光电器件

DOI：10.16818/j.issn1001－5868.2023120402

基于 GST 薄膜的弯曲波导相变光学器件光学仿真与分析

罗明馨[1,2]，张东亮[1,3*]，鹿利单[1,2]，祝连庆[1,2,3]

（北京信息科技大学 1. 光电测试技术及仪器教育部重点实验室；
2. 光纤传感与系统北京实验室，北京 100016；3. 广州南沙北科光子感知技术研究院，广州 511462）

摘　要： 研究了相变光学器件的光传输性能，使用时域有限差分法建立覆盖 $Ge_2Sb_2Te_5$（GST）薄膜的弯曲波导模型，得到了在晶态和非晶态两种情况下 GST 的面积、厚度和在弯曲波导中的位置对光传输效率及损耗的影响规律。结果表明：GST 的最优覆盖面积为 0.415 μm^2，厚度为 17 nm，器件光传输不受 GST 覆盖位置影响，光传输对比度最佳达到 90.8%，插入损耗低至 0.321 dB，在 1 500～1 670 nm 波长范围内能够实现宽光谱并行传输。该器件尺寸小，消光比大，理论上满足提高光计算准确率的需求。研究结果对于非易失性、并行集成光子矩阵计算单元器件的研制具有一定的参考意义。

关键词： 光子计算；相变光学器件；$Ge_2Sb_2Te_2$；弯曲波导；覆盖型

中图分类号： TN25　**文章编号：** 1001－5868(2024)02－0228－06

Optical Simulation and Analysis of Curved-Waveguide Phase-Change Optical Devices Based on GST Thin Film

LUO Mingxin[1,2], ZHANG Dongliang[1,3], LU Lidan[1,2], ZHU Lianqing[1,2,3]

(1. Key Lab Minist Educ Optoelect Measurement Technol;
2. Beijing Lab Opt Fiber Sensing & Syst, Beijing Information Sci & Technol Univ., Beijing 100016, CHN;
3. Guangzhou Nansha Intelligent Photonic Sensing Research Institute, Guangzhou 511462, CHN)

Abstract: This article discusses the optical transmission performances of phase-change optical devices. A bending waveguide model covering $Ge_2Sb_2Te_2$ (GST) thin films was established using the finite difference time domain method. The influences of the GST area, thickness, and position in the bending waveguide on the optical transmission efficiency and loss were obtained in both the crystalline and amorphous states. The results indicated that when the optimal coverage area of the GST was 0.415 μm^2, and the thickness was 17 nm, the optical transmission of the device was not affected by the GST position. The maximum contrast of the optical transmission reached 90.8%, and the insertion loss was as low as 0.321 dB. Broadband parallel transmission could be achieved in a wavelength range of 1 500～1 670 nm. The device had a small size and high extinction ratio, which theoretically met the requirement for enhancing the accuracy of optical calculations. This study is significant in the development of non-volatile, parallel integrated photon matrix computing unit devices.

Key words: photon computing; phase change optical devices; $Ge_2Sb_2Te_2$; curved waveguides; covering type

收稿日期：2023－12－04.

基金项目：北京学者计划研究项目(BJXZ2021-012-00046)；国家自然科学基金项目(62105039)；中国科协青年托举人才工程项目(YESS20200146)；北京信息科技大学研究项目(2022XJJ07).

* **通信作者：**张东亮

0　引言

从半导体制程进入到 10 nm 之后，在冯·诺依曼计算架构体系中，CPU 与存储器之间的数据传输速率开始受限于铜互联的性能瓶颈，严重制约计算性能的进一步提升。大数据时代下数据量的爆炸性增长，对大带宽、超高速的光子数据传输、存储和处理提出了迫切的需求。21 世纪集成光学技术的发展极大推动了光互联、光计算技术的发展，也极大地促进了集成化的硫系相变光学器件的研究[1-2]。$Ge_2Sb_2Te_5$(GST)相变材料具有独特的非易失性相变性能，在光脉冲或电脉冲作用下能发生快速、可逆的热致非晶与晶相之间的互转变，并经由相变过程中材料的原子排布变化产生巨大的光学常数反差，可以在较短作用时间内实现对光振幅和相位的调控。硅基集成的硫系相变材料快速的非易失性、可重构特性使得在光计算中的信息处理和存储操作可以在同一器件中实现，并有潜力实现大规模集成的近零功耗、非易失、可重构、存算一体的光子计算链路，近年来受到了许多研究团队的关注。

