

中红外波段硅基二维光子晶体的光子带隙*

周 梅¹⁾ 陈效双^{1)†} 徐 靖¹⁾ 曾 勇¹⁾ 吴砚瑞¹⁾ 陆 卫¹⁾ 王连卫²⁾ 陈 瑜²⁾

¹⁾中国科学院上海技术物理研究所红外物理国家重点实验室,上海 200083)

²⁾华东师范大学电子科学与工程系,上海 200062)

(2004 年 3 月 26 日收到,2004 年 6 月 4 日收到修改稿)

利用电化学腐蚀的方法制备了大多孔硅二维光子晶体. 结构图形对称性为正方格子,其结构参数为正方形晶格周期 $a = 44\mu\text{m}$,正方形空气柱的边长 $l = 2\mu\text{m}$. 并用显微红外光谱仪表征了光谱性质,揭示了所制备二维光子晶体样品的中红外波段光子的反射特性.

关键词:光子晶体,光子带隙,反射谱,时域有限差分法

PACC: 7820P, 4270Q

1. 引 言

自从 1987 年 Yablonovitch 和 Jonh 提出光子晶体的概念以来,人们研究光子晶体的兴趣越来越浓厚^[1-6]. 这主要归因于现代半导体工业中遇到的集成极限问题. 目前,超大规模集成电路的特征线宽已经缩小到 $0.18\mu\text{m}$,在可预见的将来就会达到电子的自由程. 那时的器件将会由于达到物理极限而无法实现其功能. 因此,人们急于寻找一种解决问题的途径——发展新一代器件即光子器件. 光子晶体是一种人工晶体,任何不同介电系数的材料进行周期性排列都可以形成光子晶体. 但是只有满足某些特定条件(比如晶格类型、介电常数比、散射元的形状、填充比等)的光子晶体才具有类似半导体中电子禁带的“光子禁带”^[7-10],已经得到理论和实验证实. 而且理论上预言了这一特性所带来的诱人的应用前景:多通道滤波器^[11]、超窄带通滤波器^[12]、全反射镜^[13]、光子晶体天线^[14,15]等全新光学器件可以通过设计一维光子晶体来实现;而二维光子晶体可用于具有超高分光能力的棱镜^[16-18]、任何转弯角度的光纤^[19,20]、光波导^[21-23]、光微腔^[24-26]、偏振器^[27,28]、光聚焦、光放大器^[29]等;因三维光子晶体具有全方位的“光子禁带”,它的应用更广泛. 正是因为理论上这

些预言促进了人们实验上制备和研究光子晶体的兴趣,尤其是硅基光子晶体. 吸引人们研究硅基光子晶体主要有三个原因:1)硅具有很高的介电常数(11.56—12.25),与空气介电常数的比值高达 12 左右,大于打开许多二维和三维光子晶体禁带介电差阈值. 2)硅是应用于光通讯中理想的波导材料,因为它红外透过包括了 1.33 到 $1.55\mu\text{m}$ 波段. 3)硅是应用最广泛的微电子材料,与硅有关的电子集成工艺已经非常成熟. 硅基光子晶体的集成完全可以利用现有成熟的工艺. 制备光子晶体的方法有很多,目前制备红外波段光子晶体应用较多的是刻蚀或腐蚀工艺,电化学腐蚀方法是常见的方法之一. Lehmann 和 Föll 详细地研究了电化学腐蚀方法的机理和在微电子领域中的重要应用^[30,31]. Grüning 等人用电化学腐蚀的方法腐蚀出在二维平面上周期性规则排列的大孔硅结构,并证实了这样的结构具有光子禁带^[32]. 自此,电化学腐蚀方法成为制备二维光子晶体的常用方法.

本文基于硅材料利用电化学腐蚀的方法制备出二维的光子晶体. 介绍了电化学腐蚀方法制备大孔硅的过程和所需要的设备及得到高质量样品的参数;标定了光谱特性,发现沿 $\langle 10 \rangle$ 方向在 1250cm^{-1} 位置有一个高反射带而且在高频波段有几个小的反射带,而 $\langle 11 \rangle$ 方向上在 1420cm^{-1} 位置有

* 国家重点基础研究发展规划(973)批准号 2001CB61040) 中国科学院“百人计划”基金(批准号 200012) 国家自然科学基金重点项目(批准号 J0234040) 和上海科学技术委员会重点基金项目(批准号 02DJ14066) 和上海市自然科学基金(批准号 03ZR14023) 资助的课题.

