

文章编号: 0253-2239(2009)02-0506-05

全硅光子晶体波导中二次谐波产生及影响因素

石建平¹ 董可秀¹ 黄 圆¹ 杨书容² 陈旭南³

¹ 安徽师范大学物理与电子信息学院微纳光电技术实验室, 安徽 芜湖 241000
² 安徽师范大学化学与材料科学学院, 安徽 芜湖 241000
³ 中国科学院光电技术研究所微细加工光学技术国家重点实验室, 四川成都 610209

摘要 硅材料是半导体微细加工工艺中的常用材料,属于 $m3m$ 对称点群,通常无法实现二次谐波产生,导致光子系统芯片中的非线性组件集成困难。提出一种在硅材料中可以实现二次谐波产生光子晶体波导结构。首先给出该波导结构的组成及其基本原理,然后讨论谐波产生的计算模型和计算方法,最后给出针对 $10.6 \mu\text{m}$ 波长而设计的全硅二维光子晶体波导具体结构参数,以有限时域差分算法为基础,计算分析了谐波产生情况。研究结果表明:该结构利用光子晶体带隙边缘效应增强了硅材料的电四极化强度从而实现二次谐波产生,在完全相位匹配条件下,当抽运波强度为 $1.3 \text{ MW}/\text{mm}^2$ 时,转换效率为 0.2% 。最后,对影响谐波转换效率的因素进行了初步分析。

关键词 非线性光学; 二次谐波产生; 有限时域差分法; 光子晶体波导

中图分类号 O437 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS20092902.0506

Second Harmonic Generation and Effect Factors in Silica Photonic Crystal Waveguide

Shi Jianping¹ Dong Kexiu¹ Huang Yuan¹ Yang Shurong² Chen Xunan³

¹ *Laboratory of Micro-Nano Photoelectronic Technology, College of Physics and Electronic Information, Anhui Normal University, Wuhu, Anhui 241000, China*
² *College of Chemistry and Materials Science, Anhui Normal University, Wuhu, Anhui 241000, China*
³ *State Key Laboratory of Optical Technologies for Microfabrication, Institute of Optics and Electronics, Chinese Academy of Science, Chengdu, Sichuan 610209, China*

Abstract Silicon is one of important semiconductor materials in micro-fabrication technology. However it belongs to $m3m$ point group, there is no second harmonic generation (SHG) in it. This is an obstacle for the integration of nonlinear micro-structures in optical system on chip. We present the silicon waveguide structure based on photonic crystals to realize SHG and overcome the technology bottle-neck. The configuration of waveguides and the basic principle are put forward. The computation model and methods based on finite difference time domain (FDTD) are given. Finally we present a design result aimed at the wavelength of $10.6 \mu\text{m}$ and analyze the SHG. The results show the enhancing electric quadrupole polarization leads to the SHG in silicon by virtue of photonic band edge effect. Under the condition of perfect phase matching, the conversion efficiency is 0.2% at the pumping power of $1.3 \text{ MW}/\text{mm}^2$. At the end, effect factors of conversion efficiency are discussed briefly.

Key words nonlinear optics; second harmonic generation; finite difference time domain; photonic crystal waveguide

1 引 言

二次谐波产生(SHG)是一种很重要的非线性

现象,利用它可以实现激光波长转换,从而拓宽激光光谱的覆盖范围。经典非线性理论指出,高效的非

收稿日期: 2008-08-26; 收到修改稿日期: 2008-10-15

基金项目: 国家自然科学基金(10805001)和安徽省教育厅自然科学基金项目(2006kj262B)资助课题。

作者简介: 石建平(1976—),男,博士,教授,主要从事光子晶体和微纳光电子技术等方面的研究。

E-mail: shi_jian_ping@hotmail.com

线性材料必须是非中心对称的,也就是说硅材料通常不能实现二次谐波产生。然而硅材料又是半导体微细加工工艺的常用材料,是光子系统集成芯片(Photonic system on chip, PSOC)^[1]制作的重要基础材料, PSOC 的实现离不开非线性组件,例如谐波产生、信号放大、逻辑光开关等,但非线性组件又不能直接利用硅材料来制作,这就造成了微细加工工艺和系统设计之间的矛盾。如果采用特殊技术手段能够直接利用硅材料实现二次谐波产生,那么就意味着在同一硅片上可以实现非线性组件和光子晶体波导、光子晶体微腔、耦合结构等混合集成。由于所有组件都用硅材料来实现,可以充分利用目前已经十分成熟的硅绝缘(SOI)工艺,规避 PSOC 的工艺瓶颈。

