

# 混合光子晶体等离子激元纳米微腔

童 凯 张振国 卢建如 李汉卿 高鹏耀

(燕山大学电气工程学院, 河北 秦皇岛 066004)

**摘要** 构建了一种三层混合光子晶体等离子体激元结构, 分别为金属银(Ag)层, 低折射率二氧化硅(SiO<sub>2</sub>)层和二维光子晶体层。这种混合光子晶体等离子体激元结构具有明显的横磁模(TM)模式带隙。在二维的光子晶体层的中心引入一个单元胞缺陷, 形成缺陷腔结构。这种纳米尺度的光子晶体等离子体微腔的体积远小于传统介质的光学微腔, 光子能量可以很好地被局域到低折射率层, 实现了深亚波长尺度下的对光的限制。通过改变该混合光子晶体等离子体激元结构的参数, 利用三维时域有限差分(3D-FDTD)方法, 分析了这种混合光子晶体等离子体微腔结构的光学特性。分析表明: 这种纳米微腔具有极小的模式体积  $0.0141 (\lambda/n)^3$  和高的  $Q/V$  值。

**关键词** 光学器件; 表面等离子体; 光子晶体; 纳米微腔; 模式体积

**中图分类号** O439 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/CJL201441.0905009

## Hybrid Plasmonic Photonic Crystal Nano Micro-Cavity

Tong Kai Zhang Zhenguo Lu Jianru Li Hanqing Gao Pengyao

(College of Electrical Engineering, Yanshan University, Qinhuangdao, Hebei 066004, China)

**Abstract** A kind of three-tier hybrid plasmonic photonic crystal which is respectively constituted by a metal layer of silver (Ag), a low refractive index dielectric layer of SiO<sub>2</sub> and a two-dimensional photonic crystal layer, is proposed. A clear plasmonic transverse-magnetic (TM) bandgap can be formed in this hybrid plasmonic photonic crystal. The defect cavity is constituted by introducing a unit cell defect in the center of the two-dimensional photonic crystal layer. The volume of the hybrid plasmonic photonic crystal micro-cavity is based on nano-scale, which is much less than the conventional optical micro-cavity, and the photon energy is well confined in the low index layer, so light can be limited at deep sub-wavelength scale. With some different structure parameters, the numerical analysis method of three-dimensional finite difference time domain (3D-FDTD) is used to analyze the characteristics of this hybrid plasmonic photonic crystal. The analysis indicated that this kind of nano micro-cavity has an ultra-small mode volume of  $0.0141 (\lambda/n)^3$  and an ultra-high  $Q/V$ .

**Key words** optical devices; surface plasma; photonic crystal; nano micro-cavity; mode volume

**OCIS codes** 230.5298; 250.5403; 140.3948

## 1 引 言

光子晶体是一种由不同介电常数材料在空间呈周期性排列的结构, 具有独特的光子带隙特性。在光子晶体中引入缺陷可构成光子晶体微腔<sup>[1]</sup>, 光子晶体微腔可将带隙范围内的光局域到缺陷腔内, 产生光学非线性效应<sup>[2]</sup>。在全光信息处理和光网络集成方面, 这种光学非线性具有响应速度快, 通信容量高等优点。传统的光学微腔有光子晶体平板微腔<sup>[3]</sup>、双异质结构微腔<sup>[4]</sup>、线缺陷宽度调制微腔<sup>[5]</sup>和

光子晶体耦合腔<sup>[6]</sup>等。理论上传统微腔的结构尺寸可达到波长量级, 但由于衍射极限的限制<sup>[7-8]</sup>, 其结构尺寸通常为微米甚至厘米量级。品质因子  $Q$  和模式体积  $V$  是表征光学微腔性能的重要参数, 基于纳米尺度的光学微腔具有高的品质因子和极小的模式体积特点。光局域的体积范围越小, 即模式体积越小, 可提高光与介质相互作用的珀塞尔因子<sup>[9]</sup>和自发辐射速率, 进而提高材料的发光效率。因此, 基于深亚波长结构尺寸微腔的光子器件成为当前研究

