

## 补充材料

## 基于二维六方氮化硼材料的光子晶体非对称传输异质结构设计

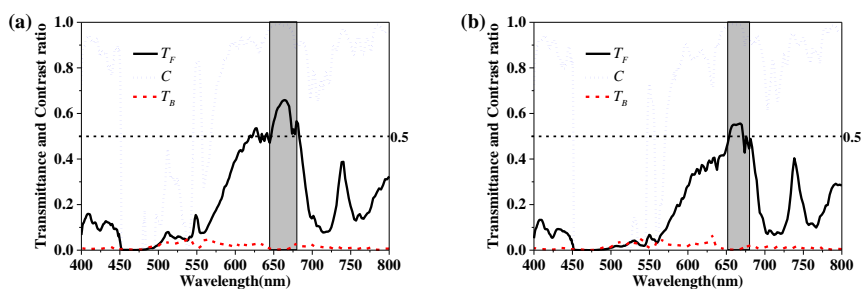
## 1. 理论模型计算方法

本文首先采用平面波展开法(R-SOFT 软件)计算 TE 偏振模式下 PhC1 和 PhC2 的能带图和等频图。平面波展开法是用来计算光子晶体能带色散关系的一种方法,主要是将电磁波以平面波叠加的方式进行转化,并通过麦克斯韦方程组得到本征方程,从而通过求解本征方程组来得到本征值,即可得到光子能带。等频图是在  $k$  空间中采用平面波展开法的麦克斯韦方程的本征频率解。本征频率解是每个频率值的色散图的横截面表示,展现出关于每个频率的入射光传输方向。

文中采用时域有限差分法(Lumerical FDTD Solutions 软件)计算 TE 偏振光波入射异质结构的正向、反向电场强度分布图与透射谱,时域有限差分法是对偏微分波动方程的离散化求解,利用时间和空间将偏微分方程转化为差分方程,从而求解电磁波传播过程中的各个离散点的参量与时间的函数关系。并且通过傅里叶级数的转化,可以同时计算出大的频率范围内的结果,此方法不会局限于光子晶体的几何结构,可以有效地得出所求结构的透射和反射等性能。

## 2. 结构性能优化

本研究发现整体的结构尺寸也影响整体器件的性能。在本文中使用的是时域有限差分方法(Lumerical FDTD Solutions 软件)来计算二维光子晶体(无限厚)结构的透射性能,光源为 TE 偏振模式光源,边界采用完美匹配层边界条件。其结构尺度是由晶格的行数和列数决定的。不同结构尺寸对应的透射率曲线如图 1 中所示。可以看到在不同尺度下,结构的透射带宽是在变化的,当尺度为  $11\ \mu\text{m}\times 11\ \mu\text{m}$ (26 行 26 列)工作带宽较宽,因此本文选择  $11\ \mu\text{m}\times 11\ \mu\text{m}$  的结构来分析研究。



