

The Nonlinear Optical Effects and Applications
Based on Silicon-On-Insulator Waveguides

基于SOI波导的
非线性
光学效应及应用

■ 文进 著



国防工业出版社
National Defense Industry Press

基于 SOI 波导的非线性 光学效应及应用

文 进 著

國防工業出版社

· 北京 ·

内 容 简 介

基于 SOI 波导的非线性光学研究是当前硅光子学领域的研究热点，在片上集成的光互连、光传感和光通信等方面发挥着重要的作用。本书在介绍国内外硅基非线性光学研究进展的基础上，给出了 SOI 波导器件仿真模拟的数值方法；完善了超快脉冲在 SOI 波导中的非线性传输的理论模型；研究了 SOI 波导中超连续谱的产生和色散波辐射现象；讨论了 SOI 波导中光参量过程；实现了中红外飞秒脉冲光参量放大器和宽调谐飞秒脉冲光参量振荡器；提出了基于后向四波混频效应的无腔镜皮秒光参量振荡器的理论模型；分析了 SOI 波导的双折射效应对脉冲传输的影响；描述了 SOI 波导在引入光学反馈机制和马赫-泽德干涉仪后的级联四波混频产生情况；从理论和实验上研究了掺铒锁模飞秒光纤激光器和光子晶体光纤参量振荡器。本书的最后部分是总结与展望。

本书可供从事硅基光子学和非线性光学专业科研的工程技术人员阅读参考，也可作为超快光子学、微纳光子器件等相关专业的研究生教材使用。

图书在版编目(CIP)数据

基于 SOI 波导的非线性光学效应及应用 / 文进著。
—北京 : 国防工业出版社 , 2015. 10
ISBN 978 - 7 - 118 - 10417 - 2
I. ①基… II. ①文… III. ①非线性光学—光学
效应—研究 IV. ①O437

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 234086 号

※

国防工业出版社出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路 23 号 邮政编码 100048)

三河市众誉天成印务有限公司印刷

新华书店经售

*

开本 710 × 1000 1/16 印张 11 1/4 字数 219 千字

2015 年 10 月第 1 版第 1 次印刷 印数 1—2000 册 定价 69.00 元

(本书如有印装错误, 我社负责调换)

国防书店: (010) 88540777
发行传真: (010) 88540755

发行邮购: (010) 88540776
发行业务: (010) 88540717

前　　言

在信息时代，随着超大规模集成电路的不断发展，现有广泛使用的电子芯片的集成程度已经达到极限。为了突破这个技术瓶颈，人们希望通过新型的光子芯片来取代传统的电子芯片，实现更可靠、更稳定、更高速地控制和传递信息的目的。在这个前提下，科研人员在利用光子作为载体控制和传递信息领域进行了大量有益的探索和实践，取得了丰硕的成果，促进了信息技术的日新月异的发展。而在这些研究中，硅光子学的研究又处于最核心的地位。尤其是近年来，基于 CMOS 工艺的硅基波导作为介质的硅光子学研究结果层出不穷。其中芯层和绝缘层具有较大折射率差的绝缘层上硅（Silicon – On – Insulator, SOI）光学波导作为光电集成的一种十分有效的介质和平台，引起了人们广泛的研究兴趣，有关硅光子学的研究结果如雨后春笋般涌现。基于硅光子学的各种新技术、新产品和新创意深刻地影响着人们的工作、学习和生活方式，推动者人类社会的进步和发展。

与先前使用的光学波导相比，SOI 波导具有自身特有的材料和结构特性。SOI 波导的核心材料为硅，属于一种使用最为广泛的典型半导体材料，具有半导体材料的特有性质；SOI 波导的芯层和绝缘层具有较大的折射率差，整个 SOI 波导对光的约束限制作用很强。除此之外，SOI 波导具有比高非线性光纤波导高数个量级的非线性系数，从而具有更强的非线性光学效应，包括克尔效应和受激拉曼散射效应。此外，受自身材料的影响，SOI 波导还具有双光子吸收、自由载流子吸收和自由载流子色散等光纤波导不具备或者不显著的非线性光学效应。因此，利用 SOI 波导作为非线性介质，可以全面地分析其中的非线性光学效应，并在此基础上实现各种光学函数功能，促进硅光子学的发展和应用。