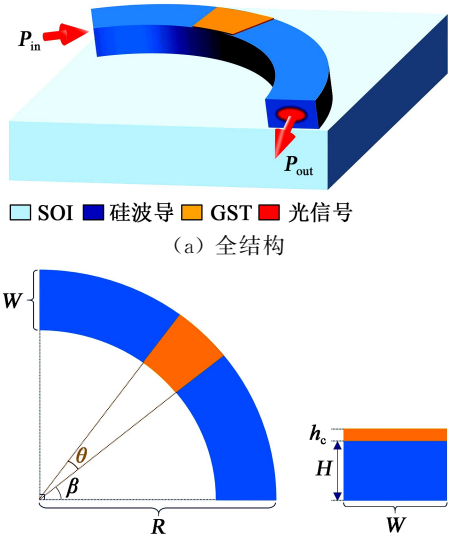
2017 年，Feldmann 团队首次报道在波导交叉点放置相变材料单元，利用经过编码的皮秒脉冲可以独立地对每个单元进行处理，实现加减、乘除等基础运算[3]。2019 年，该课题组基于 Si_3N_4/SiO_2 平台，研制了集成 10 nm 厚的 GST 的可重构相变计算单元，实现了标量乘法运算，此工作对于实现如图像处理和机器学习等重要的数据处理操作奠定了基础，进一步促进了全光计算机的发展[4]。2021 年，该课题组报道了基于光子张量核的图像识别专用集成光子硬件加速器，将上述 Si_3N_4/SiO_2 平台上的可重构相变单元与光学频率梳结合，对矩阵向量进行并行乘法运算，进而实现了二维卷积运算，运算速度可达每秒数万亿次乘累加运算，准确率为 95.3%[5]。2023 年，牛津大学的研究人员报道了一种使用射频调制光子信号的三维数据处理光子张量核系统，在空间分布的非易失性存储器和波长复用的基础上增加了一个额外的维度，具有超高的并行度和低延迟，准确率达到 93.5%，适合于边缘计算框架中的机器学习应用[6]。

制约光学神经网络计算准确率的因素有很多，其中硫系相变光学器件对光传输的影响是很重要的因素。硫系相变光学器件的光传输对比度较低，导致后期处理数据的误差较大，限制了光学计算准确率的提高。目前，用于光学卷积神经网络准确率最高的硫系相变光学器件的光传输对比度达到 70%[5]。较低的光传输对比度意味着相变光学器件在晶态和非晶态之间光损耗或吸收结果相近，无法形成明显传输对比，因此研究并优化相变光学器件的光传输特性具有重要意义。

为了提高器件的光传输对比度，本文基于文献[5]中的光子张量核计算单元结构，将相变材料 GST 与硅弯曲波导相结合，使用时域有限差分法(FDTD)和有限差分本征模求解器(FDE)对器件进行建模与仿真，重点研究晶态和非晶态两种情况下覆盖在 90°弯曲波导上 GST 薄膜的面积、厚度以及覆盖位置对波导光传输及损耗的影响规律。通过光学仿真分析得到的优化结构，在 1 500～1 670 nm 波长范围内能够实现宽光谱并行传输，插入损耗低至 0.321 dB，同时光传输对比度提高到 90.8%。本文提出的覆盖 GST 薄膜的弯曲波导相变光学器件具有高传输对比度、极低损耗、较小尺寸，理论上满足提高光计算准确率的需求，可作为光计算的核心元件，为非易失性、并行集成光子矩阵计算单元器件的研制提供参考。