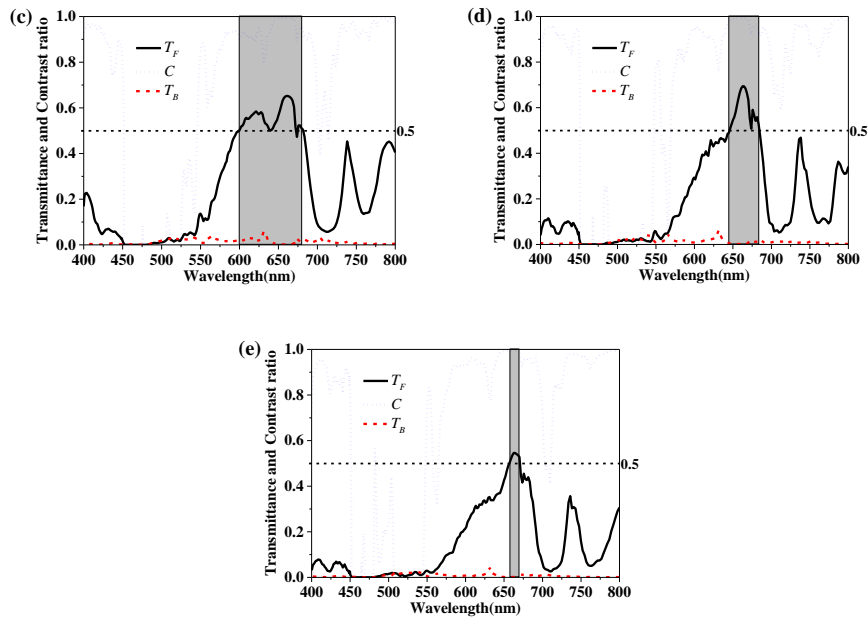


图 1 不同异质结构尺寸时, 光子晶体异质结构的透射谱图 (a)  $9\ \mu\text{m} \times 9\ \mu\text{m}$  (22 行 22 列); (b)  $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$  (24 行 24 列); (c)  $11\ \mu\text{m} \times 11\ \mu\text{m}$  (26 行 26 列); (d)  $12\ \mu\text{m} \times 12\ \mu\text{m}$  (28 行 28 列); (e)  $13\ \mu\text{m} \times 13\ \mu\text{m}$  (32 行 32 列)

Fig. 1 The transmittance spectra of photonic crystal heterostructure with dimensions of (a)  $9\ \mu\text{m} \times 9\ \mu\text{m}$  (22 rows and 22 columns); (b)  $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$  (24 rows and 24 columns); (c)  $11\ \mu\text{m} \times 11\ \mu\text{m}$  (26 rows and 26 columns); (d)  $12\ \mu\text{m} \times 12\ \mu\text{m}$  (28 rows and 28 columns); (e)  $13\ \mu\text{m} \times 13\ \mu\text{m}$  (32 rows and 32 columns).

同时, 为了最大化耦合效率, 本文研究了界面影响(这里定义: 界面 1 为入射波导与光子晶体 1(PhC1)的界面; 界面 2 为光子晶体 1(PhC1)与光子晶体 2(PhC2)的界面; 界面 3 为光子晶体 2(PhC2)与出射波导的界面, 出射波导宽度为  $w$ ), 如图 2。界面主要影响的是光波导与光子晶体, 以及两种光子晶体之间的耦合效率, 并最终影响整体的透射率。由图 3 透射谱可见, 光波导界面与光子晶体 PhC1 的距离变化取值范围从  $0.3a_1$  到  $1.5a_1$ ,  $a_1$  为光子晶体 1(PhC1)的晶格常数, 当界面间距从  $0.5a_1$  到  $a_1$  变化时, 正向透射率带宽保持稳定, 且带宽内正向透射率保持在 0.65 附近。文中我们选择了入射波导界面与光子晶体 PhC1 的距离为  $0.5a_1$ 。继续讨论改变 PhC1 与 PhC2 的间距对整体性能的影响, 图 4 为在 PhC1 与界面 2 的距离不同时(取值范围从  $0.5a_1$  到  $2.0a_1$ ), 结构的透射谱图, 从图 4 中可以看到, 当 PhC1 与界面 2 间距为一个晶格常数  $a_1$  时, 光子晶体异质结构的传输带宽较宽, 反向截止度高, 因此, 文中选择了 PhC1 与界面 2 间距为一个晶格常数  $a_1$ 。

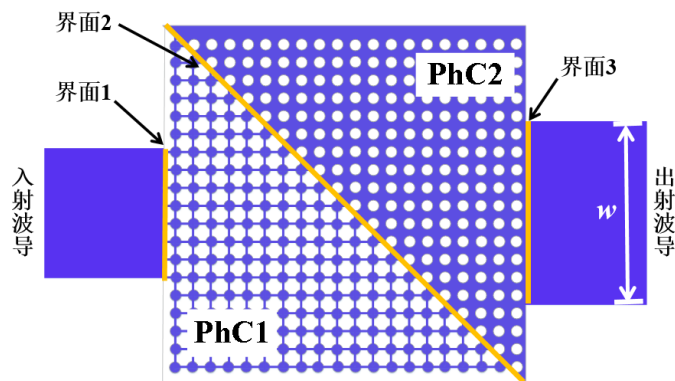


图 2 异质结构界面示意图 界面 1, 入射波导与 PhC1 的界面; 界面 2, PhC1 与 PhC2 的界面; 界面 3, PhC2 与出射波导的界面

Fig. 2 Schematic diagram of heterostructure interface: Interface 1, the interface between the incident waveguide and PhC1; interface 2, the interface between PhC1 and PhC2; interface 3, the interface between the PhC2 and the outgoing waveguide

