



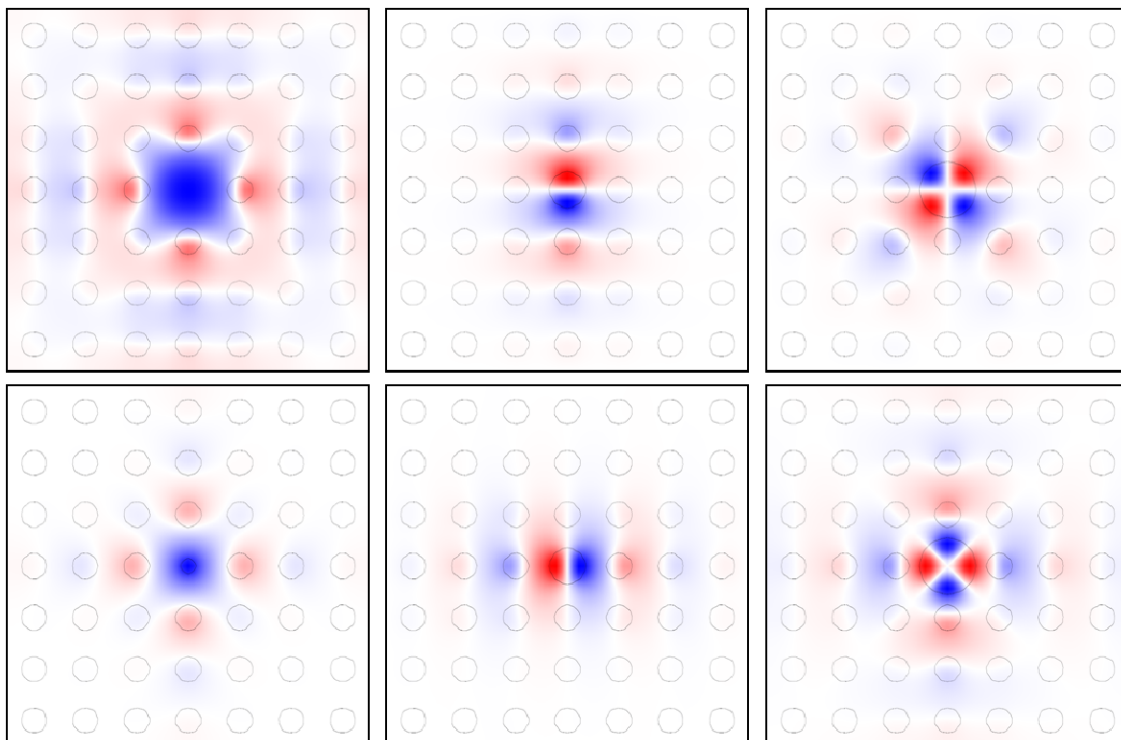
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΥΛΙΚΩΝ



ΦΩΤΟΝΙΚΑ ΥΛΙΚΑ

ΣΗΜΕΙΩΣΕΙΣ

Ελευθέριος Λοιδωρικής



ΙΩΑΝΝΙΝΑ, 2011

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

1.	ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ	3
1.1.	Εξισώσεις Maxwell.....	3
1.2.	Φορτία και ρεύματα πόλωσης	4
1.3.	Καταστατικές σχέσεις.....	5
1.4.	Επίπεδα κύματα	6
1.5.	Ενέργεια και ορμή.....	9
1.6.	Σύνοψη τύπων	11
2.	ΚΥΜΑΤΑ ΣΕ ΔΙΕΠΙΦΑΝΕΙΑ	12
2.1.	Συνοριακές συνθήκες	12
2.2.	Ανάκλαση και διάθλαση	13
2.3.	Ολική ανάκλαση.....	15
2.4.	Γωνία Brewster	16
3.	ΛΕΠΤΑ ΥΜΕΝΙΑ.....	17
3.1.	Πίνακας διεπιφάνειας	17
3.2.	Πίνακας μεταφοράς.....	18
3.3.	Ανάκλαση απο λεπτό υμένιο	19
3.4.	Αντιανακλαστική επίστρωση.....	22
3.5.	Μέτρηση πάχους υμενίου.....	24
4.	ΚΑΘΡΕΠΤΕΣ BRAGG	25
4.1.	Περιοδική διάταξη υμενίων	25
4.2.	Δομή φωτονικών ζωνών	26
4.3.	Διηλεκτρικοί καθρέπτες Bragg	31
4.4.	Πολυχρωϊκοί διαχωριστές, X-Cube	34
4.5.	Ατέλειες περιοδικότητας – φωτονικές κοιλότητες.....	35
4.6.	Laser κάθετης-κοιλότητας επιφανειακής-εκπομπής.....	38
5.	ΦΩΤΟΝΙΚΟΙ ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΙ	41
5.1.	Ορθό και αντίστροφο πλέγμα	41
5.2.	Υπολογισμός φωτονικών ιδιοκαταστάσεων	44
5.3.	Φωτονική δομή ζώνης στις δύο διαστάσεις	46
5.4.	Γραμμικές ατέλειες - κυματοδηγοί.....	49
5.5.	Σημειακές ατέλειες – κοιλότητες	52
5.6.	Τρισδιάστατοι φωτονικοί κρύσταλλοι.....	56
5.7.	Τρόποι παρασκευής.....	57
6.	ΦΩΤΟΝΙΑ & ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑ, ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΣ.....	60
6.1.	Κυματικές εξισώσεις	60
6.2.	Περιορισμός ηλεκτρονίων.....	62
6.3.	Περιορισμός φωτονίων.....	66

7.	ΔΙΗΛΕΚΤΡΙΚΗ ΣΥΝΑΡΤΗΣΗ	69
7.1.	Ο ταλαντωτής Lorentz.....	69
7.2.	Διασκεδασμός και απορρόφηση.....	71
7.3.	Διηλεκτρικά	74
7.4.	Ημιαγωγοί.....	76
7.5.	Μέταλλα.....	77
8.	ΗΜΙΑΓΩΓΟΙ.....	79
8.1.	Ηλεκτρονική δομή.....	79
8.2.	Οπτικές ιδιότητες.....	81
8.3.	Υλικά συστήματα	84
8.4.	Κβαντικός περιορισμός-πηγάδια, σύρματα, τελείες.....	86
8.5.	Κβαντικά πηγάδια σε διόδους εκπομπής φωτός	91
8.6.	Laser διόδου	93
9.	ΜΕΤΑΛΛΑ ΚΑΙ ΠΛΑΣΜΟΝΙΑ	95
9.1.	Μεταλλική απόκριση στο φως.....	95
9.2.	Πλασμόνια επιφανείας	98
9.3.	Πλασμονικοί χημικοί και βιολογικοί αισθητήρες.....	103
9.4.	Μεταλλικά νανοσωματίδια	104
9.5.	Κυματοδηγοί μεταλλικών νανοσωματιδίων	106
	ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ.....	108

1. ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ

Η διάδοση ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων μέσα στην ύλη συνίσταται στην αλληλεπίδραση του ηλεκτρικού (κυρίως) και μαγνητικού πεδίου της κύμανσης με τα φορτισμένα σωματίδια του υλικού: τα αρνητικά ηλεκτρόνια και τους θετικούς πυρήνες. Αυτή η αλληλεπίδραση εμφανίζεται σε διάφορες κλίμακες, ανάλογα με το μήκος κύματος του φωτός. Για μήκη κύματος μεγάλα σε σχέση με τις ατομικές αποστάσεις (ραδιοκύματα, μικροκύματα, υπέρυθρο, οπτικό και υπεριώδες), το υλικό εμφανίζεται σαν συνεχές, και η άρα η αλληλεπίδρασή του με το φως μπορεί να περιγραφεί με κατάλληλες μακροσκοπικές σχέσεις. Για μήκη κύματος συγκρίσιμα με τις ατομικές αποστάσεις (ακτίνες X) η αλληλεπίδραση λαμβάνει υπόψη τις πολλαπλές ανακλάσεις από τον περιοδικό κρύσταλλο. Για ακόμα μικρότερα μήκη κύματος (ακτίνες γ), η αλληλεπίδραση με τα σωματίδια που συνιστούν τους πυρήνες (πρωτόνια και νετρόνια) ξεκινάει, η οποία πλέον μόνο στα πλαίσια μιας κβαντικής θεωρίας του φωτός μπορεί να περιγραφεί.

Εδώ θα ασχοληθούμε μόνο με την πρώτη κατηγορία. Θα διερευνήσουμε τις αλληλεπιδράσεις και διάδοση του φωτός στην ύλη θεωρώντας ότι τα πεδία μέσα στο υλικό μπορούν να παρθούν ως ένας μέσος όρος των πραγματικών γύρω από κάθε άτομο. Δηλαδή αγνοούμε την διακύμανση των πεδίων σε ατομική κλίμακα, και θεωρούμε ότι όσο αναφορά την κίνηση των ηλεκτρονίων υπό την επίδραση των κυμάτων, μόνο ο μέσος όρος έχει σημασία. Ξεκινάμε δηλαδή από τις μακροσκοπικές εξισώσεις του Maxwell.

1.1. Εξισώσεις Maxwell

Οι μακροσκοπικές εξισώσεις Maxwell είναι (μονάδες cgs)

$$\nabla \cdot \vec{E} = 4\pi\rho \quad (1.1)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (1.2)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (1.3)$$

$$\nabla \times \vec{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \vec{j} \quad (1.4)$$

όπου $\vec{E}(\vec{r}, t)$, $\vec{B}(\vec{r}, t)$ είναι τα διανύσματα (συναρτήσεις του χώρου \vec{r} και χρόνου t) του ηλεκτρικού πεδίου και της μαγνητικής επαγωγής αντίστοιχα, $\rho(\vec{r}, t)$ είναι η πυκνότητα φορτίου και $\vec{j}(\vec{r}, t)$ η πυκνότητα ρεύματος. Οι παραπάνω ποσότητες θεωρούνται ότι είναι οι μέσοι όροι, των αντίστοιχων μικροσκοπικών μεγεθών, μέσα σε μια κυψελίδα η οποία είναι μικρή σε σχέση με το μήκος κύματος αλλά αρκετά μεγάλη ώστε να περιλαμβάνει αρκετά άτομα. Για παράδειγμα το ηλεκτρικό πεδίο είναι

$$\vec{E}(\vec{r}) = \langle \vec{e}(\vec{r}) \rangle = \frac{1}{V_c} \int_{V_c} \vec{e}(\vec{r} + \vec{\xi}) d\vec{\xi} \quad (1.5)$$

όπου \vec{e} είναι το μικροσκοπικό τοπικό ηλεκτρικό πεδίο λόγω του εξωτερικού ηλεκτρομαγνητικού κύματος, των ηλεκτρονίων, και των πυρήνων των ατόμων, και V_c η κυψελίδα στην οποία υπολογίζουμε τον μέσο όρο.

1.2. Φορτία και ρεύματα πόλωσης

Ας εξετάσουμε προσεκτικότερα την πυκνότητα φορτίου και ρεύματος. Η πυκνότητα φορτίου μπορεί να είναι μη-μηδενική απο δύο συνεισφορές, μια απο εξωτερικά φορτία (π.χ. απο μια εξωτερική πηγή) και μία από τοπικές μεταβολές της πυκνότητας φορτίου λόγω της πόλωσης της απο το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο

$$\rho = \rho_{pol} + \rho_{ext} \quad (1.6)$$

Η ποσότητα που άμεσα μας ενδιαφέρει είναι η ρ_{pol} . Για να καταλάβουμε την φυσική της σημασία αρκεί να δούμε τι γίνεται σε ένα ουδέτερο μη πολωμένο άτομο ή μόριο παρουσία κάποιου εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου, όπως φαίνεται στο Σχ. 1.1. Στην περίπτωση χωρίς εξωτερικό πεδίο τα άτομα είναι όπως στο Σχ 1.1.α: ολοκληρώνοντας σε μια σφαίρα μεγάλη σχετικά με το μέγεθος των ατόμων (ώστε να συμπεριλαμβάνει πολλά απο αυτά) βρίσκουμε οτι το συνολικό φορτίο μέσα της είναι μηδέν. Με παρουσία σταθερού ηλεκτρικού πεδίου, τα άτομα πολώνονται όπως στο Σχ. 1.1.β. Πάλι όμως, το φορτίο μέσα στην σφαίρα είναι μηδέν. Αυτό αλλάζει όταν το ηλεκτρικό πεδίο που πολώνει τα άτομα δεν είναι ομοιογενές. Στην περίπτωση του Σχ. 1.1.γ είναι εύκολο να δούμε οτι υπάρχει ένα συνολικό φορτίο μέσα στην σφαίρα. Η πυκνότητα αυτού του φορτίου θα αντιστοιχεί στην απόκλιση ενός *διανύσματος πόλωσης*

$$\rho_{pol} = -\nabla \cdot \vec{P} \quad (1.7)$$

Στην περίπτωση που το εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο είναι χρονικά μεταβαλλόμενο, τότε θα έχουμε και χρονική μεταβολή αυτής της πόλωσης και άρα κάποιο ρεύμα

$$\vec{J}_{pol} = \partial \vec{P} / \partial t \quad (1.8)$$

Είναι εύκολο να δείξει κανείς οτι η *εξίσωση συνέχειας φορτίου* $\partial \rho / \partial t + \nabla \cdot \vec{J} = 0$ ικανοποιείται απο τις Εξ. 17-1.8 Καθότι τα ηλεκτρόνια έχουν spin, θα υπάρχει θεωρητικά και μια άλλη συνεισφορά στο ρεύμα, η οποία μπορεί να παρθεί υπόψη ως η συνεισφορά μιας μακροσκοπικής *μαγνήτισης* \vec{M} , ορισμένη ως μαγνητική διπολική ροπή στην μονάδα του όγκου, και η οποία δημιουργεί ρεύμα

$$\vec{J}_{mag} = c \nabla \times \vec{M} \quad (1.9)$$

προσπίπτει δέσμη laser. Επίσης, στην γενική περίπτωση ανισοτροπικού υλικού οι συντελεστές της Εξ. 1.18 είναι τανυστές. Προς το παρόν θα αγνοήσουμε όλες αυτές τις περιπτώσεις και θα θεωρήσουμε μια γραμμική ιστροπική απόκριση

$$\vec{P} = \chi_e \vec{E}, \quad \vec{M} = \chi_m \vec{H} \quad (1.19)$$

όπου γράψαμε και την αντίστοιχη εξίσωση για την μαγνήτιση. Οι σταθερές χ_e, χ_m ονομάζονται ηλεκτρική και μαγνητική *επιδεικτικότητα* αντίστοιχα. Οι καταστατικές σχέσεις που συνδέουν το \vec{D} με το \vec{E} και το \vec{B} με το \vec{H} είναι η *διηλεκτρική σταθερά* (ή διηλεκτρική συνάρτηση) ϵ και η *μαγνητική διαπερατότητα* μ

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E}, \quad \vec{B} = \mu \vec{H} \quad (1.20)$$

όπου έχουν οριστεί ως

$$\epsilon = 1 + 4\pi\chi_e, \quad \mu = 1 + 4\pi\chi_m \quad (1.21)$$

Η διηλεκτρική συνάρτηση και η μαγνητική διαπερατότητα είναι εν γένει συναρτήσεις της συχνότητας. Για το ορατό φως όλα τα υλικά έχουν μηδαμινή μαγνητική συμπεριφορά, οπότε η μαγνητική τους διαπερατότητα είναι μονάδα.

Η φυσική σημασία της σχέσης μεταξύ \vec{E} και \vec{D} γίνεται κατανοητή αναλογίζοντας τι γίνεται μέσα σε ένα υλικό παρουσία ενός εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου \vec{E}_{ext} . Το πεδίο αυτό επάγει ένα επιπρόσθετο ηλεκτρικό πεδίο όπως είδαμε πριν λόγω της πόλωσης \vec{E}_{pol} . Το πεδίο που εισέρχεται στις εξισώσεις Maxwell είναι το συνολικό πεδίο $\vec{E} \equiv \vec{E}_{tot} = \vec{E}_{ext} + \vec{E}_{pol}$. Συνδυάζοντας τις Εξ.1.7 και 1.10, βλέπουμε ότι $\vec{E}_{pol} = -4\pi\vec{P}$ και άρα

$$\vec{D} \equiv \vec{E}_{ext} \quad (1.22)$$

η ηλεκτρική μετατόπιση δεν είναι τίποτα άλλο από το εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο, και συνεπώς σχετίζεται μόνο με το εξωτερικό φορτίο όπως φαίνεται στην Εξ. 1.14. Στα συνήθη διηλεκτρικά η επαγόμενη πόλωση αντιτίθεται στο αίτιο, με αποτέλεσμα το ηλεκτρικό πεδίο μέσα στο υλικό να είναι μικρότερο από το εξωτερικό, και κατά συνέπεια η διηλεκτρική σταθερά της Εξ. 1.20 να είναι μεγαλύτερη της μονάδας. Ανάλογη σχέση επικρατεί και μεταξύ \vec{B} και \vec{H} , με την διαφορά ότι συνήθως στις οπτικές συχνότητες τα υλικά είναι μη μαγνητικά και άρα $\mu = 1$. Το \vec{B} είναι το ανάλογο του \vec{E} και το \vec{H} το ανάλογο του \vec{D} .

1.4. Επίπεδα κύματα

Στο εξής θεωρούμε ότι δεν υπάρχουν εξωτερικά φορτία ή ρεύματα, δηλ. $\rho_{ext} = \vec{j}_{ext} = 0$. Το νόημα των Εξ. 1.3-1.4 όπως και των Εξ. 1.16-1.17 είναι ότι η χρονική μεταβολή στο ένα πεδίο επιφέρει δημιουργία του άλλου πεδίου. Για παράδειγμα, εάν υπάρχει κάποιο ηλεκτρικό πεδίο και αρχίσει να φθίνει με τον

χρόνο, αυτή η μεταβολή θα οδηγήσει στην δημιουργία ενός μαγνητικού, το οποίο όταν με την σειρά του αρχίσει να φθίνει θα οδηγήσει στην δημιουργία ενός ηλεκτρικού πεδίου. Άρα λοιπόν η αλληλουχία των δύο αυτών πεδίων θα πρέπει να είναι αυτο-συντηρούμενη, και τα πεδία θα πρέπει να περιγράφονται απο μια κυματική εξίσωση.

Η εξίσωση κύματος προκύπτει συνδιάζοντας τις Εξ. 1.16, 1.17 και 1.20. Αναλόγως τον τρόπο συνδιασμού προκύπτουν δύο ισοδύναμες κυματικές εξισώσεις, μια για το ηλεκτρικό πεδίο και μια για το μαγνητικό

$$\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \nabla \times (\nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t)) = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t^2} \quad (1.23)$$

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \nabla \times \vec{H}(\vec{r}, t) \right) = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{H}(\vec{r}, t)}{\partial t^2} \quad (1.24)$$

Μέσα σε ισοτροπικό υλικό η διηλεκτρική συνάρτηση δεν μεταβάλεται στον χώρο, και η Εξ. 1.23 απλοποιείται χρησιμοποιώντας την διανυσματική ταυτότητα

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = \nabla \cdot (\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E} \quad (1.25)$$

η οποία ισχύει για κάθε διανυσματικό πεδίο. Για ισοτροπικό υλικό $\varepsilon(r) \equiv \varepsilon = \text{σταθ}$ και με την βοήθεια της Εξ. 1.14 βρίσκουμε $\nabla \vec{E} = \varepsilon^{-1} \nabla \vec{D} = 0$ και καταλήγουμε στην κυματική εξίσωση για το ηλεκτρικό πεδίο

$$\nabla^2 \vec{E} - \frac{\varepsilon \mu}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (1.26)$$

Μια ίδια ακριβώς κυματική εξίσωση προκύπτει και για το μαγνητικό πεδίο. Η Εξ. 1.26 ισχύει ξεχωριστά για κάθε καρτεσιανή συνιστώσα των $\vec{E}(\vec{r}, t)$ και $\vec{H}(\vec{r}, t)$. Λύσεις της είναι τα γνωστά *επίπεδα κύματα*

$$\begin{aligned} \vec{E} &= \hat{e}_1 E_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \\ \vec{H} &= \hat{e}_2 H_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \end{aligned} \quad (1.27)$$

όπου E_0 και H_0 είναι τα πλάτη της ταλάντωσης, είναι εν γένει μιγαδικά και αμετάβλητα στον χώρο και στον χρόνο. Το ω είναι η *γωνιακή συχνότητα*, που συνδέεται με την *κυκλική συχνότητα* ν με την σχέση

$$\omega = 2\pi\nu = 2\pi c / \lambda_0 \quad (1.28)$$

\vec{k} είναι το *κυματοδιάνυσμα* και εκφράζει την χωρική συχνότητα, το πως δηλαδή κατανέμεται το πεδίο στον χώρο για μια δεδομένη χρονική στιγμή, λ_0 είναι το *μήκος κύματος* στο κενό, και c είναι η *ταχύτητα του φωτός* στο κενό. Είναι κοινή σύμβαση να χρησιμοποιούμε μιγαδικές λύσεις, αλλά πάντα θυμόμαστε οτι στο τέλος

για να βρούμε τα αληθινά πεδία, παίρνουμε το πραγματικό μέρος¹. Εάν αντικαταστήσουμε την Εξ. 1.27 στην κυματική εξίσωση 1.26, βρίσκουμε

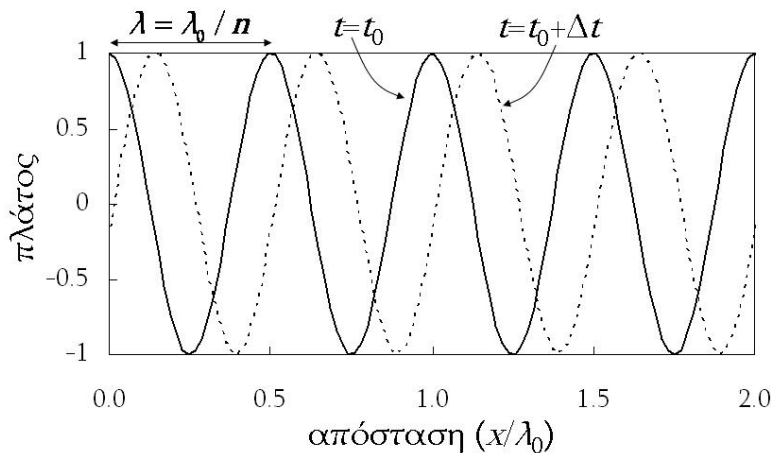
$$|\vec{k}|^2 \equiv k^2 = \epsilon\mu \frac{\omega^2}{c^2} = n^2 \frac{\omega^2}{c^2} \quad (1.29)$$

η οποία είναι η λεγόμενη *σχέση διασποράς* του κενού, και αλληλοσυνδέει τις χωροχρονικές μεταβολές της κύμανσης. Το n είναι ο δείκτης διάθλασης $n = \sqrt{\mu\epsilon} \equiv \sqrt{\epsilon}$ (όπου η τελευταία ισότητα ισχύει στις οπτικές συχνότητες καθώς για όλα τα υλικά $\mu \cong 1$).

Το μήκος κύματος μέσα στο υλικό είναι n φορές κοντύτερο απ' ότι στο κενό $\lambda = \lambda_0 / n$, και το κυματοδιάνυσμα συνδέεται με το μήκος κύματος μέσα στο υλικό

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi n}{\lambda_0} \quad (1.30)$$

Η ποσότητα $v = \omega / k$ ονομάζεται *ταχύτητα φάσης*, και είναι η ταχύτητα με την οποία κινείται η κορυφή της κύμανσης (βλ. Σχ. 1.2). Στην περίπτωση μας του ομογενούς υλικού με δείκτη διάθλασης n , η ταχύτητα φάσης είναι $v = c / n$, δηλ. η κύμανση διαδίδεται n φορές πιο αργά από το φως στο κενό. Η ταχύτητα μεταφοράς ενέργειας από το κύμα δίδεται από την *ταχύτητα ομάδας*, που ορίζεται ως $v_g = d\omega / dk$. Στην περίπτωση μας της *μονοχρωματικής* κύμανσης (δηλ. ένα και μοναδικό ω) οι δύο ταχύτητες συμπίπτουν. Διαφέρουν όταν συνυπάρχουν μια συνεχής κατανομή συχνοτήτων (δηλ. ένα *κυματοπακέτο*) και ο δείκτης διάθλασης είναι συνάρτηση της συχνότητας, στην οποία περίπτωση η ταχύτητα ομάδας περιγράφει την ταχύτητα μεταφοράς του κέντρου του κυματοπακέτου.



Σχήμα 1.2 Το πραγματικό μέρος του πρώτου όρου της κύμανσης της Εξ. 1.31, για $E_+ = 1$ [δηλ. $\cos(kx - \omega t)$] και $n = 2$.

¹ Μπορούμε γιατί οι εξισώσεις Maxwell είναι γραμμικές: αν $\vec{E}_1(\vec{r}, t)$ και $\vec{E}_2(\vec{r}, t)$ είναι δύο λύσεις, τότε και η $\vec{E}_3(\vec{r}, t) = c_1\vec{E}_1(\vec{r}, t) + c_2\vec{E}_2(\vec{r}, t)$ είναι λύση για κάθε c_1 και c_2 , όπως φαίνεται με αντικατάσταση $\partial^2 / \partial t^2 (c_1\vec{E}_1 + c_2\vec{E}_2) = c_1\partial^2 \vec{E}_1 / \partial t^2 + c_2\partial^2 \vec{E}_2 / \partial t^2$ και $\nabla \times (c_1\vec{E}_1 + c_2\vec{E}_2) = c_1\nabla \times \vec{E}_1 + c_2\nabla \times \vec{E}_2$

Ας εξετάσουμε την περίπτωση διάδοσης σε μια διάσταση, ας πούμε x , με το ηλεκτρικό πεδίο πολωμένο κατα μήκος του άξονα y (δηλ. είναι ομοιόμορφο κατά μήκος του άξονα z). Η λύση είναι

$$\vec{E}(x, t) = \hat{y} [E_+ e^{i(kx - \omega t)} + E_- e^{-i(kx + \omega t)}] \quad (1.31)$$

ο πρώτος όρος αντιστοιχεί σε επίπεδο κύμα διαδιδόμενο κατά την θετική φορά του άξονα x , ενώ ο δεύτερος όρος σε επίπεδο κύμα διαδιδόμενο κατά την αρνητική φορά του άξονα x . Ας πάρουμε την περίπτωση ενός κύματος κινούμενο κατά την θετική καταύθηση του άξονα x , όπως φαίνεται στο Σχ. 1.2, για την περίπτωση όπου το ομογενές υλικό έχει δείκτη διάθλασης $n=2$. Όλες οι ποσότητες που ορίσαμε πριν φέρονται στο σχήμα. Η *περίοδος* της κύμανσης T είναι ο χρόνος μετά τον οποίο η ταλάντωση επαναλαμβάνεται, και ορίζεται ως:

$$T = 2\pi / \omega = \lambda_0 / c \quad (1.32)$$

Πάμε πίσω στις λύσεις της Εξ. 1.27, τις οποίες αντικαταστήσουμε στις Εξ. 1.14-1.15. Βρίσκουμε

$$\begin{aligned} \hat{e}_1 \cdot \vec{k} &= 0 \\ \hat{e}_2 \cdot \vec{k} &= 0 \end{aligned} \quad (1.33)$$

οι οποίες δηλώνουν ότι τα κύματα είναι *εγκάρσια*, το ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο είναι πάντα κάθετα στην διεύθυνση διάδοσης. Με αντικατάσταση στην Εξ. 1.16

$$(\vec{k} \times \hat{e}_1) E_0 = \frac{\omega}{c} \hat{e}_2 H_0 \quad (1.34)$$

η οποία έχει λύση

$$\hat{e}_2 = \hat{k} \times \hat{e}_1 \quad (1.35)$$

και

$$H_0 = nE_0 \quad (1.36)$$

όπου $\hat{k} = \vec{k} / |\vec{k}|$. Οι Εξ. 1.33, 1.35-1.36 δείχνουν ότι τα διανύσματα του ηλεκτρικού πεδίου, μαγνητικού πεδίου και διεύθυνσης διάδοσης αποτελούν ένα *δεξιόστροφο ορθοκανονικό σύστημα*¹, και ότι ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο είναι *σε φάση* και έχουν *σταθερό πηλίκο*.

1.5. Ενέργεια και ορμή

Η μέση² *πυκνότητα ενέργειας* του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου είναι

$$u = \frac{1}{16\pi} (\epsilon |\vec{E}|^2 + \mu |H|^2) = \frac{1}{8\pi} \epsilon |\vec{E}|^2 \quad (1.37)$$

¹ Ισχύει δηλαδή ο κανόνας του δεξιού χεριού: εαν βάλουμε στον αντίχειρα το ηλεκτρικό και στον δείκτη το μαγνητικό πεδίο, ο μέσος δείχνει την διεύθυνση διάδοσης.

² Πέρνοντας μόνο το πραγματικό μέρος των πεδίων κατά την διάρκεια μιας περιόδου.

όπου για την τελευταία ισότητα χρησιμοποιήσαμε την Εξ. 1.36, ενώ η μέση ροή ενέργειας είναι

$$\vec{S} = \frac{c}{8\pi} (\vec{E} \times \vec{H}^*) \quad (1.38)$$

Το διάνυσμα \vec{S} ονομάζεται και *διάνυσμα Poynting*. Για επίπεδα κύματα σε ομοιόμορφο υλικό πρέπει να είναι ίσο με την πυκνότητα ενέργειας επι την ταχύτητα διάδοσης. Πράγματι, πέρνοντας το ηλίκιο της Εξ. 1.38 με την Εξ. 1.37, και χρησιμοποιώντας την Εξ.1.36, βρίσκουμε $|\vec{S}|/u = c/n$, που είναι η ταχύτητα διάδοσης μέσα σε ιστροπικό υλικό με δείκτη διάθλασης n . Η εξίσωση *διατήρησης της ενέργειας* στην απουσία εξωτερικών ρευμάτων¹ είναι στην διαφορική της μορφή

$$\frac{du}{dt} + \nabla \cdot \vec{S} = 0 \quad (1.39)$$

η οποία δηλώνει ότι ο ρυθμός μεταβολής της ενέργειας σε έναν μοναδιαίο όγκο είναι ίσος και αντίθετος με την ροή ενέργειας προς αυτόν.

Ισως η πιο ενδιαφέρουσα ποσότητα είναι η πυκνότητα καταστάσεων ως συνάρτηση της συχνότητας. Υποθέτοντας έναν μεγάλο όγκο V , οι ο αριθμός καταστάσεων μέχρι και την συχνότητα ω είναι:

$$N(\omega) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < n\omega/c} d^3 k = \frac{n^3 \omega^3 V}{3\pi^2 c^3} \quad (1.40)$$

όπου ο παράγοντας 2 είναι γιατί για κάθε επιτρεπτή κατάσταση υπάρχουν δύο δυνατές πολώσεις. Η πυκνότητα καταστάσεων είναι τότε

$$D(\omega) = \frac{dN(\omega)}{d\omega} = \frac{n^3 \omega^2 V}{\pi^2 c^3} \quad (1.41)$$

Σε δύο διαστάσεις η αντίστοιχη σχέση είναι

$$D_2(\omega) = \frac{n^2 \omega V}{\pi c^2} \quad (1.42)$$

ενώ στην μία διάσταση

$$D_1(\omega) = \frac{2nV}{\pi c} \quad (1.43)$$

Η πυκνότητα καταστάσεων ρυθμίζει τον ρυθμό αποδιέγερσης ατόμων, και επομένως την λειτουργία διαφόρων οπτο-ηλεκτρονικών συσκευών, όπως το *Laser* ή τις *διόδους-εκπομπής-φωτός (LED)*. Σε ομοιογενή ισότροπα υλικά πολύ μικρές αλλαγές μπορούν να γίνουν. Όπως θα δούμε στα επόμενα κεφάλαια, η βασική λειτουργία των φωτονικών υλικών είναι να αλλάζουν δραματικά τις Εξ. 1.41-1.43, ώστε να επιτραπεί ο σχεδιασμός πιο αποτελεσματικών συσκευών.

¹ Όταν υπάρχουν ρεύματα, το δεξί μέρος της Εξ. 1.39 είναι ίσο με το έργο τους, που είναι $-\vec{j} \cdot \vec{E}$.

1.6. Σύνοψη τύπων

Μια σύνοψη των τύπων για την διάδοση επίπεδων κυμάτων δίνεται στον Πίνακα I.

