

나노포토닉스 최신 연구 동향

한국과학기술연구원 나노포토닉스연구센터

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

4. 광결정

이제 본격적으로, 주기적 구조를 갖는 시스템을 알아 봅시다. 일단 4장에서 배웠던 **창살 벡터 (Grating vector) \mathbf{K}_0** 를 상기해 봅시다. \mathbf{K}_0 는 $|\mathbf{K}_0| = \frac{2\pi}{\Lambda}$ 의 크기를 가지며, $\hat{\mathbf{K}}_0$ 의 방향에 수직인 평면들이 Λ 의 주기를 가지고 주기적으로 배열된 시스템에 대한 벡터라고 정의된 바 있습니다. 예를 들어, \mathbf{K}_0 를 도입하면, 그림 4.8에 보인 것 같이, 주기적으로 유전 상수가 변하는 시스템에서는 유전 상수가 $\epsilon_r(\mathbf{r}) = \epsilon_{avg} + \Delta\epsilon \cos(\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{r})$ 라고 표현될 수 있을 것입니다.

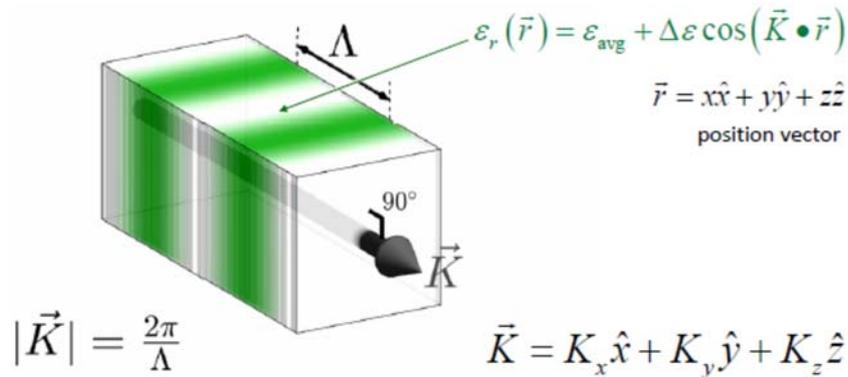


그림 4.8. 창살 벡터 (grating vector)의 개념

개념적으로, 창살 벡터는 결정 구조에서 논했던 역격자 원시 벡터와 수학적으로는 같은 개념인 것을 알 수 있습니다. 유전 상수 등의 물성이 주기적으로 변하는 시스템에서는, 물성의 주기적 변화를 정의할 수 있는 공간 의존 함수 $A(\mathbf{r})$ 를 생각할 수 있고, 이를 **envelope function**이라고 합니다. 이러한 시스템에 외부에서 β 의 파수 (이러한 파수를 **Bloch 벡터 (Bloch wave vector)**라고 합니다)를 가진 전자기파가 입사하였을 때, 전자기

파에 의해 유도된 전기장과 자기장은, 시스템의 주기적 환경 변화에 의해, 주기적으로 간섭 받게 될 것입니다. 그 간섭되는 정도 역시, 원래 시스템의 주기적 특성을 그대로 따라갈 것임도 알 수 있습니다. 따라서, 이 시스템에 분포하는 전기장과 자기장은 envelope function과 입사 전자기파의 파동 함수의 곱, 즉, $E(\mathbf{r}) = A(\mathbf{r})\exp(j\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{r})$ 같이 표현될 수 있을 것이라 생각할 수 있습니다. 이러한 이론을 **블로흐 정리 (Bloch's theorem)**라고 합니다. 블로흐 정리는 뒤에서 증명해 보도록 하겠습니다.

일단, 항상 그래왔듯, 미분방정식 형태의 맥스웰 방정식부터 시작합니다.

$$\nabla \times \mathbf{H} = j\omega\epsilon\mathbf{E}, \nabla \times \mathbf{E} = -j\omega\mu\mathbf{H}. \quad (4.2)$$

또한 방정식 (4.2)를 자기장 (\mathbf{H})을 중심으로 다시 써 봅시다.

$$\nabla \times \frac{1}{\epsilon_r(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H} = k_0^2 \mathbf{H}. \quad (4.3)$$

방정식 (4.3)에서 주목해야 할 점은, 우리가 관심을 가지고 있는 주기적인 시스템에서는 ϵ_r 가 더 이상 상수가 아니라는 점입니다. 그래서, 방정식 (4.3)을 단순한 헬름홀츠 파동 방정식으로 변환해서 계산했던 지금까지의 방식은 더 이상 유효하지 않습니다. 사실, 이러한 형태의 방정식에서 좌변의 수식 $\nabla \times \frac{1}{\epsilon_r(\mathbf{r})} \nabla \times$ 은 물리학적 관점에서는, 자기장 \mathbf{H} 에

대한 **고유연산자 (eigen-operator)**라고 하며, 오른쪽의 k_0^2 는 그 연산자에 대응하는 **고유치 (eigenvalue)**라고 하며, \mathbf{H} 는 **고유 상태 (eigen-state)**라고 정의할 수 있습니다. 결국, 방정식 (4.3)은 고유치 문제에 해당하는 것입니다.¹ 이러한 사실을 유념하고, 이제 다시 방정식 (4.2)로 돌아가 봅시다. 4장에서 광도파로를 해석할 때, 3차원 공간에서 전기장과 자기장을 계산했던 것과 같은 방법으로, 비자성 물질의 주기적 구조에 대해, 방정식 (4.2)를 여섯 개의 방정식으로 풀어 써 봅시다.

¹수학적으로 방정식 (4.3)의 고유 연산자는 흥미롭게도 에르미트 연산자 (Hermitian operator)입니다. 이 연산자는 고유치가 실수이고, 고유 상태는 서로 직교하며 (orthogonal), 고유 상태의 집합은 완전 집합 (complete)이라는 특성이 있습니다. 이러한 특성은 블로흐-플로켓 (Bloch-Floquet) 정리의 밑바탕이 되었습니다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} &= -j\omega\mu_0 H_x, \quad \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = -j\omega\mu_0 H_y, \quad \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = -j\omega\mu_0 H_z, \\ \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} &= j\omega\epsilon(\mathbf{r}) E_x, \quad \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = j\omega\epsilon(\mathbf{r}) E_y, \quad \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = j\omega\epsilon(\mathbf{r}) E_z. \end{aligned} \quad (4.4)$$

이제, 계산을 더 간단하게 만들기 위해, 주기적 구조는 $x-y$ 평면으로만 배열되어 있고, z 방향으로서는 충분히 긴 2차원 광결정 구조를 가정해 봅시다. 먼저, 외부에서 입사되는 전자기파 중, 자기장이 z 방향과 나란한 방향으로 편광되어 입사되는 경우를 생각해 봅시다.² 이 경우, $E_x = E_y = 0$ 일 것이며, z 방향으로서는 매질의 성질이 일정하므로, $\partial/\partial z$ 일 것입니다. 이러한 조건을 이용하여, 방정식 (4.4)는 아래와 같이 더 단순화될 것입니다.