1　器件结构设计与性能表征参数

采用高折射率材料制备的波导可具有较薄的波导芯层以及较小的弯曲半径，进而实现更小体积的波导器件并集成在更小尺寸的芯片上。因此，本研究基于 SOI 硅光集成平台进行器件设计，在硅波导顶部覆盖相变材料GST，如图1所示。通常情况下，



(a) 全结构　(b) 俯视图　(c) 截面图

图 1　器件结构示意图

芯片表面会淀积二氧化硅作为保护层，因此将背景折射率设置为 SiO_2 的折射率，以便数据结果更加符合实际情况。

本研究中的相变光学器件结构如图 1 所示，硅波导的厚度 H 为 220 nm，宽度 W 为 500 nm，弯曲半径 R 为 5 μm，弯曲角度为 90°。在此情况下，硅弯曲波导本身对光传输的损耗可忽略不计。相变材料 GST 的面积用 θ 表示(面积是 θ 的函数)，位置用角度 β 表示，厚度用 h_c 表示。初始设定值分别为 $\theta=1°$(对应面积为 0.041 μm^2)，$\beta=40°$，$h_c=10$ nm。晶态与非晶态的 GST 材料折射率分别为 4.6+0.12i 和 7.45+1.49i。

表征器件性能的参量分别介绍如下。

1.1 光传输对比度

在光计算领域，相变光学器件在晶态和非晶态下的光传输对比度(C_T)是影响计算准确性的重要因素。C_T 一般由非晶态与晶态条件下相变光学器件的光透射率差值得到，表达式为：

$$C_T=(T_a-T_c)\times 100\% \tag{1}$$

式中，T_a，T_c 分别是 GST 在非晶态和晶态时器件的透射率。透射率 T 计算公式为：

$$T=\frac{\frac{1}{2}\int \mathrm{Re}(P(f))\mathrm{d}S}{P_{source}(f)} \tag{2}$$

$P(f)$是坡印廷矢量，dS 是表面面元矢量，T 指归一化透射率随频率的变化。光透过率的差值越大，说明可调制中间状态数越多，即调制精度越高，能够实现更高精度的光子计算。

1.2 插入损耗

插入损耗(IL)是指光在传输过程中，光信号经过光学器件后，光信号的功率会发生一定的衰减。光学相变器件的非晶态的插入损耗总是小于晶态的插入损耗。非晶态的插入损耗越低，同时晶态的插入损耗越高，则相变光学器件的性能越好。插入损耗的计算公式为：

$$IL=-10\times \lg\frac{P_{out}}{P_{in}} \tag{3}$$

式中，P_{out}，P_{in} 分别为输出光功率与输入光功率。

1.3 消光比

消光比(ER)是光计算单元的另一项重要指标，是指在 GST 晶态和非晶态两种状态下波导输出光功率的比值。消光比越大，说明相变材料两态之间的光传输对比度越大，能够调制不同输出光的光功率数越多。由于透射率大小与输出光功率大小成正相关，使用透射率变化可以映射光功率的变化，则消光比的公式如下：

$$ER=10\lg\frac{T_a}{T_c} \tag{4}$$

式中，T_a 和 T_c 分别是 GST 在非晶态和晶态下的透射率。

2 仿真与分析

2.1 面积的影响

本文研究了在 7 个 h_c 厚度条件下，不同面积与光传输对比度之间的对应关系，将 GST 的面积对应的 θ 数值从 1°增加到 15°，绘制出了 GST 面积与光传输对比度之间的关系曲线，并将所有结果展示在图 2 中。可以观察到，随着面积的增加，器件光传输对比度表现出先增加后稳定的趋势。进一步分析得出，当相变材料面积较小时，导致折射率变化的区域不足以产生显著影响，从而无法触发输出光透射率的明显变化。而当相变材料的面积较大时，折射率变化已经达到顶峰，在这种情况下，器件在非晶态下呈现出的低透射率特性与晶态下的透射率之间的差异不太明显。经计算分析得出，在 θ 为 10°时，光传输对比度 C_T 最高可达 90.8%。