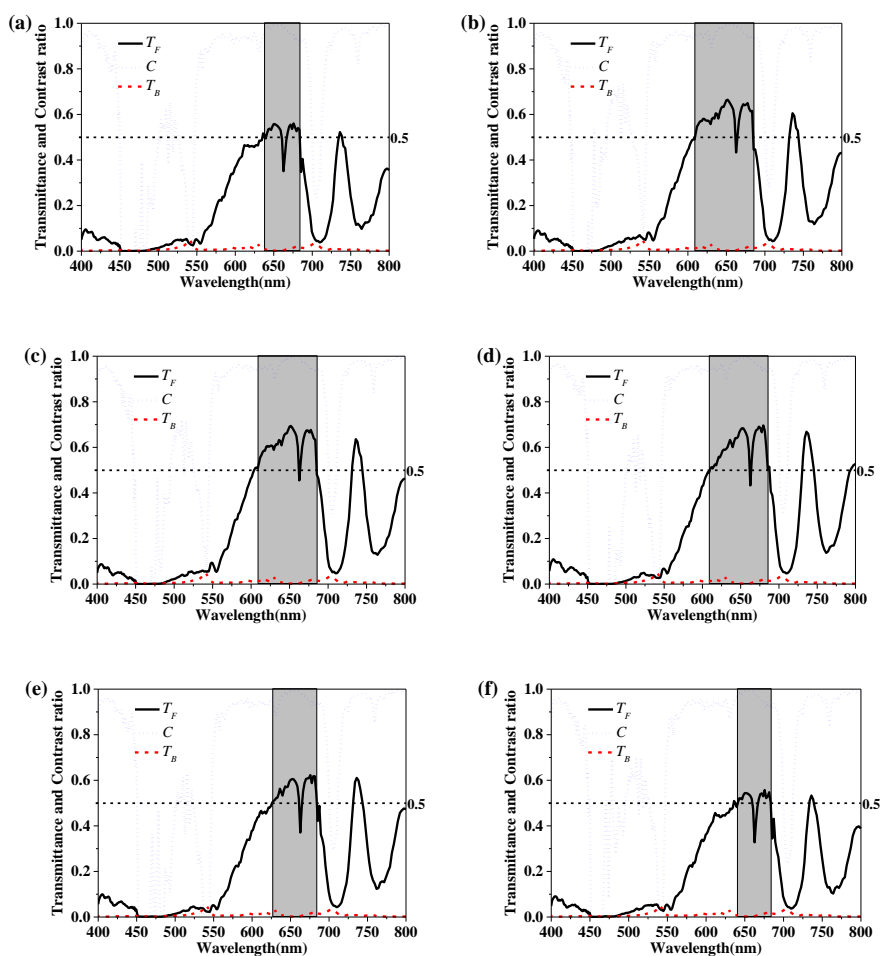


图 3 异质结构中入射光波导与光子晶体 PhC1 的距离分别为(a)0.3a<sub>1</sub>;(b)0.5 a<sub>1</sub>;(c)0.7 a<sub>1</sub>; (d)a<sub>1</sub>; (e)1.3 a<sub>1</sub>;(f)1.5 a<sub>1</sub> 时, 光子晶体异质结构的透射谱图

Fig. 3 The transmittance spectra of photonic crystal heterostructure with distances between the incident optical waveguide and PhC1 are: (a)  $0.3a_1$ ; (b)  $0.5a_1$ ; (c)  $0.7a_1$ ; (d)  $a_1$ ; (e)  $1.3a_1$ ; (f)  $1.5a_1$ .