$$\frac{\partial E_z}{\partial y} = -j\omega\mu_0 H_x, \quad -\frac{\partial E_z}{\partial x} = -j\omega\mu_0 H_y, \quad \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = j\omega\epsilon(\mathbf{r}) E_z. \quad (4.5)$$

이는 마치, 여섯 개의 연립방정식이 $[E_z, H_x, H_y]$ 에 관한 세 개의 연립방정식으로 축소된 효과입니다. 방정식 (4.5)는 앞서 계산한 것과 비슷한 과정을 거쳐, 헬름홀츠 파동 방정식 형태의 E_z 에 대한 하나의 방정식으로 정리될 수 있습니다.

$$\frac{1}{\epsilon_r(\mathbf{r})} \left(\frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} \right) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E_z}{\partial t^2}. \quad (4.6)$$

마찬가지로, 외부에서 입사되는 전자기파 중, 전기장이 z 방향과 나란한 방향으로 편광되어 입사되는 경우를 생각해 봅시다.³ 이 경우, $H_x = H_y = 0$ 일 것이며, z 방향으로서는 매질의 성질이 일정하므로, $\partial/\partial z$ 일 것입니다. 이러한 조건을 이용하여, 방정식 (4.4)는 아래와 같이 더 단순화될 것입니다.

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = -j\omega\mu_0 H_z = -\mu_0 \frac{\partial H_z}{\partial t}, \quad \frac{\partial H_z}{\partial y} = j\omega\epsilon(\mathbf{r}) E_x = \epsilon(\mathbf{r}) \frac{\partial E_x}{\partial t}, \quad -\frac{\partial H_z}{\partial x} = j\omega\epsilon(\mathbf{r}) E_y = \epsilon(\mathbf{r}) \frac{\partial E_y}{\partial t}. \quad (4.7)$$

이는 마치, 여섯 개의 연립방정식이 $[H_z, E_x, E_y]$ 에 관한 세 개의 연립방정식으로 축소된 효과입니다. 방정식 (4.7)에서, $\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \frac{\partial H_z}{\partial y} = \frac{\partial E_x}{\partial t}$ 와 $-\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \frac{\partial H_z}{\partial x} = \frac{\partial E_y}{\partial t}$ 이고, 이 관계식들을 각

²여기서, 이러한 편광 모드를 **TM 모드**라고 하겠습니다.

³여기서, 이러한 편광 모드를 **TE 모드**라고 하겠습니다.

각 y 와 x 방향으로 미분하면 $\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \frac{\partial H_z}{\partial y} \right) = \frac{\partial^2 E_x}{\partial t \partial y}$ 와 $-\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) = \frac{\partial^2 E_y}{\partial t \partial x}$ 를 얻습니다.

또한, $\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = -\mu_0 \frac{\partial H_z}{\partial t}$ 를 시간에 대해 미분하면, $\frac{\partial^2 E_y}{\partial t \partial x} - \frac{\partial^2 E_x}{\partial t \partial y} = -\mu_0 \frac{\partial^2 H_z}{\partial t^2}$ 이므로,

$\frac{\partial^2 E_y}{\partial t \partial x}$ 와 $\frac{\partial^2 E_x}{\partial t \partial y}$ 항에, 위에서 정리한 관계식을 대입하면 아래의 관계식을 얻습니다.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \frac{\partial H_z}{\partial y} \right) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 H_z}{\partial t^2}. \quad (4.8)$$

보다시피, TE 모드 편광에서는 TM 모드 편광보다, $\varepsilon(\mathbf{r})$ 의 주기성 때문에, 더 복잡한 형태의 헬름홀츠 파동 방정식이 산출됩니다.

위에서 유도한 1차원 혹은 2차원 광결정 맥스웰 방정식의 해석적 해를 구하는 것은 $\varepsilon(\mathbf{r})$ 가 단순한 주기 함수인 경우, 즉, $\varepsilon(\mathbf{r}) \sim \cos\left(\frac{2\pi}{\Lambda_x} x\right) \cos\left(\frac{2\pi}{\Lambda_y} y\right)$ 인 경우를 제외하고는 불가능합니다. 기본적으로, 시스템의 주기성 때문에, 1-4장에서 살펴 봤던 것처럼, 구조 전체를 관통하는 한 개의 단순한 파수 (고유값) 혹은 한 개의 파동 (고유 벡터)만 나오는 것이 아니며, 반대로, 이것이 의미하는 바는, 주기적 구조를 아우르는 '무한개'의 파수가 필요하다는 이야기이기도 하기 때문입니다. 다행히도, 앞서 살펴 본 블로흐 정리에 의해, 이러한 상황을 수학적으로 단순하게 처리할 수 있는 몇 가지 틀이 있습니다. 그 중 하나는 바로, **평면파 확장 방법 (plane wave expansion, PWE)**라는 방법입니다. PWE는 수학적 의미만 놓고 보았을 때는, 기본적으로 푸리에 급수 (Fourier series)와 매우 비슷합니다. 블로흐 정리에 의해, 주기적 구조를 지나가는 전자기파의 전기장은 $E(\mathbf{r}) = A(\mathbf{r}) \exp(j\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{r})$ 와 같이 표현할 수 있었습니다. Envelope function인 $A(\mathbf{r})$ 가 담고 있는 정보는 유전 상수의 '주기적 배열'이므로, $A(\mathbf{r})$ 는 기본적으로 역공간에서, 주기적 구조의 역격자 벡터 \mathbf{K} 의 푸리에 급수로 표현될 수 있습니다.

이제, 블로흐 정리가 일반적인 주기성을 갖는 envelope function에 대하여 성립하는지 따져 봅시다. 먼저, 일반적으로 3차원 공간에서, 전기장 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ 은 푸리에 변환, 즉, $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{k} A(\mathbf{k}) \exp(j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ 로 표현할 수 있습니다. 또한, 맥스웰 방정식으로부터,

$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})) = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_r(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r})$ 이며, $\varepsilon_r(\mathbf{r})$ 의 주기성, 즉, $\varepsilon_r(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} \varepsilon_{\mathbf{K}} \exp(j\mathbf{K} \cdot \mathbf{r})$ 임을 이용하여, 맥스웰 방정식의 우변을 먼저 확장해 봅시다. 일단,

$$\begin{aligned} \varepsilon_r(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= \left(\sum_{\mathbf{K}} \varepsilon_{\mathbf{K}} \exp(j\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) \right) \left(\int d\mathbf{k} A(\mathbf{k}) \exp(j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \right) \\ &= \sum_{\mathbf{K}} \int d\mathbf{k} \varepsilon_{\mathbf{K}} A(\mathbf{k}) \exp(j(\mathbf{K} + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}) \\ &= \sum_{\mathbf{K}} \int d\mathbf{k}' \varepsilon_{\mathbf{K}} A(\mathbf{k}' - \mathbf{K}) \exp(j\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}), \quad \mathbf{k}' \equiv \mathbf{K} + \mathbf{k} \end{aligned}$$

입니다. 맥스웰 방정식의 좌변은

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})) &= \nabla \times \left(\nabla \times \int d\mathbf{k} A(\mathbf{k}) \exp(j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \right) \\ &= - \int d\mathbf{k} \mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times A(\mathbf{k})) \exp(j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \end{aligned}$$

와 같이 정리됩니다. 맥스웰 방정식의 좌변과 우변을 같이 정리하기 위하여, 맥스웰 방정식의 우변을 다음과 같이 벡터 표기법을 재정립하겠습니다.

$$\begin{aligned} \varepsilon_r(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{K}} \int d\mathbf{k}' \varepsilon_{\mathbf{K}} A(\mathbf{k}' - \mathbf{K}) \exp(j\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}) \\ &= \sum_{\mathbf{K}'} \int d\mathbf{k} \varepsilon_{\mathbf{K}'} A(\mathbf{k} - \mathbf{K}') \exp(j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \end{aligned}$$

이제 좌변과 우변을 같이 정리하겠습니다.

