

通信波段硅基气孔光子晶体的带隙特性及其物理模型研究*

苗信建 黄伟其[†] 黄忠梅 周年杰 尹君

(贵州大学纳米光子物理研究所, 光电子技术与应用省重点实验室, 贵阳 550025)

(2013年9月23日收到; 2013年11月3日收到修改稿)

用平面波展开法对硅背景下的通信波段不同晶格类型和气孔形状光子晶体的能带结构进行数值计算与分析, 提出了相应的物理模型. 结果表明: 利用光子受限效应和晶格对称性效应可以有效地调控光子带隙. 随光子晶体填充率的增加, 其约束光子的能力增强, 光子带隙在一定范围内展宽且其中心频率蓝移; 带隙随晶格对称性增加而变宽. 对基元形状和旋转角度的研究发现, 光子带隙随基元旋转角度变化具有周期性和对称性, 表现出各向异性, 由此优化出对应的不同晶格的最佳谐振腔型结构.

关键词: 硅光子晶体, 光子受限效应, 对称性效应, 光子带隙调控

PACS: 02.70.Bf, 03.50.De, 03.65.Nk

DOI: 10.7498/aps.63.030203

1 引言

在硅芯片上以光子作为信息载体的光互联取代传统的电互联具有传输容量大、速度快、能耗低及抗干扰性强等优点^[1]. 光子晶体 (photonic crystal, PC) 是不同介电材料在空间上具有一定周期性分布的新型光控结构^[2-4]. 利用光子带隙 (photonic band gap, PBG) 和带隙中的缺陷态可以实现许多全新原理的高性能器件, 如光子晶体波导、高性能太阳能电池、强光LED和低阈值纳米激光器等^[5-8]. 基于在通信波段透明和目前成熟的硅基加工技术, 通信波段硅基光子晶体已成为一个非常活跃的研究领域. 尽管三维光子晶体具有全方向禁带, 考虑其制作工艺相当复杂, 实际较广泛应用的仍是具有平面禁带的二维光子晶体结构.

目前, 国内外的理论和实验研究主要集中于正方和三角晶格圆形腔光子晶体的结构. 为设计出带隙尽可能宽的晶体结构, 许多问题亟待解决. 例如, 如何展宽光子带隙, 怎样改变晶格类型、晶格基元形状和基元旋转角度等参数来影响光子带隙, 如何

通过改变晶格对称性和光子受限来有效调控光子带隙等. 空气背景下介质柱型光子晶体易形成较好的TM带隙, 介质背景下腔型光子晶体易形成较好的TE带隙^[9]. 在光子能带工程中, 晶格对称性破缺是一种有效改变带隙特性的方法^[10,11]. 本文主要研究在通信波段通过改变气孔形状和基元旋转角度等方法对不同晶格的硅光子晶体TE带隙产生影响, 提出相应的物理模型, 由此得到不同晶格的最佳结构参数.

2 模型建立与计算

采用平面波展开法^[12] (plane wave expansion, PWE) 计算电磁波在光子晶体中的传输及其带隙特性. 取通信波段硅和空气介电常数分别为12.25和1. 为分析晶格对称性效应和光子受限效应对光子带隙的影响, 首先构建不同晶格类型 (长方、正方和三角晶格) 和不同气孔形状 (圆形、正方形和六边形) 的光子晶体结构, 对其带隙参数优化比较, 并进行数值拟合. 然后改变不同晶格光子晶体的基元形

* 国家自然科学基金 (批准号: 11264007) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: sci.wqhuang@gzu.edu.cn

状和旋转角度, 分析比较带隙特性, 得到不同晶格最佳基元形状和取向.

部分晶格类型和气孔形状晶体结构如图 1 所示, a 为晶格常数, d 为基元宽度, 与圆孔直径对应. 其中, 图 1 (a), (b) 分别为三角晶格六边孔形和正方形孔形, 图 1 (c) 为正方晶格正方形孔形, 且规定此时它们的基元取向角度为 0° . 正方形和六边形分别满足四次和六次旋转对称操作, 旋转周期 T 分别为 90° 和 60° , 且 $T/2$ 处为旋转对称轴. 计算过程中旋转步长均取 15° , 图 1 (b) 中基元旋转 45° 后的结构如图 1 (d) 所示. 为使硅光子晶体的光子带隙出现在通信波段范围, 计算过程中均取 $a = 400 \text{ nm}$, 并定义填充率 $f = d/a$.