	χρονική	χωρική	
		$n = 1$	$n \neq 1$
συχνότητα	ω	k_0	$k = nk_0$
περίοδος	T	λ_0	$\lambda = \frac{\lambda_0}{n}$
σχέση συχνότητας-περιόδου	$\omega = \frac{2\pi}{T}$	$k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}$	$k = \frac{2\pi}{\lambda}$
ταχύτητα φάσης		$v_\varphi = \frac{\omega}{k_0} = c$	$v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{c}{n}$
χωροχρονική σχέση – σχέση διασποράς		$\omega = ck_0$	$\omega = v_\varphi k$
σχέση ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου		$ \vec{H} = \vec{E} $	$ \vec{H} = n \vec{E} $
πυκνότητα ενέργειας		$u = \frac{1}{8\pi} E ^2$	$u = \frac{n^2}{8\pi} E ^2$
ροή ενέργειας – διάνυσμα Poynting		$ \vec{S} = \frac{c}{8\pi} E ^2$	$ \vec{S} = \frac{cn}{8\pi} E ^2$
ταχύτητα ροής ενέργειας		$v_G = \frac{d\omega}{dk_0} = c$	$v_G = \frac{d\omega}{dk} = \frac{c}{n}$
σχέση ροής-πυκνότητας ενέργειας		$ \vec{S} = c \cdot u$	$ \vec{S} = v_G \cdot u$

Πίνακας I. Σύνοψη των κυριότερων σχέσεων για επίπεδα κύματα.

Στον Πίνακα II δίνονται τα μήκη κύματος και ενέργειες φωτονίου για το ορατό φως.

	μήκος κύματος	ενέργεια ενός φωτονίου
Κόκκινο	620 nm	2.00 eV
Κίτρινο	580 nm	2.14 eV
Πράσινο	520 nm	2.38 eV
Μπλέ	470 nm	2.64 eV
σχέσεις μετατροπής	$\lambda_0 = 1240 \text{ nm} \leftrightarrow 1 \text{ eV} \leftrightarrow \omega = 1.5 \times 10^{15} \text{ sec}^{-1}$	

Πίνακας II. Μήκη κύματος και ενέργεια φωτονίου για διάφορα χρώματα του ορατού.

2. ΚΥΜΑΤΑ ΣΕ ΔΙΕΠΙΦΑΝΕΙΑ

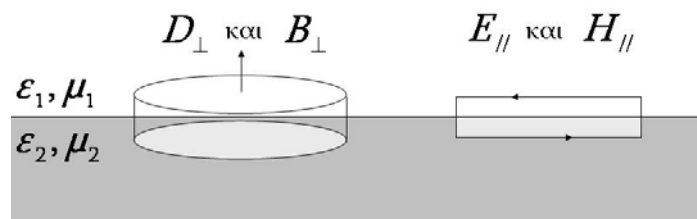
Σημαντικό μέρος των φωτονικών εφαρμογών χρησιμοποιούν απλά διηλεκτρικά υλικά με σχηματισμούς/διαμορφώσεις που προωθούν τον περιορισμό ή και την περιοδικότητα. Και οι δύο περιπτώσεις είναι αποτέλεσμα των διαδοχικών ανακλάσεων και διαθλάσεων από τις διάφορες διεπιφάνειες. Για να τις κατανοήσουμε σε βάθος θα διερευνήσουμε τους νόμους που διέπουν την ανάκλαση και διάθλαση από διεπιφάνεια δύο διηλεκτρικών με διαφορετικό δείκτη διάθλασης, οι οποίοι πηγάζουν από τις συνοριακές συνθήκες, δηλαδή τις συνθήκες συνέχειας εκατέρωθεν μιας διαχωριστικής επιφάνειας.

2.1. Συνοριακές συνθήκες

Στην απουσία επιφανειακών φορτίων και ρευμάτων, οι Εξ. 1.14, 1.15 μπορούν να γραφούν χρησιμοποιώντας το θεώρημα απόκλισης ως $\int_V \nabla \cdot \vec{D} d^3 r = \oint_S D_{\perp} dS$ και παρομοίως για την μαγνητική επαγωγή. Θεωρώντας ένα δισκίο μηδενικού πάχους πάνω στην διεπιφάνεια όπως στο Σχ. 2.1 αριστερά, και ολοκληρώνοντας, το αποτέλεσμα πρέπει να βγεί μηδέν καθώς $\nabla \cdot \vec{D} = \nabla \cdot \vec{B} = 0$. Η μόνη συνεισφορά έρχεται από τις κάθετες συνιστώσες στα επίπεδα, οι οποίες για να βγεί μηδέν το ολοκλήρωμα θα πρέπει να είναι ίσες:

$$\begin{aligned} D_{1\perp} &= D_{2\perp} \\ B_{1\perp} &= B_{2\perp} \end{aligned} \quad (2.1)$$

οι κάθετες συνιστώσες της ηλεκτρικής μετατόπισης και της μαγνητικής επαγωγής εκατέρωθεν της διεπιφάνειας είναι συνεχείς.



Σχήμα 2.1 Συνοριακές συνθήκες στην διεπιφάνεια δυο υλικών.

Από την άλλη, οι Εξ. 1.16, 1.17 μπορούν να γραφούν χρησιμοποιώντας το θεώρημα Stokes $\oint_S \nabla \times \vec{E} d\vec{S} = \int_C E_{\parallel} dl$ και παρομοίως για το μαγνητικό επίπεδο. Θεωρώντας μια ορθογώνια διαδρομή μηδενικού πάχους όπως στο Σχ. 2.1 δεξιά και ολοκληρώνοντας, το αποτέλεσμα πρέπει να βγεί μηδέν καθώς η επιφάνεια είναι

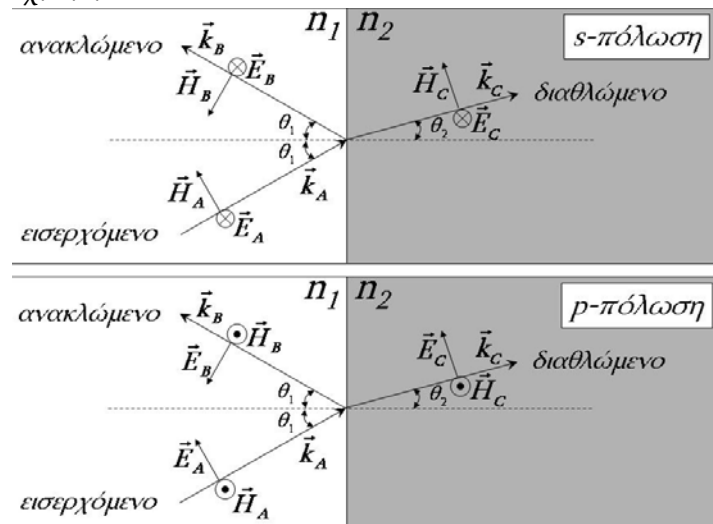
μηδέν. Η μόνη συνεισφορά έρχεται από τις παράλληλες συνειστώσες, οι οποίες για να είναι μηδέν το ολοκλήρωμα πρέπει να είναι ίσες:

$$\begin{aligned} E_{1//} &= E_{2//} \\ H_{1//} &= H_{2//} \end{aligned} \quad (2.2)$$

οι παράλληλες συνιστώσες του ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου εκατέρωθεν της διεπιφάνειας είναι συνεχείς.

2.2. Ανάκλαση και διάθλαση

Θα εξετάσουμε τώρα την ανάκλαση και διάθλαση επίπεδων κυμάτων απο διεπιφάνεια. Ξεχωρίζουμε δύο περιπτώσεις ανάλογα με την κατάσταση πόλωσης του εισερχόμενου κύματος σε σχέση με τον προσανατολισμό της διεπιφάνειας. (α) το ηλεκτρικό πεδίο είναι κάθετο στο επίπεδο πρόσπτωσης¹ και άρα είναι πάντα παράλληλο με την διεπιφάνεια: εγκάρσια ηλεκτρική πόλωση (TE ή *s*)², (β) το μαγνητικό πεδίο είναι κάθετο στο επίπεδο πρόσπτωσης και άρα είναι πάντα παράλληλο με την διεπιφάνεια: εγκάρσια μαγνητική πόλωση (TM ή *p*)³. Αυτές φαίνονται στο Σχ. 2.2.



Σχήμα 2.2 Οι δύο πιθανές καταστάσεις πόλωσης κατά την πρόσπτωση επίπεδου κύματος στην διαχωριστική επιφάνεια δύο υλικών.

Και στις δύο περιπτώσεις, οι λύσεις είναι:

$$\text{Προσπίπτων:} \quad \vec{E}_A e^{i(\vec{k}_A \vec{r} - \omega t)}, \vec{H}_A = n_1 \hat{k}_A \times \vec{E}_A \quad (2.3)$$

$$\text{Ανακλώμενο:} \quad \vec{E}_B e^{i(\vec{k}_B \vec{r} - \omega t)}, \vec{H}_B = n_1 \hat{k}_B \times \vec{E}_B \quad (2.4)$$

$$\text{Διαθλώμενο:} \quad \vec{E}_C e^{i(\vec{k}_C \vec{r} - \omega t)}, \vec{H}_C = n_2 \hat{k}_C \times \vec{E}_C \quad (2.5)$$

¹ Το επίπεδο που καθορίζεται απο την διεύθυνση πρόσπτωσης και την κάθετη στην διεπιφάνεια

² TE από το *Transverse Electric*

³ TM από το *Transverse Magnetic*

Το μόνο αμετάβλητο στο όλο πρόβλημα είναι η γωνιακή συχνότητα ω . Βάση αυτής ορίζουμε τα μέτρα των κυματοδιανυσμάτων:

$$|\vec{k}_A| = |\vec{k}_B| = n_1 \frac{\omega}{c}, \quad |\vec{k}_C| = n_2 \frac{\omega}{c} \quad (2.6)$$

Αναλύοντας το πρόβλημα του Σχ. 2.2, χρησιμοποιούμε τον νόμο της ανάκλασης: η γωνία πρόσπτωσης είναι ίση με την γωνία ανάκλασης, και τον νόμο του Snell¹:

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2 \quad (2.7)$$

Για να βρούμε την σχέση μεταξύ των πεδίων, χρησιμοποιούμε τις συνοριακές συνθήκες των Εξ. 2.1, 2.2, μαζί με τις Εξ. 2.3-2.5 και την Εξ. 1.36

$$\begin{aligned} \text{Πόλωση } s: \quad E_A + E_B &= E_C \\ n_1(E_A - E_B) \cos \theta_1 &= n_2 E_C \cos \theta_2 \end{aligned} \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} \text{Πόλωση } p: \quad (E_A - E_B) \cos \theta_1 &= E_C \cos \theta_2 \\ n_1(E_A + E_B) &= n_2 E_C \end{aligned} \quad (2.9)$$

όπου πλέον χρησιμοποιούμε $E \equiv |\vec{E}|$. Οι λύσεις είναι:

$$\begin{aligned} \text{Πόλωση } s: \quad \frac{E_C}{E_A} &= \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} \\ \frac{E_B}{E_A} &= \frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} \text{Πόλωση } p: \quad \frac{E_C}{E_A} &= \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2} \\ \frac{E_B}{E_A} &= \frac{n_2 \cos \theta_1 - n_1 \cos \theta_2}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2} \end{aligned} \quad (2.11)$$

Στην περίπτωση κάθετης πρόσπτωσης ($\theta_1 = 0$) οι σχέσεις απλοποιούνται στις

$$\begin{aligned} \text{Κάθετη πρόσπτωση:} \quad \frac{E_C}{E_A} &= \frac{2n_1}{n_1 + n_2} \\ \frac{E_B}{E_A} &= \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \end{aligned} \quad (2.12)$$

Στην Εξ. 2.12 χρησιμοποιήσαμε την σύμβαση της πόλωσης s ¹. Παρατηρούμε ότι για ανάκλαση από διεπιφάνεια με $n_2 > n_1$, το ηλεκτρικό πεδίο αλλάζει φορά (ή ισοδύνα αποκτάει επιπλέον φάση π).

¹ Και οι δύο νόμοι προκύπτουν από την ανάγκη η συνοριακή συνθήκη να παραμένει αμετάβλητη κατά μήκος της διεπιφάνειας, το οποίο εξασφαλίζεται εάν $\vec{k}_A \vec{r}|_{z=0} = \vec{k}_B \vec{r}|_{z=0} = \vec{k}_C \vec{r}|_{z=0}$ που είναι ισοδύναμο με $|\vec{k}_A| \sin \theta_1 = |\vec{k}_C| \sin \theta_2 = |\vec{k}_B| \sin \theta_1$. Μαζί με την Εξ. 2.6 προκύπτουν οι νόμοι της ανάκλασης και Snell.

Γιά να υπολογίσουμε τους συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης της ενέργειας, παίρνουμε τα αντίστοιχα πηλίκια των διανυσμάτων Poynting. Για επίπεδα κύματα ισχύει $\vec{E} \perp \vec{H}$ και $|\vec{H}| = n|\vec{E}|$, άρα $|\vec{S}| = \frac{cn}{8\pi} |\vec{E}|^2$. Για κάθετη πρόσπτωση, οι συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης είναι²

$$\begin{aligned} \text{ανάκλαση: } R &= \frac{n_1}{n_1} \left| \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \right|^2 = \frac{(n_1 - n_2)^2}{(n_1 + n_2)^2} \\ \text{διέλευση: } T &= \frac{n_2}{n_1} \left| \frac{2n_1}{n_1 + n_2} \right|^2 = \frac{4n_1 n_2}{(n_1 + n_2)^2} \end{aligned} \quad (2.13)$$

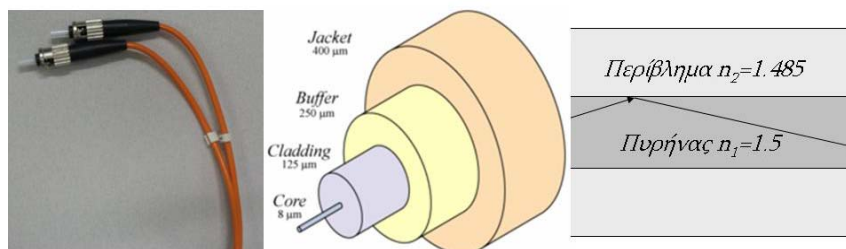
όπου προφανώς $T+R=1$, εκφράζοντας την αρχή διατήρησης της ενέργειας.

2.3. Ολική ανάκλαση

Από τον νόμο του Snell βρίσκουμε ότι η γωνία διάθλασης είναι $\theta_2 > \theta_1$ όταν $n_1 > n_2$. Η μέγιστη τιμή $\theta_2 = \pi/2$ εμφανίζεται όταν

$$\theta_1 \equiv \theta_0 = \sin^{-1} \left(\frac{n_2}{n_1} \right) \quad (2.14)$$

και ονομάζεται *γωνιά ολικής εσωτερικής ανάκλασης*. Για κάθε γωνία πρόσπτωσης ίση ή μεγαλύτερη της θ_0 , ανεξαρτήτου πόλωσης, το διαθλόμενο κύμα είναι μηδέν. Αυτή είναι η βασική αρχή λειτουργίας των *οπτικών ινών*: τα κύματα εισέρχονται από το ανοιχτό άκρο της ίνας με τέτοιο τρόπο ώστε η γωνία με τα τοιχώματα της ίνας να είναι πάντα μεγαλύτερη της αντίστοιχης θ_0 . Τα κύματα μένουν παγιδευμένα μέσα στην ίνα και συνεπώς μπορούν και ταξιδεύουν τεράστιες αποστάσεις με ελάχιστες απώλειες.



Σχήμα 2.3 Αριστερά: οπτικές ίνες, μέση: απεικόνιση της διατομής μιας οπτικής ίνας, και δεξιά: η βασική αρχή λειτουργίας είναι η ολική ανάκλαση. Υλικά που χρησιμοποιούνται είναι καθαρό γυαλί SiO_2 , με μικρή διαφοροποίηση στον πυρήνα και στο περίβλημα ώστε να υπάρχει μικρή διαφορά στον δείκτη διάθλασης.

¹ υπάρχει διαφορά προσήμου μεταξύ s και p για το ανακλώμενο κύμα, όπως εύκολα φαίνεται και από το Σχ. 2.2, εάν κανείς υποθέσει γωνία πρόσπτωσης μηδέν.

² ανάκλαση R (από *Reflection*) και διέλευση T (από *Transmission*).

Στο Σχ. 2.3 δείχνεται σε διαδοχικές μεγενθύσεις μια οπτική ίνα. Βασικά μέρη της λειτουργίας της είναι τα δύο εσωτερικά, ο πυρήνας και το περίβλημα (προσέξτε πόσο λεπτά είναι και τα δύο). Και τα δύο είναι φτιαγμένα από πολύ υψηλής καθαρότητας γυαλί SiO_2 , με ελαφρώς τροποποιημένο τον πυρήνα με προσθήκη GeO_2 ώστε να έχει λίγο υψηλότερο δείκτη (λιγότερο από 1% υψηλότερο). Με αυτές τις τιμές, η γωνία ολικής ανάκλασης είναι $\sin^{-1}(n_{\text{περ}} / n_{\text{πυρ}}) \cong \sin^{-1}(0.99) = 82^\circ$. Κατά την είσοδο, μόνο τα κύματα με γωνία πρόσπτωσης στην διεπιφάνεια μεγαλύτερη των 82° θα είναι καθοδηγούμενα. Προσοχή χρειάζεται και κατά τον μηχανικό χειρισμό της ίνας ώστε να μην δημιουργηθούν απότομες γωνίες, οι οποίες τοπικά μπορούν να αναιρέσουν την συνθήκη ολικής ανάκλασης, με αποτέλεσμα το κύμα να διαφύγει από την ίνα.

2.4. Γωνία Brewster

Απο φυσικής άποψης η ανάκλαση είναι το αποτέλεσμα δίπολων πόλωσης που δημιουργούνται στο υλικό από το διαθλώμενο κύμα, και τα οποία πάλλονται σε συμφωνία εκπέμποντας έτσι το ανακλώμενο κύμα. Είναι γνωστό ότι ένα παλλόμενο δίπολο εκπέμπει μηδενική ενέργεια κατά μήκος του άξονά του. Εάν λοιπόν λόγω γεωμετρίας τύχει τα παλλόμενα αυτά δίπολα να είναι παράλληλα με την διεύθυνση της ανακλώμενης δέσμης, τότε θα πρέπει να περιμένουμε μηδενική ανάκλαση. Αυτή η κατάσταση στην περίπτωση μας αντιστοιχεί στην p πόλωση και στην συνθήκη $\theta_1 + \theta_2 = \pi/2$. Πράγματι, από την Εξ. 2.11 και με την βοήθεια του νόμου του Snell βρίσκουμε ότι στην p πόλωση μπορούμε να έχουμε μηδενική ανάκλαση $E_B = 0$ όταν $\theta_1 + \theta_2 = \pi/2$, το οποίο ικανοποιείται όταν η γωνία πρόσπτωσης είναι (πάλη με την βοήθεια του νόμου του Snell):

$$\theta_1 = \theta_B \equiv \tan^{-1}\left(\frac{n_2}{n_1}\right) \quad (2.15)$$

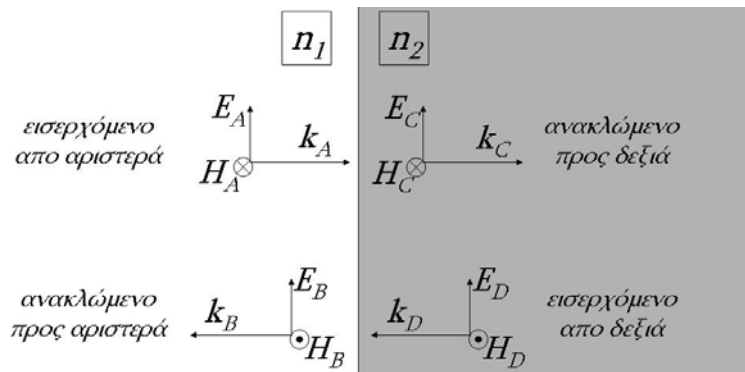
Η γωνία αυτή ονομάζεται *γωνία Brewster*, και στην οποία όλο το κύμα περνάει μέσα από την διεπιφάνεια. Το αντίστοιχο στην s πόλωση εμφανίζεται μόνο όταν $\theta_1 = \theta_2$, δηλ. $n_1 = n_2$ όταν δεν υπάρχει διεπιφάνεια. Το ενδιαφέρον λοιπόν για αυτή την περίπτωση είναι όταν το προσπίπτων κύμα εμπεριέχει και τις δύο πολώσεις, το ανακλώμενο θα είναι πλήρως s πολωμένο. Αυτή η αρχή χρησιμοποιείται σε πολλά οπτικά συστήματα προβολής και laser για δημιουργία πολωμένου φωτός, η όπως αποκαλείται *πόλωση από ανάκλαση*. Εν γένει, το s πολωμένο κύμα ανακλάται πάντα ισχυρότερα από ότι το p πολωμένο κύμα, και πάνω σε αυτή την αρχή λειτουργεί μια άλλη εφαρμογή, τα ειδικά γυαλιά ηλίου με πολωτικά φίλτρα (*polaroid*) που μπλοκάρουν την αντηλιά από την θάλασσα ή τον δρόμο: η αντανάκλαση είναι επί το πλείστον s πολωμένη, και άρα μπλοκάροντάς την με το πολωτικό φίλτρο σχεδόν εξαφανίζεται η αντηλιά.

3. ΛΕΠΤΑ ΥΜΕΝΙΑ

Όταν φως εισέρθει σε υλικό το οποίο έχει μια περιοδική διαμόρφωση στις ιδιότητές του, θα υποστεί πολλαπλές ανακλάσεις και διαθλάσεις. Η τελική λύση προκύπτει προσθέτοντας όλα τα μερικά κύματα, και επηρεάζει κρίσιμα χαρακτηριστικά του φωτός στην διάταξη, όπως ανακλαστικότητα και ταχύτητα διάδοσης. Πολλές εφαρμογές στηρίζονται στην επακριβή τροποποίηση αυτών των ιδιοτήτων μέσω κατάλληλου σχεδιασμού της περιοδικής διάταξης. Θα ξεκινήσουμε μελετώντας ένα απλό πλακίδιο ομοιογενούς ισότροπου υλικού, και επόμενο κεφάλαιο θα πάμε σε περιοδικές διατάξεις από τέτοια πλακίδια.

3.1. Πίνακας διεπιφάνειας

Ας ξαναεξετάσουμε την ανάκλαση από διεπιφάνεια στην πιο γενική περίπτωση που έχουμε εισερχόμενα κύματα και από τις δύο πλευρές. Για απλότητα, θα εξετάσουμε μόνο την περίπτωση της κάθετης πρόσπτωσης επίπεδων κυμάτων, όπως φαίνεται στο Σχ. 3.1. Οι συνοριακές συνθήκες είναι απλά η συνέχεια και των δύο πεδίων, καθώς είναι και τα δύο παράλληλα στην επιφάνεια. Χωρίζουμε τα κύματα σε τέσσερα διαφορετικά με τους δείκτες A, B, C, D ανάλογα με την μεριά που είναι και την διεύθυνση διάδοσης.



Σχήμα 3.1. Ανακλώμενα και διαθλώμενα κύματα σε μια διεπιφάνεια δύο υλικών.

Πολλά από τα μεγέθη είναι ίσα. Στο ίδιο υλικό το κυματοδιάνυσμα εξαρτάται μόνο από την συχνότητα και τον δείκτη διάθλασης, άρα

$$\begin{aligned} k_A &= -k_B \\ k_C &= -k_D = (n_2 / n_1) k_A \end{aligned} \tag{3.1}$$

Οι εξισώσεις συνέχειας εφαρμόζονται στο συνολικό πεδίο της κάθε πλευράς. Αυτές είναι

$$\begin{aligned} E_A + E_B &= E_C + E_D \\ H_A - H_B &= H_C - H_D \end{aligned} \quad (3.2)$$

Χρησιμοποιώντας την Εξ. 1.36 τις γράφουμε συναρτήσει του ηλεκτρικού πεδίου

$$\begin{aligned} E_A + E_B &= E_C + E_D \\ n_1(E_A - E_B) &= n_2(E_C - E_D) \end{aligned} \quad (3.3)$$

Λύνοντας ως προς τα κύματα που είναι αριστερά, μπορούμε να τις γράψουμε σε μορφή πίνακα

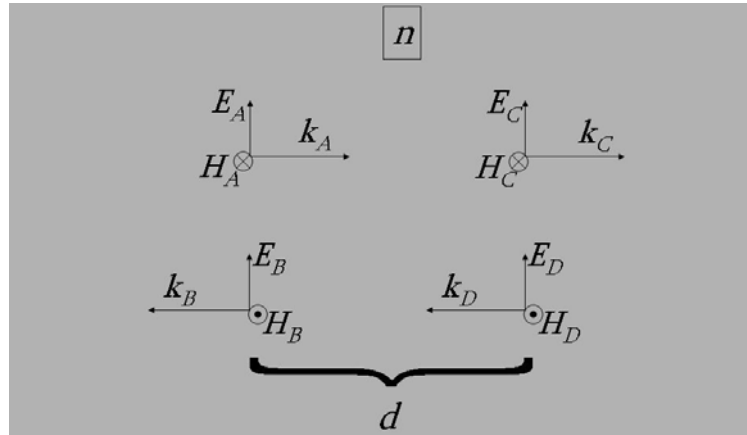
$$\begin{pmatrix} E_C \\ E_D \end{pmatrix} = \frac{1}{2n_2} \begin{pmatrix} n_2 + n_1 & n_2 - n_1 \\ n_2 - n_1 & n_2 + n_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_A \\ E_B \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

ο οποίος συνδέει τα κύματα απο δεξιά με τα κύματα απο αριστερά. Εάν λοιπόν γνωρίζουμε δύο απο αυτά, οι εξίσωση συνέχειας Εξ. 3.4 μας επιτρέπει να υπολογίζουμε τα άλλα δύο. Τον πίνακα της Εξ. 3.4 τον ονομάζουμε *πίνακα διεπιφάνειας* \check{I}_{n_2, n_1} (*interface matrix*) στο υλικό n_2 απο υλικό n_1 και γράφουμε την Εξ. 3.4 συντομογραφικά

$$\check{E}^+ = \check{I}_{n_2, n_1} \check{E}^- \quad (3.5)$$

3.2. Πίνακας μεταφοράς

Ας υποθέσουμε τώρα την διάδοση επίπεδων κυμάτων σε ένα ομοιογενές και ισότροπο υλικό για κάποια συγκεκριμένη απόσταση d , όπως φαίνεται στο Σχ. 3.2.



Σχήμα 3.2. Τα αντίστοιχα αριστροφόρα και δεξιόφορα κύματα μετά απο διάδοση σε απόσταση d .

Οι σχέσεις 3.1 τώρα γίνονται

$$k_A = k_C = -k_B = -k_D \quad (3.6)$$

Καθώς δεν υπάρχει πουθενά σκέδαση, τα κύματα διαδίδονται χωρίς να υπάρχει αλληλεπίδραση μεταξύ αυτών που πάνε προς τα αριστερά και αυτών που πάνε προς τα δεξιά. Άρα, χρησιμοποιώντας τις Εξ. 1.27 για την μορφή των επίπεδων κυμάτων, θα πρέπει να ισχύει

$$\begin{aligned} E_C &= E_A e^{ikd} \\ E_B &= E_D e^{ikd} \end{aligned} \quad (3.7)$$

όπου $k = n\omega/c$. Λύνοντας ως προς τα κύματα απο αριστερά, και βάζοντας σε μορφή πίνακα

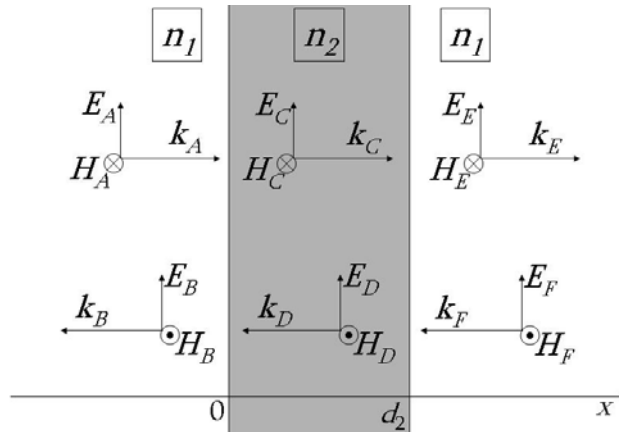
$$\begin{pmatrix} E_C \\ E_D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ikd} & 0 \\ 0 & e^{-ikd} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_A \\ E_B \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

Τον πίνακα της Εξ. 3.8 τον ονομάζουμε *πίνακα διάδοσης* $\check{P}_{n,d}$ (*propagation matrix*) και γράφουμε την Εξ. 3.8 συντομογραφικά

$$\check{E}^d = \check{P}_{n,d} \check{E}^0 \quad (3.9)$$

3.3. Ανάκλαση απο λεπτό υμένιο

Υποθέτουμε τώρα ένα λεπτό υμένιο πάχους d_2 και δείκτη διάθλασης n_2 , μέσα σε άπειρο υλικό με δείκτη διάθλασης n_1 , όπως φαίνεται στο Σχ. 3.3. Για κάθετη πρόσπτωση, η γενική λύση στην κάθε περιοχή αποτελείται όπως και πρίν από ένα κύμα που διαδίδεται προς τα δεξιά και ένα προς τα αριστερά.



Σχήμα 3.3. Ανάκλαση και διάδοση μέσα από λεπτό πλακίδιο.

Μπορούμε κατευθείαν να γράψουμε την λύση χρησιμοποιώντας τους πίνακες διεπιφάνειας και διάδοσης που ορίσαμε παραπάνω. Η λύση είναι

$$\check{E}^{d_2^+} = \check{I}_{n_1, n_2} \check{P}_{n_2, d_2} \check{I}_{n_2, n_1} \check{E}^{0^-} = \check{M} \cdot \check{E}^{0^-} \quad (3.10)$$

όπου $\check{E}^{d_2^+} \equiv \begin{pmatrix} E_E \\ E_F \end{pmatrix}$ είναι τα πεδία αμέσως μετά την διεπιφάνεια στο $x = d_2$ και

$\check{E}^{0^-} \equiv \begin{pmatrix} E_A \\ E_B \end{pmatrix}$ είναι τα πεδία αμέσως πρίν την διεπιφάνεια στο $x = 0$, και ορίσαμε τον

πίνακα 2×2 *Πίνακα Μετάβασης* \check{M} (*Transfer Matrix*). Ο υπολογισμός του είναι απλός πολλαπλασιασμός τριών 2×2 πινάκων, και το αποτέλεσμα:

$$M_{11} = \cos(k_2 d_2) + \frac{i}{2} \left(\frac{n_2}{n_1} + \frac{n_1}{n_2} \right) \sin(k_2 d_2)$$

$$M_{12} = \frac{i}{2} \left(\frac{n_2}{n_1} - \frac{n_1}{n_2} \right) \sin(k_2 d_2)$$
(3.11)

και $M_{22} = M_{11}^*$, $M_{21} = M_{12}^*$.

Μπορούμε τώρα εύκολα να υπολογίσουμε τους συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης από το υμένιο του Σχ. 3.3. Αυτοί μετράνε το ποσοστό ανάκλασης και διέλευσης της ενέργειας, δηλ. πρέπει να πέρνουμε το ανάλογο πηλίκο των διανυσμάτων *Poynting*, το οποίο απο τις Εξ. 1.38 και 1.36 είναι ανάλογο του $n|\vec{E}|^2$. Υποθέτουμε οτι έχουμε εισερχόμενο κύμα μόνο απο τα αριστερά, δηλ. $E_F = 0$. Η Εξ. 3.10 τότε γίνεται

$$E_E = M_{11}E_A + M_{12}E_B$$

$$0 = M_{21}E_A + M_{22}E_B$$
(3.12)

Οι *συντελεστές ανάκλασης R (reflection)* και *διέλευσης T (transmission)* ορίζονται αντίστοιχα ως

$$R = |E_B / E_A|^2$$

$$T = (n_{\text{τελικό}} / n_{\text{αρχικό}}) |E_E / E_A|^2$$
(3.13)

και χρησιμοποιώντας τις Εξ. 3.12

$$R = \left| \frac{M_{21}}{M_{22}} \right|^2$$

$$T = \frac{n_{\text{τελικό}}}{n_{\text{αρχικό}}} \left| \frac{\det \tilde{M}}{M_{22}} \right|^2$$
(3.14)

Η ορίζουσα του πίνακα μετάβασης \tilde{M} εξατράται από τον αρχικό και τελικό δείκτη. Χρησιμοποιώντας την ταυτότητα $\det \tilde{A}\tilde{B} = \det \tilde{A} \det \tilde{B}$, και $\det \tilde{I}_{n_2, n_1} = n_1 / n_2$, $\det \tilde{P}_{n, d} = 1$ όπως είναι εύκολο να δειχτεί, καταλήγουμε ότι

$$R = \left| \frac{M_{21}}{M_{22}} \right|^2$$

$$T = \frac{n_{\text{αρχικό}}}{n_{\text{τελικό}}} \frac{1}{|M_{22}|^2}$$
(3.15)

Στην περίπτωση μας του λεπτού υμενίου μέσα σε ομοιογενές υλικό, $n_{\text{αρχικό}} = n_{\text{τελικό}}$. Παρατηρώντας τις Εξ. 3.11 βλέπουμε οτι η ανάκλαση και η διέλευση είναι περιοδικές συναρτήσεις της συχνότητας $\omega = ck_2 / n_2$. Βρίσκουμε απο την Εξ. 3.11 και 3.15 οτι η ανάκλαση είναι μηδέν όταν ο αριθμητής είναι μηδέν, δηλ. όταν

$$\begin{aligned} \sin(k_2 d_2) = 0 &\Rightarrow n_2 \omega d_2 / c = m\pi \Rightarrow \\ d_2 / \lambda_2 &= m/2 \end{aligned} \quad (3.16)$$

όπου m είναι οποιοσδήποτε ακέραιος και $\lambda_2 = \lambda_0 / n_2$ είναι το μήκος κύματος μέσα στο υλικό με δείκτη διάθλασης n_2 . Αρα η συνθήκη μηδενικής ανάκλασης ισχύει όταν το πλάτος του πλακιδίου είναι πολλαπλάσιο το μισού μήκους κύματος στο υλικό. Σ' αυτήν την περίπτωση, ασφαλώς, η διέλευση γίνεται μονάδα. Αυτή η συνθήκη εμφανίζεται με περιοδικότητα

$$\Delta(d_2 / \lambda_2) = 1/2 \quad (3.17)$$

Ο συντελεστής διέλευσης για δύο τιμές του δείκτη διάθλασης του υμενίου φαίνεται στο Σχ. 3.4.