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{k} \mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times A(\mathbf{k})) \exp(j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + \frac{\omega^2}{c^2} \sum_{\mathbf{K}'} \int d\mathbf{k} \varepsilon_{\mathbf{K}'} A(\mathbf{k} - \mathbf{K}') \exp(j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) &= 0 \\ \rightarrow \int d\mathbf{k} \exp(j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \left[\mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times A(\mathbf{k})) + \frac{\omega^2}{c^2} \sum_{\mathbf{K}'} \varepsilon_{\mathbf{K}'} A(\mathbf{k} - \mathbf{K}') \right] &= 0 \end{aligned}$$

위에서 유도한 적분방정식은, 임의의 위치 \mathbf{r} 에서 성립해야 하기 때문에, 이를 위해서는

$$\mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times A(\mathbf{k})) + \frac{\omega^2}{c^2} \sum_{\mathbf{K}'} \varepsilon_{\mathbf{K}'} A(\mathbf{k} - \mathbf{K}') = 0$$

이어야 할 것임을 알 수 있습니다. 위 식에서 첫 번째 항에 있는 $A(\mathbf{k})$ 에는 \mathbf{k} 에 대한 제약이 없는 반면, 두 번째 항에 있는 $A(\mathbf{k} - \mathbf{K}')$ 에는 $\mathbf{k} - \mathbf{K}'$ 가 연속된 값이 아니라, 역격자 벡터의 단위인 \mathbf{K}_0 만큼만 띄엄띄엄 움직일 수 있다는 제약이 있기 때문에, 두 항이

한 식에서 항등식을 이루려면, 결국 처음부터, 전기장 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ 은 '연속된' 공간에서 $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{k} A(\mathbf{k}) \exp(j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ 처럼, 푸리에 변환될 것이 아니라, \mathbf{K}_0 의 단위만큼만 허용되는 역공간에서 '불연속적' 급수로 변환되어야 할 것임을 알 수 있습니다. 즉,

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}) \exp(j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \exp(j(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{r}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \exp(j\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) \exp(j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \end{aligned}$$

인 형태가 되어야 할 것임을 알 수 있습니다. 위 식에서는, 공간의 주기성을 이용하였습니다. 위 식에서, envelope function을 $u(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \exp(j\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}} \exp(j\mathbf{K} \cdot \mathbf{r})$ 라고 정의한다면 $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r}) \exp(j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ 임을 알 수 있으며, 따라서 블로흐 정리가 증명됩니다.

블로흐 정리를 이용하여, 1차원 주기적 구조를 살펴 봅시다. 1차원 주기적 구조에 대해서는, envelope function이 아래와 같이 표현될 수 있습니다.

$$A(\mathbf{r}) = A(x) = \frac{1}{\varepsilon_r(x)} = \sum_l G^{(\varepsilon)}_l \exp(j\mathbf{K}_l \cdot \mathbf{r}), \quad \mathbf{K}_l = \left[\frac{2l\pi}{\Lambda_x}, 0, 0 \right], \quad l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (4.9)$$

방정식 (4.9)에서, $G^{(\varepsilon)}_l$ 는 1차원 주기 함수 $\frac{1}{\varepsilon_r(x)}$ 의 1차원 푸리에 계수 (Fourier coefficient)입니다. 1차원 주기적 구조에 대해, 전기장 역시, 푸리에 급수와 블로흐 정리를 이용하여,

$$E_z(\mathbf{r}, t) = E_z(x, t) = \exp(j(\beta_x x - \omega t)) \sum_m G^{(E)}_m \exp(j\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r})$$

로 표현할 수 있겠습니다. 위에서, $G^{(E)}_m$ 는 1차원 주기를 가진 전기장 $E_z(x, t)$ 의 1차원 푸리에 계수 (Fourier coefficient)입니다. 특히, $G^{(\varepsilon)}_l$ 와는 구분된다는 것을 유념해 주시길 바랍니다. 2차원 주기적 구조 마찬가지로입니다. 예를 들어, 역격자 단위 벡터 \mathbf{b}_1 와 \mathbf{b}_2 를 가진 매질에 대하여, TM 편광된 입사광에 대해서는 전기장을,

$$\begin{aligned} E(\mathbf{r}, t) &= E(x, y, t) = \exp(j(\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{r} - \omega t)) \sum_{m,n} G^{(E)}_{m,n} \exp(j\mathbf{K}_{m,n} \cdot \mathbf{r}), \\ \mathbf{K}_{m,n} &= m\mathbf{b}_1 + n\mathbf{b}_2 = K_x^{m,n} \hat{\mathbf{x}} + K_y^{m,n} \hat{\mathbf{y}}, \quad m, n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \end{aligned} \quad (4.10)$$

으로 표현하고, TE 편광된 입사광에 대해서는 자기장을,

$$H(\mathbf{r}, t) = H(x, y, t) = \exp(j(\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{r} - \omega t)) \sum_{m,n} G_{m,n}^{(H)} \exp(j\mathbf{K}_{m,n} \cdot \mathbf{r}), \quad (4.11)$$

로 표현할 수 있을 것입니다. 또한, 2차원에서 유전 상수를 표현하는 envelope function은

$$\frac{1}{\varepsilon_r(\mathbf{r})} = \frac{1}{\varepsilon_r(x, y)} = \sum_{p,q} G_{p,q}^{(\varepsilon)} \exp(j\mathbf{K}_{p,q} \cdot \mathbf{r})$$

와 같이 표현될 수 있을 것입니다.

