

# 立体耦合光子晶体薄板微腔的高 $Q$ 值特性研究\*

江 斌 刘安金 陈 微 邢名欣 周文君 郑婉华<sup>†</sup>

(中国科学院半导体研究所, 北京 100083)

(2010 年 1 月 1 日收到; 2010 年 6 月 1 日收到修改稿)

利用微腔之间的立体耦合, 提出了基于无源材料硅的双层光子晶体薄板 H1 (DLPCS-H1) 腔, 薄板之间为空气层. 使用三维时域有限差分方法和 Padé 近似方法分析了 DLPCS-H1 腔的偶极模的场分布和品质因子. 通过对中间空气层高度的优化使 DLPCS-H1 腔的偶极模的品质因子得到了显著的提高, 大约为单层光子晶体薄板 H1 腔的偶极模的品质因子的 4 倍. 此外, 还研究了三层光子晶体薄板 H1 腔, 它的偶极模的品质因子约为单层光子晶体薄板 H1 腔的偶极模的品质因子的 7 倍.

**关键词:** 双层光子晶体薄板微腔, 偶极模, 品质因子, Padé 近似

**PACC:** 4260D, 4270Q

## 1. 引 言

光子晶体具有光子带隙、负折射、抑制自发辐射等特点<sup>[1,2]</sup>, 可以在微纳尺度实现光调控, 具有广阔的应用前景, 例如在低阈值甚至无阈值光子晶体激光器、光子晶体滤波器、光子晶体波导<sup>[3-7]</sup>等方面都有着重要的应用. 光子晶体微腔具有极高的品质因子、极小的模式体积, 可以实现对光的强烈局域, 增强光与物质的相互作用, 促进原子的自发辐射. 因而, 在上述应用中光子晶体微腔扮演了一个非常重要的角色, 光子晶体微腔也是未来实现高速光通信的关键器件. 自 1999 年 Painter 等<sup>[3]</sup>首次报道了百纳米量级的光子晶体激光器以来, 基于光子晶体微腔的研究就立刻吸引了世界各个研究小组的密切关注. 在光子晶体微腔中, 品质因子作为衡量微腔性能的一个重要参数, 直接制约微腔束缚能量的能力. 此外, 具有高品质因子的微腔具有更窄的线宽、更高的分辨率、更低的阈值等诸多优点, 因而设计高品质因子的微腔成了光子晶体微腔设计的重要内容.

提高微腔的品质因子的关键是要设法阻止微腔内的能量向外泄漏. 对于二维光子晶体薄板结构, 水平方向的光限制机制是布拉格反射, 竖直方

向则是依靠薄板和空气层的折射率差导致的全反射. 理论计算和分析表明<sup>[8]</sup>, 当光子晶体水平方向的周期数足够多时, 水平方向的泄漏很小, 竖直方向的能量泄漏是影响光子晶体薄板微腔品质因子的重要因素. 所以, 如何有效地减小竖直方向的能量泄漏受到了广泛关注.

光子晶体微腔内的场分布和品质因子对微腔的几何结构变化非常敏感, 结构上的任何微小变化都将在一定程度上改变光子晶体微腔的光学特性. 近年来, 国内外学者对光子晶体微腔结构进行微调, 提出了各种各样的光子晶体微腔结构, 获得了高品质因子和较小模式体积的微腔<sup>[9-11]</sup>. 但之前对微腔结构的调整主要是在光子晶体微腔的水平方向, 而且结构的调整设计相对比较复杂, 往往只是针对某个特定结构, 难以推广到其他结构. 本文关注微腔竖直方向结构的变化, 利用微腔之间的立体耦合, 研究双层光子晶体薄板微腔结构.