本书首先总结了当前硅基光子学理论和实验研究的趋势和进展情况，在此基础上系统地阐述了 SOI 波导中的各种非线性光学效应，以及利用非线性光学效应在光学功能器件方面的应用，目的在于深刻理解 SOI 波导中的各种非线性光学效应的物理机制机理、可能存在的实际应用价值以及各种硅基波导结构在应用过程中将可能面临的各种内在的困难，并利用这些非线性效应光学功能探索和光子器件设计提供各种应用模型。

全书的主要内容包含以下几个部分：第 1 章是绪论部分，主要介绍了硅光子学的起源和发展、硅材料的性质、SOI 材料的制备、SOI 波导的应用前景主要研究方向，以及 SOI 波导中各种非线性光学效应的原理、特点、研究背景及其进展。第 2

章介绍了 SOI 波导器件仿真计算过程中用到的几种数值方法, 主要提到了频域有限差分法(FDFD)、时域有限差分法(FDTD)、有限元法(FEM)和光束传输法(BPM), 并比较了它们的优缺点和适用范围。第 3 章介绍了 SOI 波导的模式和色散特性的研究方法。第 4 章介绍了 SOI 波导中光脉冲的传输原理和特性, 利用较为完备的理论模型描述了 SOI 波导中各种非线性光学效应产生的内在物理机制和过程。第 5 章介绍了 SOI 波导中超连续谱的产生, 着重对输入脉冲的初始啁啾参数在超连续谱产生过程中所起的重要作用进行了系统分析。第 6 章介绍了 SOI 波导中飞秒脉冲传输特性以及传输过程中产生的色散波辐射和孤子捕获现象, 利用 X-FROG 技术从时域和光谱两个方面同时对产生的色散波和孤子捕获现象进行了分析。第 7 章介绍了 SOI 波导中飞秒光参量放大技术; 第 8 章介绍了 SOI 波导中飞秒光参量振荡技术; 第 9 章介绍了 SOI 波导中基于背向四波混频效应的光参量振荡技术, 第 7 章至第 9 章都是描述 SOI 波导中基于超快四波混频效应的参量过程, 具体包括参量放大、参量振荡和背向光参量振荡等多个方面的研究内容, 所用到的泵浦光脉冲的宽度涵盖了从皮秒到飞秒的范围, 其研究思路是利用 SOI 波导的高阶色散效应和非线性效应的共同作用实现超宽带相位匹配, 从而实现了参量信号光在较宽光谱范围内的可调谐输出。第 10 章研究了 SOI 波导中双折射效应对脉冲传输的影响, 并通过计算得到当群速度色散能够被偏振模色散完全补偿时的脉冲传输特性。第 11 章介绍了 SOI 波导中的级联四波混频效应, 着重考虑了波导长度、波导色散斜率和输入泵浦功率对级联四波混频产生的影响。第 12 章介绍了基于光学反馈腔结构的级联四波混频效应产生, 利用马赫-泽德干涉仪的两个光学臂的光程差的调节实现对产生的级联四波混频的调制。第 13 章主要研究了用于 SOI 波导各种非线性光学效应的光源, 包括掺铒锁模光纤激光器及放大器, 以及波长可调的基于光子晶体光纤的飞秒光参量振荡器, 这部分研究内容可以为实现 SOI 波导中的各种非线性效应提供各种泵浦源。第 14 章是对全书的总结以及未来工作的展望, 总结了 SOI 波导中各种非线性光学效应及其应用的各个方面, 并对未来 SOI 波导非线性光学效应的研究方向和趋势尤其是基于 SOI 波导的非线性光子器件的工程化应用做了讨论。

本书获西安石油大学优秀学术著作出版基金资助。本书中的相关研究工作得到国家自然科学基金项目支持(项目批准号: 61505160)。由于作者水平有限, 加上时间仓促, 书中难免会出现不足和错误之处, 祈请专家学者和读者不吝赐教与批评指正。