1차원 광결정은, 2, 3차원의 광결정에 비해, 직관적으로 그 특성을 이해하기 쉽습니다. 사실 블로흐 정리를 적용하지 않아도, 1차원 방향으로 Λ 주기를 가지며 변하는 유전 상수 함수를, 단순한 사인 혹은 코사인 함수로 가정하여 해석적인 해를 근사적으로 구하는 것이 가능합니다. 예를 들어 방정식 (4.6)에서, $\varepsilon_r(\mathbf{r})$ 를 단순한 주기함수, 즉, $\varepsilon_r(x) = \bar{\varepsilon}_r - \Delta\varepsilon_r \cos(K_x x)$ 라고 가정하겠습니다. 그러면 방정식 (4.6)은 아래와 같이 표현할 수 있습니다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} + \frac{\omega^2}{c_0^2} \varepsilon_r(x) E_z &= 0, \\ \rightarrow \frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} + \frac{\omega^2}{c_0^2} \bar{\varepsilon}_r E_z &= \Delta\varepsilon_r \frac{\omega^2}{c_0^2} \cos(K_x x) E_z. \end{aligned} \quad (4.12)$$

미분방정식 (4.12)의 해는 $E_z(x) = A \exp(jkx) + B \exp(j(k - K_x)x)$ 형태가 될 것이기 때문에, 이를 대입하면, 아래의 항등식을 얻습니다.

$$\begin{aligned} &\left(\frac{\omega^2}{c_0^2} \bar{\varepsilon} - k^2 \right) A \exp(ikx) + \left(\frac{\omega^2}{c_0^2} \bar{\varepsilon} - (k - K_x)^2 \right) B \exp(j(k - K_x)x) \\ &= \frac{\omega^2}{c_0^2} \frac{\Delta\varepsilon}{2} \left[A \exp(j(k + K_x)x) + B \exp(jkx) + A \exp(j(k - K_x)x) + B \exp(j(k - 2K_x)x) \right] \end{aligned}$$

위의 항등식을 정리하면

$$\left(\frac{\omega^2}{c_0^2}\varepsilon - k^2\right)A = \frac{\omega^2}{c_0^2}\frac{\Delta\varepsilon}{2}B, \quad \left(\frac{\omega^2}{c_0^2}\varepsilon - (k - K_x)^2\right)B = \frac{\omega^2}{c_0^2}\frac{\Delta\varepsilon}{2}A,$$

$$\rightarrow \mathbf{\Omega} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{\Omega} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\omega^2}{c_0^2}\varepsilon - k^2\right) & -\frac{\omega^2}{c_0^2}\frac{\Delta\varepsilon}{2} \\ -\frac{\omega^2}{c_0^2}\frac{\Delta\varepsilon}{2} & \left(\frac{\omega^2}{c_0^2}\varepsilon - (k - K_x)^2\right) \end{pmatrix}$$

이 됩니다. 이 연립방정식에서, 물리적으로 의미 있는 해를 얻기 위해, $\mathbf{\Omega}$ 의 행렬식은 0이 되어야 합니다. 특히, 1차원 주기적 구조의 첫 번째 브릴루앙 영역의 경계 (즉, band edge)의 위치인 $k = K_x/2 = \pi/a$ 에서, 이를 적용하면, 다음의 관계식을 얻을 수 있습니다.

$$\frac{\omega^2}{c_0^2} \left[\varepsilon \pm \frac{\Delta\varepsilon}{2} \right] = \left(\frac{K_x}{2} \right)^2. \quad (4.13)$$

방정식 (4.13)은 상당히 재미있고 유익한 부분을 시사하고 있습니다. 예를 들어, 먼저, 유전 상수에 주기성이 없고, 그냥 일반적인 LHI 매질이라고 할 때는, $\Delta\varepsilon = 0$ 이 되므로, $\omega = k \frac{c_0}{n} = kc$ 의 결과가 나오는데, 이는 굴절률 n 을 갖는 LHI에서 맥스웰 방정식을 유도할 때 얻어진 파동방정식에서 기대되는 퍼짐 관계 (dispersion relation)입니다. 일단, 이 경우, $k = K_x/2$ 에서의 각 주파수를 $\omega_0 = \frac{c_0 K_x}{2(\varepsilon)^{1/2}}$ 라고 하겠습니다. 반대로, $\Delta\varepsilon \neq 0$ 일 경우,

band edge에서, ω 는 $\omega_L = \left(\frac{c_0 K_x}{2}\right) / \left[\varepsilon + \frac{\Delta\varepsilon}{2}\right]^{1/2}$ 와 $\omega_H = \left(\frac{c_0 K_x}{2}\right) / \left[\varepsilon - \frac{\Delta\varepsilon}{2}\right]^{1/2}$ 의 서로 다른 값을 갖게 되는데, 이것의 의미는 band edge에서 $k - \omega$ 의 퍼짐 관계 (dispersion relation)에 '불연속점'이 생긴다는 의미입니다.

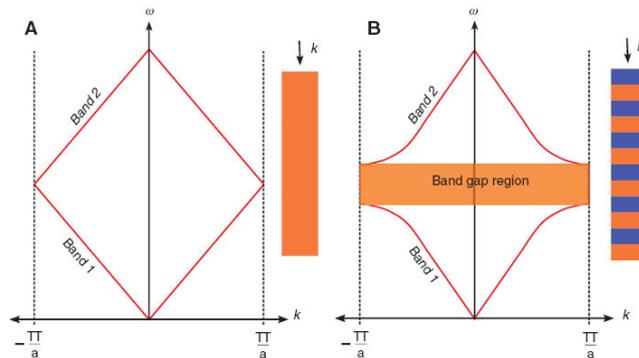


그림 4.9. 일반적 LHI 매질 (좌)와 주기적으로 유전 상수가 변하는 1차원 광결정의 포토닉 밴드 구조 비교도

그림 4.9에 개략적으로 보인 바와 같이, 이러한 불연속점은 1차원 방향으로 유전 상수가 주기적으로 변할 때, $\Delta\varepsilon$ 이 0이 아닌 이상, '필히' 나타나는 전자기파의 특성입니다. 첫 번째 브릴루앙 영역을 너머, 두 번째, 세 번째 등으로 브릴루앙 영역을 확장해 나갈 때, 영역의 경계는 각각 $\left[-\frac{\pi}{a}, +\frac{\pi}{a}\right]$, $\left[-\frac{2\pi}{a}, +\frac{2\pi}{a}\right]$, $\left[-\frac{3\pi}{a}, +\frac{3\pi}{a}\right]$ 등으로 정해지게 될 텐데, 주기적 구조는 밴드도 주기적으로 나타나므로, 모든 밴드를 첫 번째 브릴루앙 영역으로 '평행 이동' 혹은 '접어서' 표현할 수 있습니다. 역시 그림 4.9에 이 개념이 개략적으로 나타나 있습니다. 이러한 개념을 이용하면, 이러한 각 주파수의 불연속점 자체도 $\frac{\omega a}{2\pi c} = \frac{1}{2}$, $\frac{\omega a}{2\pi c} = 1$, $\frac{\omega a}{2\pi c} = \frac{3}{2}$ 등으로 주기적으로 나타나게 될 것임을 알 수 있습니다. 특히, $\Delta\varepsilon \ll \bar{\varepsilon}$ 일 경우, 위 밴드와 아래쪽 밴드의 각 주파수의 차이를 $\Delta\omega$ 라 한다면, $\Delta\omega \equiv \omega_H - \omega_L = \frac{cK_x \Delta\varepsilon}{4\varepsilon^{3/2}} = \frac{\omega_0}{2} \frac{\Delta\varepsilon}{\bar{\varepsilon}}$ 임을 유도할 수 있습니다. 광결정에서 보이는 이러한 각 주파수의 차이를 **포토닉 띠틈간격 (photonic band gap)**이라고도 합니다.

