

高 Q 值二维光子晶体缺三腔的数值模拟与分析*

潘伟† 余和军 张晓光 席丽霞

(北京邮电大学信息光子学与光通信研究院, 北京 100876)

(2011年3月7日收到; 2011年4月18日收到修改稿)

针对单光子源对高性能纳米腔的需要, 采用“柔性束缚”光子限制结构和时域有限差分法, 通过把时域和频域的光电场分布与理想高斯函数进行比较, 设计出一种高品质因子的光子晶体缺三腔 (L3), 其 Q 值达 2.8×10^5 , 有效模式体积为 $V_{\text{eff}} = 0.1813(\lambda/n)^3$, 相应的 Purcell 因子超过 $F = 1.2 \times 10^5$. 此外, 提出一种定量描述腔性能优劣程度的能量系数分析法, 通过定量对比二维高斯分布下的场分布能量与总能量, 提高了腔的优化速度与准确性. 计算结果表明, 随着腔性能的优化, Q 值正比于能量系数 γ 值直至饱和.

关键词: 光子晶体, 缺三腔, 时域有限差分法, 能量系数 γ

PACS: 42.55.Tv, 42.60.Da, 61.50.Ah

1 引言

作为下一代信息技术的重要方向, 量子通信和量子信息处理的研究日益受到关注和重视, 而作为未来量子信息技术中重要组成部分的单光子源 (single-photon source, SPS), 更是成为当前的研究热点 [1-3].

单光子源是指在固定时刻下发出单个固定频率的光子的发光器件, 是未来量子通信的信息载体, 其中的关键问题是如何产生稳定高效的单光子发射. 理论上, 产生单光子的方法有多种, 像单原子、单分子、固体材料色心和材料缺陷等都可以产生单光子, 但性能有限且不稳定. 目前公认最有前景、最有效的方法是利用半导体量子点和光子晶体纳米腔耦合, 通过量子点自发辐射产生光子, 光子晶体纳米腔束缚光子以产生高效、连续的单光子发射 [4-6]. 由于单光子发射效果与腔的性能直接相关, 设计有高性能的光子晶体腔结构成为研究的重要课题 [7-10].

光子晶体是一种折射率或介电常数呈周期性分布人工周期材料. 通过光子晶体禁带效应并合理优化光子晶体光腔的结构, 就可以将尽可能多的能量束缚腔内, 设计出高性能的光子晶体纳米腔结构.

为获得 Q 值高、模式体积小光子晶体纳米

腔, 很多研究团队做了大量工作并取得了重要进展. 2003年, Noda等 [1] 对缺三腔进行优化并提出减少“泄露模”的方法, 将 Q 值提高到 4.5×10^4 , 比之前的结果高出 10 倍, 同时腔的模式体积只有 $V_{\text{eff}} = 7 \times 10^{-14} \text{ cm}^3$; 2005年, Song等 [5] 采用双异质波导结构, Q 值达到 6×10^5 , 由于是波导结构, 模式体积相对较大; 2010年, Portalupi等 [11] 采用缺三腔, 在提高腔的出射效率同时, 将 Q 值优化到 1.5×10^5 并得到实验验证, 但结果仍有继续提高的空间.

为了进一步提高腔的性能, 本文将“异质结”模型应用于光子晶体缺三腔结构, 通过在波导方向上形成“柔性束缚”, 更加有效地束缚光子. 获得了品质因子 (quality factor) $Q = 2.8 \times 10^5$, 有效模式体积为 $V_{\text{eff}} = 0.1813(\lambda/n)^3$, 相应的 Purcell 因子超过 $F = 1.2 \times 10^5$ 腔结构. 比之前报道的结果要高近一倍. 此外, 提出一种定量描述腔性能优劣程度的能量系数分析法, 提高腔的优化速度与准确性.

2 仿真与分析方法

2.1 腔结构设计

光子晶体缺三腔 (L3 腔), 是在光子晶体平板结

* 国家自然科学基金 (批准号: 10947150, 60977049) 资助的课题.

† E-mail: panwei2005bupt@yahoo.cn

构的某一行缺省三个空气孔而形成的腔结构^[12,13]. 由于缺三腔能够在频谱上形成分离的谱分布, 相应的模式体积较小, 也可达到很高的 Q 值, 是当前很有前景的腔结构, 被广泛研究.

