Journal of the Korean Institute of Electrical and Electronic Material Engineers, Vol. 22, No. 1, p. 61, January 2009.

논 문 22-1-11

FDTD 시뮬레이션을 이용한 정방형 2차원 광자결정에서의 광자 밴드갭 특성

Characteristics of the Photonic Bandgaps in Two-dimensional Photonic Crystals with a Square Lattice by FDTD Simulation

여종빈[1,2], 양회영[1,2], 이현용[1,3,a]
(Jong-Bin Yeo[1,2], Hoe-Young Yang[1,2], and Hyun-Yong Lee[1,3,a])

Abstract

Characteristics of the photonic bandgaps (PBGs) in two-dimensional photonic crystals (2D PCs) with a square lattice have theoretically studied using a finite difference time domain (FDTD) simulation. In this paper, we propose a concept of optical coverage ratio (OCR) as a new structural parameter to determine the PBGs for E-polarized light. The OCR is an optically compensated filling factor. It is possible to normalize the PBGs of 2D PCs by introducing the OCR.

Key Words : FDTD, Optical coverage ratio, Photonic bandgaps, Photonic crystals

1. 서 론

최근, 광-기반 연구 분야에서 특수하면서 우수한 광·전자 특성을 보이는 광자결정(photonic crystals; PCs)에 대한 많은 연구가 진행되고 있다[1, 2]. 광자결정은 일정 범위 내의 주파수를 갖는 전자기파의 전파를 금지시키거나 전파를 유도할 수 있기 때문에 광통신용 능·수동 부품 뿐만 아니라 광집적회로 등 많은 응용분야에 적용되고 있으며 점차 그 범위가 확대되고 있다[3-5].

서로 다른 유전율(굴절률)을 갖는 물질의 1, 2, 3 차원 주기적인 배열인 광자결정은 특정 주파수 영역의 광을 전파시키지 않고 모두 반사하는 특성을 가진다[6]. 이는 고체 전자물리학에서 원자의 주기적인 정전기적 포텐셜 내에 있는 전자가 가질 수 없는 에너지 영역인 전자적 밴드갭(electronic bandgap)과 유사한 개념으로써 광자결정학에서는 이러한 주파수 영역을 광자밴드갭(photonic bandgaps; PBGs)이라 한다.

또한 광자결정 구조에 국소적인 결함(defect)를 만들어 주면 그 결함으로 인하여 PBGs내에 전파가 가능한 결함모드를 만들어 줄 수 있다[7]. 이러한 결함모드를 적절히 설계함 으로써 필터, 공진기, 도파로 등에 응용할 수 있다[8-10].

광자결정 연구에서 구조체를 만드는 제작(패터닝) 기술[11-14] 만큼이나 중요한 것은 제작하려하는 기능성 광자결정 소자의 구조를 설계하는 이론적 계산 방법이다. 이는 제작·특성평가의 비용을 줄이는 것 뿐 아니라 광자결정의 기본 특성을 이해하는데 큰 역할을 한다. 본 연구에서는 유한차분 시간영역(finite difference time domain; FDTD) 시뮬레이션을 이용하여 정방형 기본격자를 갖는 2차원 광자결정의 TM-편광모드에서의 PBGs 특성을 고찰, 평가하였다.

1. 전남대학교 BK21 기능성나노신화학소재사업단 (광주시 북구 용봉동 300)
2. 전남대학교 신화학소재공학과
3. 전남대학교 응용화학공학부 촉매연구소
a. Corresponding Author : hyleee@chonnam.ac.kr
접수일자 : 2008. 11. 11
1차 심사 : 2008. 12. 16
심사완료 : 2008. 12. 23

2. 시뮬레이션 방법 및 내용

2.1 모델링 및 변수 설정

그림 1은 본 연구에서 고려한 정방형 2차원 광자결정의 구조와 설정된 구조적 매개변수들을 표시한 개략도이다.

