

2차원 광결정 선결함의 낮은 군속도

Small Group Velocity of Line Defect in Two-dimensional Photonic Crystal

이명래^{1,a}, 김경래¹, 신원진¹, 김창교², 홍진수¹

(Myoung-Rae Lee^{1,a}, Gyeong-Rae Kim¹, Won-Jin Shin¹, Chang-Kyo Kim², and Chin-Soo Hong¹)

Abstract

Photonic crystal is dielectric materials or a set of different dielectric materials with periodic structure. Line defect is obtained by leaving out a row of rods along the Γ -X direction. We showed the change of group velocity in waveguide mode and found resultant small group velocity. Characteristics of the small group velocity were described by electric field distribution. Investigating the phase shift, it is confirmed if small group velocity is positive or negative.

Key Words : Photonic crystal, Line defect, Waveguide mode, Group velocity, Supercell

1. 서론

최근, 광기술 연구 분야에서 우수한 광 특성을 보이는 광결정(photonic crystals; PC)에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다[1,2]. 서로 다른 유전율($\epsilon = N^2$)을 갖는 물질의 1, 2, 3차원 주기적인 배열인 광결정은 전자기파가 입사할 때 광밴드갭(photonic bandgap; PBG)이 형성된다[3]. 광밴드갭은 전자기파의 파장과 광결정의 구조 사이에 상관관계를 만족한다. 광결정의 밴드갭이 크다면 광소자 설계의 오차를 줄일 수 있고 동작이 개선되어 양질의 광소자에 응용될 수 있다[4-6].

광밴드갭 이외에 광결정의 중요한 특성 중 하나는 결함 모드(defect mode)이다. 사실상 대부분의 광결정 응용은 이 결함 모드를 이용한 것으로 광결정 내 국소 영역에 인위적으로 주기성을 깨뜨려 이 결함 주변에 강한 국소결함모드가 발생한다[7,8]. 이러한 결함모드의 특징은 공진기(resonator), 광도파로(optical waveguide), 광 필터(optical filter) 등의 분야에 응용되고 있다[9,10].

본 논문에서는 평면파 전개 방법(plane wave expansion method; PWEM)[11]을 상업용 패키지 Mathematica로 코딩하였다. 이를 이용하여 무한 크기의 2차원 광결정(2D PC) 삼각형 격자의 선결함 밴드 구조를 구하였고 큰 밴드갭을 얻을 때 선결함 광결정 구조를 최적화하였다. 선결함 모드의 waveguide mode에서 낮은 군속도는 전파방향을 일직선상에 위치한 형태로서 확인을 하였다. 그리고 waveguide mode의 전기장(E_z) 변화를 통하여 군속도가 양의 값에서 음의 값으로 변할 때의 특징을 확인하였다.

2. 본론

2.1 Supercell

고체물리학과 결정학에서 결정(crystal)구조를 기술할 때 supercell은 기본셀(primitive cell)을 포함하는 결정의 반복되는 단위셀(unit cell)이다. 광결정 결함 모드의 계산 모델에 주기적인 경계 조건의 사용한 supercell 방법이 일반적으로 사용된다[12].

Supercell에서 실공간(real space)과 역격자 공간(reciprocal lattice)에서는 푸리에 변환 관계가 성립된다. 그러므로 공간 격자 상수는 역수의 관계가 있고 다음과 같은 식으로 삼각형 격자의 격자 상수 벡터를 나타낼 수 있다.

1. 순천향대학교 전자물리학과
(충남 아산시 신창면 읍내리 646)
2. 순천향대학교 전자정보공학과
a. Corresponding Author : lmr8104@sch.ac.kr
접수일자 : 2009. 9. 11
심사완료 : 2009. 12. 16

