871, China*)

(Received 8 September 2010; revised manuscript received 2 November 2010)

## Abstract

Dielectric waveguide with deep subwavelength mode confinement based on coupled semiconductor nanowires is proposed. Through the coupling between two adjacent nanowires with high refractive indexes, light can be efficiently confined in the nano-gap between the nanowires with a low refractive index. Numerical simulations indicate that the effective mode area of such a waveguide can be as small as  $\lambda_0^2/200$ , which is one order of magnitude smaller than that of a single nanowire, and such a mode confinement is comparable to that of hybrid plasmonic waveguide. It is also shown that from the view of real applications, possible existing low refractive index oxidization layers of nanowires, low refractive index substrate and small deviation of nanowire dimensions do not have significant influence on the property of the waveguide. As the propagation length is theoretically infinite for dielectric waveguides, such a coupled nanowire waveguide with deep subwavelength mode confinement may have important applications in future integrated photonic circuits.

**Keywords:** dielectric waveguide, subwavelength confinement, surface plasmon waveguide, nanowire

**PACS:** 42.82.Et, 78.67.Uh, 73.20.Mf

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10804004, 10821062 and 90921008) and the National Basic Research Program of China (Grant Nos. 2007CB307001 and 2009CB930504).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: lazyli@pku.edu.cn