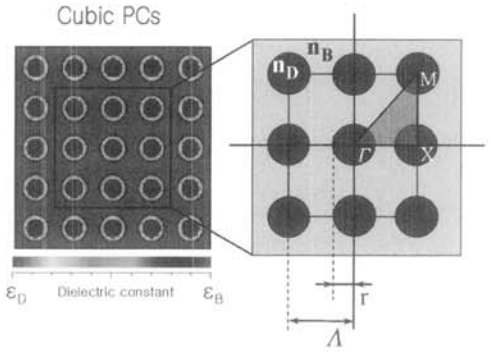

그림 1. 계산에 사용된 정방향 2차원 광자결정 구조와 매개변수.

Fig. 1. Schematic diagram of the studied square-lattice 2D photonic crystal and the structural parameters.

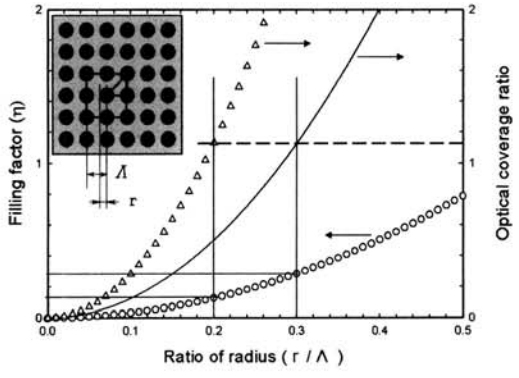

그림 2. Dot 반지름 변화에 따른 정방형 광자결정의 기하학적 채움지수와 광학적 보상을 고려했을 경우의 광학적 채움비율; ○기하학적 채움지수, —와 △는 각각 n_B=1 에 대한 n_D=2와 n_D=3 인 경우의 광학적 채움비율.

Fig. 2. Optical coverage ratio (OCR) and geometric filling factor (η) of the square-lattice 2D PC as a function of the ratio of radius; ○ = η, — = OCR for n_D=2 (n_B=1), △ = OCR for n_D=3 (n_B=1).

그림 1의 좌측 그림은 정방형 광자결정 구조의 유전률 분포를 나타내고 우측 그림은 실격자 구조 및 구조 매개변수를 보여준다. 여기서 n_B, n_D는 각각 바탕면과 dot 영역의 굴절률을 의미한다. 우측 그림 내부의 큰 사각형은 계산에서 사용된 기본 격자를 나타낸다. 정방형 광자결정의 Wigner-Seitz 단위격자 역시 정방형이며 Γ, X, M 은 기초 브릴리앙 영역(irreducible brillouin zone)의 기준 경계점으로 이 영역의 특성으로써 전체 영역의 특성을 알 수 있다. r은 dot의 반지름, Λ는 주기를 나타낸다. 본 연구에서는 Λ를 1로 정하여 r값을 계산하였다.

그림 2는 r값의 변화에 따른 기하학적 채움지수(η)과 광학적 채움비율(OCR)을 나타낸 그래프이다. 그림 2에서 점선은 OCR이 1.13인 지점을 표시하며, 두개의 세로 실선은 각각 n_D가 2와 3인 경우를 보인다. 즉, 일정 OCR에 대해 r은 n_B 및 n_D의 함수로 주어진다.

2.2 광학적 채움비율의 정의

광학적 채움비율이란 기하학적 채움지수에 광학적 특성인 굴절률 항을 넣어 규격화 시킨 인자이다. 이는 실 거리에 굴절률을 포함시키므로 광경로를 얻는 것과 같은 논리로 일반적인 기하학적 채움지수와 본 연구에서 정의한 광학적 채움비율은 아래 식과 같이 정의된다.

$$\eta = \frac{dot\ Area}{total\ Area} = \frac{4 \cdot \pi \cdot r^2}{(2 \cdot \Lambda)^2} \tag{1}$$

$$\mathrm{OCR} = \frac{optical\ dot\ area}{optical\ total\ area} = \frac{4 \cdot \pi \cdot (r \cdot n_D)^2}{(2 \cdot \Lambda \cdot n_B)^2} \tag{2}$$

상기 제시한 구조 모델과 정의된 광학적 채움비율을 이용하여 FDTD 시뮬레이션으로 정방형 2차원 광자결정의 광 금지대 특성을 고찰하였다.

