

# 光子集成用的新型波导材料 $\text{Si}_3\text{N}_4$ \*

刘耀东<sup>1,2</sup> 李志华<sup>1,2,†</sup> 余金中<sup>1,2,3,††</sup>

(1 中国科学院微电子研究所 微电子器件与集成技术重点实验室 北京 100029)

(2 中国科学院大学 北京 100049)

(3 中国科学院半导体研究所 北京 100083)

2018-07-30收到

† email: lizhuhua@ime.ac.cn

†† email: jzyu@semi.ac.cn

DOI: 10.7693/wl20190202

## New waveguide material $\text{Si}_3\text{N}_4$ for photonic integration

LIU Yao-Dong<sup>1,2</sup> LI Zhi-Hua<sup>1,2,†</sup> YU Jin-Zhong<sup>1,2,3,††</sup>

(1 Key Laboratory of Microelectronics Devices & Integrated Technology, Institute of Microelectronics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029, China)

(2 University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

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

**摘要** 光子集成是当今科技界的热门课题, 提高集成度最为重要。SOI(Silicon-on-insulator)等材料在光子集成中显现出重要的地位, 然而其损耗偏大, 对集成度产生影响。因此, 寻求新的波导材料极为重要。在这种要求下,  $\text{Si}_3\text{N}_4$ 应运而生, 成为人们研究的热点。 $\text{Si}_3\text{N}_4$ 结构稳定, 禁带宽度宽,  $E_g \sim 5.1$  eV, 对紫外到红外整个波段是透明的。在这一光波段中的损耗低达  $0.045 \pm 0.04$  dB/m, 比SOI波导低3—4个数量级。 $\text{Si}_3\text{N}_4$ 在1550 nm处的折射率 $\sim 2$ , 能够同Si和 $\text{SiO}_2$ 一起构成高性能的介质波导结构, 因此是很好的波导材料。 $\text{Si}_3\text{N}_4$ 的热膨胀系数 $\sim 2.35 \times 10^{-6}$  / $^\circ\text{C}$ , 比Si小许多, 在Si上生长 $\text{Si}_3\text{N}_4$ 会产生较大的拉应力, 因此容易产生龟裂, 生长大面积薄膜或者较厚的 $\text{Si}_3\text{N}_4$ 都十分困难。采用LPCVD或PECVD方法可以在低折射率的 $\text{SiO}_2$ 上淀积 $\text{Si}_3\text{N}_4$ 薄膜, 形成 $\text{Si}_3\text{N}_4$ - $\text{SiO}_2$ 波导结构, 减小了波导尺寸, 提高了集成度。文章综述新型波导材料 $\text{Si}_3\text{N}_4$ 的研究进展, 并对其应用进行描述与展望。

**关键词**  $\text{Si}_3\text{N}_4$ , SOI, 波导, 损耗, 光子集成

**Abstract** Photonic integration is one of the most important issues in scientific research. Silicon-on-insulator (SOI) and other materials play an important role in photonic integration, but their losses are large and affect the integration, so it is very important to find new waveguide materials. As a consequence,  $\text{Si}_3\text{N}_4$  came into being and is now a hot area of research. Its crystal structure is stable, with a wide energy band of  $E_g \sim 5.1$  eV, so it is transparent in the whole optical range from ultraviolet to infrared. Also, its optical loss in this range is very low,  $\alpha \sim 0.045 \pm 0.04$  dB/m, which is lower than that of SOI waveguides by 3—4 orders of magnitude. Its refractive index at 1550 nm is  $\sim 2$ , so combined with Si and  $\text{SiO}_2$ , high-performance dielectric waveguide structures can be designed. Its thermal expansion coefficient is  $\sim 2.35 \times 10^{-6}$  / $^\circ\text{C}$ , smaller than that of Si, so its growth on Si will introduce a larger tensile stress and may produce cracks. Thus, growing thick films of large area is very difficult. By using low-pressure or plasma-enhanced chemical vapor deposition,  $\text{Si}_3\text{N}_4$  films can be deposited on low refractive index  $\text{SiO}_2$  to form  $\text{Si}_3\text{N}_4$ - $\text{SiO}_2$  waveguides, which are smaller in size and allow better integration. Current research progress in this field is reviewed, and future application prospects are reviewed.

