

兆赫波段二維光子晶體之設計製作與分析

Design, Fabrication and Analysis of Two-Dimensional Terahertz Photonic Crystals

洪勝富、齊正中、黃瑞星

Sheng-fu Horng, Cheng-Chung Chi, Ruey-Shing Star Huang

使用高電阻值 Si 晶片堆疊，可製作兆赫波段光子晶體。我們量測分析不同晶片數堆疊的兆赫波穿透。在垂直入射，發現兆赫波穿透十分快速的收斂到定值，只要三片 Si 晶片所觀測到的穿透率已經接近無限大晶體之情況。在 0.4 THz 以下，所量測的結果已有相當好的吻合，如採用正確形狀的晶胞以計算矩陣元，則吻合度可以進一步改善。本文同時也探討了斜向入射的情形。

Two dimensional (2D) terahertz (THz) photonic crystals were fabricated by stacking micro-machined high-resistance silicon substrates. The transmission spectra through 1 to 8 stacked silicon substrates with polarization parallel and perpendicular to the grooves were measured. At normal incidence with either polarization the normalized transmission spectrum quickly converges as the number of stacked substrates increases. For as few as three stacked Si substrates, the observed transmission spectra for the first two bands converge reasonably well to the calculated results for an infinite lattice. Agreement between measurements and calculations is obtained at frequencies lower than 0.4 THz and can be further improved with matrix elements calculated from actual geometry. Oblique incidence is also measured and analyzed.

一、前言

兆赫波段是電磁頻譜中相當重要的一段，從科學研究與檢測應用來說，兆赫波段含有許多重要的能階，如分子的振動、半導體中光激子 (exciton) 與摻雜游離能、高溫超導耦合能隙等，因此可應用

於各種重要物理系統之研究上。又隨著頻寬需求的增加，高頻元件工作頻率也將進入數百 GHz 的範圍，這些高頻元件的量測分析，也必將進入兆赫波段。兆赫波的產生、波頻調制、量測與應用因此成為近幾年來相當重要的課題。兆赫波段由於是一個較為新穎的研究領域，因此在兆赫波信號的調制

等，仍未有系統簡易的方法，而這在一些需要控制兆赫波頻的應用中，卻十分重要。光子晶體⁽¹⁻³⁾ 相關的研究近十餘年來也相當的熱絡，文獻上也有使用光子晶體來達到兆赫波信號時域或頻域之所需改變的報導⁽⁴⁻⁶⁾。由於所需幾何尺度較大，光子晶體的製作，較一般可見光波段光子晶體來得容易，因此兆赫波段光子晶體方面的探討，應有益於兆赫波信號調整與光子晶體特性兩者之研究，這是我們過去幾年製作並分析兆赫波段光子晶體⁽⁷⁾ 的動機。在此論文中，討論我們過去使用 Si 晶片堆疊來製作的兆赫波光子晶體的一些結果，尤其側重在二維光子晶體以及有限尺度之光子晶體對兆赫波傳輸之效應上。

二、二維光子晶體的設計

製作光子晶體的第一步，當然是決定所需光子晶體的尺寸等幾何參數。幾何參數是決定所製作光子晶體落於電磁頻譜何處的最重要參數，因此我們使用平面波展開法來計算二維光子晶體的能帶結構。此一平面波展開法基本上是利用周期結構中的波(電場與磁場)必須遵守 Bloch 定理，並將 Bloch 函數中具有晶格週期性之函數使用 Fourier 展開，然後將之代入 Maxwell 方程式，即可將方程式改寫為矩陣的本徵值問題。我們的計算主要是依照 Plihaland 與 Maradudin 發表的論文⁽⁸⁻⁹⁾。對於二維的情況，光子晶體中的電磁場可分為電場極化 (*E*-polarization，電場平行於二維光子晶體溝槽方向，亦即介質常數不改變的方向) 與磁場極化 (*H*-polarization) 兩種獨立的情況。對此兩種獨立波模，本徵值方程式各為：

$$\sum_{\mathbf{G}'} \kappa(\mathbf{G} - \mathbf{G}') [(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}')] \tilde{A}(\mathbf{k}, \mathbf{G}') = \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{A}(\mathbf{k}, \mathbf{G})$$

(*E*-polarization) (1)

$$\sum_{\mathbf{G}'} \kappa(\mathbf{G} - \mathbf{G}') |\mathbf{k} + \mathbf{G}| |\mathbf{k} + \mathbf{G}'| \tilde{C}(\mathbf{k}, \mathbf{G}') = \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{C}(\mathbf{k}, \mathbf{G})$$

(*H*-polarization) (2)

