

Optikai tiltott energiasávok

Fényhullámok terjedése mesterséges, periodikus szerkezetű anyagokban

KÁDÁR GYÖRGY

Műszaki Fizikai Kutatóintézet, kadargy@mta.kfki.hu

SZABÓ ZSOLT

Tateyama Hungary Ltd., szabo@tateyama.hu

Kulcsszavak: fotonikus kristály, tiltott frekvenciájú sávok, periodikus dielektrikum

Bebizonyítható, hogy a kristályos anyagok szerkezetéhez hasonló, de mesterségesen előállított és a mikrométer tartományba eső ismétlődési távolságú periodikus szerkezetekben – fotonikus kristályokban – a fényhullámok terjedése közben ugyanolyan szimmetria-törvények érvényesülnek, mint amelyek az ismert kristályos anyagokban az elektronok mozgása során meghatározzák az anyagok vezetési tulajdonságait. Nevezetesen a fényhullámok energia-diszperziós függvénye energiasávokba rendeződik, amelyekben léteznek tiltott frekvenciájú sávok. A tiltott frekvenciájú fényhullámok nem terjedhetnek, nem lehetnek jelen a fotonikus kristály belsejében. A szabályos periodikus szerkezetbe beépített hibahelyek, vonalhibák, elágazások, eltérítő sarokelemek mentén azonban a fényt szinte bármilyen előre elkészített pálya mentén el lehet vezetni. Az elektromágneses hullámok terjedését számítógépes szimulációval modelleztük egy- és kétdimenziós, szabályos és rácshibás szerkezetű anyagokban.

A legutóbbi néhány évben a műszaki-tudományos szakirodalomban egyre növekedő számban jelentek meg színvonalas közlemények a mesterségesen előállított periodikus szerkezetek, úgynevezett fotonikus vagy önkényes magyarítással *fényméretű* kristályok témakörében. A *fényméretű mesterséges szerkezetek* előzményei között kell megemlíteni a mesterségesen előállított, karcolt optikai rács eszközöket, egyszimmetriós fotonikus kristályokat, amelyek a fény hullámtermészetének a bizonyítása során már a 19. század utolsó harmadában a fizika fejlődésében olyan fontos szerepet játszottak. Ide tartoznak a korszerűbb, de még ugyancsak egy dimenzióban periodikus vagy majdnem periodikus multiréteg szerkezetű optikai tükrök és szűrők, vagy az elosztott visszacsatolású lézerszerkezetek is.

A modern mikrotechnológiai módszerek fejlődésével az utóbbi években merült fel a két- vagy akár három dimenzióban periodikus, a látható fény hullámhosszával összemérhető, néhány száz nanométer nagyságrend szerint ismétlődő geometriai méretű, mesterséges szerkezetek előállításának a lehetősége. Ilyen szerkezetekben a fényhullámoknak a kristály-diffrakcióhoz hasonlítható interferenciaszórása következik be. Az interferencia jelensége a művi fényméretű kristályok belsejében is alapvetően befolyásolja a hullámterjedést, hasonlóan az elektronok hullámtulajdonságaihoz egy szilárdtest belsejében. A fényméretű kristályban a kvázi-impulzus és a fény frekvenciája között az elektronok energiasáv szerkezetéhez hasonló kapcsolat jön létre, például a fényhullámok terjedése a tiltott energiasávban (photonic bandgap) nem lehetséges. A szakterület elméleti megalapozásáról nagyon jó összefoglalók ismeretesek, például S.G. Johnson könyve [1] és az MIT ilyen témájú honlapján (<http://ab-initio.mit.edu/photons/tutorial/>) lévő bevezető cikkek és előadás-vázlatok.

Az ilyen fotonikus kristály szerkezetekben tapasztalt fizikai optikai jelenségek jól értelmezhetők az elektromágneses hullámok leírására alkalmas Maxwell-elmélet alapján, ha figyelembe vesszük a periodikus szerkezetekben megvalósuló diffrakciós interferenciaszórás a Bragg-szórás sajátosságait. A leírás elméleti eszköztára az elektronokra vonatkozó kvantummechanikai Schrödinger-egyenletnek a periodikus potenciáltérben adódó közismert megoldásához hasonlítható [2]. Ismeretes, hogy az anyagi testek elektromos vezetési tulajdonságait a kristálybeli elektronok energiasáv szerkezete (vezetési, tiltott és valenciasávok) határozza meg. A fényhullámok terjedése a fotonikus kristályokban meglepő hasonlóságokat mutat az elektronok mozgásformáihoz kristályos szilárd anyagokban.