**Keywords**  $\text{Si}_3\text{N}_4$ , SOI, waveguide, loss, photonic integration

\* 国家重大专项(批准号: 2017ZX02315004-001-002)资助项目

# 1 引言

所谓光子集成，是在同一衬底上集光学材料、光学结构、激光器、光波导和探测器等光子器件于一体，具有发射、传输和探测光学信号、能量、运载信息等一系列功能。光子集成具有低功耗、小尺寸、多功能、长寿命等特点，成为当今世界的研究热点。

光波导是光子集成的基础与核心，其主要功能是将光限制在特定介质中，引导光波沿着确定的方向传输<sup>[1]</sup>。目前主流的光波导材料是SOI(Silicon-on-insulator)，光波导芯层Si与包层SiO<sub>2</sub>的折射率差大，对光的限制作用强，可以制备出亚微米量级的光波导，大大提高了集成度<sup>[2]</sup>。随着光互连技术朝着超高速和密集集成的方向发展，传统的SOI材料受损耗、工艺容差和灵活性等方面的限制，难以完全满足光网络和光信息系统发展的需求。

普遍认为，Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>是最具应用前景的下一代光波导材料，它在光波导器件中具有许多优势：(1)材料的强度高，结构稳定；(2)Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>的禁带宽度大， $E_g \sim 5.1$  eV，透明窗口可以从红外延伸至可见光波段，甚至紫外<sup>[3]</sup>；(3)与标准CMOS工艺兼容，制作成本低廉；(4)Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>折射率高，在1550 nm处 $n \sim 2$ ，与 $n \sim 1.45$ 的SiO<sub>2</sub>的折射率差大，波导尺寸和弯曲半径可以很小，集成度高<sup>[4]</sup>，并且可以实现3D大规模集成；(5)Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-SiO<sub>2</sub>波导损耗非常小( $0.045 \pm 0.04$  dB/m)<sup>[5]</sup>，这正是制作光延迟线、高Q值谐振腔等硅基光子波导器件所必需的。

Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>材料的不足也是非常明显的，其热膨胀系数( $\sim 2.35 \times 10^{-6}/^\circ\text{C}$ )<sup>[6]</sup>比Si小，在Si上淀积Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>薄膜时会产生较大的拉应力，容易产生裂纹，生长的临界厚度仅为250 nm<sup>[7]</sup>。Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>是绝缘材料，不导电，不能够制作有源器件，只能作无源器件。利用热光效应和压光效应能够制作光调制器<sup>[8, 9]</sup>，但是调制速度较慢、功耗也大。即使如此，将性能优异的Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>波导器件同SOI上的有源器件(调制器、探测器及激光器等)集成在同一平台上，充分利用它们各自的优点，显现出许多优异的性能，将是光子集成的重要方向。

Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>是大规模光子集成的有力竞争者，本文将详细介绍Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>的物理性质和应用前景。

# 2 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>物理性质

如图1所示，Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>中Si原子与4个N原子形成SiN<sub>4</sub>正四面体，每3个正四面体共享一个顶点<sup>[10]</sup>，Si原子位于N的正四面体中。进一步研究发现，Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>样品中的SiN<sub>4</sub>正四面体不仅存在顶点共享还存在边共享，形成Si—N—Si—N排列，键角为90°<sup>[11]</sup>。Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>的能带结构中，Si原子的sp<sup>3</sup>轨道与N原子的sp<sup>2</sup>轨道结合形成Si—N键，包括成键轨道 $\sigma$ 和反键轨道 $\sigma^*$ ，分别扩展形成价带和导带<sup>[12]</sup>。N原子中有一个p轨道自耦合，称为 $p\pi$ 轨道或者孤对电子轨道，能量介于成键轨道、反键轨道之间，构成了价带顶，如图2所示。实验测量表明<sup>[11]</sup>，Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>的带隙 $E_g \sim 5.1$  eV，因此Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>材料的透明窗口可以从红外波段延伸至可见光波段<sup>[13]</sup>。Si的禁带宽度为1.12 eV，因此SOI材料的透明窗口只在近红外波段。图3包含了部