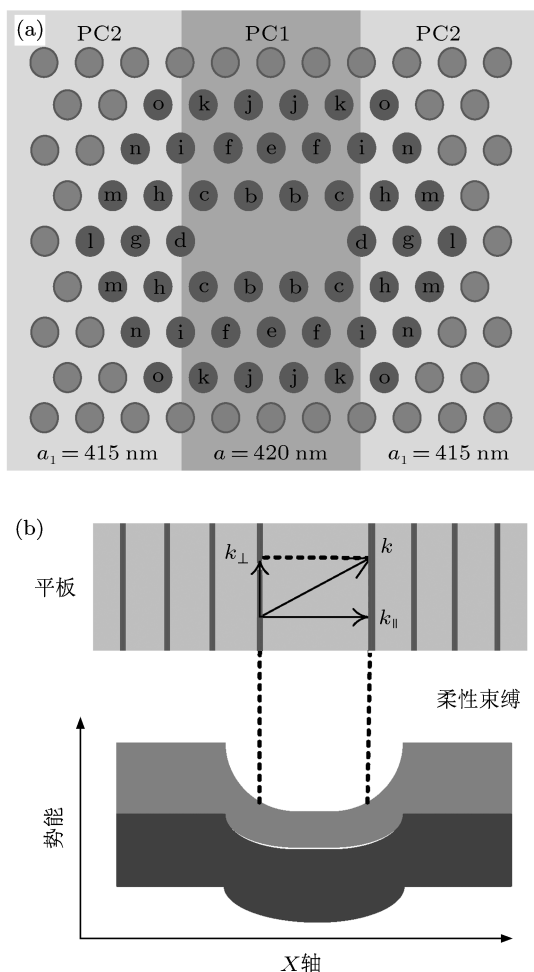


图1 (a) 光子晶体缺三腔双异质结构, 在波导方向是两种不同“晶格常数”的光子晶体平板连接在一起; (b) 波导方向上的势能分布图, 只有特定能量的光子才能存在在腔内

本文设计的光子晶体缺三腔如图 1(a) 所示. 整个腔结构分成三个部分, 其中 PC_1 和 PC_2 是两种光子晶体结构, 它们的“晶格常数”(空气孔周期) 不同^[14], 其他特征保持一致, 从而在波导方向上形成了交错的带隙, 类似于半导体中限制电子的双异质结构. 为了更好地束缚光子, 利用“柔性束缚”概念, 优化空气孔参数, 使势能曲线变成弧状, 如图 1(b), 将更多的光子束缚在腔内^[15].

2.2 优化方法

采用时域有限差分 (FDTD) 数值方法, 在完全

匹配层吸收边界条件下时域有限差分 (PML), 对文中采用 $23a \times 19a$ 的超元胞进行优化. 为了节省时间和快速定性分析, FDTD 计算精度设为每个晶格上取 10 个点, 计算范围设置相对较小. 为了防止离散计算带来的误差, 对于好的结果将分辨率提高到 20 重新计算.

对于 FDTD 计算得到的数值结果, 采用洛伦兹函数进行拟合^[16]:

$$f(\lambda) = \frac{1}{\pi} \frac{A\Delta\lambda}{\Delta\lambda^2 + 4(\lambda_0 - \Delta\lambda)^2} + B, \quad (1)$$

其中 λ_0 是腔的共振波长, $\Delta\lambda$ 是波长谱的半高全宽, A 和 B 是拟合常数; 可以很快计算出腔的 Q 值.

有效模式体积由下式计算^[17,18]:

$$V_{\text{eff}} = \frac{\int d\mathbf{r} \varepsilon(\mathbf{r}) |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2}{[\varepsilon(\mathbf{r}) |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2]_{\text{max}}}, \quad (2)$$

其中, ε 是介电常数, $|\mathbf{E}(\mathbf{r})|$ 是电场分布.

从而, Purcell 因子为^[19,20]

$$F = \frac{3}{4\pi^2} \frac{Q}{V_{\text{eff}}} \left(\frac{\lambda}{n}\right)^3, \quad (3)$$

其中, λ 是真空中光的波长, n 是腔材料的折射率.

此外, 在优化前先进行结构分析. 如图 1(a) 所示, 由于腔的对称性, 图中标号相同的空气孔对腔性能参数的影响相同, 因此其参数在优化时可以同步改变. 在优化顺序上, 首先优化包围缺陷的第一圈空气孔, 再次依次向外推进, 而优化同一圈空气孔时, 遵守“交叉优化”, 先优化 x 方向上的空气孔再优化 y 方向上的孔. 通过步步优化, 直到腔的性能不能再提高为止.