A fényterjedést tehát a Maxwell-egyenletek írják le:

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\frac{\mu}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad \nabla \times \vec{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \frac{\varepsilon}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = 0$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0$$

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E}$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H}$$

Feltételezzük, hogy a fotonikus kristályra eső bemenő hullám síkhullám tulajdonságú, vagyis az ω körfrekvenciájú, λ hullámhosszú, állandó \vec{E}_0 és \vec{H}_0 tér-amplitúdójú fényhullám a

$$\vec{k} = \vec{e}_{prop} \frac{2\pi}{\lambda}$$

hullámvektor irányában terjed, legalábbis mielőtt behatolna az anyagba:

$$\vec{E} = \vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 \exp i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$$

$$\vec{H} = \vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{H}_0 \exp i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$$

A $\text{div}\vec{D} = \nabla\vec{D} = \vec{k}\vec{D} = 0$ és $\text{div}\vec{D} = \nabla\vec{D} = \vec{k}\vec{D} = 0$ egyenletek azt az egyszerű tényt írják le, hogy a transzverzális elektromágneses hullámban mind az elektromos, mind a mágneses térerősség merőleges a fényterjedés irányára. Feltevélezzük, hogy a fotonikus kristály nem-mágneses dielektromos anyagokból készült, amelyben a mágneses permeabilitás $\mu=1$, az elektromos permittivitás pedig a térkoordinátáknak periodikus függvénye

$$\varepsilon(\vec{r}) = \varepsilon(\vec{r} + n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3),$$

ahol n_j -k egész számok és a_j -k a periodikus kristály elemi rácsvektorai, és ennek a periodikus függvénynek a maximuma lényegesen nagyobb, mint a minimuma ($|\varepsilon|_{\max}/|\varepsilon|_{\min} \gg 1$).

Ilyen feltételek mellett a Maxwell-egyenletek írják le az időben periodikus elektromos és mágneses terek függését a térkoordinátáktól. A következő egyenletekkel tudjuk kiszámítani először a mágneses térvektort, majd abból az elektromos teret, vagy először az elektromos majd abból a mágneses teret:

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \nabla \times \vec{H}(\vec{r}) \right) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \vec{H}(\vec{r})$$

$$\vec{E}(\vec{r}) = \left(\frac{-ic}{\omega \varepsilon(\vec{r})} \right) \nabla \times \vec{H}(\vec{r})$$

vagy

$$\left(\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \right) \nabla \times (\nabla \times \vec{E}(\vec{r})) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \vec{E}(\vec{r})$$

$$\vec{H}(\vec{r}) = \left(\frac{ic}{\omega} \right) \nabla \times \vec{E}(\vec{r})$$

Mindkét egyenlet formálisan egy operátor sajátérték feladatának az egyenletéhez hasonló alakú, például:

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \nabla \times \vec{H}(\vec{r}) \right) = \Theta \vec{H}(\vec{r}) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \vec{H}(\vec{r})$$

Be tudjuk bizonyítani, hogy ez a differenciál operátor Hermitikus, vagyis ebből a szempontból hasonlít a kvantummechanikai Schrödinger-egyenlethez:

$$\begin{aligned} (\vec{F}, \Theta \vec{G}) &= \int d\vec{r} \vec{F}^* \nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon} \nabla \times \vec{G} \right) = \int d\vec{r} (\nabla \times \vec{F}^*) \left(\frac{1}{\varepsilon} \nabla \times \vec{G} \right) = \\ &= \int d\vec{r} \left(\nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon} \nabla \times \vec{F}^* \right) \right) \vec{G} = (\Theta \vec{F}, \vec{G}) \end{aligned}$$

Az elektromos térre ható másik operátor Hermitikus jellegét nem tudjuk ilyen közvetlenül bebizonyítani. A bizonyításhoz transzformáció elvégzésére lenne szükség, ezért megmaradunk a mágneses térre vonatkozó egyenletnél.