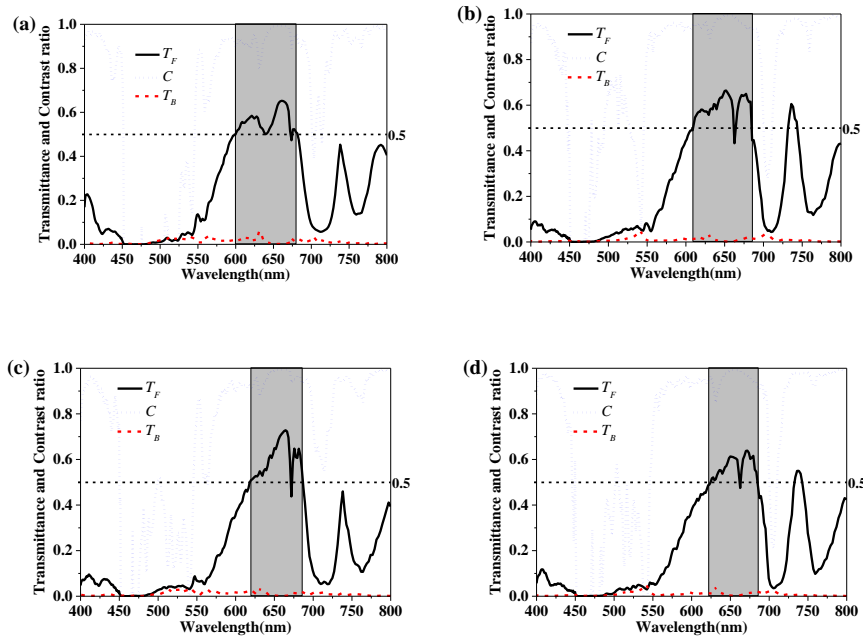


图 4 异质结构中不同 PhC1 与 PhC2 距离时光子晶体异质结构的透射谱图(a)  $0.5a_1$ ; (b)  $a_1$ ; (c)  $1.5a_1$ ; (d)  $2.0a_1$

Fig. 4 The transmittance spectra of the photonic crystal heterostructure with the distances between PhC1 and PhC2 of the heterostructure is: (a)  $0.5a_1$ ; (b)  $a_1$ ; (c)  $1.5a_1$ ; (d)  $2.0a_1$ .

接下来讨论了光子晶体 2 与右侧出射光波导(界面 3)的耦合效率, 首先通过改变右侧出射波导的宽度, 用于提高右侧波导的耦合效率。异质结构的出射波导宽度取值范围从  $1.5 \mu\text{m}$  到  $6 \mu\text{m}$ , 其光波正向透射谱情况, 如图 5 所示, 在出射波导宽度  $w=4.5 \mu\text{m}$  时, 正向透射率带宽保持稳定, 且带宽内正向透射率保持在 0.65 附近。因此, 文中右侧出射波导宽度设置为  $4.5 \mu\text{m}$ 。继续计算了分别在光子晶体二(PhC2)和出射波导的正向透射率以及界面 3 的耦合效率(即出射波导处正向透射率/PhC2 中的正向透射率), 如图 6, 出射波导基本能够将 PhC2 中的光收集起来, 平均耦合效率达到 78%, 在  $652 \text{ nm}$  的峰值位置, 耦合效率达到  $0.627/0.682=92.0\%$ , 传输带宽内整体保持在 90% 左右。

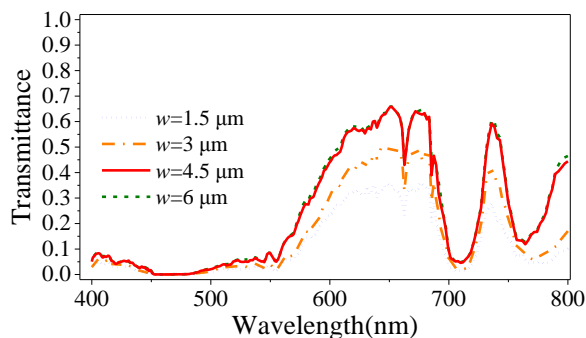


图 5 异质结构中出射波导宽度分别为  $1.5 \mu\text{m}$ ,  $3.0 \mu\text{m}$ ;  $4.5 \mu\text{m}$ ;  $6.0 \mu\text{m}$  时,

光子晶体异质结构的正向透射谱图

Fig. 5 The forward transmittance of the photonic crystal heterostructure with the different widths of the outgoing waveguide, which are 1.5  $\mu\text{m}$ ; 3.0  $\mu\text{m}$ ; 4.5  $\mu\text{m}$ ; 6.0  $\mu\text{m}$ .

