

나노포토닉스 최신 연구 동향

한국과학기술연구원 나노포토닉스연구센터

책임연구원 권석준 (sjoonkwon0531@gmail.com, cheme@kist.re.kr)

4. 광결정

앞서 3장에서 회절 격자 (diffraction grating)와 Guided mode resonance (GMR) filter를 배우면서, 주기적 구조 (periodic structures)를 갖는 광학 시스템에 대한 내용을 조금 알아 봤습니다. 사실 포토닉스나 광학 시스템에서, 주기적인 구조를 갖는 재료의 배치 혹은 기하학적 설계는 흔하게 활용되는 기법입니다. 주기적인 구조는 1차원, 2차원, 3차원 방향으로 모두 가능할뿐더러, 같은 주기라고 해도, 세세한 기하학적 특성이나 재료의 이방성 (birefringence) 등의 광학적 특성의 차이로 인해, 투과/반사 스펙트럼, 편광성, 주파수 선택성 등 광특성에 많은 변화가 생깁니다. 이러한 특성을 이용하여, 포토닉스나 광학 시스템에서 주기적인 구조를 도입하고자 할 때는, 주로 특정한 파장 대역의 빛을 강화시키거나 유도하거나 걸러내거나 가두거나 조합하거나 하는, 선택적 활용을 위한 목적으로 많이 활용됩니다. 3장에서 잠깐 언급했던 회절 격자의 경우, 회절 모드가 어떻게 형성될 것인지에 대해서는 확인할 수 있었지만, 어떤 파장 대역에서 어떤 회절 모드가 얼마나 강하게 형성될 것인지에 대해서는 더 깊게 들어가지는 않았습니다. 대신, 앞서 알아 보았던 1차원 방향으로 주기적으로 쌓인 다층 박막 구조에서는 특별한 경우를 한 가지 알아 본 바 있습니다. 그것은 바로 **분산 브래그 반사경 (distributed Bragg reflector, DBR)**이었습니다. DBR은 브래그 회절 격자 (Bragg grating)라고도 합니다. DBR은 1차원 방향으로 유전 상수가 다른 박막이 교차하면서 충분히 많은 숫자로 반복되면서 이루어진 구조입니다. DBR은 주로 특정한 대역의 파장에 대해 투과도를 최소화하고 반사도를 최대로 만드는 일종의 인공 거울로 작동합니다. 구조만 놓고 보면, 1차원 방향으로 충분히 반복적인 구조를 가지고 있으면서, 특정한 파장 대역의 빛만 반사시키기 때문에, **광결정 (photonic crystal)** 같은 역할을 합니다. 그래서 DBR를 **1차원 광결정 (1D photonic crystal)**이라고도 하는 것입니다.

예를 들어, 그림 4.1에는 1차원 광결정으로서, DBR이 어떤 특성을 보이는지 TMM-SMM 방법으로 반사도와 투과도를 계산한 결과를 보였습니다. 그림에서 볼 수 있듯이, [60 nm 두께, 굴절률 1.25], [30 nm 두께, 굴절률 2.5]의 박막 두 개가 50층 정도 반복되어 1차원 방향 (박막에 수직인 방향)으로 쏘았을 때, 쏘인 방향으로 빛을 투과시켰을 경우, 편광 모드에 따라 차이는 있지만, 대략 230-330 nm 의 파장대의 빛의 반사도를 최대로 만들 수 있는 것을 볼 수 있습니다. 실제로, DBR은 LED 등의 시스템에 활용되어, 원하는 파장 대역의 빛을 기판 바깥 방향으로 최대한 반사시키는 데 응용되고 있습니다.