**收稿日期**: 2014-03-24; **收到修改稿日期**: 2014-05-06

**基金项目**: 国家自然科学基金(61172044, 61201112)

**作者简介**: 童 凯(1973—), 男, 博士, 教授, 主要从事光子晶体器件方面的研究。E-mail: tongkai@ysu.edu.cn

的一个热点。

表面等离子体波(SPPs)是一种在金属和介质界面上传播的表面波<sup>[10]</sup>。当光波能量和金属中自由电子耦合共振时,形成沿金属和介质界面传播的电子疏密波,这种电子疏密波具有独特的色散特性。在垂直于传播方向上 SPPs 是消逝场,而在传播方向上具有比光波更大的波矢,即波长更短,因此具有超越波长衍射极限的能力,实现在亚波长尺度下对光子的限制。从而形成深亚波长尺度的光学微腔,如光子晶体无源腔<sup>[11]</sup>,金属涂层纳米微腔<sup>[12]</sup>,及布拉格光栅反射型<sup>[13-14]</sup>等离子极化微腔。

将光子晶体和表面等离子体微腔相结合,可构成纳米尺度的微腔结构,实现极小且有效的模式体积和很高的  $Q/V$  值。在此,本文提出一种新颖的二维平面混合光子晶体等离子体微腔结构,即在金属基底和光子晶体层之间嵌入一层低折射率介质层。同时,在光子晶体层中移除中心的一个空气孔,形成一个缺陷腔结构,构成混合光子晶体表面等离子体微腔。这种微腔具有深亚波长尺度的结构尺

寸,可降低损耗,且在 1550 nm 通信波段内具有极小的模式体积。

## 2 混合光子晶体等离子体微腔的结构和特性

混合光子晶体等离子体微腔结构如图 1(a)所示,由金属基层层,低折射率介质层及二维光子晶体构成。二维光子晶体为具有空气孔周期排列的正方晶格结构,介质硅(Si)中,中间低折射率层介质为二氧化硅( $\text{SiO}_2$ ),金属层为具有低损耗特性的金属银(Ag)。其结构参数如图 1(b)和(c)所示,介质厚度分别取  $H_{\text{Ag}} = 300 \text{ nm}$ ,  $H_{\text{SiO}_2} = 20 \text{ nm}$ ,  $H_{\text{Si}} = 250 \text{ nm}$ ,晶格常数  $a = 390 \text{ nm}$ ,孔半径  $r = 160 \text{ nm}$ 。这种混合模式的有效折射率为 2.595,与  $\text{SiO}_2$ -Ag 界面的表面等离子极化微腔的有效折射率 1.453 形成高折射率对比。因此,这种混合光子晶体等离子体微腔结构具有明显的横磁模(TM)模式带隙。

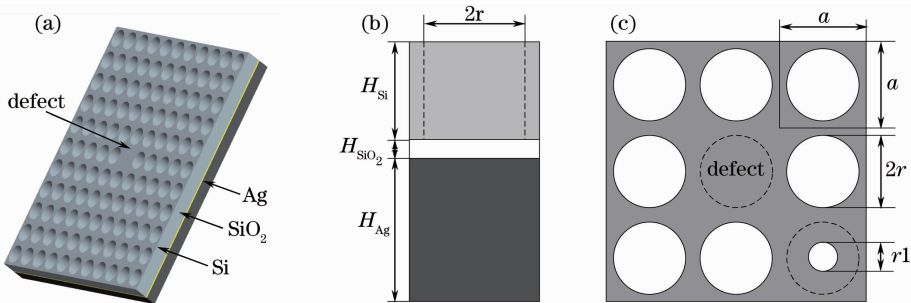


图 1 混合光子晶体等离子体微腔结构参数示意图。(a) 结构示意图;(b) 混合结构参数示意图;(c) 混合结构缺陷腔及周围空气孔的大小变化示意图

Fig.1 Schematic diagram of structure parameters of the hybrid plasmonic photonic crystal micro-cavity. (a) Schematic of the structure; (b) structure parameters of the hybrid; (c) schematic diagram of the defect cavity and the changing size of surrounding air holes

由于金属 Ag 是一种强色散材料,具有复介电常数,因此可采用三维时域有限差分(3D-FDTD)法分析混合光子晶体结构在第一布里渊区的色散关系,并利用垂直方向的对称性来限定计算 TM 模式。这种混合结构的能带结构如图 2 所示,其归一化频率带隙为 0.241~0.268,该带隙位于通信波段 1550 nm 附近。同时可以得到图 3 所示的混合结构缺陷腔的归一化谐振光谱,且该谐振峰值波长位于混合结构的带隙内。分析时,采用德鲁德模型<sup>[15]</sup>对金属 Ag 的色散性质进行拟合,背景介电常数  $\epsilon_\infty = 5$ ,等离子体振荡频率  $\omega_p = 1.38 \times 10^{16} \text{ rad/s}$ ,碰撞频率  $\gamma = 5.07 \times 10^{13} \text{ rad/s}$ 。