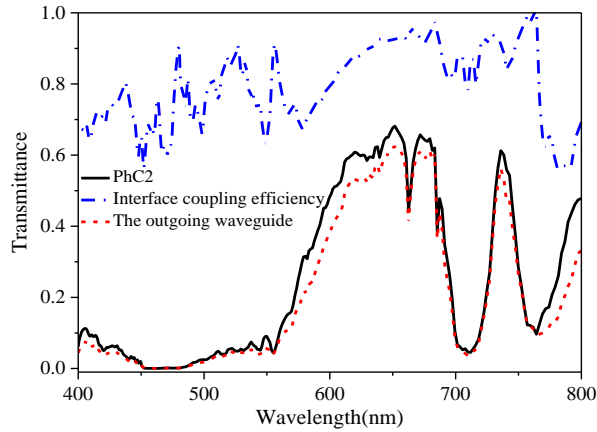
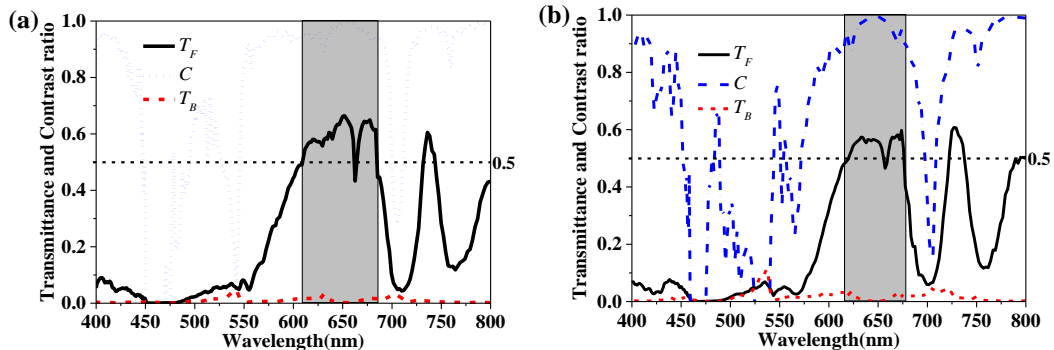


图 6 异质结构分别在 PhC 2 与出射波导中的透射率及界面耦合效率图

Fig. 6 The transmittance and interface coupling efficiency plot of the heterostructure in the PhC 2 and the outgoing waveguide.

### 3. 非对称传输器件实际性能的可能影响因素

研究发现，微纳结构在加工过程中，微介质柱表面可能不光滑、非理想的圆柱形状，或是涉及到精度问题，介质柱半径有几纳米的偏差，影响到光的传输效率。本小组设计的异质结构，在计算中发现，当微介质柱半径加工误差在  $\pm 10 \text{ nm}$  的范围内(如图 7 所示)，仍可以保证结构的高性能单向传输(正向透射率高于 0.5)，透射对比度高于 0.9，带宽保持在 50 nm 以上，因此仍然可以保证器件正常工作。



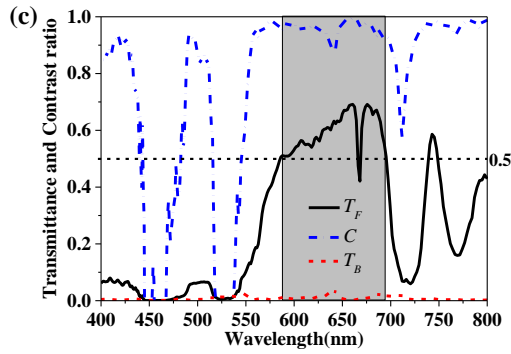


图7 异质结构介质柱半径变化 $\pm 10$  nm时, 光子晶体异质结构的透射谱图 (a) $r_1=90$  nm,  $r_2=80$  nm(原结构); (b) $r_1=100$  nm,  $r_2=90$  nm; (c) $r_1=80$  nm,  $r_2=70$  nm

Fig. 7 The transmittance spectrum of the photonic crystal heterostructure when the radius of the dielectric rods change  $\pm 10$  nm: (a) $r_1=90$  nm,  $r_2=80$  nm(原结构); (b) $r_1=100$  nm,  $r_2=90$  nm; (c) $r_1=80$  nm,  $r_2=70$  nm.