Η μέγιστη τιμή του συντελεστή διέλευσης όπως είπαμε είναι μονάδα, ανεξαρτήτου της τιμής του δείκτη διάθλασης του υμενίου, και επαναλαμβάνεται περιοδικά εάν κανείς μεταβάλλει το πάχος του πλακιδίου ή το μήκος κύματος της ακτινοβολίας. Η ελάχιστη τιμή του συντελεστή διέλευσης εμφανίζεται επίσης περιοδικά, αλλά η τιμή της εξαρτάται από τον δείκτη διάθλασης του υμενίου. Για υπολογίσουμε την ελάχιστη τιμή του συντελεστή διέλευσης υπολογίζουμε τα ακρότατα του $|M_{22}|^2$ από την Εξ. 3.11 θέτοντας $d|M_{22}|^2 / d\omega = 0$, και βρίσκουμε, εκτός της Εξ. 3.16 που περιγράφει τα μέγιστα του συντελεστή διέλευσης, την συνθήκη που περιγράφει τα ελάχιστα του συντελεστή διέλευσης.

$$\begin{aligned} \cos(k_2 d_2) = 0 &\Rightarrow n_2 \omega d_2 / c = \pi(m + 1/2) \Rightarrow \\ d_2 / \lambda_2 &= (m + 1/2)/2 \end{aligned} \quad (3.18)$$

που περιγράφει τα ελάχιστα.

Για $m=0$ έχουμε την συνθήκη ελάχιστη διέλευση (μέγιστη ανάκλαση) να είναι

$$d_2 = \frac{\lambda_2}{4} \quad (3.19)$$

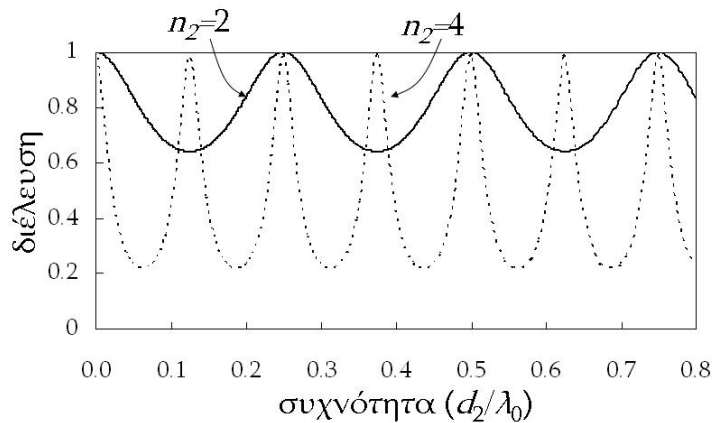
Αυτή ονομάζεται συνθήκη του ενός-τετάρτου κύματος και είναι αρκετά γενική και θα χρησιμοποιηθεί πολύ αργότερα.

Η ίδια περιοδικότητα με την Εξ. 3.16 εμφανίζεται προφανώς και για τα ελάχιστα. Όταν ικανοποιείται η Εξ. 3.18, η ελάχιστη τιμή της διέλευσης υπολογίζεται ότι είναι:

$$T_{\min} = \frac{4n_1^2 n_2^2}{(n_1^2 + n_2^2)^2} \quad (3.20)$$

Παρατηρούμε από την Εξ. 3.20 αλλά και από το Σχ. 3.4 ότι όσο μεγαλώνει η διαφορά των δεικτών, τόσο μικρότερη είναι η ελάχιστη διέλευση:

$$T_{\min(n_2 \gg n_1)} \approx (2n_1 / n_2)^2 \rightarrow 0 \quad (3.21)$$



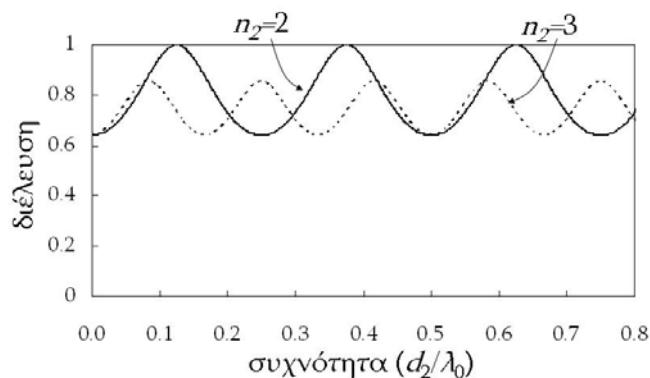
Σχήμα 3.4 Συντελεστής διέλευσης απο λεπτό πλακίδιο για δύο διαφορετικές τιμές του δείκτη διάθλασης.

3.4. Αντιανακλαστική επίστρωση

Υπάρχουν πολλές περιπτώσεις στην παρασκευή οπτικών διατάξεων που είναι επιθυμητό ένα κύμα να έχει μηδενική ανάκλαση. Συνήθως αυτό γίνεται όταν το κύμα είναι μέσα σε ένα υλικό με μεγάλο δείκτη διάθλασης n_1 και θέλουμε να το περάσουμε χωρίς απώλειες σε ένα άλλο υλικό με μικρότερο δείκτη διάθλασης n_3 . Χρησιμοποιούμε ως ενδιάμεσο σκαλοπάτι ένα λεπτό στρώμα απο υλικό με ενδιάμεσο δείκτη n_2 και πάχος d_2 . Η συνολική διάταξη ικανοποιεί την σχέση

$$\check{E}^{d_2^+} = \check{I}_{n_3, n_2} \check{P}_{n_2, d_2} \check{I}_{n_2, n_1} \check{E}^{0-} = \check{M} \cdot \check{E}^{0-} \quad (3.22)$$

η οποία είναι λίγο διαφορετική απο την Εξ. 3.10. Επειδή το εισερχόμενο και διερχόμενο κύμα είναι σε διαφορετικά υλικά, σύμφωνα με την Εξ. 3.15 ο συντελεστής διέλευσης είναι $T = (n_1/n_3)/|M_{22}|^2$. Στο Σχ. 3.5 σχεδιάζουμε τον συντελεστή διέλευσης για $n_1 = 4$, $n_3 = 1$ και δύο ενδιάμεσες τιμές του n_2 .



Σχήμα 3.5 Συντελεστής διέλευσης απο λεπτό αντι-ανακλαστικό πλακίδιο πάνω σε υλικό υψηλού δείκτη διάθλασης $n_1 = 4$ για μεταφορά σε υλικό με δείκτη $n_3 = 1$, για δύο διαφορετικές τιμές του δείκτη διάθλασης του πλακιδίου.

Θέτοντας $d|M_{22}|^2 / d\omega = 0$ για να βρούμε τα ακρότατα, βρίσκουμε πάλι τις Εξ. 3.16 και Εξ. 3.18, με τον ρόλο τους όμως αντεστραμμένο: η Εξ. 3.16 περιγράφει το ελάχιστο ενώ η Εξ. 3.18 το μέγιστο¹. Πιο συγκεκριμένα βρίσκουμε μέγιστη διέλευση όταν

$$\cos(k_2 d_2) = 0 \Rightarrow d_2 / \lambda_2 = (m + 1/2) / 2 \quad (3.23)$$

με τιμή

$$T_{\max} = \frac{4n_1 n_3 n_2^2}{(n_2^2 + n_1 n_3)^2} \quad (3.24)$$

ενώ ελάχιστη διέλευση όταν

$$\sin(n_2 \omega d_2 / c) = 0 \Rightarrow d_2 / \lambda_2 = m / 2 \quad (3.25)$$

με τιμή

$$T_{\min} = \frac{4n_1 n_3}{(n_1 + n_3)^2} \quad (3.26)$$

Ο λόγος που παρατηρείται αυτή η αντιστροφή είναι λόγω του προσήμου στην ανάκλαση από την Εξ. 1.37: στην προηγούμενη περίπτωση οι δύο ανακλάσεις ($n_1 \rightarrow n_2$ και $n_2 \rightarrow n_1$) είχαν διαφορετικό πρόσημο (διαφορά φάσης π), ενώ τώρα ($n_1 \rightarrow n_2$ και $n_2 \rightarrow n_3$) έχουν το ίδιο. Είναι λοιπόν ενδιαφέρον ότι το ίδιο πλακίδιο στο κενό να λειτουργεί ως ανακλαστήρας, ενώ πάνω σε άλλο υλικό να αλλάζει και να λειτουργεί ως αντι-ανακλαστήρας.

Από τον υπολογισμό στο υμένιο σε ομοιογενές υλικό είχαμε βρεί ότι το μέγιστο ήταν ανεξάρτητο του δείκτη διάθλασης του υμενίου. Αυτό ήταν συνιφασμένο με την συνθήκη 3.16. Τώρα που οι συνθήκες έχουν αντιστραφεί, βρίσκουμε ότι το ελάχιστο της διέλευσης είναι ανεξάρτητο του δείκτη διάθλασης του υμενίου. Όσο μεγαλώνει η διαφορά μεταξύ των n_1, n_3 , η ελάχιστη διέλευση τείνει στο μηδέν:

$$T_{\min(n_3 \gg n_1)} \approx 4n_1 / n_3 \rightarrow 0 \quad (3.27)$$

Αντίστοιχα, το μέγιστο είναι εξαρτώμενο από τον δείκτη, δηλ. η μέγιστη διέλευση που μπορούμε να επιτύχουμε εξαρτάται από τον δείκτη διάθλασης του υλικού που επιλέξαμε. Για κάθε ζευγάρι n_1, n_3 η βέλτιστη επιλογή είναι ο γεωμετρικός μέσος όρος

$$n_2 = \sqrt{n_1 n_3} \quad (3.28)$$

όπως μπορεί εύκολα να επιβεβαιωθεί στην Εξ. 3.24. Και οι δύο συνθήκες 3.23 και 3.28 πρέπει να ικανοποιούνται για $T = 1$. Επιλέγοντας το υλικό με βάση τον δείκτη της Εξ. 3.28, και το πάχος του υμενίου ώστε να ικανοιείται η Εξ. 3.23, επιτυγχάνουμε μέγιστη διέλευση στο υλικό με δείκτη n_3 .

¹ Αυτό ισχύει εφόσον $n_1 > n_2 > n_3$ ή $n_1 < n_2 < n_3$. Σε άλλη περίπτωση εξαρτάται από τις τιμές τους. Σε οποιαδήποτε περίπτωση, οι Εξ. 2.22-2.23 παραμένουν τα ακρότατα.

3.5. Μέτρηση πάχους υμενίου

Υπάρχουν πολλές περιπτώσεις κατά την διάρκεια ανάπτυξης πλακιδίων που θέλουμε να ξέρουμε το πάχος τους χωρίς όμως να τα βγάλουμε έξω για να τα μετρήσουμε. Σε αυτήν την περίπτωση μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τις παραπάνω ιδιότητες: όπως το πάχος του πλακιδίου μεγαλώνει¹ μετρούμε την ανάκλαση σε κάποιο γνωστό μήκος κύματος. Απο την περιοδικότητά της, με την Εξ. 3.17, βρίσκουμε οτι κάθε φορά που η τιμή της ανάκλασης κάνει έναν κύκλο, το πάχος του πλακιδίου έχει αυξηθεί κατά

$$\Delta d_2 = \frac{\lambda_0}{2n_2} \quad (3.29)$$

Εάν δεν είναι γνωστή η τιμή το δείκτη του πλακιδίου μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την Εξ. 3.24 για να τον υπολογίσουμε.

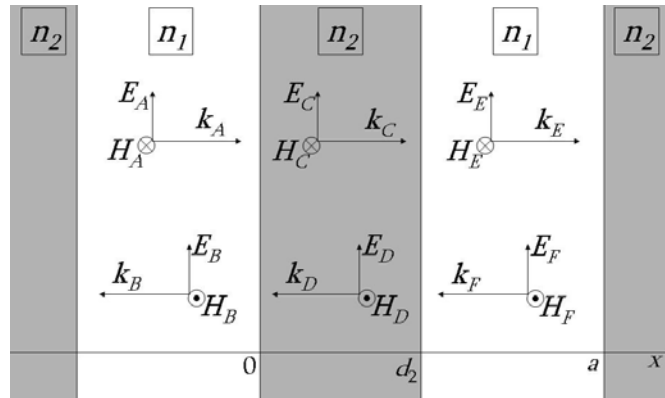
¹ έχοντας γράψει την συχνότητα ως d_2 / λ_0 η αλλαγή στη συχνότητα είναι ισοδύναμη με αλλαγή πάχους.

4. ΚΑΘΡΕΠΤΕΣ BRAGG

Η πιο γνωστή και ευρέως χρησιμοποιούμενη περιοδική διάταξη είναι ο διηλεκτρικός καθρέπτης, ή αλλιώς καθρέπτης Bragg. Ονομάζεται επίσης και μονοδιάστατος φωτονικός κρύσταλλος, η οποία ονομασία θα γίνει στο επόμενο κεφάλαιο πιο προφανής όταν μελετήσουμε τους φωτονικούς κρυστάλλους.

4.1. Περιοδική διάταξη υμενίων

Θεωρούμε την περιοδική (άπειρη) τοποθέτηση λεπτών πλακιδίων δείκτη διάθλασης n_2 και πάχους d_2 μέσα σε ομογενές υλικό με δείκτη διάθλασης n_1 , με περίοδο a . Η μοναδιαία κυψελίδα του συστήματος εκτείνεται από $x=0^-$ μέχρι $x=a^-$, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.1.



Σχήμα 4.1 Υπολογισμός για περιοδικό σύστημα πλακιδίων. Πάλι θεωρούμε ότι η λύση μπορεί να γραφεί ως γραμμικός συνδιασμός δύο αντιθέτως κινούμενων κυμάτων.

Η μεταβολή των πεδίων κατά μήκος μιας κυψελίδας βρίσκεται όπως και προηγουμένως

$$\check{E}^{a^-} = \check{P}_{n_1, d_1} \check{I}_{n_1, n_2} \check{P}_{n_2, d_2} \check{I}_{n_2, n_1} \check{E}^{0^-} = \check{M} \cdot \check{E}^{0^-} \quad (4.1)$$

ο πίνακας \check{M} της μοναδιαίας κυψελίδας είναι ο ίδιος με αυτόν του υμενίου της Εξ. 3.11, με την μόνη διαφορά ότι αλλάζουν το πρώτο και το τελευταίο στοιχείο

$$\begin{aligned} M_{11} &\rightarrow e^{ik_1(a-d_2)} M_{11} \\ M_{22} &\rightarrow e^{-ik_1(a-d_2)} M_{22} \end{aligned} \quad (4.2)$$

Η διηλεκτρική σταθερά (ή αντίστοιχα ο δείκτης διάθλασης) είναι περιοδική συνάρτηση της απόστασης με περίοδο a :

$$\varepsilon(x+a) = \varepsilon(x) \quad (4.3)$$

Απο το θεώρημα Bloch-Floquet ξέρουμε ότι λύσεις της Εξ. 4.1 είναι της μορφής

$$\tilde{E}_q(x) = e^{iqx} \tilde{u}(x) \quad (4.4)$$

όπου το διάνυσμα/συνάρτηση \tilde{u} είναι περιοδικό $\tilde{u}(x+a) = \tilde{u}(x)$, και q είναι το κυματοδιάνυσμα που περιγράφει τις χωρικές ιδιότητες της λύσης. Η βασική ιδιότητα της Εξ. 4.4 είναι ότι αν μετατοπιστούμε κατά μια περίοδο a , η λύση παραμένει αμετάβλητη εκτός από μια επιπλέον φάση

$$\tilde{E}_q(x+a) = e^{iqa} \tilde{E}(x) \quad (4.5)$$

Συνδιάζοντας την Εξ. 4.1 με την Εξ. 4.5 και γράφοντας λεπτομερώς το \tilde{E}

$$\tilde{M} \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = e^{iqa} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

Αυτό είναι ένα κλασικό πρόβλημα ιδιοτιμών¹, και η λύση του βρίσκεται με διαγωνοποίηση του \tilde{M}

$$\det|\tilde{M} - \beta\tilde{I}| = 0 \Rightarrow \beta_{\pm} = (M_{11} + M_{22})/2 \pm \sqrt{(M_{11} - M_{22})^2/4 - 1} \quad (4.7)$$

όπου I είναι ο μοναδιαίος 2×2 πίνακας, και οι ιδιοτιμές $\beta_{\pm} \equiv e^{\pm iqa}$.

Το άθροισμα των δύο ιδιοτιμών² μας δίνει την καταστατική εξίσωση που περιγράφει την φωτονική δομή ζώνης του περιοδικού συστήματος

$$\begin{aligned} \beta_+ + \beta_- &= 2 \cos(qa) = M_{11} + M_{22} \Rightarrow \\ \cos(qa) &= \cos(k_1 d_1) \cos(k_2 d_2) - \frac{1}{2} \left(\frac{n_1}{n_2} + \frac{n_2}{n_1} \right) \sin(k_1 d_1) \sin(k_2 d_2) \end{aligned} \quad (4.8)$$

όπου $d_1 = a - d_2$. Και το k και το q έχουν μονάδες αντίστροφου μήκους και είναι κυματοδιανύσματα. Η διαφορά τους είναι ότι το k περιγράφει την μεταβολή φάσης ενός *επίπεδου κύματος* σε κάθε σημείο του χώρου και είναι αυστηρώς συνδεδεμένο με την συχνότητα, ενώ το q περιγράφει την μεταβολή της φάσης μιας *κυματομορφής* (όχι επίπεδο κύμα κατ'ανάγκη) σε μια περίοδο.

4.2. Δομή φωτονικών ζωνών

Η εξ. 4.8 είναι η καταστατική εξίσωση που περιγράφει την ύπαρξη και διάδοση κυμάτων μέσα στο περιοδικό μέσο. Κοιτάζοντάς την αναγνωρίζουμε ότι ο συσχετισμός του q με το k_1 και k_2 (και συνεπώς με το ω) δεν είναι ακριβής. Για

¹ Ο \tilde{M} είναι μοναδιαίος πίνακας, και ως γνωστό από την γραμμική άλγεβρα έχει ιδιοτιμές $e^{\pm i\varphi}$.

² Οι ιδιοτιμές είναι επίπεδα κύματα διαδιδόμενα κατά αντίθετες φορές. Αυτό είναι αποτέλεσμα και της συμμετρίας χρονικής αναστροφής αλλά και της συμμετρίας χωρικής αναστροφής.

την μια συγκεκριμένη συχνότητα ω (δηλ. για συγκεκριμένα $k_1 = n_1\omega/c$ και $k_2 = n_2\omega/c$) μπορούμε να προσθέσουμε στο q οποιοδήποτε πολλαπλάσιο του $\pm 2\pi/a$ και η Εξ. 4.8 θα συνεχίσει να ισχύει, επειδή το συνημίτονο είναι περιοδική συνάρτηση του ορίσμάτος του. Οι διαφορετικές τιμές του q στην Εξ. 4.8 είναι συνεπώς

$$-\pi \leq qa \leq \pi \quad (4.9)$$

Για παράδειγμα, έστω ότι το qa είναι μεγαλύτερο του π , τότε μπορεί να γραφεί ως $qa = \pi + \varphi$ όπου $0 < \varphi < \pi$. Τότε όμως

$$\cos(qa) = \cos(\pi + \varphi) = \cos(-\pi + \varphi) = \cos(-\varphi) = \cos(\varphi) \quad (4.10)$$

όπου $-\pi < \varphi < 0$, είναι δηλαδή ισοδύναμο με ένα άλλο $q'a$ μέσα στο διάστημα της Εξ. 4.9. Άρα, για κάθε ω υπάρχει ένα $\pm q$ στο διάστημα της Εξ. 4.9 που ικανοποιεί την Εξ. 4.8.

Ας εξετάσουμε πρώτα την οριακή περίπτωση όπου η διαφορά των δύο δεικτών διάθλασης είναι μηδέν, δηλ. $n_2, n_1 \rightarrow n$. Τότε

$$\cos(qa) \rightarrow \cos(kd_1)\cos(kd_2) - \sin(kd_1)\sin(kd_2) = \cos(ka) \quad (4.11)$$

όπου $k = n\omega/c$ καθώς $d_1 + d_2 = a$. Σε αυτή την περίπτωση το q είναι ίσο με το k , εκτός από μια φάση πολλαπλάσια του $\pm 2\pi/a$. Θα δούμε παρακάτω τι σημαίνει αυτή η φάση.

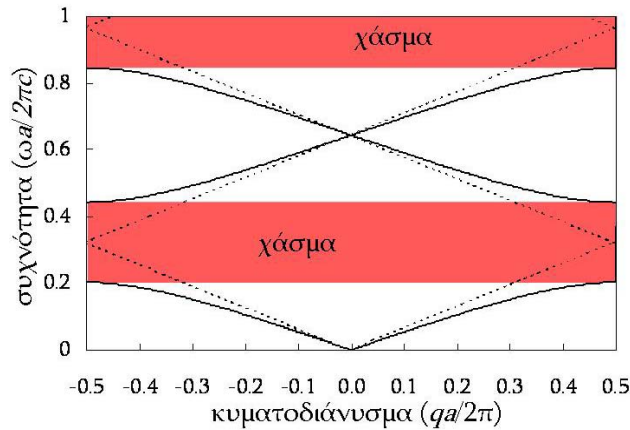
Θα εξετάσουμε τώρα την περίπτωση που οι δύο δείκτες διάθλασης δεν είναι ίσοι. Η λύση της Εξ. 4.8, δηλ. η σχέση μεταξύ q και ω αποτελεί την λεγόμενη *φωτονική δομή ζώνης*. Καθώς αυτή περικλείεται μεταξύ των αποδεκτών τιμών της Εξ. 4.9, ονμάζεται και *πρώτη Ζώνη Brillouin*. Υπάρχουν πολλοί τρόποι να επιλέξει κανείς τα πάχη d_1 και d_2 . Μια ιδιαίτερα απλή περίπτωση, και όπως αποδεικνύεται η πλέον ενδιαφέρουσα, είναι να θεωρήσουμε την περίπτωση που τα οπτικά πάχη του κάθε υμενίου είναι ίσα, δηλαδή $k_1d_1 = k_2d_2$, ή πιο απλά

$$k_1d_1 = k_2d_2 \quad (4.12)$$

σε αυτή την περίπτωση η Εξ. 4.8 απλοποιείται στην

$$\cos(qa) = \cos^2(k_1d_1) - \frac{1}{2} \left(\frac{n_1}{n_2} + \frac{n_2}{n_1} \right) \sin^2(k_1d_1) \quad (4.13)$$

Μια τέτοια διάταξη ονομάζεται *επιστιβαγμα-ενός-τετάρτου-κύματος (quarter-wave-stack)*. Η λύση της Εξ. 4.13 υπολογίζεται για τους δείκτες $n_1 = 1$ και $n_2 = 3.5$ με πάχη $d_1 = (n_2/n_1)d_2$ στο σχήμα 4.2.



Σχήμα 4.2. Η φωτονική δομή ζώνης για ένα περιοδικό σύστημα υμενίων πάχους λ -τέταρτα, με $m=1$ και $m=3.5$. Με κόκκινη επισκίαση είναι τα φωτονικά χάσματα ζώνης.

Το πρώτο που παρατηρεί κανείς επιχειρώντας την λύση της Εξ. 4.13 είναι ότι υπάρχουν συχνότητες για τις οποίες η λύση δεν είναι ένας απλός πραγματικός αριθμός, όταν δηλαδή το δεξί μέρος της Εξ. 4.13 είναι μεγαλύτερο του 1 ή μικρότερο του -1. Σε αυτές τις περιπτώσεις το q είναι μιγαδικός, και άρα δεν υπάρχει διάδοση κυμάτων: η λύση είναι μια εκθετική απόσβεση με την απόσταση. Πραγματικές λύσεις που περιγράφουν απλή διάδοση κυμάτων έχουμε όταν το δεξί μέρος της Εξ. 4.13 είναι μεταξύ του -1 και του 1, όταν δηλαδή ισχύει

$$|\cos(qa)| \leq 1 \quad (4.14)$$

Στην φωτονική δομή ζώνης σχεδιάζουμε μόνο την πραγματική τιμή του q . Στις περιπτώσεις που το q είναι μιγαδικό, το πραγματικό του μέρος είναι ή $\pm \pi/a$ ή 0. Στο Σχ. 4.2 παρατηρούμε ότι σε αυτές τις περιπτώσεις ουσιαστικά δεν έχουμε διαδόσιμη λύση, υπάρχει ένα χάσμα στην σχέση μεταξύ q και ω , το οποίο αποτελεί το λεγόμενο *φωτονικό χάσμα ζώνης*. Η φυσική σημασία του φωτονικού χάσματος είναι η εξής: ακτινοβολία με συχνότητα τέτοια που να εμπίπτει μέσα στο φωτονικό χάσμα δεν μπορεί να διαδοθεί, και άρα υφίσταται ολοκληρωτική ανάκλαση. Παρατηρούμε ότι πολλά τέτοια χάσματα ανοίγουν, στο καθένα απο αυτά ισχύει η ίδια ιδιότητα της μη διάδοσης. Το κάθε χάσμα χαρακτηρίζεται απο το πραγματικό μέρος του q , στο πρώτο είναι $qa = \pi$, στο δεύτερο $qa = 3\pi$ κοκ.

Για μια πρώτη κατανόηση του χάσματος, αρκεί να θυμηθούμε ότι η ανάκλαση από ένα υμένιο μεγιστοποιείται όταν ικανοποιείται η συνθήκη της Εξ. 3.19 του ενός τετάρτου κύματος $d = (m + \frac{1}{2})\lambda_0 / 2n$. Στο κέντρο του κάθε χάσματος αυτή η συνθήκη ικανοποιείται και απο τα δύο υμένια

$$n_1 d_1 = n_2 d_2 = (m + \frac{1}{2})\lambda_0 / 2 \quad (4.15)$$

όπου το m παίζει τον ρόλο της τάξης του χάσματος. Αυτό που έχουμε λοιπόν δημιουργήσει είναι μια διάταξη στην οποία για την κατάλληλη συχνότητα το κύμα

βρίσκει ισχυρή ανάκλαση από κάθε υμένιο, έτσι ώστε να συμβάλουν όλα μαζί και να ανακλούν ολοσχερώς κάθε εισερχόμενο κύμα.

Από την Εξ. 4.15 πέρνουμε ότι $k_1 d_1 = \pi(m + \frac{1}{2})$. Εάν το εισάγουμε αυτό στην Εξ. 4.13, βρίσκουμε ότι στα κέντρα των χασμάτων ισχύει

$$|\cos(qa)| = \frac{1}{2} \left(\frac{n_1}{n_2} + \frac{n_2}{n_1} \right) \quad (4.16)$$

και άρα βλέπουμε ότι η συνθήκη χάσματος $|\cos(qa)| > 1$ ικανοποιείται αυτόματα για την οποιαδήποτε διαφορά στους δείκτες, καθώς $(n_1/n_2 + n_2/n_1) > 2$ για $n_1 \neq n_2$.

Ανάμεσα στα χάσματα οι ζώνες τέμνονται. Στα σημεία αυτά ισχύει η συνθήκη μέγιστης διέλευσης του υμενίου

$$n_1 d_1 = n_2 d_2 = m \lambda_0 / 2 \quad (4.17)$$

Από εδώ βρίσκουμε ότι $k_1 d_1 = m\pi$, και η Εξ. 4.12 τώρα γίνεται

$$|\cos(qa)| = 1 \quad (4.18)$$

ασχέτως την διαφορά μεταξύ των δεικτών. Εδώ το κύμα διαδίδεται ανενόχλητο, με μια ταχύτητα ομάδας που καθορίζεται από την κλίση της ζώνης $v_G = d\omega/dq$. Όπως θα δούμε και παρακάτω τα σημεία τομής αντιστοιχούν σε $qa = 2\pi, 4\pi$ κοκ.

Αξίζει εδώ να σημειωθεί ότι στην περίπτωση που η συνθήκη ίσων οπτικών παχών της Εξ. 4.12 δεν ικανοποιείται επακριβώς, τότε η Εξ. 4.18 μετατρέπεται σε $|\cos(qa)| > 1$ με αποτέλεσμα το άνοιγμα ενός μικρού χάσματος και σε αυτά τα σημεία. Αυτά τα χάσματα είναι εν γένει μικρότερα από τα άλλα στην άκρη της ζώνης. Συγχρόνως, τα χάσματα στην άκρη της ζώνης Brillouin συρικνώνονται με την αλλαγή της συνθήκης 4.12. Όσο δηλαδή απομακρινόμαστε από την ιδανική συνθήκη της Εξ. 4.12, τα περιττά χάσματα μικραίνουν και τα ζυγά ανοίγουν και μεγαλώνουν.

Με διακεκομμένες γραμμές είναι η λύση που θα έπερνε κανείς εάν έχετε $n_1, n_2 \rightarrow \langle n \rangle \equiv (n_1 d_1 + n_2 d_2) / a$, δηλαδή τον αντίστοιχο ομογενοποιημένο χώρο με τον μέσο όρο του δείκτη διάθλασης. Παρατηρούμε ότι ακολουθεί πιστά τα χάσματα, και άρα μπορούμε να το χρησιμοποιήσουμε εναλλακτικά για να βρούμε σε ποιές συχνότητες θα εμφανιστούν τα χάσματα ή τα σημεία τομής. Καθώς $qa = \pm m\pi$ και για το ομογενοποιημένο ισχύει $\langle q \rangle = \langle n \rangle \omega / c$, συναπάγεται ότι τα χάσματα ή σημεία τομής θα επικεντρώνονται στις συχνότητες

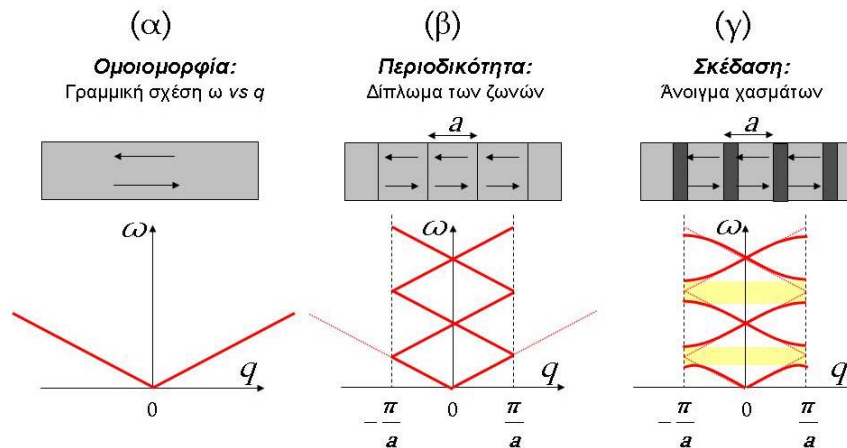
$$\omega_m = m \frac{\pi c}{a \langle n \rangle} \quad (4.19)$$

Ένας άλλος τρόπος να γραφτεί η Εξ. 4.19 είναι χρησιμοποιώντας το μήκος κύματος

$$\frac{\lambda_0}{\langle n \rangle} = \frac{2a}{m} \quad (4.20)$$

η οποία δηλώνει ότι τα κρίσιμα σημεία (χάσματα για περιττό m και σημεία τομής για άρτιο) ουσιαστικά αντιστοιχούν στις περιπτώσεις όπου η περίοδος είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του μισού μέσου μήκους κύματος μέσα στο υλικό.

Μια βασική ερώτηση με την ομογενοποιημένη ζώνη είναι γιατί αυτή εμφανίζεται μέσα στην ζώνη *Brillouin* αφού εδώ δεν υπάρχει κάποια περιοδικότητα. Ως απάντηση, σχεδιάζουμε στο Σχ. 4.3 τους δύο βασικούς μηχανισμούς στά περιοδικά συστήματα.