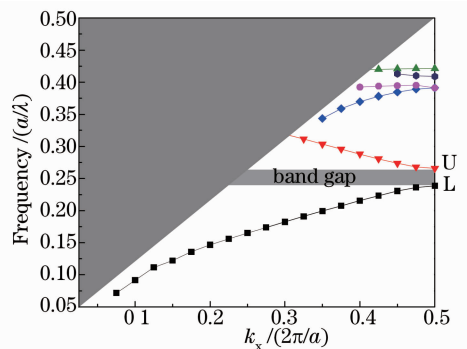


图 2 混合结构的归一化能带结构图

Fig.2 Normalized band structure of the hybrid structure

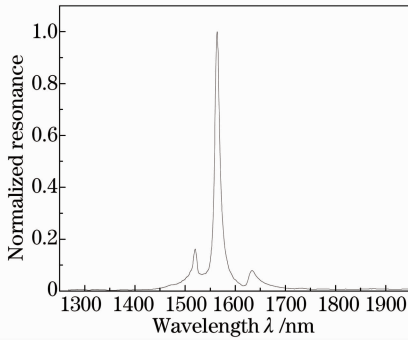


图3 归一化的混合结构微腔谐振波长示意图

Fig. 3 Diagram of normalized resonance wavelength of the hybrid structure micro-cavity

由模式场的分布可知,在能带 U 和 L 的边缘模式即为 SPP 模式<sup>[9]</sup>,带隙的出现是由于能量密度在混合结构中的独特分布所决定。此外,由于混合光子晶体等离子激元波导结构的光子模式具有比 SPP 模式更高的频率,因此,可在较低频率激发这种结构的等离子体激元模式,且不会干扰结构的光子模式。

图 4 中的两组图(a)、(c)和(b)、(d)分别表示具有 SiO<sub>2</sub>层结构和无 SiO<sub>2</sub>层结构的混合光子晶体表面等离子激元结构的典型腔模式图。图 4(a)和(b)的  $|E_z|^2$  场分布相似,谐振模场的大部分能量都被局域在缺陷处,这是由于光子晶体缺陷提供了一个很

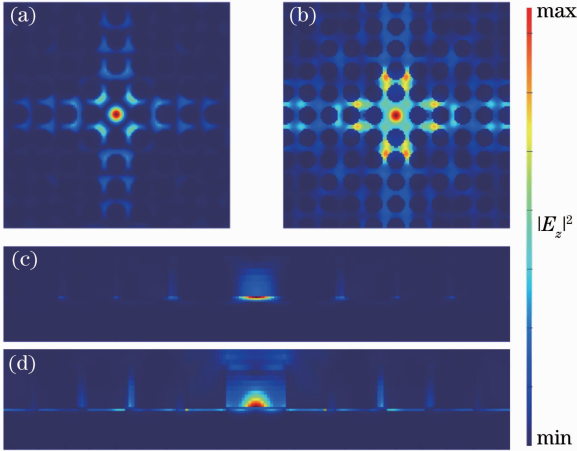


图 4  $|E_z|^2$  能量分布图。(a) 带有 SiO<sub>2</sub> 层三层结构的剖面俯视图;(b) 无 SiO<sub>2</sub> 层的二层结构的剖面俯视图;(c) 具有 SiO<sub>2</sub> 层的三层结构的剖面侧视图;(d) 无 SiO<sub>2</sub> 层的二层结构的剖面侧视图

Fig. 4  $|E_z|^2$  energy distribution. (a) Top cross-sectional view of the three-layer structure with SiO<sub>2</sub> layer; (b) top cross-sectional view of the two-layer structure without SiO<sub>2</sub> layer; (c) side cross-sectional view of the three-layer structure with SiO<sub>2</sub> layer; (d) side cross-sectional view of the two-layer structure without SiO<sub>2</sub> layer