A kvantummechanikai Schrödinger- és az elektromágneses Maxwell-egyenletek párhuzamos jellege teszi lehetővé, hogy ugyanazokat a szimmetria megfontolásokat tekintsük érvényesnek az elektromágneses hullámok egyenleteinek megoldásaira fotonikus kristályokban, mint amelyek érvényesek az elektronok mozgását leíró hullámfüggvény egyenletének megoldásaira a szokásos kristályos szilárd anyagokban.

Ezt a párhuzamosságot a következő táblázatban mutatjuk be:

	Schrödinger egyenlet	Maxwell egyenlet
Kiszámítandó függvény	$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) \exp(i\omega t)$	$\vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{H}(\vec{r}) \exp(i\omega t)$
Egyenlet	$H\Psi = E\Psi$	$\Theta \vec{H} = (\omega/c)^2 \vec{H}$
Operátor	$H = -(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V(\vec{r})$	$\Theta = \nabla \times ((1/\varepsilon(\vec{r}))\nabla \times \cdot)$

A periodikus potenciálokra vonatkozó kristályszimmetria megfontolások a legerősebb mértékben az energia diszperziós összefüggéseit érintik, vagyis a hullámok energiájának függését a hullám-vektortól:

$$\omega(\vec{k}) = E(\vec{k})/\hbar.$$

Mint ismeretes az elektronok energiája kölcsönhatás nélkül csak a kinetikus tagot tartalmazza:

$$\omega(\vec{k}) = p^2/(2m\hbar) = (\hbar/2m)k^2,$$

amely négyzetesen függ a hullámvektortól, a fotonok energiája pedig

$$\omega(\vec{k}) = 2\pi(c/\lambda) = c|\vec{k}|$$

a hullámvektor abszolút értékének lineáris függvénye. A fotonikus kristály periodikus szerkezetében ugyanúgy lehet reciprok rácsot és Brillouin-zónákat definiálni, mint a normális szilárdtest kristályokban. A foton energiagörbéje ugyanúgy felhasad a Brillouin-zóna határain, mint az elektronoké a kristályokban, és ugyanúgy jönnek létre a tiltott energiasávok.

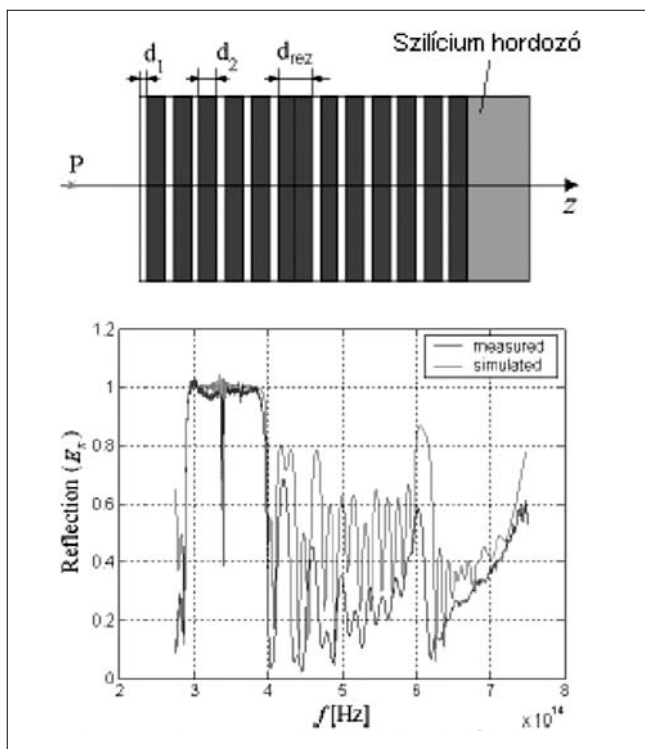
Mivel a fotonok energiája megmaradó mennyiség, a tiltott frekvenciasávba eső fotonok nem tudnak behatolni és terjedni a fotonikus kristályban.

