

光子晶体的微腔特性*

赵致民[†] 许兴胜 李 芳 刘育梁 陈弘达

(中国科学院半导体研究所, 北京 100083)

摘要: 为了设计一种高品质因子的光子晶体微腔和研究单缺陷光子晶体微腔谐振模波长随晶格常数的变化规律, 使用时域有限差分法(difference time-domain method)和基于 Baker 算法的 Padé 近似方法计算了半导体材料上空气孔阵列光子晶体微腔的谐振模波长和品质因子. 得到的新型光子晶体微腔的品质因子达 246510, 单缺陷光子晶体微腔模波长随晶格常数 a 和孔半径 r 的近似为线性变化关系; 当孔半径 r 为一常数时, 表现为晶格常数改变 1nm, 谐振波长变化约 3nm, 为实际制作光子晶体微腔激光器提供了理论指导.

关键词: 光子晶体; 微腔; 半导体激光器; 时域有限差分法; 品质因子

PACC: 4260D; 4270Q; 5235H

中图分类号: TN252 文献标识码: A 文章编号: 0253-4177(2006)06-01034-04

1 引言

光子晶体的概念源自半导体物理, 是一种介电系数(或折射率)成周期排列的天然或人工材料, 其本质特征是具有光子带隙. 自从 Yablonovitch 在 1987 年发现光子晶体抑制自发辐射以来^[1], 光子晶体所具有的独特的光子控制特性不断地吸引越来越多的研究人员加入到这一领域, 使得有关光子晶体理论、实验和器件研究不断被拓宽和深入, 如光子晶体负折射率、光纤、激光器等^[2~4]. 制作高 Q 值、小模体积纳米尺寸的微腔是集成光学中的一个重要的研究领域, 可以制作诸如滤波器、波分复用器、激光器等基于微腔的有源和无源器件. 相对于微盘微腔和微柱微腔, 光子晶体微腔具有更加优良的特性, 有实验报道 Q 值高达 600,000^[5], 如此高质量的微腔无疑将极大地提高基于微腔的器件性能. 如极低阈值的光子晶体微腔激光器, 有报道阈值仅为 $0.35\mu\text{W}$ 的光泵浦单缺陷光子晶体激光器^[6].

时域有限差分方法(finite-difference time-domain, FDTD)是目前广为使用的分析光子晶体微腔的数值方法, 由 Yee 于 1966 年提出, 直接求解麦克斯韦旋度方程, 利用二阶精度的中心差分近似把旋度方程中的微分算符直接转换为差分形式, 空间上使电磁分量交错放置, 在时间轴上电分量和磁分量相差半个时间步. FDTD 方法在时域内解 Maxwell 方程, 得到的是电磁场随时间变化的时域信号, 使用快速傅里叶变换(fast Fourier transform, FFT)将

时域信号转化为频域信号, 利用公式 $Q = \frac{\omega_0}{\delta\omega}$ 求得品质因子, $\omega_0, \delta\omega$ 分别是谐振频率和半高线宽, 但其效率很差, 要用很长的时间步才能得到高的光谱分辨. 还有一种方法是根据品质因子的物理含义, 利用公式 $Q = \omega_0 \frac{U}{P}$ 计算品质因子, 其中 U 是微腔中存储的能量, P 是损耗的功率, 这种方法仍需要很长的时间步, 并且还要另外计算微腔中存储的能量和损耗的功率.

本文使用文献[8~10]提出的一种基于 Baker 算法的 Padé 近似方法, 能从短的时间序列得到高分辨率的频谱, 利用这一方法我们计算了一种新型光子晶体微腔的谐振频率和品质因子. 本文还计算了三角晶格和正方晶格空气孔阵列光子晶体微腔的谐振模波长和品质因子, 得到了这种三维 Air-bridge 对称结构下微腔谐振模波长随晶格常数 a 和孔半径 r 的近似线性变化关系.