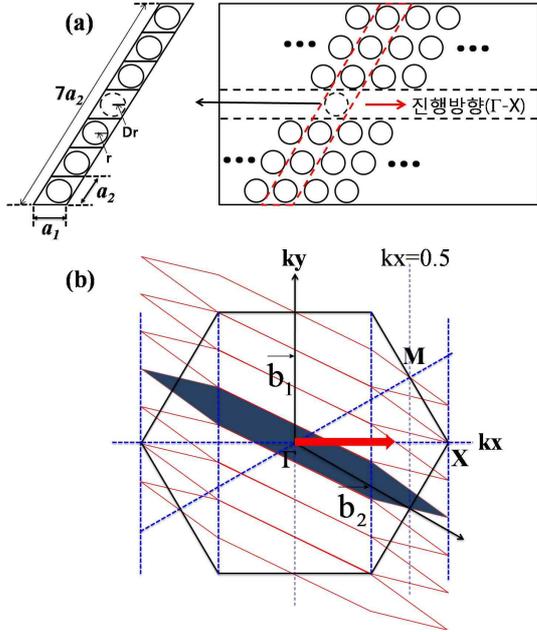


그림 1. (a) 삼각형 격자에서 1×7 supercell의 실공간(real space) (b) 삼각형 격자의 역격자 공간(reciprocal space)에서의 unit cell과 1×7 supercell의 first Brillouin zone.

Fig. 1. 1×7 supercell of triangular lattice in real space (b) Unit cell and 1×7 supercell of first Brillouin zone in triangular lattice reciprocal space.

$$\begin{cases} \vec{a}_1^s = (2N_x + 1)A_x(1, 0) \\ \vec{a}_2^s = (2N_y + 1)A_y(\cos 60^\circ, \sin 60^\circ) \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{cases} \vec{b}_1^s = \frac{2\pi}{(2N_x + 1)A_x}(1, -\cot 60^\circ) \\ \vec{b}_2^s = \frac{2\pi}{(2N_y + 1)A_y}(0, \csc 60^\circ) \end{cases} \quad (2)$$

식 (1)과 식 (2)에서 $(2N_x + 1)$ 과 $(2N_y + 1)$ 은 실공간과 역격자 공간에서 unit cell을 포함한 supercell 개수를 나타낸다. 예를 들어 $N_x=1, N_y=1$ 이 되면 3×3 supercell을 이루는 것이다.

그림 1(a)처럼 배열된 구조에서 유전률은

$$\frac{1}{\epsilon(r)} = \sum_{G_{mn}} \eta_{G_{mn}} \exp[i\vec{G}_{mn} \cdot \vec{r}] \quad (3)$$

로 나타낼 수 있다. 여기서 $\vec{G}_{mn} = m\vec{b}_1^s + n\vec{b}_2^s$ 이고 역격자 벡터(reciprocal lattice vector)라 부른다.

그림 1(b)는 역격자 공간에서의 unit cell(정육각형)과 supercell을 나타낸다. 1개의 unit cell에 7개의 supercell이 포함되어 있으며 7개의 supercell 면적의 합은 unit cell의 면적과 같다. 그림 1(b)에서 G, X, M은 unitcell의 구성요소로서 이 세 구간으로 Brillouin zone의 에너지 스펙트럼을 표현할 수 있다. 그러므로 이 세 구간만을 취하여 기본 PC구조의 광밴드갭을 구하고 이를 선결함 모드에 적용시킨다. 그리고 supercell에서 채워진 부분은 supercell의 first Brillouin zone이다.

전기장이 그림 1(a)의 원기둥 축에 평행하게 전자기파가 입사하면 E-편광이라 하고

$$\sum_{G_{mn}} \eta_{G_{mn} - G_{m'n'}} [\vec{k} + \vec{G}_{m'n'}]^2 A_{G_{m'n'}}^{\vec{k}} = \frac{\omega_k^2}{c^2} A_{G_{mn}}^{\vec{k}} \quad (4)$$

와 같은 최종식을 얻는다. 식 (4)에서 $A_{G_{m'n'}}^{\vec{k}}$ 는 고유벡터(eigenvector)이며 ω_k^2/c^2 는 고유값(eigenvalue)이다. 식 (4)를 행렬로 풀어서 고유값과 고유벡터를 얻었다. 계산에서 $m', n' = -p, -p+1, \dots, p-1, p$ 로 각각 $2p+1$ 개씩, 전체 m', n' 개수는 $(2p+1)^2$ 이다. 또한 supercell에서 생기는 $(2N_x + 1)(2N_y + 1)$ 이 있으므로 전체 평면파의 개수는 $(2p+1)^2(2N_x + 1)(2N_y + 1)$ 이 된다.