† E-mail: xschen@mail. sip. ac. cn, 电话: 021-65420850-24309.

小的高反射带,分析了制备样品过程中可能引起测量光谱和理论计算之间误差的原因,进行了实验和理论计算能带比较,发现高反射带和理论计算有一定差别,并分析了差别的原因和来源.

2. 制 备

二维光子晶体是在大孔硅上制备的,大孔硅是多孔硅的一种^[31]. Grüning 等人在氢氟酸溶液中用电化学腐蚀的方法得到了规则排列的大多孔硅^[33]. 此后大多孔硅成了研究二维光子晶体的理想材料. 它的制备是建立在标准的半导体工艺过程中,因为成熟的半导体工艺可以保证得到准确的结构形状和非常大的纵横比(孔的深度和半径之比)有序孔的排列,大

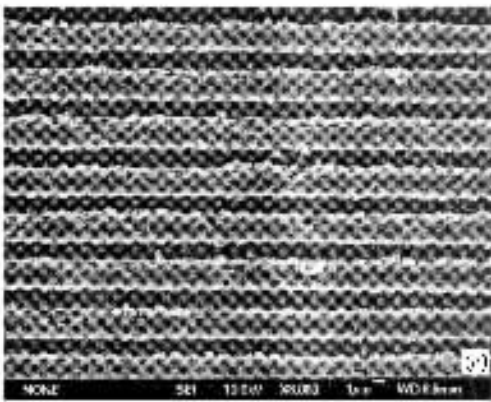
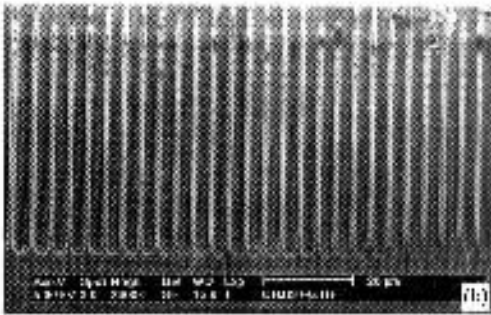
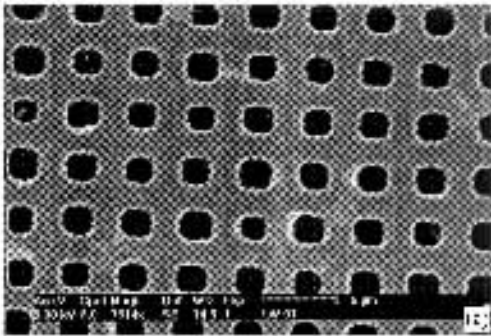


图 1 样品的 SEM 图

多孔硅的制备过程见文献 [33—36]. 本文只简要介绍制备过程所用的原料和主要参数. 孔边长为 $2\mu\text{m}$ 的正方大多孔硅,在晶向为(100)掺杂类型为 n 型、电阻范围为 $30\text{—}50\Omega\text{cm}$ 的硅片上制备的. 在氢氟酸中进行阳极氧化同时在硅片的背面有一个光照. 阳极氧化所用的电流密度范围为 $2.5\text{—}20\text{mA}/\text{cm}^2$,光照所用的电压范围为 $0.5\text{—}1.5\text{V}$. 在整个工艺过程中共有两层掩膜层,一层是光刻胶作为氮化硅的掩膜,而 LPCVD (low pressure chemical vapor deposition) 生长的氮化硅作为刻蚀硅的掩膜. 通过涂胶、光刻等半导体工艺将正方形格子复制到光刻胶上,进而传递到光刻胶下的氮化硅层. 用干法刻蚀氮化硅层到硅片,然后氮化硅做掩膜层,用 $25\text{wt}\%$ TMAOH 溶液腐蚀出推动电化学腐蚀的起始核,倒金字塔形状. 其中正方形晶格的周期即晶格常数 $a = 4\mu\text{m}$,每一个正方形空气柱的边长 $l = 2\mu\text{m}$,在 5% 氢氟酸和酒精混合溶液中腐蚀出正方形排列的硅孔. 硅孔的电子扫描显微镜如图 1 所示,图 1(a)为抛光后的背面图、(b)为硅孔的剖面图、(c)为放大 3000 倍的侧面图.