从微观机制上讲,非线性效应来源于电子在材料本身势场和外加电场的共同作用下产生非简谐振动所致,作用机理包括电偶极极化(EDP)、电四极极化(EQP)、磁偶极极化(MDP)、磁四极极化(MQP)等^[2]。通常情况下,EDP 强度最大,因此在分析非线性材料中 SHG 时几乎都采用 EDP 近似。然而,在中心对称材料中 EDP 是禁戒的,此时非线性贡献主要来源于 EQP^[3],由于电四极极化系数 $Q^{(2)}$ 较之典型非线性材料的电偶极极化系数 $\chi^{(2)}$ 至少要小 3~4 个数量级,因此中心对称材料中一般观测不到 SHG。不过, EQP 强度与电场空间变化密切相关,只要通过特殊手段使介质体内的电场梯度急剧增大就可以增大 EQP,激发出二次谐波。实际上早在 20 世纪 60 年代 R. W. Terhune 等^[4]就已经通过外加静电场的方法在方解石中观察到了 SHG。

光子晶体是一种周期性亚波长电介质结构^[5,6],存在明显的光子带隙,对电磁场的调制很剧烈,尤其在带隙边缘处,光子态密度剧增剧减^[7,8],因此在光子晶体中可以获得很大的电场梯度,所以只要设计适当光子晶体结构,就有可能在中心对称材料中激发出强度可以与典型非线性材料相比拟的二次谐波。比如, Martorell 等^[9,10]就分别在聚苯乙烯微粒和 PMME 薄膜(均为中心对称材料)构成的光子晶体中成功观测到 SHG。本文提出一种完全由 Si 材料组成的光子晶体波导结构来实现 SHG。

2 理论模型

图 1 为全硅光子晶体波导结构,由两块光子晶体和数条空气波导构成。两块光子晶体的晶格形

状、元胞尺寸、晶格常数均不相同,波导间有介质柱隔开,均为二维微细结构,可以在同一硅片上光刻而成。Si 材料实现 SHG 的关键在于增强 EQP 效应,而 EQP 强度的增强有两个途径,一个是直接增加作用在介质上的电场强度,另一个是增加电场的空间变化梯度。因此既要利用光子晶体对光场的局域特性增加电场强度,也要利用光子带隙边缘效应增加电场梯度。在设计具体结构时首先要考虑选取合适的光子晶体结构,使得其带隙结构的边缘恰好位于入射波频率边缘,从而最大限度地增大电场梯度。其次,应尽量选择对于抽运波和倍频波吸收系数小的材料,避免抽运波和倍频波损耗严重,降低转换效率。另外,结构本身的不对称也会增大光场的梯度,所以结构中应尽量采用两种不同的光子晶体。

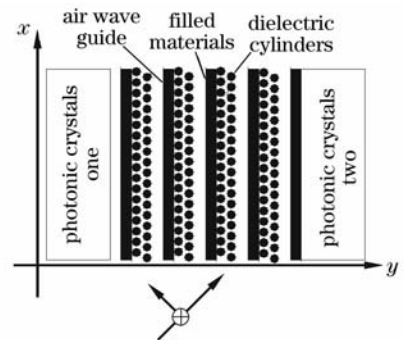


图 1 全硅光子晶体波导结构

Fig. 1 Silica photonic crystal waveguide

以 TE_z 波为例讨论 SHG 的计算模型, TM_z 波的计算与之类似。

当入射波为 TE_z 且波矢位于 xy 平面,并假定介质对于入射波无损耗时,则在结构内传播的电磁波满足如下时域方程:

$$\begin{cases} \frac{\partial E_y}{\partial t} = -\frac{1}{\epsilon(x,y)} \frac{\partial H_z}{\partial x}, \\ \frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon(x,y)} \frac{\partial H_z}{\partial y}, \\ \frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu_r(x,y)\mu_0} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right), \end{cases} \quad (1)$$