2.2 선결함 구조

그림 1(a)와 같이 x축($\Gamma-X$ 방향)을 따라 전자기파가 1×7 supercell로 진행할 때 선결함 모드가 나타난다. 7개의 원통 중 가운데 점선으로 되어 있는 원통이 결함을 나타낸다. 본 논문에서는 결함 원통의 비율을 DefectRatio라 하였다. DefectRatio는 원통에 대한 결함의 크기의 비율로서 $\text{DefectRatio} = D_r \times r/a$ 이다. PWEM으로 삼각형 2D PC 선결함을 전산모사 하기 위해 3087개의 평면파를 사용하고 격자주기($A_x = A_y = a_1 = a_2 = a$)는 500 nm, E-편광 그리고 원통의 굴절률(N_2)은 3.4를 사용하였다. 선결함 모드는 원통이 완전히 제거된 형태($D_r=0$)에서 밴드갭 내에서의 waveguide mode를 확인하였다.

그리고 결함모드에 적용된 밴드갭은 기본 PC구조에서 얻은 최대 밴드갭을 적용하였다($\text{arRatio}=0.2$ 일 때). 그림 2는 $\text{arRatio}=0.2, \text{DefectRatio}=0$ 일 때를 보여준다. 여기서 $\text{arRatio}(=r/a)$ 는 격자주기에 대한 원통의 비율을 나타낸다.

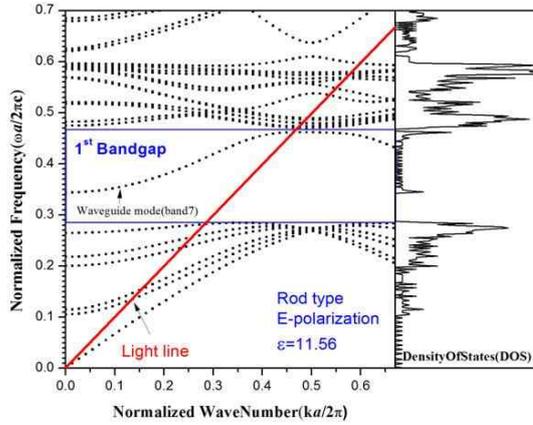


그림 2. 2차원 광결정 선결함에서 밴드구조(Γ -X 방향). 첫 번째 밴드갭 내에 waveguide mode(band7) 존재. 각진동수와 평면파수는 각각 $\omega a/2\pi c$ 와 $ka/2\pi$ 로 규격화 하였다.

Fig. 2. Band structure in 2D PC line defect(Γ -X direction). Existing the waveguide mode (band7) inside 1st bandgap.

그림 2에서 light line 위쪽은 공진영역 (resonant states)으로서 파수(k)와 진동수의 함수 관계에서 기울기가 1 이상이 되어 (즉, $v \geq c$; 전자기파의 속도가 빛 속도보다 크거나 같다) 고려하지 않는다 [13]. 그리고 밴드 구조의 우측 그림은 밴드의 상태 밀도(Density Of States; DOS)를 나타낸다[11].

밴드갭 내에서는 전파되는 모드가 존재하지 않지만 결함을 넣었을 때 밴드갭 내에서 waveguide mode(그림 2에서 7번째 밴드)가 존재한다. waveguide mode의 군속도(v_g)를 구하여 전자기파의 흐름을 확인 할 수 있었다. 여기서 군속도는 빛의 속도(c)로 규격화 되었다.

2.3 Waveguide mode의 군속도(v_g)

Waveguide mode의 군속도는 PWEM에 의한 계산을 적용하였다[15]. 식 (4)를 \vec{k} 에 대해 미분을 하여

$$\vec{v}_g = \frac{\partial \omega_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}} \quad (5)$$

의 최종식을 얻었다.