同时, 考虑界面间距对结构性能带来的影响, 即界面 1: 入射光波导与 PhC1 的界面; 界面 2: PhC1 与 PhC2 的界面, 在微纳加工过程中, 可能无法精准控制界面的间距产生缺陷, 影响光波的传输, 这里, 我们分析了入射光波导与 PhC1 间距为  $0.3a_1-1.5a_1$  (120—600 nm) 范围内(见补充材料图 3), 正向透射率仍保持在 0.5 以上, 带宽大于 50 nm 的良好性能。PhC1 与 PhC2 间距为  $0.5a_1-2.0a_1$  (210—840 nm) 范围内(见补充材料图 4), 正向透射率稳定在 0.6 附近, 带宽保持稳定, 可见, 在一定的范围内, 结构性能受界面间距的影响较小。

#### 4. 二维平板结构性能研究及实验制作流程设计

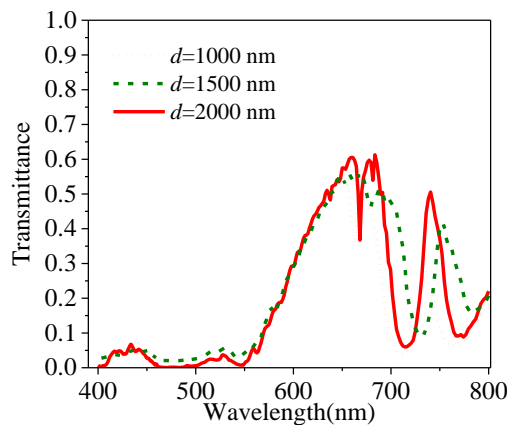


图8 异质结构厚度为  $d=1000$  nm,  $d=1500$  nm,  $d=2000$  nm 时, 光子晶体异质结构的正向透射率对比图

Fig. 8 Forward transmittance contrast spectra of the heterostructures with thicknesses of  $d=1000$  nm,  $d=1500$  nm, and  $d=2000$  nm

本研究的方法是首先从二维光子晶体(无限厚)的结构出发, 研究如何优化二维光子晶体的结构参数, 实现最优的非对称光传输的器件性能。然后在此基础上设计整体结构的厚度, 实现

有限厚度的适合于实验加工的非对称光传输器件。由于 hBN 本身的折射率较低, 本研究设计的材料的厚度为  $2\ \mu\text{m}$  (6000 层左右) 来最大限度的减小传输损耗, 运用 Lumerical FDTD Solutions 计算, TE 基模模式光源入射有限厚度二维光子晶体平板结构, 得到不同厚度的二维光子晶体平板的透射谱图, 如图 8 所示。

结合目前的实验平台, 拟设计异质结构的制备方法为: hBN 薄片剥落到开槽的硅基板上。然后, 沉积 15 nm 的钨层。PMMA 旋转镀膜在钨层上。下一步, 通过 EBL 在 PMMA 制作出图案。然后将其转印通过 RIE 转移到钨掩膜。之后再以钨层为掩模使用 EBIE 蚀刻出 hBN 结构。最后使用  $\text{H}_2\text{O}_2$  去除钨掩膜。这种一体式结构的制作工艺要求与制作空气孔光子晶体的工艺十分接近<sup>[1]</sup>(当然加工过程参数需要专门优化), 因此根据目前的实际工艺是完全可以实现的。

#### 参考文献

- [1] Kim S, Fröch J E, Christian J, Straw M, Bishop J, Totonjian D, Watanabe K, Taniguchi T, Toth M, Aharonovich I 2018 *Nat. Commun.* **9** 2623