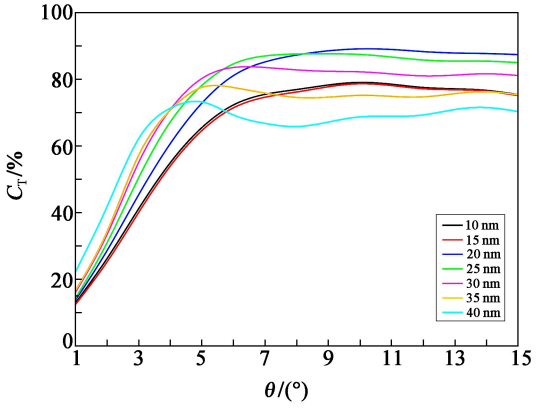
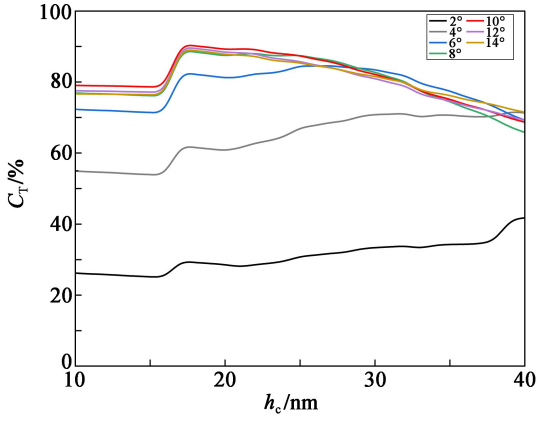


图 2 在七种不同 h_c 厚度下，GST 面积与光传输对比度的关系图

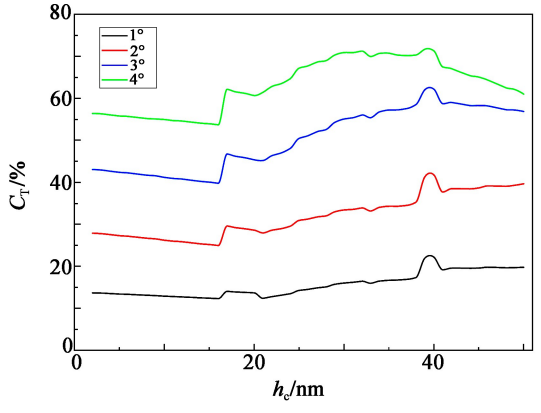
2.2 厚度的影响

相变材料的厚度也是影响相变光学器件性能的因素之一。对于 GST 而言，当其过薄时，容易在外部激励下发生击穿现象，从而损坏与其接触的波导结构。而当 GST 厚度超过一定数值时，不论处于晶相还是非晶相状态，均会引起较大的光吸收和折射，导致器件在这两种状态下的透射率降低，难以实现较大的光传输对比度。在基于前述得到的最优面积 $\theta=10°$条件下，研究了厚度 h_c 从 10 nm 逐渐增加到

40 nm 时器件光传输的变化，如图 3 中的红色曲线。为避免偶然因素的影响，本文针对 7 组不同面积 θ 条件下研究了 GST 厚度对器件光传输的影响，并将所有结果展示在图 3 中。观察到 h_c 在 10～15 nm 范围内，光传输对比度没有明显变化；当 h_c 处于 15～18 nm 范围内时，光传输对比度急剧增大；当 h_c 超过 18 nm 后，光传输对比度变化缓慢并有下降趋势。然而，在 θ(面积)较小的情况下，厚度变化与光传输对比度呈正相关关系。因此本文进一步研究了在 θ 分别为 1°，2°，3°，4°时，材料厚度 h_c 与光传输对比度 C_T 之间的关系，结果如图 3(b)所示。当厚度增加到 50 nm 时，θ 为 3°和 4°对应的曲线呈现峰值，并且变化趋势与面积较大的情况一致。相关研究表明，为了更好地使 GST 材料非晶化，其厚度不应超过 50 nm[7]，结合上述仿真结果分析，认为当 h_c 为 17 nm 时，弯曲波导光传输对比度达到最大值。