Σχήμα 4.3. Οι τρεις βασικές φωτονικές δομές ζώνης: α) στον ελεύθερο χώρο είναι μια απλή ευθεία, β) η περιοδικότητα διπλώνει τις ζώνες μέσα στην ζώνη Brillouin, γ) η σκέδαση λόγω διαφορετικών δεικτών διάθλασης ανοίγει απαγορευμένες ζώνες-χάσματα.

Στο Σχ. 4.3.α είναι η ζώνες ενός ομοιογενούς χώρου, που δεν είναι άλλο παρά η γραμμική σχέση διασποράς $\omega = cq / n$. Στο Σχ. 4.3.β είναι η ίδια περίπτωση με το α, με την διαφορά οτι έχουμε επιβάλει μια τεχνητή περιοδικότητα a . Η περιοδικότητα αυτή δεν κάνει τίποτα άλλο απο το να δημιουργεί μια ζώνη Brillouin και να διπλώνει τις ζώνες μέσα σε αυτήν. Δεν επιφέρει όμως καμία σκέδαση, και έτσι οι ζώνες δεν ξεφεύγουν απο την γραμμική μορφή τους. Η μόνη διαφορά είναι οτι το σημείο $qa = 2\pi$ τώρα εμφανίζεται στο μηδέν, όπως επίσης και τα $qa = 4\pi, 6\pi$ κοκ. Στο Σχ. 4.3.γ εισάγουμε και σκέδαση αλλάζοντας τις τιμές των δύο υμενίων. Το αποτέλεσμα αυτού είναι η καμπύλωση των ζωνών και το άνοιγμα των χασμάτων. Μπορούμε λοιπόν να συνοψίσουμε την περιοδική διάταξη ως εξής: η περιοδικότητα επιφέρει δίπλωμα των ζωνών, και η σκέδαση επιφέρει την καμπύλωση των ζωνών.

Απο την παραπάνω ανάλυση, προκύπτει και μια καλύτερη εικόνα για τον μηχανισμό δημιουργίας του χάσματος. Ακριβώς στην άκρη της ζώνης, οι λύσεις για $qa = \pi$ και $qa = -\pi$ ουσιαστικά συμπίπτουν. Η πιο ακριβέστερα, η σκέδαση επιφέρει την μετατροπή απο το ένα στο άλλο. Δύο αντίθετα κύματα με το ίδιο πλάτος και συχνότητα είναι ένα στάσιμο κύμα, με ταχύτητα διάδοσης μηδέν. Πράγματι, στην άκρη της ζώνης η κλίση είναι και άρα η ταχύτητα ομάδας $v_g = d\omega / dq$ είναι και αυτή μηδέν. Η φυσική σημασία της άκρης του χάσματος μπορεί λοιπόν να ειπωθεί ως την σύγχρονη σκέδαση μπρος και πίσω ενός κύματος με ένα άλλο διαδιδόμενο στην αντίθετη φορά με την συνεπακόλουθη δημιουργία στάσιμου κύματος.

Μπορούμε να υπολογίσουμε το πλάτος του πρώτου χάσματος. Τα άκρα του εμφανίζονται όταν $\cos(qa) = -1$. Λύνοντας την Εξ. 4.12 έχουμε

$$\cos^2(k_1 d_1) - \frac{1}{2} \left(\frac{n_1}{n_2} + \frac{n_2}{n_1} \right) \sin^2(k_1 d_1) = -1 \Rightarrow \quad (4.21)$$

$$\omega_e = \frac{c}{n_1 d_1} \sin^{-1} \left(\sqrt{2 / \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{n_1}{n_2} + \frac{n_2}{n_1} \right) \right]} \right) \quad (4.22)$$

όπου ω_e είναι η συχνότητα στο κάτω άκρο. Χρησιμοποιώντας την συχνότητα στο κέντρο του χάσματος από την $\lambda_0 / 4 = d_1 n_1 = d_2 n_2 \Rightarrow \omega_o = \pi c / 2 n_1 d_1$ και το γεγονός ότι το χάσμα είναι συμμετρικό, βρίσκουμε το συνολικό του πλάτος.

4.3. Διηλεκτρικοί καθρέπτες Bragg¹

Για συχνότητες μέσα στο χάσμα το q είναι φανταστικό, και άρα αντί για διαδιδόμενα κύματα η λύση είναι κύματα που αποσβένουν εκθετικά στον χώρο. Σε ένα πεπερασμένο τέτοιο σύστημα, κάθε προσπίπτων κύμα με την κατάλληλη συχνότητα θα ανακλάται. Όσο μεγαλύτερος ο αριθμός των επιστρώσεων, τόσο μεγαλύτερη η ανάκλαση. Ένα τέτοιο σύστημα αποτελεί έναν τέλειο καθρέπτη, παρόλο που αποτελείται από μια περιοδική διάταξη *διάφανων* πλακιδίων, και ονομάζεται *διηλεκτρικός καθρέπτης* ή *καθρέπτης Bragg*. Μπορούμε να υπολογίσουμε την ανάκλαση και διέλευση για ένα τέτοιο σύστημα με N περιόδους, ξεκινώντας από τον ορισμό του πίνακα μεταφοράς της μοναδιαίας κυψελίδας \tilde{M} της Εξ. 4.2:

$$\begin{pmatrix} A^N \\ B^N \end{pmatrix} = \tilde{M}^N \begin{pmatrix} A^1 \\ B^1 \end{pmatrix} \quad (4.23)$$

Εάν υπολογίσουμε το \tilde{M}^N τότε θα είναι εύκολο να υπολογίσουμε την ανάκλαση και διέλευση. Για να το κάνουμε αυτό θα χρησιμοποιήσουμε γνωστές ιδιότητες των τετραγωνικών μοναδιαίων πινάκων. Συνεχίζοντας από τις Εξ. 4.6-4.7 γράφουμε τον πίνακα \tilde{M} συναρτήσει των ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων του,

$$\tilde{M} = \tilde{\Psi} \begin{pmatrix} e^{iqa} & 0 \\ 0 & e^{-iqa} \end{pmatrix} \tilde{\Psi}^{-1} = \tilde{\Psi} \tilde{\Phi} \tilde{\Psi}^{-1} \quad (4.24)$$

όπου οι στήλες του πίνακα $\tilde{\Psi}$ είναι τα ιδιοδιανύσματα του \tilde{M} . Τότε

$$\tilde{M}^N = [\tilde{\Psi} \tilde{\Phi} \tilde{\Psi}^{-1}]^N = \tilde{\Psi} \tilde{\Phi} \tilde{\Psi}^{-1} \tilde{\Psi} \tilde{\Phi} \tilde{\Psi}^{-1} \dots \tilde{\Psi} \tilde{\Phi} \tilde{\Psi}^{-1} = \tilde{\Psi} \tilde{\Phi}^N \tilde{\Psi}^{-1} \quad (4.25)$$

όπου πολύ απλά

¹ Bragg mirror, ή, Distributed Bragg Reflector (DBR).

$$\check{\Phi}^N = \begin{pmatrix} e^{iNqa} & 0 \\ 0 & e^{-Nqa} \end{pmatrix} \quad (4.26)$$

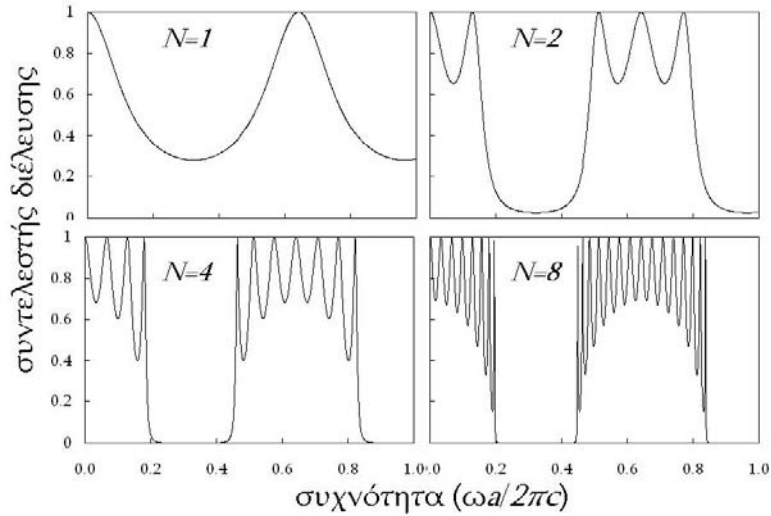
άρα η λύση βρίσκεται μετά από πολλαπλασιασμό τριών πινάκων. Μετά από λίγη άλγεβρα:

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}^N = \begin{pmatrix} \frac{M_{11} \sin Nqa - \sin(N-1)qa}{\sin qa} & \frac{M_{12} \sin Nqa}{\sin qa} \\ \frac{M_{21} \sin Nqa}{\sin qa} & \frac{M_{22} \sin Nqa - \sin(N-1)qa}{\sin qa} \end{pmatrix} \quad (4.27)$$

Ο συντελεστής διέλευσης και ανάκλασης υπολογίζονται από τις Εξ. 3.12. Για υλικά χωρίς απορρόφηση μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την συνθήκη $R + T = 1 \Rightarrow T = 1/(1 + R/T) = 1/(1 + |M_{21}|^2)$ και να βρούμε τον συνολικό συντελεστή διέλευσης

$$T = \frac{1}{1 + |M_{21}|^2 \frac{\sin^2 Nqa}{\sin^2 qa}} \quad (4.28)$$

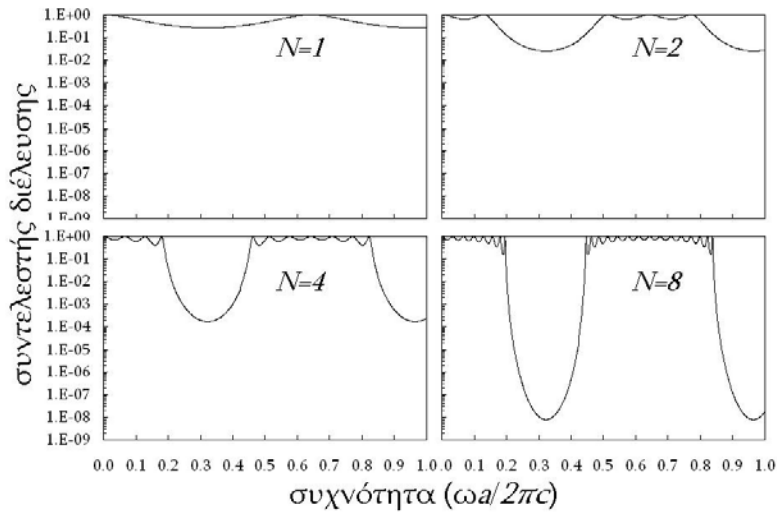
Προφανώς στην περίπτωση $N=1$ και $n_1=1$ επανερχόμαστε στην Εξ. 3.15 του ενός πλακιδίου, όπως πολύ εύκολα μπορεί να δειχτεί.



Σχήμα 4.4. Συντελεστής διέλευσης για σύστημα του Σχ. 4.2, για τέσσερις διαφορετικούς αριθμούς περιόδων. Παρατηρούμε ότι ο αριθμός των κροσσών συμβολής στην κάθε ζώνη, εκτός της πρώτης που είναι N , είναι $2N-1$. Στα χάσματα του Σχ. 4.2 πράγματι αντιστοιχεί μηδενική διέλευση.

Στο Σχ. 4.4 σχεδιάζεται ο συντελεστής διέλευσης του διηλεκτρικού καθρέπτη του Σχ. 4.2, για τέσσερις τιμές του αριθμού N των περιόδων. Στο Σχ. 4.5 σχεδιάζεται ακριβώς το ίδιο σύστημα με την μόνη διαφορά ότι ο κάθετος άξονας είναι σε λογαριθμική κλίμακα. Μερικές πολύ ενδιαφέρουσες παρατηρήσεις: α) τά άκρα του χάσματος γίνονται τόσο πιο απότομα, όσο μεγαλώνει ο αριθμός των περιόδων, β) ο

αριθμός των κροσσών συμβολής σε κάθε ζώνη είναι ίσος με τον αριθμό των περιόδων (στην συγκεκριμένη περίπτωση στο $q=0$ τέμνονται οι δύο ζώνες και άρα, εκτός της πρώτης, εμφανίζονται διπλές, δηλαδή με αριθμό κροσσών $2N-1$), γ) η ελάχιστη τιμή της διέλευσης μέσα στο χάσμα μικραίνει εκθετικά όσο αυξάνει ο αριθμός των περιόδων. Είναι ενδιαφέρον ότι για κάθε νέα περίοδο που προσθέτουμε ο συντελεστής διέλευσης ελατώνεται κατά δέκα φορές! Αυτό είναι πραγματικά εντυπωσιακό, εάν σκεφτεί κανείς ότι τα υλικά που αποτελούνται τα πλακίδια είναι απολύτως διαφανή.



Σχήμα 4.5. Συντελεστής διέλευσης του προηγούμενου σχήματος, αλλά σε λογαριθμική κλίμακα. Για κάθε νέα περίοδο, ο συντελεστής διέλευσης ελατώνεται στο ένα δέκατο.

Μπορούμε εύκολα να υπολογίσουμε την ελάχιστη διέλευση στο μέσο του χάσματος, όπου από την Εξ. 3.11 έχουμε

$$|M_{21}|_{\chi\acute{\alpha}\sigma\mu\alpha}^2 = \frac{1}{4} \left| \frac{n_2}{n_1} - \frac{n_1}{n_2} \right|^2 \quad (4.29)$$

ενώ από την Εξ. 4.16 έχουμε ότι το q είναι φανταστικό με τιμή

$$|qa|_{\chi\acute{\alpha}\sigma\mu\alpha} = \cosh^{-1} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{n_1}{n_2} + \frac{n_2}{n_1} \right) \right] \quad (4.30)$$

Συνεπακόλουθα, και τα ημίτονα της Εξ. 4.28 είναι υπερβολικά ημίτονα. Συνδιάζοντας τις Εξ. 4.28, 4.29 και 4.30 καταλήγουμε

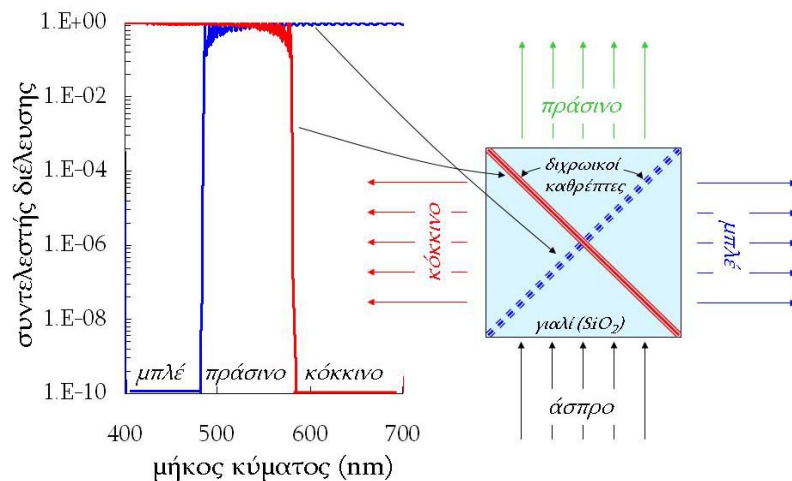
$$T_{\chi\acute{\alpha}\sigma\mu\alpha} = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left| \frac{n_2}{n_1} - \frac{n_1}{n_2} \right| \frac{\sinh^2(N |qa|_{\chi\acute{\alpha}\sigma\mu\alpha})}{\sinh^2(|qa|_{\chi\acute{\alpha}\sigma\mu\alpha})}} \quad (4.31)$$

Η διέλευση πράγματι πέφτει εκθετικά με τον αριθμό των περιόδων που χρησιμοποιούμε. Ο ρυθμός πτώσης είναι τόσο μεγαλύτερος, όσο μεγαλύτερη είναι η διαφορά των δύο δεικτών.

Στην πράξη τα υλικά έχουν διαφορετικό δείκτη διάθλασης για διαφορετικά μήκη κύματος. Πώς σχεδιάζουμε σε αυτήν την περίπτωση μια διάταξη; Τα βήματα που ακολουθούμε είναι τρία: α) καθορίζουμε το μήκος κύματος στο οποίο θέλουμε η διάταξη να λειτουργεί, β) καθορίζουμε τους δείκτες διάθλασης των υλικών που θα χρησιμοποιήσουμε στο επιλεγμένο μήκος κύματος, γ) καθορίζουμε το πλάτος των υμενίων ώστε να έχουμε την επιθυμητή απόκριση. Εάν π.χ. έχουμε καθορίσει τα λ_0, n_1, n_2 , και θέλουμε να είμαστε στο κέντρο του πρώτου χάσματος, τότε απλά καθορίζουμε τα πλάτη $d_1 = \lambda_0 / 4n_1$, $d_2 = \lambda_0 / 4n_2$.

4.4. Πολυχρωϊκοί διαχωριστές, X-Cube

Χρησιμοποιώντας πολλαπλές επιστρώσεις πάνω σε ένα παχύ κομμάτι γυαλί μπορούμε λοιπόν να φτιάξουμε έναν καθρέπτη ο οποίος να ανακλάει μέρος των συχνοτήτων ενώ αφήνει τις υπόλοιπες να διέλθουν ανενόχλητες. Παραδείγματος χάριν, κοντά στην κάτω άκρη ενός χάσματος, μεγαλύτερες συχνότητες ανακλώνται ενώ μικρότερες διέρχονται. Ένας τέτοιος καθρέπτης ονομάζεται *διχρωϊκός*. Υπάρχουν πολλές εφαρμογές για τέτοια συστήματα, από διάφορα οπτικά συστήματα μέχρι Lasers. Μία ιδιαίτερα ενδιαφέρουσα εφαρμογή είναι σε συστήματα προβολής (όπως π.χ. video προβολείς), όπου το φως μιας λάμπας, το οποίο είναι *άσπρο* (άχρωμο), πρέπει να χωριστεί σε μπλέ, πράσινο και κόκκινο. Το κάθε χρώμα επεξεργάζεται διαφορετικά και μετά επανασυνθέτεται ώστε να φτιαχτεί η εικόνα. Ένα τέτοιο σύστημα ονομάζεται πολυχρωϊκός διαχωριστής. Ένας τρόπος για να γίνει αυτό χρησιμοποιεί σύστημα διχρωϊκών καθρεπτών τοποθετημένων σε διάταξη X, και εξ-αυτού ονομάζονται *X-Cube*.



Σχήμα 4.6. Σχηματικό μοντέλο ενός πολυχρωϊκού διαχωριστή X-Cube. Στα αριστερά φαίνεται η απόκριση του κάθε καθρέπτη συναρτήσει του μήκους κύματος. Ο μπλέ καθρέπτης ανακλά μόνο κάτω από τα 490nm, ενώ ο κόκκινος καθρέπτης ανακλά μόνο πάνω από τα 590nm. Το πράσινο περνά ανενόχλητο και από τους δύο. Στα δεξιά είναι ένα σχηματικό της διάταξης.

Η αποικόνιση ενός τέτοιου συστήματος φαίνεται στο Σχ. 4.6. Τα υλικά που χρησιμοποιούνται στο συγκεκριμένο παράδειγμα έχουν δείκτες στο ορατό φάσμα $n_1 = 1.47$ (γυαλί SiO_2) και $n_2 = 2.0$ (πολλά οξειδία έχουν τέτοιο δείκτη και είναι τελείως διάφανα, όπως π.χ. ZnO , ZrO_2 , SnO_2 , HfO_2 , Si_3N_4 , ή DLC). Για τον “μπλέ” καθρέπτη¹ χρησιμοποιούμε $d_1 = 74 \text{ nm}$, $d_2 = 55 \text{ nm}$ ενώ για τον “κόκκινο” κόκκινο καθρέπτη χρησιμοποιούμε $d_1 = 108 \text{ nm}$, $d_2 = 80 \text{ nm}$. Ο ένας καθρέπτης ανακλάει το μπλέ και αφήνει τα υπόλοιπα να περνάνε, και αντιστρόφως ο κόκκινος καθρέπτης. Το πράσινο φως περνάει ανενόχλητο και από τους δυό. Στο Σχ. 4.7 φαίνεται μια πραγματική τέτοια διάταξη.



Σχήμα 4.7. Πραγματικοί X-Cube κρύσταλλοι. Ειδικότερα στα αριστερά φαίνεται ότι μια εισερχόμενη λευκή δέσμη φωτός διαχωρίζεται σε μπλέ, πράσινη και κόκκινη δέσμες. Αυτός ο κρύσταλλος χρησιμοποιείται σε πολλά σύγχρονα συστήματα παραγωγής εικόνας όπως τηλεοράσεις και video projectors (πηγή: www.chinasupply.net).

4.5. Ατέλειες περιοδικότητας – φωτονικές κοιλότητες

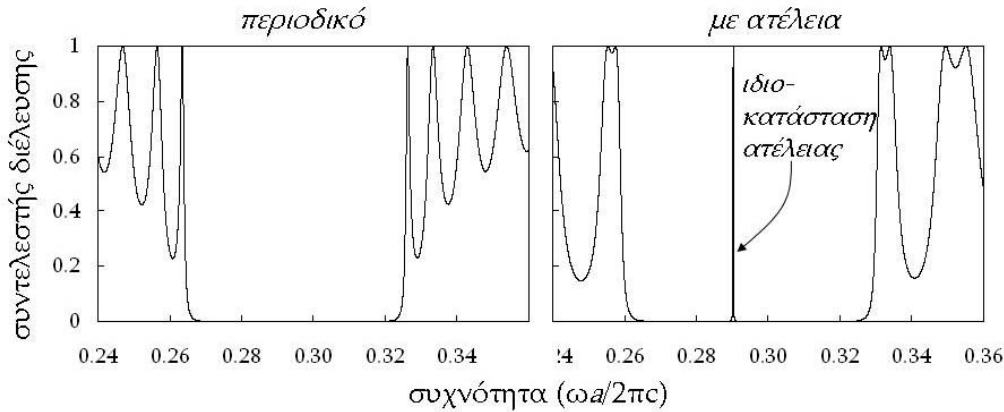
Χρησιμοποιούμε τον “κόκκινο” καθρέπτη του παραπάνω παραδείγματος, με $n_1 = 1.47$, $n_2 = 2.0$, $d_1 = 108 \text{ nm}$ και $d_2 = 80 \text{ nm}$. Ο συντελεστής διέλευσης συναρτήσει της συχνότητας φαίνεται στο Σχ. 4.8.α, για $N=21$ περιόδους. Τι θα γίνει εάν αυτή η περιοδικότητα σπάσει; Ένας εύκολος τρόπος να σπάσει η περιοδικότητα είναι ένα από τα πλακίδια να αλλάξει διαστάσεις. Στο Σχ. 4.8.β σχεδιάζουμε το αποτέλεσμα μιας τέτοιας διαταραχής², όπου το κεντρικό πλακίδιο με δείκτη $n_1 = 1.47$ διπλασιάζεται από $d_1 = 108 \text{ nm}$ σε $d_1 = 216 \text{ nm}$, όπως σχηματικά φαίνεται στο Σχ. 4.9.

Παρατηρούμε μια μικρή αλλαγή στην μορφή του συντελεστή διέλευσης γύρω απο το χάσμα, και σε μια δραματική αλλαγή μέσα στο χάσμα: την εμφάνιση μιας νέας κατάστασης με μεγάλο συντελεστή διέλευσης, η οποία όμως εμφανίζεται σε πολύ μικρό εύρος συχνοτήτων. Ο καλύτερος τρόπος για να το καταλάβουμε αυτό

¹ το μπλέ χρώμα είναι περίπου μεταξύ 400nm και 490nm μήκος κύματος, το πράσινο από 490nm μέχρι 580nm, ενώ το κόκκινο ξεκινάει από 580nm και ξεπερνάει τα 700nm.

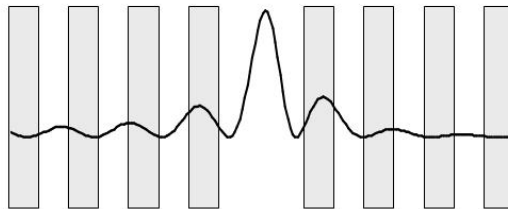
² Η αναλυτική λύση αυτού του συστήματος είναι δυνατή αλλά αρκετά πολύπλοκη. Για την δημιουργία των αποτελεσμάτων χρησιμοποιούμε την αριθμητική εφαρμογή των Εξ. 3.10.

είναι να σκεφτούμε το νέο σύστημα του Σχ. 4.9 ως αποτελούμενο από δύο επιμέρους κομμάτια-καθρέπτες, οι οποίοι απέχουν απόσταση $d = 216 \text{ nm}$ μεταξύ τους. Τότε, φως μπορεί να παγιδευτεί ανάμεσά τους, όπως ακριβώς και σε οποιαδήποτε κοιλότητα που σχηματίζεται από δύο καθρέπτες.



Σχήμα 4.8. Συντελεστής διέλευσης στην περίπτωση ατέλειας. Αριστερά είναι η αντίστοιχη περιοδική περίπτωση. Το σύστημα είναι ο “κόκκινος” καθρέπτης της προηγούμενης παραγράφου με $n_1 = 1.47$, $n_2 = 2.0$, $d_1 = 108 \text{ nm}$ και $d_2 = 80 \text{ nm}$. Η ατέλεια είναι το κεντρικό πλακίδιο με δείκτη $n_1 = 1.47$ που διπλασιάζεται από $d_1 = 108 \text{ nm}$ σε $d_1 = 216 \text{ nm}$.

Άρα έχουμε δημιουργήσει μια κοιλότητα, με χαρακτηριστική συχνότητα μέσα στο χάσμα (η χαρακτηριστική συχνότητα κοιλότητας δεν θα μπορούσε να είναι μέσα στις ζώνες διέλευσης, γιατί τότε τα δύο κομμάτια δεν θα συμπεριφέρονταν σαν καθρέπτες και άρα εξ-ορισμού δεν θα δημιουργούνταν η κοιλότητα). Φως μπορεί να διέλθει μέσα από όλο το σύστημα μόνο εάν η συχνότητά του συμπίπτει επακριβώς με την συχνότητα της κοιλότητας, στην οποία περίπτωση ο μηχανισμός είναι παρόμοιος με συντονισμό σε κβαντικό φαινόμενο σήραγγος: το φως διέρχεται χρησιμοποιώντας την κοιλότητα ως ενδιάμεσο σκαλοπάτι. Τέτοιες διατάξεις λειτουργούν ως έξοχα φασματικά φίλτρα για απομόνωση συγκεκριμένων συχνοτήτων.



Σχήμα 4.9. Σχηματική αναπαράσταση της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου γύρω από την ατέλεια, όταν η συχνότητα του εισερχόμενου κύματος είναι συντονισμένη με την κατάσταση ατέλειας όπως αυτή φαίνεται στα δεξιά του Σχ. 4.8.

Η θέση της συχνότητας της κοιλότητας μέσα στο χάσμα εξαρτάται από το μήκος της κοιλότητας. Μέσα στο πρώτο χάσμα τα υμένα που έχουμε αντιστοιχούν σε πάχος λ -τέταρτα, αντιστοιχούν δηλαδή στην συνθήκη μέγιστης ανάκλασης. Εάν αντιστοιχίσουμε την ατέλεια στην συνθήκη μέγιστης διέλευσης, δηλαδή σε πάχος λ -δύτερα, τότε η κατάσταση ατέλειας θα εμφανιστεί κοντά στο κέντρο του χάσματος. Όσο πιο κοντά στο κέντρο του χάσματος εμφανίζεται τόσο πιο μεγάλες οι ανακλάσεις από τους καθρέπτες, και άρα τόσο πιο καλά εντοπισμένη θα είναι.

Το φασματικό (ή συχνοτικό) εύρος της κατάστασης κοιλότητας εξαρτάται στο “βάθος” του χάσματος στην συχνότητα που εμφανίζεται, και άρα από την θέση της στο χάσμα από τον αριθμό των περιόδων στην κάθε πλευρά: όσο μεγαλύτερος είναι ο αριθμός N , τόσο καλύτεροι οι καθρέπτες, και άρα τόσο πιο στενό το φασματικό εύρος. Επίσης, τόσο πιο μεγάλος είναι και ο εντοπισμός του πεδίου μέσα στην κοιλότητα (βλ. Σχ. 4.9).

Το πηλίκο της συχνότητας ω στην οποία εμφανίζεται η κατάσταση κοιλότητας προς το εύρος συχνοτήτων $\Delta\omega$ που καλύπτει (όπως αυτό μετρείται στο ήμισυ της μέγιστης τιμής της¹) ονομάζεται *συντελεστής ποιότητας* της κοιλότητας:

$$Q = \omega / \Delta\omega \quad (4.32)$$

Ο συντελεστής ποιότητας επίσης εκφράζει τον αντίστροφο του ρυθμού με τον οποίο η παγιδευμένη ενέργεια διαφεύγει από την κοιλότητα και συνεπώς ορίζεται και ως

$$Q = 2\pi \frac{\text{Αποθηκευμένη ενέργεια}}{\text{διαφεύγουσα ενέργεια σε κάθε κύκλο}} \quad (4.33)$$

Με τον ορισμό της Εξ. 4.33 είναι προφανές ότι όσο καλύτεροι είναι οι καθρέπτες τόσο περισσότερο χρόνο παίρνει να διαφύγει το φως και άρα τόσο μεγαλύτερος ο συντελεστής ποιότητας. Συνεπάγεται τότε από την Εξ. 4.32 ότι τόσο πιο στενό είναι το φασματικό εύρος της κατάστασης κοιλότητας. Η φυσική σημασία αυτού δεν είναι διαφορετική από ότι στο γνωστό παράδειγμα αποδιέγερσης ατόμων: όσο πιο μεγάλο το φασματικό εύρος της αρχικής και τελικής κατάστασης, τόσο πιο γρήγορος ο ρυθμός αποδιέγερσης.

Στα μονοδιάστατα συστήματα οποιαδήποτε ατέλεια θα δημιουργήσει δέσμια κατάσταση, με την συχνότητά της μέσα στο χάσμα. Για μικρές τιμές της ατέλειας, η συχνότητα θα είναι πολύ κοντά στα άκρα του χάσματος, και όσο μεγαλώνει η ατέλεια τόσο θα μεταφέρεται προς το κέντρο του χάσματος. Γενικά, η αύξηση του μέσου δείκτη διάθλασης, όπως τον αισθάνεται μια συγκεκριμένη λύση, οδηγεί σε μια μείωση της συχνότητάς της στο διάγραμμα ζωνών (σκεφτείτε ότι στον ελεύθερο χώρο $\omega = cq / n$). Αντίθετα, μια μείωση του μέσου δείκτη διάθλασης θα οδηγήσει σε αύξηση της συχνότητάς της στο διάγραμμα ζωνών. Υπάρχουν λοιπόν εν γένει δύο ειδών ατελειών αναλόγως από ποιά άκρη του χάσματος ξεκινούν:

¹ Full Width at Half Maximum (FWHM)

(α) Ατέλειες αυξημένου διηλεκτρικού: Ξεκινάνε απο την άνω άκρη του χάσματος και κατεβαίνουν προς τα κάτω για αυξανόμενες τιμές της ατέλειας. Δημιουργούνται με αύξηση του πάχους του πλακιδίου με τον ψηλότερο δείκτη, ή μείωση του πάχους του πλακιδίου με τον χαμηλότερο δείκτη. Μπορούν επίσης να εμφανιστούν εάν αυξηθεί ο δείκτης τοπικά σε οποιοδήποτε πλακίδιο. Συνήθως εμφανίζονται λίγο πιο κάτω απο το άνω άκρο του χάσματος και *θυμίζουν τις καταστάσεις δότη που βρίσκουμε στους ημιαγωγούς.*

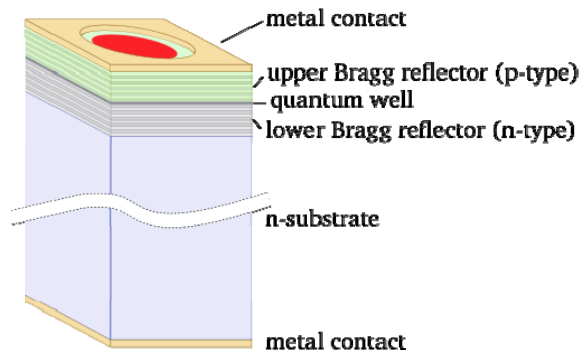
(β) Ατέλειες μειωμένου διηλεκτρικού: Ξεκινάνε απο την κάτω άκρη του χάσματος και ανεβαίνουν προς τα πάνω για αυξανόμενες τιμές της ατέλειας. Δημιουργούνται με μείωση του πάχους του πλακιδίου με τον ψηλότερο δείκτη, ή αύξηση του πάχους του πλακιδίου με τον χαμηλότερο δείκτη. Μπορούν επίσης να εμφανιστούν εάν μειωθεί ο δείκτης τοπικά σε οποιοδήποτε πλακίδιο. Συνήθως εμφανίζονται λίγο πιο πάνω απο το κάτω άκρο του χάσματος και *θυμίζουν τις καταστάσεις αποδέκτη που βρίσκουμε στους ημιαγωγούς.*

4.6. Laser κάθετης-κοιλότητας επιφανειακής-εκπομπής

Ένα *laser* κάθετης-κοιλότητας επιφανειακής-εκπομπής¹ φαίνεται στο Σχ. 4.10. Το μέρος όπου παράγεται η ακτινοβολία είναι τα λεγόμενα *κβαντικά πηγάδια*², τα οποία αποτελούνται απο λεπτά στρώματα (40 με 80 στρώματα, μεταξύ 4 και 8 nm πάχος) $In_xGa_{1-x}As$, χωριζόμενα απο λεπτά στρώματα (μεταξύ 4 και 16 nm πάχος) $InGaAs$. Το x καθορίζει το ακριβές μήκος κύματος της ακτινοβολίας. Για $x=0.2$ το εκπεμπόμενο μήκος κύματος είναι περίπου 980nm. Για να μεγιστοποιηθεί η απόδοση του laser, το βάζουμε μέσα σε μια κοιλότητα, όπως αυτή του Σχ. 4.9, αποτελούμενη απο διηλεκτρικούς καθρέπτες Bragg. Εάν συντονίσουμε την κατάσταση ατέλειας που δημιουργείται να συμπέφτει ακριβώς με την κατάσταση ατέλειας της κοιλότητας τότε, πάνω από κάποιο όριο λειτουργίας, όλες οι αποδιεγέρσεις απο τα κβαντικά πηγάδια θα καταλήγουν σε αυτήν. Αυτό γίνεται γιατί δεν υπάρχουν αποδεκτές φωτονικές καταστάσεις στις γειτονικές συχνότητες στις οποίες θα μπορούσαν να εκπέμψουν τα κβαντικά πηγάδια, καθώς είμαστε μέσα στο χάσμα ζώνης. Η μόνη επιτρεπτή είναι η κατάσταση ατέλειας. Όσο μεγαλύτερο είναι το Q της κοιλότητας, τόσο αυξάνει και η αποτελεσματικότητα του laser. Η ταλάντωση λοιπόν του πεδίου του laser είναι κάθετη, κατά μήκος της κοιλότητας (εξού και το *κάθετη-κοιλότητα*) και άρα και η εκπομπή του φωτός είναι κάθετη, δηλαδή απο την επιφάνεια (εξού και το *επιφανειακή-εκπομπή*).

