

行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告

光子晶體結構之可行性探討(II)

計畫編號：NSC 90-2215-E-009-071-

執行期限：90 年 08 月 01 日至 91 年 07 月 31 日

主持人：謝太炯 tchsieh@cc.nctu.edu.tw

執行機構及單位名稱：交通大學電子物理系

計畫參與人員：陳科遠，王玉璽

執行機構及單位名稱：交通大學電子物理系

一、中文摘要

本期主要繼續上期理論探討光子晶體之工作，使用平面波展開法 (planer-wave expansion method) 及傳遞矩陣法 (transfer-matrix method) 探討光子能隙結構的色散關係與穿透效率等波動特性。本工作嘗試模擬在半導體基質建構光子能隙結構的可行性，以整合微電子電路及光子元件於同一基質。

關鍵詞：光子晶體、光子能隙、

Abstract

This work is the second part of a feasibility study on the photonic bandgap structures. Theoretically, both the plane wave expansion method and the transfer-matrix method are exploited to the photonic crystal analysis. In the special case, when the semiconductor substrate is used to fabricate the photonic bandgap structure, the conductivity of a highly doped substrates would affect the wave propagation within. In this situation, the transfer-matrix method is found more adequate than the plane wave expansion method for the analysis. An optical filter based on the one-dimensional photonic bandgap structure is studied detailed that is assumed to be on the silicon chip and the working wavelength is centered at 1500 nm.

Keywords: photonic bandgap structures, optical filters

二、緣由與目的

本計畫試定位為前瞻性的探討，主要為理論計算，使用 Bloch 模式 [1, 2] 分析光子能隙，以了解電磁波動在光子晶體結構內的傳輸性質，尋找光子晶體的設計參數，並在未來推演這些知識到半導體光子晶體元件的研究。

三、計劃執行的結果與討論

理論分析方法簡述：

從 Maxwell 方程式，考慮材料的參數 ϵ ， μ ，及 σ ，

並且假設時間諧波 $\exp(i\omega t)$ ，加以整理可得

$$\nabla \times \left(\frac{\nabla \times \vec{H}}{\epsilon_r(\vec{r}) - \frac{\sigma}{i\omega\epsilon_0}} \right) = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{H} \quad (1)$$

若電導係數 σ 可以忽略，我們採用 Bloch mode 之分析法，如上期工作，假設晶格倒置相量 \vec{G} ，將波函數及介質分布函數 $\epsilon(\vec{r})$ 以 Fourier 級數展開，例如

$$\frac{1}{\epsilon_r(\vec{r})} = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{G}} e^{i(\vec{G}\cdot\vec{r})}, \text{ 其中 } C_{\vec{G}} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \frac{1}{\epsilon_r(\vec{r})} e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} d\tau,$$

及 Ω 為單位晶格體積。磁場 H 可以寫成平面波的疊加

$$\vec{H}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \sum_{\lambda=1,2} h_{\vec{G},\lambda} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\cdot\vec{r}} \hat{e}_{\lambda},$$

選擇 \hat{e}_{λ} 垂直於向量 $\vec{k} + \vec{G}$ ，代入式(1)並且整理得下式(2)

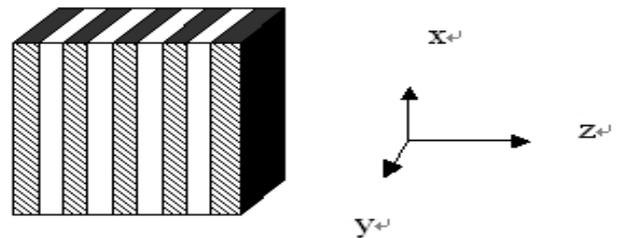
$$\sum_{\vec{G}'} \sum_{\lambda'=1,2} \Theta_{\vec{G},\vec{G}',\lambda,\lambda'} h_{\vec{G}',\lambda'} = \frac{\omega^2}{c^2} h_{\vec{G},\lambda} \quad (2)$$