对于非磁性介质 $\mu_r(x,y) = 1.0$, $\epsilon(x,y)$ 为对应于空间各点的介电常数,由于 $\epsilon(x,y)$ 很复杂,导致(1)式很难求出解析解,只能借助于数值计算,我们采用有限时域差分(FDTD)算法求解^[9]。在结构内光场已知的情况下,起源于 EQP 的非线性极化强度可描述为

$$P_i^{NL,Q} = \sum Q_{ijkl} E_j \nabla_k E_l. \quad (2)$$

Si 材料属于 $m3m$ 对称点群,(2)式可简化为

$$\begin{cases} P_1^{\text{NL},Q} = Q_{1111} E_1 \partial_1 E_1 + Q_{1212} E_2 \partial_1 E_2, \\ P_2^{\text{NL},Q} = Q_{2222} E_2 \partial_2 E_2 + Q_{2211} E_2 \partial_1 E_1 + Q_{2112} E_1 \partial_1 E_2, \\ P_3^{\text{NL},Q} = 0, \end{cases} \quad (3)$$

(3)式就是 Si 材料微结构中二次谐波的起源项,抽运光场在两块光子晶体间的波导区域中传播时,通过电四极极化系数不断与 Si 材料相互作用,产生二阶非线性极化矢量,激发出二次谐波。当抽运波在介质中的损耗可以忽略时,激发出的二次谐波满足

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}^{2\omega}(x, y, z, t) + \mu_0 \epsilon(x, y, z) \frac{\partial^2 \mathbf{E}^{2\omega}(x, y, z, t)}{\partial t^2} = -\mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{P}^{\text{NL},Q}(x, y, z, t)}{\partial t^2}, \quad (4)$$

式中, $\mathbf{P}(x, y, t) = (P_1, P_2, P_3)$ 由(3)式决定。由于介电常数是空间位置的函数,(4)式也只能采用 FDTD 方法来求数值解。

在波导方向的某一固定点 x 处获得的倍频波坡印廷矢量平均值,即光束强度为

$$S_{\text{aver}}^{\text{PL},Q}(2\omega, x) = \frac{\sqrt{\epsilon(2\omega)}}{2L} \int (E_x^2 + E_y^2) dy, \quad (5)$$

式中 L 为出口处宽度。SH 的转换效率为

$$\eta = S_{\text{out}}^{\text{PL},Q} / S_{\text{in}}, \quad (6)$$

式中 $S_{\text{out}}^{\text{PL},Q} = \frac{1}{(n_2 - n_1)} \sum_{j=n_1}^{n_2} S_{\text{aver},j}^{\text{PL},Q}$ 是处于平衡状态的强度曲线对时间的平均值, n_1 和 n_2 为时间采样点数。

3 计算结果及分析

针对不同的抽运源,需要确定具体的光子晶体结构参数。当抽运源为 CO_2 激光器时,我们设计的具体参数为:材料选用单晶硅(介电常数 $\epsilon = 11.9$);两块光子晶体一为空气孔结构 $r/a = 0.4$,一为介质柱结构均为三角形晶格 $r/a = 0.2$,晶格结构均为三角形;波导长度 $50 \mu\text{m}$,波导宽度 $1.6a$,光子晶体周期 $a = 3.2 \mu\text{m}$ 。当入射波为 TE 偏振时,空气孔光子晶体带隙位于 $2.5a \sim 4a$,介质柱光子晶体带隙位于 $2.0a \sim 3.3a$ 。 CO_2 激光器的中心频率恰好位于空气孔光子晶体的禁带内和介质柱光子晶体的带隙边缘,这样既可以使得电磁波能量被大部分局限于两块光子晶体之间,又可以最大限度地增大电磁场的空间梯度,从而增大非线性极化强度。

采用标准 FDTD 算法求解抽运波和倍频波在结构中的传播行为。空间采样步长为 $\Delta x = \Delta y = 0.11 \mu\text{m}$,时间采样步长 $\Delta t = 0.2 \text{ fs}$ 。在满足相位匹配的前提下,计算了当有效电四极极化系数 10^{-16} esu 量级时(比 R. W. Terhune 估计的方解石的电四极极化系数小 1 个数量级^[4])倍频波的强度。图 2 是倍频波强度沿波导方向的变化曲线,变化趋势与二

