

3次元フォトニック結晶の計算機支援設計・製造と電磁波回折挙動

大阪大学接合科学研究所 桐原聡秀、宮本欽生

1. 緒言

誘電体の三次元格子に電磁波を入射させると、周期に一致する波長のみが回折作用を受け、特定周波数の電磁波が構造体への伝播を禁止される。このような誘電体の三次元構造はフォトニック結晶と呼ばれ、形成される電磁波の禁止帯はフォトニックバンドギャップと呼ばれる[1-2]。ナノメートルオーダーの結晶構造により、電磁波として光を制御し、光回路やスーパープリズムなどを開発する研究が幅広く行われてきた。さらに、ミリメートルオーダーの構造によりミリ波やマイクロ波を制御し、高指向性のアンテナや電磁波防壁を作製する動きも見られる[3]。

ダイヤモンド格子構造は三次元的に等方な周期構造を有し、あらゆる方向に対して同程度の波長に回折作用を示すため、全方位への電磁波伝播を禁止する完全バンドギャップを形成する[4]。我々はCAD/CAM方式の光造形法を用いて、ミリメートルオーダーのダイヤモンド格子構造を形成し、マイクロ波およびミリ波制御用のフォトニック結晶を開発している[5-6]。今年度は、結晶周期が異なるダイヤモンド格子構造および反転構造のフォトニック結晶サンプルを作製し、バンドギャップ形成周波数の変化を観察した。そして、それぞれの結晶構造の設計データを平面波展開法による電磁バンド構造のシミュレーションに適用し、理論計算と測定結果の差異について検討を加えた。フォトニック結晶を用いた電磁波制御デバイスの開発に必要不可欠である電磁波特性予測法を活用した、三次元構造の最適化手法の確立を目指す。

2. 実験方法

三次元CADソフトウェア(トヨタケラム社: Think Design Ver. 6)を用いて、ダイヤモンド型フォトニック結晶の設計を行った。結晶構造には誘電体格子が三次元的に組み合わさりダイヤモンド構造を形成する格子型と、誘電体中に空気格子が三次元的に展開してダイヤモンド構造を形成する反転型を採用した。格子の直径と長さの比率は2:3として設計を行った。

液状のエポキシ系光硬化性樹脂にチタニア系セラミッ

ク粒子を体積分率15vol%で分散し、脱泡処理を24時間連続で行った。混合溶液の液面に対して波長355nmでスポット径100 μm の紫外線レーザーを出力120mWで照射し、直径150 μm の球状硬化領域を形成した。CADデータから得られた二次元断面データに従って、レーザービームを速度90m/sで走査し、厚さ120 μm の誘電体薄膜を形成した。これらを100 μm 間隔で連続的に積層して三次元構造を作製した。誘電体格子の断面に対してSEM観察を行い、セラミック粒子の分散状態を確認した。

平面波展開法により計算を行い、格子型および反転型ダイヤモンド結晶に対する電磁バンド構造を得た。三次元データから得られた誘電体の空間分布をもとにして、誘電率周期関数を導出し、空間におけるダイヤモンド結晶の無限格子に対して、127個の平面波展開を仮定した。第一ブリルアン面近傍における電磁波回折についてバンド計算を行い、結晶方位 Γ -L<111>, Γ -X <100>, Γ -K<110>方向に対するバンドギャップ形成を予測した。

ネットワークアナライザ(アジレントテクノロジー社製: HP8720D)を用いて、ダイヤモンド型フォトニック結晶におけるTEモードの電磁波透過率を測定した。バルク材の誘電率は誘電体プローブキット(アジレントテクノロジー社製: HP8510B)を用いて測定した。

3. 結果と考察

光造形法により作製したダイヤモンド構造を有するチタニア系セラミック粒子分散型フォトニック結晶を Fig. 1に示す。格子型および反転型構造における(100), (110), (111)結晶面がミリメートルオーダーで実現されている。誘電体および空気格子の直径や長さ、また結晶格子間隔をマイクロメートルで測定し、設計データと比較したところ、寸法誤差は0.15%未満にとどまっていた。エポキシ樹脂中に分散したチタニア系セラミック粒子は、平均粒径5 μm 程度で凝集することなく均一に分散していた。この複合材料の誘電率をプローブ法により測定したところ10程度であった。