3. 光谱特性

大多孔硅光子晶体的光谱是在正入射角度下测量的,即垂直于正方空气柱柱轴的方向. 测量光谱的仪器是傅里叶转换红外光谱仪并连接了一个红外显微镜 (Nexus 670) 如图 2 所示. 冷却到 77K 的碲镉汞探测器的探测范围为 $650\text{—}4500\text{cm}^{-1}$ ($2.2\text{—}15\mu\text{m}$). 在透射的测量过程中,显微镜用两个物镜,一个用来聚焦入射光,一个用来收集透射光. 对于反射光谱的测量,只用同一个物镜就可以聚焦和收集入射和反射光. 用一个镜子将所收集的一半光强的光发送到探测器. 在每一个物镜前面还加有一个可调节入射光斑大小的长方光阑,这样大大增加了入射光束的平行性. 光斑的大小可以从 0 到 $100\mu\text{m} \times 100\mu\text{m}$ 范围内独立地、连续地调节变动. 这样的机械装置对于选择性地探测仅仅通过光子晶体区域的光能量是一个必须条件. 当光斑宽度沿正方硅孔柱轴方向被设置的接近或小于柱轴长度,无用信号(没有通过光子晶体区域的光)就会被大大地削弱. 相反在侧面方向上光斑宽度几乎和光子晶体整个区域宽度相当,如此一来信号和噪声的比率将会达到最大值,难以揭示光子禁带的信息. 对图 1 的样品进行了反射光谱

的测量,样品的结构参数是 $a = 4\mu\text{m}$, $l = 2\mu\text{m}$ (a 是晶格常数, l 是正方空气柱的边长),样品厚度从 $300\mu\text{m}$ 被减薄到 $100\mu\text{m}$ 即 $h = 100\mu\text{m}$,如图 3 中插图所示测量方向.由于布里渊区高对称点处光子能带的简并是制约完全光子带隙形成的关键因素^[8,37],换句话说,一般情况下只要几个特殊的高对称点处具有带隙,其他低对称方向也都会有带隙,因此大多数光子晶体带隙的实验研究都是通过对其主要对称方向的研究来进行的.对于二维正方结构光子晶体来说,所关心的布里渊区中高对称点为 $\Gamma = (0,0)$, $K(\frac{\pi}{a}, 0)$, $M(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ (见图 4 中插图).分别对样品沿着 $\Gamma-K$ 和 $\Gamma-M$ 方向即 $\langle 10 \rangle$ 和 $\langle 11 \rangle$ 两个方向测量了反射光谱.对于在平面中传播的光,根据磁场 (TM 极化)或电场 (TE 极化)是否平行于结构中柱轴方向,光可以分解成两种不同的极化模式.然而,如果入射光没有被极化或者很少被极化,所得到的光谱就是两个极化光共同的光谱,得到的禁带是共同的禁带,也就是两个极化光重叠的部分.测量的光谱是无偏振情况下得到的,图 3(a)有几个反射极大

带,说明光在 $\langle 10 \rangle$ 传播方向上对于两个极化存在着几个共同的带隙.这几个绝对带隙的位置分别在 1250cm^{-1} , 1750cm^{-1} 和 2700cm^{-1} .在 4000cm^{-1} 的位置看到趋向反射极大,因探测器探测截止波段在这个位置,所以无法判断是因为样品的结构引起的反射极大还是探测器波段截止引起.图 3(b)是沿着样品 $\langle 11 \rangle$ 方向入射测得的结果.从图中可以看到除了在 1420cm^{-1} 位置有一个反射极大峰,在整个测量范围内没有再出现很大峰值的起伏.为了对比,用相同的光路径和探测器测量了无结构块状硅片的反射光谱.从测量的数据可看到反射率为 55% 而透射率为 45%,所以所用的样品硅片是没有吸收的,而且可以确定在所测量范围内,反射光谱几乎是通带,仅仅在低频波段因探测器的截止引起反射率下降.因此,可以确信,有结构的样品反射光谱的最高峰和最低峰是光子禁带所引起的,吸收的可能性被排除了.测量也清楚地显示了在光子禁带频率范围内,光子能量从光子晶体结构表面反射回空气中.从图 3 可以看到有结构的反射都比无结构的反射低.出现这种情况的原因可以解释为:第一,光从光子晶体结构和空气接触面上散射,特别是从锯齿状的光子晶体结构