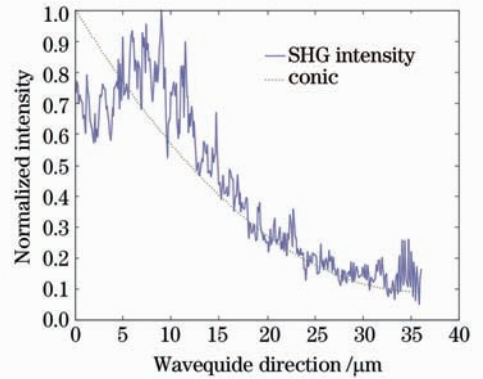


图 2 二次谐波强度沿波导方向的变化

Fig. 2 Intensity of SHG along the waveguides

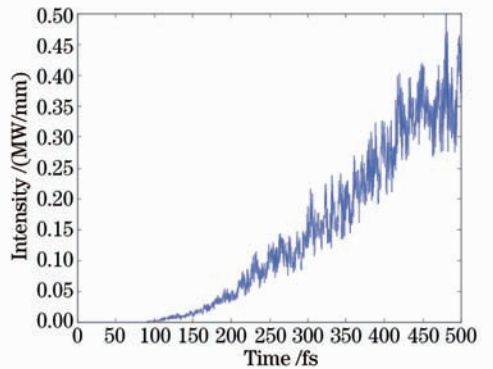


图 3 出口处二次谐波随时间的变化

Fig. 3 Variation of SHG intensity at the exit of waveguides with time

次曲线极为吻合,如图中虚线所示,这与典型非线性体材料中的倍频波产生过程是一致的。图 3 中考察的是在波导出口处倍频波强度随时间的变化情况。入射波为均匀平面波,电场强度为 100 kV/mm 。从图 3 中可以看出,倍频波强度随时间逐步增强,从 420 fs 处开始趋于平缓,表明基波和倍频波在经过一段时间的非线性能量耦合过程后,能量转换达到平衡,激发出的倍频波强度逐渐稳定。把处于平衡状态的强度曲线对时间的平均值作为输出的倍频波强度,利用(6)式计算的能量转换效率为 0.3% 。与

典型非线性材料在完全相位匹配下的转换效率相比,这一效率还稍低。

4 SH 强度影响因素分析

4.1 光子晶体带隙 PBG

经模拟在组成结构的单边有光子携带效应 (PBG) 存在时,虽然 PBG 对光场有一定的束缚力,但束缚能力很弱,能量从波导区域侧面泄漏严重,不能产生 SH 输出;在两边都不存在 PBG 时,因光场没有被局域,不能束缚光的传播,结构中更不会产生 SH 输出;在结构两边都存在 PBG,并且入射抽运波频率又位于两光子晶体 PBG 内时,PBG 已把光场束缚在波导区域传播,局域有利于增强介质与光的作用,由图 4 可知,这种增强还不是很强,但可说明 PBG 结构对 SH 输出至关重要,它的存在对 SH 的产生起着决定性作用。当模拟光子晶体的带隙边缘又位于抽运波频率处时,由于带隙边缘电磁模密度 (EDOM)^[12~14] 显著增强,群速度迅速减弱,光子态密度剧增剧减,其带隙边缘效应对光场已有较大调制作用,使电场梯度大大增强,SH 输出强度也显著增大,如图 4 所示。可见,利用带隙边缘效应很有必要,而且还希望带隙边缘陡峭特性愈大愈好,因为陡峭特性越大越有利电场梯度增大。

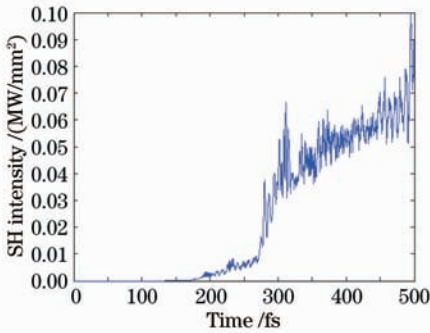


图 4 抽运频率位于带隙内时的 SH 强度

Fig. 4 SH intensity when pump frequency locates in PBG

4.2 抽运波入射角

抽运波入射角度的影响主要表现在能否增强光子晶体结构对电磁场的调制,提高空间电场梯度。对不同入射角时输出的 SH 强度进行了模拟,得到如图 5 所示。由图 5 可知,当入射角为 0° ,即平行 y 方向入射时,由于电场能量大部分沿波导方向直线传输,通过波导间的耦合介质柱在波导间相互耦合传递的能量很少,没有很好利用耦合介质柱对光场