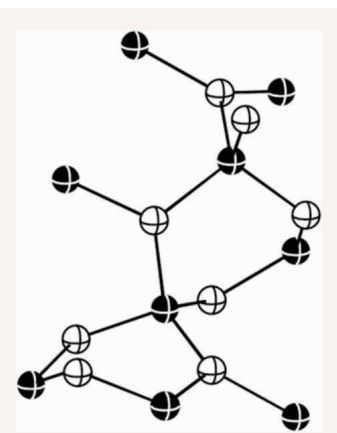


图1 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>原子结构示意图，黑球代表Si原子，白球代表N原子<sup>[10]</sup>

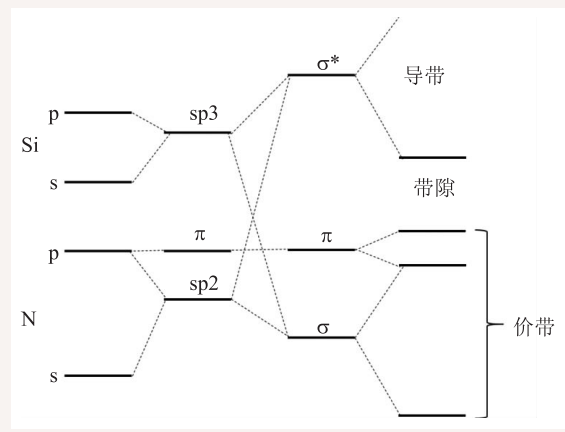


图2 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>的分子轨道和能带示意图<sup>[12]</sup>

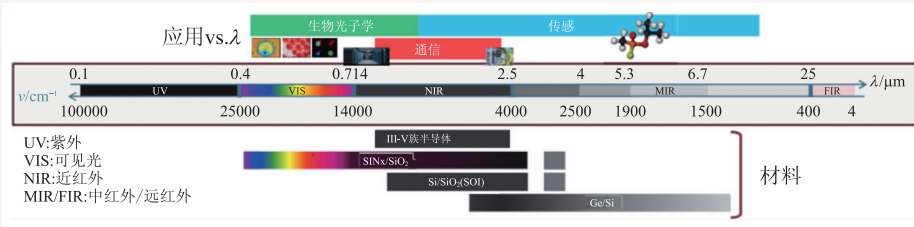


图3 部分光学材料的波长适用范围<sup>[13]</sup>

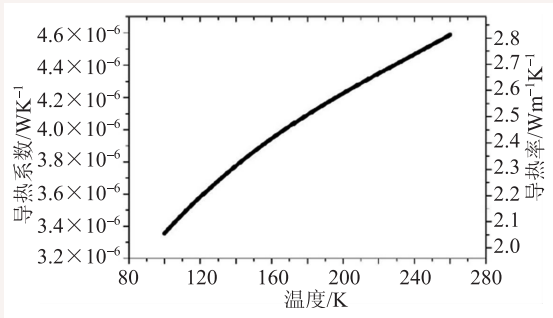


图4 100 nm厚的Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>薄膜的热导率随温度变化曲线<sup>[16]</sup>

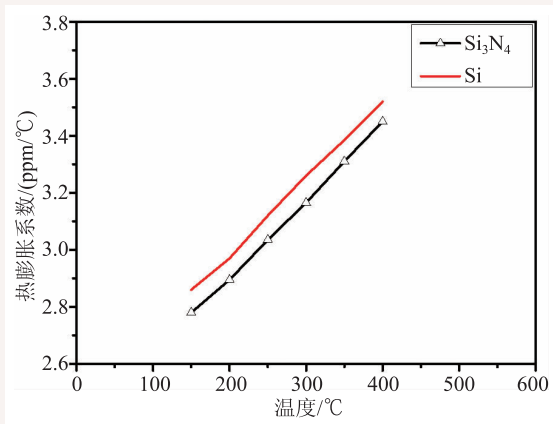


图5 Si和Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>的热膨胀系数随温度变化曲线<sup>[6]</sup>