그림 3은 waveguide mode에 대한 군속도를 나타낸 그림이다. 그림 3을 보면 $k_x=0.5$ 부근에서 군

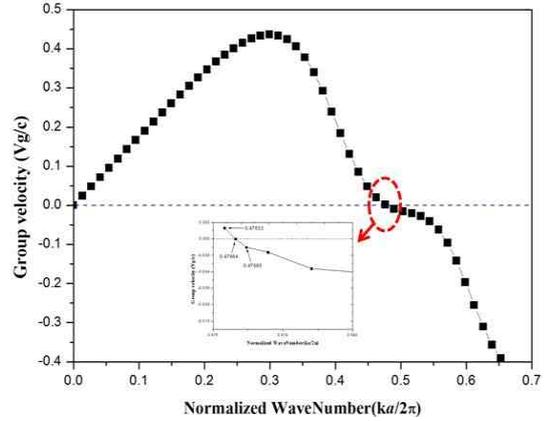


그림 3. Waveguide mode의 군속도, 삽입된 그림은 군속도가 “0”에 가까운 지점을 확대 (여기서, 군속도는 빛의 속도 “c”로 규격화 되었다.)

Fig. 3. Group velocity of waveguide mode. Inserted fig was magnified near zero group velocity. (Here, the group velocity was normalized speed of light “c”).

속도가 “0”에 가까운 것을 볼 수 있다. 군속도가 0을 보이는 것은 정상파(standing wave)형태로서 전자기파가 진행방향으로 나가지 못하고 머물러 있는 형태이다. 즉, 에너지 흐름이 없는 정적 상태이다[12]. 그리고 군속도가 음을 나타내는 것은 전자기파의 진행에 반대 방향으로 에너지가 흐르는 것이다. 그림 3에서 삽입된 그림은 점선으로 표시된 부분을 확대하여 표시하였다. $k_x=0.47664$ 에서 군속도가 0을 보이며 전자기파의 에너지 흐름이 양에서 음로 바뀌게 된다. 다음으로 군속도가 양에서 음로 바뀔 때 각각의 파수(k)에 따른 전기장을 통하여 mode의 위상변화를 확인한다.

2.4 Waveguide mode의 전기장(Ez)

우리는 식 (4)에서 얻은 고유벡터 성분을 이용하여 waveguide mode의 전기장을 구하였다.

$$E_z = \sum_{G_{mn}} A_{G_{mn}}^{\vec{k}} \exp i [(\vec{k} + \vec{G}_{mn}) \cdot \vec{r}] \quad (6)$$

낮은 군속도의 파수를 뽑아 군속도의 부호가 “+”, “0”, “-” 일 때 각각의 전기장을 구현하였다.

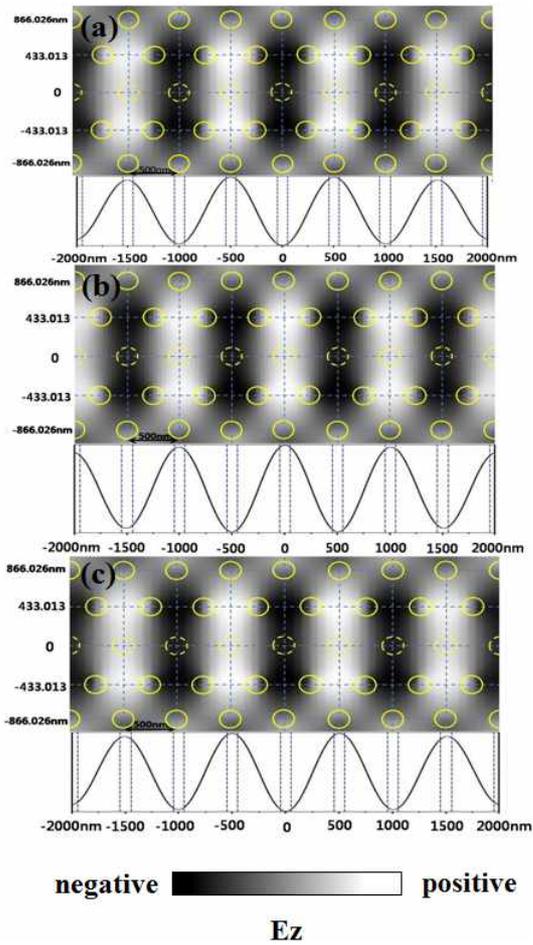


그림 4. (a) $k_x=0.47633$ (b) $k_x=0.47664$ (c) $k_x=0.47695$. (a),(b),(c) 각각 $ka/2\pi$ 로 규격화.
 Fig. 4. (a) $k_x=0.47633$ (b) $k_x=0.47664$ (c) $k_x=0.47695$. (a), (b) and (c) was normalised $ka/2\pi$.