文进
2015 年 10 月

目 录

第1章 绪论	1
1.1 光子学的产生和发展	1
1.2 硅光子学的发展	3
1.3 硅的材料性质	5
1.3.1 硅的晶体性质	5
1.3.2 硅的能带结构	5
1.3.3 硅的电学性质	6
1.3.4 硅的光学性质	7
1.4 SOI 材料的特性及应用	8
1.4.1 SOI 的制备方法	9
1.4.2 SOI 的主要制备方法的比较	10
1.4.3 SOI 材料的晶体质量	10
1.5 SOI 材料的应用与发展趋势	11
1.6 SOI 波导的结构和性质	12
1.7 SOI 波导中的非线性光学效应及过程	14
1.7.1 克尔效应	15
1.7.2 自相位调制效应	17
1.7.3 交叉调制效应	17
1.7.4 受激拉曼散射效应	18
1.7.5 四波混频效应	20
1.7.6 双光子吸收效应	21
1.7.7 自由载流子吸收效应	22
1.7.8 自由载流子色散效应	22
1.8 SOI 波导中的非线性光学效应及应用研究进展	23
1.9 本书主要研究内容和结构安排	33
参考文献	35

第2章 SOI 波导与器件仿真数值算法	43
2.1 引言	43
2.2 FDFD 方法	45
2.3 FDTD 方法	46
2.4 FEM 方法	48
2.5 BPM 方法	49
2.6 小结	49
参考文献	50
第3章 SOI 波导的模式和色散计算及调控	51
3.1 引言	51
3.2 SOI 波导的材料色散	51
3.3 SOI 波导的模式和色散的仿真计算	53
3.3.1 FDFD 法仿真计算结果	54
3.3.2 FEM 法仿真计算结果	56
3.3.3 BPM 法仿真计算结果	61
3.4 SOI 波导的色散调控	63
3.5 小结	64
参考文献	65
第4章 SOI 波导非线性光学效应的理论框架	66
4.1 引言	66
4.2 理论模型的基本形式	66
4.3 小结	68
参考文献	69
第5章 SOI 波导中超连续谱产生研究	70
5.1 引言	70
5.2 理论模型	70
5.3 数值计算方法	71
5.3.1 分步傅里叶方法	71
5.3.2 四阶龙格 - 库塔方法	72
5.4 SOI 波导结构设计及色散特点	73
5.5 数值模拟结果	74

5.6 小结	80
参考文献	81
第6章 SOI波导中色散波辐射及其描述	82
6.1 引言	82
6.2 SOI波导中色散波辐射及孤子捕获的数值模型	82
6.3 数值结果及讨论	83
6.4 小结	88
参考文献	89
第7章 SOI波导中光参量放大研究	90
7.1 引言	90
7.2 SOI波导中光参量放大的物理过程	91
7.2.1 硅材料中的三阶非线性极化	91
7.2.2 SOI波导中的非线性耦合方程组	92
7.2.3 SOI波导中参量放大过程中的相位匹配	93
7.3 SOI波导色散调控和分析	93
7.4 数值模拟结果	96
7.5 小结	99
参考文献	99
第8章 SOI波导中光参量振荡研究	101
8.1 引言	101
8.2 SOI波导中光参量振荡的物理过程分析	102
8.2.1 SOI波导中参量放大过程中的相位匹配	103
8.2.2 宽调谐飞秒SOI波导光参量振荡器的方案设计	105
8.3 宽调谐SOI波导飞秒光参量振荡器数值计算结果	105
8.4 小结	110
参考文献	110
第9章 SOI波导中无腔镜光参量振荡研究	112
9.1 引言	112
9.2 SOI波导中皮秒非简并FWM无镜光参量振荡器的理论模型	113
9.3 数值模拟结果及讨论	116
9.4 小结	120

参考文献	121
第 10 章 SOI 波导中脉冲传输及脉冲捕获的数值研究	123
10.1 引言	123
10.2 波导设计和色散调节	124
10.3 理论模型	126
10.4 数值模拟结果和讨论	127
10.5 小结	132
参考文献	133
第 11 章 SOI 波导中级联四波混频产生研究	135
11.1 引言	135
11.2 SOI 波导中级联四波混频的物理机制和理论模型	136
11.3 SOI 波导中级联四波混频的数值模拟结果	138
11.3.1 SOI 波导的结构特点	138
11.3.2 SOI 波导中级联四波混频的模拟方法和数值结果	139
11.4 小结	144
参考文献	144
第 12 章 硫系化合物波导中基于光学反馈和马赫 – 泽德干涉仪的 级联四波混频研究	146
12.1 引言	146
12.2 理论模型和方案设计	147
12.2.1 理论模型	147
12.2.2 方案设计	148
12.3 数值模拟结果和讨论	149
12.4 小结	154
参考文献	154
第 13 章 掺铒锁模飞秒光纤激光器和宽调谐飞秒光子晶体光纤参量 振荡器研究	156
13.1 引言	156
13.2 掺铒锁模飞秒光纤激光器	156
13.2.1 锁模的物理机制	157
13.2.2 被动锁模	158