3. 결과 및 고찰

식(2)에 의하여 인자 r은 (3)식과 같이 단순화할 수 있다.

$$r = \sqrt{\frac{OCR \cdot n_B^2}{\pi \cdot n_D^2}} \tag{3}$$

OCR=1.13 조건에 대해 n_B 및 n_D 변화에 따른 r 값을 표 1에 나타내었다. 여기서 Δ는 굴절률 비율(index ratio; n_D/n_B)이다.

표 1. OCR = 1.13 일 때의 n_B와 n_D에 따른 dot 반지름 r의 계산된 값.

Table 1. Calculated radius at OCR = 1.1304.

n_B \ $n_D - n_B$	1	2	3	4
1	0.300	0.200	0.150	0.120
2	-	0.300	0.240	0.200
3	-	-	0.300	0.257
4	-	-	-	0.300

표 1에서 -표시는 시뮬레이션 결과 TM-편광에 대해 광자금지대가 생성되지 않은 영역으로써 후에 설명하도록 한다. 그리고 r = 0.30으로 동일한 조건은 n_D/n_B = 1 로써 Δ가 일정할 때이다. 이는 동일한 Δ에서는 항상 같은 반지름 r 값으로 계산된다는 것을 나타낸다.

그림 3은 표 1에서 계산된 동일 OCR(=1.13) 조건의 r 값, n_D (n_B=1) 값을 대입하여 모사된 광학 밴드 구조를 나타낸다.

동일 OCR 조건에서 dot 영역의 굴절률이 증가할수록 반지름은 감소하며, 그림 3의 조건의 경우 n_B = 1일 때 Δ = 2, 3, 4, 5 는 각각 r=0.300, 0.200, 0.150, 0.120 에 대응한다. 그림 1의 —과 △의 비교에서 알 수 있듯이 r의 감소는 n_D 배수의 역수로 나타남을 알 수 있다. 즉 n_D가 2, 3, 4, 10 배로 증가할 경우 반지름은 각각 1/2, 1/3, 1/4, 1/10 배가 된다.

그림 3의 조건(OCR=1.13)에서 PBG는 Δ가 1.83 보다 클 경우 생성되는데 이때 PBG가 열리기 시작하는 시점의 주파수를 문턱 주파수 ω_0로 정의한다. 그림 3에서 보는바와 같이 동일 OCR 조건에서 생성되는 PBG는 항상 ω_0를 포함하면서 점점 PBG 범위를 넓혀감을 알 수 있다. 이는 기존의 연구 결과와 같이 두 물질의 굴절률 차이가 커지기 때문에 PBG가 넓어진 것으로 해석된다. 여기서 PBG가 높은 주파수 보다 낮은 주파수 영역으로 급격한 확대가 이루어 지는 이유는 PBG의 기본 주파수 스펙트럼이 다음과 같이 표현되는 것으로부터 이해될 수 있다.

$$\omega(k) = \frac{ck}{\sqrt{\varepsilon}} \tag{4}$$

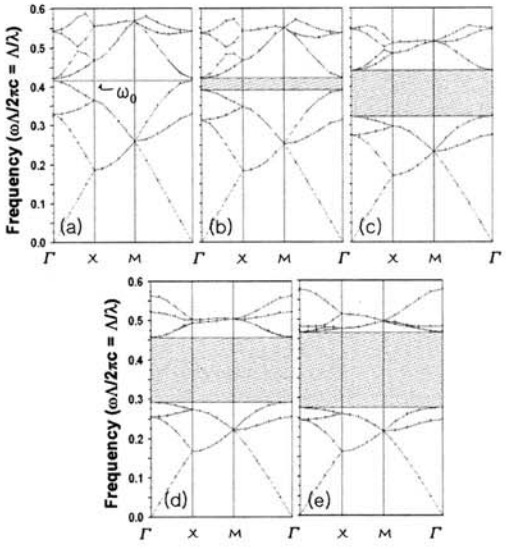

그림 3. n_B = 1, OCR = 1.13 일 경우 n_D 변화 (r 변화)에 따라 전산모사 된 광학 밴드 구조; 각각 Δ가 1.83, 2, 3, 4, 5.