的调制作用,使得电场梯度增加不够,因此输出的 SH 强度相对也不大。但是,入射角太大时同样也不能获得很高的 SH 输出,因为随着入射角的增大,耦合进入波导中的能量将会减少,即使由于耦合介质柱的调制可以获得较好的空间梯度形态,梯度的幅值却要减小很多,输出 SH 强度依然较低,尤其是当接近垂直入射时更是如此,几乎没有 SH 输出。所以,要想获得较高的 SH 输出,应选择合理角度入射,最佳入射角在 $20^\circ \sim 30^\circ$ 之间。

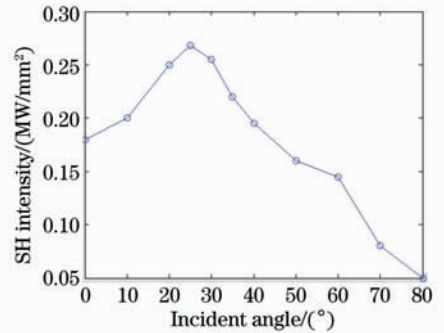


图 5 SH 强度随入射角度变化曲线

Fig. 5 Variation of SH intensity with incident angle

4.3 结构中的耦合介质柱

在构成图 1 结构波导间增加两排耦合介质柱。由于只增加两排,不具有光子晶体的带隙特性禁止光传播,但它能对分布其间的电磁场起强烈的调制作用,使电场发生畸变,能量在波导间相互耦合传递,又增加了电场与材料的作用几率。同样,对加有和没有加介质柱时 SH 输出强度沿波导长度变化进行了模拟,图 6 是模拟结果。可以看到,当没有加介质柱时,虽然受 PBG 的影响电场变化也较为剧烈,但由于光场的扰动相对比较规整,空间梯度还不够大,因此输出的 SH 强度也不够大;有介质柱时的 SH 输出曲线,由于光场的扰动变大,电场变化较剧烈,空间梯度增大,输出的 SH 强度也就大得多。因此,耦合介质柱的存在是有必要的,但有两排已足够,进一步增多排数对结果影响并不大,况且受到波导宽度的限制。

此外,SHG 还与波导长度有一定关系,本文设计的波导结构在相干长度以内,SH 强度与波导长度平方成正比,长度太长将引起相位失配,导致 SHG 效率降低;同时,与材料吸收系数也有关,为避免被吸收损耗而降低转换效率,应选用对抽运波和倍频波的吸收都很小的材料。以上因素在设计时应该综合考虑。

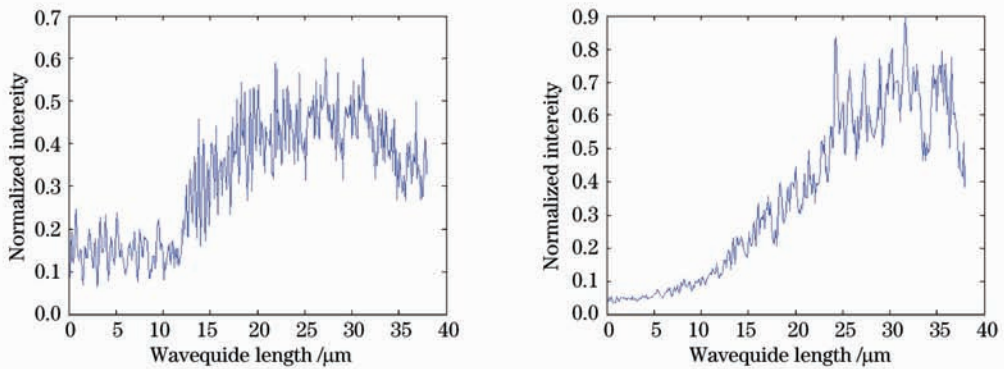


图 6 耦合介质柱对 SH 强度影响。(a)无耦合介质柱；(b)一排耦合介质柱

Fig. 6 Effect of coupled dielectric cylinders on SH intensity. (a) without coupled dielectric cylinders; (b) with one row of coupled dielectric cylinders