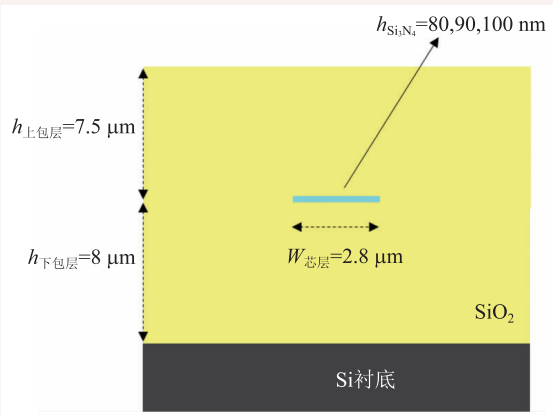


图6 低限制性Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>波导的截面图<sup>[19]</sup>

分光学材料的波长适用范围，可以看出没有一种材料能够满足所有光子应用的要求，因此经常追求互补技术的整合。

材料的光学性质通常由折射率的光谱

依赖性决定，在长波长通信波段，Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>的折射率  $n \sim 2$ ，与SiO<sub>2</sub>形成较大的折射率差 ( $\Delta n \sim 0.55$ )，这为小尺寸的单模波导提供了有利条件，在实现高密度光子集成的同时，很大程度减小了散射损耗<sup>[14]</sup>。高的折射率差会在波导侧墙处引起高的导模强度，当存在表面粗糙度时，这种与表面的相互作用会增加散射损耗<sup>[3]</sup>。对于SOI波导来说，传输损耗在1—2 dB/cm左右，而Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>波导的损耗可以低至  $(0.045 \pm 0.04)$  dB/m。

热导率是表征材料热物性的一个重要参数，其大小代表了材料导热能力的强弱。测量热导率的方法有很多，采用  $3\omega$ 法与Völklein结构相结合，对Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>薄膜的热导率进行测量<sup>[15, 16]</sup>。如图4所示，Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>的热导率随着温度的升高表现出增加的趋势，在室温下Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>的热导率约为  $3 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ 。

Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>是一种极具发展前景的波导材料，但是自身的应力限制了它在厚膜方面的应用。厚膜可以实现高限制性和高Q值，使光学模式与波导的边界重叠更小，进一步降低散射损耗<sup>[17]</sup>。Si衬底上的Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>薄膜的热膨胀系数随温度的变化曲线如图5所示<sup>[6]</sup>，在室温下的热膨胀系数约为  $2.35 \times 10^{-6}/\text{°C}$ ，比硅 ( $\sim 2.6 \times 10^{-6}/\text{°C}$ )小，在高温退火时，会表现出很高的拉应力，使硅片翘曲<sup>[18]</sup>。

### 3 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>光波导

作为一种电介质材料，Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>具有稳定性高、绝缘性好、带隙宽、折射率高等特点，在化工、微电子、光电子等方面均有广泛的应用。最近，Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>作为新型光波导材料成为光子集成领域的研究前沿和热点。