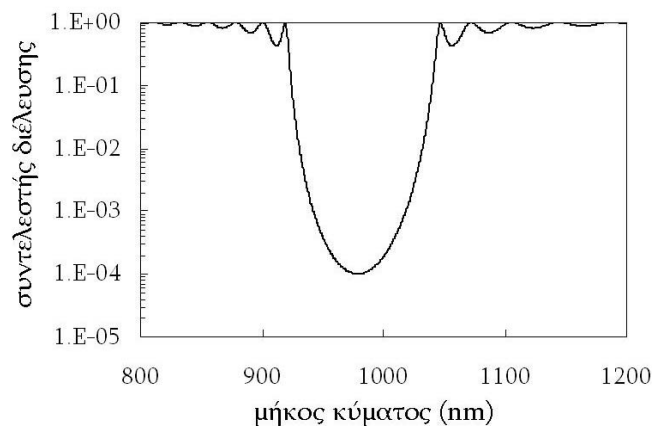
¹ Vertical Cavity Surface Emitting Laser (VCSEL)

² Quantum Wells



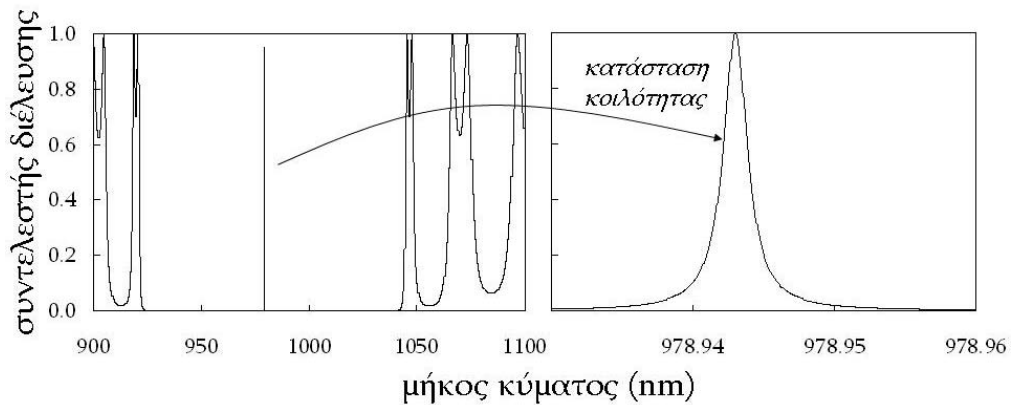
Σχήμα 4.10. Σχηματική αναπαράσταση διάταξης laser κάθετης-κοιλότητας επιφανειακής-εκπομπής. Το βασικό του συστατικό είναι τα κβαντικά πηγάδια που εκπέμπουν το φως τοποθετημένα ανάμεσα από δύο κατάλληλους διηλεκτρικούς καθρέπτες Bragg.

Για να μεγιστοποιηθεί η απόδοση του laser, οι δύο διηλεκτρικοί καθρέπτες πρέπει να έχουν ανακλαστικότητα πάνω από 99%. Τα υλικά που χρησιμοποιούνται πρέπει να είναι παρόμοια με αυτά των κβαντικών πηγαδιών, και είναι τα GaAs και $Al_xGa_{1-x}As$. Μπορούμε να χρησιμοποιούμε μέχρι και $x=1$. Στο μήκος κύματος που μας ενδιαφέρει (980nm) οι δείκτες διάθλασης είναι για το GaAs: $n_2 = 3.52$ και για AlAs: $n_1 = 2.95$. Επιθυμούμε το μήκος κύματος να συμπίπτει με το κέντρο του πρώτου χάσματος. Από την παράγραφο 4.2 ξέρουμε πως πρέπει να είναι $d_1 n_1 = d_2 n_2 = \lambda_0 / 4$. Άρα, $d_2 = 69.5$ nm, και $d_1 = 83$ nm. Χρησιμοποιώντας αυτά τα νούμερα στην Εξ. 4.28 και 4.31, και για $N=30$ περιόδους υπολογίζουμε τον συντελεστή διέλευσης στο Σχ. 4.11. Πράγματι, για την συχνότητα εκπομπής των 980nm έχουμε επιτύχει συντελεστή διέλευσης περίπου 0.01%, δηλαδή ανακλαστικότητα περίπου 99.99%, κάτι που θα ήταν αδύνατο με οποιοδήποτε συμβατό μεταλλικό καθρέπτη.

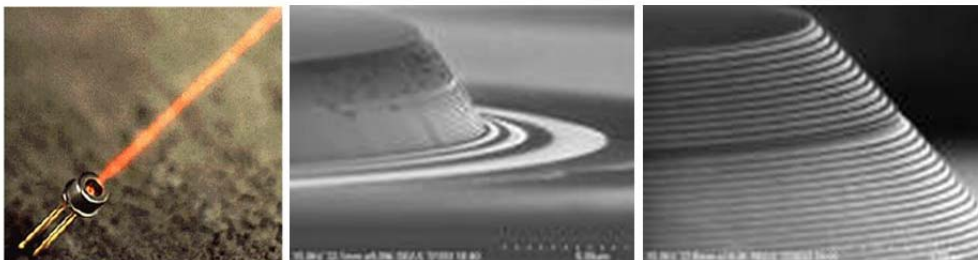


Σχήμα 4.11. Ο συντελεστής διέλευσης, σε λογαριθμική κλίμακα, για έναν καθρέπτη Bragg ενός τετάρτου κύματος με $N=30$ περιόδους. Τα υλικά είναι GaAs με $n_2 = 3.52$, $d_2 = 69.5$ nm και AlAs με $n_1 = 2.95$, $d_1 = 83$ nm. Το μήκος κύματος του laser είναι στα 980nm.

Το να υπολογίσουμε το ακριβές μέγεθος της κοιλότητας είναι λίγο πιο πολύπλοκο καθώς επιβάλλει την αριθμητική λύση των Εξ. 3.10. Ξέρουμε όμως ότι για να πετύχουμε την μέγιστη ένταση ακριβώς στο κέντρο της κοιλότητας, η συχνότητα ατέλειας πρέπει να είναι στο κέντρο του πρώτου χάσματος, και άρα το πλάτος της κοιλότητας πρέπει να έχει μήκος περίπου ίσο με μισό μήκος κύματος. Υποθέτοντας ότι το υλικό της κοιλότητας είναι GaAs (αγνοούμε την μικρή αλλαγή από κβαντικά πηγάδια) χρησιμοποιούμε μήκος κοιλότητας $d=139\text{nm}$. Για $N=30$ περίοδοι από την κάθε πλευρά, υπολογίζουμε τον ολικό συντελεστή διέλευσης στο Σχ. 4.12. Η κατάσταση μέσα στο χάσμα είναι η κατάσταση ατέλειας κοιλότητας στην οποία θα λειτουργεί το laser, και πράγματι το μήκος κύματος που εμφανίζεται είναι πολύ κοντά στο επιθυμητό 980nm . Στα δεξιά του σχήματος έχουμε μεγενθύνει πάνω σε αυτήν. Υπολογίζουμε ότι ο συντελεστής ποιότητας είναι περίπου $Q=470000$. Κλείνουμε με το σχήμα 2.23 όπου δείχνουμε μερικές φωτογραφίες από αληθινά VCSEL.



Σχήμα 4.12. Ο συντελεστής διέλευσης για την κοιλότητα λ-δεύτερα ($d_2 = 139\text{ nm}$) σε μια διάταξη VCSEL. Η κατάσταση μέσα στο χάσμα είναι εκεί ακριβώς που θα λειτουργεί το laser. Ο συντελεστής ποιότητας της κοιλότητας υπολογίστηκε γύρω στις 470000.



Σχήμα 4.13. Φωτογραφίες από πραγματικές διατάξεις VCSEL. Αριστερά, πακεταρισμένο σαν τελικό προϊόν. Προσέξτε πόσο μικρό είναι. Στη μέση και δεξιά διακρίνονται οι περιοδικοί καθρέπτες Bragg από GaAs/AlGaAs και τα κβαντικά πηγάδια στην μέση. (πηγή: αριστερά <http://www.deas.harvard.edu/matsci/research/stress-kinetics.html>, μέση και δεξιά <http://asumbe.eas.asu.edu/dryetch.htm>)

5. ΦΩΤΟΝΙΚΟΙ ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΙ

Μέχρι τώρα έχουμε δει τις σημαντικές επιπτώσεις της περιοδικότητας στην διάδοση του φωτός, και αρκετές οπτικές συσκευές και διατάξεις που λειτουργούν χάρη σε αυτές. Είναι προφανές ότι εάν αυτός ο έλεγχος πάνω στο φως μπορεί να επιτευχθεί και στις δύο ή και τρεις διαστάσεις, τότε πολλά περισσότερα θα μπορούσαν να επιτευχθούν. Σκεφτείται μόνο ότι ένα φωτονικό χάσμα ζώνης σε τρεις διαστάσεις θα είναι το αντίστοιχο για τα φωτόνια όπως είναι το χάσμα ζώνης στους ημιαγωγούς για τα ηλεκτρόνια. Αυτό δηλαδή ανοίγει την πόρτα για μια νέα γενιά τεχνολογίας, όπου αντί για ηλεκτρονικά κυκλώματα θα έχουμε οπτικά λογικά κυκλώματα και επεξεργαστές.

5.1. Ορθό και αντίστροφο πλέγμα

Στο προηγούμενο κεφάλαιο εξετάσαμε την περιοδικότητα στην μια διάσταση και είδαμε ότι δύο περιοδικές λύσεις του συστήματος είναι παρόμοιες (ή μπορεί η μία να σκεδαστεί στην άλλη) εάν τα χαρακτηριστικά τους κυματοδιανύσματα διαφέρουν κατά ακέραια πολλαπλάσια της ποσότητας $\pm 2\pi/a$. Βάσει αυτής μπορούμε να ορίσουμε τα διανύσματα του αντίστροφου πλέγματος $\vec{G}_m = \hat{x}2\pi m/a$, όπου a είναι η σταθερά του πλέγματος, \hat{x} η διεύθυνση στην οποία υπάρχει η περιοδικότητα, και m οποιοδήποτε ακέραιος. Έχουν μονάδες αντίστροφου μήκους όπως και το κυματοδιάνυσμα (το οποίο είναι $k = 2\pi/\lambda$), και εκφράζουν την αλλαγή που μπορεί να επιφέρει η σκέδαση από το περιοδικό πλέγμα πάνω στην λύση. Άλλος τρόπος να εκφραστεί αυτό είναι ότι εκφράζουν τον τρόπο με τον οποίο οι διάφορες λύσεις συζεύγονται μεταξύ τους. Όπως ξέρουμε και από την κβαντομηχανική, η ορμή ορίζεται ως $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, και άρα η ποσότητα ποσότητα $\hbar\vec{G}_m$ εκφράζει την ορμή που προσφέρει το πλέγμα στο κύμα σκεδάζοντάς το.

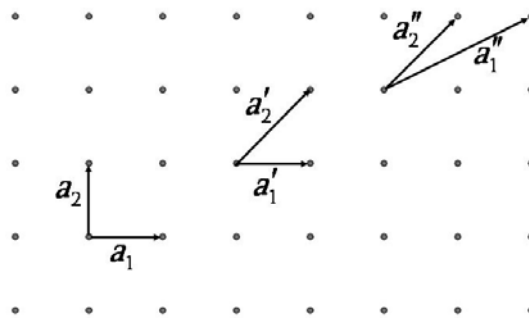
Βάση των διανυσμάτων του αντίστροφου πλέγματος ορίσαμε προηγουμένως την πρώτη ζώνη Brillouin, το διάστημα κυματοδιανυσμάτων μοναδικά ορισμένων και ανεξάρτητων μεταξύ των. Εκεί όμως ήταν εύκολο, υπήρχε μόνο μια διεύθυνση. Τώρα πρέπει να ορίσουμε πιο προσεκτικά πιο είναι το αντίστροφο πλέγμα και ποιά είναι η πρώτη ζώνη Brillouin.

Ένα τρισδιάστατο περιοδικό πλέγμα ορίζεται βάση τριών διανυσμάτων $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, τα οποία ονομάζονται *διανύσματα βάσης*. Κάθε κομβικό σημείο του πλέγματος γράφεται ως γραμμικός των διανυσμάτων βάσης

$$\vec{R}_m = m_1\vec{a}_1 + m_2\vec{a}_2 + m_3\vec{a}_3 \quad (5.1)$$

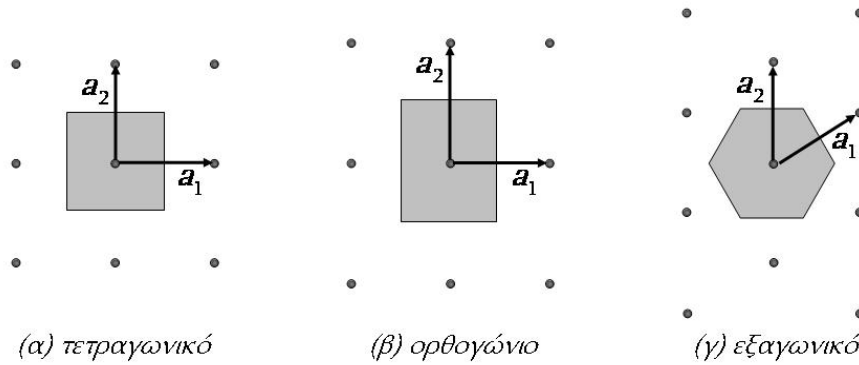
όπου τα m_1, m_2, m_3 είναι οποιοδήποτε θετικοί ή αρνητικοί ακέραιοι. Μπορούμε να πούμε ότι η περιοδικότητα στον άξονα παράλληλο με το \vec{a}_1 η περιοδικότητα είναι

$|\vec{a}_1|$, κ.ο.κ. Εάν μια ιδιότητα (π.χ. διηλεκτρική σταθερά ή ενέργεια) είναι συνάρτηση της θέσης, τότε αναγκαστικά πρέπει και η ίδια να είναι περιοδική, π.χ. $\varepsilon(\vec{r} + \vec{R}_m) = \varepsilon(\vec{r})$. Τα διανύσματα βάσης δεν είναι μοναδικά, αλλά συνήθως διαλέγουμε αυτά που καλύτερα αντιπροσωπεύουν την συμμετρία του πλέγματος. Για παράδειγμα, στο Σχ. 5.1 φαίνεται ένα δισδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα και τρεις διαφορετικές επιλογές για διανύσματα βάσης. Είναι προφανές ότι η καλύτερη επιλογή είναι η πρώτη (\vec{a}_1, \vec{a}_2).



Σχήμα 5.1. Το δισδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα. Υπάρχουν πολλοί τρόποι να επιλέξει κανείς διανύσματα βάσης, αλλά ο πιο αποτελεσματικός είναι η επιλογή αυτών των διανυσμάτων που είναι πιο απλά και καλύτερα αντιπροσωπεύουν την συμμετρία του πλέγματος, όπως π.χ. παραπάνω τα \vec{a}_1, \vec{a}_2 .

Τρία παραδείγματα πλεγμάτων στις δύο διαστάσεις φαίνονται στο Σχ. 5.2. Αυτές είναι το τετραγωνικό, το ορθογώνιο και το εξαγωνικό. Τα αντίστοιχα διανύσματα βάσης φαίνονται και στις τρεις περιπτώσεις. Έχοντας ορίσει τα διανύσματα βάσης ορίζουμε τώρα την *θεμελιώδη κυψελίδα*: είναι η επιφάνεια η οποία μετατοπιζόμενη κατά όλα τα πλεγματικά διανύσματα θα καλύψει πλήρως όλο τον χώρο. Ένας πιο στενός, αλλά και πιο χρήσιμος είναι ο ορισμός της *κυψελίδας Wigner-Seitz*: η θεμελιώδης κυψελίδα της οποίας τα σημεία έχουν την μικρότερη δυνατή απόσταση από το κέντρο της. Συνήθως αυτός ο ορισμός είναι ισοδύναμος με αυτόν της πιο συμμετρικής (ή σφαιρικής) θεμελιώδους κυψελίδας. Παραδείγματα κυψελίδας Wigner-Seitz φαίνονται στο Σχ. 3.2 με γκρι επισκίαση. Ένας παρκτικός τρόπος για να βρίσκουμε την κυψελίδα, είναι ξεκινώντας από ένα σημείο τοποθετούμε όλα τα διανύσματα βάσης προς τις διαφορετικές κατευθύνσεις. Στο μέσο του κάθε διανύσματος τραβούμε μια κάθετη γραμμή. Ενώνοντας τις κάθετες γραμμές από όλα τα διανύσματα βάσης καταλήγουμε στην κυψελίδα Wigner-Seitz.



Σχήμα 5.2. Τρία διδιάστατα πλέγματα, με τα αντίστοιχα διανύσματα βάσης. Οι κυψελίδες Wigner-Seitz φαίνονται με σκούρα επισκίαση.

Στο προηγούμενο κεφάλαιο διατυπώσαμε στην Εξ. 4.4-4.5 διατυπώσαμε το θεώρημα Bloch-Floquet στην μία διάσταση: εάν η διηλεκτρική σταθερά είναι περιοδική συνάρτηση της θέσης x , τότε η λύση σε άλλο πλεγματοειδές σημείο είναι ίση με την αρχική πολλαπλασιασμένη με μια φάση $E_q(x+a) = e^{iqa} E(x)$. Εδώ έχουμε και τις τρεις διευθύνσεις, οπότε το $q \equiv \vec{q}$ είναι διάνυσμα. Ορίσαμε τα διανύσματα του αντιστρόφου πλέγματος $\vec{G}_m = \hat{x} 2\pi m / a$, με την ιδιότητα ότι εάν στο q προσθέσουμε ένα \vec{G}_m τίποτα δεν αλλάζει. Πράγματι, $E_{q+\vec{G}_m}(x+a) = e^{i(q+\vec{G}_m)a} E(x) = e^{i\vec{G}_m a} e^{iqa} E(x) = e^{i2\pi m} e^{iqa} E(x) = e^{iqa} E(x)$.

Αυτή ήταν και η βάση του ορισμού της πρώτης ζώνης Brillouin, η οποία δεν ήταν τίποτε άλλο από την κυψελίδα Wigner-Seitz του αντιστρόφου πλέγματος. Αυτή η ιδιότητα παραμένει και στις δύο ή τρεις διαστάσεις, και το μόνο που χρειαζόμαστε είναι μια συνταγή για να υπολογίζουμε τα αντίστοιχα διανύσματα του αντιστρόφου πλέγματος. Η βασική ιδιότητα του αντιστρόφου πλέγματος είναι ότι για κάθε διάνυσμά του \vec{G}_m και για κάθε διάνυσμα του πραγματικού πλέγματος \vec{R}_n ισχύει

$$\vec{G}_m \cdot \vec{R}_n = 2\pi \cdot N \quad (5.2)$$

όπου N κάποιος ακέραιος που εξαρτάται από τα n και m . Έστω λοιπόν ένα πλέγμα που καθορίζεται από τα πλεγματοειδή διανύσματα $\vec{R}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$. Τότε τα διανύσματα του αντιστρόφου πλέγματος γράφονται ως $\vec{G}_m = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3$, όπου

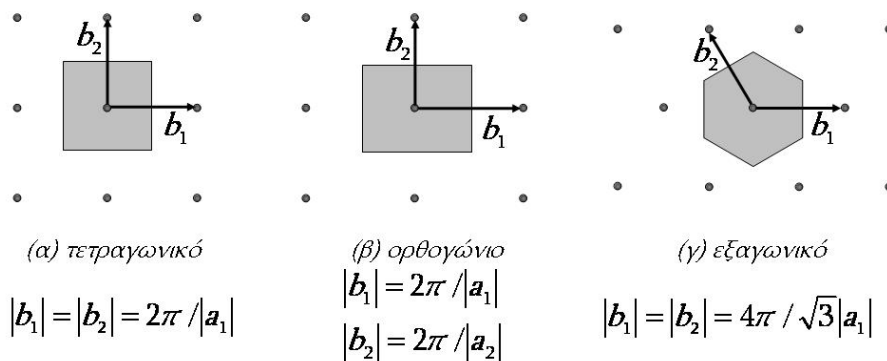
$$b_1 = \frac{2\pi}{V_c} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3), \quad b_2 = \frac{2\pi}{V_c} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1), \quad b_3 = \frac{2\pi}{V_c} (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \quad (5.3)$$

όπου $V_c = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$ είναι ο όγκος της θεμελιώδους κυψελίδας. Είναι εύκολο να επαληθεύσουμε ότι $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$ και άρα $\vec{G}_m \cdot \vec{R}_n = 2\pi \cdot (m_1 n_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3)$, όπως επιβάλλει η Εξ. 5.2.

Στα δισδιάστατα ορθογώνια πλέγματα τα \vec{b}_1, \vec{b}_2 είναι παράλληλα με τα \vec{a}_1, \vec{a}_2 αντίστοιχα, και οι παραπάνω υπολογισμοί γίνονται τετριμένοι. Το ίδιο όμως δεν ισχύει στα εξαγωνικά πλέγματα, και περιπλέκονται ακόμα περισσότερο όταν πάμε στις τρεις διαστάσεις και πλέγματα όπως το *BCC*, το *FCC* ή του διαμαντιού. Στο Σχ. 5.3 δίνεται τα αντίστοιχα αντίστροφα πλέγματα με τις δισδιάστατες δομές του Σχ. 5.2. Στα επισκιασμένα κομμάτια είναι η πρώτη ζώνη Brillouin, η οποία όπως είπαμε παραπάνω δεν είναι τίποτα άλλο απο την κυψελίδα Wigner-Seitz του αντίστροφου πλέγματος. Ο όγκος της πρώτης ζώνης Brillouin είναι $V_B = \vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3)$ και είναι εύκολο να δείξει κανείς ότι είναι αντιστόφως ανάλογη του όγκου της κυψελίδας Wigner-Seitz του ευθέως πλέγματος,

$$V_b = (2\pi)^3 / V_c \quad (5.4)$$

άρα όσο μεγαλύτερες οι διαστάσεις στο ευθύ πλέγμα, τόσο μικρότερες στο αντίστροφο.



Σχήμα 5.3. Οι ζώνες Brillouin (σκούρα επισκίαση) και τα αντίστοιχα διανύσματα του αντιστρόφου πλέγματος των δισδιάστατων δομών του Σχ. 3.2.

5.2. Υπολογισμός φωτονικών ιδιοκαταστάσεων

Στο προηγούμενο κεφάλαιο υπολογίσαμε τις λύσεις του μονοδιάστατου συστήματος υποθέτοντας ότι η λύση μέσα σε κάθε πλακίδιο γράφεται ως γραμμικός συνδιασμός δύο αντίθετα κινούμενων επίπεδων κυμάτων. Ξεκινήσαμε με καθορισμένη συχνότητα ω , και η εφαρμογή των συνοριακών συνθηκών καθόρισε το κυματοδιάνυσμα \vec{q} . Επειδή το σύστημα είναι περιοδικό, η τελική λύση για κάθε ω είναι μια περιοδική συνάρτηση, πολλαπλασιασμένη από ένα επίπεδο κύμα με κυματοδιάνυσμα \vec{q} , δηλαδή $E_{\vec{q}, \omega}(\vec{r}) = e^{i\vec{q}\vec{r}} u_{\omega}(\vec{r})$. Είδαμε μετά ότι όλες οι λύσεις με το ίδιο q ανήκουν στην ίδια ομάδα, κάθε μία με διαφορετική συχνότητα. Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε αυτή την μοναδικότητα και να γράψουμε μια γενικότερη μορφή $E_{\vec{q}}(\vec{r})$ για όλα τα ω , έτσι ώστε η κάθε επιμέρους λύση για μια συχνότητα να προκύπτει ως υποπερίπτωση της γενικής μορφής. Η βασική ιδιότητα που πρέπει να

ικανοποιείται είναι η Εξ. 4.5, δηλαδή $E_{\vec{q}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{q}\vec{R}} E_{\vec{q}}(\vec{r})$. Αυτό επιτυγχάνεται εάν γράψουμε την $E_{\vec{q}}(\vec{r})$ σαν γραμμικό συνδιασμό όλων των επίπεδων κυμάτων που ικανοποιούν την Εξ. 4.5 χρησιμοποιώντας όλα τα διανύσματα του αντιστρόφου πλέγματος

$$E_{\vec{q}}(\vec{r}) = \sum_{m=-\infty}^{m=+\infty} E_{\vec{q}+\vec{G}_m} \cdot e^{i(\vec{q}+\vec{G}_m)\vec{r}} \quad (5.5)$$

όπου τα $E_{\vec{q}+\vec{G}_m}$ είναι απλά νούμερα και είναι οι συντελεστές της λύσης. Μπορεί να αποδειχτεί ότι αυτή η μορφή είναι πλήρης και μπορεί να περιγράψει επακριβώς οποιαδήποτε μορφή και να έχει η τελική λύση. Αυτό που ουσιαστικά κάνουμε είναι ότι γράφουμε την λύση σαν ανάπτυγμα Fourier. Αυτό που μας λείπει τώρα είναι η διαδικασία να βρούμε τα $E_{\vec{q}+\vec{G}_m}$ για κάποιο συγκεκριμένο ω . Για να το κάνουμε αυτό αλλάζουμε την μορφή και της διηλεκτρικής συνάρτησης, εκμεταλευόμενοι το γεγονός ότι και αυτή είναι περιοδική. Γράφουμε δηλαδή

$$\varepsilon(\vec{r}) = \sum_{m=-\infty}^{m=+\infty} \varepsilon_{\vec{G}_m} \cdot e^{i\vec{G}_m\vec{r}} \quad (5.6)$$

Το μόνο που μένει είναι να αντικαταστήσουμε τις Εξ. 5.5 και 5.6 στην κυματική εξίσωση

$$\nabla^2 E(\vec{r}) - \varepsilon(\vec{r}) \frac{\omega^2}{c^2} E(\vec{r}) = 0 \quad (5.7)$$

και μετά απο λίγες πράξεις και ανακατατάξεις όρων, καταλήγουμε στην

$$\sum_m \varepsilon_{\vec{G}_n - \vec{G}_m} |\vec{q} + \vec{G}_m|^2 E_{\vec{q}+\vec{G}_m} = \frac{\omega^2}{c^2} E_{\vec{q}+\vec{G}_n} \quad (5.8)$$

Αυτή είναι η τελική εξίσωση, με αγνώστους τα $E_{\vec{q}+\vec{G}_m}$. Τα $\varepsilon_{\vec{G}_m}$ είναι γνωστά και ένας τρόπος υπολογισμού δίνεται στο παρακάτω παράδειγμα. Η Εξ. 5.8 λύνεται εάν γραφεί σε μορφή πίνακα και διαγωνοποιηθεί, όπου οι αντίστοιχες ιδιοτιμές θα είναι οι συχνότητες ω_1/c , ω_2/c , ω_3/c , ... Η κυματομορφή της κάθε λύσης βγαίνει απο την Εξ. 5.5 χρησιμοποιώντας το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα (δηλαδή τα $E_{\vec{q}+\vec{G}_m}$ για όλα τα m) για την κάθε ιδιοσυχνότητα. Άρα λοιπόν γράψαμε την γενική λύση για συγκεκριμένο κυματοδιάνυσμα \vec{q} , και βρήκαμε σε μορφή ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων όλες τις λύσεις για όλες τις συχνότητες. Αυτή η μέθοδος ονομάζεται *Μέθοδος Ανάπτυξης σε Επίπεδα Κύματα*, και είναι η πιο διαδεδομένη μέθοδος για την λύση πολλών φυσικών συστημάτων, χάρην της απλότητας και της γενικότητάς της.

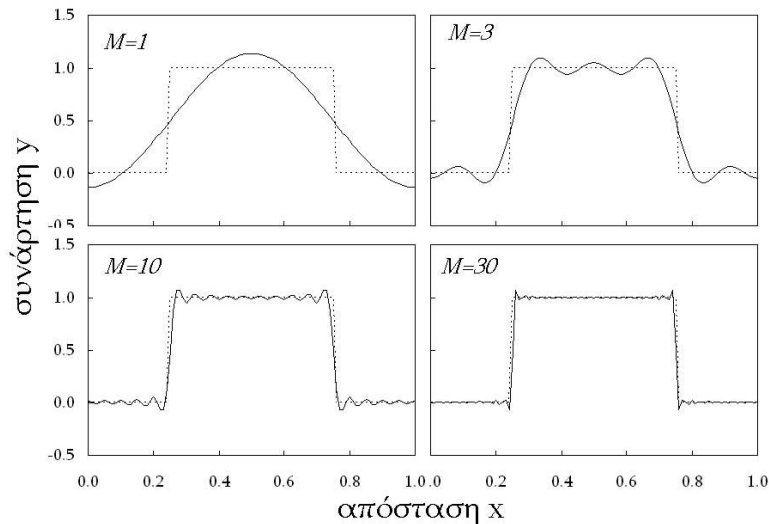
Οι συνιστώσες $\varepsilon_{\vec{G}_m}$ υπολογίζονται απο την Εξ. 5.6 πολλαπλασιάζοντάς την με $e^{-i\vec{G}_m\vec{r}}$ και ολοκληρώνοντας σε όλο τον χώρο, γνωρίζοντας ότι $\int e^{i\vec{G}_m\vec{r}} e^{-i\vec{G}_n\vec{r}} d^3 r = \delta_{nm}$:

$$\varepsilon_{\vec{G}_m} = \int \varepsilon(\vec{r}) e^{-i\vec{G}_m \cdot \vec{r}} d^3 r \quad (5.9)$$

Αυτή είναι η χωρική ανάλυση Fourier της διηλεκτρικής συνάρτησης. Ως ένα απλοποιημένο παράδειγμα ας θεωρήσουμε μια απλής μονοδιάστατη συνάρτηση. Έστω η τετραγωνική μορφή

$$y(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < 0.25 \text{ \& } 0.75 < x < 1 \\ 1 & 0.25 < x < 0.75 \end{cases} \quad (5.10)$$

Μπορούμε να γράψουμε την y ως γραμμικό συνδιασμό απο συνημίτονα $y(x) = \sum_m y_m \cos(2\pi mx)$ όπου $y_m = \int y(x) \cos(2\pi mx) dx$. Όσα περισσότερα συνημίτονα χρησιμοποιήσουμε, τόσο μεγαλύτερη ακρίβεια πετυχαίνουμε στην αναπαράσταση της y , όπως φαίνεται και στο Σχ. 5.4. Σημειώνουμε εδώ ότι λόγω συμμετρίας, μόνο οι όροι με περιττό m συνεισφέρουν.