13.2.3	自行研制的掺铒锁模飞秒光纤激光器	159
13.3	宽调谐飞秒光子晶体光纤参量振荡器	162
13.3.1	宽调谐飞秒光子晶体光纤参量振荡器理论研究	163
13.3.2	宽调谐飞秒光子晶体光纤参量振荡器实验研究	167
13.4	小结	172
	参考文献	173
第 14 章	总结与展望	175
14.1	本书的主要研究内容	175
14.2	未来的工作展望	177

第1章 绪论

1.1 光子学的产生和发展

光学是物理学中的一门主要学科,也是一门古老的学科,它的发展和物理学的发展密切相关、同步进行。在漫长的岁月中,光学经过长期的发展得以形成完整的科学理论,也经历了坎坷的过程。这期间还发生了光到底是粒子还是波的争论,随着科学的发展和实验手段的进步,科学家们最后证明了光具有波粒二象性。到了现代,以激光器的发明为标志,古老的光学也重新焕发了青春。从广义上讲,光学的发展和整个科学技术的发展是分不开的,就现代来说,回顾20世纪所取得的辉煌的科学成就,就时间点上,大体可以分为两个时期:前五十年和后五十年,两个不同的时期有各自不同的代表性成果。前五十年主要是基础理论研究和探索的突破,以爱因斯坦建立相对论理论和量子力学的创立为标志,为人类开辟了新纪元;后五十年主要是工程技术研究和创新的进步,以激光器和大规模集成电路为代表的技术成果彻底改变了人们的生产和生活方式,高速促进了人类文明的发展。

科学先贤们所创立的电磁理论、量子力学和相对论加深了人们对外部物质世界的理解和认识,提升了人们改造和利用物质世界的能力和水平,从而极大地促进了生产力的发展。随之引发的激光器、集成电路和光通信等技术变革为21世纪的高速持续发展奠定了雄厚的基础。在20世纪的科学技术发展过程中,电子是作为信息和能量的载体出现的,因此20世纪通常被称为“电子时代”。

进入新千年,科学技术的发展呈现出更加灿烂、更加快速的局面,随着社会物质文明和精神文明的进步,人们对“信息”提出了更高的要求,小到人们之间的交流,大到外层空间的开发利用,都离不开“信息”这个工具。毫不夸张地说,“信息无处不在且与人人相关”。正因为“信息”在我们所处的这个时代如此重要,故21世纪被人们形象地称为“信息化时代”或者“信息时代”。随着时代的发展,当今“信息”一词的内涵和功能已经大大超越了普通层面上的通信、联络和娱乐等领域,现在的“信息”的内涵更加深刻、运用更加广泛、影响更为深远,例如现代信息能够对生产进行“自动化”和“智能化”控制和处理。

随着时代的发展和社会的进步,可以想象的场景就是未来的社会信息量将会呈现爆炸式增长,计量时间的概念将迈入皮秒(ps)甚至飞秒(fs)量级,同时,相应的信息传输容量也会急速增大,甚至可能突破太比特每秒(Tb/s)。高速发展的信

息容量对传输和处理信息的载体提出了新的更高的要求,当电子作为信息的载体时,由于受到经典物理效应的限制,电子技术难以突破纳秒的门槛,其速度始终受到限制,这被称为“电子瓶颈”效应。为了突破这种瓶颈效应,人们需要寻找一种新的信息载体,经过比较和筛选,光子成为首选的信息载体对象。当然光子能够脱颖而出成为信息载体的首选并不是偶然的,光子自身具有的特点使得它能够成为新的信息载体:首先,光子不具有电荷属性,因此不存在瓶颈效应的制约问题;其次,到目前为止,光的传播速度是最快的,例如,光在硅等半导体介质中的速度大约为 $8 \times 10^7 \text{ m/s}$,可以解决大信息量高速传输的问题;再次,光波具有抗电磁干扰和定向传播的特性,因此利用光子携带信息具有很高的安全性。光子的这些特点使得它具有成为替代电子成为信息传递和控制的载体的条件,理所当然成为人们的首选。到目前为止,人们主要利用的两种信息载体分别是电子和光子。电子和光子作为两种信息载体,同时具有波动性和粒子性。表 1.1 反映和比较了电子和光子的双重特性。