对于长距离传播和高Q值谐振器来说,平板波导必须具有超低传输损耗。LioniX公司和加州大学圣塔芭芭拉分校(UCSB)的研究人员使用低限制性波导结构( $\text{Si}_3\text{N}_4$ 厚度 $<100\text{ nm}$ ,如图6)<sup>[19]</sup>,有助于减小芯层与包层界面的散射损耗,实现了 $0.5\text{ mm}$ 的弯曲半径,损耗仅有 $8\text{--}9\text{ dB/m}$ (在 $1550\text{ nm}$ )。进一步优化光刻和侧壁刻蚀工艺,弯曲半径达到 $7\text{ mm}$ 时,实现 $0.1\text{ dB/m}$ 的超低损耗。图7展示了使用晶圆键合技术,在 $\text{Si}_3\text{N}_4$ 薄膜中引入了更小的应力,研制出损耗只有 $(0.045\pm 0.04)\text{ dB/m}$ 的平板介质波导(在 $1580\text{--}1610\text{ nm}$ )<sup>[5]</sup>。除了低限制性波导外,还有高限制性波导( $\text{Si}_3\text{N}_4$ 厚度 $>400\text{ nm}$ ),使用抗裂沟槽克服 $\text{Si}_3\text{N}_4$ 厚膜的应力限制,制作出了Q值高达700万的 $\text{Si}_3\text{N}_4$ 微环谐振器<sup>[17]</sup>(图8),传输损耗只有 $4.2\text{ dB/m}$ 。在热氧 $\text{SiO}_2$ 中蚀刻沟槽并用 $\text{Si}_3\text{N}_4$ 填充(图9),为了释放材料的应力沉积分步进行,晶片在沉积间隔冷却到室温,测量得到的传输损耗在 $1550\text{ nm}$ 附近波长处低至 $0.4\text{ dB/cm}$ <sup>[20]</sup>。

Barrios等<sup>[21]</sup>第一次提出了 $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2$ 狭缝波导(图10),与 $\text{Si}/\text{SiO}_2$ 狭缝波导相比具有更大的狭缝区域可以填充非线性材料、电致发光材料、液体以满足有源器件和高灵敏度传感器的要求。Melloni等<sup>[22]</sup>提出了全新的TriPleX几何结构,包括Box型(图11(a))和Double-Strip(DS)型(图11(b))。Box型内部由低折射率 $\text{SiO}_2$ 组成, $\text{Si}_3\text{N}_4$ 包裹在 $\text{SiO}_2$ 周围,传输损耗小于 $0.1\text{ dB/cm}$ ,极化相关损耗小于 $0.1\text{ dB/cm}$ <sup>[23]</sup>,由于形状对称,极大地降低了器件偏振灵敏度,非常适合电信应用。DS型波导的典型应用是需要小弯曲半径和强偏振双折射的器件。Twente大学和LioniX公司的研究人员报告了为光学延迟线开发的 $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2$ 光波导<sup>[24]</sup>,应用于微波光子信号处理。在光学环形谐振器(optical ring resonator, ORR)结构中测量波导传输损耗为 $0.095\text{ dB/cm}$ ,弯曲半径低至 $70\text{ }\mu\text{m}$ 。

由于 $\text{Si}_3\text{N}_4$ 不导电,

无法实现电光调制,目前 $\text{Si}_3\text{N}_4$ 的调制器仅有热光、压光调制器。热光调制器(图12(a))功耗大,相邻加热器之间的热串扰严重,实现 $\pi$ 相移功耗