2.3 能量系数分析法

通过空间傅里叶变换, 可以将腔内的电场分解为一系列不同 k 矢量的平面波, 而只有 $|k_{//}|$ 大于临界值的平面波才满足 Snell 定律, 形成全反射, 而 $|k_{//}|$ 小于临界值就会辐射到腔外, 在傅里叶空间就是形成一个圆区域, 称为“泄漏区”^[21]. 在“泄漏区”的分量越多, 表示损失的能量越多; 反之, 腔的性能越好. 当腔的模式分布越是接近高斯分布的时候, 落在“泄漏区”的分量越少, 腔的 Q 值越高^[22].

为了直观地反映模式分布的形态, 从而定量分析腔的优化状态, 我们定义一个新的参量——能量系数 γ :

$$\gamma = \frac{\Sigma_{\text{高斯}}}{\Sigma_{\text{整体}}} = \frac{\int_{\text{高斯包络}} |E(s)|^2 \varepsilon ds}{\int_{\text{整体包络}} |E(s)|^2 \varepsilon ds}, \quad (4)$$

$\Sigma_{\text{高斯}}$ 表示二维高斯分布覆盖下的电场能量, $\Sigma_{\text{整体}}$ 是总的电场能量, 其中的高斯分布是通过最大

相关系数找出. $|E(s)|$ 是场分布. 如图 2 所示, 可知 $0 < \gamma < 1$, 当 γ 越大时, 表示模式分布越接近高斯, 越多的能量集中在腔内, 腔的性能就越好, Q 值越高; 如果 γ 很小, 说明有大量的能量流失到腔外, Q 值低, 需要进一步的优化提高.

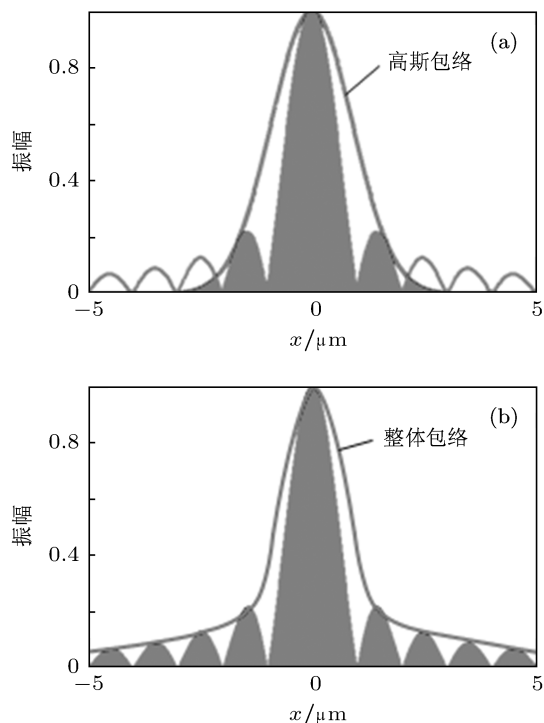


图 2 能量系数示意图 (a) 表示高斯覆盖下电场的能量; (b) 表示电场的全部能量

3 仿真结果与讨论

3.1 腔的基本参数优化

通过对光子晶体每个参数进行优化分析, 并考虑制造工艺和 FDTD 算法的偏差, 对缺三腔的基本参数设置如下: 晶格常数 $a_1 = 415 \text{ nm}$, $a_2 = a = 420 \text{ nm}$, 以在通信波段获得较好的双异质结构限制效应. 平板厚度 $T = 0.65a$, 材料折射率 $n = 3.45$ (对应的是最常用的 GaAs/InGaAs 材料), 空气孔半径 $R = 0.29a$, 得到 $Q = 7924$, 对应的模式体积只有 $V_{\text{eff}} = 0.2393(\lambda/n)^3$, 中心波长是 1586.29 nm , 能量系数 $\gamma = 0.8618$, 结果见表 1. 此外, 分析发现腔的 Q 值正比于材料的折射率, 并对计算分辨率非常敏感, 计算的范围和计算步数对仿真结果也有很大的影响.