好的典型腔模式,将大部分的能量局域在该处。由图 4(c)和(d)可知,在有 SiO<sub>2</sub>层的结构中,模场的极大值分布在光子晶体和 SiO<sub>2</sub>的交界面上,整个模场的大部分能量都分布在低折射率的 SiO<sub>2</sub>层中。而在无 SiO<sub>2</sub>层的结构中,模场的最大值都分布在金属银和光子晶体的界面上,大部分能量都分布在 Si 层中。又因为 SiO<sub>2</sub>是 1550 nm 波长附近的低损耗材料,这有助于微谐振腔的品质因子的提高。此外,低折射率 SiO<sub>2</sub>层的加入可以提高对模场的限制能力,将大部分的模场能量都限制在一个很小的区域,减小有效的模式体积,从而提高 Q/V 值。同时,由混合结构的横截面  $|E_z|^2$  分布图[图 4(a)和(c)]可以看出,所激发的 SPP 模式被很好的局域在纳米微腔的缺陷区域中,这证明了所提出的这种混合结构的腔模式特性,可以在图 2 所示的这种混合结构的带隙中观测到明显的混合光子晶体等离子激元腔模式。

这种混合光子晶体等离子激元结构具有可激励出 SPP 模式的纳米微腔,通过改变缺陷孔周围的空气孔的半径大小实现对纳米微腔大小进行调节。由于采用 3D-FDTD 方法对这种多层结构进行仿真时,需耗费计算机大量的计算资源,因此,设计了  $11 \times 11$  的二维光子晶体波导结构,同时保证可以将光的能量尽可能局域在中心缺陷处。随着 SiO<sub>2</sub>层厚度减小模场分布越来越集中,但是当厚度减小到 10 nm 时模场并没有全部局域到 SiO<sub>2</sub>层中,很大部分的模场泄漏到 Si 层中,因此选择 SiO<sub>2</sub>层厚度为 20 nm。

### 3 仿真结果与分析

#### 3.1 理论分析

对于混合光子晶体等离子激元结构缺陷腔,可以通过分析其光子寿命,获得光学微腔的品质因子<sup>[16]</sup>。微腔的品质因子描述为

$$Q = 2\pi \frac{u(t)}{-[du(t)/dt] \cdot T} = \frac{2\pi}{\gamma \cdot T} = \frac{\omega_0}{\gamma} \quad (1)$$

因此,可通过谐振模的阻尼振荡衰减波包的  $\gamma$  值和谐振频率求出 Q 值。但是由于基底金属层的吸收,腔内的光子能量会由于金属的吸收损耗 ( $\sim 1/Q_{\text{abs}}$ ) 和辐射到空气中的辐射损耗 ( $\sim 1/Q_{\text{rad}}$ ) 而损耗掉。因此,总的品质因子 ( $\sim 1/Q_{\text{tot}}$ ) 可以被分解为金属的吸收损耗  $Q_{\text{abs}}$  和辐射损耗  $Q_{\text{rad}}$ , 即

$$Q_{\text{tot}}^{-1} = Q_{\text{abs}}^{-1} + Q_{\text{rad}}^{-1} \quad (2)$$

由图 4(a) 和 (c) 可以看出, 大部分的光子能量都被局域在低折射率层中。对于色散介质的电磁场的能量密度  $W(\mathbf{r})$  表示为<sup>[15]</sup>

$$W(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{Re} \left[ \frac{d(\omega \epsilon)}{d\omega} \right] |E(\mathbf{r})|^2 + \mu |H(\mathbf{r})|^2 \right\}. \quad (3)$$

混合光子晶体等离子体微腔的模式体积为<sup>[6]</sup>

$$V_m = \frac{W_m}{\max[W(\mathbf{r})]} = \frac{1}{\max[W(\mathbf{r})]} \iiint W(\mathbf{r}) d^3 r. \quad (4)$$

### 3.2 纳米微腔大小变化的影响

通过改变缺陷腔周围空气孔的半径大小来调节纳米微腔的大小。分别分析了缺陷腔上下左右 4 个

空气孔, 缺陷腔对角 4 个空气孔, 以及缺陷腔周围的 8 个空气孔孔径变化三种情况对其谐振波长的影响, 结果如图 5(a) 所示 (u: 缺陷周围上下左右最近的 4 个空气孔, d: 缺陷对角线上的 4 个空气孔, ud: 缺陷周围的 8 个空气孔), 当周围空气孔半径从  $0.25a$  变化到  $0.45a$  时, 微腔中的谐振波长随之减小。且当缺陷的周围 8 个空气孔同时变化时, 对波长的变化影响最大, 其次是对角的 4 个空气孔的变化, 离缺陷最近的上下左右 4 个空气孔的变化对谐振波长变化影响最小。因此可以通过调整缺陷周围空气孔的大小, 将谐振波长调到合适的范围。