(a) 厚度为 10～40 nm

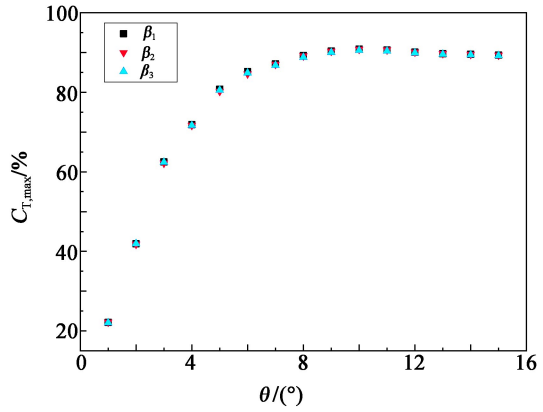


(b) 厚度为 1～50 nm

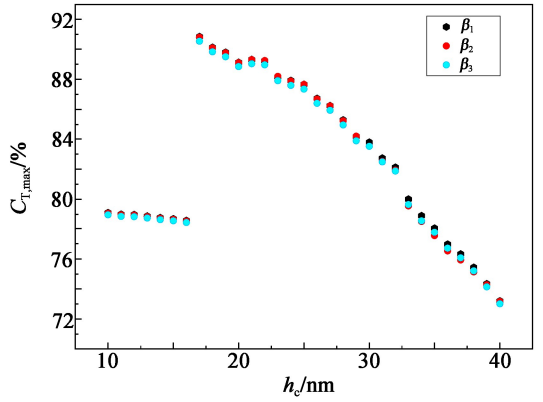
图 3　在 7 种不同 GST 面积下，厚度与光传输对比度关系图

2.3　位置的影响

波导与相变材料结合区域的折射率变化，能够导致光在此区域传播时发生传播方向和吸收损耗的改变。如果在弯曲波导中折射率变化的区域不同，则光传播方向发生变化的位置也会不同。因此，研究了在初始位置 $\beta=40°$处覆盖的 GST 面积和厚度对光传输的影响规律之后，进一步探讨了分别覆盖在波导前部($\beta=75°$)和后部($\beta=15°$)两个位置的 GST 薄膜面积和厚度对弯曲波导光传输的影响，并与之前的结果进行了比较。在图 4(a)中，散点表示在 3 个位置处，每个 θ 值(面积)对应的最大对比度 $C_{T,max}$；在图 4(b)中，散点表示为 3 个位置处，每个厚度 h_c 值对应的 $C_{T,max}$。分析两图发现 GST 覆盖在 3 个不同位置的器件，其光传输对比度几乎完全重叠，C_T 最大可为 90.8%。此外，3 个位置对应的最佳厚度 h_c 和面积 θ 均为 17 nm 和 10°，GST 薄膜的覆盖位置对弯曲波导器件的光传输没有显著影响。