表 1 缺三腔的基本参数

$R(a)$	$T(a)$	n	Q	$V((\lambda/n)^3)$	γ
0.29	0.65	3.45	7924	0.2393	0.8618

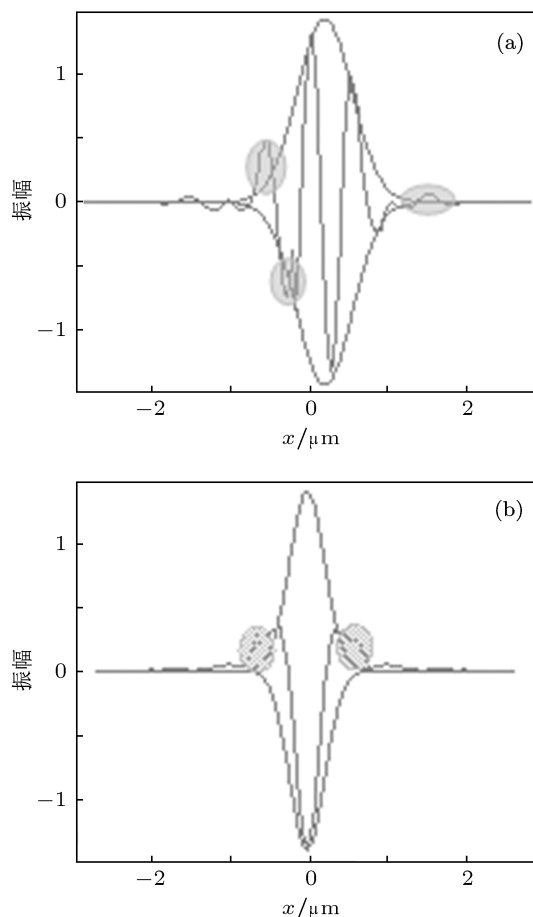


图 3 第一步优化后的电场分布. 包络是高斯函数, 曲线是电场分布曲线 (a) x 方向的电场分布; (b) y 方向的电场分布

3.2 第一圈空气孔的优化

首先, 分析基本参数优化后 x 和 y 方向上的模式分布, 并与理想高斯曲线相比较. 如图 3 所示, 灰色区域指出了仿真结果与理想结果的差异. 图 3(a) 是 x 方向的电场分布, 可以看到差异主要集中在电场分布的边缘, 对应的位置正好是腔两端的空气孔, 所以 x 方向应该优化空气孔 d (考虑对称性, 应同时优化图 1(a) 中 d 代表的两个空气孔, 后面的优化中也是如此); y 方向, 根据图 3(b), 应该优化空气孔 b 和 c . 考虑到“交叉优化”, 先优化空气孔 d 的半径, 再移动孔 d 位置 D_d , 发现 Q 值有明显的提高; 然后优化空气孔 b 和 c , 使 y 方向的电场分布更加接近高斯分布. 当各个参数选取如下: $R_b = R_c = 0.29a$, $R_d = 0.3a$, $D_d = 0.17a$ 时, Q 值最高, $Q = 78572$, 模式体积 $V_{\text{eff}} = 0.2370(\lambda/n)^3$, $\gamma = 0.9152$. 图 4(b) 是电场的傅里叶变换谱, 黑色曲线内是“泄露区”, 很明显, 有很大一部分电场分量在“泄露区”内, 必须继续优化以减少“泄露区”内的能量, 降低辐射损耗. 表 2 是第一圈空气孔优化后的参数.