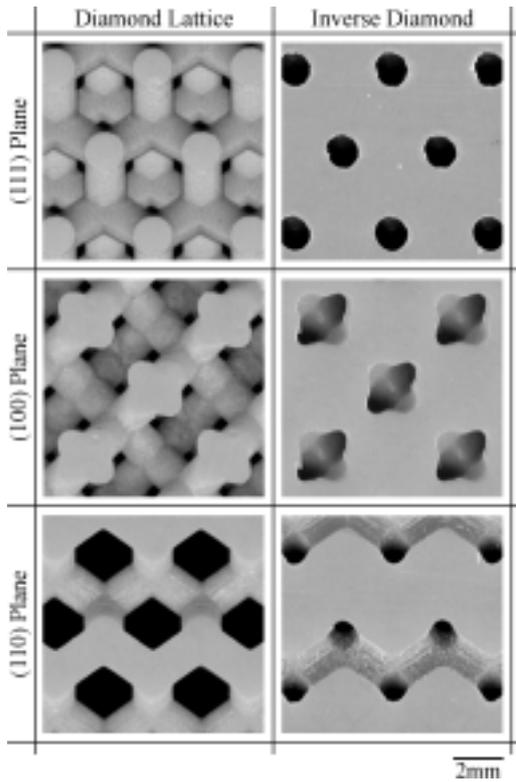


Fig. 1 Lattice planes of the normal and inverse diamond structures.

セラミック粒子を分散したエポキシ樹脂のバルク材に対する電磁波特性を評価したところ、透過率が 0dB を示し、電磁波がサンプルにほとんど吸収されることなく透過することが確認された。格子定数が 22mm であるダイヤモンド格子構造の電磁波透過特性を Fig. 2 に示す。結晶の $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ 方向に対して電磁波を透過させたところ、いずれの場合も同程度の周波数領域において透過率の急激な減衰が見られる。減衰帯の幅は 1.5GHz 程度であるが、最大減衰量は 50dB に達する。フォトニックバンドギャップの形成を表わしていると考えられる。

平面波展開法により計算したダイヤモンド格子構造の電磁バンドを Fig. 3 に示す。図中の白丸は、測定によって得られた各方位に対するバンドギャップの高周波端と低周波端である。測定結果は第一バンドギャップと良く一致している。全方位に共通な完全バンドギャップが形成されており、作製した結晶が 1GHz 程度の帯域であらゆる方向に対する電磁波の進行を禁止できることがわかる。

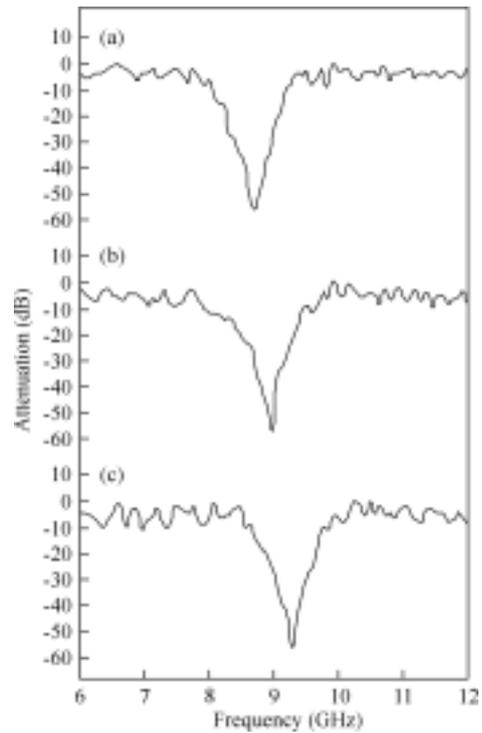


Fig. 2 Attenuations of transmission amplitude of microwave through the normal diamond samples as a function of frequency: (a) Γ -L $\langle 111 \rangle$ direction, (b) Γ -X $\langle 100 \rangle$, (c) Γ -K $\langle 110 \rangle$.