그림 4에서 (a), (b), (c) 각각의 그림 아래쪽에 삽입되어 있는 선형그래프는 전기장의 x축 단면이고 점선으로 표시된 부분은 실제 원통의 사이즈를 표시한 것이다.

그림 4 (a), (b), (c)를 비교해 보면 파장이 반 파장씩 바뀌는 것을 확인할 수 있다[13]. 즉, 낮은 군속도를 갖는 파수에서 정상파 형태를 보이나 에너지의 흐름은 있다는 것을 알 수 있다. 또한 군속도의 값이 양의 값에서 음의 값으로 변하는 것은 식 (4)의 $|\vec{k} + \vec{G}|$ 성분에서 \vec{k} 방향으로 진행되는 전자기파가 \vec{G} 에 의해 에너지의 흐름 방향이 바뀌는 것이다.

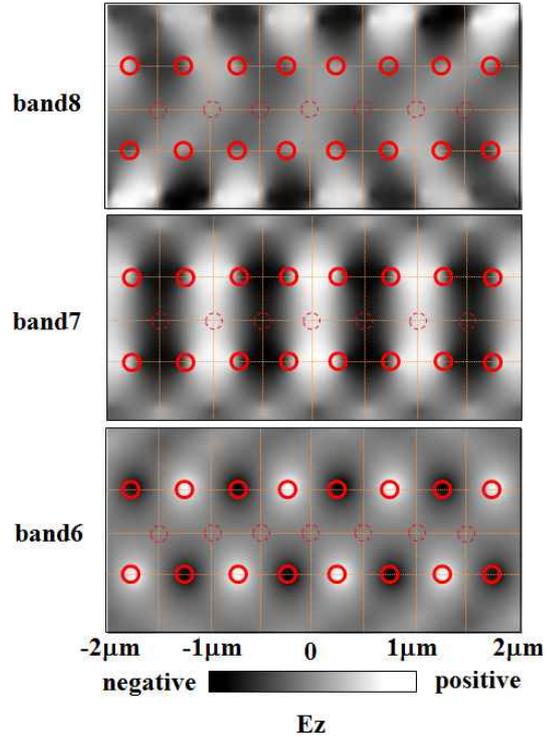


그림 5. $k_x=0.47664$ 일 때의 band에 따른 전기장 분포.
 Fig. 5. Band for the electric field distribution in $k_x=0.47664$.

그림 5는 waveguide mode(band7)의 군속도가 0이 되는 지점($k_x=0.47664$)에서 mode의 아래 밴드와 위쪽 밴드의 전기장 분포를 나타낸 것이다. 이 그림에서 보면 band 7에서는 결함을 가지는 원통에 전기장이 강하게 인가되어 있고 band6과 band8은 각기 원통과 원통 바깥쪽으로 전기장 분포가 크게 나타남을 알 수 있다. 이것으로 보아 band7은 band8에 영향을 강하게 받으며 또한 반발작용(repulsion)이 일어나 waveguide mode의 군속도가 0이 됨을 알 수 있다.

3. 결론

우리는 2차원 광결정에서 무한 크기의 삼각형 격자의 supercell과 선결함에 대해 논의하였다. 밴드갭 내에서는 전파되는 mode가 존재하지 않지만 결함을 넣었을 경우 밴드갭내에 waveguide mode가 존재함을 볼 수 있었다.

Waveguide mode가 $k_x=0.47664$ 일 때 군속도가 "0"이고 $k_x=0.47664$ 이후로 전자기파의 에너지 흐름이 반대로 바뀌었다. 이것은 정상파 상태에서 전자기파가 진행방향으로 나가지 못하고 진행 반대 방향으로 흐른다는 의미이다. 그러므로 식 (4)에서 $\vec{k} + \vec{G}$ 는 원래 진행 방향인 \vec{k} 방향의 반대 방향으로 에너지가 흐르므로 역격자벡터(\vec{G}_{mn})에 의해서 음의 군속도가 나옴을 알았다.