在众多光子晶体微腔中, 三角晶格空气孔光子晶体 H1 腔的偶极模由于具有高偏振、易于竖直耦合等特点, 在实际应用中有非常高的使用价值. 但是对于简单的 H1 腔, 其偶极模的品质因子比较低, 虽然通过微调 H1 腔周围的空气孔可以提高 H1 腔内偶极模的品质因子, 但是提升空间有限. 因而本文以 H1 腔为例, 使用基于无源材料硅的双层光子

\* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2006CB921705)、国家自然科学基金 (批准号: 10634080, 60677046, 60838003) 和国家高技术研究发展计划 (批准号: 2007AA03Z410, 2007AA03Z408) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: whzheng@semi.ac.cn

晶体薄板 H1 (DLPCS-H1) 腔, 利用上下两个光子晶体薄板 H1 腔之间的立体耦合, 提高 H1 腔的偶极模的品质因子. 研究发现, 通过设计适当的空气层高度, DLPCS-H1 腔的偶极模的品质因子提高了近 4 倍, 三层光子晶体薄板 H1 腔的偶极模的品质因子提高了近 7 倍. 这个设计思想非常清晰明了, 而且易于推广到其他结构.

## 2. 结构设计和数值计算方法

如图 1 所示, DLPCS-H1 腔具有上下薄板之间为空气层的类三明治结构. 上下两个薄板采用的是完全相同的三角晶格光子晶体空气孔结构, 且上下两薄板关于空气层中间平面对称. 去掉上下薄板中央的一个空气孔形成光子晶体 H1 腔, 同时调整 H1 腔最近邻六个空气孔的半径  $r_1$ , 使其缩小为原来的  $7/10$ , 目的是为了增大其品质因子, 同时在微腔内产生更多的模式, 便于不同模式的研究. 结构的具体参数如下: 材料折射率  $n = 3.4$ , 晶格常数  $a = 420 \text{ nm}$ , 空气孔半径  $r = 0.3a$ , H1 腔最近邻空气孔半径  $r_1 = 0.7r$ , 光子晶体薄板的厚度  $t = 0.6a$ , 空气层高度记为  $h$ .

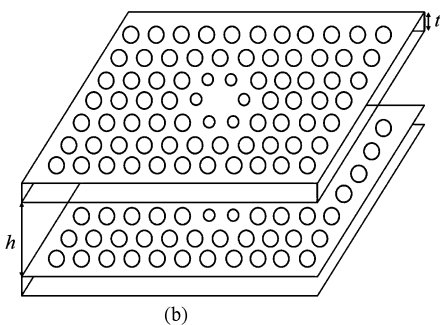
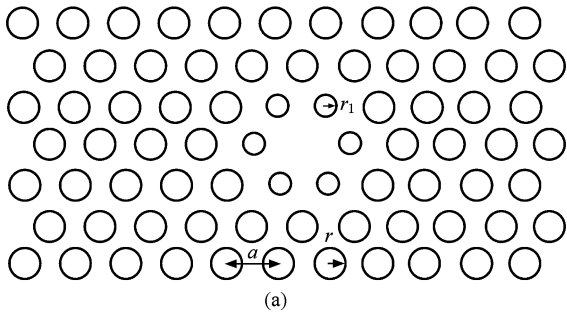