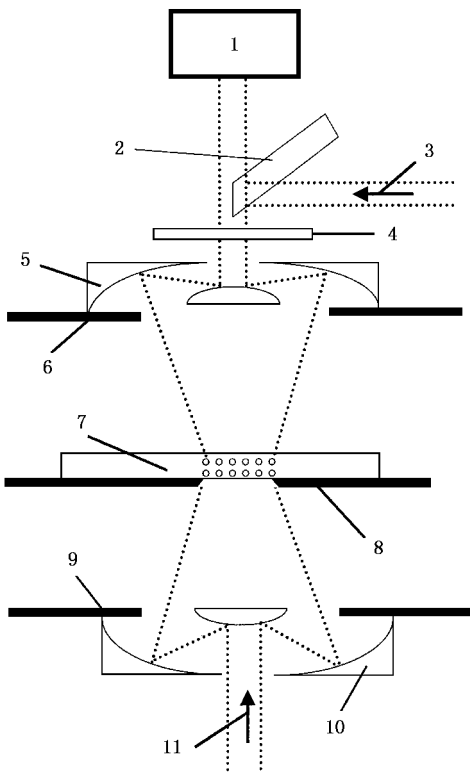


图 2 测量设备和光路示意图 1. 碲镉汞探测器 2. 测量反射的物镜 3. 测量来自 FTIR 的反射光 4. 偏振片 5, 10. 物镜 6, 9. 正方光阑 7. 样品 8. $50\mu\text{m}$ 狭长的光阑 11. 测量来自 FTIR 的透射光

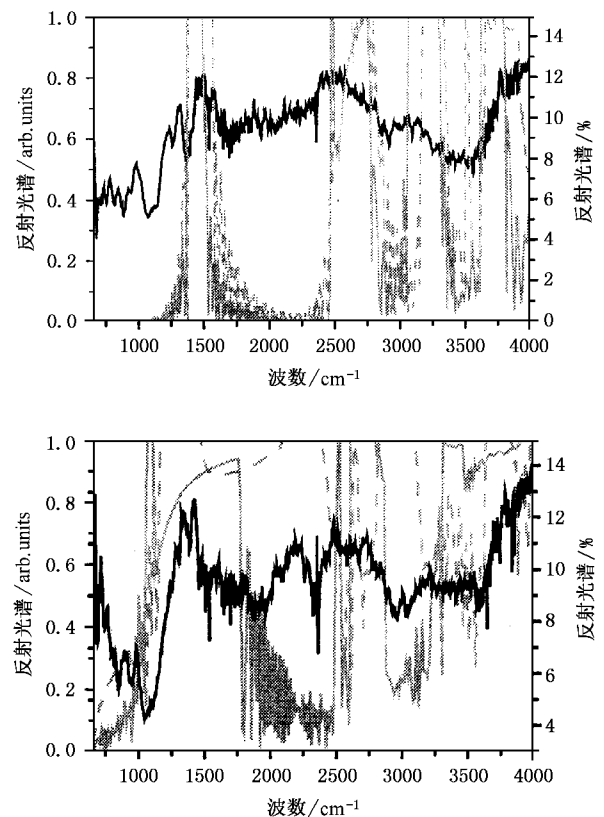


图 3 理论计算和实验测量反射光谱

截面上,也就是不完全规则的横截面上.这种不规则的截面可以从图 1(c)看到,而且在空气孔的壁面上附着有屑碎的附着物,这种截面散射非常强而且在实验中很难控制光的散射方向.第二,可能从光子晶体衬底表面上产生散射.因为刻蚀后残余物留在衬底上,衬底表面非常粗糙.大部分光避免入射到衬底上,但还是少量的光会照射到衬底上.这也有可能使入射的绝对光强损失掉一部分.第三,在制备过程中不可避免地出现硅孔的不均匀性所造成的.比如孔径大小和孔壁的规则性等.还有一个可能的因素,光耦合到光子晶体上时不是平面波分布,而是有一定的角度近乎于一个高斯波形状,使得光谱的情况更复杂.