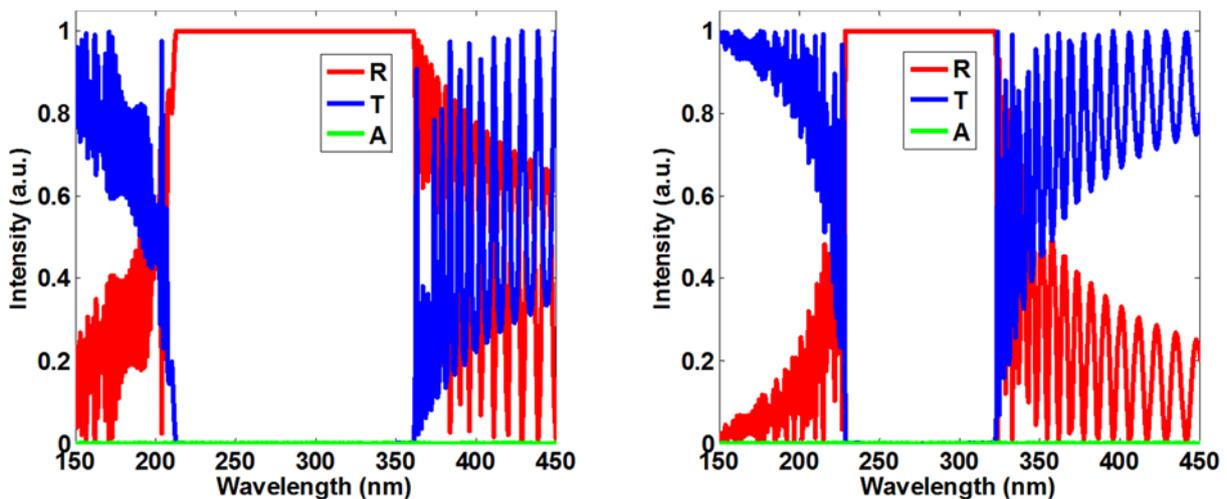


그림 4.1. TMM-SMM으로 계산된 DBR (1D PhC, M = 50) 다층 박막 구조의 반사, 투과, 흡광도. (좌) TE 모드, (우) TM 모드로 편광된 빛이 45°의 입사각으로 다층 구조에 입사한 경우

이렇게, DBR은 1차원 광결정의 역할을 하는 것을 볼 수 있습니다. 1차원을 넘어서, 2차원, 3차원 공간에서도 주기적인 구조 (즉, 유전 상수가 주기적으로 변하는 구조)가 형성되었을 경우, 이러한 기능을 할 수 있는 시스템, 즉, 광결정이 만들어질 수 있을 것입니다. 사실 광결정을 넘어, 공간상에서 '인공적'으로 주기적 구조를 만들어서 새로운 광특성 혹은 광기능을 부여하는 것은 많은 응용 가능성이 있습니다. 예를 들어, 광범위한 분야에서 이용되고 있는 회절 격자, 광도파로 (도파관), 주기적 배열 구조를 갖는 안테나 (periodic antenna array)를 비롯해서, 최근 각광 받고 있는 **광학적 띠틈간격 재료 (optical band gap materials)**, **메타재료 및 메타표면 (metamaterials & metasurfaces)**, **주파수 선택적 표면 (frequency selective surfaces, FSS)** 같은 것이 그렇습니다. 그림 4.2에는 포토닉스와 광학 분야에서 많이 응용되는 주기적 구조를 갖는 재료들의 사례를 보였습니다.