Fig. 3. The photonic band structures of square-lattice 2D PCs; simulated as a function of n_D (n_B = 1, OCR = 1.13). (a), (b), (c), (d) and (e) are for Δ= 1.83, 2, 3, 4 and 5, respectively.

식(4)에 의하여 전파 되는 대역이 계산되는데 여기서 ε은 유전률 항을 나타내므로 굴절률의 변화에 따라서 전파 주파수의 변화가 생기게 된다. 즉 PBG 영역의 아래 전파 밴드는 주로 n_D 특성으로 정의되는 밴드 영역이고 위쪽 전파 밴드는 n_B 특성으로 정의되는 밴드 (n_B=1인 경우 air band라 함) 영역으로써 n_D 값의 변화에 의하여 급격한 확대가 이루어진다[6].

그림 4는 n_B = 1 일 때 광자 금지대의 upper 밴드와 lower 밴드를 n_D (혹은 r) 변화에 대하여 나타낸 그래프이다. 이 그래프에서도 볼 수 있듯이 PBG 확대가 ①영역 보다는 ②영역에서 더욱 크게 이루어 짐을 알 수 있다.

특히 OCR = 1.13 에서 PBG 생성 임계 조건은 $\Delta \geq 1.83$ 이었으며 이때의 문턱주파수 ω_0=0.4174 이었다. 예를들어, n_B=1, n_D=1.83, r=0.65557/Λ 조건의 정방형 2D PC에서 ω_0=0.4174 이므로, Λ=1 μm로 제작되어 질 경우 $\lambda=\Lambda/\omega_0$=2.12 μm가 된다.

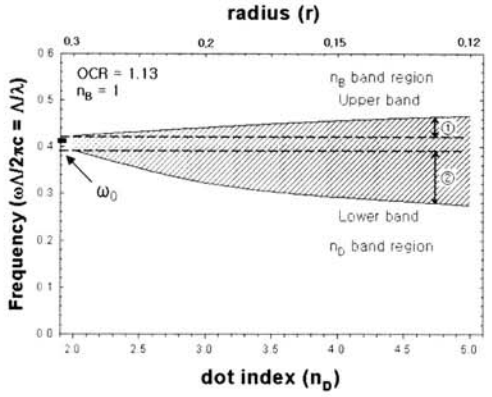

그림 4. n_B=1 (OCR=1.13) 일 때 n_D 변화에 따른 광자 금지대의 upper 밴드, lower 밴드의 변화; ① upper 밴드 확장, ② lower 밴드 확장.

Fig. 4. Changes of upper and lower band in PBG (OCR=1.13, n_B=1) as a function of n_D; ① upper band expansion, ② lower band expansion.

그림 5는 동일 OCR 조건에서 n_B의 변화에 따른 PBG의 upper, lower 밴드의 변화 및 ω_0의 변화를 나타낸 그래프이다. 그림 5에서 굵은 실선은 각 n_B에서의 ω_0에 해당하는 값이다. 그림 5에서 보는 바와 같이 n_B의 증가에 따라 밴드는 낮은 주파수 영역으로 천이함을 알 수 있으며 n_B를 곱하여 광학적으로 정규화 시켜주면 일정한 주파수값이 된다는 것을 알 수 있다. 이는 OCR로써 모든 광자결정의 정규화가 가능하다는 것을 보여준다. 마찬가지로 n_B의 증가에 따라 광자 금지대의 폭이 줄어드는 것을 볼 수 있지만 이를 정규화 함에 따라 같은 크기의 광자 금지대를 형성하는 것으로 보아 광자 금지대 영역의 크기에도 OCR 기본 개념인 광학적 물성이 관련 되어 있음을 알 수 있다.