在兩方程式中， \mathbf{G} 、 \mathbf{G}' 是電場與磁場平面波展開式中的互補空間之晶格向量(由 Bloch 函數中聚晶格周期部分之 Fourier 展開而來)， c 為光速， ω 與 \mathbf{k} 為波之角頻率及波向量， $\kappa(\mathbf{G})$ 為光子晶體介電係數倒數， $1/\epsilon(\mathbf{r})$ ，之 Fourier 展開的係數。在上面的推導中，假設電磁場之本構關係 (consecutive equations) 是區域性 (local) 且即時 (instantaneous) 的，亦即 $D(\mathbf{r}, t)$ 只與 $E(\mathbf{r}, t)$ 有關，且介電係數 $\epsilon(\mathbf{r})$ 只與位置有關。假設光子晶體是由半徑 R ，介電係數 ϵ_a 之圓柱處於介電係數 ϵ_b 的介質中，且光子晶格具有三角 (trigonal) 對稱，而其基本晶胞 (primitive cell) 邊長為 a ，則經計算可得：

$$\kappa(\mathbf{G}) = \frac{1}{\epsilon_b} \delta_{\mathbf{G},0} + \left(\frac{1}{\epsilon_a} - \frac{1}{\epsilon_b} \right) f \frac{2J_1(|\mathbf{G}|R)}{|\mathbf{G}|R}$$

其中 $f = \frac{2\pi R^2}{\sqrt{3}a^2}$ 為光子晶體的填充因子 (filling factor)， $J_1(x)$ 為一階之第一類 Bessel function。

上述展開之本徵值方程式 (1) 與 (2) 是可寫為一無窮大矩陣之本徵值方程式，實際上計算當然不可能真的拿無窮大的矩陣來算，因此通常需要取一定數目的平面波。如果需要進一步簡化計算，通常可考慮加入波向量後的對稱性，然後預先組合平面波，使成為具有所需對稱性的基底函數，這樣可以大幅化簡所需矩陣的維數，這是群論在能帶結構的應用；在此短文中，為避免過於複雜的推導，將不予以介紹。然而可以自互補空間晶格中，由中心的零向量開始，逐步選取所需的互補空間晶格向量(每一個代表一個平面波展開的基底向量)來計算。我們可以藉由選取不同數目所計算得的能帶結構是否趨於定值來初步判斷，所選的矩陣是否夠大。一般來說，如果只需看前四個能帶，將發現大約 169 互補空間晶格向量已經足夠。關於平面波展開法之收斂問題可參看參考文獻 10。對每一個主要對稱方向之波向量 \mathbf{k} ，可以解矩陣之本徵值方程式求得 ω ，使用 Matlab，上述計算相當的簡易。

圖 1(a) 及 (b) 是計算所得上述描述的二維三角光子晶體的 *E*- 與 *H*-polarization 能帶結構。在這些計算中， ϵ_a 與 ϵ_b 分別設為 1 與 11.74 (Si 的相對介電係數)，而填充因子 f 則為 0.56。如圖 1 (a) 及 (b) 所

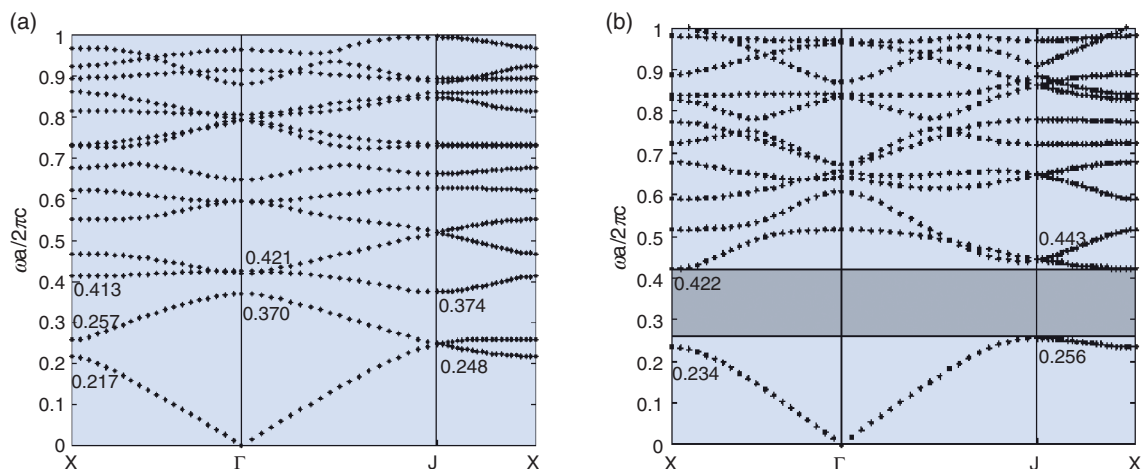


圖 1. 計算所得二維三角光子晶體之能帶圖，(a) E -polarization，(b) H -polarization，光子晶體之填充因子為 0.56。結構與介電係數等如文中描述。

示，在歸化頻率 (normalized frequency) $\tilde{\omega} \equiv \omega a / 2\pi c \approx 0.37$ 附近有完全能隙。我們也試過介於 0.55 到 0.85 的不同填充因子，觀察到在 $\tilde{\omega}$ 介於 0.37 與 0.5 間都有完全能隙。此與 Plihaland *et al.* 所報告者同。因為我們在實驗上所需要的兆赫頻率為 0.05–1.0 THz，因此可選擇所需要的三角晶格大小。

三、光子晶體的製作與量測

我們的光子晶體是使用半導體製程在 Si 晶片上先製作溝槽，然後再堆疊起來。每一片晶片結構與其堆疊方式如圖 2 所示。每一 Si 晶片都是雙面拋光高電阻率 ($> 10 \text{ k}\Omega \cdot \text{cm}$) (100) Si 晶片，其厚度