2 模型及讨论

首先利用时域有限差分方法计算光子晶体微腔, 得到时域离散电磁场分量 $u(t)$, 然后用傅里叶变换得到离散电磁场分量的频谱

$$U(\infty, f) = \sum_{n=0}^N u(n\Delta t) e^{-i2\pi f n \Delta t} \quad (1)$$

定义函数 $F(z, f)$

$$F(z, f) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n z^n \quad (2)$$

* 国家自然科学基金(批准号: 60377011, 60345008)和国家高技术研究发展计划(批准号: 2003AA311020)资助项目

[†] 通信作者. Email: Zhaozhimin@red.semi.ac.cn

2005-11-07 收到, 2005-12-30 定稿

其中 z 为一参数, C_n 为

$$C_n = u(n\Delta t)e^{-i2\pi fn\Delta t} \quad (3)$$

由方程(1),(2)可看到 $F(1, f) = U(\infty, f)$, 可建立对角的 Padé 近似来逼近 $F(z, f)$, 即 $[N/2, N/2] \rightarrow F(z, f)$. 快速建立对角 Padé 近似的算法即 Baker 算法, 它由 Padé 近似 $[0, N](z)$ 和 $[0, N-1](z)$ 经过循环迭代得到 $[N/2, N/2](z)$. 定义 Padé 近似 $[j, N-j](z)$ 和 $[j, N-j-1](z)$.

$$[j, N-j](z) = \frac{\eta_{2j}(z)}{\theta_{2j}(z)} \quad (4)$$

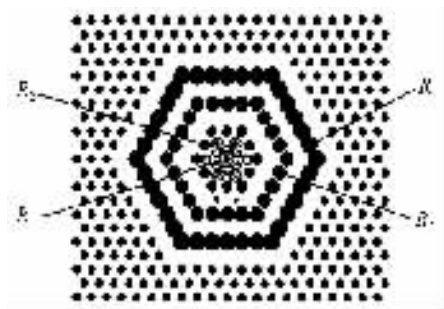
$$[j, N-j-1](z) = \frac{\eta_{2j+1}(z)}{\theta_{2j+1}(z)} \quad (5)$$

它们的迭代关系如下

$$\frac{\eta_{2j}(z)}{\theta_{2j}(z)} = \frac{\eta_{2j-2}(z) - z\eta_{2j-1}(z)}{\theta_{2j-2}(z) - z\theta_{2j-1}(z)} \frac{\bar{\eta}_{2j-2}/\bar{\eta}_{2j-1}}{\bar{\theta}_{2j-2}/\bar{\theta}_{2j-1}} \quad (6)$$

$$\frac{\eta_{2j+1}(z)}{\theta_{2j+1}(z)} = \frac{[\bar{\eta}_{2j}\eta_{2j-1}(z) - \bar{\eta}_{2j-1}\eta_{2j}(z)]/(\bar{\eta}_{2j} - \bar{\eta}_{2j-1})}{[\bar{\eta}_{2j}\theta_{2j-1}(z) - \bar{\eta}_{2j-1}\theta_{2j}(z)]/(\bar{\eta}_{2j} - \bar{\eta}_{2j-1})} \quad (7)$$

其中 $\bar{\eta}_j$ 表示多项式 $\eta_j(z)$ 中 z 的最高次项的系数, $\eta_j(z)$ 中 z 最高次项为 $z^{N-[(j+1)/2]}$, 其中 $[(j+1)/2]$ 表示不超过 $(j+1)/2$ 的最大整数. 由循环关系(6, 7)可知, 假如知道了 $\eta_{2j-2}(z), \theta_{2j-2}(z), \eta_{2j-1}(z)$ 及 $\theta_{2j-1}(z)$ 便可以求出 $\eta_{2j}(z), \theta_{2j}(z), \eta_{2j+1}(z)$ 及 θ_{2j+1}



(a)

(z), 由方程(4)便可建立对角的 Padé 近似 $[N/2, N/2](z)$, 即 $U(\infty, f)$ 的近似. 循环的初始值为

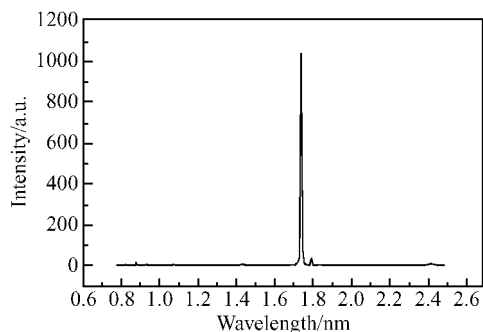
$$\eta_0(z) = \sum_{n=0}^N C_n z^n \quad \theta_0(z) = 1.0 \quad (8)$$

$$\eta_1(z) = \sum_{n=0}^{N-1} C_n z^n \quad \theta_1(z) = 1.0 \quad (9)$$

得到 $U(\infty, f)$, 我们用洛仑兹函数拟和 $|U(\infty, f)|^2$, 就可以得到谐振腔模的光谱和品质因子.

