

# nc-Ge/Si 岛基光子晶体单点缺陷腔的 数值模拟与分析\*

唐海侠<sup>†</sup> 王启明

(中国科学院半导体研究所, 北京 100083)

**摘要:** 阐述了利用光子晶体单点缺陷微腔来提高 Ge/Si 纳米岛发光效率的机理. 通过 3D FDTD 方法计算出在平板厚度为 300nm 时, 谐振波长随  $a$  和  $r/a$  变化的规律, 即当给定  $r/a, h$  时, 波长随晶格常数成次线性增加; 当给定  $a, h$  时, 波长随  $r/a$  的增加而减小. 并从理论上给予分析.

**关键词:** 光子晶体; 单缺陷腔; nc-Ge/Si 岛

**PACC:** 1320

**中图分类号:** TN713

**文献标识码:** A

**文章编号:** 0253-4177(2006)12-2139-05

## 1 引言

在 Si 基集成光电子学的发展中, 高效的 Si 基光源是人们不懈追求的目标. 但由于 Si 属于间接带隙结构材料, 导带的最小值和价带的最大值不在  $k$  空间同一位置, 要实现发光跃迁, 必须同时满足能量守恒和动量守恒定律, 因此, 注入到 Si 导带底的电子和价带顶的空穴的辐射复合必须借助声子的参与. 这种跃迁过程属于二级微扰过程, 跃迁几率小, 所以 Si 材料本身的发光效率极低. 于是, Si 基高效发光材料的探索自然成为近年来学术界研究的一个重点课题. 在尝试了众多的方法<sup>[1]</sup>之后, 人们进一步认识到利用三维的量子限制效应来突破动量守恒的制约是一种很有前途的研究方向.

nc(nanocrystal)-Ge/Si 量子点材料是一种被广泛研究的 Si 基纳米发光材料, 其生长工艺与标准的 CMOS 工艺有很好的兼容性, 发光波长能够覆盖重要的光通信波段即  $1.3 \sim 1.55 \mu\text{m}$ , 因此成为实现 Si 基发光器件的重要途径之一. 但是目前得到的这种材料的发光效率仍很低, 这是由于 Ge/Si 的导带偏移很小, 因而在 Ge/Si 材料体系中, 量子限制效应只对空穴有效, 它限制了量子点中电子的局域化程度. 另外, 由于传统方法生长的量子点的密度低, 而且尺寸很大, 通常大于几十微米, 因此我们称之为纳米岛, 它并不能达到完全的量子限制, 从而影响了它的发光效率.

伴随着光子晶体(PC)研究热潮的兴起, 人们逐

渐认识到了光子晶体的重要用途. 它具有类似于半导体能带的光子禁带(PBG), 在光子禁带频率范围内的光无法传播. 若在光子晶体中引入缺陷, 就会在 PBG 中引入频率极窄的缺陷态, 从而可以控制光的传播行为. 如果在 Ge/Si 纳米岛材料上制作光子晶体单点缺陷腔结构, 利用点缺陷对发射光的定域功能有望提高 Ge/Si 量子点的发光效率. 因为自发辐射的速率正比于  $\omega D(\omega)$ , 其中,  $D(\omega)$  是辐射场的态密度. 在自由空间体积  $V$  中,  $D(\omega) = \frac{\omega^2 V^{[2]}}{\pi^2 c^3}$ , 因此, 有源介质的自发辐射谱很宽. 但引入光子晶体单点微腔后, 就在光子禁带中引入了一个频率极窄的缺陷态, 使得其中的  $D(\omega)$  分布呈现近于  $\delta$  函数形式<sup>[3]</sup>. 因此, 位于光子禁带内的所有自发辐射模集中在缺陷态, 其他的模几乎全被抑制, 从而自发辐射模的数量被大大压缩, 自发辐射的能量大部分参与缺陷模发光, 即自发辐射因子  $\beta$  值增大. 自发辐射可以控制的这种现象叫 Purcell 效应. Purcell 放大因子<sup>[4]</sup>为  $f = \frac{3Qg(\lambda/2n)^3}{2\pi V_{\text{CAV}}}$ . 其中,  $Q$  是品质因子;  $g$  是模式简并度;  $\lambda$  是波长;  $n$  是折射率;  $V_{\text{CAV}}$  是腔体积. 可见微腔的  $Q$  值越高, 体积越小, 自发辐射的放大也就越强.