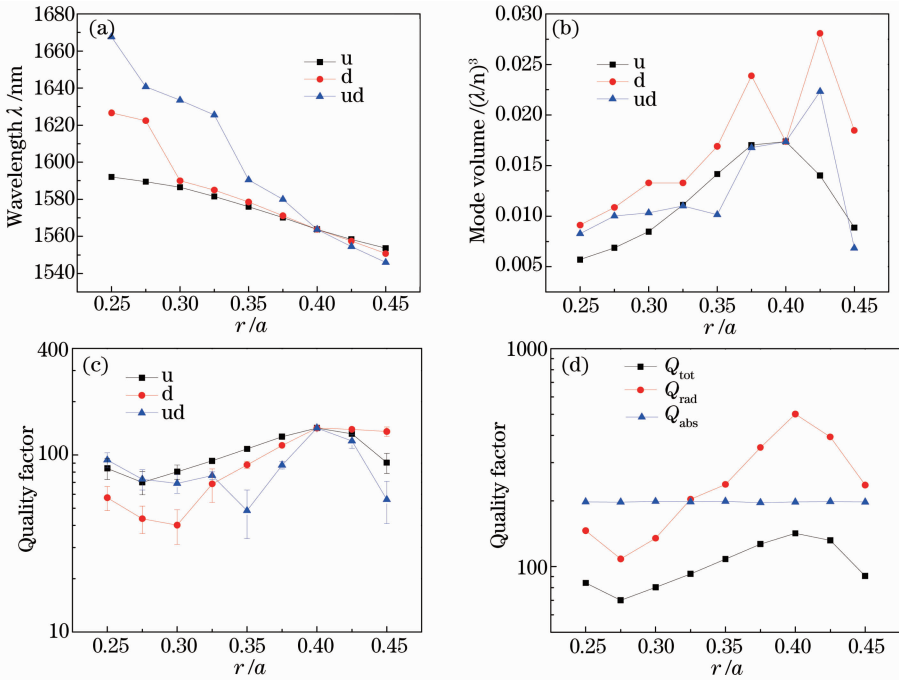


图 5 空气孔的大小对腔特性的影响。(a) 对谐振波长的影响;(b) 对模式体积的影响;(c) 对品质因子的影响;(d) 对  $Q_{tot}$ ,  $Q_{rad}$ ,  $Q_{abs}$  的影响

Fig. 5 Effects on the cavity characteristics with different sizes of air holes. (a) Effects on the resonant wavelength; (b) effects on the mode volume; (c) effects on the quality factor; (d) effects on the  $Q_{tot}$ ,  $Q_{rad}$ ,  $Q_{abs}$

图 5(b) 描述的是缺陷腔周围空气孔孔径的变化对于模式体积的影响。当空气孔半径从  $0.25a$  变化到  $0.4a$  时, 模式体积有微小增大的趋势, 而当超过  $0.4a$  时其模式体积随之减小。在上述三种空气孔孔径变化的情况下, 对模式体积没有明显的影响。缺陷腔周围空气孔的变化对纳米微腔品质因子的影响如图 5(c) 所示, 当缺陷点周围空气孔孔径为  $0.4a$  时, 纳米微腔的品质因子  $Q$  达到极大值。且随着空气孔的半径从  $0.4a$  逐渐减小时, 纳米微腔的品质因子将随之减小。基于上述的理论模型, 通过计算在  $1000 \text{ fs}$  内缺陷腔中光子的寿命, 得到的该缺陷腔的

品质因子, 由于分析时选取在一个有限时间内计算腔内光子的寿命, 因此存在计算误差, 对应三种情况下品质因子的误差棒图如图 5(c) 所示。三种情况下品质因子的误差都在  $0.4a$  附近最小, 此时的计算误差为  $\pm 0.39327$ 。当周围的空气孔的半径取值以  $0.4a$  为基准, 周围的空气孔增大或减小时, 品质因子的计算误差也在随之增大, 计算误差的最大值为  $\pm 14.782$ 。