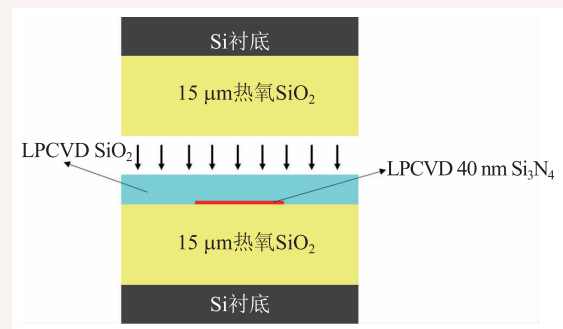


图7 晶圆键合示意图<sup>[5]</sup>

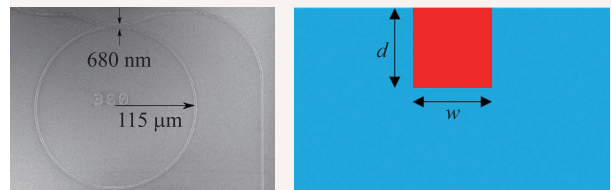


图8 微环谐振器SEM图<sup>[17]</sup>

图9 沟槽波导截面图<sup>[20]</sup>

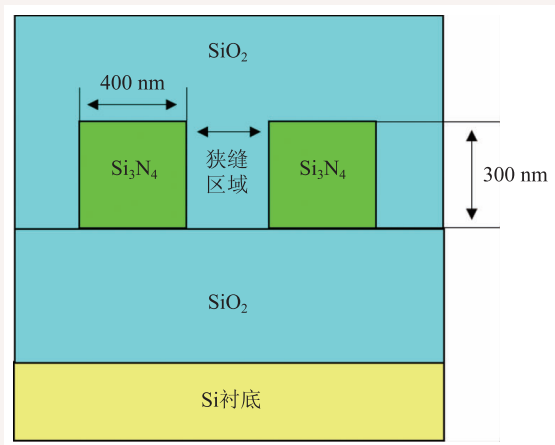


图10 垂直狭缝波导截面图<sup>[21]</sup>

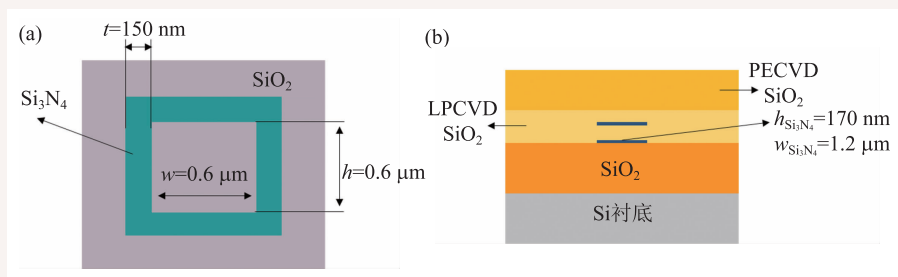


图11 全新的TriPleX几何结构 (a) Box型波导截面图<sup>[23]</sup>; (b)DS型波导截面图<sup>[24]</sup>

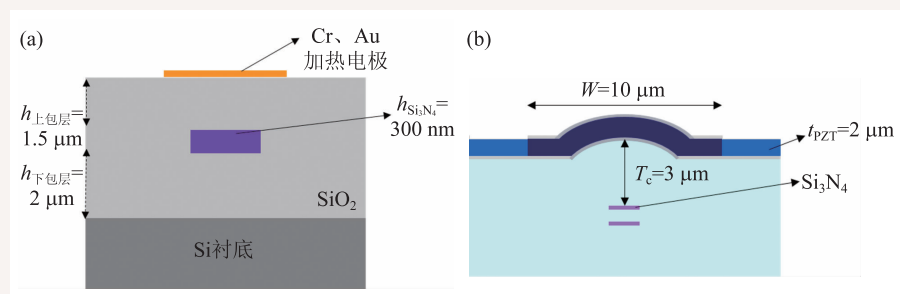


图12 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>的调制器 (a)热光调制器截面图<sup>[8]</sup>; (b)压光调制器截面图<sup>[9]</sup>