Az időtartománybeli véges differenciák (finite difference time domain – FDTD) numerikus matematikai módszere [3] alkalmas a fényméretű kristályokban terjedő elektromágneses hullámok viselkedésének modellezésére. Ezzel kapcsolatos eredményeink közül ebben a közleményben bemutatunk néhány példát, amelyek alátámasztják a fentebbi elméleti megfontolásokat.

Az első példa egy egy-dimenziós multiréteg szerkezet, amely az egyik legegyszerűbb fotonikus kristálynak tekinthető. A 12 azonos réteg-párból álló szerkezet egy egyszerű Bragg-tükör, amely egy meghatározott frekvenciasávban igen jó hatásokkal reflektálja a ráeső fényt. Egy ilyen Bragg-tükör optikai mikroüreg rezonátorra alakítható, ha a rétegszerkezetbe egy „hibát”, ebben az esetben egy vastagabb réteget helyezünk el.

A következő oldali, 1. ábrán látható rétegszerkezet anyagi összetétele a $d_1=73 \cdot 10^{-9}m$ vastagságú rétegekben 38% porozitású, a $d_2=144 \cdot 10^{-9}m$ vastagságú rétegekben pedig 66% porozitású pórusos szilícium. Ilyen réteg-szerkezetet a mikro-áramkörök alapanyagaként ismert kristályos szilíciumból elektrokémiai marási technológiával viszonylag könnyen elő lehet állítani. A közléptájon kialakított rezonátor réteg vastagsága $d_{\text{rez}} = 2 \cdot d_2$. A kísérleti célra elkészített rezonátor fény-visszaverő képességének mért és az FDTD számítási módszerrel modellezett adatai a mellékelt ábrán láthatóak.

Az ábra legfontosabb része a 280-400 TeraHz közötti szakasz. Rezonátor réteg nélkül ez egy tiltott sáv, amelyben egyenletes, szinte teljes visszaverődés lenne tapasztalható, azonban a megvastagított „hibaré-



1. ábra Egydimenziós fotonikus kristály Bragg-tükör, amelyben egy réteghiba rezonáns frekvenciát keltett

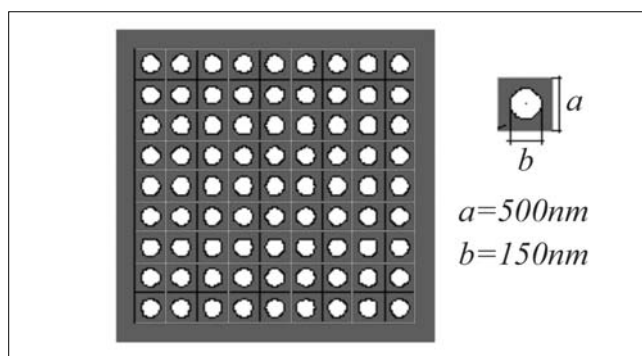
teg” hatására körülbelül 340 TeraHz frekvencia körül található egy keskeny sáv, ahol a hiba nélkül egyébként tiltott frekvenciájú fény is behatol a rétegszerkezetbe. Ebben a frekvenciatartományban a modellszámítás elég jól szimulálni tudja a mérési eredményeket.

Az egydimenziós fotonikus kristályok periodikus rendjét a korszerű rétegleválasztási technológiák alkalmazásával könnyen ki lehet alakítani. Az optikai kísérletekben a fény a váltakozó rétegek síkjára merőlegesen terjed, a különféle kísérleti elrendezések megvalósításának nincs geometriai akadálya.

A két- vagy háromdimenziós fotonikus kristály szerkezetek mesterséges előállítására és kísérleti vizsgálatára már nagyobb nehézségekbe ütközhet. Egyelőre ilyen fotonikus kristály minta és mérési adatok nem állnak rendelkezésünkre, csupán számítógépes modellkísérleteket tudunk végezni ilyen szerkezeteken.

Kétdimenziós fotonikus kristály modelljét mutatjuk be a 2. ábrán.

A modell 9×9 darab nagy dielektromos permittivitású hengerszerű rúdból áll, amelyek a z-tengely irányában végtelen hosszúságúak, átmérőjük $b=0.15 \cdot 10^{-6} m$, az x-y síkban derékszögű négyzetes szimmetriájú rácsban vannak elrendezve $0.5 \cdot 10^{-6} m$ periódus távolsággal, a közöttük lévő térfogatot levegő ($\epsilon_{rel}=1$) tölti ki.