## 2 器件结构

本文研究的器件结构如图 1 所示, 在 SOI 衬底上生长 nc-Ge/Si 岛, SOI 中的顶层 Si 和 nc-Ge/Si

\* 国家自然科学基金资助项目(批准号:60336010,60537010)

<sup>†</sup> 通信作者. Email: thx@mail.semi.ac.cn

2006-05-18 收到, 2006-08-11 定稿

岛一起构成了平板波导的芯层. 然后在其上制作光子晶体, 刻蚀空气孔到埋层  $\text{SiO}_2$  处停止. 在完整的光子晶体结构中移去中心的空气孔引入单点缺陷, 就形成了光子的一个局域的缺陷态. 在水平方向上, 通过缺陷周围的光子晶体的布拉格反射将光限制在缺陷中传播, 而在垂直方向上, 通过全内反射将光限制在高折射率的平板波导中. 通过材料组分设计使得 nc-Ge/Si 岛的发光光谱峰值在  $1.5\mu\text{m}$  处.

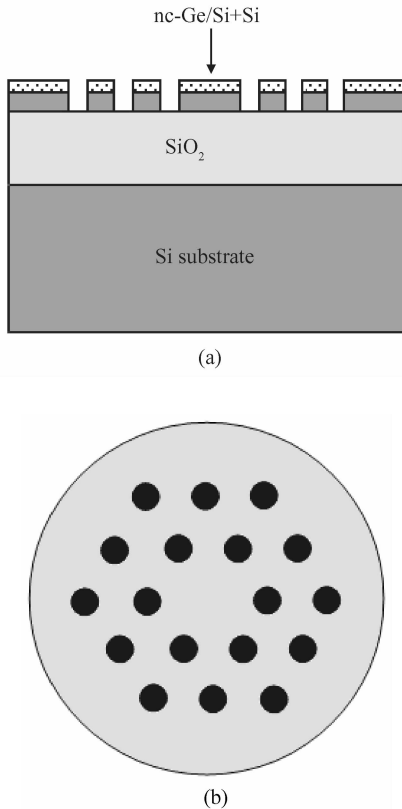


图 1 器件结构示意图 (a)剖面图; (b)俯视图

Fig. 1 Schematic of the device (a)Sectional view; (b)Top view

为了实现垂直方向上的单模波导, 波导层的总厚度(SOI 中的顶层 Si 厚度与 nc-Ge/Si 的厚度之和)最大值应满足单模条件<sup>[5]</sup>:

$$h_{\max} = \frac{\lambda_0}{2\pi} \times \frac{1}{\sqrt{n_1^2 - n_2^2}} \left[ \pi + \tan^{-1} \left( \sqrt{\frac{n_2^2 - n_3^2}{n_1^2 - n_2^2}} \right) \right] \quad (1)$$

其中  $n_1$ ,  $n_2$  和  $n_3$  分别代表波导层和上下包层的折射率. 这里取  $\lambda_0 = 1.5\mu\text{m}$ ,  $n_1 = 3.5$ ,  $n_2 = 1.45$  ( $\text{SiO}_2$ ),  $n_3 = 1$  (air), 计算得到  $h_{\max} = 242\text{nm}$ . 考虑到光子晶体制作后刻蚀的空气孔使波导层的有效折射率减小, 选取整个波导层的厚度为  $300\text{nm}$ . 另外,

为了达到很好的光学隔离, 需要埋层  $\text{SiO}_2$  的厚度为  $1\mu\text{m}$ .

因为对于空气孔光子晶体结构而言, 三角晶格比正方晶格具有更大的类 TE 模光子带隙, 所以这里我们只研究三角晶格的空气孔光子晶体结构. 光子晶体的晶格周期和空气孔半径分别用  $a$  和  $r$  表示.