이제, 블로흐 정리에 의거하여, 2차원 광결정에 대해 TM 모드 편광인 경우를 먼저 살펴 보겠습니다. 방정식 (4.6)에, 방정식 (4.10)과 $\frac{1}{\varepsilon_r(\mathbf{r})}$ 의 관계식을 대입합시다. 그러면 다음과 같은 관계식을 얻을 수 있습니다.

$$\begin{aligned}
& \sum_{l,m} \sum_{n,o} G_{l,m}^{(\varepsilon)} \exp(j\mathbf{K}_{l,m} \cdot \mathbf{r}) \left((K_x^{n,o} + \beta_x)^2 + (K_y^{n,o} + \beta_y)^2 \right) G_{n,o}^{(E)} \exp(j(\mathbf{K}_{n,o} + \boldsymbol{\beta}) \cdot \mathbf{r}) \\
&= \frac{\omega^2}{c^2} \sum_{p,q} G_{p,q}^{(E)} \exp(j(\mathbf{K}_{p,q} + \boldsymbol{\beta}) \cdot \mathbf{r}) \\
&\rightarrow \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} G_{l,m}^{(\varepsilon)} G_{p-l,q-m}^{(E)} \left((K_x^{(p-l)(q-m)} + \beta_x)^2 + (K_y^{(p-l)(q-m)} + \beta_y)^2 \right) = \frac{\omega^2}{c^2} G_{p,q}^{(E)}. \quad (4.14)
\end{aligned}$$

TE 모드 편광인 경우에도 마찬가지로, 다음과 같은 관계식을 얻을 수 있습니다.

$$\begin{aligned}
& \sum_{l,m} \sum_{n,o} G_{l,m}^{(\varepsilon)} \exp(j\mathbf{K}_{l,m} \cdot \mathbf{r}) \left(K_x^{l,m} (K_x^{n,o} + \beta_x) + K_y^{l,m} (K_y^{n,o} + \beta_y) + (K_x^{n,o} + \beta_x)^2 + (K_y^{n,o} + \beta_y)^2 \right) G_{n,o}^{(H)} \exp(j(\mathbf{K}_{n,o} + \boldsymbol{\beta}) \cdot \mathbf{r}) \\
&= \frac{\omega^2}{c^2} \sum_{p,q} G_{p,q}^{(H)} \exp(j(\mathbf{K}_{p,q} + \boldsymbol{\beta}) \cdot \mathbf{r}) \\
&\rightarrow \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} G_{l,m}^{(\varepsilon)} G_{p-l,q-m}^{(H)} \left(K_x^{l,m} (K_x^{(p-l)(q-m)} + \beta_x) + K_y^{l,m} (K_y^{(p-l)(q-m)} + \beta_y) + (K_x^{(p-l)(q-m)} + \beta_x)^2 + (K_y^{(p-l)(q-m)} + \beta_y)^2 \right) \\
&= \frac{\omega^2}{c^2} G_{p,q}^{(H)}. \quad (4.15)
\end{aligned}$$

방정식 (4.14)와 (4.15)은 해석적으로 푸리에 계수를 계산할 수 없기 때문에, 수치해석 방법을 이용하여 계산합니다. 푸리에 계수의 아래첨자 지수들의 쌍 $[p, q]$ 에 대하여, 이들의 최소값과 최대값을 설정하고, 이 범위 내에서, 푸리에 계수들로 이루어진 벡터에 대한 행렬 방정식 (행렬의 고유값 분해 문제)을 계산합니다. 계산의 정확도는 지수들의 쌍이 가질 수 있는 범위, 즉, PWE에 활용하는 평면파의 개수에 비례합니다. 예시를 위해, $-1 \leq p+q \leq 1$ 인 경우를 한 번 살펴 봅시다.⁴ 이 경우, TE 편광 모드에 대해서, 방정식 (6.14)는 아래와 같은 행렬 방정식으로 표현할 수 있습니다.

$$\begin{pmatrix} G_{0,0}^{(\varepsilon)} \Xi_{0,0}^{0,1} & G_{1,1}^{(\varepsilon)} \Xi_{1,1}^{0,1} & G_{0,1}^{(\varepsilon)} \Xi_{0,1}^{0,1} & G_{1,1}^{(\varepsilon)} \Xi_{1,1}^{0,1} & G_{0,2}^{(\varepsilon)} \Xi_{0,2}^{0,1} \\ G_{1,1}^{(\varepsilon)} \Xi_{1,1}^{1,0} & G_{0,0}^{(\varepsilon)} \Xi_{0,0}^{1,0} & G_{1,0}^{(\varepsilon)} \Xi_{1,0}^{1,0} & G_{2,0}^{(\varepsilon)} \Xi_{2,0}^{1,0} & G_{1,1}^{(\varepsilon)} \Xi_{1,1}^{1,0} \\ G_{0,1}^{(\varepsilon)} \Xi_{0,1}^{0,1} & G_{1,0}^{(\varepsilon)} \Xi_{1,0}^{0,1} & G_{0,0}^{(\varepsilon)} \Xi_{0,0}^{0,1} & G_{1,0}^{(\varepsilon)} \Xi_{1,0}^{0,1} & G_{0,1}^{(\varepsilon)} \Xi_{0,1}^{0,1} \\ G_{1,1}^{(\varepsilon)} \Xi_{1,1}^{1,0} & G_{2,0}^{(\varepsilon)} \Xi_{2,0}^{1,0} & G_{1,0}^{(\varepsilon)} \Xi_{1,0}^{1,0} & G_{0,0}^{(\varepsilon)} \Xi_{0,0}^{1,0} & G_{1,1}^{(\varepsilon)} \Xi_{1,1}^{1,0} \\ G_{0,2}^{(\varepsilon)} \Xi_{0,2}^{0,1} & G_{1,1}^{(\varepsilon)} \Xi_{1,1}^{0,1} & G_{0,1}^{(\varepsilon)} \Xi_{0,1}^{0,1} & G_{1,1}^{(\varepsilon)} \Xi_{1,1}^{0,1} & G_{0,0}^{(\varepsilon)} \Xi_{0,0}^{0,1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{0,1}^{(E)} \\ G_{1,0}^{(E)} \\ G_{0,0}^{(E)} \\ G_{1,0}^{(E)} \\ G_{0,\bar{1}}^{(E)} \end{pmatrix} = \frac{\omega^2}{c^2} \begin{pmatrix} G_{0,1}^{(E)} \\ G_{1,0}^{(E)} \\ G_{0,0}^{(E)} \\ G_{1,0}^{(E)} \\ G_{0,\bar{1}}^{(E)} \end{pmatrix},$$

$$\Xi_{l,m}^{p,q} \equiv \left(K_x^{(p-l)(q-m)} + \beta_x \right)^2 + \left(K_y^{(p-l)(q-m)} + \beta_y \right)^2. \quad (4.16)$$