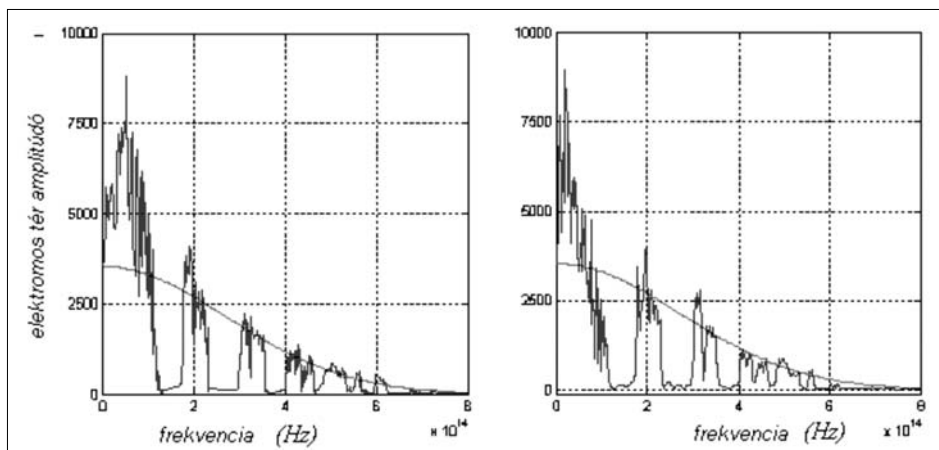
2. ábra Kétdimenziós fotonikus kristály

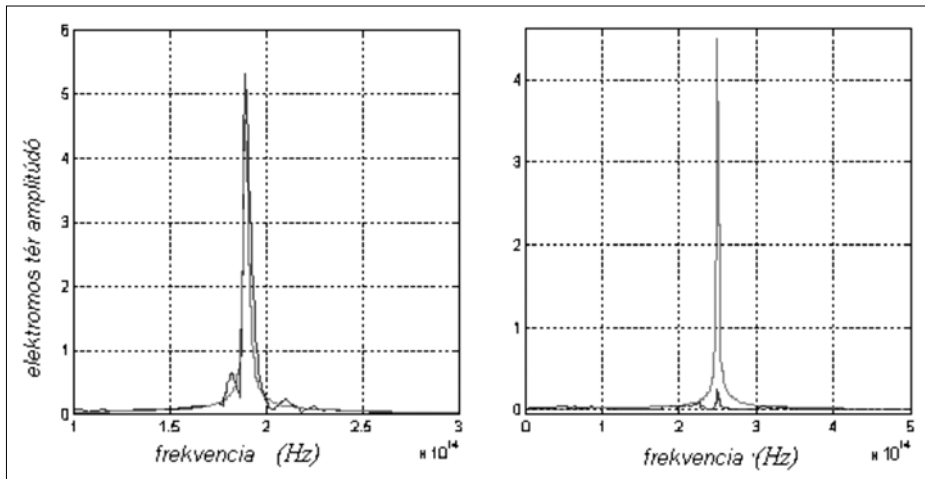
Egy Gauss-függvény szerinti frekvencia-eloszlású, a pozitív x-tengely irányába terjedő bemenő hullámcsomagot indítunk el a kristály alsó oldalán és az egyensúlyi állandósult állapot beállása után a fotonikus kristályon áthaladt, vizsgáljuk a felső oldalon megjelenő kimenő hullám Fourier-transzformációval kiszámított frekvencia szerinti eloszlását.

A 3. ábrán a sima fél-harang alakú Gauss-görbék a bemenő tér-amplitúdó frekvencia eloszlását jelzik egy 9×9 rácson és egy 20×20 rácson, a véletlenszerűen ugrálva oszcilláló görbék pedig a kimenő amplitúdó frekvencia eloszlását. A kettő közül a részletesebb számítás (20×20 rács) eredménye természetesen valamelyest jobb, simább eredményt szolgáltat, viszont sokkal több számítási időt igényel. Az összehasonlítás alapján arra következtethetünk, hogy nyugodtan megelégedhetünk a 9×9 rácson kapott eredményekkel. Nagyon jól látható, hogy a tiltott energiaszakaszok a néhány száz TeraHz (130, 270, 390 stb.) tartományban alakultak ki.