计算中采用的是如图 1 所示的制作在折射率为 3.4 介质平板上的二维空气孔阵列三角晶格光子晶体结构, 晶格常数 a , 孔半径 R . 我们设计的微腔类似光栅, 如图 1(a) 所示, 从缺陷中心开始, 每隔一个周期去掉一圈孔, 晶格常数为 500nm, 孔半径 $R = 0.32a$. 中心孔的半径 $R_1 = 0.12\mu\text{m}$, 外围的第一圈孔半径 $R_2 = 0.2\mu\text{m}$, 以此类推, $R_3 = 0.26\mu\text{m}, R_4 = 0.3\mu\text{m}$.

图 1(a), (b) 分别给出了微腔的模场分布和光谱, 可以看出微腔中存在单个回音 (whispering-gallery) 壁谐振模, 波长为 $1.74\mu\text{m}$, 使用基于 Baker 算法的 Padé 近似方法计算得到品质因子为 246510, 证明了这是一种优良的光子晶体微腔.



(b)

图 1 (a) 光子晶体微腔的模场分布; (b) 光子晶体微腔的光谱

Fig.1 (a) Mode distribution of photonic crystal microcavity; (b) Spectrum of photonic crystal microcaviy

我们还计算了如图 2(a), (b) 所示的制作在折射率为 3.4 介质平板上的二维空气孔阵列光子晶体结构, 去掉一个孔形成单缺陷微腔. 在垂直方向上, 介质平板上下由空气包围, 构成空气桥结构. 图 3 是晶格常数 a 为 500nm、孔半径 r 为 $0.3a$ 时, 三角晶格微腔的光谱, 可以看出, 微腔中只存在单个模式. 由于工艺上的种种原因, 实际制作出的图形尺寸往往和理论设计有较大差别, 如果能在理论计算上将工艺上可能涉及的参数变化考虑进去, 会对实验结果有着很好的指导作用. 基于上述考虑, 我们计算了

晶格常数 a 在一定范围变化, 平板厚度和孔半径为 $0.41a$ 和 $0.3a$ 下光子晶体微腔腔模波长, 如图 4 所示. 可以看出, 晶格常数 a 变化范围在 100nm 时, 正方晶格微腔和三角晶格微腔腔模波长近似为线性变化, 拟合的结果为: 晶格常数改变 1nm, 谐振波长变化约 3nm.

3 结论

利用时域有限差分法和基于 Baker 算法的 Padé

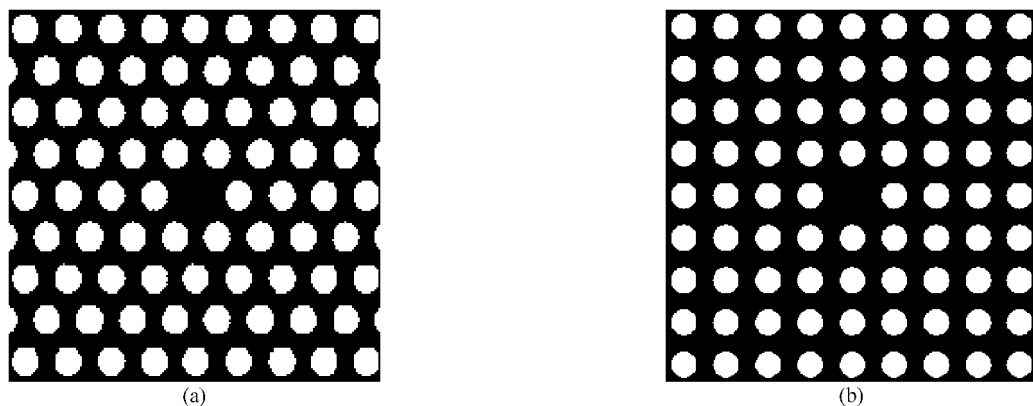


图 2 (a)三角晶格光子晶体微腔;(b)正方晶格光子晶体微腔

Fig. 2 (a) Triangular lattice photonic crystal microcavity;(b) Square lattice photonic crystal microcavity