방정식 (4.16)는, $-1 \leq p+q \leq 1$ 인 조건 하에, 아래와 같이 더 간단하게 만들 수 있습니다.

$$\begin{pmatrix} G_{0,0}^{(\varepsilon)} \Xi_{0,0}^{0,1} & 0 & G_{0,1}^{(\varepsilon)} \Xi_{0,1}^{0,1} & 0 & 0 \\ 0 & G_{0,0}^{(\varepsilon)} \Xi_{0,0}^{1,0} & G_{1,0}^{(\varepsilon)} \Xi_{1,0}^{1,0} & 0 & 0 \\ G_{0,1}^{(\varepsilon)} \Xi_{0,1}^{0,1} & G_{1,0}^{(\varepsilon)} \Xi_{1,0}^{0,1} & G_{0,0}^{(\varepsilon)} \Xi_{0,0}^{0,1} & G_{1,0}^{(\varepsilon)} \Xi_{1,0}^{0,1} & G_{0,1}^{(\varepsilon)} \Xi_{0,1}^{0,1} \\ 0 & 0 & G_{1,0}^{(\varepsilon)} \Xi_{1,0}^{1,0} & G_{0,0}^{(\varepsilon)} \Xi_{0,0}^{1,0} & 0 \\ 0 & 0 & G_{0,1}^{(\varepsilon)} \Xi_{0,1}^{0,1} & 0 & G_{0,0}^{(\varepsilon)} \Xi_{0,0}^{0,1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{0,1}^{(E)} \\ G_{1,0}^{(E)} \\ G_{0,0}^{(E)} \\ G_{1,0}^{(E)} \\ G_{0,\bar{1}}^{(E)} \end{pmatrix} = \frac{\omega^2}{c^2} \begin{pmatrix} G_{0,1}^{(E)} \\ G_{1,0}^{(E)} \\ G_{0,0}^{(E)} \\ G_{1,0}^{(E)} \\ G_{0,\bar{1}}^{(E)} \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

TM 편광 모드에 대해서도 마찬가지로 푸리에 급수에 대한 행렬 방정식을 유도할 수 있을 것입니다.

이러한 행렬 방정식의 해석적 해는 구하기 어려우므로, 대부분 수치해석적인 방법을 통해 이를 계산할 수 있습니다. 방정식 (4.17) 같은 경우, 행렬의 고유값 분해를 이용하여, 첫 번째 브릴루앙 영역에서 정의될 수 있는 각 대칭점들을 이은 선분을 따라 역격자 벡터를 정의한 후, 그 선분에서 계산되는 역공간 벡터의 지점에 대해, 고유값과 고유 벡터를 추출할 수 있습니다. 이를 이용하여, 모든 역격자 공간에 대하여, 고유값을 계

⁴ $p+q$ 가 꼭 이 범위에 있어야 한다는 것은 아닙니다. 식을 간단하게 만들기 위한 예시일 뿐입니다.

산할 수 있으며, 이러한 고유값은 각 주파수의 역수의 제곱근이 될 것입니다. 수치해석적인 방법을 이용할 경우 아래의 알고리즘을 따라 **포토닉 밴드 구조 (Photonic band structure or band diagram)**, 그리고 **포토닉 상태 밀도 (photonic density of states (DOS))**를 계산합니다.

광결정의 포토닉 밴드 구조 및 DOS 계산 알고리즘

- 1 단계. 결정 구조 정의 (격자 상수, 부피 분율, 굴절률, 대칭 구조 등)
- 2 단계. 역격자 벡터 정의
- 3 단계. 첫 번째 브릴루앙 영역 정의 및 대칭점 정의
- 4 단계. 전자기장 및 유전 상수의 비연속적 푸리에 급수의 계수의 한계 정의 (즉, l, m, p, q 의 최소, 최대값 정의)
- 5 단계. 방정식 (4.16), (4.17)을 이용해서, 푸리에 계수 행렬 생성 (TE, TM 모드 별로)
- 6 단계. 첫 번째 브릴루앙 영역의 대칭점을 한 바퀴 돌아오는 역격자 벡터의 유한 차분 (discrete reciprocal vectors) 성분 생성
- 7 단계. 계산할 포토닉 밴드의 최대 개수 지정
- 8 단계. 푸리에 계수 행렬의 고유값 분해 후 고유값 크기에 따른 정렬
- 9 단계. 각 밴드에 따라, 6 단계에서 정한 역격자 벡터의 유한 차분 성분에 따른 고유값 벡터 계산
- 10 단계. 9 단계 결과를 그래프로 그림 (포토닉 밴드 구조 혹은 다이어그램 생성)
- 11 단계. 9 단계에서 계산한 결과를, 고유값 크기에 따라 히스토그램으로 재조합.
- 12 단계. 11 단계의 결과를 그래프로 그림 (포토닉 DOS 계산)
- 13 단계. 12 단계에서, TE, TM, TE+TM을 개별적으로 나타낼 수 있음. (그림 4.9에서는 TE+TM을 같이 계산하였음.)

이러한 방식을 이용하여, 2D 광결정 구조를 이루고 있는 재료에 대한 계산 결과를 그림 4.10에 보였습니다. 그림에서 검은색 부분은 산화 그래핀 (graphene oxide, GO), 하얀색 부분은 공기입니다. 산화 그래핀의 두께가 두꺼워질수록, 포토닉 밴드 구조가 어떻게 변하는지 그림 4.10에서 볼 수 있습니다. 일단, 포토닉 밴드 구조에서 y 축은 정규화된 각 주파수, 즉, $\frac{\omega a}{2\pi c_0} = \frac{fa}{c_0} = \frac{a}{\lambda}$ 입니다. 대략, $\frac{\omega a}{2\pi c_0} = \frac{a}{\lambda} \sim 0.5$ 근처에서 포토닉 띠틈 (Photonic band gap)이 형성되는 것을 DOS 그래프에서 볼 수 있습니다. 예를 들어, $a = 100 \mu m$ 인 산화 그래핀 마이크로 벌집 구조체라면, $\lambda_{inc} = 200 \mu m$ 인 영역에서 포토닉 띠틈이 형성

되는 것이고, 이는 주파수 대역에서는 1.5 THz에 해당하는 '테라파'입니다. 다시 말해, 1.5 THz의 전파가 2차원 산화 그래핀 벌집 구조체에 입사할 경우, 어떤 방향에서 어떤 편광 모드로 입사를 해도, 이 전파는 이 벌집 구조체를 투과할 수 없다는 의미가 되겠습니다. 이러한 시스템을 **테라파 필터 (Terahertz wave filter)**라고도 합니다. 또한, 흥미롭게도, 검은색 부분과 하얀색 부분의 굴절률이 뒤바뀔 경우, (즉, 하얀 원 부분이 산화 그래핀, 검은 벽 부분이 공기일 경우), 포토닉 띠간격은 형성되지 않습니다. 산화 그래핀-공기 조합인 경우는 물론이고, 대부분의 경우, 전체 구조체에서 대다수의 부피를 차지하는 영역의 굴절률이 상대적으로 더 작아야 포토닉 띠간격이 형성될 가능성이 있습니다. 반대일 경우, 대부분 포토닉 띠간격이 잘 형성되지 않습니다. 계산된 결과를 그림 4.11에서 비교했습니다.