### 3 数值模拟

由电磁场理论可以知道, 频率为  $\omega$  的光在存在点缺陷的光子晶体结构中的传播, 服从 Maxwell 方程<sup>[6]</sup>:

$$\nabla \cdot \{ \epsilon_0 \epsilon(r) E(r, t) + P_d(r, t) \} = 0 \quad (1)$$

$$\nabla \cdot H(r, t) = 0 \quad (2)$$

$$\nabla \times E(r, t) = -\mu_0 \frac{\partial H(r, t)}{\partial t} \quad (3)$$

$$\nabla \times H(r, t) = \frac{\partial}{\partial t} \{ \epsilon_0 \epsilon(r) E(r, t) + P_d(r, t) \} \quad (4)$$

其中  $P_d(r, t)$  是位于缺陷附近的振荡偶极子的极化场. 经过一系列的简化, 最后得到电场  $z$  方向分量  $E_z(r_{//}, t)$  的波方程为:

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon(r_{//})}{c^2} \times \frac{\partial^2 E_z}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} \\ = \frac{d\omega^2}{c^2} \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \exp(-i\omega t) \end{aligned} \quad (5)$$

其中  $(x_0, y_0)$  表示偶极子在 2D 平面内的位置;  $d$  表示偶极子的振幅.

利用 3D FDTD (finite difference time domain)<sup>[7]</sup> 方法数值求解公式 (5) 就可以得到点缺陷模式的信息. 缺陷模式可以通过谐振频谱以及谐振波长处的电磁场分布来表征.

因为在不同的测试温度下, Ge/Si 纳米岛的光致发光峰值波长的位置是变化的, 所以需要调节腔模谐振波长的位置与之对应. 可以通过改变光子晶体平板的结构参数来调节谐振波长的位置. 在通常的光子晶体平板结构中, 有三个结构参数可以用于调节缺陷腔模的谐振波长, 即晶格常数  $a$ 、空气孔半径  $r$  和平板波导厚度  $h$ . 但在文中讨论的结构中, 已经给定了平板波导层的厚度为  $300\text{nm}$ . 因此, 只有前两个参数可以改变. 我们计算了不同的  $a$  和  $r/a$  值下对应的 TE 缺陷模的谐振波长来研究谐振波长随光子晶体结构参数的变化规律. 光子晶体晶格常数  $a$  分别取为  $0.38, 0.39, 0.40, 0.41, 0.42$  和  $0.43\mu\text{m}$ , 每个晶格常数对应的占空比  $r/a$  分别取为  $0.30, 0.32, 0.34, 0.36, 0.38$  和  $0.40$  时, 光子晶体单点缺陷腔的缺陷模式波长的结果如图 2 所示.

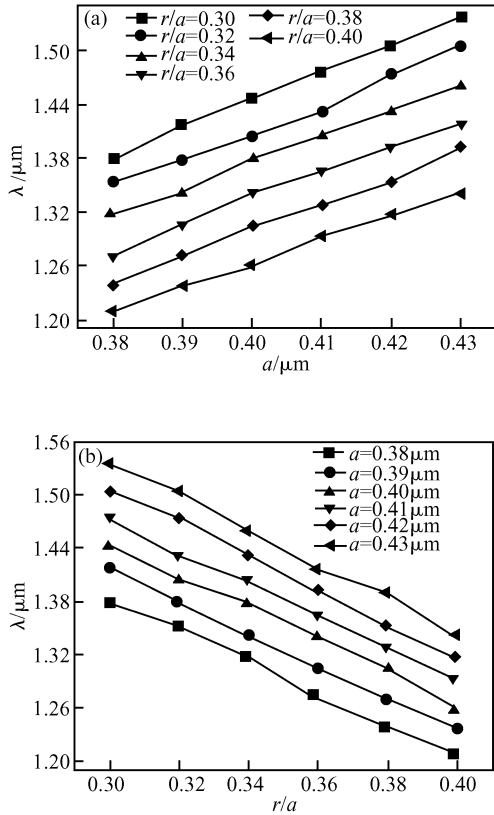


图 2 (a)不同的  $r/a$  下,对应的波长随  $a$  的变化关系;(b)不同的  $a$  下,对应的波长随  $r/a$  的变化关系  
Fig. 2 (a) Wavelength as a function of lattice constant  $a$  for different  $r/a$ ; (b) Wavelength as a function of  $r/a$  for different lattice constants  $a$