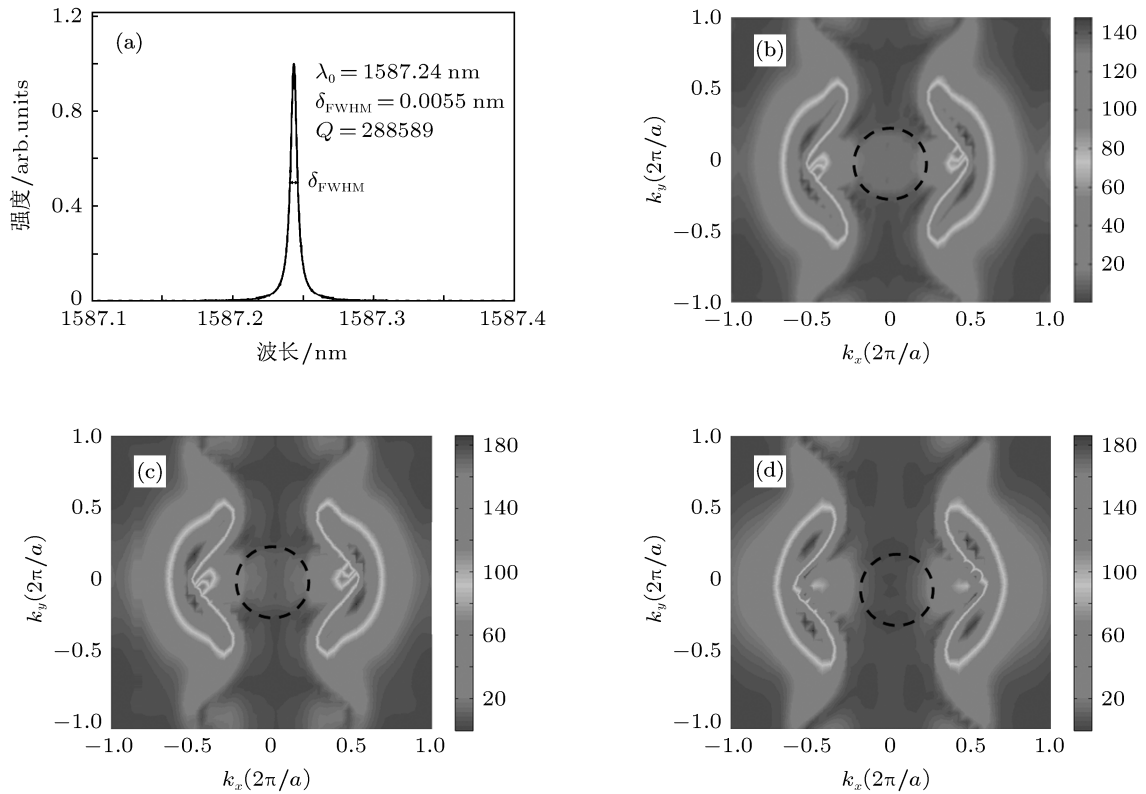


图 4 (a) 是最佳结果下的共振波长谱; (b), (c), (d) 分别是第一圈、第二圈和外围空气孔优化后电场的傅里叶变换谱, 可以看出“泄露区”的电场分量越来越少

表 2 第一圈空气孔优化后的参数

R_b	R_c	R_d	D_d	Q	$V((\lambda/n)^3)$	γ
0.29	0.29	0.31	0.17	78572	0.2370	0.9152

表 3 第二圈空气孔优化后, 空气孔的参数选择

R_e	R_f	R_g	R_h	R_i	Q	$V((\lambda/n)^3)$	γ
0.32	0.3	0.31	0.31	0.31	251966	0.1952	0.9515

表 4 外围空气孔优化后, 最佳结果下的空气孔的参数

R_l	R_m	R_n	Q	$V((\lambda/n)^3)$	F	γ
0.29	0.3	0.3	288589	0.1813	120675	0.9536

3.3 第二圈空气孔的优化

重复第一圈的步骤优化第二圈空气孔. 分析 x 方向电场分布与高斯分布的差异后, 空气孔 g 向腔的两端移动位置 D_g , 发现 Q 值显著地提高到 125890; 在 y 方向, 同样的方法优化完空气孔 f 和 e 之后, Q 值达到了 209958; 确保优化的完整性和对称性, 空气孔 h 和 i 都得到了优化, 此时的 Q 值是 251966, 模式体积为 $V_{\text{eff}} = 0.1952(\lambda/n)^3$, 参数如表 3 所示. Purcell 因子 F 和能量系数 γ 都得

到很好的提高, 图 4(c) 是电场的傅里叶变换谱, 可以发现, 虽然有部分电场分量在“泄露区”内, 但是与第一圈的优化结果 (图 4(b)) 相比, “泄露区”内的能量已经明显减少.

3.4 外围空气孔的优化

仿真发现, 当优化进行到第三圈上的 l, j, k 孔时, Q 值提高到约 288589, 继续优化第三圈的其他几个孔时, Q 值变化不大, 但模式体积却得到进一步降低, 只有 $V_{\text{eff}} = 0.1813(\lambda/n)^3$, 此时计算腔的 Purcell 因子, 达到 $F = 120675$, 这是仿真中达到的最大值. 继续对第四圈空气孔进行优化, 但 Q 值没有得到更明显的提高, 这是因为远离缺陷的空气孔对腔性能影响减弱的缘故. 图 4(a) 是最佳结果下的共振谱. 图 4(d) 是优化第四圈空气孔后电场的傅里叶变换谱, 从中可以看到, “泄露区”内已经几乎没有电场分量了, 与图 (b) 所示结果相比, 腔的性能已经有了很大的提升.