其中 $\Theta_{\vec{G},\vec{G}',\lambda,\lambda'} = C_{\vec{G}-\vec{G}'} [(\vec{k} + \vec{G}') \times \hat{e}_{\lambda'}] \cdot [(\vec{k} + \vec{G}) \times \hat{e}_{\lambda}]$ ，或以矩陣表之

$$\Theta_{\vec{G},\vec{G}'} = \left| \vec{k} + \vec{G}' \right| \cdot \left| \vec{k} + \vec{G} \right| C_{\vec{G}-\vec{G}'} \begin{bmatrix} \hat{e}_2 \cdot \hat{e}_2 & -\hat{e}_2 \cdot \hat{e}_1 \\ -\hat{e}_1 \cdot \hat{e}_2 & \hat{e}_1 \cdot \hat{e}_1 \end{bmatrix}$$

在本工作主要使用式(2)於一維及二維空間結構之光子晶體的探討。

圖(Fig.1) 示意探討的光子晶體，沿 z-軸以週期 a(晶格常數) 排列 ϵ_a 及 ϵ_b 的介質，其厚度分別為 a-b 及 b。



圖(Fig. 1.) 一維光子能隙結構

若電磁波斜向射入這個一維光子晶體結構，設 $\vec{k} + \vec{G}$ 在 $y-z$ 平面，即 $\vec{k} = \vec{k}_y + \vec{k}_z$ 。我們可以取 \hat{e}_1 同 x 軸向，其他之 \hat{e}_2 在 $y-z$ 平面上。當磁場 H 成 x 方向之極化時，其 \hat{e}_2 方向之分量 $h_{G,2} = 0$ 。因為

$$\hat{e}_1 \cdot \hat{e}_2 = \hat{e}_2 \cdot \hat{e}_1 = 0, \text{ 則}$$

$$\Theta_{G, \sigma, 1, 1'} = \left| \vec{k} + \vec{G}' \right| \cdot \left| \vec{k} + \vec{G}'' \right| C_{G-G'} \hat{e}_2 \cdot \hat{e}_2'$$

$$= C_{G-G'} (\vec{k} + \vec{G}') \cdot (\vec{k} + \vec{G}'')$$

從式(2).

$$\frac{\omega^2}{c^2} h_{G,1} = \sum_{G'} C_{G-G'} [k_y^2 + (k_z + G_z)(k_z + G_z')] h_{G,1} \quad (3)$$

另一個可能的極化情形為 H 在 $y-z$ 平面，則

$$h_{G,1} = 0, \text{ 且 } \Theta_{\vec{G}, \vec{G}', 2, 2'} = \left| \vec{k} + \vec{G}' \right| \cdot \left| \vec{k} + \vec{G}'' \right| C_{\vec{G}-\vec{G}'}, \text{ 結果}$$

$$\text{可得式(4)}$$

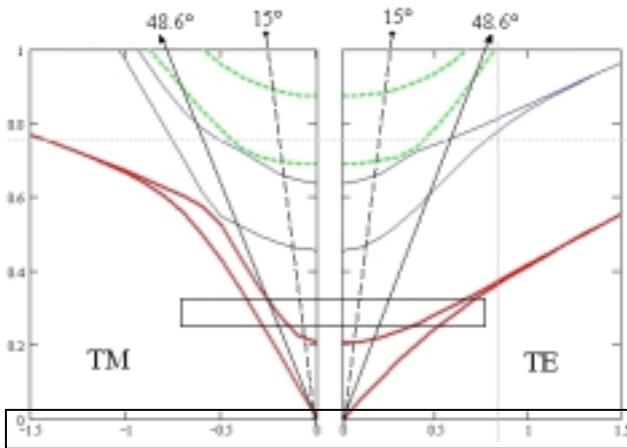
$$\frac{\omega^2}{c^2} h_{G,2} = \sum_{G'} C_{G-G'} \sqrt{[k_y^2 + (k_z + G_z)^2][k_y'^2 + (k_z + G_z')^2]} h_{G,2} \quad (4)$$

$$\text{其中係數 } C_{G-G'} = \frac{1}{a} \int_0^a \frac{1}{\epsilon(z)} e^{-i(G-G')z} dz.$$