Ezután az illusztráció kedvéért átbocsátottunk a kétdimenziós fotonikus kristálymodellrel két jól definiált frekvenciájú síkhullámot, az egyiket a fényt áteresztő feltétel szerinti (190 TeraHertz) frekvenciával, a másikat a tiltott sávba eső, a fényterjedést megakadályozó feltétel szerinti (250 TeraHz) frekvenciával. Mindkét esetben kiszámítottuk és a 4. ábrán ábrázoltuk az áthaladó hullám amplitúdóját.

3. ábra A 9x9 méretű (bal) és a 20x20 méretű (jobb) négyzetes rácsban elrendezett kétdimenziós fotonikus kristályon átmenő hullám amplitúdója a frekvencia függvényében





4. ábra
A „fényáteresztő” és a „tiltott” tartományba eső frekvenciájú síkhullámok átmenő amplitúdójának ábrázolása az 1. ábrán látható kétdimenziós fotonikus kristályban

A 4. ábrán láthatjuk, hogy a „fényáteresztő” és a „tiltott” frekvencián átmenő tér-amplitúdók között legalább egy nagyságrendnyi különbség van.

A fénymeretű fotonikus kristályok lehetséges gyakorlati felhasználása azon a tényen alapul, hogy a szabályos periodikus struktúrába beépített hibahelyek pontjaiban a tiltott frekvenciájú fényhullámok is terjedhetnek, például ilyen terjedés lehetséges egy geometriai vonal mentén, ha a rács megfelelő pontjaiba a többitől eltérő dielektromos állandójú hibákat helyezünk.

Az 5. ábra egy 9×9 rácsméretű kétdimenziós fotonikus kristályban a frekvenciafüggő átmenő amplitúdó függvényt és egy derékszögű sarkot alkotó hibavonal mentén terjedő elektromágneses hullám amplitúdójának szintvonalait ábrázolja. A hibavonal a rácsot alkotó hengeres elemek eltávolításával keletkezett. A hibamentes szerkezetben a tiltott frekvenciasáv közepe körülbelül 300 TeraHz, ilyen frekvenciával indítottuk a be-
menő síkhullámot az x -tengely irányában.

A hullámterjedés számítógépes FDTD szimulációja az ábrán azt illusztrálja, hogy a fényhullám a tökéletes periodicitású területeken szinte teljesen lecsillapodik, a hibavonal mentén viszont szinte csillapítás nélkül terjed és terjedése során a derékszögű sarkot követve még be is kanyarodik, ami azért meglehetősen szokatlan és meglepő jelenség. Hangsúlyoznunk kell, hogy ebben az esetben a fény nem visszaverődik, vagy megtörik a

közegben, hanem egy tökéletesen szabályos periodikus struktúrába beépített tökéletlen hibavonal mentén, azt követve terjed.

A fotonikus kristályok optikai tulajdonságai és viselkedése sok további meglepő jelenségben nyilvánulnak meg. Ennek a közleménynek nem célja további részletek tárgyalása, csak azt reméljük, hogy ez a bevezető tanulmány ösztönzés lehet az Olvasóknak, hogy elmélyüljenek ennek a növekedő és fejlődő fizikai és anyagtudományi szakterületnek az irodalmában.

Köszönetnyilvánítás

Ezt a munkát az Országos Tudományos Kutatási Alap támogatta a T 046696 nyilvántartási szám alatt.

Irodalom

- [1] S. G. Johnson, J. D. Joannopoulos: “Photonic crystals: The road from theory to practice”, Kluwer AP, 2002, ISBN: 0792376099
- [2] Kazuaki SAKODA: “Optical Properties of Photonic Crystals”, Springer, Berlin, 2001
- [3] Dennis M. Sullivan: “Electromagnetic Simulations Using the FDTD Method”, IEEE Press, 2000.

5. ábra
Tiltott frekvenciájú hullám terjedése a fotonikus kristályban derékszögű sarokvonalon elhelyezett hibák mentén