图 1 DLPCS-H1 腔结构示意图 (a) DLPCS-H1 腔俯视图, (b) DLPCS-H1 腔立体图

通过调整空气层高度  $h$ , 改变上下两个光子晶

体薄板 H1 腔之间的立体耦合, 可以得到不同的微腔结构. 为了比较不同微腔的性能, 我们计算了微腔内偶极模的品质因子和场分布, 从而设计出高品质因子的微腔结构. 由于本文着重关注微腔品质因子的变化情况, 因而采用高效的光子晶体品质因子的计算方法尤为重要. 光子晶体品质因子的计算方法有许多种, 比如频谱方法、品质因子的能量定义法、能量衰减法等. 使用频谱方法时, 需要用快速傅里叶变换 (FFT) 或离散傅里叶变换 (DFT) 把时域序列转换为频域序列, 再由品质因子的计算公式  $Q = \omega / \Delta\omega$  (其中  $\omega$  为模式的谐振频率,  $\Delta\omega$  为频谱谱峰的半高全宽) 计算得到品质因子. 当品质因子非常大时, 频谱谱峰的半高全宽非常小, 要求频谱具有非常高的精度. 由于 FFT 和 DFT 变化得到的频域精度与做 FFT 和 DFT 变化的时间序列的长度成正相关, 所以当微腔的品质因子很大时需要非常长的时间序列, 这将消耗大量的时间. 采用品质因子的能量定义公式  $Q = \omega U(t) / P(t)$  (其中  $U(t)$  为微腔中存储的能量,  $P(t)$  为耗散功率) 时, 需要得到稳定的场所对应的准确能量  $U(t)$  和耗散功率  $P(t)$ . 采用能量衰减法时, 认为微腔内存储的能量以  $U(t) = U_0 \exp(-\alpha t)$  的指数形式衰减, 品质因子定义为  $Q = 2\pi\nu / \alpha$  (其中  $\nu$  为谐振频率,  $\alpha$  为衰减因子), 可以通过 e 指数拟合的方法计算得到. 品质因子能量定义法和能量衰减法需要得到稳定的场分布, 但是当品质因子较大时, 场需要非常长的时间才能稳定, 因而这两种方法在处理高品质因子微腔时也需要很长的时间. 基于上述分析可知, 采用传统的品质因子计算方法计算模式的品质因子不可避免地需要花费大量的时间. 本文采用一种基于 Baker 算法的 Padé 近似方法来计算品质因子<sup>[12-14]</sup>, Padé 近似方法是一种高精度非线性近似方法, 利用这个方法可以从短的时间序列中得到高分辨率的频谱, 并具有非常高的稳定性.

## 3. 数值计算结果及讨论

在计算过程中, 源放置在上层薄板中, 在上层薄板、空气层、下层薄板中间  $xoy$  平面的不同位置设置监测点来监测磁场的时域信号和磁场的空间分布. 图 2(a) 示出了薄层厚度为  $0.6a$  ( $1a = 420 \text{ nm}$ ) 的二维光子晶体空气孔薄板 H1 腔的偶极模的  $H_z$  场分布. 图 2(b), (c), (d) 分别对应空气层厚度为

$0.5a$  的 DLPCS-H1 腔中上层薄板中间  $xoy$  平面、空气层中间  $xoy$  平面、下层薄板中间  $xoy$  平面的成键态偶极模的  $H_z$  场分布. 从图 2 (b), (c), (d) 可以看出, 这个模式不同部位都显示出偶极模特征, 并有相同的振动方向和相似的场分布. 图 2 (f), (g), (h) 分别对应空气层厚度为  $0.5a$  的 DLPCS-H1 腔中上层薄板中间  $xoy$  平面、空气层中间  $xoy$  平面、下层薄板中间  $xoy$  平面的反键态偶极模的模场分布. 从图 2 (b), (c), (d) 可以看出, 在光子晶体上层薄板和下层薄板都显示出偶极模特征, 并具有相似的场分布, 但是上层薄板和下层薄板的模场之间存在  $180^\circ$  的相位差. 图 2 (e), (i) 分别为成键态偶极模和反键态偶极模在  $xoz$  平面的  $H_z$  场分布, 从中可以更

清晰地看出两个模式的差异, 成键态偶极模的场分布上下对称, 反键态偶极模的场分布上下反对称. 成键态偶极模和反键态偶极模的形成是由上下两个薄板之间的模式存在相互作用导致的. 上层薄板 H1 腔的模式耦合到下层薄板 H1 腔中形成谐振模式, 接着再作用于上层薄板 H1 腔, 通过上下层薄板 H1 腔的相互作用使得单层薄板微腔中的偶极模分裂成两个偶极模, 并最终形成一个稳定的场分布. 另外, 因为上下层薄板的微腔结构完全一样, 所以上下层薄板的谐振波长及其所对应的场分布是相似的. 由于成键态偶极模的场分布更稳定, 品质因子比反键态偶极模高, 本文着重研究成键态偶极模的品质因子的变化情况.