實際使用 Mathcad 進行式(3, 4)之數值計算時 $G_z = 2\pi/a$ 且

$$C_{G-G'} = C(n) = \frac{1}{a} \left[\int_0^b \frac{1}{\epsilon_b} e^{-inGz} dz + \int_b^a \frac{1}{\epsilon_a} e^{-inGz} dz \right]$$

下圖(Fig. 2)示一個光子能隙的求解，詳細的計算步驟可見於碩士論文[3]。



圖(Fig.2) 光子能隙的模擬計算，以 k_z 為計算參數。縱軸是頻率 $\omega \cdot a / 2\pi c$ ，橫軸為波數向量值 $k_y \cdot a / 2\pi$ ，

右半部(TE)是 H 在 x 方向之極化情況，左半部(TM)為 H 在 $y-z$ 平面之極化情形，頻率間隙可以從縱軸的刻度讀出。

若不忽略式(1)之 σ/ω ，以下簡述本計畫使用傳遞矩陣法的分析，但此處只嘗試波動垂直入射的情形。在圖(Fig. 1.)的一維光子能隙結構，在不同介質的區域的平面波表式如下：

$$E(z)_I = A \cdot e^{ik_1 z} + B \cdot e^{-ik_1 z} \quad (z < 0)$$

$$E(z)_{II} = C \cdot e^{ik_2 z} + D \cdot e^{-ik_2 z} \quad (0 \leq z \leq b)$$

$$E(z)_{III} = E \cdot e^{ik_1(z-b)} + F \cdot e^{-ik_1(z-b)} \quad (b < z < a)$$

其中 $k_s = i\alpha_s + \beta_s$ ，以標號 $s = 1, 2$ 分別代表不同的介質，

$$\alpha_s = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_{rs}}{2} \left[\sqrt{1 + \left(\frac{\sigma_s}{\omega \epsilon_0 \epsilon_{rs}} \right)^2} - 1 \right]^2},$$

$$\beta_s = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_{rs}}{2} \left[\sqrt{1 + \left(\frac{\sigma_s}{\omega \epsilon_0 \epsilon_{rs}} \right)^2} + 1 \right]^2}$$

各別波動之振幅 (A, B) , (C, D) and (E, F) 之間的關係可以從邊界連續條件，即在不同介質之界面 $E(z)$ 及 $\frac{d}{dz} E(z)$ 須連續，推導出來。定義以下的兩個矩陣：

$$D_s = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ ik_s & -ik_s \end{bmatrix} \text{ 及 } P_s = \begin{bmatrix} e^{ik_s d_s} & 0 \\ 0 & e^{-ik_s d_s} \end{bmatrix}, \text{ 其中}$$

$d_1 = b$ 和 $d_2 = a - b$ 分別是兩種材質的厚度。從上述的邊界條件連續要求，經由一些式子推演可以得到：

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = D_1^{-1} [D_2 P_2^{-1} D_2^{-1}] [D_1 P_1^{-1} D_1^{-1}] [D_2 P_2^{-1} D_2^{-1}] D_1 \begin{bmatrix} E' \\ F' \end{bmatrix}$$

表示在位置 $z = 0$ 入射波的振幅 (A, B) 和在 $z = a+b$ 出來波的振幅 (E', F') 的傳遞關係，即波動穿越圖(Fig. 1.)一層交互變化之介質結構。若穿越兩層，其表式為