실공간(real space)에서 전자기파가 작은 굴절률을 가지는 매질에서 큰 매질로 이동할 때 위상 변화가 일어난다. 그러나 광 결정(reciprocal space)에서 $k_x=0.47664$ 일 때 실공간과 같은 현상이 일어났다. 이 속성은 $k_x=0.47664$ 가 실공간에서 경계면 효과를 갖는 것과 동일하다. 마치 광학 현상과 유사하게 볼 수 있다. 위상이 180° 바뀌는 것은 광학에서 보강소멸간섭에 중요한 요인이다. 광결정에서도 빛의 소멸보강간섭으로 빛을 제어할 수 있을 것이다.

참고 문헌

- [1] E. Yablonovitch, "Photonic crystals", Journal of Modern Optics, Vol. 41, No. 2, p. 173, 1994.
- [2] J. Semmel, L. Nahle, S. Hofling, and A. Forchel, "Edge emitting quantum cascade microlasers on InP with deeply one-dimensional photonic crystals", Appl. Phys. Lett., Vol. 91, p. 071104, 2007.
- [3] John D. Joannopoulos, "Photonic Crystals", Princeton Press, 1995.
- [4] E. Yablonovitch, "Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics", Phys. Rev. Lett., Vol. 58, No. 20, p. 2059, 1987.
- [5] C. O. Cho, Y. G. Roh, Y. S. Park, H. S. Jeon, B. S. Lee, H. W. Kim, and Y. H. Choe, "Photonic crystal slab waveguides fabricated by the combination of holography and photolithography", Jap. J. App. Phys., Vol. 43, No. 4A, p. 1384, 2004.
- [6] H. Y. Lee, H. Makino, T. Yao, and A. Tanaka, "Si-based omnidirectional reflector and transmission filter optimized at a wavelength of $1.55 \mu m$ ", Appl. Phys. Lett., Vol. 81, No. 24, p. 4502, 2002.
- [7] F. Wua, T. Wu, Z. Liu, and Y. Liu, "Effect of point defect geometry on localized defect modes in two-dimensional photonic crystals", Phys. Lett. A, Vol. 349, p. 285, 2006.
- [8] C. S. Kee, J. E. Lee, H. Y. Park, and K. J. Chang, "Defect modes in a two-dimensional square lattice of rods", Phys. Rev. B, Vol. 58, No. 6, p. 7908, 1998.
- [9] J. C. Knight, J. Broeng, T. A. Birks, P. St. and J. Russell, "Photonic band gap guidance in optical fibers", Science, Vol. 282, p. 1476, 1998.
- [10] H. Y. Lee, H. Makino, T. Yao, and A. Tanaka, "Si-based omnidirectional reflector and transmission filter optimized at a wavelength of $1.55 \mu m$ ", Appl. Phys. Lett., Vol. 81, No. 24, p. 4502, 2002.
- [11] L. Shen and S. He, "Analysis for the convergence problem of the plane-wave expansion method for photonic crystals", J. Opt. Soc. Am. A, Vol. 19, Issue 5, p. 1021, 2002.
- [12] Risto M. Nieminen, "Supercell Methods for Defect Calculations", Springer Berlin, Heidelberg, p. 22, 2006.
- [13] S. H. G. Teo, A. Q. Lui, and J. Singh, "Rod type photonic crystal optical line defect waveguides with optical modulations", Appl. Phys. A, Vol. 89, p. 417, 2007.
- [14] Samuel S. M. Cheng, L.-M. Li, C. T. Chan, and Z. Q. Zhang, "Defect and transmission properties of two-dimensional quasiperiodic photonic band-gap systems", Phys. Rev. B, Vol. 59, p. 4091, 1999-II.
- [15] K. Sakoda, "Optical Properties of Photonic Crystals", Springer-Verlag, Berlin, p. 32, 2001.