表 1.1 电子和光子的双重特性比较

特 性	电 子	光 子
带电特性	负电	电中性
质量特性	静止(m_0)运动(m_e)	静止(0)运动($\hbar\nu/c^2$)
波长特性	$>0.3\text{ mm}$	$0.3\text{ mm} \sim 10^5\text{ nm}$
频率特性	$<10^{12}\text{ Hz}$	$10^{12} \sim 10^{18}\text{ Hz}$
粒子特性	费米子	波色子
时间特性	有时间不可逆性	有一定的类时间可逆性
空间特性	具有空间局域性	不具有空间局域性
能量特性	连续	量子化
传播特性	不能在自由空间传播	能在自由空间传播
理论模型	麦克斯韦方程	薛定谔方程

早在 20 世纪 20 年代,法国的科学家德布罗意经过大量的科学研究已经证明,光同时具有波动性和粒子性,称为波粒二象性。光在各类传输介质中表现出十分明显的波动性,在分析和描述光的反射、折射、干涉和衍射等过程中,利用光的波动方程可以给出十分合理的解释。但是,在光和物质的相互作用过程中,例如吸收、散射、激发和辐射等过程就充分地表现出光的量子特性。人们对光的波动特性研究起步较早,认识也比较深刻,相关理论也比较完善。但是人们对光的粒子特性认识还不够完善,有待于进一步的研究。随着超快技术的发展,光的量子传输特性表现得越来越明显,光的量子描述增加,在这种形势下,光子学便应运而生。从物理学的角度来看,光子学是研究光子的产生和运动特性,光子同物质相互作用及应用的一门前沿学科;从工程技术角度来看,光子学是研究作为信息和能量所赋予的特

性及应用的一门工程技术。可以这样对光子学做一个定义：光子学(photonics)是研究作为信息和能量载体的光子的行为及其应用的学科。光子学及其发展的相关技术即光子技术具有丰富的内涵和广阔的应用前景。20世纪70年代，随着高速摄影技术的发展，半导体激光器、光通信器件、光电探测器和新材料的研制、应用和提高，光子学应运而生。1970年8月，在美国戴维营举行的第9届国际高速摄影会议上荷兰科学家L.波德瓦特首次提出光子学的定义规范，认为光子学是研究以光子为信息载体的科学。随后，他又说明以光子作为能量载体的也应属于光子学的研究内容。

光子学是一个大的学科门类，其研究的内容包罗万象，光子学的研究内容包括光的产生、发射、传输、调变、信号处理、切换、放大及传感。一般而言，光子学可以分为基础光子学、光子器件、信息光子学、生物医学光子学和集成与微结构光子学。为了方便理解，光子学又可以细分为信息光子学和固体光子学等小的门类。将光子作为信息载体，研究其信息功能和应用的新型科学就是信息光子学。信息光子学是材料学、计算科学和通信科学等相互交叉形成的一个新学科。固体光子学是指专门以固体材料为介质，研究光子载体在固体介质中的产生、运动、控制和操作，研究光子和固体介质相互作用及其应用。最为典型的固体光子学是半导体光子学，硅光子学是更为具体的固体光子学，它是指专门研究硅及硅基异质结材料中光子的产生、运动、控制等行为和规律，硅光子学本身就是一个涵盖了广泛研究内容的学科，蕴含了丰富的研究意义。所以硅光子学这个学科门类是光子学这个大宝库中的一个小分支，但是其研究内容和意义已经十分丰富和深刻，足见光子学内容的博大精深。

1.2 硅光子学的发展

硅是一种典型的半导体材料，和碳元素一样，在化学元素周期表上位于第四主族，是半导体家族的重要组成成员。硅材料的特点使得它在日常生产生活中扮演着重要的角色，与其他材料相比，硅材料具有其独特的优点，具体如下：