图 5(d) 所示为缺陷点周围空气孔孔径的变化对总的品质因子  $Q_{tot}$ , 辐射损耗品质因子  $Q_{rad}$  及吸收损耗品质因子  $Q_{abs}$  的影响。可以看出, 金属的吸收

损耗基本保持不变,而  $Q_{\text{rad}}$  的变化明显。

通过计算,当混合结构的周围空气孔半径  $r = 160 \text{ nm}$  时,获得纳米微腔的品质因子为 141.426,模式体积为  $0.0141(\lambda/n)^3$ ,从而得到所设计混合结构的  $Q/V = 10101.86 (\lambda/n)^{-3}$ 。由于金属银是一种强色散材料,不是可见光及红外波段的良好导体,对于在其上传播的表面等离子体具有很大的吸收损耗,因此基于此种表面等离子体激元的光学微腔的品质因子  $Q$  都很低。当去掉底层的等离子体银层计算出的品质因子高达 5092.76,但是此时的模式体积也相应地变大为 1.9239,该结构的  $Q/V = 2647.1 (\lambda/n)^{-3}$ 。因此,提出的混合结构相对于无等离子体银层的结构,不仅实现了亚波长尺度的模式体积,且其  $Q/V$  值提高 4 倍左右。

### 3.3 其他参数对于缺陷腔模式的影响

分别研究了缺陷周围空气孔填充介质的折射率和低折射率层厚度对于混合结构缺陷腔特性的影响,对缺陷周围的 8 个空气孔中分别填充不同的折射率材料进行了数值分析,结果如图 6 所示。微腔的谐振波长与周围空气孔填充的介质的折射率呈线性关系,因此也可以通过调整周围空气孔的填充介质折射率来获得所需的谐振波长。同时得到了微腔的品质因子和折射率的关系,可以看出微腔的品质因子会随着填充介质折射率的增大而减小。图 7 分析了中间低折射率  $\text{SiO}_2$  层的厚度对于微腔的品质因子和微腔模式体积的影响。由于在中间低折射率层的场分布在总的场分布中占主要部分,因此模式体积对于低折射率层的厚度变化非常敏感,可以看出模式体积随着  $\text{SiO}_2$  层厚度的增大而增大,同时发现  $\text{SiO}_2$  层厚度的变化对品质因子  $Q$  无明显影响。

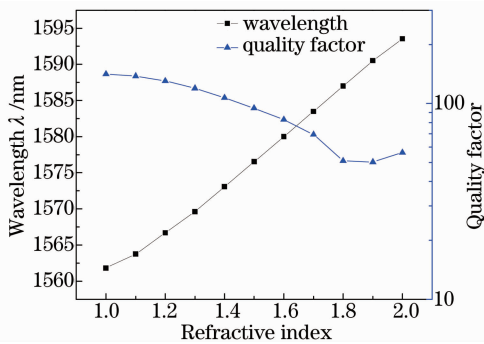


图 6 填充材料折射率的不同与腔的谐振波长和品质因子的关系

Fig. 6 Quality factor and resonance wavelength as a function of different refractive index of filling material

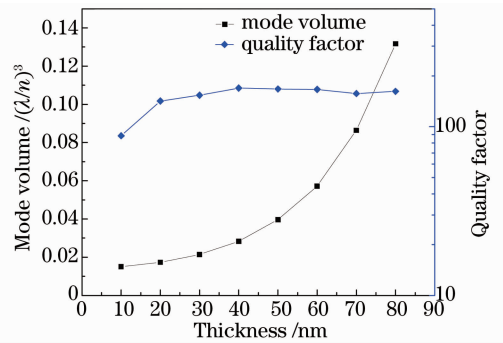


图 7 低折射率层的厚度对品质因子和模式体积的影响

Fig. 7 Quality factor and mode volume as a function of different thicknesses of the low refractive index layer