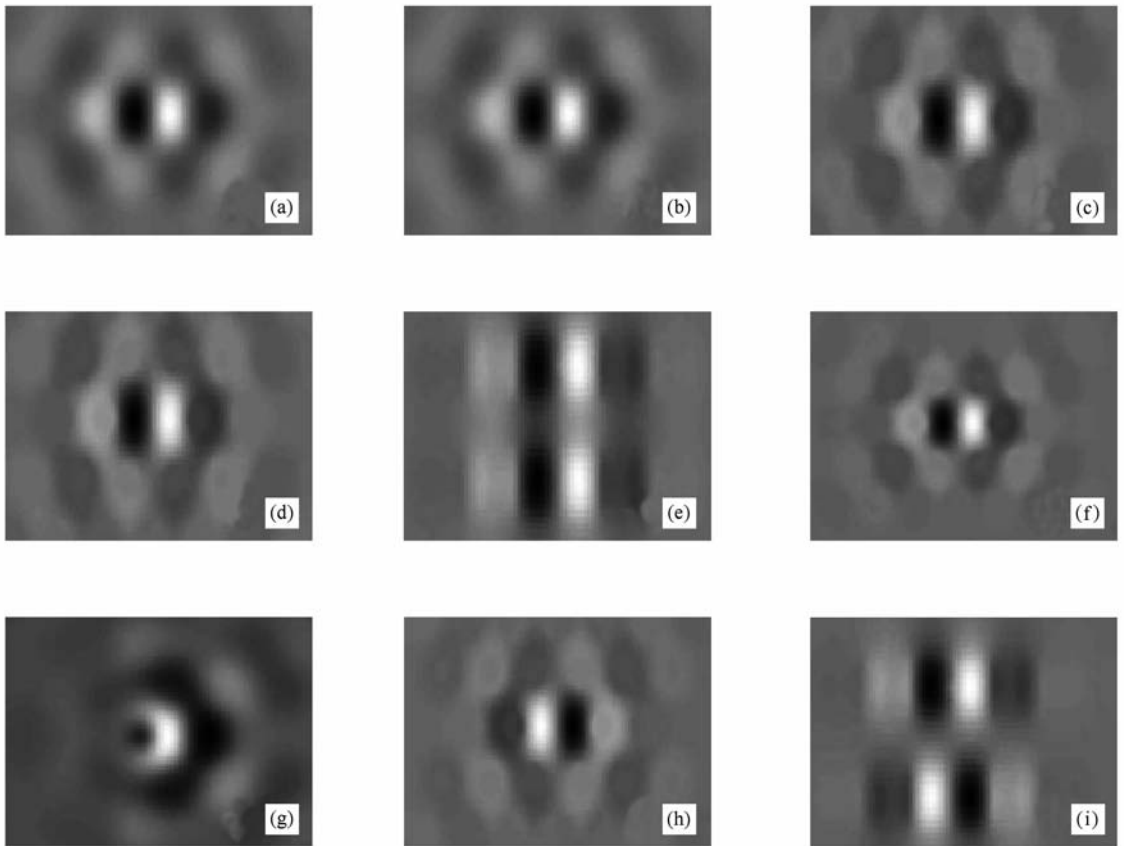


图 2 单层光子晶体薄板 H1 腔和 DLPCS-H1 腔内偶极模的  $H_z$  场分布 (a) 厚度为  $0.6a$  的三角晶格空气孔光子晶体薄板 H1 腔中间  $xoy$  平面的偶极模的  $H_z$  场分布, (b) DLPCS-H1 腔中上层薄板中间  $xoy$  平面的成键态偶极模的  $H_z$  场分布, (c) DLPCS-H1 腔中空气层中间  $xoy$  平面的成键态偶极模的  $H_z$  场分布, (d) DLPCS-H1 腔中下层薄板中间  $xoy$  平面的成键态偶极模的  $H_z$  场分布, (e) 成键态偶极模在  $xoz$  平面的  $H_z$  场分布, (f) DLPCS-H1 腔中上层薄板中间  $xoy$  平面的反键态偶极模的  $H_z$  场分布, (g) DLPCS-H1 腔中空气层中间  $xoy$  平面的反键态偶极模的  $H_z$  场分布, (h) DLPCS-H1 腔中下层薄板中间  $xoy$  平面的反键态偶极模的  $H_z$  场分布, (i) 反键态偶极模在  $xoz$  平面的  $H_z$  场分布

由于上下层薄板 H1 腔之间存在相互作用, 因而调整上下层薄板的距离, 可以改变上下层薄板 H1