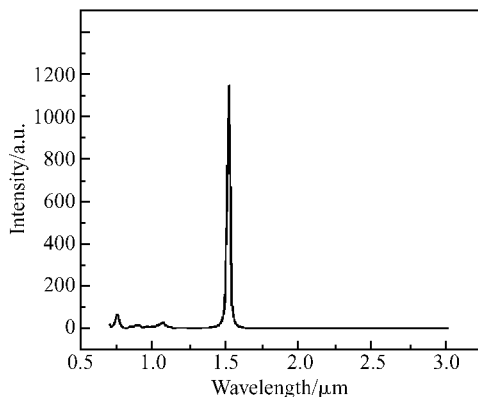


图 3 光子晶体微腔光谱

Fig. 3 Spectrum of photonic crystal microcavity

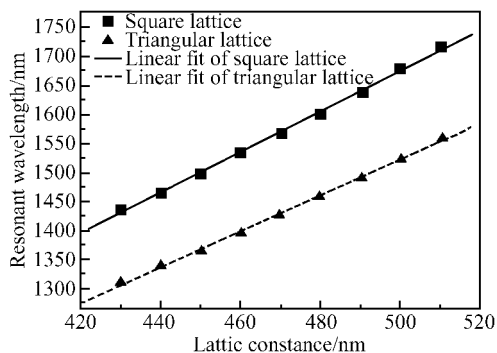


图 4 不同晶格常数下三角晶格和正方晶格的微腔谐振波长
Fig. 4 Resonant wavelength of triangular and square lattice microcavity

近似方法设计出了一种高品质因子的光子晶体微腔,品质因子高达 246510. 研究了 Membrane 型三角晶格和正方晶格空气孔阵列光子晶体微腔的模式、品质因子和光谱特性,得到了腔模波长与晶格

常数之间的近似线性关系,为实际器件的制作提供了理论依据.

致谢 国伟华博士和作者进行了有益的讨论,在此深表感谢.

参考文献

- [1] Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Phys Rev Lett*, 1987, 58(20): 2059
- [2] Kosaka H, Kawashima T, Tomita A. Superprism phenomena in photonic crystals. *Phys Rev B*, 1998, 58: R10096
- [3] Knight J C, Broeng J, Birks T A, et al. Photonic band gap guidance in optical fibers. *Science*, 1998, 282: 1476
- [4] Painter O, Lee R K, Scherer A, et al. Two-dimensional photonic crystal band-gap defect mode laser. *Science*, 1999, 284: 1819
- [5] Song B S, Noda S, Asano T, et al. Ultra-high- Q photonic double-heterostructure nanocavity. *Nature Materials*, 2005, 4: 207
- [6] Lee Y H, Ryu H Y, Park H K, et al. Low threshold 2-D photonic crystal lasers. *LEOS*, 2002, 1: 219
- [7] Talove A. *Computational electrodynamics; The finite-difference time-domain method*. Artech House, 1995
- [8] Guo W H, Li W J, Huang Y Z. Computation of resonant frequencies and quality factors of cavities by FDTD technique and Padé approximation. *IEEE Microwave Wireless Components Lett*, 2001, 11: 223
- [9] Huang Yongzhen, Chen Qin, Guo Weihua, et al. Application of Padé approximation in simulating photonic crystals. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2005, 26(7): 1281 (in Chinese)[黄永箴, 陈沁, 国伟华, 等. Padé 近似在光子晶体模拟中的应用. *半导体学报*, 2005, 26(7): 1281]
- [10] Qiu Min, Zhang Ziyang. High- Q microcavities in 2D photonic crystal slabs studied by FDTD techniques and Padé approximation. *Proc of SPIE*, 2005, 5733: 366

Properties of a Photonic Crystal Microcavity*

Zhao Zhimin[†], Xu Xingsheng, Li Fang, Liu Yuliang, and Chen Hongda

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

Abstract: In order to design a new type of photonic crystal microcavity with a high quality factor and to study the relationship between the resonant mode wavelength and the lattice constant of a single-defect photonic crystal microcavity, the finite difference time-domain method and the Padé approximation together with Baker's algorithm are employed to calculate the resonant mode wavelength and quality factor of air hole photonic crystal microcavities made of semiconductor material. The quality factor of this photonic crystal microcavity is 246510, and it has a linear relationship such that a change of three nanometers in the resonant mode wavelength results in a change of only one nanometer in the lattice constant of the single defect photonic crystal microcavity for a fixed hole radius. These results provide theoretical instruction for fabricating photonic crystal microcavity lasers.

Key words: photonic crystal; microcavities; semiconductor lasers; difference time-domain method; quality factor

PACC: 4260D; 4270Q; 5235H

Article ID: 0253-4177(2006)06-1034-04

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Nos. 60377011, 60345008), and the National High Technology Research and Development Program of China (No. 2003AA311020)

[†] Corresponding author. Email: Zhaozhimin@red.semi.ac.cn

Received 7 November 2005, revised manuscript received 30 December 2005

©2006 Chinese Institute of Electronics