4. 理论模拟和比较

理论上研究了所制备的正方格子结构光子晶体.理论计算所用的方法是时域有限差分方法(FDTD)^[38],计算中的参数是介电常数 $\epsilon = 11.56$,晶格常数 $a = 4\mu\text{m}$,硅孔的边长 $l = 2\mu\text{m}$,以及填充比 $f = l^2/a^2 = 25\%$.计算了沿着 $\langle 10 \rangle$ 和 $\langle 11 \rangle$ 两个方向的能带结构,如图 4 的插图,两边的图是计算的反射光谱,其中实线表示的是 TM 极化波而短线表示 TE 极化波.从计算的结果可以看到沿着 $\langle 10 \rangle$ 方向在 $\omega a/2\pi c = 0.1655$ 位置出现了一个绝对禁带,这里 ω 是入射光的角频率, c 是真空中光速.沿 $\langle 10 \rangle$ 和 $\langle 11 \rangle$ 两个方向所有光子禁带用长方形的阴影表示.沿 $\langle 11 \rangle$ 方向的禁带计算的能带结构中并没有出现绝对带隙,但是实验测量的反射光谱中出现了禁带,位置在低频 1420cm^{-1} . $\langle 10 \rangle$ 方向的能带结构和实验测量光谱出入更大而且比较复杂.有几个禁带并且每一个禁带的位置都被标定且和理论计算所得结果相比较.其中实验中位置在 1250cm^{-1} 禁带要比理论模拟的结果宽,这个差别可以归结到有一些模没有被平面光波激活.如果真如上述推测,这个

禁带实际上是混合的光子禁带(高频和未耦合的低频模).

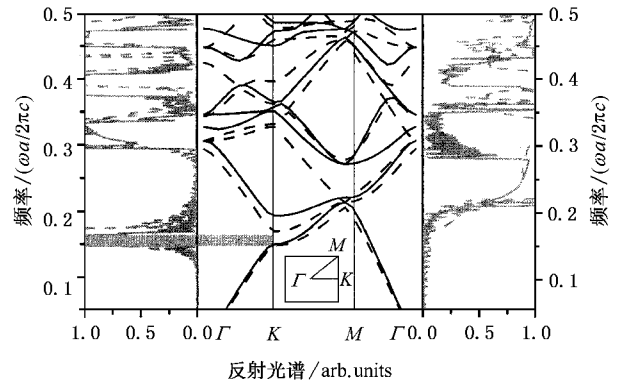


图 4 理论计算的能带和反射光谱比较

从实验光谱和理论计算的能带来看,两者并不完全一致.反射光谱的最高峰(实验得到的禁带位置)和理论计算得到的禁带位置有偏差.我们认为,尽管所制备的样品纵横比很大,实际晶体结构的非周期方向的长度还不能被看作无限长.绝大多数的差异可归结到探测光束的分叉,正入射到 Γ -M 或 Γ -K 方向的入射光中并不仅仅包括 Γ -M 或 Γ -K 方向的光还有其他传播方向的光.

5. 结 论

利用电化学方法成功地制备了禁带在中红外波段的两维光子晶体.因光谱是直接证明光子晶体的光学特性手段,利用傅里叶转换红外光谱仪并连接了一个红外显微镜测量了样品的反射光谱,并表征了样品具有中红外光子禁带这一性质, $\langle 10 \rangle$ 方向禁带的中心位置在 1250cm^{-1} ,带宽为 300cm^{-1} .

本实验所用样品的前道工艺为作者之一王连卫教授在荷兰 Delft 技术大学制作.作者感谢该校 Delft 微电子及深亚微米技术研究所工艺组的工程师们在工艺流程中所给予的帮助和 P. H. Sarro 教授所给予的资助.