## 4 结 论

提出的混合微腔结构具有深亚波长的结构尺寸,因此具有稳定的低损耗和极小的模式体积。数值计算了结构参数对于微腔的品质因子,模式体积和谐振波长的影响,在通信波段范围得到了较高的品质因子和深亚波长的模式体积。这种混合光子晶体等离子激元腔可作为集成光路上的结构微腔,或作为等离子激元光源直接耦合进等离子激元波导中和弯曲的锥形光纤波导中。此外,可以在低折射率层中使用增益材料,例如  $\text{InGaAsP}$  量子阱掺入这种混合结构中,制作出高效的具有腔结构的等离子激元光源。同时,金属基底对电和热的良好传导性,这种微腔结构可以实现在室温条件下的大功率激光器。

## 参 考 文 献

- Xiaoling Wang, Naiguang Lv, Qiaofeng Tan, *et al.*. Investigation of biosensor built with photonic crystal microcavity [J]. *Chin Opt Lett*, 2008, 6(12): 925–927.
- G T Kiehne, A E Kryukov, J B Ketterson. A numerical study of optical second-harmonic generation in a one-dimensional photonic structure[J]. *Appl Phys Lett*, 1999, 75(12): 1676–1678.
- Han Lihong, Liu Liming, Guo Xuan, *et al.*. Research and design of L3 square air holes photonic crystal cavity[J]. *Acta Optica Sinica*, 2013, 33(11): 1116005.  
韩利红, 刘立明, 郭璇, 等. 正方形空气孔 L3 型光子晶体平板微腔的研究与设计[J]. *光学学报*, 2013, 33(11): 1116005.
- Y Jie, J. Ding, Jacob B Khurgin. Resonant raman scattering in GaN single crystals and GaN-based heterostructures: feasibility for laser cooling[J]. *Chin Opt Lett*, 2013, 1(11): 011901.
- E Kuramochi, M Notomi, S Mitsugi, *et al.*. Ultra-high-Q photonic nanocavities realized by the local width modulation of a line defect[J]. *Appl Phys Lett*, 2006, 88(20): 041112.
- M Notomi, E Kuramochi, T Tanabe. Large-scale arrays of ultrahigh-Q coupled nanocavities[J]. *Nature Photonics*, 2008, 2(12): 741–747.

- 7 X Luo, T Ishihara. Surface plasmon resonant interference nanolithography technique[J]. Appl Phys Lett, 2004, 84(23): 4780–4782.
- 8 V Georgios, Zhangfu Yu, K Sukru Ekin, *et al.*. Metal-dielectric-metal plasmonic waveguide devices for manipulating light at the nanoscale[J]. Chin Opt Lett, 2009, 7(4): 302–308.
- 9 R M Ma, R F Oulton, V J Sorger, *et al.*. Room-temperature sub-diffraction-limited plasmon laser by total internal reflection [J]. Nat Mater, 2011, 10(2): 110–113.
- 10 Luo Xin, Zou Xihua, Wen Kunhua, *et al.*. Narrow-band filter of surface plasmon based on dual-section metal-insulator-metal structure[J]. Acta Optica Sinica, 2013, 33(11): 1123003.
- 11 Feng Chen, Feng Guoying, Zhou Hao, *et al.*. Characteristic analysis on photonic crystal laser cavity with one-dimensional photonic bandgap[J]. Chinese J Lasers, 2012, 39(8): 0802009. 冯 琛, 冯国英, 周 昊, 等. 一维光子带隙光子晶体激光腔的特性分析[J]. 中国激光, 2013, 39(8): 0802009.
- 12 A Mizrahi, V Lomakin, B A Slutsky, *et al.*. Low threshold gain metal coated laser nanoresonators[J]. Opt Lett, 2008, 33(11): 1261–1263.
- 13 P Xu, Q Huang, Y Shi. Silicon hybrid plasmonic Bragg grating reflectors and high Q-factor micro-cavities [ J ]. Optics Communications, 2013, 289: 81–84.
- 14 P Xu, K Yao, J Zheng, *et al.*. Slotted photonic crystal nanobeam cavity with parabolic modulated width stack for refractive index sensing[J]. Opt Express, 2013, 21(22): 26908–26913.
- 15 X Yang, A Ishikawa, X Yin, *et al.*. Hybrid photonic plasmonic crystal nanocavities[J]. ACS Nano, 2011, 5(4): 2831–2838.
- 16 P B Deotare, M W McCutcheon, I W Frank, *et al.*. High quality factor photonic crystal nanobeam cavities[J]. Appl Phys Lett, 2009, 94(12): 121106.

栏目编辑:韩 峰