$$M^{(2)} = D_1^{-1} [D_2 P_2^{-1} D_2^{-1}] [D_1 P_1^{-1} D_1^{-1}] [D_2 P_2^{-1} D_2^{-1}] D_1.$$

依此，推展至 N 層之一維光子能隙結構變成為

$$M^{(N)} = D_1^{-1} \{ [D_2 P_2^{-1} D_2^{-1}] [D_1 P_1^{-1} D_1^{-1}] \}^{N-1} [D_2 P_2^{-1} D_2^{-1}] D_1,$$

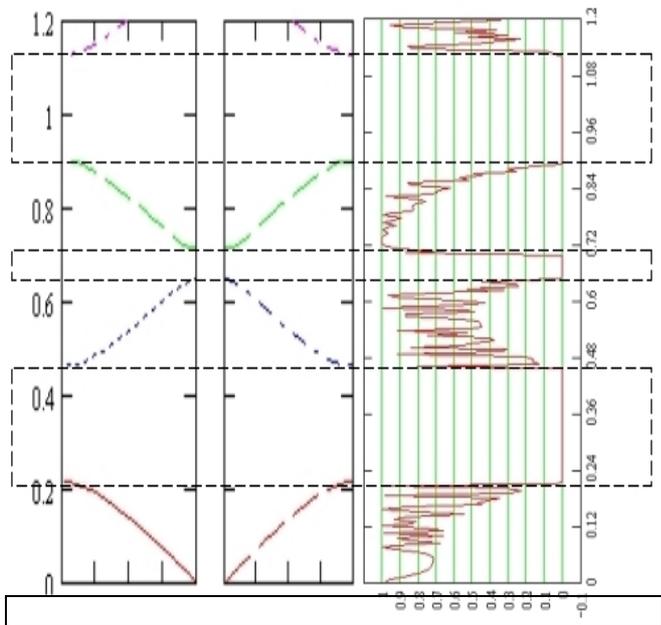
$$\text{或 } M^{(N)} = D_1^{-1} \{ [D_2 P_2^{-1} D_2^{-1}] [D_1 P_1^{-1} D_1^{-1}] \}^N D_1 P_1.$$

N 層之一維光子能隙結構的傳遞關係可以用矩陣描述

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = M^{(N)} \begin{bmatrix} E \\ F \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E \\ F \end{bmatrix} \quad (5)$$

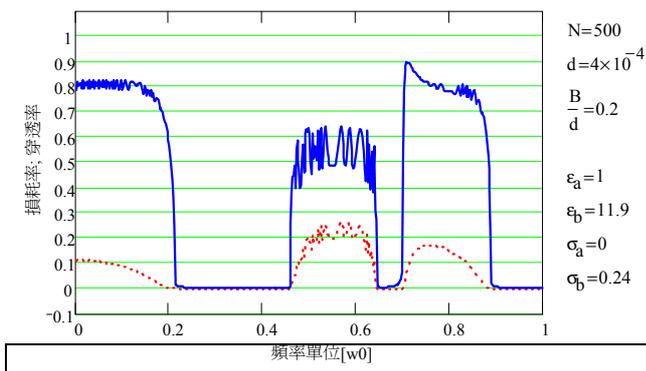
其中 (A, B) 為在入射面波的振幅， (E, F) 是波從輸出面出來的振幅。依式(5)，波動之穿透率 T 及反射率 R 可以用公氏計算出； $T = t^* t$ 且 $t = E/A = 1/M_{11}$ 及

$R = r^* r$ 且 $r = B/A = M_{21}/M_{11}$ 。穿越結構造成波動的吸收率則為 $Absorption = 1 - (R + T)$ 。圖(Fig3)舉例說明傳遞矩陣法在電導係數 $\sigma=0$ 光子能隙的分析，是由矩陣方程式(5)所計算，此結果與式(2)之平面波展開法所獲得之頻率間隙一致。關於使用式(5)的計算，其詳細步驟同樣可見於碩士論文[3]。



圖(Fig. 3) $\sigma=0$ 時傳遞矩陣法在光子能隙的分析(右半部，縱軸是頻率 $\omega \cdot a/2\pi c$ ，橫軸是穿透率 T)，圖示頻率間隙與平面波展開法一致(左半部，縱軸是頻率 $\omega \cdot a/2\pi c$ ，橫軸為波數向量值 $k_y \cdot a/2\pi$)

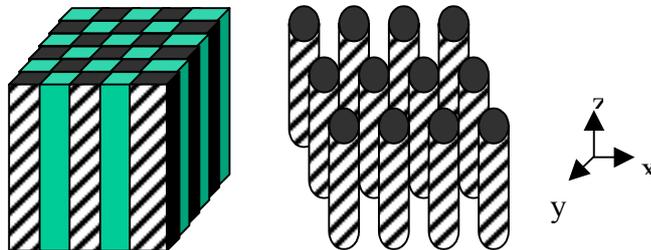
圖(Fig. 4)是一個例子，說明以傳遞矩陣法模擬有限電導係數的分析，即考慮 σ/ω 效應對光子能隙影響。