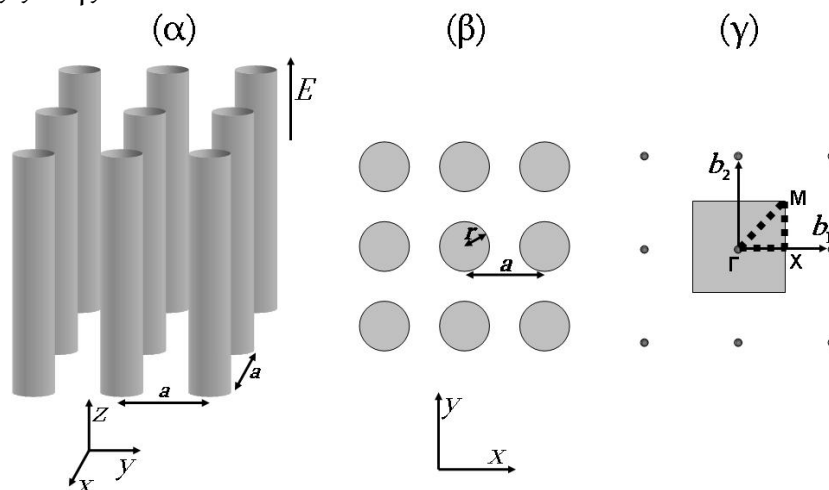
Σχήμα 5.4. Αναπαράσταση Fourier μιας τετραγωνικής συνάρτησης χρησιμοποιώντας 1, 3, 10, και 30 συνημίτονα. Λόγω συμμετρίας, μόνο τα συνημίτονα με περιττό m συνεισφέρουν (έχουν μη-μηδενικό συντελεστή), οπότε με $M=30$, εννοούνται τα συνημίτονα απο $\cos(2\pi x)$ μέχρι $\cos(120\pi x)$.

5.3. Φωτονική δομή ζώνης στις δύο διαστάσεις

Η παραπάνω μεθοδολογία χρησιμοποιείται με όλα τα διανύσματα του αντίστοιχου αντίστροφου πλέγματος. Η μία επιπλέον περιπλοκή έρχεται απο το γεγονός ότι το φως έχει δύο δυνατές καταστάσεις πόλωσης (θυμηθείται τις s και p πολώσεις στην ανάκλαση από πλακίδιο). Στα προηγούμενα είχαμε μία διάσταση (κάθετη πρόσπτωση) οπότε ήταν και οι δύο ισοδύναμες. Προκύπτει τελικά, λόγω συμμετρίας, οτι στις δύο διαστάσεις μπορούμε να εξετάσουμε χωριστά τις δύο πολώσεις. Η μία έχει το ηλεκτρικό πεδίο στο επίπεδο xy και το μαγνητικό στο z και

ονομάζεται *εγκάρσια ηλεκτρική*¹ (*TE*), ενώ η άλλη τα έχει αντίθετα και ονομάζεται *εγκάρσια μαγνητική*² (*TM*).

Η συνήθης διάταξη είναι η τετραγωνική διάταξη ή η εξαγωνική. Χάριν απλότητας θα εξετάσουμε μόνο την τετραγωνική. Επίσης, υπάρχουν δύο πιθανότητες, το πλέγμα να είναι απο υλικό υψηλού δείκτη μέσα σε μήτρα με υλικό χαμηλού δείκτη, ή το αντίθετο. Χάριν απλότητας θα εξετάσουμε μόνο το πρώτο. Τέλος, θα μελετήσουμε μόνο την *TM* πόλωση, καθώς για αυτήν έχουμε και τις περισσότερες εφαρμογές. Το σύστημα και η αντίστοιχη ζώνη Brillouin φαίνονται στο Σχ. 5.5. Από όλα τα διαφορετικά \vec{q} της ζώνης Brillouin, πολλά είναι ισοδύναμα λόγω συμμετρίας. Τα μοναδικά μή-ισοδύναμα \vec{q} είναι αυτά που περικλείονται απο τις διακεκομμένες γραμμές του Σχ. 5.5.γ, και σχηματίζουν την λεγόμενη *μη-αναγώγιμη ζώνη Brillouin*. Από όλα τα \vec{q} της μη-αναγώγιμη ζώνης τα πιο σημαντικά είναι αυτά στην περίμετρό της, δηλαδή πάνω στις διακεκομμένες γραμμές. Η κάθε διεύθυνση συμβολίζεται με ειδικά γράμματα, όπως π.χ. το Γ για το κέντρο της ζώνης.



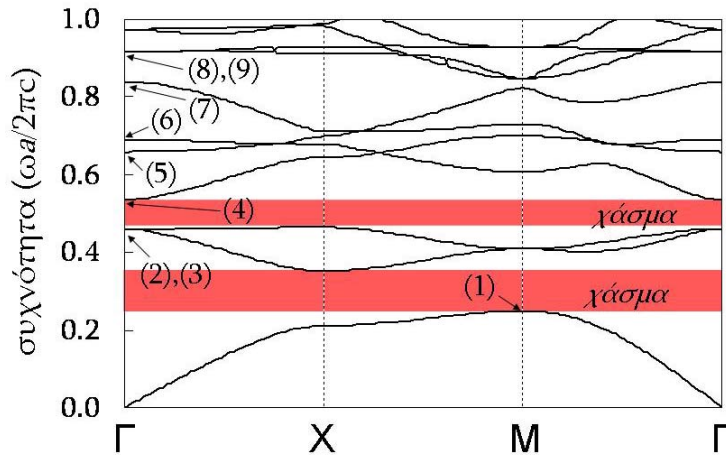
Σχήμα 5.5. Η δισδιάστατη τετραγωνική δομή: α) στην πραγματικότητα ο κρύσταλλος αποτελείται απο άπειρους διηλεκτρικούς κυλίνδρους, β) λόγω συμμετρίας μας ενδιαφέρει η λύση μόνο στο επίπεδο, αφού η λύση θεωρείται σταθερή (όμοια) στην άλλη διεύθυνση, και γ) η ζώνη Brillouin και η μη-αναγώγιμη ζώνη Brillouin (διακεκομμένη γραμμή).

Το δισδιάστατο σύστημα στην ουσία του αποτελείται απο άπειρους διηλεκτρικούς κυλίνδρους παράλληλους με τον z άξονα. Στην *TM* πόλωση το ηλεκτρικό πεδίο είναι παράλληλο με τον z άξονα, ενώ το μαγνητικό είναι στο επίπεδο xy . Για την λύση του συστήματος μας ενδιαφέρει μόνο η προβολή της διάταξης στο επίπεδο, όπως απεικονίζεται στο Σχ. 5.5β. Υποθέτουμε οτι η ακτίνα

¹ *Transverse Electric (TE)*

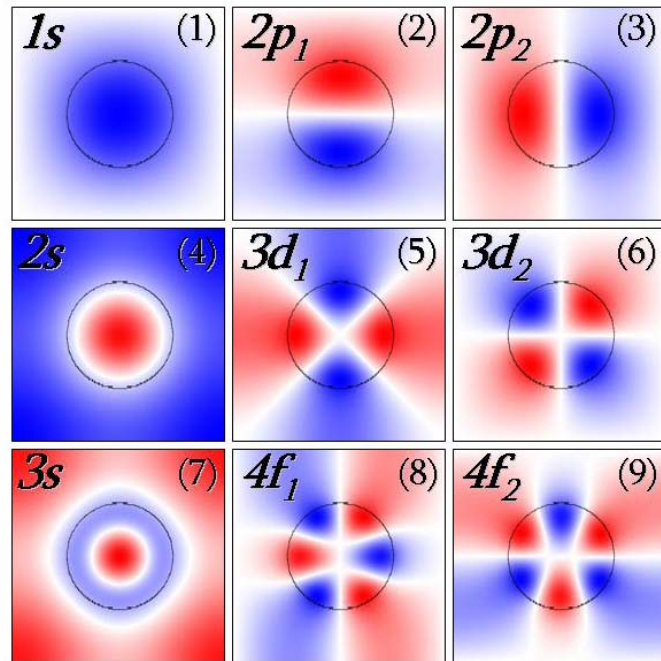
² *Transverse Magnetic (TM)*

των κυλίνδρων είναι $r=0.25a$, όπου a η σταθερά πλέγματος. Οι διηλεκτρικές σταθερές που υποθέτουμε είναι $n_2=3.5$ (π.χ. πυρίτιο στο $\lambda=1.55\mu\text{m}$) για τους κυλίνδρους και $n_1=1$ τον υπόλοιπο χώρο (αέρας). Η υπολογισμένη δομή ζώνης φαίνεται στο Σχ. 5.6.



Σχήμα 5.6. Κατά μήκος της διακεκομμένης γραμμής του Σχ. 5.5.γ υπολογίζουμε τις ιδιοσυχνότητες και σχηματίζουμε την φωτονική δομή ζώνης. Παρατηρούμε την δημιουργία τουλάχιστον δύο φωτονικών χασμάτων ζώνης.

Στην δομή ζώνης, τα q πάνω στις διακεκομμένες γραμμές του Σχ. 5.5.γ οριοθετούν τα άκρα της κάθε ζώνης. Οποιοδήποτε q μέσα από τις διακεκομμένες γραμμές θα εμφανιστεί μέσα από τα όρια των “περιγραμματικών” q . Παρατηρούμε την δημιουργία χασμάτων ζώνης και εδώ. Για συχνότητες μέσα στο χάσμα, για οποιαδήποτε διεύθυνση στο επίπεδο δεν επιτρέπεται η διέλευση κυμάτων. Είναι το ακριβές αντίστοιχο του μονοδιάστατου χάσματος του προηγούμενου κεφαλαίου, σε δύο διαστάσεις. Είναι ενδιαφέρον ότι εάν περιοριστεί κανείς μεταξύ των διευθύνσεων Γ και X η δομή ζώνης δεν είναι και τόσο διαφορετική από αυτήν που είχαμε στην μία διάσταση. Ο λόγος είναι απλός: σε αυτή την διεύθυνση το κύμα “βλέπει” διαδοχικά επίπεδα από κυλίνδρους, και άρα η περιοδικότητα είναι ουσιαστικά παρόμοια με τα μονοδιάστατα συστήματα του προηγούμενου κεφαλαίου. Εάν κανείς υπολογίσει τον συντελεστή διέλευσης για κύματα εισερχόμενα παράλληλα στην ΓX διεύθυνση, βρίσκουμε μια μορφή πολύ παρόμοια με αυτή του μονοδιάστατου συστήματος, με χασμάτα και κροσσούς συμβολής μέσα στην κάθε ζώνη, τόσους όσοι είναι και οι περίοδοι του κρυστάλλου σε αυτή την διεύθυνση.

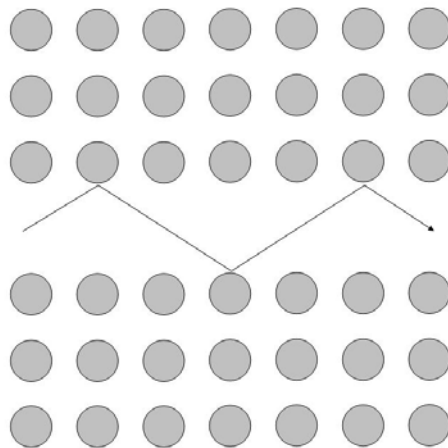


Σχήμα 5.7. Η μορφή των φωτονικών ιδιοκαταστάσεων στο σημείο Γ της δομής ζώνης, όπως αριθμούνται στο Σχ. 5.6 (η πρώτη είναι στο σημείο M γιατί στο Γ δεν υπάρχει λύση). Οι καταστάσεις έχουν τις συμμετρίες που θα περιμέναμε από ένα δισδιάστατο σύστημα, και λόγω της ομοιότητάς τους με τα ατομικά τροχιακά τα ονομάζουμε με παρόμοια ορολογία: $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$ κτλ. Η φασματική σειρά που εμφανίζονται όμως είναι διαφορετική.

Ένα ενδιαφέρον νέο στοιχείο είναι η πλούσια μορφολογία των διαφόρων φωτονικών καταστάσεων που δημιουργούνται. Σχεδιάζουμε στο Σχ. 5.7 τις εννέα πρώτες καταστάσεις με την σειρά που εμφανίζονται. Σε όλες τις περιπτώσεις το \vec{q} είναι πάνω στο σημείο Γ , εκτός από την πρώτη που την σχεδιάζουμε στο $\vec{q}=M$, όπως δείχνονται στο Σχ. 5.6. Αυτές οι μορφές δεν μας είναι τελείως άγνωστες, αλλά μοιάζουν πολύ με τα γνωστά ατομικά τροχιακά της κβαντομηχανικής, και για αυτό χρησιμοποιούμε την ίδια ορολογία για την ονομασία τους. Είναι ενδιαφέρονσα και η συχνотική σειρά με την οποία εμφανίζονται: $1s, 2p, 2s, 3d, 3s, 4f$ κτλ. Σε μεγαλύτερες συχνότητες βρίσκουμε και τις υπόλοιπες $3p, 4d, 4p$ κτλ.

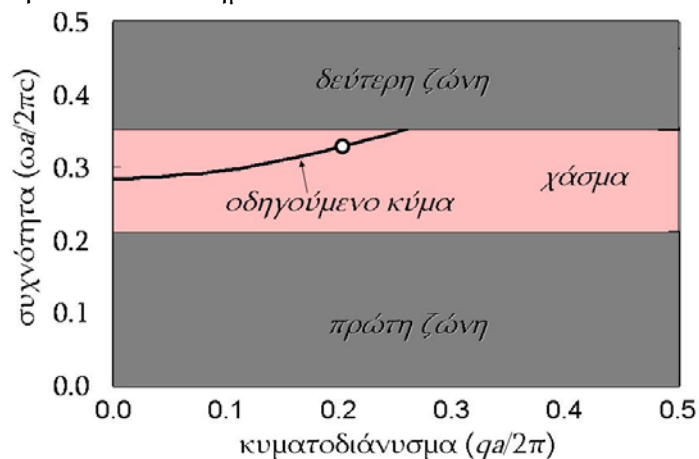
5.4. Γραμμικές ατέλειες - κυματοδηγοί

Όπως δείξαμε προηγουμένως, ο δισδιάστατος φωτονικός κρύσταλλος για συχνότητες μέσα στο χάσμα ζώνης απαγορεύει την διέλευση κυμάτων. Είναι λοιπόν αναμενόμενο ότι εάν πάρουμε δύο παράλληλα κομμάτια φωτονικού κρυστάλλου και τα φέρουμε πολύ κοντά το ένα στο άλλο, μπορούμε να παγιδεύσουμε φως ανάμεσά τους. Μια πιο ειδική και απλή περίπτωση είναι να πάρουμε ένα μεγάλο κομμάτι και να αφαιρέσουμε μια γραμμή κυλίνδρων, όπως φαίνεται στο Σχ. 3.8.



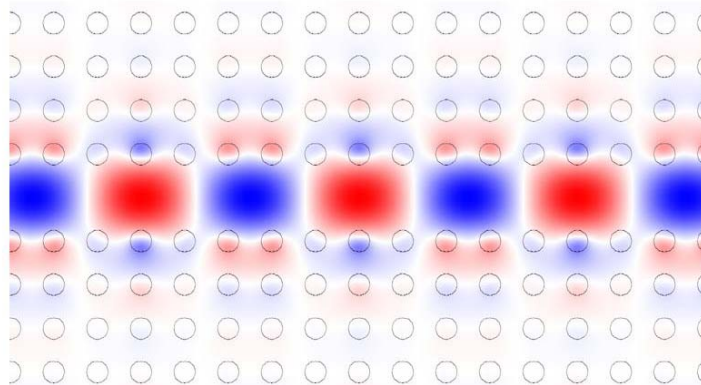
Σχήμα 5.8. Σχεδιάγραμμα μιας γραμμικής ατέλειας σε δισδιάστατο φωτονικό κρύσταλλο. Φώς παγιδευμένο αναγκαστικά οδηγείται κατά μήκους της ατέλειας.

Μια πρώτη παρατήρηση είναι ότι η περιοδικότητα στην κάθετη διεύθυνση έχει σπάσει, αλλά στην οριζόντια παραμένει. Άρα, δεν μπορούμε πια να μιλάμε για αντίστροφο πλέγμα και ζώνες Brillouin στην κάθετη διεύθυνση, το πρόβλημα έχει γίνει ξανά μονοδιάστατο. Η δεύτερη και σημαντικότερη παρατήρηση είναι ότι η περιοδικότητα στον οριζόντιο άξονα επιβάλλει όπως και πριν η λύση να είναι περιοδική εκτός μόνο από μια φάση. Δηλαδή μπορούμε να ορίσουμε λύσεις που διαδίδονται με σταθερό και αμετάβλητο q , τουλάχιστον όσο το σύστημα παραμένει περιοδικό. Στην ουσία του λοιπόν ο φορμαλισμός είναι παρόμοιος με αυτόν που χρησιμοποιούσαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο. Στο Σχ. 5.9 δείχνουμε την δομή ζώνης για το παραπάνω σύστημα.



Σχήμα 5.9. Δομή ζώνης κατά μήκος της γραμμικής ατέλειας (κατά μήκος της περιοδικής διεύθυνσης). Για καλύτερη ευκρίνεια οι ζώνες του αντίστοιχου τέλειου κρυστάλλου δίνονται από μια συμπαγή ευθεία. Η κατάσταση που είναι μέσα στην ατέλεια είναι του οδηγούμενου κύματος, του οποίου η σχέση διασποράς εμφανίζεται μέσα στο φωτονικό χάσμα του υπόλοιπου κρυστάλλου.

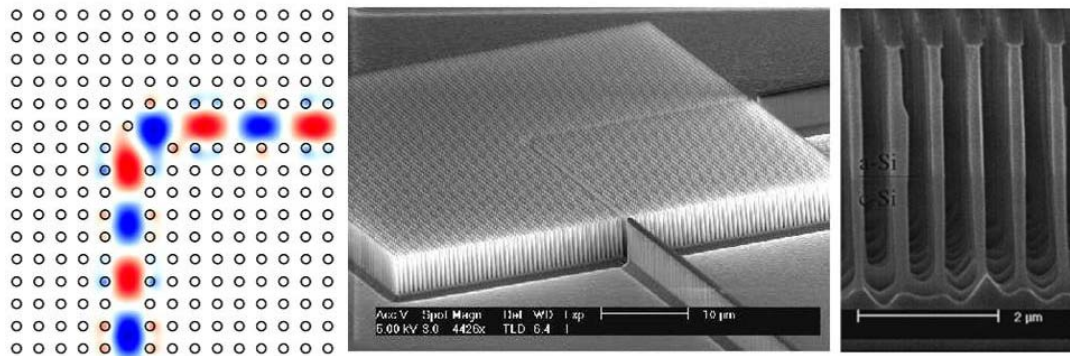
Όλες οι καταστάσεις έξω από το αντίστοιχο χάσμα του τέλει διδιάστατου κρυστάλλου έχουν καλυφθεί με σκούρο γκρι, ώστε να είναι πιο απλή η παρουσίαση και να εστιάσουμε στο ζητούμενο, που είναι η ύπαρξη κυματοδηγούμενων καταστάσεων. Πράγματι, υπάρχει μία λύση οδηγούμενου κύματος. Στο $q=0$, η κατάσταση βρίσκει τον άξονα των συχνοτήτων με κάθετη κλίση, το οποίο σημαίνει ότι η ταχύτητα ομάδας $v_g = d\omega/dq$ εκεί είναι μηδέν. Αυτό μπορεί να το αντιληφθεί κανείς ως ένα παγιδευμένο κύμα που πηγαίνει πάνω-κάτω χωρίς να μετακινείται προς τα δεξιά ή τα αριστερά. Όσο το q μεγαλώνει, τόσο μεγαλώνει η οριζόντια κίνηση (βλ. Σχ. 5.8), και άρα μεγαλώνει και η ταχύτητα ομάδας. Για το $qa/2\pi=0.2$ (βλ. το σημιάδι πάνω στην καμπύλη διασποράς του Σχ. 5.9) σχεδιάζουμε την λύση στο Σχ. 5.10. Πράγματι η λύση είναι τελείως εντοπισμένη μέσα στο κενό, χωρίς δυνατότητα διαφυγής.



Σχήμα 5.10. Η λύση για την περίπτωση που η συχνότητα είναι αυτή του σημείου πάνω στην σχέση διασποράς του Σχ. 5.9. Το κύμα είναι πράγματι παγιδευμένο μέσα στην ατέλεια και οδηγούμενο κατά μήκος της.

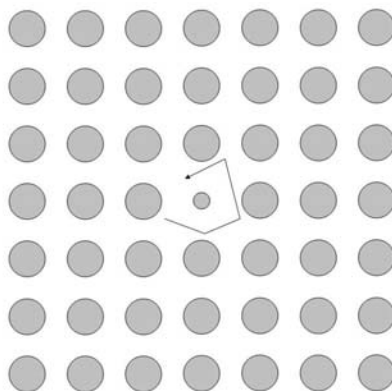
Ένα από τα μειονεκτήματα των απλών κυματοδηγών που βασίζονται στο φαινόμενο της ολικής ανάκλασης (π.χ. οπτικές ίνες) είναι ότι εάν υπάρξει σε κάποιο σημείο απότομη γωνία, το οδηγούμενο κύμα στο μεγαλύτερο μέρος του ανακτάται ή διαφεύγει. Κατά συνέπεια είναι δύσκολη, έως αδύνατη, η εφαρμογή τους σε ολοκληρωμένα οπτικά κυκλώματα, των οποίων το βασικό χαρακτηριστικό πρέπει να είναι οι πολύ μικρές διαστάσεις. Αυτό το πρόβλημα λύνεται εάν χρησιμοποιήσουμε κυματοδηγούς από φωτονικούς κρυστάλλους. Έστω η γωνία 90° στα αριστερά του Σχ. 5.11. Επειδή η συχνότητα κύματος είναι μέσα στο χάσμα ζώνης, η διεφυγή κύματος είναι απαγορευμένη. Η μόνη πιθανότητα είναι για χάσιμο κύματος είναι από ανάκλαση, η οποία όμως αποδεικνύεται ότι με κατάλληλο σχεδιασμό μπορεί να μηδενιστεί (τουλάχιστον για κάποιο εύρος συχνοτήτων). Έτσι λοιπόν επιτυγχάνεται η 100% διέλευση του κύματος από την κάθετη γωνία. Μια εφαρμογή αυτού φαίνεται στα δεξιά του Σχ. 5.11. Με παρόμοιο τρόπο μπορούν να

σχεδιαστούν και διακλαδωτές, γέφυρες, κτλ. Η εφαρμογή αυτών θα ήταν οπτικά ολοκληρωμένα κυκλώματα, που πιθανώς κάποτε να αντικαταστήσουν τα ηλεκτρονικά ολοκληρωμένα κυκλώματα που έχουμε σήμερα στους ηλεκτρονικούς υπολογιστές, την δημιουργία δηλαδή κάτι σαν φωτονικούς υπολογιστές.



Σχήμα 5.11. Μία εφαρμογή των φωτονικών κρυστάλλων είναι η δημιουργία κυματοδηγών που να επιτρέπουν την 100% διέλευση του φωτός ακόμα και μέσα απο απότομες γωνίες 90°. Αριστερά φαίνεται το αποτέλεσμα μιας προσομοίωσης, και στη μέση μια πειραματική διάταξη σε πυρίτιο. Στα δεξιά φαίνεται σε μεγένθυση η μικροδομή του φωτονικού κρυστάλλου: κολώνες πυριτίου σε αέρα, με διαστάσεις 5μm ύψος, 205nm διάμετρο και 570nm περίοδο (τετραγωνικό πλέγμα). Το μήκος κύματος λειτουργίας είναι $\lambda=1.5\mu\text{m}$ (πηγή: *T. Zijlstra et al., J. Vac. Sci. Technol. B 17, 2734 (1999)*).

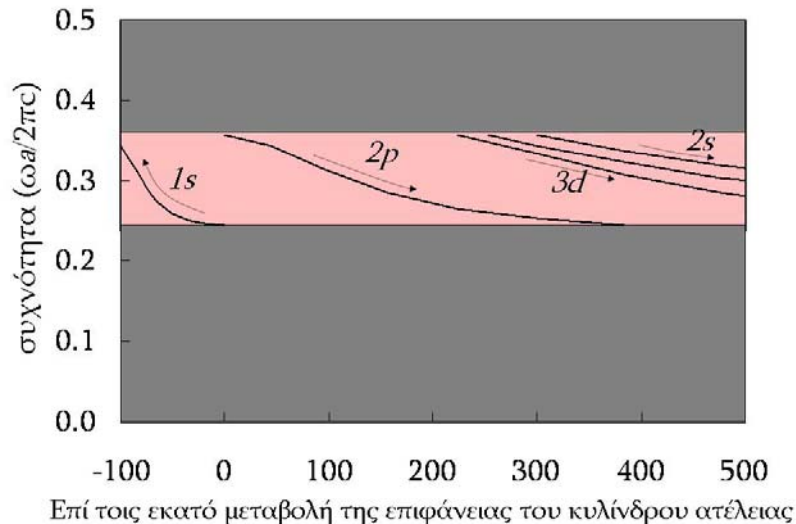
5.5. Σημειακές ατέλειες – κοιλότητες



Σχήμα 5.12. Σχηματικό μιας σημειακής ατέλειας στον διδιάστατο φωτονικό κρύσταλλο. Η ατέλεια μπορεί να είναι ένας κύλινδρος με διαφορετικό δείκτη διάθλασης ή διαφορετική ακτίνα. Εδώ εξετάζουμε μόνο διαφορετικές ακτίνες.

Ας πάμε ένα βήμα παρακάτω: σύμφωνα με όσα έχουμε δείξει μέχρι τώρα, είναι δυνατό να παγιδεύσουμε το κύμα σε ένα σημείο του χώρου, π.χ. σε μια ατέλεια όπως φαίνεται στο Σχ. 5.12. Εδώ πιά έχουμε καταστρέψει την περιοδικότητα και

στις δύο διαστάσεις, οπότε δεν έχει νόημα η ύπαρξη κάποιας ζώνης Brillouin. Στην πραγματικότητα, οι καταστάσεις του τέλειου περιοδικού συστήματος που είχαμε βρεί προηγουμένως παραμένουν και εδώ με ελάχιστες διαφοροποιήσεις, εκτός από τις νέες δέσμιες καταστάσεις οι οποίες έχουν καλά καθορισμένη συχνότητα μέσα στο χάσμα ζώνης του αντίστοιχου περιοδικού συστήματος. Αυτό που θα κάνουμε λοιπόν είναι να υπολογίσουμε αυτές τις δέσμιες καταστάσεις και να τις κατανομήσουμε ανάλογα με το είδος της ατέλειας.



Σχήμα 5.13. Ιδιοσυχνότητες των καταστάσεων ατέλειας. Στον οριζόντιο άξονα είναι η μεταβολή της επιφάνειας του κυλίνδρου ατέλειας. Για ευκρίνεια, οι ζώνες του αντίστοιχου τέλειου κρυστάλλου δίνονται στην σκούρα επισκίαση. Ξεκινώντας από μηδέν ατέλεια και πηγαίνοντας προς τα αριστερά (η ατέλεια μικραίνει) δημιουργούμε μια *ατέλεια μειωμένου διηλεκτρικού*, η οποία ξεκινάει από την κάτω ζώνη και ανεβαίνει προς τα πάνω. Προχωρώντας προς τα δεξιά (η ατέλεια μεγαλώνει) δημιουργούμε μια *ατέλεια αυξανόμενου διηλεκτρικού*, η οποία ξεκινάει από την πάνω ζώνη και πηγαίνει προς τα κάτω. Όσο μεγαλώνει η ατέλεια, τόσες περισσότερες καταστάσεις κατεβαίνουν από τις υψηλότερες ζώνες και εμφανίζονται στο πρώτο χάσμα, πάντα μετακινούμενες προς τα κάτω για αυξανόμενη ατέλεια.

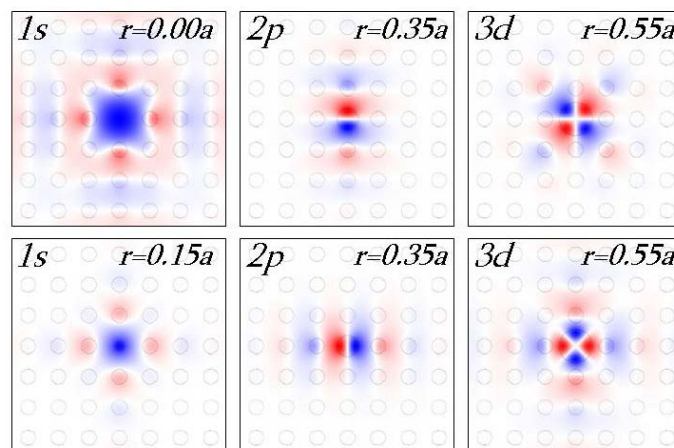
Υπάρχουν πολλών ειδών σημειακών ατελειών που μπορούμε να σκεφτούμε: μεγαλύτερος ή μικρότερος κύλινδρος, άλλος δείκτης διάθλασης, μετατόπιση κτλ. Εδώ θα κοιτάξουμε μόνο την πιο απλή περίπτωση της αλλαγής της ακτίνας ενός κυλίνδρου. Κάνοντάς το αυτό δημιουργείται μια δέσμια κατάσταση επικεντρωμένη στην ατέλεια, της οποίας η μορφή εξαρτάται από την μορφή της ατέλειας, όπως φαίνονται και στο Σχ. 5.13:

(α) Ατέλεια αυξανόμενου διηλεκτρικού: εμφανίζεται όταν μεγαλώνει η ακτίνα του κυλίνδρου ατέλειας. Ο μέσος δείκτης που “αισθάνεται” η λύση είναι μεγαλύτερος, και άρα η συχνότητα εμφανίζεται μικρότερη. Αυτές οι λύσεις ξεκινάνε από την

πάνω ζώνη και κατεβαίνουν μέσα στο χάσμα βαθύτερα, όσο μεγαλύτερη είναι η ατέλεια. Αυτές είναι αντίστοιχες των *ατελειών δότη* στους ημιαγωγούς.

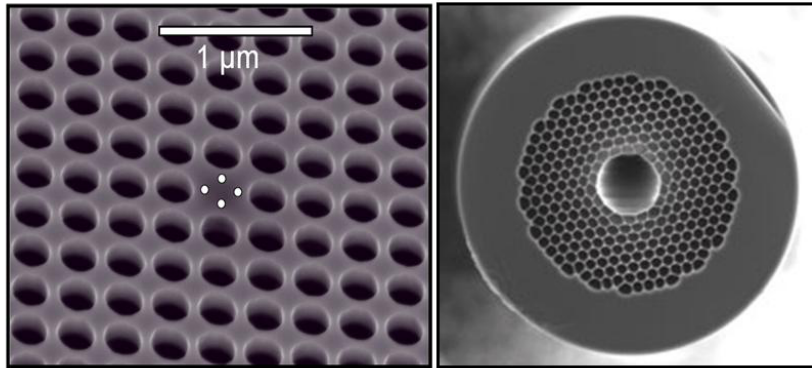
(β) Ατέλεια μειωμένου διηλεκτρικού: εμφανίζεται όταν μικραίνει η ακτίνα του κυλίνδρου ατέλειας. Ο μέσος δείκτης που “αισθάνεται” η λύση είναι μικρότερος, και άρα η συχνότητα εμφανίζεται μεγαλύτερη. Αυτές οι λύσεις ξεκινάνε από την κάτω ζώνη και ανεβαίνουν μέσα στο χάσμα βαθύτερα, όσο μικρότερη είναι η ακτίνα. Αυτές είναι αντίστοιχες των *ατελειών δέκτη* στους ημιαγωγούς.

Από άποψη συμμετρίας και μορφής, οι καταστάσεις ατέλειας δεν διαφέρουν καθόλου από τις απλές καταστάσεις μέσα στις ζώνες, όπως τις είδαμε και ταξινομήσαμε στο Σχ. 5.7. Στην πράξη, είναι οι ίδιες καταστάσεις, απλώς τροποποιημένες ώστε να είναι εστιασμένες πάνω στην ατέλεια. Από αυτήν την άποψη, μπορούμε να πούμε ότι οι καταστάσεις ατέλειας “ξεκινάνε” από την αντίστοιχη ζώνη και μετατοπίζονται μέσα στο χάσμα ανάλογα με το είδος και μέγεθος της ατέλειας. Πιο συγκεκριμένα από την πρώτη ζώνη ξεκινάνε οι $1s$ καταστάσεις και ανεβαίνουν στο χάσμα προς τα πάνω για ατέλειες μειωμένου διηλεκτρικού. Οι $2p$ και $2s$ ξεκινάνε από την δεύτερη ζώνη και κατεβαίνουν στο χάσμα προς τα κάτω για ατέλειες αυξημένου διηλεκτρικού, ή ανεβαίνουν στο χάσμα προς τα πάνω για ατέλειες μειωμένου διηλεκτρικού. Επίσης, οι $3d$, $3s$ κτλ. μετακινούνται προς τα πάνω ή προς τα κάτω στο δεύτερο χάσμα, ή αν το μέγεθος της ατέλειας μεγαλώσει αρκετά, μπορούν να μετακινηθούν παραπέρα και να εμφανιστούν για παράδειγμα στο πρώτο χάσμα. Άρα λοιπόν, για μιά ατέλεια θα εμφανιστούν καταστάσεις ατέλειας μέσα σε όλα τα χάσματα, κάθε μια διαφορετική ανάλογα με τους συνδιασμούς που είναι δυνατοί.