腔之间的相互作用强度, 进而改变模式的谐振波长以及对应的场分布. 图 3 (a) 给出了 DLPCS-H1 腔的

偶极模的谐振波长  $\lambda$  随空气层高度  $h$  变化情况,其中虚线为单层 H1 腔的偶极模的谐振波长. 从图 3 (a) 可以看出,随着空气层厚度增加,DLPCS-H1 腔的成键态偶极模的谐振波长逐渐减小,不断向单层薄板 H1 腔的偶极模的谐振波长靠近;反键态偶极模的谐振波长逐渐增加,也不断向单层薄板 H1 腔的偶极模的谐振波长靠近. 这是因为薄板距离较近时,上下层薄板 H1 腔的偶极模的作用较强,偶极模能级分裂较大,谐振波长明显偏离单层薄板 H1 腔的偶极模的谐振波长. 当上下层薄板距离足够远时,由于上下层薄板 H1 腔之间的作用较弱,可以近似看成两个孤立的单层薄板 H1 腔,此时上下层薄板 H1 腔的谐振波长与单层薄板 H1 腔的谐振波长接近.

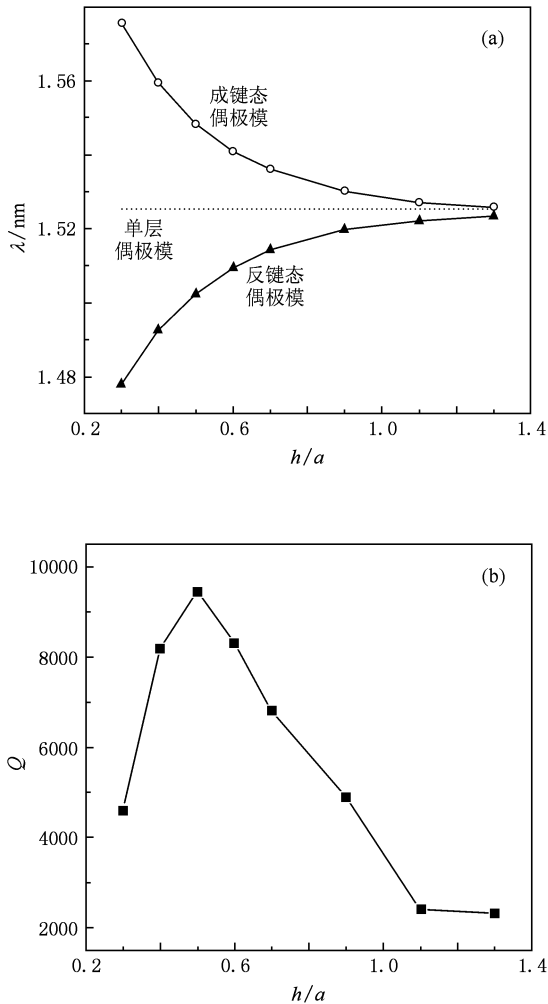


图3 DLPCS-H1 腔的缺陷态的波长  $\lambda$  和品质因子  $Q$  随中间空气层高度  $h$  的变化 (a) 成键态和反键态偶极模的谐振波长随空气层高度的变化, (b) 成键态的偶极模品质因子随空气层高度的变化