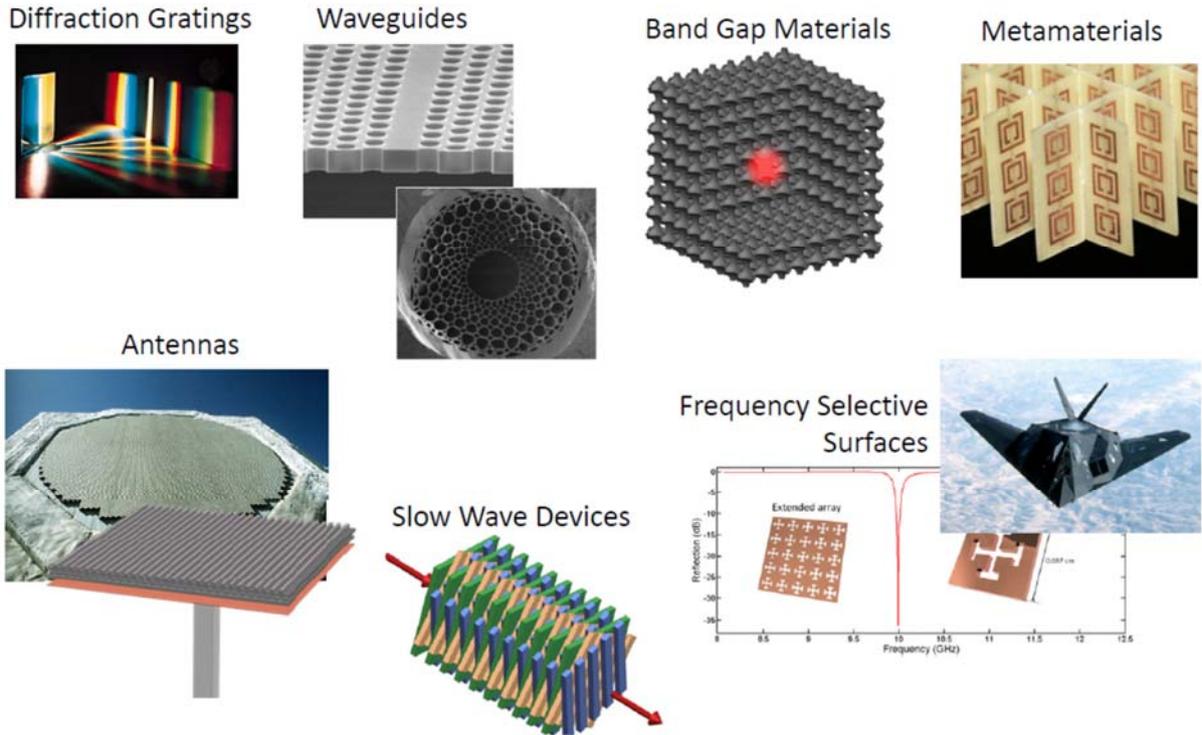


그림 4.2. 다양한 주기적 구조 기반의 포토닉스 및 광학 시스템

광결정이나 메타재료 같은 주기적 구조를 갖는 시스템에서의 전자기 현상을 분석하기 위해서는, 우선 주기적 구조를 수학적으로 설명하는 방법에 대해 알아 볼 필요가 있습니다. 다행히도, 물리학자들과 결정학자들은, 예전부터 주기적인 구조를 다룰 수 있는 편리한 방법을 고안해 왔는데,¹ 그 시작은 주기적인 구조가 갖는 **대칭성 (symmetry)**에 대한 분류부터입니다. 분류를 위해서는 대칭 여부를 판별할 수 있는 연산자가 필요합니다. 대표적으로, **평행이동 (translation)**, **회전이동 (rotation)**, **거울반사 (reflection)**, 그리고 이들을 조합한 **(combination)** 연산자가 있습니다. 주기적 구조는 이러한 연산자들의 가능한 조합수에 따라, 총 **230개의 공간 그룹 (space groups)**으로 분류될 수 있습니다. 한 편, 주기적 구조는 기하학적으로는 **격자 구조 (lattice)**로 표현될 수 있는데, 격자 구조의 각 지점에 가상의 구를 놓아 두었을 때, 그림 4.3에 나온 바와 같이, 3차원 공간에서는 서로 다른 격자 구조로 분류될 수 있는 방법이 **14가지**가 있으며, 이를 통칭하여

¹그럴 수 밖에 없는 것이, 고체를 이루는 기본 단위인 원자 배열 자체가 주기적인 구조를 가지기 때문에, 이를 분석하기 위해서는 주기적 구조에 대한 수학적 도구가 발전할 수 밖에 없었던 것입니다.

브라베 격자 (Bravis lattices)라고 합니다. 또한, 모든 브라베 격자는 각각의 **단위 셀 (unit cell)**의 모양으로 분류될 수 있는데, 이를 기준으로 하면, 2차원에서는 총 5개, 3차원에서는 총 **7개**의 결정 구조가 나옵니다. 그림 4.3에는 단위 셀의 형태를 기준으로 결정 구조를 분류할 수 있는 단위 셀의 모식도가 나타나 있습니다.

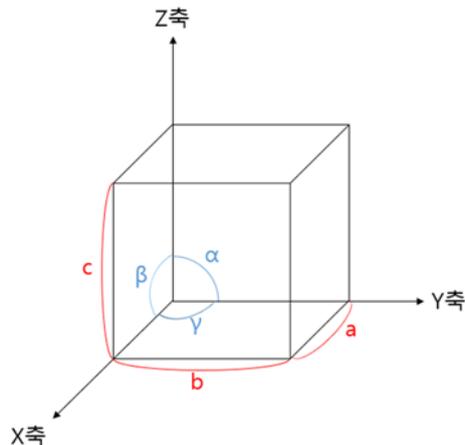


그림 4.3. 결정 구조 분류를 위한 단위 셀의 모식도

3차원에서 7개의 결정 시스템은 그림 4.4과 같이, 정방정계 (tetragonal, $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$), 단사정계 (monoclinic, $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$), 사방정계 (orthorhombic, $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$), 삼방정계 (trigonal, $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$), 삼사정계 (triclinic, $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$), 육방정계 (hexagonal, $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$), 입방정계 (cubic, $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)로 구분됩니다.