Σχήμα 5.14. Η κυματική μορφή των καταστάσεων ατέλειας του Σχ. 5.13. Η κάθε μορφή έχει τις ίδιες συμμετρίες με τις καταστάσεις του τέλειου κρυστάλλου, αναλόγως την ζώνη από την οποία ξεκίνησε.

Οι μεταβολές αυτές για το πρώτο χάσμα φαίνονται στο Σχ. 5.13. Για αρνητική μεταβολή του εμβαδού (μείωση της ακτίνας) έχουμε την 1s κατάσταση να ανεβαίνει προς τα πάνω, μέχρι την οριακή μεταβολή 100% που αντιστοιχεί σε ακτίνα μηδέν. Από την άλλη, για θετική μεταβολή του εμβαδού (αύξηση της ακτίνας) έχουμε πρώτα τις 2p καταστάσεις να κατεβαίνουν, κατόπιν τις 3d, μετά την 3s, κοκ¹. Αυτές οι καταστάσεις ατέλειας φαίνονται στο Σχ. 5.14.



Σχήμα 5.15. Αριστερά: Δισδιάστατος φωτονικός πάνω σε λεπτό υμένιο GaAs με σημειακή ατέλεια. Μέσα στην ατέλεια τοποθετούμε τέσσερις κβαντικές τελείες InAs, με τέτοιο σχηματισμό ώστε να συμπέφτουν με τα μέγιστα της κατάστασης ατέλειας που δημιουργείται (βλ. Σχ. 5.14). Αυτή η διάταξη είναι μια ερευνητική δουλειά στην κατεύθυνση του laser κβαντικών τελειών και εφαρμογών για κβαντικούς computers (πηγή: *K. Hennessy et al., Appl. Phys. Lett. 87, 021108 (2005)*). Δεξιά: οπτική ίνα φωτονικού κρυστάλλου. Το φως παγιδεύεται μέσα στην κεντρική ατέλεια (που είναι ουσιαστικά αέρας) και κατευθύνεται κατά μήκος της ίνας. (πηγή: <http://www.blazephotonics.com>)

Η δυνατότητα να περιορίσουμε το φως σε ένα σημείο είναι ιδιαίτερα ελκυστικό για την δημιουργία συστημάτων laser βασιζόμενα σε *κβαντικές τελείες*. Εάν αυτές τοποθετηθούν μέσα στην κοιλότητα, όπως π.χ. φαίνονται από τους λευκούς κύκλους στα αριστερά του Σχ. 5.15, τότε όλο το φως που δημιουργείται κατά την αποδιέγερσή τους θα εκπέμπεται στην κατάσταση κοιλότητας, η οποία θα γίνει και η βασική κατάσταση εκπομπής του laser.

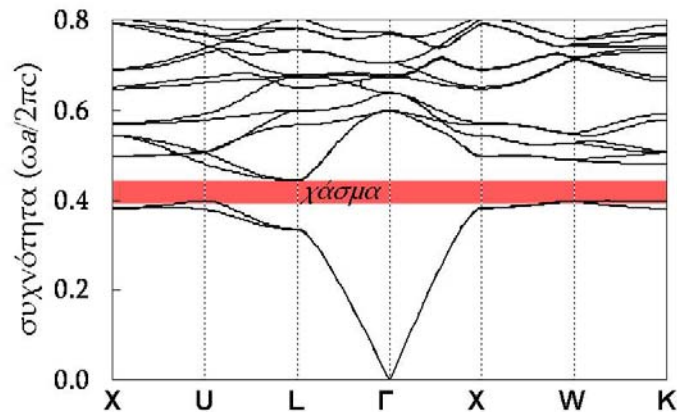
Μια άλλη πιθανότητα είναι ο περιορισμός στο *xy* από μια κοιλότητα φωτονικού κρυστάλλου, και η οδήγηση των κυμάτων κατά μήκος του άξονα του *z*, όπως φαίνεται στα δεξιά του Σχ. 5.15. Αυτή είναι η λεγόμενη *ίνα φωτονικού κρυστάλλου*, και έχει εφαρμογές στις τηλεπικοινωνίες, στην ιατρική τεχνολογία, κτλ. Τέτοιες ίνες έχουν την θεωρητική δυνατότητα να ελαχιστοποιήσουν τις απώλειες τους κάτω από το επίπεδο που έχουν οι συνηθείς οπτικές ίνες από σίλικά (δεν το έχουν καταφέρει ακόμα). Επίσης έχουν την επαναστατική ιδιότητα του ότι μεταφέρουν το

¹ Κάποια στιγμή η ακτίνα γίνεται αρκετά μεγάλη και επικαλύπτει τους γειτονικούς κυλίνδρους, οπότε οι καταστάσεις αλλάζουν από αυτή την απλή εικόνα.

φώς στον αέρα, δύνοντας την δυνατότητα μεταφοράς πολύ ισχυρής ακτινοβολίας από laser, που συμβατές οπτικές ίνες δεν μπορούν να μεταφέρουν γιατί θα έλειωναν. Το υλικό είναι σίλικα (SiO_2) και ο τρόπος που φτιάχνεται είναι ως εξής: ξεκινώντας από μεγάλες κούφιες ίνες από σίλικα, συγκολλημένες μεταξύ τους στην κατάλληλη γεωμετρία, θερμαίνονται και κατόπιν τραβιούνται σχηματίζοντας την ίδια δομή αλλά σε πολύ πιο λεπτή κλίμακα (όπως π.χ. λεπταίνει μια μαστίχα όταν τεντώνεται).

5.6. Τρισδιάστατοι φωτονικοί κρύσταλλοι

Στις τρεις διαστάσεις ο υπολογισμός ακολουθεί εν γένει την ίδια μεθοδολογία, αλλά γίνεται λίγο πιο πολύπλοκος. Οι δύο πολώσεις δεν μπορούν να χωριστούν, οπότε ο υπολογισμός πρέπει να γίνει και για τις δύο συγχρόνως. Επίσης, τα πιθανά πλέγματα είναι πιο πολλά, όπως και οι αντίστοιχες ζώνες Brillouin και οι διευθύνσεις συμμετρίας. Προκύπτει ότι και στις τρεις διαστάσεις μπορεί να δημιουργηθεί ολικό χάσμα ζώνης όπου για οποιαδήποτε διεύθυνση, ακτινοβολία με συχνότητες μέσα στο χάσμα ζώνης δεν μπορεί να διαδοθεί. Ένα από τα πλέγματα με το μεγαλύτερο χάσμα ζώνης είναι το διαμάντι. Διηλεκτρικές σφαίρες τοποθετημένες στον χώρο στην δομή του διαμαντιού δημιουργούν κυριολεκτικά έναν φωτονικό ημιαγωγό. Το βασικό απαιτούμενο είναι οι διηλεκτρικές σφαίρες να έχουν μεγάλη διαφορά στον δείκτη διάθλασης με τον υπόλοιπο χώρο. Στο Σχ. 5.16 φαίνεται η δομή ζώνης ενός τέτοιου φωτονικού κρυστάλλου, με δείκτες $n_2 = 3.5$ για τις σφαίρες (π.χ. Si στα $\lambda = 1.55 \mu\text{m}$) και $n_1 = 1.0$ (αέρας) για τον υπόλοιπο χώρο, όπου είναι εμφανές το χάσμα ζώνης.



Σχήμα 5.16. Φωτονική δομή ζώνης σφαιρών πυριτίου σε διάταξη πλέγματος διαμαντιού. Παρατηρούμε ότι δημιουργείται ολικό χάσμα ζώνης, καθιστώντας αυτόν τον κρύσταλλο σε “φωτονικό ημιαγωγό”.

Με τον ίδιο ακριβώς τρόπο που περιγράψαμε στην προηγούμενη παράγραφο, ατέλειες μέσα στον τρισδιάστατο φωτονικό κρύσταλλο οδηγούν σε νέες

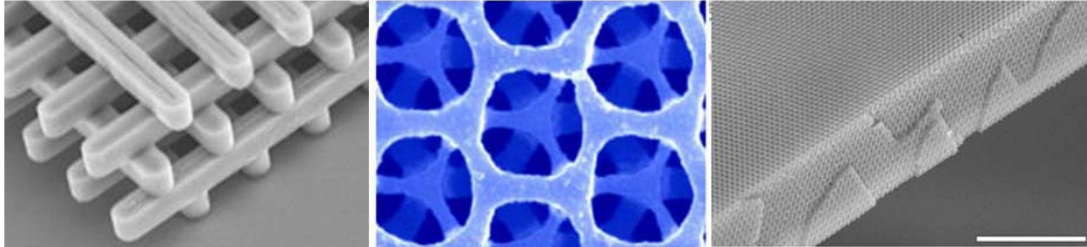
καταστάσεις για το φώς. Γραμμικές ατέλειες δημιουργούν κυματοδηγούς, σημειακές ατέλειες δημιουργούν δέσμιες καταστάσεις μέσα στο φωτονικό χάσμα. Όπως και πρίν, θα έχουμε ατέλειες αυξημένου διηλεκτρικού και ατέλειες μειωμένου διηλεκτρικού. Η βασική διαφορά όμως με αυτές που περιγράψαμε στις δύο διαστάσεις, είναι ότι εδώ αυτές είναι πραγματικές δέσμιες καταστάσεις: ο φωτονικός κρύσταλλος εκτείνεται παντού γύρω στον χώρο, και κυριολεκτικά δεν υπάρχει δυνατότητα διαφυγής. Πράγματι, στην θεωρητική περίπτωση ενός τέλεια δομημένου φωτονικού κρυστάλλου απείρων διαστάσεων, με μία και μοναδική ατέλεια, δημιουργείται μια δέσμια κατάσταση η οποία θεωρητικά έχει άπειρο χρόνο ζωής. Ένα διεγερμένο άτομο μέσα σε αυτήν την κοιλότητα/ατέλεια, θα χρειαζόταν πολύ παραπάνω χρόνο από ότι συνήθως για να αποδιεγερθεί εκπέμποντας ένα φωτόνιο, εάν η συχνότητα εκπομπής έπεφτε μέσα στο χάσμα ζώνης. Αυτή η ιδιότητα είναι ιδανική για κατασκευή laser τα οποία δουλεύουν με ελάχιστη ισχύ έναρξης, και ιστορικά αποτέλεσε μια από τις δύο πρώτες βασικές ιδέες/εμπνεύσεις που ξεκίνησαν την έρευνα στην κατεύθυνση των φωτονικών κρυστάλλων.

5.7. Τρόποι παρασκευής

Υπάρχουν πολλοί τρόποι κατασκευής τρισδιάστατων φωτονικών κρυστάλλων. Μπορούμε γενικά να τις χωρίσουμε σε δύο κατηγορίες:

(α) **Λιθογραφικές και ολογραφικές μέθοδοι:** γίνεται ο σχεδιασμός του φωτονικού κρυστάλλου, και χρησιμοποιείται η λιθογραφική ή η ολογραφική μέθοδος για να αφαιρεθεί το απαιτούμενο υλικό ώστε να σχηματιστεί ο φωτονικός κρύσταλλος. Στην λιθογραφική μέθοδο, ο σχεδιασμός γίνεται συνήθως από σύστημα δέσμης ηλεκτρονίων (e-beam) πάνω σε φιλμ ευαίσθητο σε ηλεκτρόνια (συνήθως πολυμερές) το οποίο έχει εναποτεθεί πάνω στο επιλεγμένο υλικό. Το κομμάτι του φιλμ που έχει εκτεθεί στην ηλεκτρονική ακτινοβολία φεύγει (π.χ. με κάποια χημική μέθοδο), και το υπόλοιπο χρησιμοποιείται ως μάσκα, ώστε να προστατεύσει το υλικό που θα αποτελέσει τον φωτονικό κρύσταλλο. Το ακάλυπτο κομμάτι του υλικού φεύγει (etching) είτε με ξηρές διαδικασίες (dry-etch) όπως π.χ. με ενεργά ιόντα (reactive-ion-etching), είτε με υγρές διαδικασίες (wet-etch) όπως π.χ. με ηλεκτροχημική εγχάραξη. Συνήθως επειδή αυτή η μέθοδος επεξεργάζεται ένα επίπεδο της δομής την κάθε φορά, θα πρέπει να επαναληφθεί τόσες φορές, όσα είναι τα επιθυμητά επίπεδα που θέλουμε να φτιάξουμε. Η μέθοδος αυτή είναι μεν η πιο επίπονη από όλες, αλλά και αυτή που μας δίνει τον μέγιστο έλεγχο τόσο στις δομές που σχεδιάζουμε (π.χ. ατέλειες, κυκλώματα), όσο και στα υλικά που χρησιμοποιούμε (δυνατότητα για μεγάλες διαφορές στους δείκτες διάθλασης). Στην ολογραφική μέθοδο ο σχεδιασμός γίνεται εξ' ολοκλήρου στον υπολογιστή, και χρησιμοποιώντας πολλαπλές δέσμες laser (π.χ. λιθογραφία δύο φωτονίων όπου χρησιμοποιούμε δύο laser), γράφουμε την τρισδιάστατη δομή πάνω σε φωτοευαίσθητο υλικό (π.χ. ειδικό πολυμερές που πολυμερίζεται από την σύγχρονη

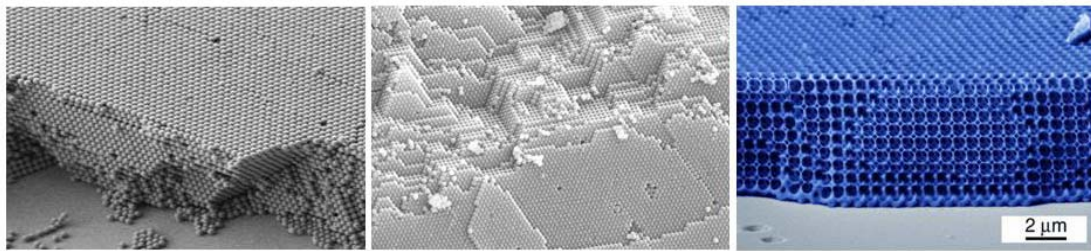
απορρόφηση δύο φωτονίων). Αυτή η μεθοδολογία έχει την ίδια ευκολία και έλεγχο στη δομή που δημιουργούμε, και είναι πιο εύκολη από την προηγούμενη, αλλά το μειονέκτημά της είναι στον περιορισμό που έχει σε υλικά με μικρή διαφορά στους δείκτες διάθλασης. Στο Σχ. 5.17 φαίνονται τρεις φωτονικοί κρύσταλλοι φτιαγμένοι με την παραπάνω μέθοδο.



Σχήμα 5.17. Φωτονικοί κρύσταλλοι φτιαγμένοι με την μέθοδο της λιθογραφίας. Αριστερά είναι η δομή “woodpile” (από την ομοιότητα με στίβαγμα ξύλων) φτιαγμένη σε πυρίτιο χρησιμοποιώντας ηλεκτρονική λιθογραφία (Si σε αέρα), ένα επίπεδο την φορά (πηγή: www.llnl.gov). Στή μέση είναι η “δομή του MIT”, επίσης φτιαγμένη σε πυρίτιο χρησιμοποιώντας ηλεκτρονική λιθογραφία (Si σε αέρα), ένα επίπεδο την φορά (πηγή: MIT). Δεξιά, ολογραφική λιθογραφία ενός φωτονίου σε γυαλί χρησιμοποιώντας 4 δέσμες laser (πηγή: D. N. Sharp et al., *Opt. Quant. Elec.* 34, 3 (2002)). Η περιοδικότητα στα παραπάνω είναι περίπου 500nm.

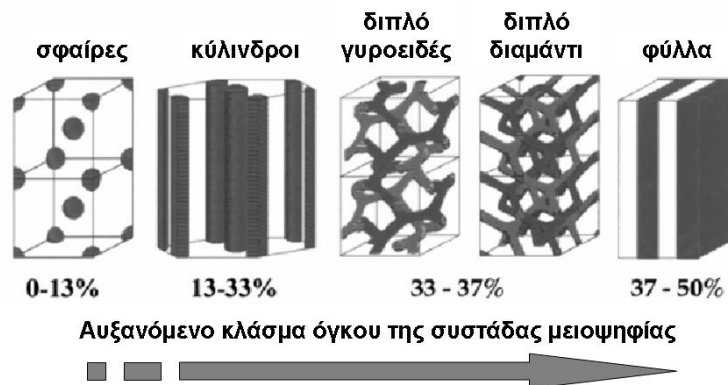
(β) Μέθοδοι αυτο-οργάνωσης: κολλοειδή διαλύματα (συνήθως μονοδιάσπαρτη σίλικα ή νανοσφαίρες πολυστυρενίου) οργανώνονται αυθόρμητα σε μία σταθερή δομή. Μία ευρέως χρησιμοποιούμενη τεχνική είναι η *ιζηματοποίηση υπό βαρύτητα*. Σε αυτήν, τα σωματίδια αιωρούμενα σε διάλυμα, παραμένουν στο κάτω μέρος του δοχείου καθώς εξατμίζεται ο διαλύτης. Η αρνητική πλευρά αυτής της τεχνικής είναι η μεγάλη χρονική διάρκεια που απαιτείται (μέχρι και 4 εβδομάδες).

Ένα κοινό μειονέκτημα των μεθόδων αυτο-οργάνωσης είναι ότι τα υλικά που έχουμε στην διάθεσή μας είναι μικρού δείκτη διάθλασης, και έτσι είναι δύσκολο να δημιουργήσεις κρυστάλλους με τρισδιάστατο φωτονικό χάσμα ζώνης. Αυτό ξεπερνιέται με την μέθοδο της *ένθεσης υλικών* με υψηλό δείκτη διάθλασης μέσα από τα κενά που αφήνουν οι κολλοειδής σφαίρες. Κατόπιν με μια χημική μέθοδο (etch) μπορούμε να διώξουμε τις σφαίρες και να αφήσουμε μόνο το ένθετο υλικό. Η δομή που δημιουργείται είναι η συμπληρωματική από την αρχική, αλλά έχει την ίδια συμμετρία, και έχει την απαιτούμενη μεγάλη διαφορά σε δείκτες διάθλασης. Έχει δείξει ότι τέτοιες δομές (*inverted opal*) έχουν πράγματι πλήρες φωτονικό χάσμα ζώνης. Το δεύτερο μειονέκτημα αυτής της μεθόδου είναι ότι δεν δίνει την δυνατότητα για αρκετό έλεγχο στην δομή που φτιάχνεται, και έχει ελάχιστο έλεγχο για την δημιουργία ατελειών και μικροδομών. Το θετικό της είναι ότι μεγάλες ποσότητες μπορούν να φτιαχτούν σχετικά εύκολα. Στο Σχ. 5.18 φαίνονται τρεις φωτονικοί κρύσταλλοι φτιαγμένοι με την παραπάνω μέθοδο.



Σχήμα 5.18. Φωτονικοί κρύσταλλοι φτιαγμένοι με την μέθοδο της αυτο-οργάνωσης. Αριστερά και μέση νανοσφαίρες απο σίλικα (γυαλί SiO_2) (πηγή: *D. Norris, UMN*, και <http://www.icmm.csic.es/cefe> αντίστοιχα). Δεξιά, με την μέθοδο της ένθεσης και κατόπιν εκδίωξης, έχουμε σφαίρες αέρα (όπου ήταν αρχικά οι διηλεκτρικές σφαίρες) μέσα σε μήτρα πυριτίου (Si), τό ένθετο υλικό (πηγή: *Y. A. Vlasov et al., Nature 414, 289 (2001)*). Η περιοδικότητα στα παραπάνω είναι περίπου 500nm.

Υπάρχουν βεβαίως και διάφορες άλλες τεχνικές για πιο γρήγορη και αποτελεσματική δημιουργία κρυστάλλων απο αυτο-οργάνωση. Μια ιδιαίτερα ενδιαφέρουσα προσέγγιση είναι η αυτο-οργάνωση συμπολυμερούς με διαφορετικούς τύπους συστάδων (π.χ. μια υδρόφιλη και μια υδρόφοβη). Οι δύο συστάδες αυτο-οργανώνονται σε διάφορες περιοδικές μορφολογίες ανάλογα με το κλάσμα όγκου της κάθε συστάδας. Στο Σχ. 5.19 απεικονίζονται οι διάφορες μορφολογίες που μπορούν να επιτευχθούν. Ιδιαίτερα καλά καθορισμένες δομές δίνουν τα συμπολυμερή τύπου *πολυστυρένιο-b-πολυισοπρένιο*.



Σχήμα 5.19. Η διαφορετικές δομές που μπορούν να παραχτούν απο αυτο-οργάνωση συμπολυμερούς με διαφορετικούς τύπους συστάδων (π.χ. μια υδρόφοβη και μια υδρόφιλη). Βασική παράμετρος διαφοροποίησης είναι το κλάσμα όγκου της μιας συστάδας (πηγή: *Y. Fink et al., J. Lightwave Tech. 17, 1963 (1999)*).

6. ΦΩΤΟΝΙΑ & ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑ, ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΣ

Μέχρι τώρα χρησιμοποιήσαμε πολλές φορές την κβαντική εικόνα για να περιγράψουμε τις διάφορες φωτονικές καταστάσεις: ζώνες Brillouin, τροχιακά, χάσματα, καταστάσεις δότη και δέκτη, κτλ. Η καλή αυτή αντιστοιχία είναι παραπάνω από σύμπτωση, είναι λόγω του ότι τα φωτόνια και τα ηλεκτρόνια περιγράφονται και τα δύο από κυματικές εξισώσεις. Στο κεφάλαιο αυτό θα διερευνήσουμε τις ομοιότητες και θα μελετήσουμε την επίδραση που έχει ο περιορισμός πάνω στις αντίστοιχες λύσεις.

6.1. Κυματικές εξισώσεις

Η εξίσωση για τα φωτόνια είναι η κυματική εξίσωση του Maxwell

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \nabla \times \vec{H}(\vec{r}, t) \right) = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{H}(\vec{r}, t)}{\partial t^2} \quad (6.1)$$

ενώ τα ηλεκτρόνια για χρονοανεξάρτητο δυναμικό περιγράφονται από την εξίσωση του Schrödinger

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (6.2)$$

Το τετράγωνο της απόλυτης τιμής του μαγνητικού πεδίου μας δίνει την πυκνότητα της έντασης ακτινοβολίας στην θέση \vec{r} την χρονική στιγμή t , ενώ το τετράγωνο της απόλυτης τιμής της κυματοσυνάρτησης μας δίνει την πυκνότητα της πιθανότητας να βρεθεί το ηλεκτρόνιο στην θέση \vec{r} την χρονική στιγμή t . Εάν περιγράφουμε μια μακροσκοπική δέσμη φωτονίων ή ηλεκτρονίων, οι δύο ορισμοί είναι ουσιαστικά ταυτόσημοι.

Οι λύσεις και για τις δύο είναι αρμονικές συναρτήσεις του χρόνου και άρα ανάλογες του $e^{-i\omega t}$, δηλαδή της μορφής $\vec{H}(\vec{r}, t) = e^{-i\omega t} \vec{H}(\vec{r})$, και παρομοίως για την Ψ . Εισάγοντάς την στις Εξ. 6.1 και 6.2 βρίσκουμε τις αντίστοιχες χρονοανεξάρτητες εξισώσεις για φωτόνια και ηλεκτρόνια

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \nabla \times \vec{H}(\vec{r}) \right) = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{H}(\vec{r}) \quad (6.3)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (6.4)$$

όπου $E = \hbar\omega$ στην Εξ. 6.4 είναι η ενέργεια του ηλεκτρονίου. Και οι δύο εκφράζουν ένα πρόβλημα ιδιοτιμών

$$\hat{H}\Phi = E\Phi \quad (6.5)$$

όπου \hat{H} είναι ο τελεστής της Χαμιλτονιανής και E η ιδιοτιμή. Για τα φωτόνια

$$\hat{H} \equiv \nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon(\vec{r})} \nabla \times \right) \quad (6.6)$$

$$E \equiv \frac{\omega^2}{c^2}$$

ενώ για τα ηλεκτρόνια

$$\hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \quad (6.7)$$

Χρησιμοποιήσαμε την κυματική εξίσωση Εξ. 1.24 για το μαγνητικό πεδίο, καθώς έτσι ο αντίστοιχος τελεστής της Χαμιλτονιανής προκύπτει ερμητιανός¹, και άρα οι ιδιοτιμές του είναι πραγματικές. Εάν είχαμε χρησιμοποιήσει την Εξ. 1.23 του ηλεκτρικού πεδίου, τότε ο αντίστοιχος Χαμιλτονιανός τελεστής δεν θα ήταν ερμητιανός.

Η αλληλεπίδραση με το υλικό στην περίπτωση του ηλεκτρονίου συμπεριλαμβάνεται στο δυναμικό $V(\vec{r})$. Στην περίπτωση του φωτονίου το δυναμικό αλληλεπίδρασης συμπεριλαμβάνεται στην διηλεκτρική συνάρτηση $\epsilon(\vec{r})$. Στην περίπτωση των ελεύθερων σωματιδίων (μηδενική αλληλεπίδραση, δηλαδή $V(\vec{r}) = V_c \equiv \text{σταθ.}$ και $\epsilon(\vec{r}) = \epsilon_c \equiv \text{σταθ.}$) οι λύσεις και για τα δύο είναι επίπεδα κύματα $e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$. Η σχέση μεταξύ ορμής και ενέργειας για ελεύθερα φωτόνια και ηλεκτρόνια είναι

$$\begin{array}{l} \text{φωτόνια} \\ p = \hbar k = h / \lambda \\ E = \hbar \omega = cp \end{array} \quad (6.8)$$

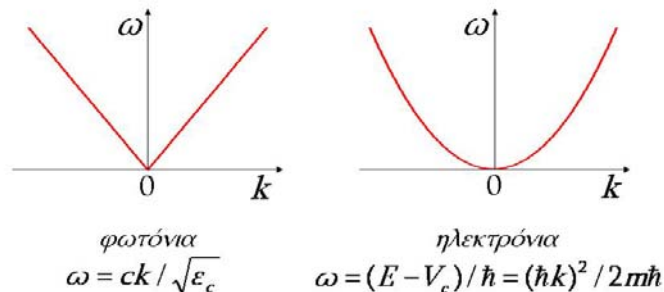
$$\begin{array}{l} \text{ηλεκτρόνια} \\ p = h / \lambda = mv \\ E = \hbar \omega = mv^2 / 2 \end{array}$$

Η βασική διαφορά είναι ότι η σχέση ορμής ενέργειας είναι γραμμική για το φωτόνιο ενώ τετραγωνική για το ηλεκτρόνιο (βλ. Σχ. 6.1), αποτέλεσμα του ότι το φωτόνιο δεν έχει μάζα ενώ το ηλεκτρόνιο έχει σχετικά μεγάλη μάζα². Επίσης τα ηλεκτρόνια είναι Φερμιόνια και τα φωτόνια Μποζόνια. Πέρα από αυτό, οι μεθοδολογίες και πολλά συμπεράσματα είναι παρόμοια. Οι λύσεις προκύπτουν από την αντίστοιχη κυματική εξίσωση υποκειμένη στις συνοριακές συνθήκες, υπακούουν τους βασικούς κανόνες συμμετρίας. Υπάρχουν ελεύθερες και δέσμιες

¹ Χρησιμοποιώντας την ταυτότητα $\nabla \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) = \vec{B} \cdot (\nabla \times \vec{A}) - \vec{A} \cdot (\nabla \times \vec{B})$ και δυο φορές παραγοντική ολοκλήρωση μπορούμε να αποδείξουμε ότι $\int d\vec{r} \cdot \vec{H}^* \cdot \nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon} \nabla \times \vec{H} \right) = \int d\vec{r} \cdot \left(\nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon} \nabla \times \vec{H} \right) \right)^* \cdot \vec{H}$, που είναι ο ορισμός ενός ερμητιανού τελεστή.

² δηλαδή η μάζα ηρεμίας mc^2 είναι κατά πολύ μεγαλύτερη της κινητικής ενέργειας $mv^2/2$, αλλιώς θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε την σχετικιστική εξίσωση του Dirac, και η σχέση E, p γίνεται πιο πολύπλοκη.

(περιορισμένες) λύσεις ανάλογα με το δυναμικό. Σε περιοδικά συστήματα ισχύει το θεώρημα Bloch και προκύπτουν χάσματα ζώνης κτλ.

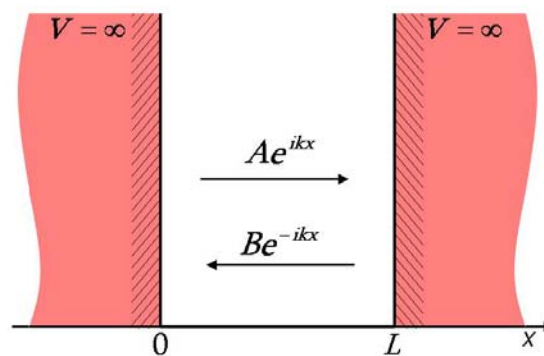


Σχήμα 6.1. Οι σχέσεις διασποράς για ελεύθερα φωτόνια και ηλεκτρόνια.

Στο προηγούμενο κεφάλαιο είδαμε την περιοδικότητα να εφαρμόζεται στα φωτόνια. Μιλήσαμε για τον περιορισμό στις οπτικές ίνες, αλλά δεν μπήκαμε σε βάθος στο πως μελετάται. Το αφήσαμε να το κάνουμε σε αυτό το κεφάλαιο, ώστε να γίνει παράλληλα με την μελέτη του περιορισμού στα ηλεκτρόνια, αφ' ενός γιατί έτσι θα φανούν πιο ξεκάθαρα οι ομοιότητες στα δύο συστήματα, αφ' ετέρου γιατί μας ενδιαφέρει ιδιαίτερα ο περιορισμός στα ηλεκτρόνια καθώς έτσι προκύπτουν πολλά νέα συστήματα εκπομπής και ανίχνευσης φωτός.

6.2. Περιορισμός ηλεκτρονίων

Θεωρούμε ένα μονοδιάστατο απλοποιημένο μοντέλο κβαντικού πηγαδιού κατά μήκος του άξονα x , απείρου βάθους, όπως φαίνεται στο Σχ. 6.2.



Σχήμα 6.2. Κβαντικό πηγάδι απείρου βάθους. Το σωματίδιο υπάρχει μόνο μέσα στο πηγάδι.

Αυτή είναι μια ακραία περίπτωση που επιδέχεται μόνο δέσμιες λύσεις: το σωματίδιο μπορεί να υπάρχει μόνο μέσα στο πηγάδι, άρα είναι πλήρως δέσμιο μέσα σε αυτό. Μέσα στο πηγάδι το δυναμικό είναι μηδέν, άρα λύνουμε την ελεύθερη εξίσωση Schrödinger της οποίας λύσεις είναι επίπεδα κύματα. Στην γενική περίπτωση υπάρχουν δύο, όπως φαίνεται και στο Σχ. 6.2, ένα προς τα δεξιά και ένα προς τα

αριστερά, και η λύση είναι επαλληλία των δύο $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$. Διακρίνουμε δύο περιπτώσεις λύσεων:

(α) $A=B$: $\psi(x) \propto \cos(kx)$ με μη-μηδενική τιμή στο $x=0$

(β) $A=-B$: $\psi(x) \propto \sin(kx)$ με μηδενική τιμή στο $x=0$.

Οι επιτρεπτές τιμές του κυματοδιανύσματος k (και άρα της ενέργειας μέσω της Εξ. 6.8) βρίσκεται στην κάθε περίπτωση από τις συνοριακές συνθήκες. Παρατηρούμε ότι το σωματίδιο δεν μπορεί να εισέλθει μέσα στην περιοχή όπου το δυναμικό απειρίζεται, άρα η κυματοσυνάρτηση εκεί μηδενίζεται. Η συνοριακή συνθήκη είναι η $\psi(x)$ να μηδενίζεται στα $x = 0$ και $x = L$.

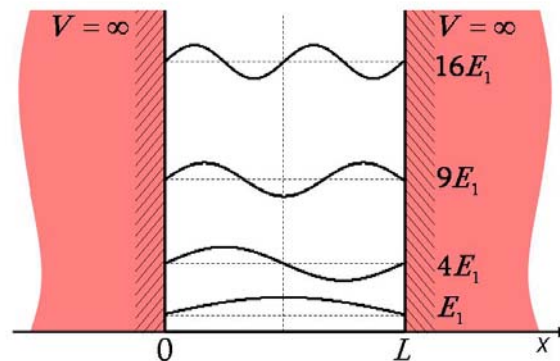
Η συνοριακή συνθήκη στο $x = 0$, υποχρεωτικά αποκλείει το συνημίτονο (δηλ. την περίπτωση α) άρα χρησιμοποιούμε το ημίτονο ως λύση. Η συνοριακή συνθήκη στο $x = L$ επιβάλλει

$$\sin(kL) = 0 \Rightarrow kL = n\pi \Rightarrow k = n \frac{\pi}{L} \quad (6.9)$$

Χρησιμοποιώντας και την Εξ. 6.8 βρίσκουμε τις κβαντισμένες ενεργειακές στάθμες

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \quad (6.10)$$

Οι λύσεις σχεδιάζονται στο Σχ. 6.3. Προσέξτε ότι είναι εναλλάξ συμμετρικές και αντι-συμμετρικές γύρω από το κέντρο του πηγαδιού. Επίσης προσέξτε ότι δεν υπάρχει στάθμη μηδενικής ενέργειας. Η ελάχιστη τιμή είναι για $n=1$. Αυτό είναι ένα καθαρά κβαντικό φαινόμενο, χωρίς αντιστοιχία στην κλασική μηχανική.