是 $250 \mu\text{m}$ ，直徑為 4"。在每一片晶片兩面先長上 600 \AA LPCVD (low-pressure chemical vapor deposition) Si_3N_4 ，然後使用 RIE (reactive ion etching) 來開出所需的區域。然後以 KOH 非等向性蝕刻來做出兩面所需要的溝槽。最後使用熱磷酸來除去留下來的 Si_3N_4 。晶片上結構的形狀與尺度如圖 2(b)，單位是微米。溝槽結構佈滿晶片上 $6 \text{ cm} \times 6 \text{ cm}$ 正方形區域，在此區域的旁邊為了對準不同晶片，則另外蝕刻了一個溝槽，然後使用光纖來當作相鄰兩片間的對準。

圖 3(a) 及 (b) 是製作出來的 Si 晶片的側面與正面電子顯微鏡照片。側面的深度尺寸等使用 Dektak3030 Surface Texture Analysis System (Veeco

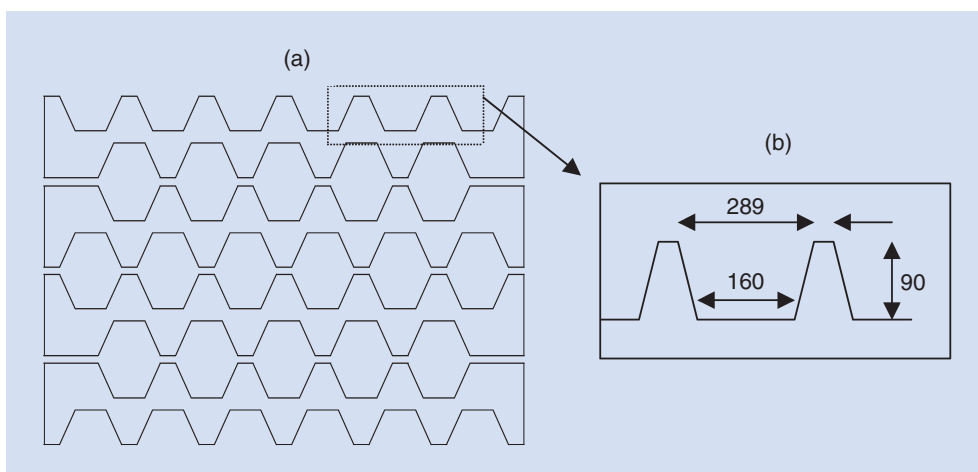


圖 2. (a) 以 Si 晶片堆疊而成二維光子晶體之結構，(b) 晶片上形狀與尺寸，圖中單位是 μm 。

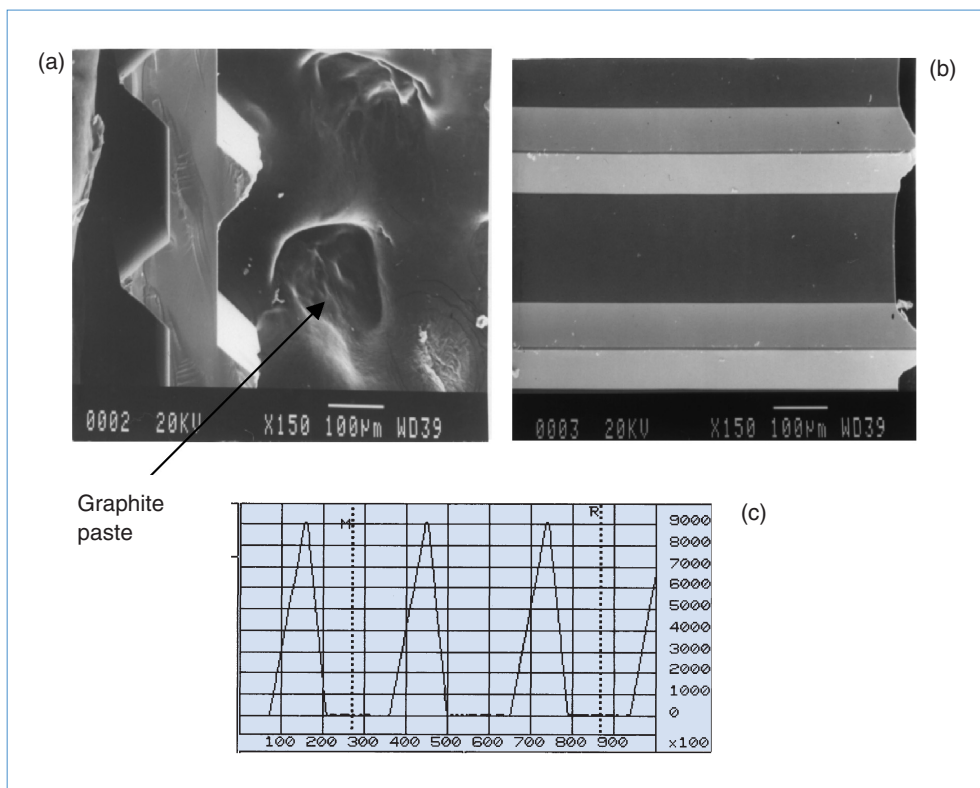


圖 3. 製作完成之光子晶體 (a) 側面，(b) 上視 SEM 照片，(c) 以 Dekak3030 Surface Texture Analyzer 量測得之表面結構，橫軸單位為 μm ，垂直軸每格為 10 nm。