표 1에서 예측되는 바와 같이 동일 Δ 조건에서는 반지름 값 r은 항상 같게된다. 예를들어 OCR = 1.13 (n_B = 1)일 경우 Δ = 2 일 때 반지름 r은 항상 $0.3/\Lambda$로 일정하며 Δ = 3 일 때 반지름은 항상 $0.2/\Lambda$로 일정하다. 이는 (5)식에서 $(2 \cdot n_B)^2 / n_D^2$ 의 항이 항상 일정하기 때문이다. 표 2는 같은 Δ 일 때 서로 다른 n_B 의 경우 n_D와 r 값을 비교한 표이다. 표 2에서 볼 수 있듯이 다른 조건에 영향없이 Δ가 일정할 경우 dot 반지름은 일정함을 볼 수 있다.

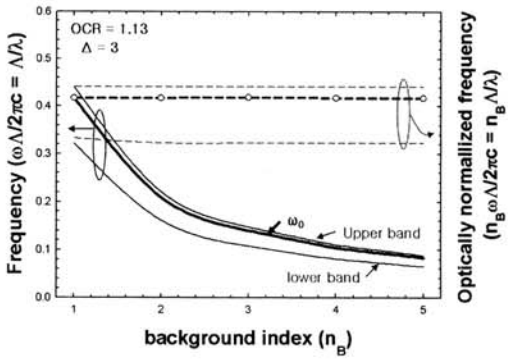

그림 5. OCR=1.13의 정방형 2D PC에서 n_B 변화에 따른 ω_0와 $\Delta = 3$ 조건에서 PBG의 upper, lower 밴드의 변화; 실선은 계산된 주파수값, 파선은 계산된 주파수값에 n_B를 곱하여 광학적으로 정규화 시킨 값 ; 굵은 선은 ω_0, 가는 선은 각각 upper, lower 밴드.

Fig. 5. Changes of ω_0, upper and lower bands as a function of n_B in PBGs (OCR =1.13, $\Delta = 3$). Broken lines show the optically normalized frequencies.

표 2. OCR = 1.13 이고 Λ = 1 일 때 Δ의 변화와 서로 다른 n_B 에서 n_D와 r의 비교.

Table 2. Comparison of n_D and r as functions of Δ and n_B (OCR = 1.1304, Λ = 1).

n_B \ Δ	2	3	4	5
1	n_D=2	3	4	5
	r=0.30	0.20	0.15	0.12
2	n_D=4	6	8	10
	r=0.30	0.20	0.15	0.12
3	n_D=6	9	12	15
	r=0.30	0.20	0.15	0.12
4	n_D=8	12	16	20
	r=0.30	0.20	0.15	0.12

표 2의 조건들에 대해 얻어진 광자밴드구조를 그림 6에 보였다. 여기서 PBG는 각각 금지대에 n_B 값을 곱해서 광학적으로 보상해주게 되면 n_B = 1의 광자 금지대와 일치하게 된다. 이는 앞서 그림 5에서 설명한 바와 같다.

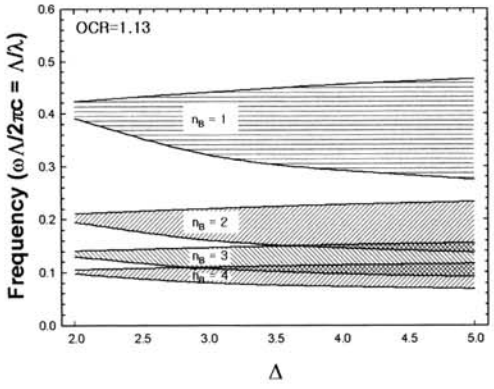

그림 6. OCR = 1.13 일 때 Δ 변화에 따른 각 n_B(=1, 2, 3, 4)에서의 광자 금지 밴드 변화.