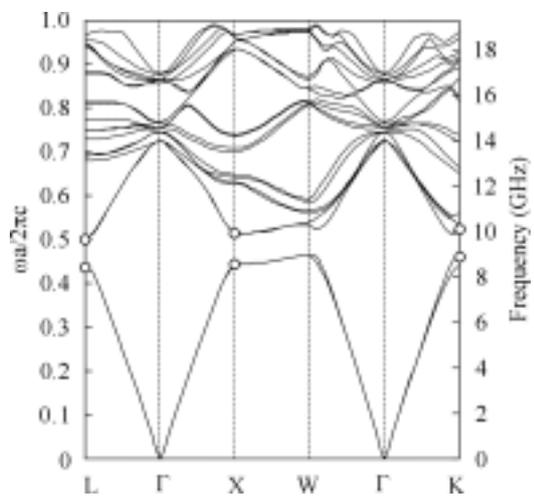


Fig. 3 An electromagnetic band diagram for the normal diamond structure. The dielectric constant of the lattice is 10. Volume ratios of the dielectric lattice and air are 67 and 33%, respectively. Open circles show the measured edges of the bandgaps in microwave transmission.

格子定数が 22mm の反転型ダイヤモンド構造に対する電磁波透過特性を Fig. 4 に示す。

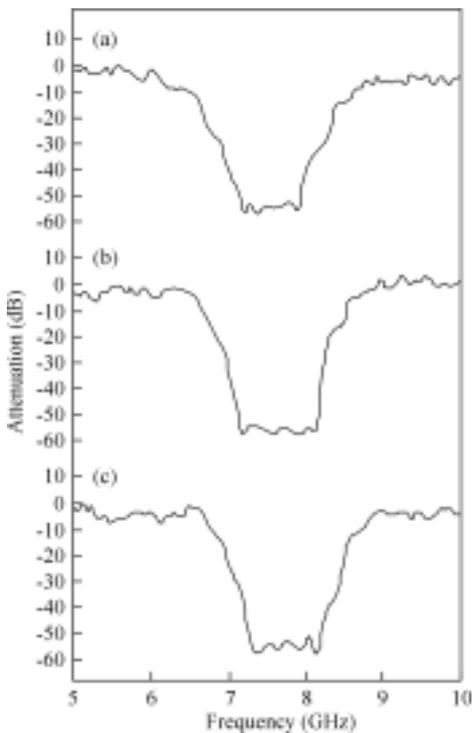


Fig. 4 The attenuations of transmission amplitude of microwave through the inverse diamond samples as a function of frequency: (a) Γ -L $\langle 111 \rangle$ direction, (b) Γ -X $\langle 100 \rangle$, (c) Γ -K $\langle 110 \rangle$.

結晶の $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ 方向について、周波数 2GHz にわたり最大減衰量が 50dB におよぶバンドギャップが形成されている。反転型ダイヤモンド構造のバンド図を Fig. 5 に示す。電磁波透過率の測定で得られた減衰帯の高周波および低周波端もあわせて示した。測定結果は第一バンドギャップによく一致している。バンドギャップは結晶方位によらず、ほぼ同じ周波数領域に形成されており、1.5GHz にわたる完全バンドギャップの形成が見られる。反転構造はより低周波側にギャップを形成する傾向が見られる。これは反転構造の場合は誘電体の体積率が増えることで、結晶全体のマクロ的な誘電率が増加し、より長い波長の電磁波を回折するためであると考えられる。

フォトリックバンドギャップの形成モデルを模式的に描き Fig. 6 に示した。誘電率の周期構造は 1 次元の場合を想定しており、Fig. 6-(a), (b), (c), (d)の移り変わりは、結晶を伝播する電磁波の波数ベクトルが小さくなりエネルギーが次第に増加する状況を表わしている。

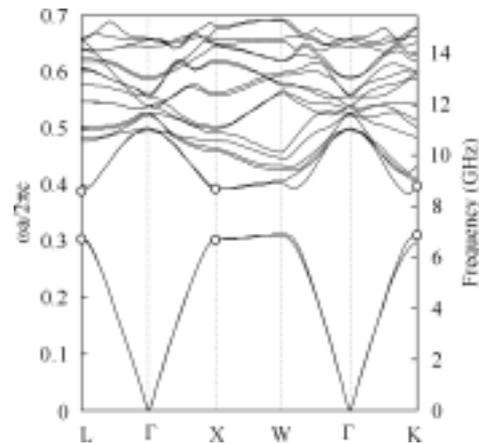


Fig. 5 The electromagnetic band diagram for the inverse diamond structure. The dielectric constant of the lattice is 10. Volume ratios of the dielectric lattice and air are 33 and 67%, respectively. The open circles show the measured edges of the bandgaps in microwave transmission.