Instruments Inc.) 得量測結果如圖 3(c)。由於製作上的問題，我們發現對準溝槽深度稍有不足，因此當晶片組成光子晶體後，兩相鄰晶片間會有 $15 \mu\text{m}$ 的間隙。這間隙將造成光子晶體的晶格變形與對稱性的喪失。

製造好的光子晶體是使用我們實驗室的兆赫波量測系統來量測兆赫波穿透率。此一量測系統是使用一 Ti-sapphire 超短脈衝雷射系統 (Tsunami, Spectra-Physics Inc.) 來激發一個在 GaAs 晶片上製作的大孔徑光導兆赫發射天線 (large-aperture photoconductive THz emitter)，並且使用一 ZnTe 電光偵測器 (electro-optical detector) 來量測兆赫波強度。光脈衝寬是 100 fs，而其波長是 785 nm。關於此系統可閱讀參考文獻 11。

四、結果與討論

圖 4(a) 是量測得使用一到八片 Si 晶片堆疊的光子晶體垂直入射 (TX 方向) *E*-polarization 兆赫波的穿透波對時間的關係。

為了比較，我們在圖中也加入未經光子晶體樣品的兆赫波信號 (標為 0 者)。使用 Fourier 變換，將圖 4(a) 中各信號轉到頻域，然後以自由空間之頻譜除之，即可得不同堆疊數有限光子晶體之兆赫波穿透率，如圖 4(b)。相同的對 *H*-polarization 兆赫波亦可相同的處理，所得結果顯示於圖 5(a) 與 (b)。

如圖 4(b) 與圖 5(b) 所示，前兩光子晶體頻段的兆赫波穿透率隨著堆疊片數很快的收斂。事實上由觀察顯示，只要三片 Si 晶片，兆赫波穿透率基本上已經達到穩定。對於較高的能帶，尤其是 *E*-polarization 的情形收斂則較慢。我們量測得的 *H*-polarization 第一能隙 (0.18–0.33 THz) 比起 *E*-polarization 第一能隙 (0.18–0.25 THz) 寬得多，此與前面的計算結果相符合。但是我們所量得的光子晶體能隙所出現的頻率，則較使用圓柱形內坎溝槽結構所計算上得到的來得低。同時，量測的結果與計算在 0.4 THz 以上，差異頗大。

在上面的計算上，使用圓柱形的內坎溝槽 (介電係數為 1)。雖然所使用的填充因子與實際樣品

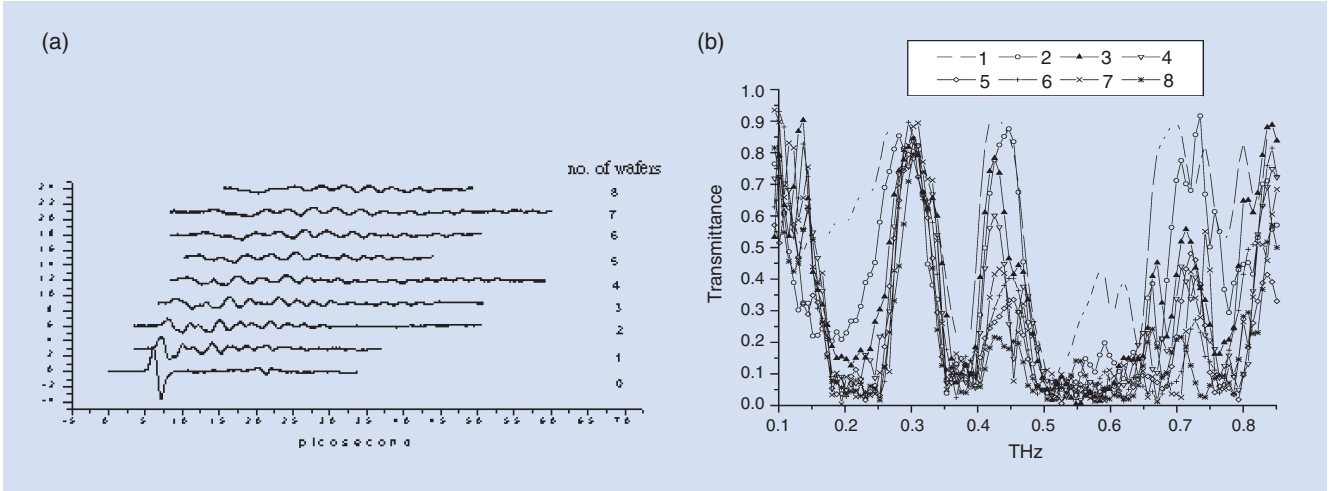


圖 4. (a) 不同堆疊片數光子晶體所量得 *E*-polarization 兆赫波穿透與時間之關係，(b) 所量得穿透率對頻率的關係。

製作時所用相同，但晶片上溝槽並非圓柱形。因此在計算矩陣元時候，可能產生誤差。同時樣品中的空氣間隙，也讓光子晶體愈加偏離前面的矩陣元計

算公式。為檢驗這一點是否造成實驗觀測能隙頻率與計算所得不同的原因，我們使用實際的晶胞結構去做 Fourier 轉換，所計算得到的 $\kappa(\mathbf{G})$ 如下：