图 3(b) 所示为 DLPCS-H1 腔的成键态偶极模的品质因子  $Q$  随空气层高度  $h$  的变化情况. 单层薄板 H1 腔的偶极模的品质因子  $Q = 2500$ . 当空气层高度  $h = 0$  时,即两个高度为  $0.6a$  的单层薄板 H1 腔接连在一起,构成一个高度为  $1.2a$  的单层薄板 H1 腔结构. 此时 H1 腔的偶极模品质因子  $Q = 840$ . 随着空气层高度的增加,偶极模品质因子先是增加,并在空气层高度  $h = 0.5a$  时达到最大值 ( $Q = 9500$ ),约为单层薄板 H1 腔的偶极模的品质因子的 4 倍. 随着空气层高度的进一步增加,偶极模的品质因子开始减小,逐渐向单层薄板 H1 腔的偶极模的品质因子靠近. 这是因为当上下板层距离足够远时,上下层薄板微腔之间的耦合较弱,此时的 DLPCS-H1 腔可以近似看作两个孤立的单层薄板 H1 腔结构.

#### 4. 理论分析

从 DLPCS-H1 腔的空间结构可以很容易理解品质因子随空气层高度的变化. 当空气层的高度较小时,DLPCS-H1 腔结构近似于两倍厚度的单层薄板 H1 腔结构,DLPCS-H1 腔的品质因子较小. 当空气层的高度较大时,双层薄板微腔之间的耦合减弱,DLPCS-H1 腔相当于两个孤立的单层薄板 H1 腔,因而品质因子和单层薄板 H1 腔的品质因子相近. 这一点也可以从图 3(a) 看出:当空气层高度增加时,DLPCS-H1 腔的谐振波长向单层薄板微腔的谐振波长靠近.

一般而言,提高微腔品质因子的方法主要有局域场调节法、辐射能量再循环法、模式匹配法<sup>[10,15,16]</sup>,本文从前两种方法的角度出发来解释 DLPCS-H1 腔的品质因子随空气层高度的变化. 图 4 (a) 为单层薄板 H1 腔沿薄板中间  $xoy$  平面  $x$  方向的  $E_y$  场分布,图 4 (b) 为 DLPCS-H1 腔沿上层薄板中间  $xoy$  平面  $x$  方向的  $E_y$  场分布. 从图 4 可以看到,改变空气层高度至某一合适值 ( $0.5a$ ) 时,DLPCS-H1 腔沿上层薄板中间  $xoy$  平面  $x$  方向的  $E_y$  场分布更接近于高斯分布. 这意味着此时 DLPCS-H1 腔在垂直于光子晶体薄板的方向上对光子的束缚增强,竖直方向的泄漏被抑制,从而提高了整体的品质因子. 另一方面,对于单层薄板微腔结构,频率落在光锥内的光不满足全内反射条件,会从竖直方向泄漏到微腔外,这部分能量的损失是制约品质