電磁波の波長が結晶周期と等しくなると、回折により波が反射される。このとき、結晶中では二つの定在波が形成される。一方は Fig. 6-(b)に示される誘電体領域で振動するエネルギーの低い波であり、他方は Fig. 6-(c)に示される空気領域で振動するエネルギーの高い波である。両者は同じ波数ベクトルを持つが、エネルギーが異なるためにバンド曲線に不連続が生じる。この不連続領域のエネルギー値すなわち周波数を持つ電磁波モードは、結晶中に存在することが許されないため、電磁波伝播を禁止するフォトリックバンドギャップが形成される。ギャップを挟んで、低周波数側の第一ブリルアンゾーンは誘電体バンドと呼ばれ、高周波数側の第二ブリルアンゾーンは空気バンドと呼ばれる。ダイヤモンド格子構造の誘電体の体積率は 33% であり、反転構造ではその 2 倍の 67%となる。結晶中における誘電体の体積率が増加すれば、誘電体領域で振動する電磁波のエネルギーが引き下げられ、誘電体バンドのエネルギー端がより低周波数側へ移動し、結果として幅広いバンドギャップが得られる。格子構造のままバンドギャップ幅を増加させる手段としては、格子の直径を太くして誘電体の体積を稼ぐ方法があるが、2 倍の体積増加を実現させようとすると、隣り合う格子が接触してしまいダイヤモンド構造が形成できない。また、格子の誘電率を増加させて誘電体バンドのエネルギーレベルをより引き下げれば、

バンドギャップ幅を広げることも可能であるが、平面波展開法により予測計算を行った結果、反転構造が形成すると同程度のバンドギャップ幅を実現するには、結晶格子の誘電率を約3倍に増加させる必要があることが分かった。チタニア系粒子をエポキシ系樹脂に分散して誘電率を向上させる手法を用いるのであれば、粒子の含有量を50vol%程度まで引き上げる必要がある。樹脂に対する多量の粒子分散が極めて困難である上に、粘性の高さから光造形は困難であると予想される。実験に用いた比誘電率が10程度の媒質を用いるのであれば、ダイヤモンド格子構造と同様に等方性のある誘電率分布を有し、誘電体の体積率のみを増加させたダイヤモンド反転構造は、フォトリソグラフィ結晶の構造として幅広いバンドギャップを得るのに効率の良い形態といえる。

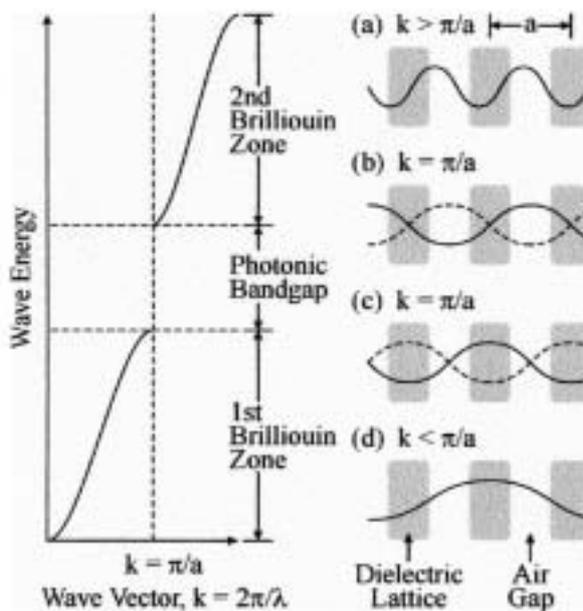


Fig. 6 A schematic illustration of bandgap formation in the photonic crystal: (a)-(c) wave modes in the periodic arrangement of the dielectric materials.