(a) 不同覆盖位置处的 GST 面积(θ)值对应最大 C_T 的散点分布图



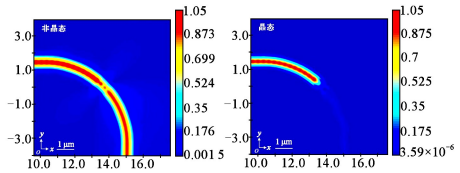
(b) 不同覆盖位置的 GST 厚度 h_c 值对应最大 C_T 的散点分布图

图 4　3 个 GST 覆盖位置处的 C_T 散点分布

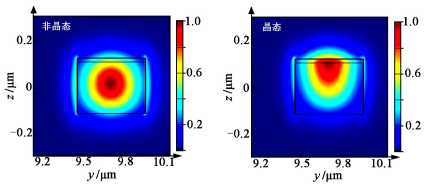
2.4　最优结构

经过上述的仿真和分析，得出结论：覆盖型 GST 薄膜的最佳厚度 h_c 为 17 nm，最优面积对应的

θ 为 10°，该相变光学器件的光传输不受 GST 覆盖位置的影响。为了进一步评估最佳薄膜厚度和面积对器件光传输的影响，使用时域有限差分法(FDTD)和有限差分本征模求解器(FDE)，分别计算得到了最优覆盖模型在两种相态下的光场分布以及模场强度分布，如图 5 所示。



(a) 非晶态和晶态光场分布

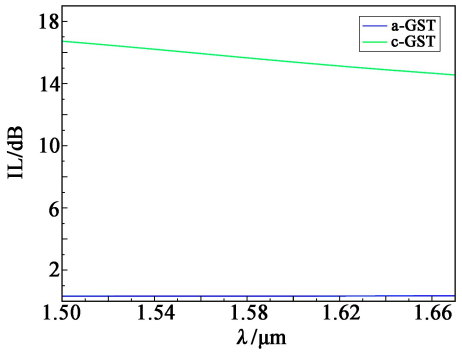


(b) 非晶态和晶态模场分布

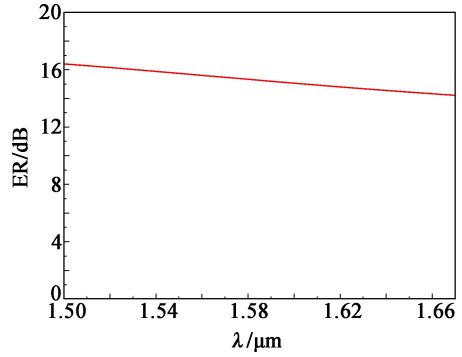
图 5 器件晶态和非晶态的光场分布及模场分布

从图 5(a)所示的光场分布图可见，当 GST 处于非晶态时，波长为 1 550 nm 的输入光得以沿着弯曲波导轨道路径传输至下方输出端口，并且仅在覆盖 GST 的波导区域产生微小的光损耗。然而当 GST 处于晶态时，大部分输入光在遵循波导轨道路径传输后无法持续传播，这导致输出端口出现显著的光损耗。两种光场分布之间的差异表明，在本研究中提出的相变光学器件中，光可按照波导轨道路径传输，并符合传输特性。从图 5(b)展示的模场分布图可知，当 GST 处于非晶态时，光主要被限制在硅波导中传输，其对 TE 模式的有效折射率为 2.539＋0.008 7i；当 GST 处于晶态时，光场更容易泄漏至 GST 层，导致波导的有效折射率为 2.828＋0.312i。通过结合光场与模场分布的分析知，晶态 GST 表现出较大的传播常数和更高的光吸收损失。

对于波长为 1 550 nm 的输入光，经过非晶态 GST 覆盖区域后插入损耗 IL 为 0.326 dB，而经过晶态 GST 覆盖区域后 IL 升至 16.057 dB，此时的光传输对比度 C_T 为 90.3%。随后将波长范围扩展到 1 500～1 670 nm，并对上述结构进行进一步仿真计算，得到 IL 和 ER 随波长变化的关系(如图 6)。在这个波长范围内，当 GST 处于非晶态时，器件的插入损耗 IL 均保持在 0.343 dB 以上；而当 GST 处于晶态时，器件的插入损耗 IL 则均超过 14.555 dB。同时两相态之间的光传输对比度 C_T 均高于 88.9%，而消光比 ER 均亦高于 14.21 dB。