圖(Fig. 4) 模擬圖(Fig. 1)之光子晶體結構在矽基質內 $\sigma=0.24 \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ 的情形，晶格週期 $a=4 \mu\text{m}$ ，矽佔 $0.2a$ 。縱軸之表示是：細虛線為穿透率，粗實線為損耗率，橫軸單位為 $(\frac{\omega \cdot a}{2\pi c})$ ，頻率間隙發生在下面範圍： $\text{Gap}=0.208\sim 0.458$ 、 $0.646\sim 0.700$ 、 $0.886\sim 1.121$ 。此模擬顯示電導係數對材質吸收波動能量的效應。

在半導體基質製作光子能隙結構，電導係數是否會影響電磁波動的行進性質，仍須詳加探討，此處只是以模擬方式研究電導係數可能對波動在光子能隙的影響。上述之分析結果可以應用在光學濾波器的設計。

二維空間結構之光子晶體其示意如圖(Fig. 5)



圖(Fig. 5) 二維光子晶體

圖(Fig. 5)之分析同樣忽略電導係數 σ ，以求解 Bloch mode，簡述如下；x-y 平面上定義晶格向量 \vec{t}_1 和 \vec{t}_2 ，在 z 軸上定義一個向量 \vec{t}_3 ，使得 $\epsilon(\vec{r} + m\vec{t}_1 + n\vec{t}_2 + p\vec{t}_3) = \epsilon(\vec{r})$ (其中 m、n、p 為任意整數)，得到倒晶格向量 $\vec{g}_i = \frac{2\pi\epsilon_{ijk}}{\Omega} \vec{t}_j \times \vec{t}_k$ ，(其中 i, j, k=1, 2, 3; $\epsilon_{ijk}=0, 1, -1$)

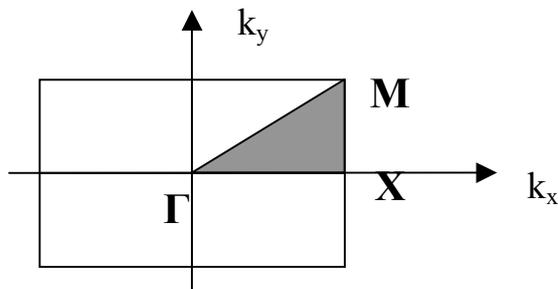
因此介電係數的倒數可以 Fourier 展開成

$$\frac{1}{\epsilon(\vec{r})} = \sum_m \sum_n C(m, n) e^{i(m\vec{g}_1 + n\vec{g}_2) \cdot \vec{r}}$$

其中 $C(m, n) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \cdot e^{-i(m\vec{g}_1 + n\vec{g}_2) \cdot \vec{r}} d^2\vec{r}$ ，代入式(2)，

計算二維光晶的色散關係。

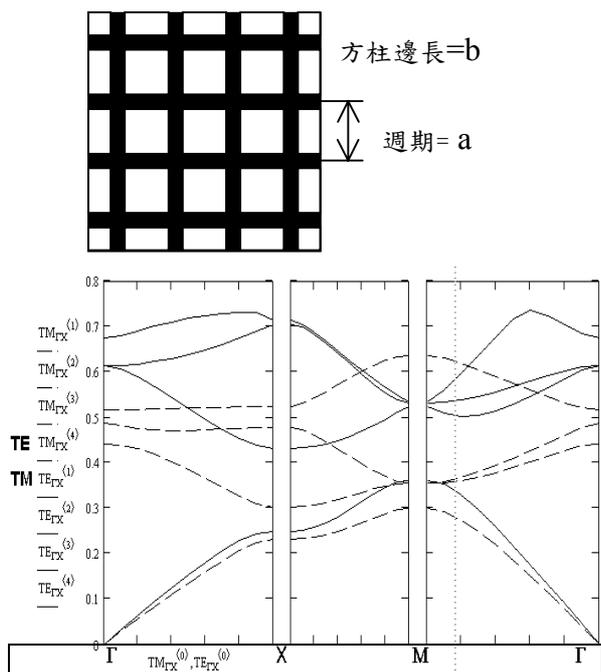
二維光子晶體的能帶圖較為複雜，例如方形晶格之 xy-平面之晶格向量 $\vec{t}_1 = a(1,0,0)$ ， $\vec{t}_2 = a(0,1,0)$ 及其倒晶格向量 $\vec{g}_1 = \frac{2\pi}{a}(1,0,0)$ ， $\vec{g}_2 = \frac{2\pi}{a}(0,1,0)$ ，其第一 Brillouin 區仍是方形，如下圖之示意。