마지막으로 광결정을 어떻게 활용할 수 있는지에 대한 힌트를 언급하고 넘어가겠습니다. 광결정은 1차원이든 2차원이든, 유전 상수의 주기적 배열로 인해, 포토닉 띠간격이 생길 수 있는 특성을 가지고 있습니다. 다시 말해, 띠간격 범위에 있는 주파수의 외부 전자기파가 광결정으로 입사할 경우, 그 전자기파는 대부분 투과되지 못하고 반사될 것이라는 것입니다. 만약, 광결정 내부에 유전 상수가 다르거나, 주기를 흐트리는 구조를 일부러 형성한다면 어떻게 바뀔까요? 이러한 비주기적 영역을 defect라고 하는데, 이러한 defect가 차지하는 영역이 일정 비율 이상 되면, 전자기파는 마치 징검다리 삼아 시냇물을 건너 가듯, defect를 이용하여 광결정 내부를 지나갈 수도 있습니다. 이를 활용하면, 광결정 내부에서 발생한 빛을 defect가 있는 영역에만 가둬 두거나 (즉, 이를 Laser cavity in photonic crystal이라고 합니다), 길게 이어진 defect를 따라 빛을 유도 (즉, 이를 waveguide in photonic crystal이라고 합니다.)도 할 수 있게 될 것입니다. 또한, defect의 비율을 잘 설계하여 조절하면, 띠간격 내부에, 특정한 주파수만 통과시킬 수 있는 필터도 설계할 수 있습니다. 예를 들어, 1차원 광결정인 DBR에서, 저-고 굴절률이 반복되는 다층 박막 구조의 중간 부분에, 더 고 굴절률 ($n_3 = 5$)를 갖는 두꺼운 층 ($d_3 = 2 \cdot (d_1 + d_2)$)을 삽입하면, TM 편광 모드에 대해 계산한, 그림 4.12(c)와 (d)에서 볼 수 있듯, defect가 없었을 때 (그림 4.12(c))는 232-317 nm 파장 영역에서 반사도가 거의 1에 가까웠고, 그 구간에서는 반사도가 저하되는 특정한 파장이 관찰되지 않았으나, 고 굴절률 defect 박막이 DBR 중간에 삽입된 경우, 특정한 파장 (예를 들어, 246, 273, 307 nm)에서는 반사도가 저하되어, 빛이 일부분 투과를 할 수 있음을 확인할 수 있습니다. 이러한 기능은, 특정한

파장을 포토닉 띠간격 내부에서 특별히 활용해야 할 경우, 매우 유용하게 활용할 수 있는 기능입니다. 이렇게 defect를 적절히 이용하면, 광결정의 응용 범위가 더 확장될 수도 있습니다.

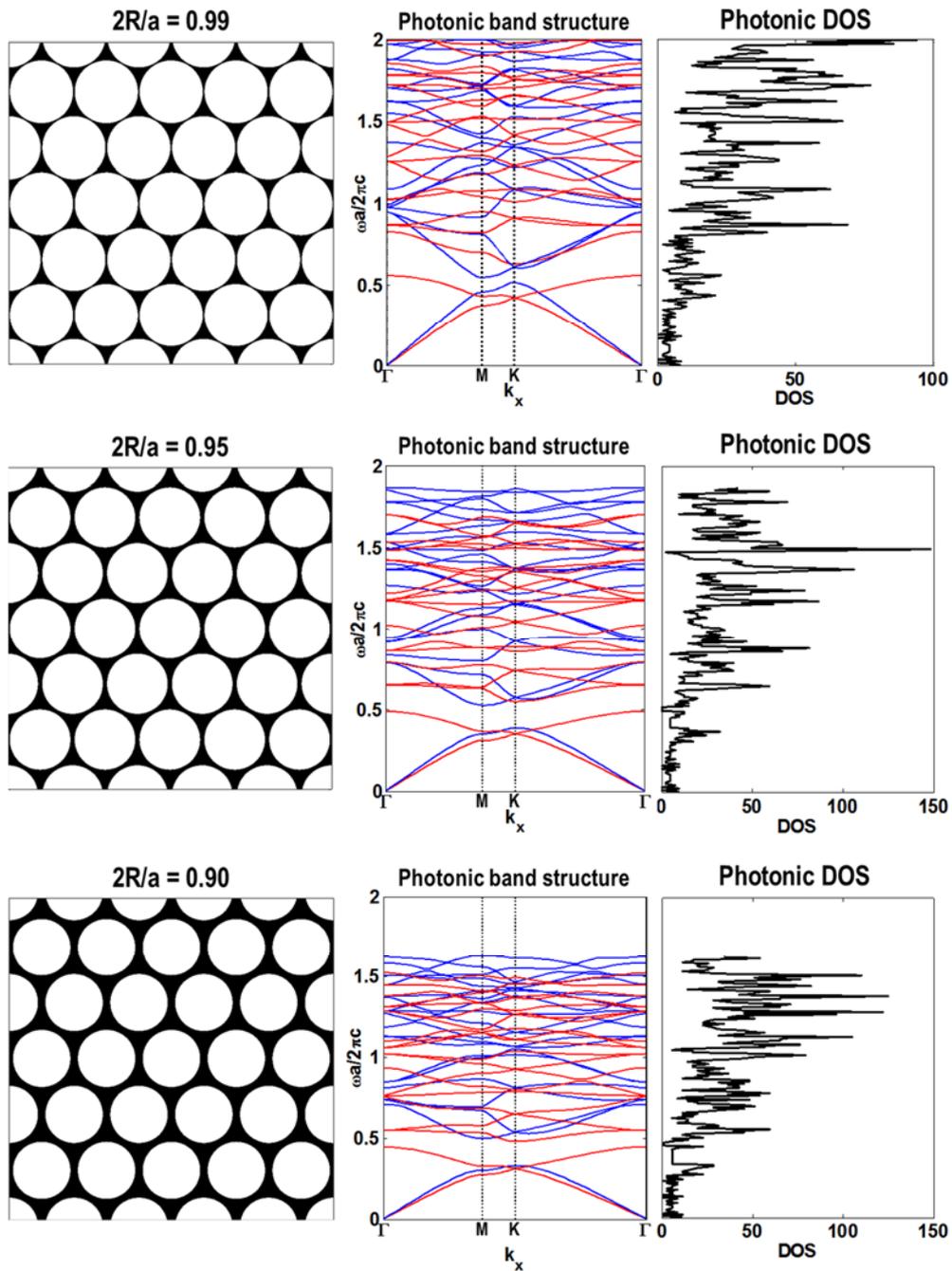


그림 4.10. 부피 분율에 따른 2D 광결정 (흰 색 : 공기 ($n_1 = 1$), 검은색 : 산화 그래핀 ($n_2 = 2.74$))의 포토닉 밴드 구조의 변화 (파란색 : TE, 빨간색 : TM 편광 모드) 및 포토닉 DOS 변화