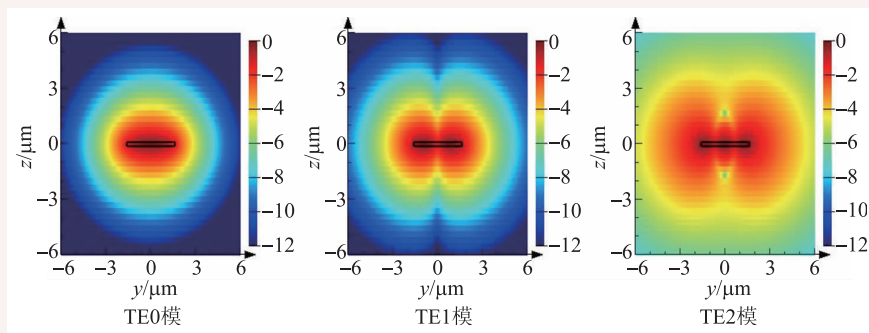


图13 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>波导有效折射率随波导宽度的变化关系图

高达 350 mW，响应时间约 1 ms，这些技术指标难以满足大规模波导阵列的需求<sup>[8]</sup>。为了解决这个问题，Epping 等<sup>[9]</sup>制备出了超低功耗的压光调制器(图 12(b))，将压电材料锆钛酸铅(PZT)淀积在 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> TriPleX 结构上，施加应力就能够改变材料的折射率。其静态损耗只有 μW 量级，动态损耗 (1 kHz) 约为 4 mW，最高的响应频率为 10 kHz。这些技术指标依然不能够满足光子集成的要求。

中国科学院微电子研究所李志华研究员课题组使用低压化学气相淀积(LPCVD)的方法，在 800℃ 的条件下制备出 200 nm 厚的 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 薄膜。该方法制备的 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 薄膜颗粒污染小、台阶覆盖性好，折射率为 2.04(在 632 nm)。

针对 200 nm 厚的 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 薄膜，利用 Lumerical 软件研究其波导单模条件，图 13 给出了 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 条形波导中单模(TE0 模)和多模(TE1、TE2 模)的光场强度分布图。单模对应的唯一峰值在波导层中心且泄露出去的光场能量较少；存在多模时，泄露到限制层中的光场能量随着模式数目的增加有所增加。根据有效折射率随波导宽度的变化关系

(图 14)，当 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 厚度为 200 nm 时，波导宽度要小于 1.7 μm 才能满足单模条件。

在电子集成中，各种电子元器件是通过金属引线实现互连的。在光子集成中，依靠 SOI 的波导也能够实现光波的传输与互连。然而它的损耗比较大和尺寸比较长就限制了光子集成的集成度、增加了传输损耗。采用 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 波导来代替 SOI 波导，既能够提高集成度，也能够降低损耗，一举两得。至于 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 不能够作成有源器件这一短板，可以

利用 SOI 和 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 各自在有源和无源波导器件上的优势，将两者有机地结合在一起，这必定将成为光子集成的最佳组合。

## 4 结束语

在未来的光子集成中，人们最为重视的物理参数是芯片的集成度、信息传输与控制的速率、功耗的大小、工作稳定性与寿命。SOI 和 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 联合起来就是最好的光子集成波导材料，再通过键合与外延等方式与 III—V 族发光材料组合在一起，就完全能够满足硅基光子集成的所有要求。

Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 具有化学稳定性好、禁带宽度宽( $E_g \sim 5.1$  eV)、折射率高( $n \sim 2$ )、光学损耗小( $0.045 \pm 0.04$  dB/m)等优异物理特性，被广泛的用于硅光子领域<sup>[25]</sup>，为新型硅基光电子器件的实现提供了一个与标准 CMOS 工艺兼容的平台。

从光子集成的角度考虑，首先是传输波段，红外波段的优势更大，在此基础上透明波段越宽越好。其次，要实现大规模的生产，光学集成芯

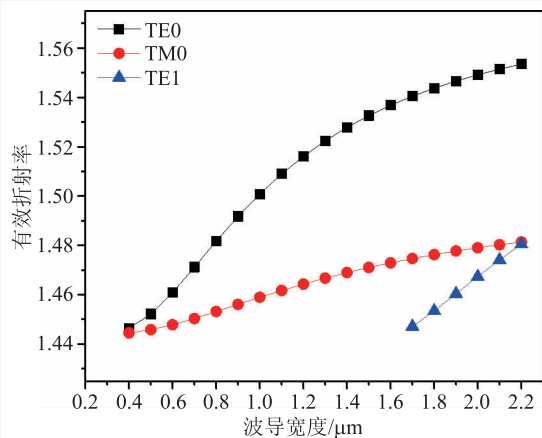


图14 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>条形波导中TE<sub>0</sub>、TE<sub>1</sub>、TE<sub>2</sub>三个不同模式的光场分布图