이렇게 대칭성으로 분류되는 주기적 구조를 다루기 위해서는, 구조의 특징을 단번에 나타낼 수 있는 도구가 필요합니다. 예를 들어, 그림 4.5에 나타낸 바와 같이, 주기적 구조의 단위 셀에서는, **원시 이동 벡터 (primitive translation vectors)**를 정의할 수 있습니다. 원시 이동 벡터는, 격자의 한 지점에서 바로 이웃한 지점을 연결한 벡터를 말합니다. 보통의 경우, 원시 이동 벡터를 **원시 격자 벡터 (primitive lattice vectors)**라고 통칭합니다.

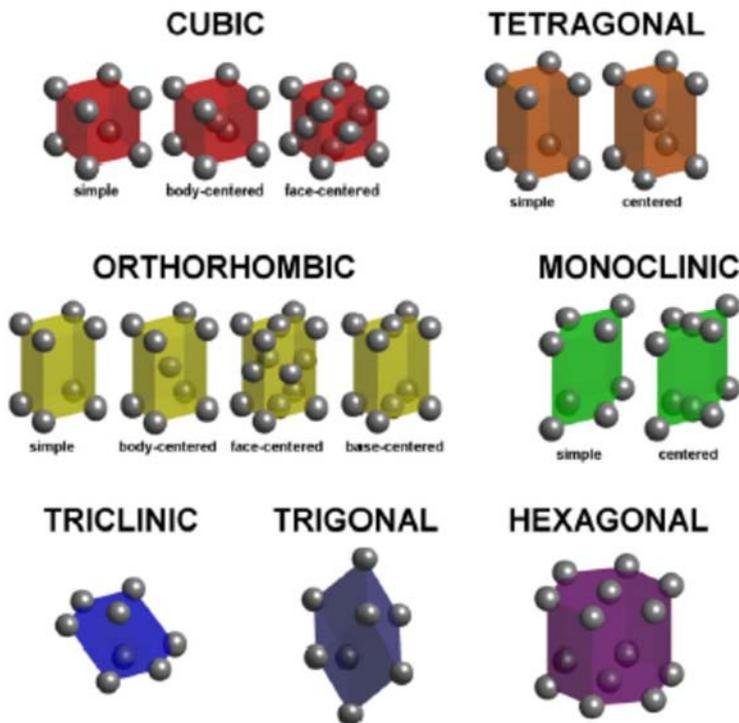
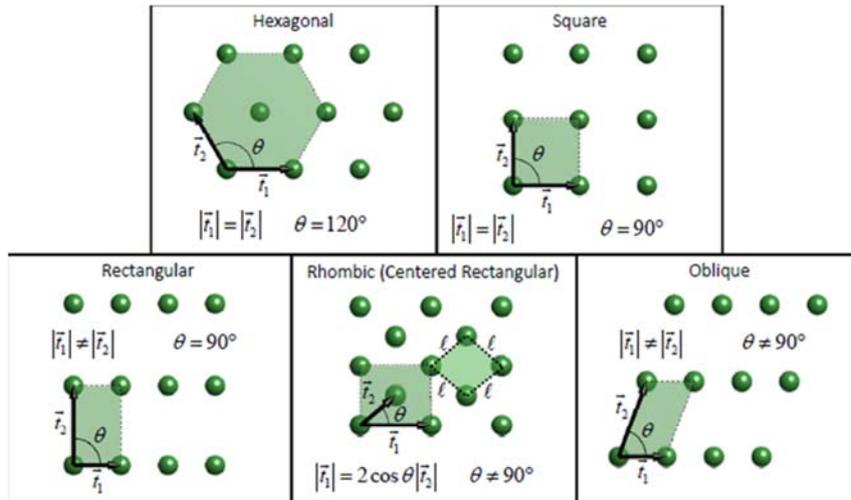


그림 4.4. (위) 2차원 및 (아래) 3차원에서 정의될 수 있는 브라베 격자 구조

보통, 주기적 구조에서의 전자기파를 다룰 때는, 전자기장의 파수와 같은 물리적 단위 (즉, m^{-1} 같은 단위)를 갖는 장치를 도입하면 편해질 때가 많습니다. 이런 관점에서, 정상적인 3차원 공간에서 정의되는 격자 구조 대신, **역공간 (reciprocal space)**에서 정의되는 **역격자 (reciprocal lattice)**라는 개념을 생각할 수 있겠습니다. 그림 4.6에는 정상 공간에서의 격자와 역격자를 비교한 그림이 나와 있습니다. 수학적으로, 원래의 격자 구조를 정의하는 원시 격자 벡터와 역격자의 원시 격자 벡터는 같은 정보를 내포하고 있습니다.