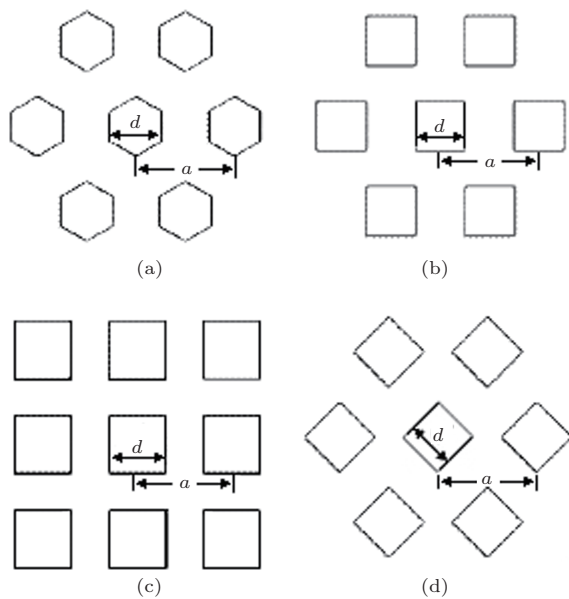


图 1 不同晶格类型和气孔形状的光子晶体结构

3 结果与讨论

3.1 光子受限效应和晶格对称性效应对光子带隙影响

在纳米尺度范围内, 随着纳米结构尺寸减小, 由于电子的量子受限效应^[13]电子带隙展宽. 在光波段尺度范围内, 不同晶格腔型光子晶体随填充率 f 增加, 约束光子能力增强, 光子带隙同样得到展宽, 且带隙中心频率蓝移. 图 2 所示为三角晶格圆形腔体结构的带隙宽度和中心频率随填充率变化曲线及其拟合.

其中带隙中心频率 E 与 f 关系满足下式:

$$E = A \cdot (1.155 - f)^{-n}. \quad (1)$$

式中 A 为光子受限效应系数(可由实验校准), $(1.155 - f)$ 对光子的约束作用可以与量子受限效应中纳米结构的尺寸效应类比^[14], f 越大, $(1.155 - f)$ 对应了光子所处的空间越小, 光子受约束越强, 故光子带隙中心的能量越高. 当 $f = 1$ 时, 晶体处于腔结构与硅柱结构临界值, 如图 2 (b) 中插图所示; f 约为 1.155 时, 整个空间恰为均一空气, 为理论受限最大值. 对不同晶格腔型光子晶体, A 和 n 分别取不同值.

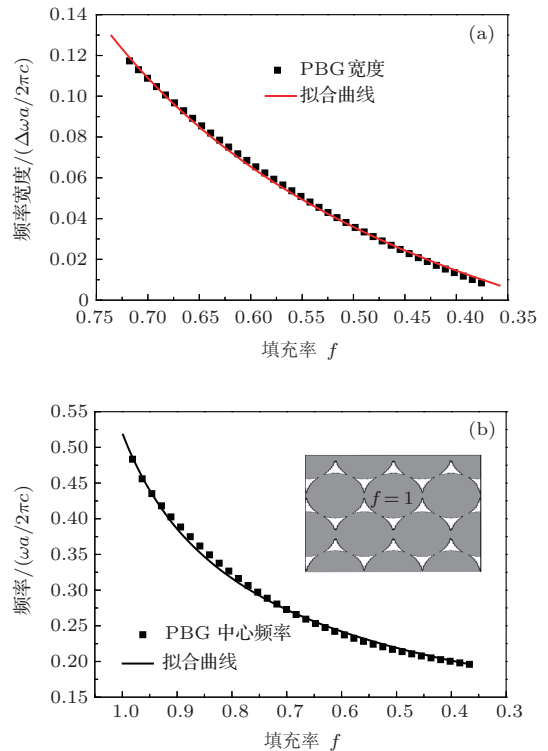


图 2 光子带隙参数随填充率变化关系曲线及其拟合 (a) 光子带隙宽度; (b) 光子带隙中心频率(插图为 $f = 1$ 时光子晶体结构)

以最简单的长方和正方晶格圆孔结构为模型, 分析改变晶格对称性与光子受限对光子带隙的影响. 长方晶格和正方晶格分别具有两次、四次旋转对称. 固定长方晶格中腔的大小和 X 方向的晶格常数 $a_x = a = 400 \text{ nm}$, 通过改变 Z 方向晶格常数 a_z 改变晶格对称性和光子受限, 晶体结构如图 3 中插图所示. 当 a_z 从大减小至 400 nm 的过程中, 长方晶格转为正方晶格, 晶格对称性增加, 光子受限增强; a_z 继续减小, 正方晶格又转为长方晶格, 对称性降低, 光子受限持续增强. 图 3 所示为光子带隙宽度随 a_z 变化关系及其拟合, 容易发现对称性和光子受限共同作用于光子带隙, 且使带隙宽度在 a_z 为 400 nm 时出现峰值 F .