片的制造工艺必须同CMOS工艺兼容。光子器件的尺寸影响集成度，高折射率差能缩小器件尺寸、提高集成度。随着集成度的提高，就要求损耗越来越低。综合以上因素，Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>为光子集成提供了一个很好的平台，尽管在厚膜和有源器件方面还存在一些不足，但毫无疑问的是Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>优异的物理性质和广泛的应用前景会为硅光子学的发展作出重大贡献。尽管对Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>的研究方兴未艾，但是可以明显地看出，它具有非常多的优越性，必将在光子集成中发挥重要的作用。

**致谢** 特别感谢赵超研究员在论文的撰写过程中提供的指导，以及熊文娟老师、许庆同学在Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>薄膜制备部分的撰写中提供的帮助。

## 参考文献

- [1] 宋贵才,全薇.光波导原理与器件(第2版).北京:清华大学出版社,2016.3
- [2] 余金中.半导体光子学.北京:科学出版社,2015.378
- [3] Rahim A, Ryckeboer E, Subramanian A *et al.* J. Lightwave Technol., 2017, 35(4):639
- [4] Heck M. Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> waveguide technology for broadband and ultra-low-loss photonic integrated circuits. In: International Summer School of Photonics. IEEE Photonics Society, 2016
- [5] Bauters J F, Heck M J, John D D *et al.* Opt. Express, 2011, 19(24):24090
- [6] Sinha A K, Levinstein H J, Smith T E. J. Appl. Phys., 1978, 49(4):2434
- [7] Melchiorri M, Daldosso N, Sbrana F *et al.* Appl. Phys. Lett., 2005, 86(12):3218
- [8] Pérez D, Fernández J, Baños R *et al.* Switching and cross-talk characteristics of compact thermal tuners on a Silicon Nitride platform. In: 18th European Conference on Integrated Optics, Warsaw, 2016
- [9] Epping J P, Marchenko D, Leinse A *et al.* Ultra-low-power stress-optics modulator for microwave photonics. In: Proceedings of the International Society for Optical Engineering, 2017. 101060F
- [10] Kroll P J. Non-Cryst. Solids, 2001, 293(1):238
- [11] Hintzsche L E, Fang C M, Watts T. Phys. Rev. B, 2012, 86(23):235204
- [12] Robertson J. Philos. Mag. B, 1991, 63(1):47
- [13] Muñoz P, Micó G, Bru L A *et al.* Sensors, 2017, 17(9):2088
- [14] Romero-García S, Merget F, Zhong F *et al.* Opt. Express, 2013, 21(12):14036
- [15] Sikora A, Ftouni H, Richard J *et al.* Rev. Sci. Instrum., 2012, 83(5):054902
- [16] Sikora A, Ftouni H, Richard J *et al.* Rev. Sci. Instrum., 2013, 84(2):029901
- [17] Luke K, Dutt A, Lipson M *et al.* Opt. Express, 2013, 21(19):22829
- [18] Saito Y, Kagiya T, Nakajima S. Jpn. J. Appl. Phys., 2003, 42(10A):L1175
- [19] Bauters J F, Heck M J, John D D *et al.* Opt. Express, 2011, 19(4):3163
- [20] Epping J P, Hoekman M, Mateman R *et al.* Opt. Express, 2015, 23(2):642
- [21] Barrios C A, Sánchez B, Gylfason K B *et al.* Opt. Express, 2007, 15(11):6846
- [22] Melloni A, Morichetti F, Costa R *et al.* TriPleX: A new concept in optical waveguiding. In: 13th Eur. Conf. Integrated Optics (ECIO), Copenhagen, 2007
- [23] Morichetti F, Melloni A, Martinelli M *et al.* J. Lightwave Technol., 2007, 25(9):2579
- [24] Zhuang L, Marpaung D, Burla M *et al.* Opt. Express, 2011, 19(23):23162
- [25] Fan G, Orobchouk R, Han B *et al.* IEEE J. Sel. Topics Quantum Electron, 2016, 22(6):225