3.5 结果分析

对比图 4(b), (c), (d) 可以看到, 光子晶体纳米腔

损失的能量逐渐减少,与腔的 Q 值的增加相对应.

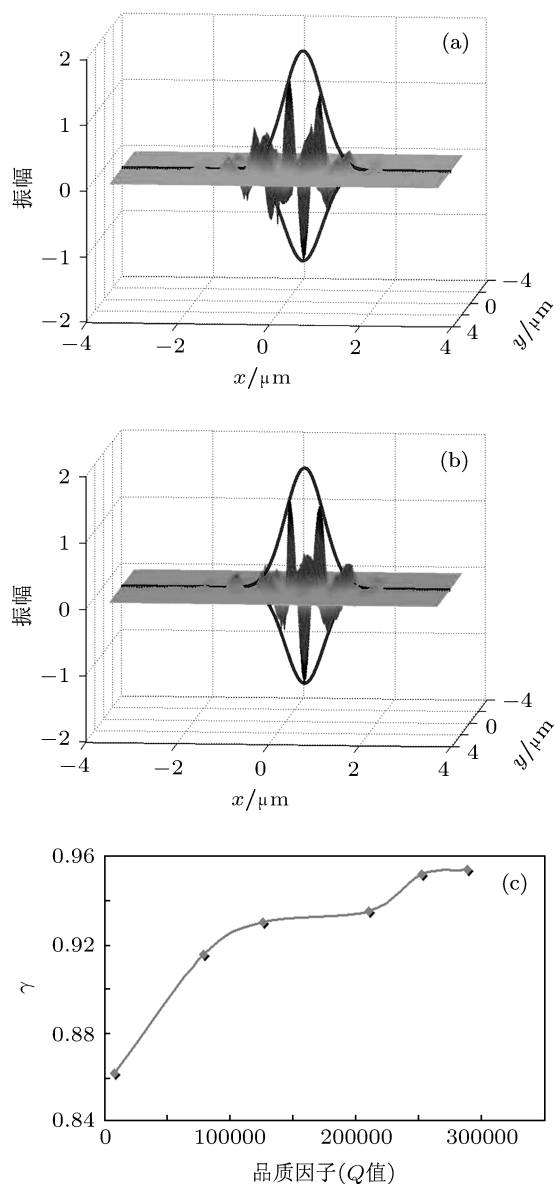


图5 (a)和(b)分别是优化前和优化后的模式分布图,其中包络是高斯分布曲线; (c)能量系数与 Q 值的对应图

进一步考察能量系数 γ . 随着腔的优化, γ 与腔的 Q 值成正比; 当优化进行到第四圈后, 大部分电场能量都被二维高斯分布包络覆盖, 电场分布的边缘也变得更加的圆滑与高斯包络变得更加匹配. 在如图 5 中, 为了清晰表示结果, 我们用一维高斯曲线代替二维高斯分布包络. 图 5(a) 是优化前的模场分布, 图 5(b) 是优化之后的模场分布, 可以看出优化之后的模式分布更加接近高斯分布, 能量更加集中; 图 5(c) 是能量系数 γ 与腔 Q 值的对应图, 可以看出 γ 随着 Q 值的增加而增加, 当 Q 值小的时候 γ 随 Q 值增大快速增加, 当 Q 值很大时, γ 值达到很高并接近饱和, 说明 Q 值已经接近腔的最好情况; 至于 γ 值没有更接近 1, 主要是微结构表面效应的存在. 在不考虑材料吸收和非线性的情况下, 几乎所有能量都束缚在腔内, “泄漏区” 存在的辐射损耗已经基本被消除, 在这种情况下要进一步提高腔 Q 值将变得非常的困难, 提升的空间也较为有限.