ダイヤモンド格子構造および反転構造において、格子定数とバンドギャップの関係をFig. 7に示す。白丸は

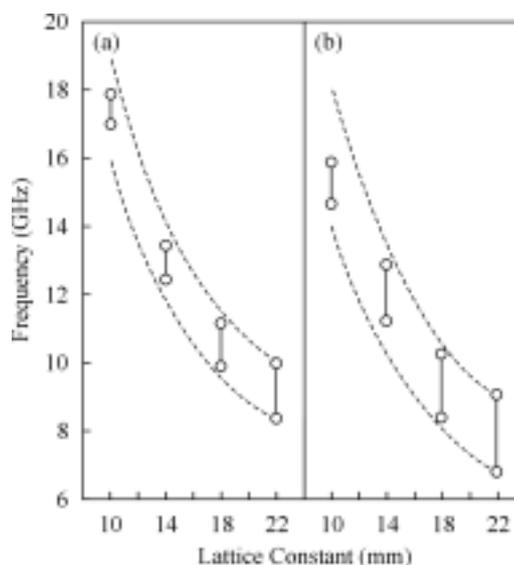


Fig. 7 Variations of electromagnetic bandgaps as a function of the lattice constant for Γ -X $\langle 100 \rangle$ direction: (a) the normal diamond structure, (b) the inverse form. The open circles and dotted lines show the measured and calculated bandgap edges, respectively.

電磁波透過率の測定により得られたバンドギャップの測定値を表わし、点線は平面波展開法により得られたバンドギャップの計算値を表わす。結晶の $\langle 100 \rangle$ 方向に対する結果をまとめた。格子定数が大きく電磁波周波数が低い場合には、バンドギャップの計算値と測定値は比較的良く一致している。ところが、格子定数が小さく電磁波周波数が高くなるにしたがって、バンドギャップ幅の測定値が狭くなり、計算値との間に差が見えはじめる。他の結晶方位 $\langle 110 \rangle$ および $\langle 111 \rangle$ についても、格子間隔に対するバンドギャップの計算値と測定値の差異には同様の傾向が見られた。

格子型および反転型のダイヤモンド構造において、格子定数と完全バンドギャップの関係をFig. 8に示す。白丸は結晶の $\langle 111 \rangle$, $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ 方向に対するバンドギャップの測定値を表わし、点線は全方位に共通な完全バンドギャップの計算値を表わす。格子定数が大きく電磁波周波数が低い場合には、各結晶方位に形成されるバンドギャップの帯域にばらつきが見られる。

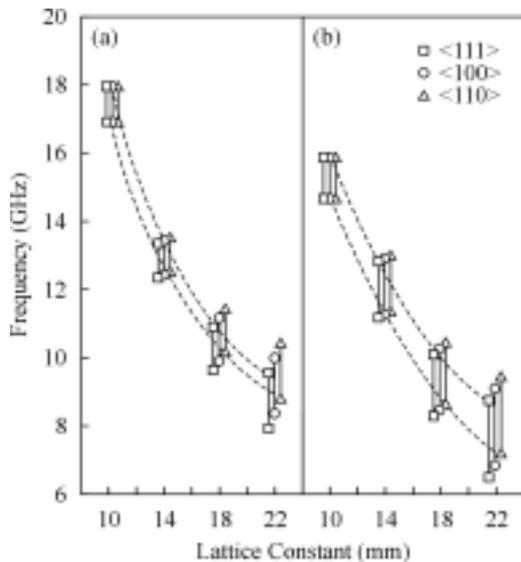


Fig. 8 Variations of perfect bandgaps as a function of lattice constant: (a) normal diamond structure, (b) inverse form. The open circles and dotted lines show the measured and calculated bandgap edges.

一方、格子定数が小さく電磁波周波数が高くなるにしたがって、バンドギャップの測定値が完全バンドギャップの計算値に収束していくのがわかる。格子定数が変化しても結晶の三次元構造は相似であるから、回折挙動に違いが見られる理由が結晶構造にあるとは考えにくい。

導波管内における電磁波の伝送モードを Fig. 9 に示した。実線の矢印が電場の振動方向を表わし、点線の矢印が磁場の振動方向を表わしている。フォトニック結晶の電磁波特性を評価した周波数帯 4 ~ 20GHz について考える。電磁波の周波数が低く波長が長い帯域では、Fig. 9-(a) に示される導波管の断面に対して 1 つの定在波が立つ TE_{10} 基本モードが形成される。電場が伝送方向に対して垂直に振動しているため、伝送方向のみの結晶構造により回折が起こる。したがって Fig. 7 に示すように、各結晶方位に対するバンドギャップの計算値と測定値が良い一致を示すと考えられる。電磁波の周波数が高く波長が短い帯域では、Fig. 9-(b) に示されるように導波管内に複数の定在波が立つ TE_{21} モードが形成される。定在波の節の部分が導波管内においてかなりの部分を占め、電磁場の振動が伝送方向に対して様々な角度を持つようになるため、伝送方向の回折に加えて、様々な方位の結晶構造による回折が複合して起こる。したがって Fig. 8 に示すように、バンドギャップの測定値が全結晶方位の回折に共通する完全バンドギ