结合数值拟合, 带隙宽度可通过下式表示:

$$\Delta E = -B \cdot (a_z - 400)^2 + c/a_z + D, \quad (2)$$

式中第一项的 B 与晶体对称性有关, 在 $a_z = 400$ nm 附近对称性对带隙起主要作用, B 取较大值, 可由图 3 中抛物线型拟合曲线 1 描述; 随着 a_z 增大, B 值变小, 第二项涉及的光子受限效应逐渐起主要作用, 可由图 3 中反比例线型拟合曲线 2 描述. 因此, 抛物线型和反比例线型可以精确描述光子晶体的对称效应和受限效应. 当 a_z 值离开 400 nm 时, 引起对称性破缺, 当 a_z 值大于 400 nm 时, 光子受限效应作用强于对称性破缺效应, 故光子受限效应起主要作用; 而当 a_z 值小于 400 nm 时, 其尺度小于光子受限效应的特征尺度 (对应光子的德布洛意波长), 故光子受限效应减弱, 对称性破缺效应起主要作用.

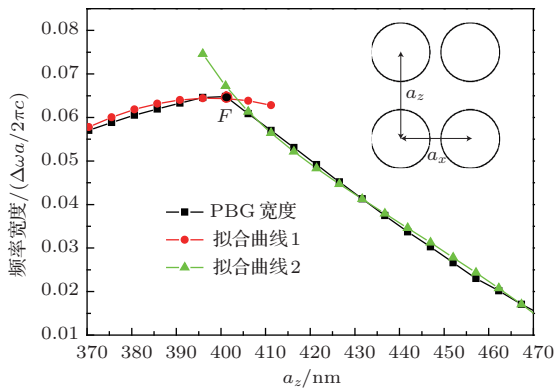


图3 长方晶格 PBG 宽度随 z 方向周期 a_z 变化曲线及其拟合 (插图为相应晶格结构)

相同条件下, 三角晶格腔型光子晶体比正方晶格形成更大的 TE 光子带隙^[15]. 由于三角晶格具有六次旋转对称, 比正方晶格对称效果更好. 因此容易得出结论: 相同条件下, 随晶格对称性增加, 光子晶体形成较好的光子带隙.

3.2 同一晶格不同基元形状的光子带隙比较

对三角晶格腔型光子晶体, 基元形状分别取圆形、六边形和正方形. 为便于分析令 d 为 1, 则圆孔、六边形孔和正方孔所占空间面积分别为 $\pi/4$, 0.866 和 1, 依次增加. 如图 4 (a), (b) 所示, 当 f 取值小于 0.7 时, 圆孔、六边形孔和正方孔光子晶体对应的带隙宽度和中心频率均依次增加. 因此对晶格相同基元形状不同的光子晶体, 在填充率一定条件下, 腔所占空间越大, 光子所处空间越小, 相应光子受

限效应增强, 带隙变宽. 但是, 随填充率增加, f 为 0.866 时三角晶格正方孔结构首先开始转化为硅柱结构, TE 带隙很快消失. 对于 TM 带隙会有类似的效应.