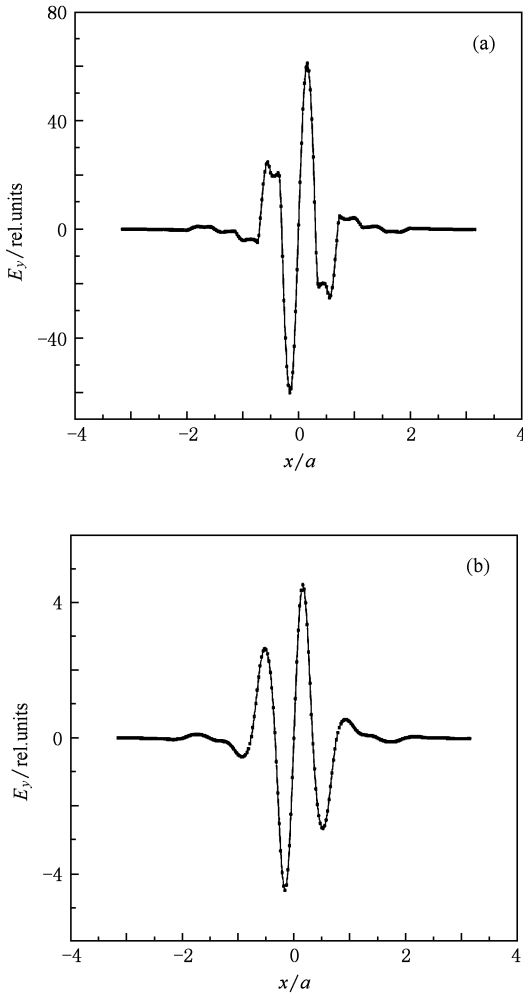


图4 单层光子晶体薄板 H1 腔和 DLPCS-H1 腔沿薄板  $xoy$  平面  $x$  方向的  $E_y$  场分布 (a) 单层 H1 腔沿薄板中间  $xoy$  平面  $x$  方向的  $E_y$  场分布, (b) DLPCS-H1 腔沿上层薄板中间  $xoy$  平面  $x$  方向的  $E_y$  场分布

因子的重要因素. 我们继续从辐射能量再循环角度来分析 DLPCS-H1 腔的偶极模品质因子的提高. 源首先在上层薄板 H1 腔激励出模式, 部分能量从上层薄板 H1 腔向下泄漏出上层薄板 H1 腔, 这部分能量随后耦合到下层薄板 H1 腔中并形成谐振, 产生和上层薄板 H1 腔相似的模式. 随后, 下层薄板 H1 腔中部分辐射的能量又向上耦合回上层薄板 H1 腔, 增强上层薄板 H1 腔的能量. 通过上层薄板 H1

腔和下层薄板 H1 腔的相互作用, 微腔中的辐射场被有效地束缚在腔内, 从而大大提高了微腔的品质因子. 我们还计算了三层光子晶体薄板 H1 腔的品质因子, 在三层光子晶体薄板 H1 腔中, 由于中间层薄板 H1 腔与上层薄板 H1 腔和下层薄板 H1 腔都存在耦合作用, 偶极模的品质因子得到了进一步的提高, 增大到 17900, 约为单层光子晶体薄板 H1 腔的偶极模品质因子的 7 倍.

本文研究的对象是基于无源材料硅的光子晶体微腔, 研究的波长在  $1.525 \mu\text{m}$  附近, 即光子能量在  $0.8131 \text{ eV}$  附近, 小于硅的吸收带隙 ( $1.12 \text{ eV}$ ). 可以认为, 无源材料硅对于研究的波长范围内的光没有吸收, 介质损耗很小, 可以忽略. 因而, 在仿真的过程中不需要考虑介质损耗. 如果引入复折射率, 工作量太大, 并且对本文的结论也毫无影响. 另外, 本文没有对微腔的结构以及更多层 (多于 2 层) 的光子晶体板层之间空气层的高度进行优化, 但是可以预测, 对这些结构参数进一步优化后可以得到更好的结果.

## 5. 结 论

本文采用 DLPCS-H1 腔结构, 利用上下层薄板 H1 腔之间的立体耦合, 从第三维方向上调整了模场特性, 有效地改善了微腔内的场分布并提高了微腔的品质因子. 在计算中, 本文使用时域有限差分和 Padé 方法计算分析了不同空气层高度的 DLPCS-H1 腔的场分布和品质因子, 得出偶极模品质因子随空气层高度的变化规律, 并从微腔的几何结构、局域场调制、辐射能量再循环等角度对其进行了解释. 当空气层高度为  $0.5a$  时, DLPCS-H1 腔的偶极模的品质因子提高了近 4 倍, 三层光子晶体薄板 H1 腔的偶极模的品质因子提高了近 7 倍. 实际上, 双层光子晶体还适合其他微腔结构, 例如光子晶体 H3 腔、光子晶体 L3 腔等, 这为微腔结构的模式控制、品质因子的提高提供了新的途径. 此外, 微腔谐振波长随空气层厚度的变化, 也为其在生物传感等领域的应用提供了可能.