ャップに収束すると考えられる。以上の結果から、フォトニック結晶の電磁波透過を基本モード周波数から高周波にわたり同一の導波管により測定した場合には、帯域に応じて異なる電磁波の回折挙動を観察できる。基本モード周波数帯では TE_{10} モードが形成され、伝送方向に対する波の回折を表現できるため、特定方位のバンドギャップ形成を観察するのに適する。一方、導波管の基本モード周波数帯よりも高周波域では TE_{21} モードが形成され、様々な方位に対する複合的な回折挙動を表現できるため、完全バンドギャップの形成を観察するのに適していると考えられる。

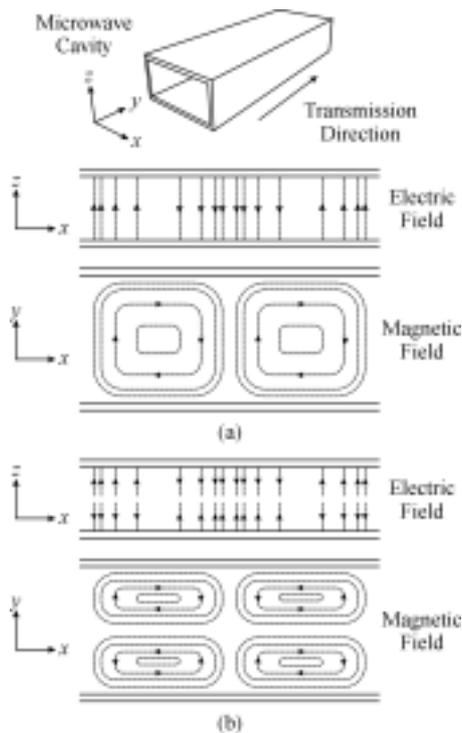


Fig. 9 Transmission modes of microwave in metal cavity: (a) TE_{10} mode, (b) TE_{21} .

4. 結言

チタニア系セラミック粒子を分散したエポキシ樹脂により、光造形法を用いてミリメートルオーダーの誘電体三次元構造を形成し、ダイヤモンド構造を有するフォトニック結晶を作製し、結晶構造の最適化手法について検討を行った。

(1) チタニア系セラミック粒子はエポキシ樹脂中で均一に分散し、比誘電率は 10 を示した。格子定数 10, 14, 18, 22mm のフォトニック結晶が精密に作製され、寸法誤差は 0.1% 以内であった。

(2) 10GHz 付近においてバンドギャップが形成され、格

子構造では 1GHz 程度の幅を示し、反転構造では 2GHz 程度の幅を示した。バンドギャップにおける共通帯域の存在も確認された。

(3)格子構造および反転構造において、バンドギャップの測定結果は計算結果と良い一致を示した。全結晶方位に共通する完全バンドギャップの形成も確認され、特定周波数の電磁波の進行をあらゆる方向に対して禁止することが確認された。

(4)導波管内で結晶構造に対して平面波を伝送するとき、断面に対してひとつの定在波が立つ基本モードでは、特定の結晶方向に対する回折が起こり、多数の定在波が立つ場合には、様々な方向に対する複合的な回折が起こる。前者は各方位に対するバンドギャップ形成に、後者は全方位に共通する完全バンドギャップの観察に適することがわかった。

5. 参考文献

- [1] K. Ohtaka, Phys. Rev. B, 19 (1979) 5057.
- [2] S. John, J. Wang, Phys. Rev Lett., 64 (1990) 2418.
- [3] J. W. Haus, J. Mod. Opt., 41(1994)195.
- [4] S. Kawakami, "Photonic Crystals -Application, Technology and Physics-", CMC, Tokyo, 2002, in Japanese .
- [5] S. Kirihara, Y. Miyamoto, K. Kajiyama, Ceram. Eng. and Sci. Proc., Am. Ceram. Soc., 21 (2000) 13.
- [6] S. Kirihara, Y. Miyamoto, K. Takenaga, M. W. Takeda, K. Kajiyama, Solid State Communications, 121 (2002) 435.