首先，硅材料的价格十分低廉，来源广阔，储量和产量都很大。科学研究表明，硅是地球上含量最大的元素之一，占地球的27.6%，而且绝大多数的硅元素以单质和化合物的形态广泛地分布在地球的各个区域，有利于对其进行开发利用，并且开发成本很低。

其次，硅材料的加工纯度很高。硅材料提纯技术的不断发展和进步使得它成为目前世界上利用人工方法可以得到的最纯的物质，其纯度可以达到10个“9”量级。

再次，基于硅材料的各种晶体结构易生长形成，硅的单晶生长技术的发展和

进步使人们可以获得各种不同掺杂浓度的高质量单晶硅。在特殊的应用场合,可以将硅生长成多晶结构,这种灵活的硅晶体生长方式使得硅材料的用途更加广泛。

硅是半导体工业的一种最基本的材料,作为集成光学和光电子学的一种重要的理想介质,硅材料近年来得到了业界的极大关注和广泛研究^[1-3]。硅材料的进步大大促进了半导体集成电路的发展。半个世纪以来,电子器件在器件尺寸、功耗、集成度和时间延迟等特性上都产生了量级的变化,在计算机的计算速度上得到了体现。但是以硅材料为基础的电子学的发展还是遇到了不可避免的瓶颈,这是因为电子学的发展本身就受到“摩尔定律”的制约,因此,人们转向了对基于硅材料在集成光路和集成光子学方面的研究,并且获得了巨大的进步和成功。硅作为现代微电子工业的基础和材料,得到了广泛的研究和应用,已经成为最著名的半导体材料。将硅材料用作光子学和光电集成器件,最早是由 Soref 在 20 世纪 80 年代提出来的。经过多年的探索研究,再加上制造技术的进步,硅光子平台及硅光子学的发展取得了很多巨大的突破。

首先,硅光子学的突破在于硅基波导的传输损耗得到了有效的减小^[4-9],传输损耗的减小对于波导器件的实用化起着十分重要的作用。其次,硅光子学能取得突破的一个非常重要的方面在于从光纤到硅基波导的高效耦合方法得到了发展,产生了很多的新型耦合器件^[10-15],如微纳锥形光耦合器、垂直光栅光耦合器等,这些耦合器件的出现使得光功率能得到有效利用^[16]。再次,许多高性能的无源光子器件也陆续得到证实和应用,如光存储器^[17]、光延时线^[18-20]、光分插复用滤波器^[21-23]、光波分复用/解复用器件等^[24-28],这些器件也促进了硅光子学的发展。除此之外,还有许多光有源器件也得到了证实和发展,如拉曼激光器^[29-32]、高速电光调制器^[33-36]、光开关^[37]、信号再生器^[38]、波长转换器^[39-43]、参量放大器^[44-46]和高速硅/锗集成光电探测器^[47,48]。最后,硅光子学能够取得突破和相关研究机构的推动是分不开的,有些研究单位集中在对于单个硅光子器件进行研究,但是一些研究机构已经将目光定位于硅基集成系统的研究,从器件到系统的研究升级,必然会促进硅光子学的进一步发展和繁荣。

硅材料不仅仅可以应用在线性光学方面,还可以应用在多种非线性光学效应方面。以硅材料为基础制作成的波导结构就具有很好的非线性光学特性,近年来硅基波导的非线性光学研究也取得了很多令人欣喜的成果。与传统的二氧化 SOI 波导相比,硅基波导除了前面已经提到的宽光谱透明性、强光束限制性、高非线性折射率特性、大拉曼增益特性和与 CMOS 工艺兼容性以外,还具有它独特的非线性光学效应,如双光子吸收、自由载流子吸收、自由载流子色散以及自由载流子效应导致的折射率变化。另外,硅的偏振特性也和二氧化硅不一样,这是由它的晶体结构决定的。硅基波导的这些特点,使得它在非线性光学方面具有十分重要的应用