由图 2 可以清楚地看到下面的规律:

- (1)当  $r/a$  不变, $a$  变化时,腔模的谐振波长随着晶格常数  $a$  的增加而增加;
- (2)当  $a$  不变, $r/a$  变化时,腔模的谐振波长随着  $r/a$  的增加而减小。

因此,在实际的设计过程中,对于某一给定波长,可以按照这一规律很方便地估计出几组相应的  $a$  和  $r/a$  值.如对于波长  $\lambda=1.5\mu\text{m}$ ,可以选取  $r/a=0.3, a=0.42\mu\text{m}$  或者  $r/a=0.32, a=0.43\mu\text{m}$ .

为了更直观地了解缺陷模式的信息,以  $a=0.42\mu\text{m}, r/a=0.30$  为例,给出了其谐振频谱和谐振波长处的电磁场分布,分别如图 3 和 4 所示.可见,谐振波长位于  $1.5\mu\text{m}$  处.这个缺陷模式的电磁场在微腔附近是最强的,模式被很好地束缚在微腔中.即在光子晶体中,复合产生的对应于缺陷波长的所有光子将隧穿到单个的缺陷响应模,仅有这一个模式被发射.因此,这种单点缺陷微腔很好地实现了单模运作。

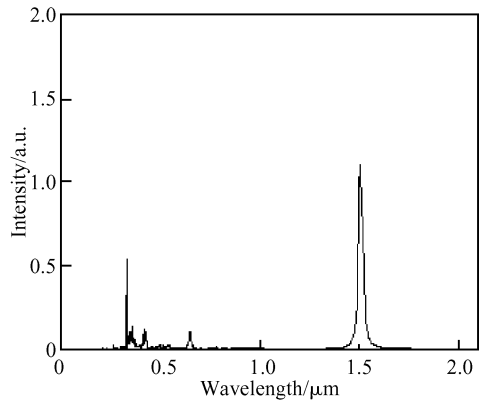


图 3  $a=0.42\mu\text{m}, r=0.126\mu\text{m}$  时的单点缺陷微腔谐振频谱  
Fig. 3 Resonant spectrum of single point defect cavity with  $a=0.42\mu\text{m}, r=0.126\mu\text{m}$

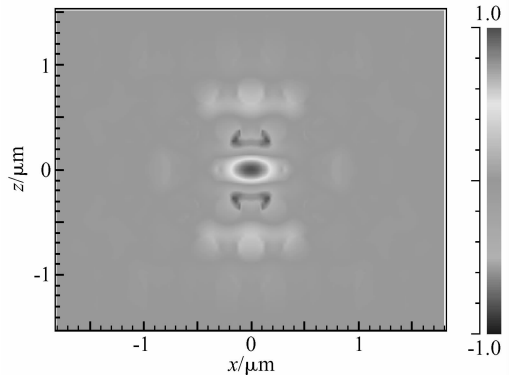


图 4  $a=0.42\mu\text{m}, r=0.126\mu\text{m}$  时的单点缺陷微腔在谐振波长  $1.50465\mu\text{m}$  处的电磁场分布  
Fig. 4 Electromagnetic field distribution at  $1.50465\mu\text{m}$  wavelength of single point defect cavity with  $a=0.42\mu\text{m}, r=0.126\mu\text{m}$

### 4 理论分析

通过上面的数值模拟,可以看到腔模的谐振波长随  $a, r$  变化的大致规律.这里我们要从理论上对模拟结果加以分析.