Primitive Translation Vectors

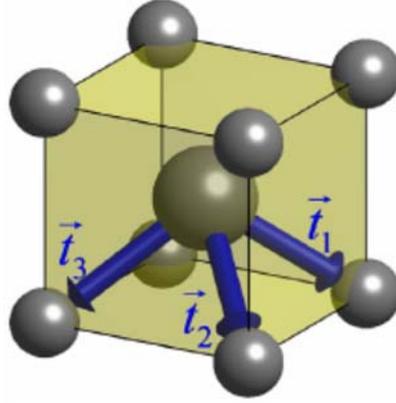


그림 4.5. 단위 셀에서의 원시 이동 벡터의 모식도

예를 들어, 원시 격자 벡터 $\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{t}_3$ 를 알고 있을 때, 역격자 원시 벡터 $\mathbf{T}_1, \mathbf{T}_2, \mathbf{T}_3$ 는 다음과 같이 정의될 수 있습니다. 반대로 마찬가지로입니다.

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3}{\mathbf{t}_1 \cdot (\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3)}, \quad \mathbf{T}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{t}_3 \times \mathbf{t}_1}{\mathbf{t}_2 \cdot (\mathbf{t}_3 \times \mathbf{t}_1)}, \quad \mathbf{T}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{t}_1 \times \mathbf{t}_2}{\mathbf{t}_3 \cdot (\mathbf{t}_1 \times \mathbf{t}_2)}, \\ t_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{T}_2 \times \mathbf{T}_3}{\mathbf{T}_1 \cdot (\mathbf{T}_2 \times \mathbf{T}_3)}, \quad t_2 = 2\pi \frac{\mathbf{T}_3 \times \mathbf{T}_1}{\mathbf{T}_2 \cdot (\mathbf{T}_3 \times \mathbf{T}_1)}, \quad t_3 = 2\pi \frac{\mathbf{T}_1 \times \mathbf{T}_2}{\mathbf{T}_3 \cdot (\mathbf{T}_1 \times \mathbf{T}_2)}, \end{aligned} \quad (4.1)$$

어떠한 종류의 격자 구조든, 역격자에서도 벡터 $\mathbf{T}_1, \mathbf{T}_2, \mathbf{T}_3$ 만 있으면, 이들을 $\mathbf{T}_{PQR} = P\mathbf{T}_1 + Q\mathbf{T}_2 + R\mathbf{T}_3$ 같이 선형으로 조합해서, 격자 구조에서 볼 수 있는 특정한 방향으로 배향된 반복되는 면을 정의할 수 있습니다. 이런 면들은 선형 조합의 계수만 따로 조합하여, 일종의 $\langle PQR \rangle$ 같은 지표 (index)로 표시할 수 있는데, 이러한 지표를 **밀러 지표 (Miller index)**라고도 합니다. 원시 격자 벡터를 중심으로, 단위 셀을, 반복되는 구조의 특성을 지킬 수 있는 최소한의 부피로 만든 셀을 **Wigner-Seitz 셀**이라고 합니다. Wigner-Seitz 셀을 만드는 방법은, 격자 구조에서, 아무 점이나 한 점을 선택하여, 가장 이웃한 점들과 선분을 그은 다음, 그 선분을 정확히 수직으로 이등분하는 평면을 그리고, 그 평면들로 둘러싸인 영역을 구축하면 됩니다.² 당연히 이 영역에는 격자 구조의 점 한 개 (예를 들면 원자 한 개)만 포함되어 있을 것입니다. 역격자에서도 비슷한 방식으로 최소한의 부피로 만들어진 단위 셀을 정의할 수 있는데, 이를 **브릴루앙 영역 (Brillouin**

²수학적으로 이러한 방법은 보로노이 구획화 (Voronoi tessellation)이라고 합니다.

zones)이라고 합니다. 참고로, 면심입방구조 (face-centered cubic, FCC)를 갖는 격자 구조에 대응하는 역격자 구조의 브릴루앙 영역은 잘린 팔면체 (truncated octahedron)인데, 이 구조는 거의 원에 가까운 모양이라, 브릴루앙 격자 중에서도, 가장 대칭성이 높은 구조로 알려져 있습니다. 브릴루앙 영역 중에서도, 추가적인 대칭성을 고려하여, 가장 작은 부피를 갖는 영역을 생각할 수 있는데, 이를 **irreducible Brillouin zone (IBZ)**라고 합니다. 그림 4.7에는 FCC 구조의 격자에 대응하는 브릴루앙 영역과, 그의 IBZ를 그렸습니다.