前景和研究价值,相关的研究已逐渐深入^[49,50]。

1.3 硅的材料性质

硅材料是当前微电子工业的基础材料,在今后一段时间内将继续引领这一领域的发展。硅的材料性质是其能广泛应用于微电子工业的基础和决定性因素,因此对硅的材料性质进行研究和讨论是很有必要的。人们很早就开始对硅的材料性质进行分析研究,利用材料科学领域种类繁多的处理问题的办法,硅材料的物理特性能得到极大的改善。本节将描述硅基材料的基本物理性质,包括晶体结构、能带结构、热学、力学、电学和光学性质,当然,由于本书主要研究硅基波导的非线性光学效应,因此会重点描述硅基材料的光学性质。在硅材料的性质研究方面,德国斯图加特大学 Erich Kasper 主编的 *Properties of Strained and Relaxed Silicon Germanium* 一书^[51]做了非常详细的介绍,提供了很多有用的科学数据,是该领域中一本非常有参考价值的书籍。

1.3.1 硅的晶体性质

硅材料是一种晶体材料,首先阐述的是硅的晶体性质。硅是第四主族半导体材料,其原子最外层分布着 4 个电子。固体的硅原子之间形成的是稳定的共价键,并且完全对称。这种完全对称和稳定的共价键使得硅晶体结构具有一系列稳定的特点。硅晶体结构为金刚石结构:这类晶体结构是由两套面心立方晶格沿着对角线方向相对位移 $1/4$ 而成^[52],在金刚石结构中,每个原子有 4 个最近邻的原子,每个原子同 4 个近邻原子构成正四面体结构,该原子位于正四面体的中心,4 个最近原子位于正四面体的 4 个顶点上。在金刚石结构中,每个立方原胞含有 8 个原子。

晶格常数是半导体材料中的重要参数之一,硅材料也不例外。在室温条件下,高纯硅单晶体的晶格常数的实验值为 $a_{\text{Si}} = 0.54310 \text{ nm}$ 。由于硅和锗具有十分相似的性质,在硅或锗的衬底上生长外延生长硅锗合金时,形成位错的过程中释放了晶格失配引进的应变,使得外延层变得稳定,然而引进大量的位错会改变晶体的性质,恶化材料的电学和光学性质。因此,必须采用多层异质结构和优化的工艺技术,才能获得优良的晶体材料。

1.3.2 硅的能带结构

硅是间接带隙材料,为了保持电子 - 空穴对复合发光过程中的能量守恒和动量守恒,需要声子的参与,部分能量转换为晶格振动的热能。由于有声子的参与,电光转换效率就比较低,因此间接带隙的材料如硅就不适合直接制作发光管和激

光器等期间,这在后面的研究进展里将再次提到。

在半导体材料中,能带图 E_k 的最大值或最小值通常在布里渊区的中心或边界点上,其他位置也可能出现极值。经过研究表明,硅的导带的极小值点不在 Γ 点 ($k=0$ 处),而处在布里渊区边界上的 X 点附近的 X_1 ,如图 1.1 所示。硅的导带底出现在 [100] 方向的 X 。

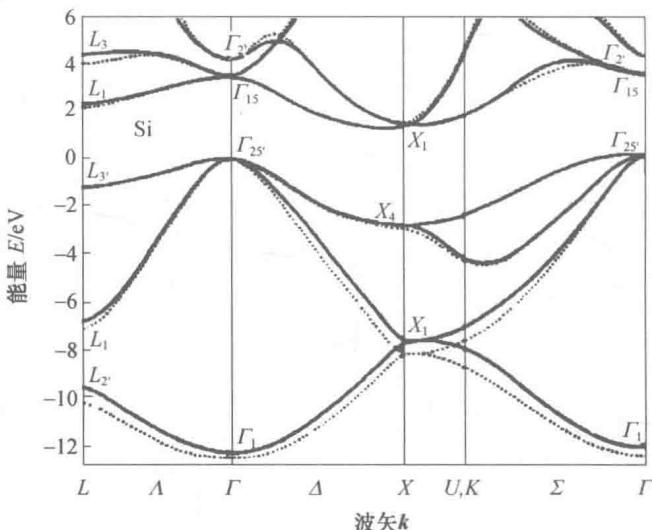


图 1.1 硅的能带结构图^[53]