在光子晶体中,光传输应满足 Maxwell 方程.定义一个归一化本征频率<sup>[7]</sup>为:

$$\omega^n = \frac{\alpha\omega}{2\pi c} = \frac{a}{\lambda_0} \tag{2}$$

其中  $\omega$  是角频率; $c$  是光速; $\lambda_0$  是真空中波长;上标  $n$  表示归一化频率。

因为我们讨论的结构是一个三维结构,为简化分析,可以将本征频率近似分成两个分量,即 2D 平面(即  $x-y$  平面)内的分量  $\omega_{//}$  和垂直方向( $z$  方向)上的分量  $\omega_{\perp}$ <sup>[8]</sup>。

$$\omega^2 \approx \omega_{\parallel}^2 + \omega_{\perp}^2 = \left(\frac{c}{n_{\text{eff}}^{\parallel}}\right)^2 k_{\parallel}^2 + \left(\frac{c}{n_{\text{eff}}^{\perp}}\right)^2 k_{\perp}^2 \quad (3)$$

其中  $k_{\parallel} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$  代表 2D 平面内的波矢, 也即光子晶体晶格的倒空间中第一布里渊区(BZ)内的波矢量. 对于三角形的空气孔晶格, 其第一 BZ 区如图 5 所示.

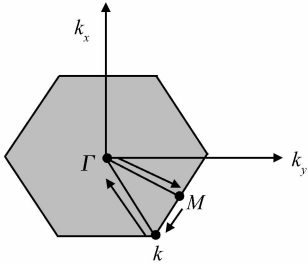


图 5 三角晶格光子晶体的第一 BZ 区

Fig. 5 First Brillouin zones for 2D triangular lattice

可以求出图中  $\Gamma K$ ,  $\Gamma M$  和  $MK$  线段的长度分别为  $\frac{4\pi}{3a}$ ,  $\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}$  和  $\frac{2\pi}{3a}$ , 于是  $k_{\parallel} = \sqrt{\left(m \frac{4\pi}{3a}\right)^2 + \left(n \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\right)^2}$

$$= p \frac{\pi}{a}$$

其中  $m, n$  为大于等于零且小于等于 1 的任意实数, 有

$$p = \sqrt{m^2 + \frac{4}{3}n^2} \quad (4)$$

而  $k_z = 2\pi/\lambda_z$  是指垂直方向( $z$  方向)上的波矢量, 因为对于  $1.5\mu\text{m}$  波长, 设计在平板垂直方向上仅基模传输,

$$\lambda_z \approx 2h \quad (5)$$

$n_{\text{eff}}^{\parallel}$  是指 2D 平面内的有效折射率, 它是由平板介质和空气孔共同决定的, 可以近似认为:

$$n_{\text{eff}}^{\parallel} = (1-f)n_{\text{slab}} + fn_{\text{air}} \quad (6)$$

其中  $n_{\text{slab}} = 3.5$  代表平板波导材料的折射率;  $n_{\text{air}} = 1$  是空气孔的折射率;  $f = \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\left(\frac{r}{a}\right)^2$  为空气填充因子. 于是(6)式变为:

$$n_{\text{eff}}^{\parallel} = 3.5 - 2.5 \times \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\left(\frac{r}{a}\right)^2 \quad (7)$$

而  $n_{\text{eff}}^{\perp}$  是由垂直方向折射率波导决定的有效折射率. 它只与折射率波导结构有关, 因为在我们讨论的结构中, 垂直方向的波导层厚度已固定不变, 因此  $n_{\text{eff}}^{\perp}$  可近似为一常数.

将(3)式左右两边同时乘以  $\left(\frac{a}{2\pi c}\right)^2$ , 并利用(4)~(7)式可以得到:

$$\omega^n \approx \sqrt{\frac{p^2}{49\left(1 - 2.6\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)^2} + \frac{1}{4(n_{\text{eff}}^{\perp})^2}} \left(\frac{h}{a}\right)^{-2} \quad (8)$$

由(8)式可以看到:

(1) 当  $r/a, h$  给定时, 归一化频率随晶格常数  $a$  的增加而增加, 从而波长随晶格常数成次线性增加. 同时应注意到: 当  $h \rightarrow \infty, r/a$  给定时, 归一化频率不随晶格常数  $a$  的变化而变化, 这就是二维的情况.