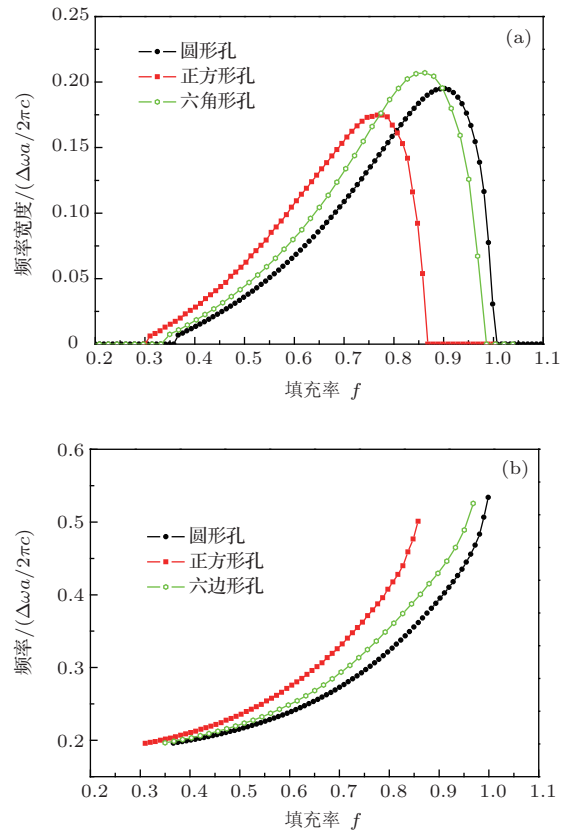


图4 三角晶格不同腔型带隙参数随填充率变化曲线 (a) 光子带隙宽度; (b) 光子带隙中心频率

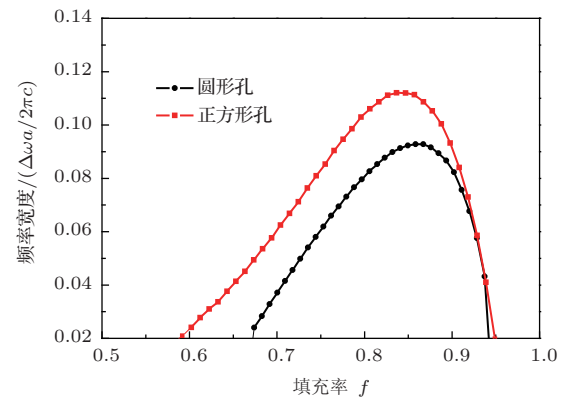


图5 正方晶格圆形和正方形腔带隙宽度随填充率变化

上述情况对正方晶格不同基元形状光子晶体同样适用. 图 5 所示分别为正方晶格圆形和正方孔光子晶体带隙宽度随填充率变化, 很明显正方晶格正方孔结构带隙宽度在整个填充率范围内均优于

圆形孔. 由图 4(a) 和图 5 可知, 三角晶格六边形孔和正方晶格正方孔与其他孔形相比有明显的 PBG 宽度最大值. 它们的结构独特性在于随着填充率增加至整个空间全为空气 (f 均为 1) 过程中, 腔没有过渡为硅柱结构, 可实现对空间的充分占据, 从而达到对光子最佳约束, 有利于 TE 带隙的形成.

3.3 同一晶格基元旋转不同角度的光子带隙比较

对三角晶格六边形腔和正方晶格正方形腔结构, 基元旋转满足周期性和对称性. 研究发现, 它们的光子带隙宽度随基元旋转角度变化同样满足旋转周期性和对称性, 表现出各向异性, 而带隙中心频率相同, 其中带隙宽度变化分别如图 6(a), (b) 所示. 由于只改变基元旋转角度, 约束光子能力没有改变, 只有对称性效应对带隙有影响. 基元旋转角度为 0° 时, 对应带隙宽度均为最大值, 旋转一个周期 T 的过程中, 带隙宽度先减小后增加相应也变化一个周期; 旋转角度分别为 $T/2$ 时, 由于对称性破缺最大, 带隙宽度最小. 这类特殊结构光子晶体的各向异性, 可应用于滤波器、太阳能电池和纳米激光器等方面. 图 6(b) 中拐点 G , H 分别对应

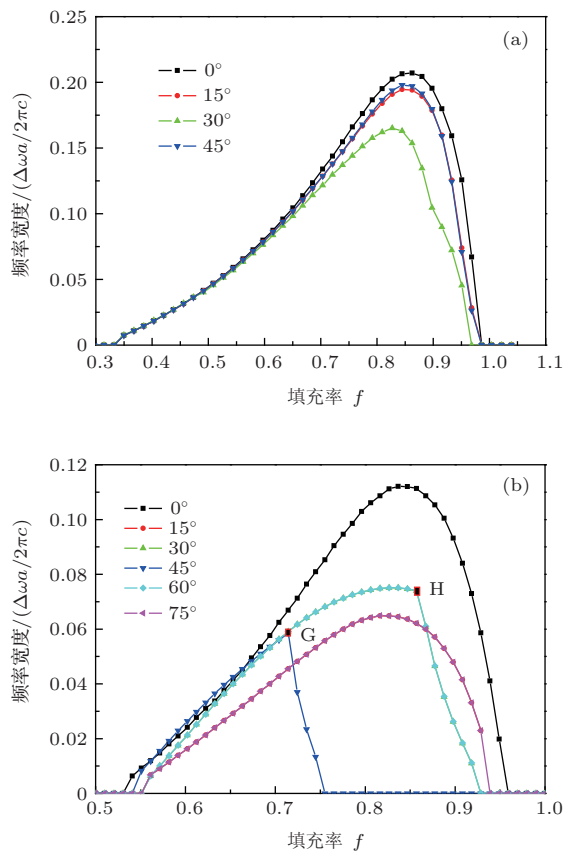


图 6 基元旋转不同角度时带隙宽度随填充率变化比较 (a) 三角晶格六边形腔; (b) 正方晶格正方形腔

f 为 0.707 和 0.857, 由于孔结构开始转变为硅柱导致 TE 带隙快速减小.