[1] John S 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2486

[2] Yablonvitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059

[3] Painter O, Lee R K, Scherer A, Yariv A, O'Brien J D, Dapkus P D, Kim I 1999 *Science* **284** 1819

- [4] Noda S, Chutinan A, Imada M 2000 *Nature* **407** 608
- [5] Shinya A, Mitsugi S, Kuramochi E, Notomi M 2006 *Opt. Express* **14** 12394
- [6] Chutinan A, Noda S 2000 *Phys. Rev. B* **62** 4488
- [7] Han S Z, Tian J, Feng S, Ren C, Li Z Y, Cheng B Y, Zhang D Z 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5659 (in Chinese) [韩守振、田洁、冯帅、任承、李志远、程丙英、张道中 2005 物理学报 **54** 5659]
- [8] Ryu H Y, Park H G, Lee Y H 2002 *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **8** 4
- [9] Chen W, Xing M X, Ren G, Wang K, Du X Y, Zhang Y J, Zheng W H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 3955 (in Chinese) [陈微、邢名欣、任刚、王科、杜晓宇、张冶金、郑婉华 2009 物理学报 **58** 3955]
- [10] Akahane Y, Asano T, Song B S, Noda S 2003 *Nature* **425** 944
- [11] Akahane Y, Asano T, Song B S, Noda S 2005 *Opt. Express* **13** 1202
- [12] Dey S, Mitra R 1998 *IEEE Microwave Guide Wave Lett.* **8** 415
- [13] Huang Y Z, Chen Q, Guo W H, Yu L J 2005 *J. Semicond.* **26** 281
- [14] Guo W H, Li W J, Huang Y Z 2001 *IEEE Microwave Wireless Compon. Lett.* **11** 223
- [15] Lalanne P, Mias S, Hugonin J P 2004 *Opt. Express* **12** 458
- [16] Jugessur A S, Pottier P, De La Rue R M 2003 *Electron. Lett.* **39** 367

## The characteristic of the stereo-coupling high- $Q$ photonic crystal slab cavity\*

Jiang Bin Liu An-Jin Chen Wei Xing Ming-Xin Zhou Wen-Jun Zheng Wan-Hua<sup>†</sup>

(*Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China*)

(Received 1 January 2010; revised manuscript received 1 June 2010)

### Abstract

Inspired by the idea of the stereo-coupling, we propose a new sandwich-like photonic crystal microcavity which is composed of double layer photonic crystal slabs H1 (DLPCS-H1) cavity with an air layer in between. We calculate the electromagnetic field distribution and the quality factor of the dipole mode by the three-dimensional finite-difference time-domain method and the Padé approximation method. Through carefully analyzing the effect of the air layer height on the quality factor of the dipole mode, we obtain an optimized DLPCS-H1 cavity in which the height of intermediate air layer is about  $0.5a$  ( $a$  is the lattice constant,  $a = 420$  nm). In this cavity, the quality factor of the dipole mode is 4 times as large as that of the conventional single layer photonic crystal slab H1 cavity. Furthermore, we study the three-layer photonic crystal slabs H1 cavity, and the quality factor of its dipole mode is increased over 7 times.

**Keywords:** double layers photonic crystal slabs cavity, dipole mode, quality factor, Padé approximation

**PACC:** 4260D, 4270Q

\* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2006CB921705), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10634080, 60677046, 60838003) and the National High Technology Research and Development Program of China (Grant Nos. 2007AA03Z410, 2007AA03Z408).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: whzheng@semi.ac.cn