(2) 当  $a, h$  给定时, 归一化频率随  $r/a$  的增加而增加, 从而波长随  $r/a$  的增加而线性减小.

这与前面用 3D FDTD 方法得到的规律完全一致.

## 5 结 论

本文提出了用光子单点缺陷微腔来提高 Ge/Si 纳米岛的发光效率, 并阐述了其基本原理. 通过 3D FDTD 方法计算出在平板厚度为  $300\text{nm}$  时, 不同的  $a$  和  $r/a$  值所对应的腔模谐振波长, 由此得到谐振波长随这两个参数变化的规律, 即当  $r/a, h$  给定时, 波长随晶格常数成次线性增加; 当  $a, h$  给定时, 波长随  $r/a$  的增加而减小, 并从理论上给予分析. 同时, 为了更直观地了解缺陷模式的信息, 也给出了利用 3D FDTD 方法计算出的  $a = 0.42\mu\text{m}, r/a = 0.3$  时微腔的谐振频谱和电磁场分布, 可以得出单点缺陷微腔很好地实现了单模运作.

## 参 考 文 献

- [1] Wang Qiming. Nano-technology and energy band engineering to promote the high efficient luminescence of silicon. Progress in Physics, 2002, 22(4): 359 (in Chinese) [王启明. 纳米技术与能带工程对 Si 基高效发光的促进. 物理学进展, 2002, 22(4): 359]
- [2] Huang K, Han Ruqi. Solid state physics. Beijing: Higher Education Press, 2002 (in Chinese) [黄昆原著, 韩汝琦改编. 固体物理. 北京: 高等教育出版社, 2002]
- [3] Yaviv A, Xu Y, Lee R K, et al. Coupled-resonator optical waveguide: a proposal and analysis. Opt Lett, 1999, 24(11): 711
- [4] Shakya J, Kim K H, Oder T N, et al. III-nitride blue and UV photonic crystal light-emitting diodes. Proc SPIE, 2004, 5530: 241
- [5] Guo Changzhi. Theory of semiconductor lasing mode. Beijing: Posts & Telecom Press, 1989 (in Chinese) [郭长志. 半导体激光模式理论. 北京: 人民邮电出版社, 1989]
- [6] Sakoda K. Optical properties of photonic crystals. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2001
- [7] Ge Debiao, Yan Yubo. Finite-difference time-domain method for electromagnetic wave. Xi'an: Xidian University Press, 2002 (in Chinese) [葛德彪, 闫玉波. 电磁波时域有限差分方法. 西安: 西安电子科技大学出版社, 2002]
- [8] Painter O, Husain A, Scherer A, et al. Lithographic tuning of a two-dimensional photonic crystal laser array. IEEE Photonics Technol Lett, 2000, 12(9): 1126

## Numerical Simulation and Theoretical Analysis of Photonic Crystal Single-Defect Cavity Based on nc-Ge/Si Islands \*

Tang Haixia<sup>†</sup> and Wang Qiming

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

**Abstract:** The principle of the enhancement of nc-Ge/Si islands by a photonic crystal single-defect cavity is explained. For a photonic crystal slab with a thickness of 300nm, the resonant wavelength of a photonic crystal single-defect cavity based on Ge/Si islands as a function of  $a$  and  $r/a$  is calculated with the 3D FDTD method and is analyzed theoretically. For fixed  $r/a$  and  $h$ , the wavelength increases sub-linearly with the increase of lattice constant. For fixed  $a$  and  $h$ , the wavelength decreases linearly with the increase of  $r/a$ .

**Key words:** photonic crystal; single-defect cavity; nc-Ge/Si islands

**PACC:** 1320

**Article ID:** 0253-4177(2006)12-2139-05

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Nos. 60336010, 60537010)

<sup>†</sup> Corresponding author. Email: thx@mail.semi.ac.cn

Received 18 May 2006, revised manuscript received 11 August 2006