4 结 论

总之, 本文通过构建物理模型, 用平面波展开法研究了光波尺度下的光子受限效应和晶格对称性效应对光子带隙的调控. 第一, 光子受限效应和晶格对称性效应共同影响光子带隙的形成, 且在一定条件下分别起主要作用. 随填充率增加, 光子受限增强, 带隙在一定范围内展宽且其中心频率蓝移. 三角晶格与长方晶格、正方晶格相比对称性最好, 形成较好的光子带隙. 第二, 对同一晶格光子晶体, 在一定范围内相同条件下基元所占空间越大, 带隙特性越好, 光子受限效应起主要作用. 第三, 光子带隙随晶格基元旋转角度满足周期性和对称性, 即表现各向异性, 对称性效应起主要作用. 随填充率增加, 基元取向一定的三角晶格六边形腔和正方晶格正方形腔结构光子晶体带隙有最优值.

参考文献

- [1] Ruan J, Fauchet P M, Negro L D, Cazzanelli M, Pavese L 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 5479
- [2] Yablonovitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059
- [3] John S 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2486
- [4] Wang X G, Zhang D Z, Li Z Y 2008 *Chin. Phys. B* **17** 1101
- [5] Galli M, Politi A, Belotti M, Gerace D, Liscidini M 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 251114
- [6] Huang W Q, Miao X J, Huang Z M, Liu S R, Qin C J 2012 *Chin. Phys. B* **21** 094207
- [7] Huang W Q, Huang Z M, Miao X J, Liu X R, Qin C J 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 214205 (in Chinese)[黄伟其, 黄忠梅, 苗信建, 刘世荣, 秦朝建 2012 物理学报 **61** 214205]
- [8] Weng B B, Ma J G, Wei L, Li L, Qiu J J, Xu J, Shi Z S 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 221110
- [9] Joannopoulos J D, Johnson S G, Winn J N, Meade R D 2008 *Photonic crystals* (Princeton: Princeton University Press) p243
- [10] Anderson C M, Giapis K P 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 2949
- [11] Li Z Y, Gu B Y, Yang G Z 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 2574
- [12] Plihal M, Maradudin A A 1991 *Phys. Rev. B* **44** 8565
- [13] Proot J P, Delerue C, Allan G 1992 *Appl. Phys. Lett.* **61** 1948
- [14] Huang W Q, Huang Z M, Cheng H Q, Miao X J, Shu Q, Liu S R, Qin C J 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 171601
- [15] Villeneuve P R, Piche M 1992 *Phys. Rev. B* **46** 4969

A physical model for band gap of silicon-based photonic crystal of air hole at telecom wavelengths*

Miao Xin-Jian Huang Wei-Qi[†] Huang Zhong-Mei Zhou Nian-Jie Yin Jun

(Institute of Nanophotonic Physics, Key Laboratory of Photoelectron technology and application, Guizhou University, Guiyang 550025, China)

(Received 23 September 2013; revised manuscript received 3 November 2013)

Abstract

Band structures of silicon photonic crystal (PC) with different lattices and shapes of air holes at telecom wavelengths were investigated by plane-wave expansion method, and the related physical models were proposed. Calculated results demonstrate that photonic band gap (PBG) can be effectively manipulated by photon confinement effect and lattice symmetry effect. With the increase of filling fraction, the ability with which photons are confined by PC is enhanced, PBG is opened and the central frequency undergoes a blue-shift. PBG is enlarged as the lattice symmetry increases. Shape and rotation of lattice element are also studied. Band gap with the rotation angle which follows periodicity and symmetry indicates its anisotropy. The optimal cavity structures for different lattices are also found.

Keywords: silicon photonic crystal, photon confinement effect, symmetry effect, photonic band gap manipulation

PACS: 02.70.Bf, 03.50.De, 03.65.Nk

DOI: [10.7498/aps.63.030203](https://doi.org/10.7498/aps.63.030203)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11264007).

[†] Corresponding author. E-mail: sci.wqhuang@gzu.edu.cn