Fig. 6. Changes of photonic bandgaps for n_B = 1, 2, 3 and 4 as a function of Δ (OCR = 1.13).

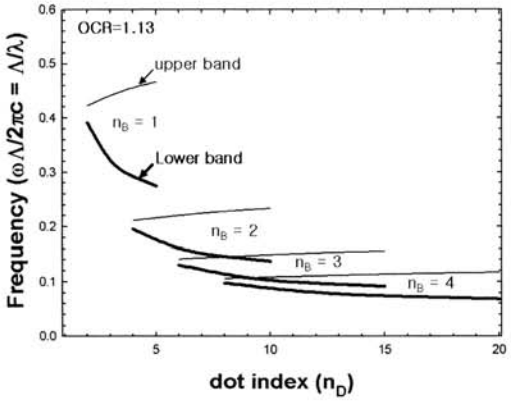

그림 7. OCR = 1.13 이고 Δ = 2, 3, 4, 5 일 경우 각 n_B에서 n_D의 변화에 따른 PBGs.

Fig. 7. PBGs of n_B as a function of n_D at OCR = 1.13 and Δ = 2, 3, 4 and 5, respectively.

그림 7은 같은 Δ(= 2, 3, 4, 5)일 경우 각 n_B에서 n_D에 따른 광자 금지 밴드를 나타낸 그림이다. 위에서부터 차례대로 n_B = 1, 2, 3, 4 일 경우의 광자 금지 밴드를 나타내며 가는 실선은 광자 금지 밴드의 upper 밴드, 굵은 실선은 lower 밴드를 나타낸다.

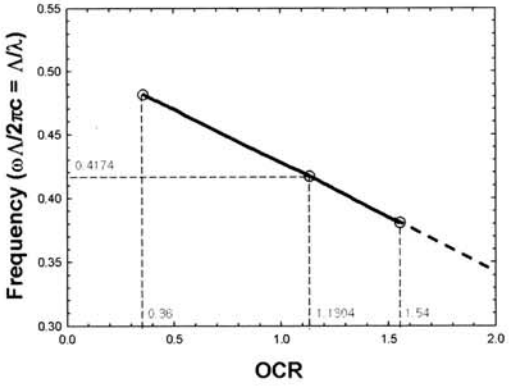

그림 8. OCR의 변화에 따른 문턱조건에서의 광자 금지 주파수의 변화.

Fig. 8. Change of Photonic bandgap frequency of threshold condition at changed OCR.

그림 8은 다양한 OCR을 가진 구조에서 문턱주파수 ω_0의 변화를 나타낸 그림이다. 여기서 광자 금지 밴드를 갖기 시작하는 점은 OCR = 0.36 일 때 이며 본 연구에서 사용된 OCR = 1.13에서는 ω_0 = 0.4174의 문턱 주파수를 가지게 된다. 또한 PBG 생성 임계 조건으로는 OCR $\geq$ 499.8 영역과 $r \geq 0.4345/\Lambda$에서는 PBG가 없어지는 것을 확인할 수 있었다.

4. 결 론

집적광학의 필요성이 대두되고 있는 시점에서 이에 대한 기반기술로 인식되고 있는 광자결정의 특성을 예측하고 표준화 하는 것은 매우 중요하다 할 수 있다. 기존의 연구 결과들을 통하여 1차원 광자결정의 특성은 표준화 되어 있는 상황이지만 구조의 다양성을 갖는 2차원 광자결정의 특성을 표준화 되어 있지 않다. 특히 기본적인 2차원 광자결정 구조 특성을 표준화 함으로써 최근 연구되고 있는 특수 목적의 광자준결정 (photonic quasi-crystals)의 특성 연구까지 도움이 될 수 있다.