半导体材料中,带隙(禁带宽度)的大小等于导带的绝对最小值同价带最大值之间的差值,硅的导带和价带的极值不在同一 k 处,如果要发生电子跃迁,则跃迁前后电子的波矢 k 会发生改变,因为电子的初态和终态对应着不同的波矢,这种导带和价带的极值不在同一波矢 k 处的半导体材料称为间接带隙半导体材料。半导体材料是否是直接带隙对它们的物理特性有重要的影响,特别是对其辐射复合特性有重要影响。直接带隙材料中,导带底附近的电子同价带顶附近的空穴相复合时,就会产生光子,并发射出来,其辐射复合效率较高,所以直接带隙的半导体材料适合制作激光器等发光设备。在间接带隙材料中,声子参与了复合过程,以便维持动量守恒定律。这就使得间接带隙材料的复合效率大为下降,通常比直接带隙材料的复合效率要低 $10^3 \sim 10^5$ 倍,这就是前面提到的间接带隙半导体材料不适合应用于发光器件的制作的原因。

1.3.3 硅的电学性质

硅的电学性质也十分重要,它是硅作为电子器件的判断依据。电子和空穴的迁移率是表征材料的重要参数,既反映了物理特性又为应用提供了重要的基础。研究表明,界面的粗糙度和界面的散射是影响电子迁移率的主要因素,而在调制掺

杂的异质结构场效应晶体管中,远程杂质散射和沟道中无掺杂的本底杂质散射是主要的机理。在杂质浓度不太高的硅材料中,如果不考虑应变的影响,则晶格散射起主导作用,也就是说声学声子和非极性光学声子引起的散射起主导作用。声子散射是正常温度下或者更高温度下的主要散射机理,但是在低温条件下,声子被冻结,中性杂质散射作用不明显,电离杂质散射便成为最主要的散射机制了。硅材料的电学性质十分重要,有相关的论著详细讨论。关于硅材料的电学性质,中国科学院半导体研究所的余金中教授等人在他们的论著《硅光子学》中作了十分详细的描述^[53],故本书中不作过多论述。

1.3.4 硅的光学性质

硅材料的光学性质和本书的内容最为密切,硅材料能够应用在光子学方面,并且作为一种重要的集成平台,也是与它的光学性质分不开的。硅的光学性质如下:

(1) 硅作为一种半导体材料,自然存在着禁带宽度。在常温下,硅在波长为 $1.1\mu\text{m}$ 处的禁带宽度为 1.12eV ,因此在最重要的通信窗口波段 $1.3\sim1.7\mu\text{m}$ 的范围内,是完全透明的。硅材料的带隙结构能使波长超过 $1.1\mu\text{m}$ 截止波长的光谱成分透明传输,十分有利于将硅材料应用在通信领域。除此之外,在波长小于 $2.2\mu\text{m}$ 的透明范围内,硅材料本身所特有的半导体物理性质导致光在传输过程中呈现出一些有显著意义的光学特征。

(2) 硅材料是人们到目前为止能够得到的最纯净的物质,从光学性质上讲,高纯度就意味着低损耗,硅的高纯度性质使得人们可以利用它制作出各种低损耗和低杂质散射的光波导功能器件。

(3) 硅材料与CMOS工艺兼容,能够以硅材料为基础制造出硅基波导。与CMOS过程中用到的两种主要的衬底介质(空气 $n_{\text{air}}=1$ 和二氧化硅 $n_{\text{Silica}}=1.46$)比较,硅材料在 $1.5\mu\text{m}$ 波段的折射率很大,其数值大约为3.5。大的折射率对比度特点非常有利于光的相互作用和光波导尺寸的控制,导致硅基波导器件具有强的光束限制、高的光集成度和小的芯片尺寸等特点。

(4) 硅的非线性折射率是普通石英的200倍,拉曼增益系数是普通石英材料的3000倍且依赖于光的偏振特性。因此,硅材料是一种良好的非线性光学材料,可以作为Kerr效应和拉曼效应的研究载体。

由于本书着重研究SOI波导的非线性光学效应,硅材料的光学性质也是应该重点讨论的方面。在硅材料众多的光学性质中,折射率是硅材料的重要光学参数,它是由材料本身的性质决定的,也同光波的波长和能量有关。研究表明,在波长为 $0.89\sim2.48\mu\text{m}$ 的范围内,硅的折射率随着波长的增加而减小,而且这种变化是单调的。吸收系数也是材料的重要光学参数,吸收系数衡量的是材料的纯度。研究