4 结 论

本文提出一种实现 SHG 的新方法,通过设计制作特定的微细结构利用中心对称材料就能输出有效的二次谐波,非常有利于目前半导体生产工艺的生产集成,有助于光子系统芯片的实现,同时也为非线性材料开发提供了新的思路。

参 考 文 献

- Jennifer Ouellette. Seeing the future in photonic crystals[J]. *Industrial Physicist*, 2001, **10**: 14~18
- Y. R. Shen. *The Principles of Nonlinear Optics* [M]. New York: John Wiley & Sons, 1984. 5~15
- P. S. Persan. Nonlinear optical properties of solid: energy consideration[J]. *Phys. Rev.*, 1963, **130**: 919~923
- R. W. Terhune, P. Maker, C. M. Savage. Optical harmonic generation in calcite[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1962, **8**(21): 404~406
- Fang Hong, Lou Shuqin, Guo Tieying *et al.*. Novel-high birefringence photonic crystal fiber [J]. *Acta Optica Sinica*, 2007, **27**(2): 202~206
方 宏, 娄淑琴, 郭铁英 等. 一种新结构高双折射光子晶体光纤 [J]. *光学学报*, 2007, **27**(2): 202~206
- Cheng Tonglei, Li Suguang, Zhou Guiyao *et al.*. Relation between power fraction in the core of hollow-core photonic crystal fibers and their bandgap property[J]. *Chinese J. Lasers*, 2007, **34**(2): 249~254
程同蕾, 李曙光, 周桂耀 等. 空芯光子晶体光纤纤芯中的功率分数及其带隙特性[J]. *中国激光*, 2007, **34**(2): 249~254
- I. S. Fogel, J. M. Bendickson, M. D. Tocci *et al.*. Spontaneous emission and nonlinear effects in photonic bandgap materials[J]. *Pure Appl. Opt.*, 1998, **7**: 393~407
- M. D. Tocci, M. Scalora, M. J. Bloemer *et al.*. Measurement of spontaneous-emission enhancement near the one-dimensional photonic band edge of semiconductor heterostructures[J]. *Phys. Rev. A*, 1996, **53**: 2799~2803
- G. J. Ashwell, G. Jefferles, D. G. Hamilton *et al.*. Centrosymmetric molecules for second harmonic generation[J]. *Nature*, 1995, **375**: 385~388
- Teruya Ishihara, Kazuki Koshino. Second harmonic generation due to quadrupole interaction in a photonic crystal slab: angle dependence and symmetry of the unit cell [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2003, **91**: 253901
- A. Taflove, M. E. Brodwin. Numerical solution of steady-state electromagnetic scattering problems using the time-dependent Maxwell's equations[J]. *IEEE Trans. On Microwave Theory Technol.*, 1975, **23**: 623~630
- Fang Yuntuan, Shen Tinggen, Tan Xilin. Study on one-dimensional photonic crystal with impurity defects [J]. *Acta Optica Sinica*, 2004, **24**(11): 1557~1560
方云团, 沈廷根, 谭锡林. 一维光子晶体掺杂缺陷模研究 [J]. *光学学报*, 2004, **24**(11): 1557~1560
- Che Ming, Zhou Yunsong, Wang Fuhe *et al.*. Density of states and local density of states of two-dimensional photonic crystals with cylinder scatter in square lattice [J]. *Acta Optica Sinica*, 2006, **26**(12): 1849~1851
车 明, 周云松, 王福合 等. 圆柱形散射子二维光子晶体的态密度与局域态密度 [J]. *光学学报*, 2006, **26**(12): 1849~1851
- Su Yucheng, Feng Shuai, Yang Yuping *et al.*. The distribution of density of photonic states in quasiperiodic photonic crystals [J]. *J. Central University for Nationalities (Natural Sciences Edition)*, 2007, (1): 35~38
苏玉成, 冯 帅, 杨玉平等. 准周期光子晶体的态密度 [J]. *中央民族大学学报(自然科学版)*, 2007, (1): 35~38