色散關係的橫軸以 $\Gamma=(0,0,0)$ ， $X = \frac{\vec{g}_1}{2} = \frac{\pi}{a}(1,0,0)$ 、 $M = \frac{\pi}{a}(1,1,0)$ 定義，使用這三個 (Γ , X , M) 參考點可

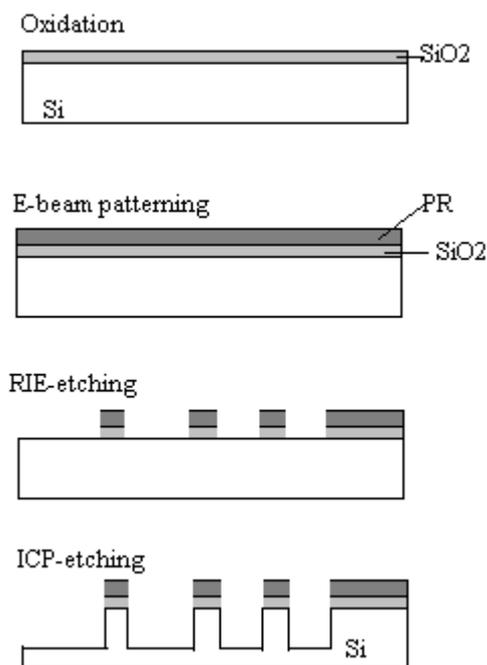
以描述 Brillouin 區的所有 k 向量。

圖(Fig. 6)示一個方柱排列之光子能隙計算結果[3]。



圖(Fig. 6) 方柱排列之光子能隙計算[3]： $b/a=0.8$ ， $\epsilon_a=8.9$ ， $\epsilon_b=1$ 其中實線代表 TE 波，虛線代表 TM 波。縱軸單位為 $\omega a / 2\pi c$ ，其中 TE 波的帶隙在 $\omega a / 2\pi c = 0.361\sim 0.431$ ，TM 波的帶隙在 $\omega a / 2\pi c = 0.300\sim 0.302$ 。

實驗部份：本計畫結束時仍未完成實驗工作。進行中的工作是以矽材質製作圖(Fig. 1.)之一維光子能隙結構，以實現一個中心波長 1500nm 的光濾波器。製作方法之流程如下；



目前的製作委託國科會精密儀器中心及中央大學以 Mems 的製程實施。

四、計畫成果自評

本計畫已建立本實驗室之光子晶體的理論計算能力，部分結果也試投稿到 OPT2002 研討會[4]。後續工作除了延續平面波展開方法，擬進一步發展 FDTD(Finite Difference Time Domain)，探討缺陷模(defect mode)的問題。

計畫執行之主要缺失仍為理論研究的人力不足，影響實驗工作的進度及研究內容的深度。雖然如原來構想完成部分光子能隙在光頻的分析，本工作未能按照原計畫同時進行光子能隙結構於微波振盪器的研究。此係原先規劃的微波研究人力，未能按計畫內容執行所導致，未來擬繼續此未完成的工作。

五、參考文獻

- [1] E.Yablonovitch, et al.: Photonic band structure: the face-centered-cubic case Phys. Rev. Lett., Vol.63, No.18, 1905-1953 (1989)
- [2] John.D.Joannopoulos: Photonic Crystals, Modeling the Flow of Light, Princeton University Press (1995)
- [3] 陳科遠；一維及二維光子晶體之分析與模擬，碩士論文(July, 2002)，交通大學電子物理系 (Taiwan, Hsinchu)
- [4] K.Y. Chen, T.C. Hsieh: Simulation study of photonic band gap structure in semiconductor substrates, (Submitted to OPT 2002, Taipei)