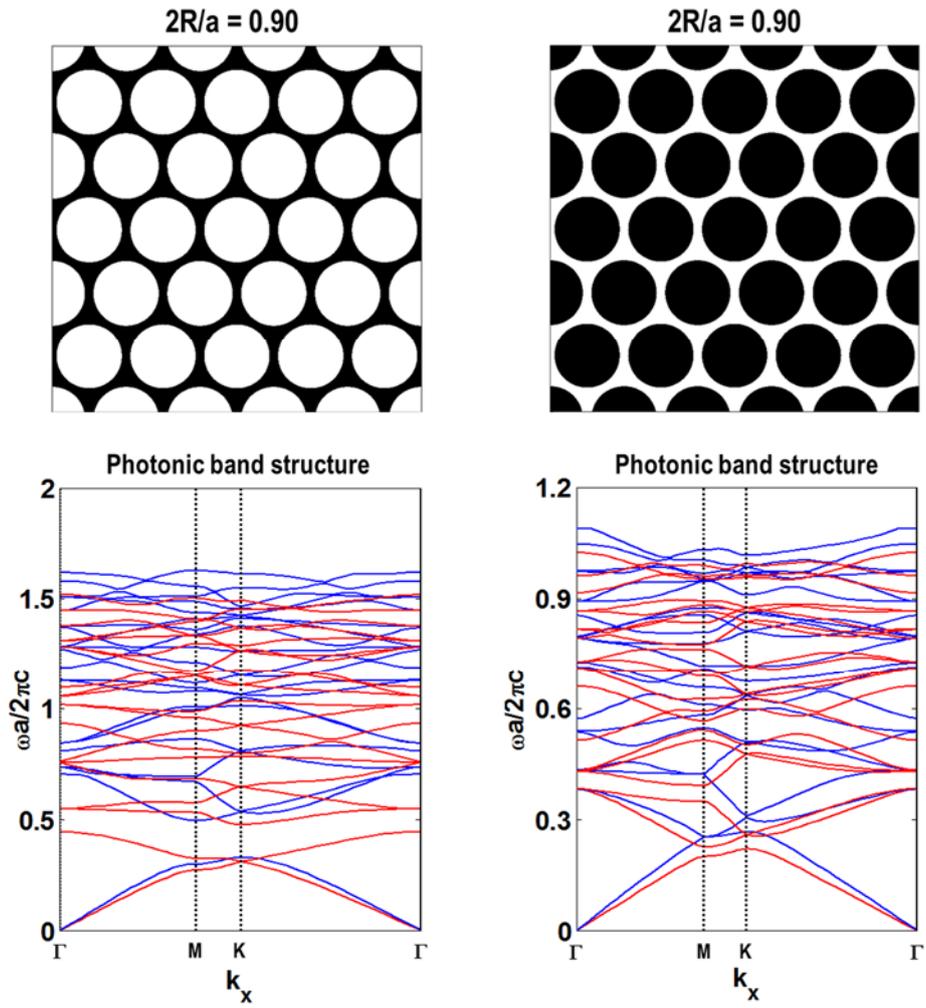


그림 4.11. 그림 6.9에서 계산한 벌집 구조의 저-고 굴절률 영역이 반전되었을 경우의 포토닉 밴드 구조의 비교

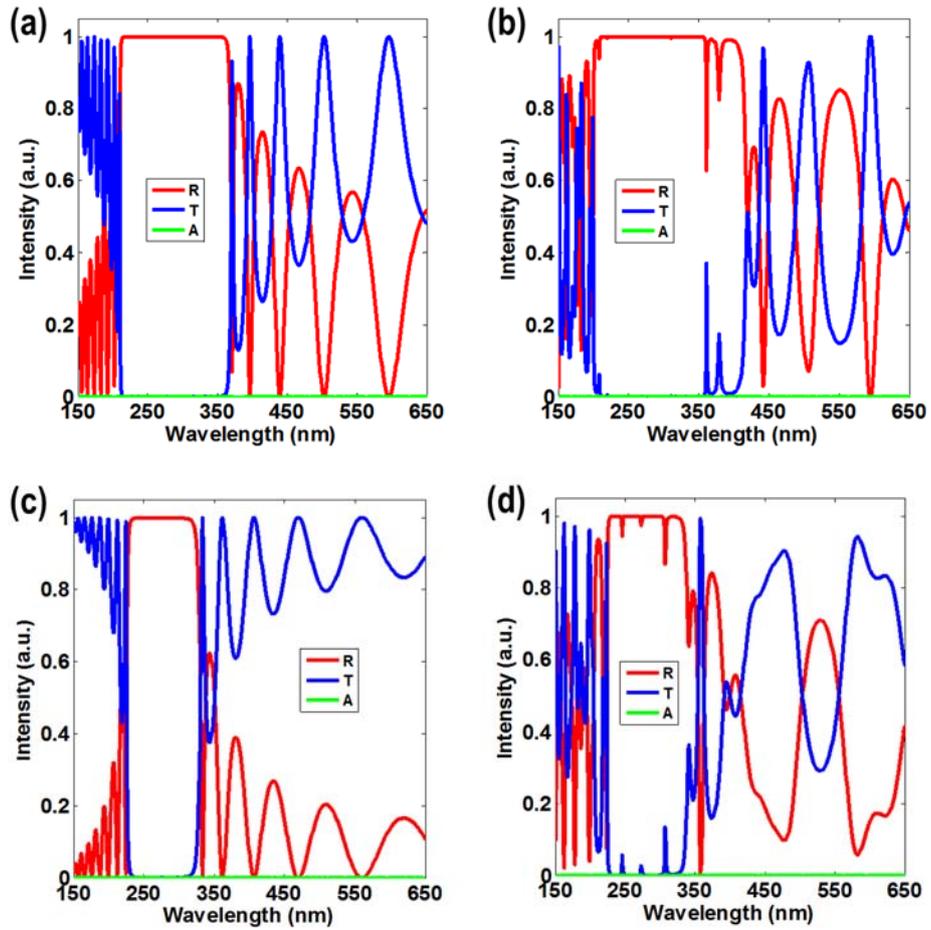


그림 4.12. 1차원 DBR 구조 (저-고 굴절률 박막층의 조합 = 50층 반복) 광결정에, 고 굴절률 defect (n_3) 역할을 하는 박막이 포함 안 된 경우 (a, c)와 포함되었을 경우 (b, d)의 자외선-가시광 대역의 반사도, 투과도 스펙트럼의 차이 (a, b = TE 편광 모드, c, d = TM 편광 모드). 입사각은 45° , $n_1 = 1.25$, $n_2 = 2.5$, $n_3 = 5$. $d_1 = 30$ nm, $d_2 = 60$ nm, $d_3 = 180$ nm.