- [1] Yablonovitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059
- [2] John S 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2486
- [3] Yablonovitch E and Gmitter T J 1989 *Phys. Rev. Lett.* **63** 1950
- [4] Satpathy S, Zhang Z and Salehpour M R 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 1950
- [5] Leung K M and Liu Y F 1990 *Phys. Rev. B* **41** 10188
- [6] Leung K M and Liu Y F 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 2646
- [7] Li Z Y, Gu B Y and Yang G Z 1999 *The European Physical Journal B* **11** 65
- [8] Anderson C M and Giapis K P 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 2949
- [9] Villeneuve P R and Piché M 1992 *Phys. Rev. B* **46** 4969
- [10] Villeneuve P R and Piché M 1992 *Phys. Rev. B* **46** 4973
- [11] Zi J, Wan J and Zhang C 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 2084
- [12] Qiao F, Zhang C, Wan J and Zi J 2000 *Appl. Phys. Lett.* **77** 3698
- [13] Fink Y, Winn J N, Fan S, Chen C, Michel J, Joannopoulos J D and Thomas E L 1998 *Science* **282** 1679
- [14] Brown E R, Parker C D and Yablonovitch E 1993 *J. Opt. Soc. Am. B* **10** 404
- [15] Brown E R and McMahon O B 1996 *Appl. Phys. Lett.* **68** 1300
- [16] Lin S Y *et al* 1996 *Opt. Lett.* **21** 1771
- [17] Kosaka H *et al* 1998 *Phys. Rev. B* **58** R0096
- [18] Kosaka H *et al* 1999 *J. Lightwave Technology* **17** 2032
- [19] Knight J C *et al* 1998 *Science* **282** 1476
- [20] Knight J C *et al* 1999 *Optical Materials* **11** 143
- [21] Mekis A 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3787
- [22] Sigalas M M *et al.* 1996 *Phys. Rev. B* **54** 7837
- [23] Bayindir M, Temelkuran B and Ozbay E 2000 *Phys. Rev. B* **61** R11855
- [24] Yablonovitch E *et al* 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 3380
- [25] Smith D R *et al* 1993 *J. Opt. Soc. Am. B* **10** 314
- [26] Lin S Y *et al* 1996 *Appl. Phys. Lett.* **68** 3233
- [27] Wan J *et al* 1999 *Physics* **28** 393 (in Chinese) [万 钧等 1999 物理 **28** 393]
- [28] Zhang C, Qiao F, Wan J and Zi J 2000 *J. Appl. Phys.* **87** 3174
- [29] Wijnhoven J E G J and Vos W L 1998 *Science* **281** 802
- [30] Lehmann V 1993 *J. Electrochem. Soc.* **140** 2863
- [31] Lehmann V and Gösele U 1991 *Appl. Phys. Lett.* **58** 856
- [32] Grüning U, Lehmann V and Engelhardt C M 1995 *Appl. Phys. Lett.* **66** 3254
- [33] Grüning U, Lehmann V, Ottow S and Busch K 1996 *Appl. Phys. Lett.* **68** 747
- [34] Birner A, Grüning U, Ottow S, Schneider A, Müller F, Lehmann V, Föll H and Gösele U 1998 *Phys. Status Solidi A* **165** 111
- [35] Rönnebeck S, Carstensen J, Ottow S and Föll H 1999 *Electrochem. Solid State Lett.* **2** 126
- [36] Wang L W, Nichelatti A, Schellevis H, Boer C de, Visser C, Nguyen T N and Sarro P M 2003 *IEEE. MEMS.* **12** 634
- [37] Zhang X D and Zhang Z Q 2000 *Phys. Rev. B* **61** 9847
- [38] Xiao S S, Shen L F and He S L 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2858 (in Chinese) [肖三水、沈林放、何赛灵 2002 物理学报 **51** 2858]

Photonic band gap of two-dimensional photonic crystal based on silicon in mid-infrared^{*}

Zhou Mei¹⁾ Chen Xiao-Shuang^{1)†} Xu Jing¹⁾ Zeng Yong¹⁾ Wu Yan-Rui¹⁾ Lu Wei¹⁾ Wang Lian-Wei²⁾ Chen Yu²⁾

¹⁾(National Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China)

²⁾(Department of Electronic Science and Technology, East China Normal University, Shanghai 200062, China)

(Received 26 March 2004 ; revised manuscript received 4 June 2004)

Abstract

Two-dimensional macroporous photonic crystal with mid-infrared band gap was fabricated by electrochemical etching method in this work. The sample structure is of square lattice with structure parameters : lattice constant $a = 4\mu\text{m}$ and the length of the square lattice structure $l = 2\mu\text{m}$. The reflection spectrum of the sample was measured using the microscopic infrared spectrometer and showed the photonic crystal characteristics.

Keywords : photonic crystal, photonic band gap, reflection spectrum, FDTD

PACC : 7820P, 4270Q

^{*} Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No.2001CB61040) , the " Hundred-Talent Project " of Chinese Academy of Sciences (Grant No.200012) , Key Fund of Chinese National Science Foundation (Grant No.10234040) and Key Fund of Shanghai Science and Technology Foundation (Grant No.02DJ14066) , Shanghai Natural Science Foundation (Grant No.03ZR14023) .

[†]E-mail : xschen@mail. sip. ac. cn ; Tel : 021-65420850-24309.