$$\kappa(\mathbf{G}) = \frac{1}{\varepsilon(am_1 + h) \left(b + 2c + d + \frac{h}{m_1} \right)} \left\{ \frac{e^{ik_1 \left(a + \frac{h}{m_1} \right)} - 1}{k_1 k_2} + \frac{e^{ik_1 \left(a + \frac{h}{m_1} + 2c + d \right)} - e^{ik_1 \left(a + \frac{h}{m_1} \right)}}{k_1 k_2} \right. \\ \left. - \frac{e^{i \left[k_1 \left(b + 2c + d + 2 \left(a + \frac{h}{m_1} \right) \right) + k_2 \left(a + \frac{h}{m_1} \right) m_1 \right]} - e^{i \left[k_1 \left(a + b + 2c + d + \frac{b}{m_1} \right) + k_2 \left(a + \frac{b}{m_1} \right) m_1 \right]}}{k_1 k_2} - \frac{e^{i \left[k_1 \left(a + \frac{h}{m_1} \right) + k_2 \left(a + \frac{h}{m_1} \right) m_1 \right]} - 1}{k_2 (k_1 + k_2 m_1)} \right. \\ \left. + \frac{e^{i \left[k_1 \left(b + 2c + d + 2 \left(a + \frac{h}{m_1} \right) \right) + k_2 \left(b + 2c + d + 2 \left(a + \frac{h}{m_1} \right) \right) m_1 - k_2 \left(a + b + 2c + d + \frac{h}{m_1} \right) m_1 \right]} - e^{ik_1 \left(a + \frac{h}{m_1} + 2c + d \right)}}{k_2 (k_1 + k_2 m_1)} \right. \\ \left. - \frac{e^{i \left[k_1 \left(a + b + 2c + d + \frac{h}{m_1} \right) + k_2 \left(a + \frac{h}{m_1} \right) \left(a + b + 2c + d + \frac{h}{m_1} \right) m_1 \right]} - e^{i \left[k_1 \left(a + \frac{h}{m_1} \right) + k_2 \left(a + \frac{h}{m_1} \right)^2 m_1 \right]}}{k_2 (k_1 + k_2 am_1 + hm_1)} \right\} \\ + \left(1 - \frac{1}{\varepsilon} \right) \frac{1}{(am_1 + h)(b + 2c + d + h/m_1)} \left\{ \frac{e^{ik_1 a} - 1}{k_1 k_2} + \frac{e^{ik_1 b} - e^{ik_1 a}}{k_1 k_2} - \frac{e^{i(k_1 b + k_2 am_1)} - e^{i(k_1 a + k_2 am_1)}}{k_1 k_2} \right. \\ - \frac{e^{i(k_1 (a + b + 2c + d) + k_2 am_1)} - e^{i(k_1 (b + c) + k_2 am_1)}}{k_1 k_2} + \frac{e^{i(k_1 (b + c + d) + k_2 cm_2)} - e^{i(k_1 (b + c) + k_2 cm_2)}}{k_1 k_2} - \frac{e^{i(k_1 (b + c + d) + k_2 (am_2 - cm_2))} - e^{i(k_1 (b + c) + k_2 (am_1 - cm_2))}}{k_1 k_2} \\ - \frac{e^{i(k_1 a + k_2 am_1)} - 1}{k_2 (k_1 + k_2 m_1)} + \frac{e^{i \left[k_1 \left(a + b + 2c + d \right) - k_2 \left(b + 2c + d \right) m_1 + k_2 \left(a + b + 2c + d \right) m_1 \right]} - e^{ik_1 (b + 2c + d)}}{k_2 (k_1 + k_2 m_1)} + \frac{e^{ik_1 (b + 2c + d)} - e^{i \left[k_1 (b + c + d) - k_2 (b + c + d) m_2 + k_2 (b + 2c + d) m_2 \right]}}{k_2 (k_1 + k_2 m_2)} \\ - \frac{e^{i \left[k_1 (b + c) - k_2 (b + c) m_2 + k_2 (am_1 + hm_2) \right]} - e^{i \left[k_1 b - k_2 hm_2 + k_2 (am_1 + hm_2) \right]}}{k_2 (k_1 - k_2 m_2)} \\ \left. + \frac{e^{i \left[k_1 (b + 2c + d) + k_2 (b + 2c + d) m_2 + k_2 (am_1 - (b + 2c + d) m_2) \right]} - e^{i \left[k_1 (b + c + d) + k_2 (b + c + d) m_2 + k_2 (am_1 - (b + 2c + d) m_2) \right]}}{k_2 (k_1 + k_2 m_2)} \right\}$$