(a) 晶态和非晶态的 IL 与波长关系曲线



(b) ER 与波长的关系曲线

图 6 1 500～1 670 nm 波段器件的 IL 和 ER 曲线

在 1 500～1 670 nm 波长范围内，不论 GST 处于晶态还是非晶态状态，器件的插入损耗波动差值均保持在小于 2.5 dB 的范围内，表明该器件能够有效地并行传输较宽波长范围的光谱。本研究提出的覆盖型 GST 薄膜弯曲波导相变光学器件直径不超过 5 μm，具有较小尺寸和较低损耗的特点。通过仿真设计优化了器件结构，有望为改善器件性能指标提供参考。

3 结论

本研究通过建立覆盖型 GST 弯曲波导的光学模型，探究了 GST 材料的面积、厚度和位置对器件光传输的影响规律，为器件工艺设计提供了有效指导。根据仿真结果分析，发现 GST 最佳覆盖面积对应的 θ 为 10°(即面积为 0.415 μm²)、厚度为 17 nm，器件的光传输在晶态和非晶态之间表现出高达 90.8%的光传输对比度，并且不受 GST 位置的影响。作为光计算的核心元件，本文提出的相变光学器件尺寸小、消光比大，具备宽光谱并行传播的优势，适用于高集成度光子矩阵计算。这一研究结论对于开发非易失

性、可扩展、并行光子矩阵计算的器件单元具有一定的参考价值。随着研究人员对材料特性和工艺技术的深入研究，硅基集成相变光学器件的性能也会得到进一步提升和应用推广。

参考文献：

[1] Pellizzer F, Benvenuti A, Gleixner B, et al. A 90 nm phase change memory technology for stand-alone non-volatile memory applications[C]// Symposium on VLSI Technology, 2006: 122-123.

[2] Servalli G. A 45 nm generation phase change memory technology [C]// IEEE Inter. Electron Devices Meeting (IEDM), 2009: 1-4.

[3] Feldmann J, Stegmaier M, Gruhler N, et al. Calculating with light using a chip-scale all-optical abacus[J]. Nat. Commun., 2017, 8: 8.

[4] Rios C, Youngblood N, Cheng Z G, et al. In-memory computing on a photonic platform[J]. Sci. Adv., 2019, 5(2): 5759.

[5] Feldmann J, Youngblood N, Karpov M, et al. Parallel convolutional processing using an integrated photonic tensor core[J]. Nature, 2021(589): 52-58.

[6] Dong B, Aggarwal S, Zhou W, et al. Higher-dimensional processing using a photonic tensor core with continuous-time data[J]. Nat. Photon., 2023(17): 1080-1088.

[7] 李钧颖. 通讯波段透明的 Ge-Sb-Se-Te 非易失光学相变材料及器件[D]. 重庆：重庆大学，2019.
Li Junying. Telecom-wavelength-transparent Ge-Sb-Se-Te nonvolatile optical phase change materials and devices[D]. Chongqing: Chongqing University, 2019.

[8] 穆章健，李丽莹，杜　嘉，等. 基于 $Ge_2Sb_2Se_4Te_1$ 的可重构光开关的仿真[J]. 光学仪器，2021，43(6)：6-12.
Mu Zhangjian, Li Liying, Du Jia, et al. Simulations of reconfigurable optical switching based on $Ge_2Sb_2Se_4Te_1$[J]. Optical Instruments, 2021, 43(6): 6-12.

[9] Shafiee A, Charbonnier B, Pasricha S, et al. Design space exploration for PCM-based photonic memory[C]// ACM Great Lakes Symposium on VLSI (GLSVLSI), 2023: 533-538.

[10] Shafiee A, Pasricha S, Nikdast M. A survey on optical phase-change memory: the promise and challenges[J]. IEEE Access, 2023, 11: 11781-11803.

作者简介：

罗明馨(1998—)，女，云南省楚雄市人，硕士研究生，主要研究方向为基于光子计算的相变光学器件结构设计；

张东亮(1986—)，男，河南省信阳市人，工学博士，副高级研究员，主要研究方向为低维量子结构红外光电子器件物理、材料外延技术、器件开发，以及新型红外光电系统应用开发。