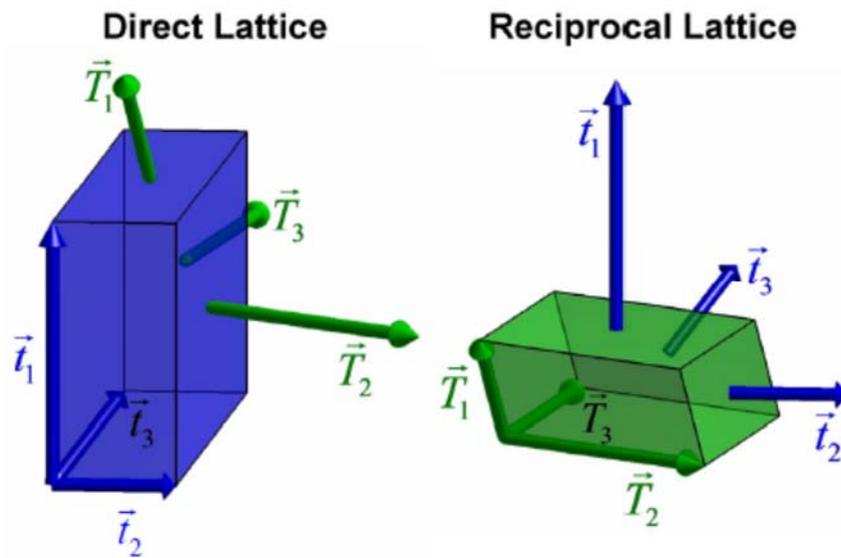


그림 4.6. 정상 공간에서의 격자와 역공간에서의 격자 (역격자)

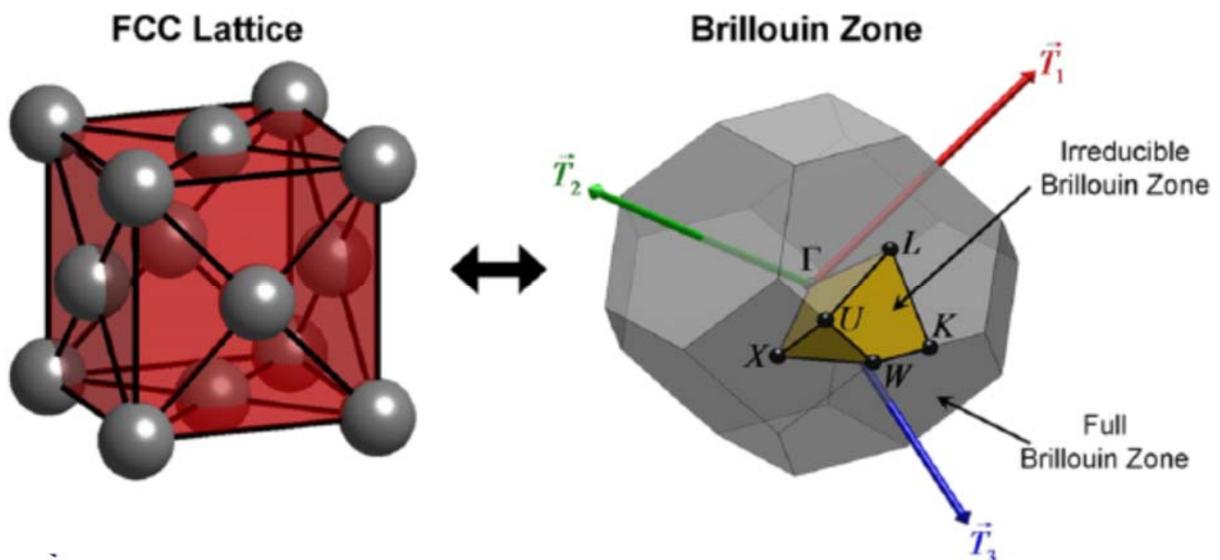


그림 4.7. FCC 구조의 격자 (왼쪽)과 이에 대응하는 브릴루앙 영역 (오른쪽 회색 다면체), 그리고 그의 IBZ (irreducible Brillouin zone, 노란색 다면체)