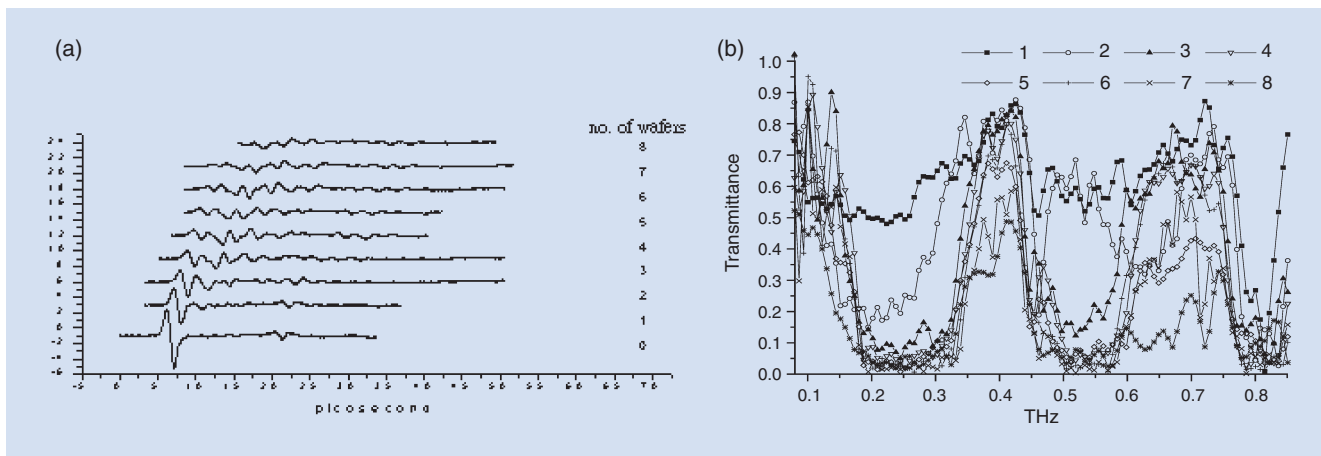


圖 5. (a) 不同堆疊片數光子晶體所量得 H -polarization 兆赫波穿透與時間之關係，(b) 所量得穿透率對頻率的關係。

上式中各幾何尺度參數如圖 6 中所示，而 k_x 與 k_y 則為波向量沿 x 與 y 軸的分量。

使用此一 $\kappa(\mathbf{G})$ ，可以求得較為準確的矩陣元。重複前面計算可得實際結構中的能帶結構如圖 7(a) 及 (b)。由此可以看出圖中第一能隙確實會出現在比較低的頻率，但與實驗所量得仍有小偏差。我們猜測此一剩餘的偏差應該是由於實際樣品晶胞與空氣間隙不規則所造成。之前 Agio 等在文獻上亦有類似的觀察⁽¹²⁾。

上述量測中兆赫波是正向入射，我們也量測斜向入射的兆赫波穿透率，此點在使用光子晶體於色散控制等方面，尤具重要性。圖 8(a) 與 (b) 所示為

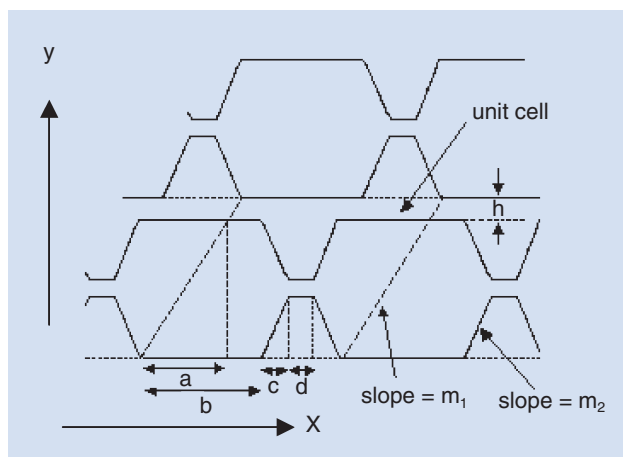


圖 6. 實際元件之晶胞結構與文中公式所用符號。

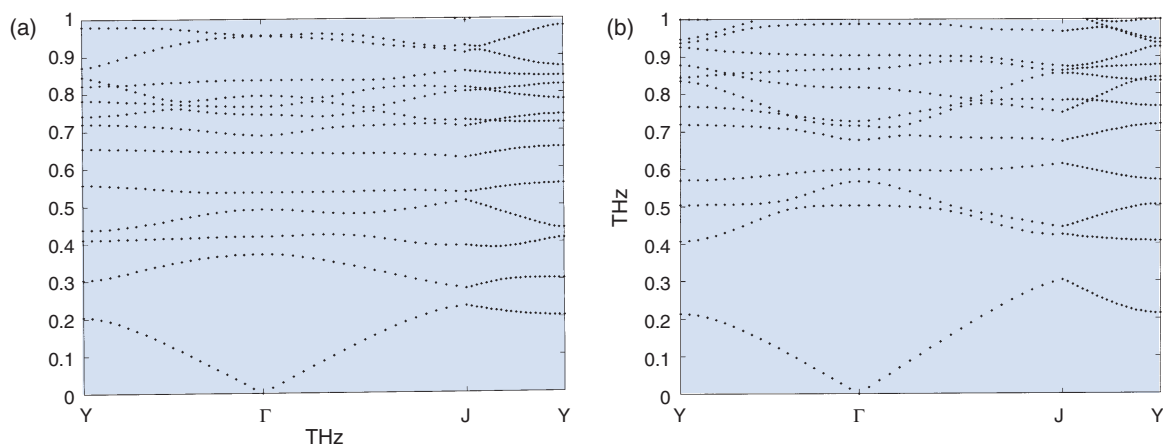


圖 7. 使用改良過幾何結構所計算得二維三角光子晶體之能帶圖，(a) E -polarization，(b) H -polarization。光子晶體之填充因子為 0.56。