4 结论

本文通过综合采用异质结构限制效应、柔性束缚、光电场频谱分析优化以及交叉优化的方法, 使目前广泛研究的二维光子晶体缺三腔的性能获得了极大提升. 使腔的 Q 值达到了 2.8×10^5 , 同时保持有较小的模式体积约 $0.1813(\lambda_0/n)^3$, 相应的 Purcell 因子超过 12 万. 同时, 我们提出可采用“能量系数” γ 来定量分析微腔、纳米腔的优化结果, γ 可以快速有效地反映腔的性能变化. 研究表明, 当 γ 较小时 Q 值随 γ 快速提高, γ 很高时, Q 值和 γ 都接近饱和. 本文的研究结果为光子晶体纳米腔在纳米光子学领域的应用打下了基础, 也为实现单光子源提供了参考, 文中提高腔性能的优化方法和分析方法也可以用于其他形式的光腔.

- [1] Akahane Y, Asano T, Song B, Noda S 2003 *Nature* **425** 944
- [2] Song B, Noda S, Asano T, Akahane Y 2005 *Nature Mater.* **4** 207
- [3] Wang H Q, Fang L G, Wang Y F, Yu A L 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 014203(in Chinese) [王慧琴, 方利广, 王一凡, 余奥列 2011 物理学报 **60** 014203]
- [4] Noda S, Chutinan A, Imada M 2000 *Nature* **407** 608
- [5] Song B, Noda S, Asano T 2003 *Science* **300** 1537
- [6] Jiang B, Zhang Y J, Zhou W J, Chen W, Liu A J, Zheng W H 2011 *Chin. Phys. B* **20** 024208
- [7] Lončar M, Scherer A, Qiu Y 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 4648
- [8] Painter O, Lee R K, Scherer A, Yariv A, Brien J D, Dapkus P D, Kim I 1999 *Science* **284** 1819
- [9] Michler P, Kiraz A, Becher C, Schoenfeld W V, Petroff P M, Zhang L, Hu E, Imamoglu A 2000 *Science* **290** 2282
- [10] Zhou C Z, Xiong Z G, Li Z G 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 094201
- [11] Portalupi S L, Galli M, Reardon C 2010 *Opt. Express* **18** 16064
- [12] Barth M, Kouba J, Stingl J, Löchel B, Benson O 2007 *Opt. Express* **15** 17231
- [13] Akahane Y, Asano T, Song B, Noda S 2005 *Opt. Express* **13** 1202
- [14] Takano H, Song B, Asano T, Noda S 2006 *Opt. Express* **14** 3491
- [15] Notomi M, Kuramochi E, Taniyama H 2008 *Opt. Express* **16** 11095
- [16] Daniel Y, Cao T, Ivanov P, Cryan M, Craddock I, Railton C, Rarity J 2007 *IEEE J. Quant. Elect.* **43** 462

- [17] Vučković J, Lončar M, Mabuchi H, Scherer A 2001 *Phys. Rev. E* **65** 016608
- [18] Kuramochi E, Notomi M, Mitsugi S, Shinya A, Tanabe T 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 041112
- [19] Purcell E 1946 *Phys. Rev. Lett.* **69** 681
- [20] Patterson M, Hughes S 2009 *Phys. Rev. B* **80** 125307
- [21] Srinivasan K, Painter O 2002 *Opt. Express* **10** 670
- [22] Lecamp G, Lalanne P, Hugonin J P, Gerard J M 2005 *IEEE J. Quant. Elect.* **41** 1323

Numerical simulation and analysis of a high- Q two-dimensional photonic crystal L3 microcavity*

Pan Wei[†] Yu He-Jun Zhang Xiao-Guang Xi Li-Xia

(Institute of Information Photonics and Optical Communications, Beijing University of Posts and Telecommunications, Beijing 100876, China)

(Received 7 March 2011; revised manuscript received 18 April 2011)

Abstract

A new double-heterostructure photonic crystal L3 microcavity is designed, under the condition of “gentle confinement”, the quality factor of the cavity is optimized to reach as high as 2.8×10^5 by comparing the simulated mode distribution calculated by finite difference time domain algorithm with the ideal Gaussian distribution, while the mode volume remains small, $V_{\text{eff}} = 0.1813(\lambda/n)^3$. This is the best result at present. Additionally, an energy correlation coefficient is introduced to qualitatively describe the optimization level of a photonic crystal microcavity, which improves the speed and the accuracy of optimization.

Keywords: photonic crystal, three holes defeat cavity, finite difference time domain, energy coefficient

PACS: 42.55.Tv, 42.60.Da, 61.50.Ah

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10947150, 60977049).

[†] E-mail: panwei2005bupt@yahoo.cn