본 논문에서는 FDTD 시뮬레이션 방법을 이용하여 정방형 2차원 광자결정 구조의 특성을 계산하고 표준화 시킴으로써 광자 금지 특성을 조사하였다. 본 연구에서 얻어진 결과를 요약하면 다음과 같다. (1) 동일한 OCR을 갖는 구조에서 동일하거나 유사한 광자 금지 영역이 나타나고 이는 n_B에 역수배의 관계가 있음을 알 수 있었다. (2) 광자

금지대 upper 밴드와 lower 밴드 영역는 n_B 물질과 n_D 물질에 영향을 받기 때문에 변화량이 차이가 난다. (3) 광자 금지 밴드를 갖기 위한 OCR 문턱값이 존재하며 이를 이용하여 광자 금지대를 갖는 구조를 쉽게 설계할 수 있다. 이에 대한 설명으로 본 논문에서 제시한 광학적 채움지수(OCR)라는 인자(foactor)를 정의함으로써 다양한 특성을 표준화 하였다.

이상과 같이 기본적인 정방향 2차원 광자결정의 다양한 구조를 설계하여 계산하였으며 특성을 표준화 함으로써 광자결정의 실제 설계 및 특성 연구에 대한 기초 연구를 하였다. 현재 육방형 2차원 광자결정과 광자-준결정의 특성을 OCR을 이용한 표준화 작업을 진행중에 있다.

감사의 글

이 논문은 2007년 정부의 재원으로 한국학술진흥재단의 지원을 받아 수행된 연구임 (KRF-2007-412-J02003). 또한 이 연구의 주요 계산은 한국과학기술정보연구원(KISTI)이 무상으로 제공한 컴퓨팅 자원을 이용하여 수행되었음. 본 연구에 많은 도움을 준 교육인적자원부 BK21 기능성 나노 신화학소재 사업단에 감사의 말씀을 드립니다.

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] E. Yablonovitch, "Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics", Phys. Rev. Lett., Vol. 58, No. 20, p. 2059, 1987.

[4] 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.

[5] H. Y. Lee, H. Makino, T. Yao, and A. Tanaka, "Si-based omnidirectional reflector and transmission filter optimized at a wavelength of 1.55 μm", Appl. Phys. Lett., Vol. 81, No. 24, p. 4502, 2002.

[6] John D. Joannopoulos, "Photonic Crystals", Prinston Press, 1995.

[7] J. D. Joannopoulos, P. Villeneuve, and S. Fan, "Photonic crystals: putting a new twist on light", Nature, Vol. 386, p. 143, 1997.

[8] 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.

[9] H. Y. Lee, H. Makino, T. Yao, and A. Tanaka, "Si-based omnidirectional reflector and transmission filter optimized at a wavelength of 1.55 μm", Appl. Phys. Lett., Vol. 81, p. 4502, 2002.

[10] E. Yablonovitch, T. J. Gmitter, R. D. Meade, A. M. Rappe, K. D. Brommer, and J. D. Joannopoulos, "Donor and acceptor modes in photonic band structure", Phys. Rev. Lett., Vol. 67, p. 3380, 1991.

[11] J. B. Yeo, S. D. Yun, and H. Y. Lee, "Realization of dot- and antidot type two-dimensional photonic crystals by double holographic method", J. Appl. Phys., Vol. 102, p. 084502, 2007.

[12] J. B. Yeo, S. D. Yun, and H. Y. Lee, "Influence of substrate and structure on Ag-photodoping into amorphous GeSe film by holographic method", J. Kor. Phys. Soc., Vol. 52, No. 2, p. 435, 2008.

[13] 여종빈, 윤상돈, 이현용, "광자결정 제작을 위한 홀로그라피 공정 연구", 전기전자재료학회논문지, 20권, 8호, p. 726, 2007.

[14] 윤상돈, 여종빈, 이현용, "다중-노출 홀로그라피 방법을 이용한 광자준결정 제작", 전기전자재료학회논문지, 21권, 9호, p. 829, 2008.