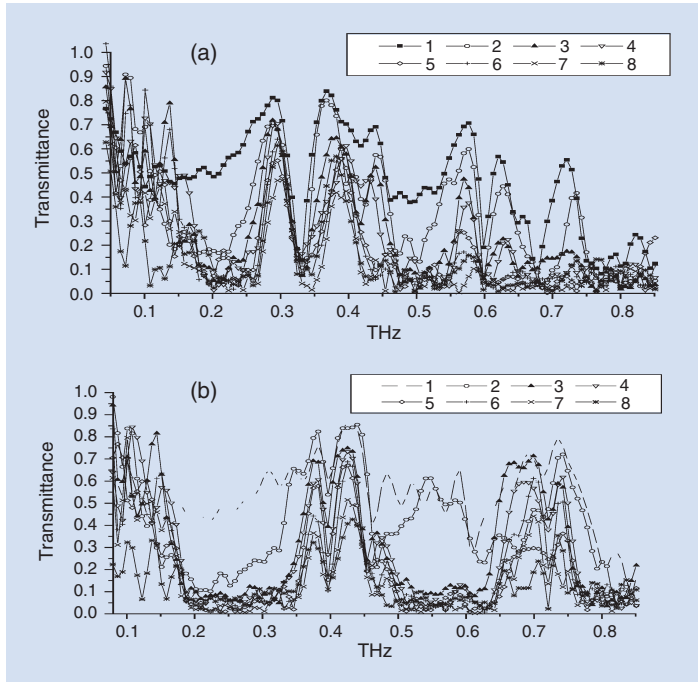


圖 8. (a) *E*-polarization 30° 斜向入射兆赫波穿透率，
(b) *H*-polarization 30° 斜向入射兆赫波穿透率。

入射角之 *E*- 與 *H*-polarization 之兆赫波穿透率對頻率的關係。比較起正向入射的情況，第一能隙顯然都變大了。

為了分析斜向入射的兆赫穿透，我們在 *k*-平面上畫出第一與第二能帶的等頻率圖，如圖 9。在圖 9 中， k_1 與 k_2 代表波向量平行與垂直於光子晶體與空氣介面方向之分量。由於電磁波入射光子晶體，平行於介面之波向量分量需守恆，因此我們可以畫出 30° 入射時在兆赫波光子晶體內之波向量，如圖 9 中虛線所示。因為上述波向量在介面水平分量需守恆以及在能帶邊緣色散的關係，顯然以一定角度入射的電磁波不能取所有能帶中的頻率。因此斜向入射時所觀察到能隙，應該大於正向入射。比如如圖 9(a) *E*-polarization 情形中 30° 斜向入射所得第一能隙為 0.20–0.31 THz，又如圖 9(b) 中 30° 斜向入射所得第一能隙為 0.22–0.42 THz，此兩者皆高於正向入射者。這些皆與實驗結果相符合。當然如正向入射一般，此時亦有頻率上的小偏差。

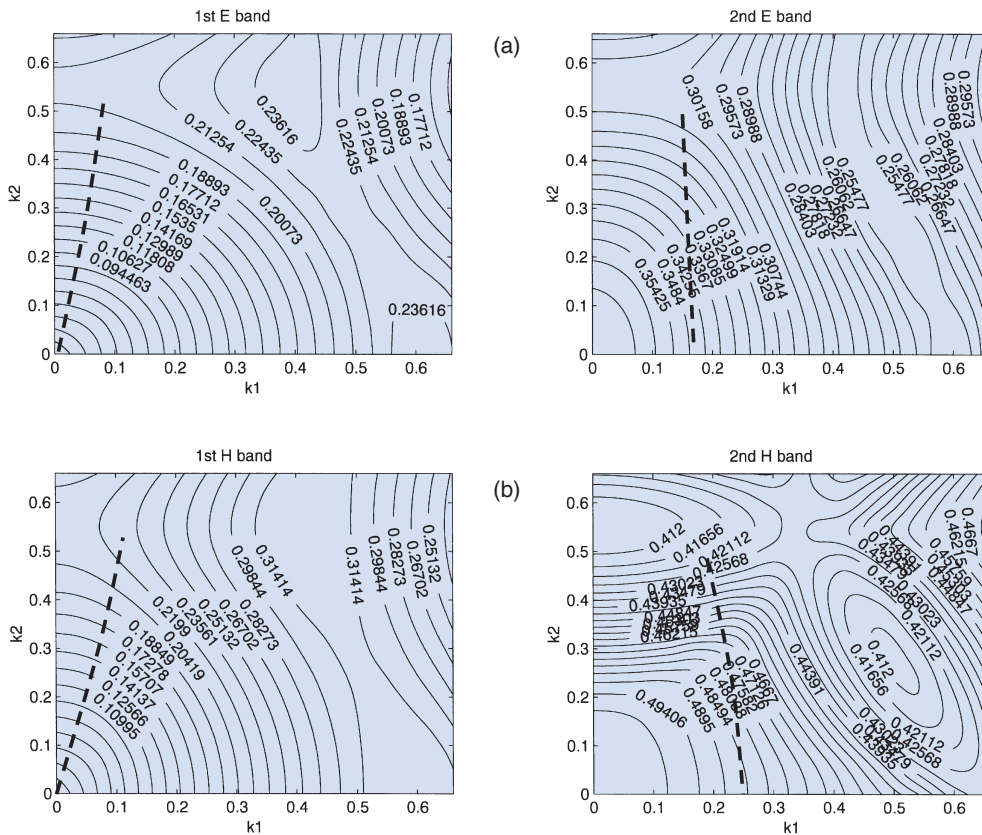


圖 9.
上述光子晶體 *k*-平面上第一與第二能帶之等頻率圖，(a) *E*-polarization，
(b) *H*-polarization。圖上虛線為符合邊界條件之 30° 斜向入射兆赫波在光子晶體內不同頻率之波向量。

五、結論

我們以 Si 晶片堆疊的方式製作兆赫波段二維光子晶體，並研究不同片數光子晶體的穿透率。我們發現在對於第一與第二能帶，只要三片 Si 晶片，兆赫波穿透率基本上已經達到穩定。對於較高的能帶，尤其是 E-polarization 的情形收斂則較慢。但我們量測得的光子晶體能隙所出現的頻率，則較使用圓柱形內坎溝槽結構所計算上得到的來得低。同時，量測的結果與計算在 0.4 THz 以上，有相當大的差異。我們使用了一個改進的矩陣元計算，並獲得與實驗量測結果較為接近的能隙。我們也研究斜向入射的情況，藉由 k -空間等頻率圖的分析，可以獲得斜向入射的特性，與實驗結果有相當好的吻合。

誌謝

我們感謝國科會過去數年來對我們在兆赫波段以及時間解析量測的資助。

參考文獻

1. E. Yablonovitch, *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 2059 (1987).
 2. J. K. Ranka, R. S. Windeler, and A. J. Stentz, *Opt. Lett.*, **25**, 25 (2000).
 3. J. D. Joannopoulos, R. D. Meade, and J. N. Winn, *Photonic Crystals-Molding the Flow of Light*.
 4. E. Ozbay, E. Michel, G. Tuttle, R. Biswas, and K. M. Ho, *Opt. Lett.*, **19**, 1155 (1994).
 5. E. Ozbay, E. Michel, G. Tuttle, R. Biswas, M. Sigalas, and K. M. Ho, *Appl. Phys. Lett.*, **64**, 2059, (1994).
 6. E. Ozbay, E. Michel, G. Tuttle, R. Biswas, K. M. Ho, J. Bostak, and D. M. Bloom, *Appl. Phys. Lett.*, **65**, 1617 (1994).
 7. C. C. Chi, H. D. Wang, S. S. Pai, W. C. Lai, S. F. Horng, and R. S. S. Huang, *Fabrication and Characterization of Terahertz Photonic Crystals, Proc. SPIE*, **4643**, 19, *Ultrafast Phenomena in Semiconductors*, **VI**, 24 (2002).
 8. M. Plihaland, A. Shambrook, and A. A. Maradudin, *Opt. Comm.*, **80**, 199 (1991).
 9. M. Plihaland and A. A. Maradudin, *Phys. Rev. B*, **44**, 8565 (1991).
 10. H. S. Sozuer, J. W. Haus, and R. Inguva, *Phys. Rev. B*, **45**, 13962 (1992).
 11. 洪勝富, 齊正中, 短脈衝雷射激發兆赫輻射技術及其應用, 中華民國物理學會物理雙月刊, 26 (2) (2001).
 12. M. Agio, E. Lidorikis, and C. M. Soukoulis, *J. Opt. Soc. Am. B*, **17** (12), 2037 (2000).
-
- 洪勝富先生為美國普林斯頓大學電機工程博士，現任國立清華大學電機工程系與電子工程研究所教授。
 - 齊正中先生為美國賓州大學物理博士，現任國立清華大學物理系及材料中心教授，並兼任國立台灣大學系統奈米科學中心主任。
 - 黃瑞星先生為澳洲新南威爾斯大學電機工程博士，現任國立清華大學電機工程系與電子工程研究所教授。
 - Sheng-fu Horng received his Ph.D. in electrical engineering from Princeton University, USA. He is currently a professor in the Department of Electrical Engineering and Institute of Electronics Engineering at National Tsing Hua University.
 - Cheng-Chung Chi received his Ph.D. in physics from the University of Pennsylvania, USA. He is currently a professor in the Department of Physics and Material Research Center at National Tsing Hua University. He is also the director of Center of Nano-Science and Technology, University System of Taiwan.
 - Ruey-Shing Star Huang received his Ph.D. from the University of New South Wales, Sydney, Australia. He is currently a professor in the Department of Electrical Engineering and Institute of Electronics Engineering at National Tsing Hua University.