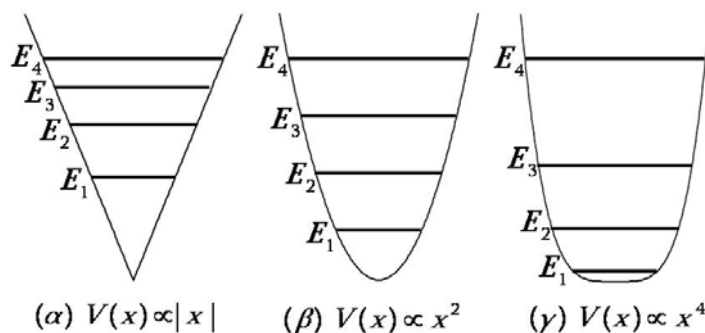


Σχήμα 6.3. Οι ενεργειακές καταστάσεις μέσα στο πηγάδι. Η ενέργεια ανεβαίνει με το τετράγωνο του κβαντικού αριθμού n , και είναι εναλλάξ συμμετρικές και αντι-συμμετρικές σε σχέση με το κέντρο του πηγαδιού.

Στην πράξη δεν υπάρχουν τέλεια απειρόβαθα πηγάδια. Εν γένει μπορούμε να συναντήσουμε δύο ειδών διαφοροποιήσεων:

- (α) απειρόβαθα πηγάδια με διάφορα σχήματα,
- (β) πηγάδια πεπερασμένου βάθους.

Στην πρώτη περίπτωση αποδεικνύεται ότι για οποιοδήποτε σχήμα ο κανόνας της εναλλάξ εμφάνισης συμμετρικής και αντι-συμμετρικής λύσης (αρχίζοντας πάντα από την συμμετρική) συνεχίζει να ισχύει. Αυτό που αλλάζει (πέρα από την ακριβή μορφή της κυματοσυνάρτησης) είναι το φάσμα των ενεργειακών τιμών. Στο απειρόβαθο πηγάδι οι ενέργειες μεγάλωναν με το τετράγωνο του κβαντικού αριθμού n . Σε δευτεροβάθμιο ($V \propto x^2$), οι ενέργειες για διαδοχικά n ισαπέχουν. Για γραμμικό ($V \propto |x|$) η απόσταση μεταξύ διαδοχικών ενεργειών μικραίνει όσο αυξάνει ο κβαντικός αριθμός n . Μερικά από αυτά απεικονίζονται στο Σχ. 6.4.



Σχήμα 6.4. Τρεις περιπτώσεις πηγαδιών με διαφορετικό βαθμό κλίσης: α) γραμμικό, β) τετραγωνικό, γ) τετάρτης δύναμης.

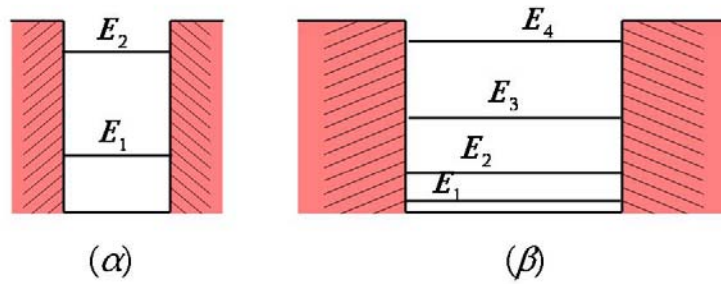
Ως γενικός κανόνας, όσο αυξάνει ο κβαντικός αριθμός n , η απόσταση μεταξύ διαδοχικών ενεργειακών σταθμών:

(α) μεγαλώνει, εάν το πηγάδι είναι πιο απότομο από δευτεροβάθμιο.

(β) μικραίνει εάν το πηγάδι είναι λιγότερο απότομο από δευτεροβάθμιο.

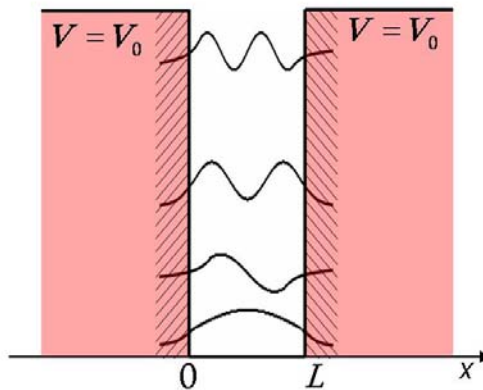
Μια ενδιαφέρουσα παρατήρηση είναι ότι οι ενεργειακές στάθμες είναι αντιστρόφως ανάλογες με το τετράγωνο του πλάτους του πηγαδιού. Συνεπακόλουθα, για τα δυναμικά διαγράμματα του Σχ. 6.4, η πρώτη ενεργειακή στάθμη θα εμφανίζεται ψηλότερα όσο λιγότερο απότομο είναι το δυναμικό, αλλά η διαφορά της ενέργειας μεταξύ σταθμών γίνεται μικρότερη όσο μεγαλώνει η ενέργεια.

Η δεύτερη διαφοροποίηση έχει να κάνει με το ύψος του πηγαδιού, όπως φαίνεται στο Σχ. 6.5. Στο προηγούμενο ήταν άπειρο, και ως αποτέλεσμα το σύστημα επιδεχόταν μόνο δέσμιες καταστάσεις ως λύσεις. Όταν όμως είναι πεπερασμένο, τότε το σύστημα επιδέχεται και δέσμιες αλλά και ελεύθερες λύσεις. Ο αριθμός των δέσμιων λύσεων εξαρτάται και από το ύψος του πηγαδιού αλλά και από το πλάτος του. Όλες οι λύσεις με $E \geq V_0$ (άπειρες σε αριθμό) είναι ελεύθερες λύσεις. Δέσμιες καταστάσεις σε ένα πεπερασμένο πηγάδι ύψους V_0 είναι οι λύσεις που έχουν ενέργεια μικρότερη του V_0 . Ο αριθμός των δέσμιων καταστάσεων είναι το μέγιστο n για το οποίο ισχύει $E_n < V_0$. Ο αριθμός αυτός μεγαλώνει όσο μεγαλώνει το ύψος (βάθος) του πηγαδιού και όσο αυξάνει το πλάτος του πηγαδιού, όπως φαίνεται και στο Σχ. 6.5.



Σχήμα 6.5. Δύο περιπτώσεις πηγαδιών πεπερασμένου ύψους. Όσο αυξάνει το πλάτος του πηγαδιού, τόσες περισσότερες δέσμιες καταστάσεις “χωράνε” μέσα.

Όταν το ύψος του πηγαδιού είναι πεπερασμένο, τότε η κυματοσυνάρτηση των δέσμιων καταστάσεων δεν μηδενίζεται πιά στα όρια του πηγαδιού, αλλά εισέρχεται μέσα στην απαγορευμένη περιοχή όπου κατόπιν φθίνει εκθετικά, όπως φαίνεται στο Σχ. 6.6. Η γενική λύση μέσα στην απαγορευμένη περιοχή είναι και πάλι της μορφής e^{ikx} , όπου όμως τώρα η ενέργεια και το νέο κυματοδιάνυσμα κ συνδέονται ως $E - V_0 = \hbar^2 \kappa^2 / 2m < 0$ καθότι για την δέσμια κατάσταση $E < V_0$. Άρα αναγκαστικά το κ είναι φανταστικός, και η λύση γράφεται ως $e^{-\kappa|x|}$, δηλ. ένα εκθετικά φθίνων κύμα. Η συνολική λύση βρίσκεται απαιτώντας στα σημεία $x = 0$ και $x = L$ συνέχεια της κυματοσυνάρτησης και της παραγώγου της.



Σχήμα 6.6. Οι ενεργειακές καταστάσεις σε πηγάδι πεπερασμένου βάθους. Η κυματοσυνάρτηση εισχωρεί μέσα στην απαγορευμένη περιοχή, όπου όμως φθίνει εκθετικά.

Μέχρι εδώ δεν μιλήσαμε για το τι γίνεται στις άλλες δύο διαστάσεις, υποθέσαμε σιωπηρά ότι η κίνηση εκεί δεν είναι περιορισμένη. Άρα μπορεί να περιγραφεί από ελεύθερα επίπεδα κύματα. Η συνολική λύση είναι το γινόμενο της λύσης στο x , επί τις λύσεις στο y και z , δηλαδή

$$\Psi(x, y, z) \propto \sin(n\pi x / L) e^{ik_y y} e^{ik_z z} \quad (6.11)$$

και η ενέργεια

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \quad (6.12)$$

6.3. Περιορισμός φωτονίων

Θεωρούμε ένα υμένιο πάχους d και δείκτη διάθλασης n_2 μέσα σε υλικό με μικρότερο δείκτη n_1 , παράλληλο στο yz επίπεδο, όπως φαίνεται στο Σχ. 6.7. Ένα τέτοιο σύστημα ονομάζεται κυματοδηγός υμενίου, και οδηγεί τα κύματα κατά μήκος του λόγω της ολικής εσωτερικής ανάκλασης. Ένα φωτόνιο στην περίπτωση μας θα είναι περιορισμένο μέσα στο υμένιο, δηλαδή θα είναι περιορισμένο στην x διεύθυνση και άρα η ορμή του να είναι κατα μήκος του yz επιπέδου. Θα περιγράφεται δηλαδή σαν επίπεδο κύμα στις yz διευθύνσεις. Θα δούμε κάτω απο ποιές προϋποθέσεις αυτό είναι εφικτό, δηλαδή πότε θα έχουμε οδηγούμενα κύματα μέσα σε ένα υμένιο. Η παραπέρα γενίκευση στους κυματοδηγούς και οπτικές ίνες θα είναι προφανής.

Έχοντας την εμπειρία απο το κβαντικό πηγάδι ξεκινάμε υποθέτοντας ότι έχουμε μια συχνότητα ω και ότι το κυματοδιάνυσμα κατά τον y και z είναι k_y και k_z αντίστοιχα. Η λύση τότε θα είναι

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}(x)e^{ik_y y} e^{ik_z z} \quad (6.13)$$

Εισάγοντας την Εξ. 6.13 στην κυματική εξίσωση Εξ. 1.26 βρίσκουμε την εξίσωση για την λύση στην x διεύθυνση

$$\nabla^2 \vec{E}(x) = [\varepsilon(x)\omega^2 / c^2 - k_y^2 - k_z^2] \vec{E}(x) \quad (6.14)$$

Αυτή είναι μια κυματική εξίσωση με κυματοδιάνυσμα

$$k_x^2 = \varepsilon(x)\omega^2 / c^2 - k_y^2 - k_z^2 \quad (6.15)$$

Ας θεωρήσουμε την ορμή στους άλλους άξονες ως $q^2 = k_y^2 + k_z^2$, και ας βρούμε ως συνάρτηση του q τις οδηγούμενες (δέσμιες) λύσεις. Όπως και στο παράδειγμα του κβαντικού πηγαδιού, μια τέτοια λύση θα είναι ένα πραγματικό κύμα στο διάστημα $0 \leq x \leq L$, και μια εκθετικά φθίνουσα λύση έξω από αυτό. Καθώς $k_x = \sqrt{\varepsilon(x)\omega^2 / c^2 - q^2}$, και $\varepsilon(x) = n_1$ για $x < 0$ ή $x > L$, και $\varepsilon(x) = n_2$ για $0 \leq x \leq L$, θα πρέπει να είναι

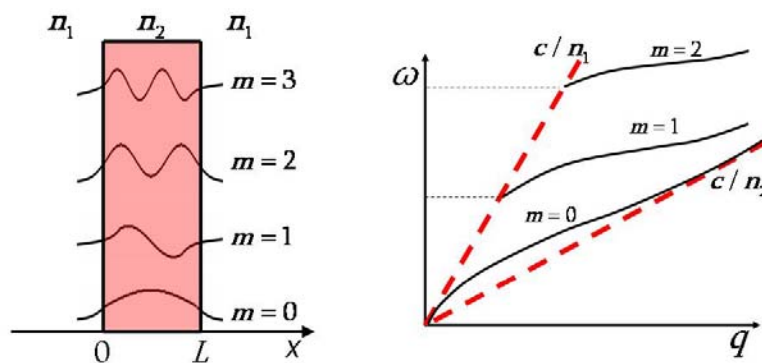
$$\begin{cases} n_2^2 \omega^2 / c^2 - q^2 \geq 0 & 0 < x < L \\ n_1^2 \omega^2 / c^2 - q^2 < 0 & x < 0, x > L \end{cases} \quad (6.16)$$

Είναι προφανές ότι αυτό μπορεί να ισχύει μόνο για $n_2 > n_1$. Η παραπάνω σχέση δεν είναι τίποτα άλλο απο μια ουσιαστικά επανατύπωση του νόμου της ολικής εσωτερικής ανάκλασης: εάν η γωνία πρόσπτωσης είναι μεγάλη (δηλ. μεγάλο q), τότε δεν υπάρχει αντίστοιχη λύση στον χώρο με τον μικρότερο δείκτη διάθλασης και άρα υφίσταται ολική ανάκλαση. Έξω απο το υμένιο η λύση φθίνει εκθετικά. Η συνολική λύση λοιπόν θα είναι

$$\begin{cases} e^{\kappa x} & x < 0 \\ \cos(k_x x) & 0 \leq x \leq L \\ e^{-\kappa(x-L)} & x > L \end{cases} \quad (6.17)$$

όπου $k_x = \sqrt{n_2^2 \omega^2 / c^2 - q^2}$ και $\kappa = \sqrt{q^2 - n_1^2 \omega^2 / c^2}$. Εφαρμόζοντας τις συνοριακές συνθήκες (συνέχεια των εφαπτομενικών E, H και εγκάρσιων D, B) στις μορφές της Εξ. 6.17, βρίσκουμε την τελική συναρτησιακή σχέση (διαφοράς) μεταξύ συχνότητας ω και q των δέσμιων (οδηγούμενων) λύσεων.

Όπως και στα προηγούμενα κεφάλαια, υπάρχουν δύο περιπτώσεις πόλωσης, η εγκάρσια ηλεκτρική (TE) με το ηλεκτρικό πεδίο κάθετο στις επιφάνειες του υμενίου, και η εγκάρσια μαγνητική (TM) με το ηλεκτρικό πεδίο παράλληλο στις επιφάνειες του υμενίου. Στην πρώτη περίπτωση πρέπει να επιβάλουμε συνέχεια των D, H , ενώ στην δεύτερη συνέχεια των E, B . Δεν θα μπορούμε εδώ σε τέτοιες λεπτομέρειες. Βρίσκουμε μια σειρά διακριτών λύσεων με συχνότητες ω_m για κάθε q , κάθε μία παρόμοια με τις λύσεις $E(x) \propto \sin((m+1)\pi x / L)$ που είχαμε βρεί στο κβαντικό πηγάδι πεπερασμένου βάθους.



Σχήμα 6.7. Αριστερά: οι αναμενόμενη μορφή των δέσμιων (οδηγούμενων) λύσεων. Δεξιά: Η σχέση διασποράς των οδηγούμενων κυμάτων. Οι κόκκινες γραμμές είναι οι σχέσεις διασποράς μέσα σε ομοιογενή χώρο με δείκτη n_1 και n_2 αντίστοιχα.

Στο δεξί μέρος του Σχ. 6.7 σχεδιάζουμε τις πρώτες 4 λύσεις, οι οποίες είναι της ίδιας μορφής με εκείνες του κβαντικού πηγαδιού πεπερασμένου βάθους. Όσο πιο μεγάλη είναι η συχνότητα μιας συγκεκριμένης λύσης, τόσο πιο πολύ μοιάζει στην λύση του απειρόβαθου πηγαδιού, δηλαδή οι ουρές που προεκτείνονται έξω από τον κυματοδηγό γίνονται όλο και μικρότερες. Η πρώτη λύση ξεκινάει από συχνότητα μηδέν, άρα υπάρχει δέσμια λύση έστω και για μηδενική συχνότητα. Οι υπόλοιπες ξεκινούν η κάθε μια από κάποια χαρακτηριστική τιμή της συχνότητας και πάνω, έχουν δηλαδή κατώτατο όριο. Η εξήγηση σε γενικές γραμμές έχει και πάλι να κάνει με την ολική ανάκλαση: εάν ορίζαμε μια μέση γωνία πρόσπτωσης, αυτή θα σχετιζόταν με τον λόγο του κυματοδιάνυσματος στην yz διεύθυνση προς το κυματοδιάνυσμα στην x διεύθυνση. Για τις $m > 0$ λύσεις, το κυματοδιάνυσμα στην x

Ξεκινάει απο μια ελάχιστη τιμή και πάνω (αλλιώς δεν θα είχαμε τους επιπλέον λοβούς) η οποία είναι αντίστροφα ανάλογη με το πλάτος του κυματοδηγού. Άρα για να παραμένει η μέση γωνία πρόσπτωσης αρκετά μεγάλη ώστε να έχουμε ολική ανάκλαση, θα πρέπει και το q να ξεκινάει απο μια ελάχιστη τιμή και άνω. Συνεπακόλουθα, ο αριθμός των διαφορετικών οδηγούμενων λύσεων εξαρτάται απο την συχνότητα και το πλάτος του υμενίου, όσο μεγαλύτερη συχνότητα και όσο πλατύτερο το υμένιο, τόσες περισσότερες. Για την λύση $m=0$ αυτό δεν είναι πρόβλημα, καθώς το κυματοδιάνυσμα στην x διεύθυνση μπορεί να πάρει μέχρι και την τιμή μηδέν.

Ένας άλλος τρόπος για να κατανοήσουμε την φύση των δέσμιων καταστάσεων είναι παρατηρώντας στο Σχ. 6.7 ότι οι λύσεις ξεκινάνε απο την γραμμή $\omega = cq / n_1$ και καταλήγουν στην $\omega = cq / n_2$. Πάνω από την πρώτη γραμμή δεν υπάρχουν δέσμιες λύσεις, μόνο ελεύθερες: εκεί η συχνότητα είναι αρκετά μεγάλη ώστε η δεύτερη συνθήκη της Εξ. 6.16 να μην ισχύει, άρα η λύση έξω απο το υμένιο δεν είναι φθίνουσα και άρα δεν είναι δέσμια (δηλ. δεν είναι οδηγούμενη). Κάτω απο την δεύτερη γραμμή δεν υπάρχουν καθόλου λύσεις: εκεί η συχνότητα είναι αρκετά μικρή ώστε και η πρώτη συνθήκη της Εξ. 6.16 να μην ισχύει, και άρα τα πεδία θα ήταν και μέσα στο υμένιο φθίνουσα. Οδηγούμενες λύσεις υπάρχουν δηλαδή μόνο ανάμεσα στις δύο γραμμές. Για την πρώτη λύση $m=0$, στιμ πολύ μικρές συχνότητες το κύμα έχει πολύ μεγάλες ουρές έξω απο το υμένιο, και άρα ο “μέσος” δείκτης που αισθάνεται είναι πιο κοντά στον n_1 . Γι’ αυτό και η γραμμή διασποράς είναι παράλληλη με την πρώτη γραμμή. Όσο μεγαλώνει το q , τόσο περιορίζονται οι ουρές, και άρα τόσο περισσότερο αισθάνεται τον “μέσος” δείκτης που αισθάνεται είναι πιο κοντά στον n_2 . Στο όριο των πολύ μεγάλων q η λύση είναι πλήρως εντοπισμένη μέσα στο υμένιο και η σχέση διασποράς γίνεται παράλληλη με την δεύτερη γραμμή.

7. ΔΙΗΛΕΚΤΡΙΚΗ ΣΥΝΑΡΤΗΣΗ

Η απόκριση των υλικών στην ακτινοβολία όπως είδαμε είναι το αποτέλεσμα της κίνησης των ηλεκτρονίων υπό την επίδραση του ηλεκτρικού πεδίου της κύμανσης. Μπορούμε να πάρουμε μια καλή ποιοτική εικόνα και αίσθηση αυτής της αλληλεπίδρασης εξετάζοντας το θέμα κλασσικά. Για την σωστή ποσοτική περιγραφή του, βέβαια, είναι αναγκαία η πλήρης κβαντική περιγραφή των ηλεκτρονίων, των επιτρεπτών καταστάσεών τους στον κρύσταλλο, και η αλληλεπίδρασή τους με το φως. Θα εξετάσουμε πως συμπεριφέρεται ένα δέσμιο ηλεκτρόνιο και πως ένα ελεύθερο και θα καταλήξουμε στα μοντέλα Lorentz και Drude που περιγράφουν έναν μονωτή και ένα μέταλλο αντίστοιχα.

7.1. Ο ταλαντωτής Lorentz

Τα δέσμια ηλεκτρόνια ενός ατόμου είναι οργανωμένα σε τροχιές γύρω από τον πυρήνα. Στην απουσία εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου, το ηλεκτρονικό αυτό νέφος είναι σφαιρικά συμμετρικό: τό κέντρο της ηλεκτρονιακής πυκνότητας συμπίπτει με τον πυρήνα. Όταν υπάρχει όμως εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο, τότε το ηλεκτρονικό νέφος μετατοπίζεται κατά την αντίθετη κατεύθυνση και το άτομο είναι μοιάζει με ένα ηλεκτρικό δίπολο. Έστω ότι η μετατόπιση αυτή για ένα συγκεκριμένο τροχιακό είναι \vec{r} . Σε αυτήν την κατάσταση θα υπάρχει μια δύναμη επαναφοράς, η οποία στην προσέγγιση του *Hook* είναι ανάλογη της μετατόπισης $\vec{F}_H = -k\vec{r}$. Από την μηχανική γνωρίζουμε ότι ένα σώμα μάζας m με σταθερά ελατηρίου k ταλαντώνεται με συχνότητα $\omega_0 = \sqrt{k/m}$. Επίσης, υπάρχει και μια δύναμη τριβής, η οποία στην πιο απλή προσέγγιση είναι ανάλογη της ταχύτητας $\vec{F}_F = -m\gamma\vec{v} = -m\gamma(d\vec{r}/dt)$, όπου γ είναι μια σταθερά. Τέλος, υπάρχει και η εξωτερική δύναμη από το ηλεκτρικό πεδίο $\vec{F}_E = -e\vec{E}$. Βάζοντάς τα όλα μαζί στον νόμο του Newton, γράφουμε την εξίσωση κίνησης

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} + m\gamma \frac{d\vec{r}}{dt} + m\omega_0^2 \vec{r} = -e\vec{E} \quad (7.1)$$

όπου $-e$ και m είναι το φορτίο και η μάζα του ηλεκτρονίου αντίστοιχα. Υποθέτουμε ότι η μάζα του πυρήνα είναι άπειρη σε σχέση με το ηλεκτρόνιο, και άρα ότι αυτός μένει ακούνητος καθ' όλη την διαδικασία. Επίσης θεωρούμε ότι η δύναμη πάνω στο ηλεκτρόνιο λόγω του μαγνητικού πεδίου $\vec{F}_M = -e\vec{v} \times \vec{B}/c$ είναι μηδαμινή, καθώς η ταχύτητα του ηλεκτρονίου \vec{v} είναι πολύ μικρότερη από την ταχύτητα του φωτός c .

Για την εξωτερική δύναμη χρησιμοποιούμε το μακροσκοπικό ολικό πεδίο \vec{E} , αντί του πιο σωστού τοπικού πεδίου \vec{E}_{loc} που περιλαμβάνει την επίδραση των

άλλων ηλεκτρονίων και του πυρήνα. Ποσοτικά, το λάθος είναι μικρό, καθώς επιζητούμε την μέση επίδραση λόγω του εξωτερικού πεδίου, και ποιοτικά δεν περιμένουμε καμία διαφορά. Η σταθερά τριβής γ έχει μονάδες αντίστροφου χρόνου και καθορίζει τον ρυθμό με τον οποίο χάνεται ενέργεια απο τον ταλαντωτή. Υπάρχουν διάφοροι μηχανισμοί κατανάλωσης ενέργειας σε ένα στερεό, με τον σημαντικότερο την σύζευξη με φωνόνια (ταλαντώσεις πλέγματος).

Θεωρούμε οτι το ηλεκτρικό πεδίο μεταβάλλεται αρμονικά με τον χρόνο $\vec{E} \equiv \vec{E}e^{-i\omega t}$, και οτι συνεπώς και η μετατόπιση του ηλεκτρονικού νέφους του συγκεκριμένου τροχιακού \vec{r} θα μεταβάλλεται αρμονικά με τον χρόνο $\vec{r} \equiv \vec{r}e^{-i\omega t}$. Αντικαταστήνοντας στην Εξ. 7.1, βρίσκουμε

$$-m\omega^2\vec{r} - i\omega m\gamma\vec{r} + m\omega_0^2\vec{r} = -e\vec{E} \quad (7.2)$$

και λύνοντας ως προς \vec{r}

$$\vec{r} = \frac{-e\vec{E}/m}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad (7.3)$$

Η διπολική ροπή που συνεπάγεται απο την μετατόπιση του ηλεκτρονικού νέφους του συγκεκριμένου αυτού τροχιακού είναι $\vec{p} = -e\vec{r}$,

$$\vec{p} = \frac{e^2\vec{E}}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad (7.4)$$

Υποθέτουμε οτι το ηλεκτρικό πεδίο και οι μετατοπίσεις είναι μικρά, και άρα οτι τα μεγέθη ω_0, γ είναι ανεξάρτητα της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου, δηλ. είμαστε στην λεγόμενη γραμμική περιοχή. Τότε, η σχέση εξάρτησης μεταξύ της διπολικής ροπής και του ηλεκτρικού πεδίου είναι γραμμική, και μπορούμε να γράψουμε

$$\vec{p} = \alpha(\omega)\vec{E} \quad (7.5)$$

όπου

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad (7.6)$$

είναι η ατομική πολωσιμότητα για άτομο με ένα ηλεκτρόνιο. Είναι είναι συνάρτηση της συχνότητας, όπως φαίνεται απο την Εξ. 7.4, και επίσης μιγαδική, καθώς έχουμε εισάγει τον όρο της τριβής. Αυτό σημαίνει οτι υπάρχει μια διαφορά φάσης μεταξύ του ηλεκτρικού πεδίου και της διπολικής ροπής.

Εάν έχουμε πολλά τέτοια άτομα σε πυκνή διάταξη, τότε το σύνολο των διπολικών ροπών συνιστούν μια μέση μακροσκοπική πόλωση

$$\vec{P} = N\alpha\vec{E} = \chi_e\vec{E} \quad (7.7)$$

όπου N είναι ο αριθμός των ατόμων στην μονάδα του όγκου, και χ_e η ηλεκτρική επιδεκτικότητα. Μπορούμε τώρα να ορίσουμε εύκολα την διηλεκτρική συνάρτηση

$$\begin{aligned}\vec{D} &= \varepsilon \vec{E} = \vec{E} + 4\pi \vec{P} = (1 + 4\pi \chi_e) \vec{E} \Rightarrow \\ \varepsilon(\omega) &= 1 + 4\pi \chi_e(\omega)\end{aligned}\quad (7.8)$$

η οποία είναι μιγαδική συνάρτηση της συχνότητας.

$$\varepsilon = 1 + \frac{4\pi N e^2}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad (7.9)$$

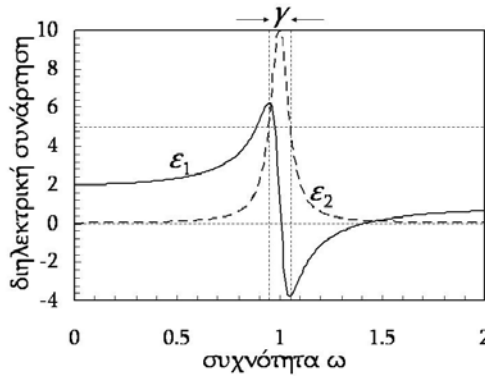
Για μη μαγνητικά υλικά η διηλεκτρική συνάρτηση είναι ίση με το τετράγωνο του δείκτη διάθλασης, ο οποίος τώρα αναγκαστικά είναι μιγαδικός

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 = (n + ik)^2 = n^2 - \kappa^2 + i2n\kappa \quad (7.10)$$

όπου n, κ το πραγματικό και φανταστικό μέρος του δείκτη διάθλασης, και $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ το πραγματικό και φανταστικό μέρος της διηλεκτρικής συνάρτησης

$$\begin{aligned}\varepsilon_1 &= n^2 - \kappa^2 = 1 + \frac{4\pi N e^2}{m} \frac{(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} \\ \varepsilon_2 &= 2n\kappa = \frac{4\pi N e^2}{m} \frac{\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2}\end{aligned}\quad (7.11)$$

Στο Σχ. 7.1 σχεδιάζεται η διηλεκτρική συνάρτηση για τις τιμές $\gamma = 0.1$, $\omega_0 = 1$ και $4\pi N e^2 / m = 1$.



Σχήμα 7.1. Η διηλεκτρική συνάρτηση όπως προκύπτει στο μοντέλο του ταλαντωτή Lorentz.

7.2. Διασκεδασμός και απορρόφηση

Ο μιγαδικός δείκτης διάθλασης $\tilde{n} = n + ik$ καθορίζει τον τρόπο διάδοσης κυμάτων μέσα στο υλικό. Για ένα επίπεδο κύμα έχουμε

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}x - \omega t)} = \vec{E}_0 e^{i((n+ik)\omega x / c - \omega t)} = \vec{E}_0 e^{i(n\omega x / c - \omega t)} e^{-\kappa\omega x / c} \quad (7.12)$$

το πρώτο μέρος εφράζει την γνώριμη διάδοση επίπεδων κυμάτων χωρίς απόσβεση, και ο δεύτερος όρος εκφράζει την απόσβεση. Η ροή ενέργειας (δηλ. το διάνυσμα *Poynting*) αποσβαίνει με την απόσταση ω s

$$I = I_0 e^{-2\kappa\omega x/c} = I_0 e^{-\alpha x} \quad (7.13)$$

όπου ορίσαμε τον *συντελεστή απορρόφησης*

$$\alpha = 4\pi\kappa / \lambda_0 \quad (7.14)$$

ο οποίος έχει μονάδες αντίστροφου μήκους, και εκφράζει το αντίστροφο της απόστασης στην οποία η ροή ενέργειας πέφτει στο $1/e$ της αρχικής της τιμής.

Η μέγιστη τιμή του ε_2 βρίσκεται προσεγγιστικά στο $\omega = \omega_0$ (ισχύει για μικρά γ), και απο την Εξ. 7.11 την βρίσκουμε

$$\varepsilon_{2_{\max}} = 2\pi\kappa = \frac{4\pi N e^2}{m\gamma\omega_0} \quad (7.15)$$

Για μικρές συχνότητες $\omega \ll \omega_0$ η ε_1 μεγαλώνει για αυξανόμενη συχνότητα. Αυτό ονομάζεται *κανονικός διασκεδασμός*. Σε μια στενή περιοχή συχνοτήτων γύρω απο το ω_0 η συμπεριφορά αυτή αντιστρέφεται, ε_1 μικραίνει για αυξανόμενη συχνότητα, και μπορεί να γίνει και αρνητικό. Αυτό ονομάζεται *ανώμαλος διασκεδασμός*. Το εύρος της ζώνης ανώμαλου διασκεδασμού βρίσκεται μεταξύ των δύο ακρότατων του ε_1 , τα οποία βρίσκονται θέτοντας την παράγωγο του ε_1 ίση με μηδέν. Για στενό εύρος, αυτό είναι περίπου ίσο με το εύρος της καμπύλης του ε_2 στο μισό της μέγιστης τιμής του. Από την Εξ. 7.11 για μικρό γ , βρίσκουμε το το εύρος ανώμαλου διασκεδασμού είναι ίσο με γ .

Για πιο μεγάλες συχνότητες το ε_1 μπορεί να γίνει αρνητικό. Αυτή η συμπεριφορά, όπως θα δούμε παρακάτω πιο διεξοδικά, είναι χαρακτηριστική των ελεύθερων ηλεκτρονίων και το υλικό συμπεριφέρεται σαν μέταλλο. Για ακόμα μεγαλύτερα $\omega \gg \omega_0$ το ε_1 είναι και πάλι θετικό και πλησιάζει ασυμπτωτικά την μονάδα από κάτω. Αυτή η συμπεριφορά είναι κοινή για όλα τα υλικά σε υψηλές συχνότητες.

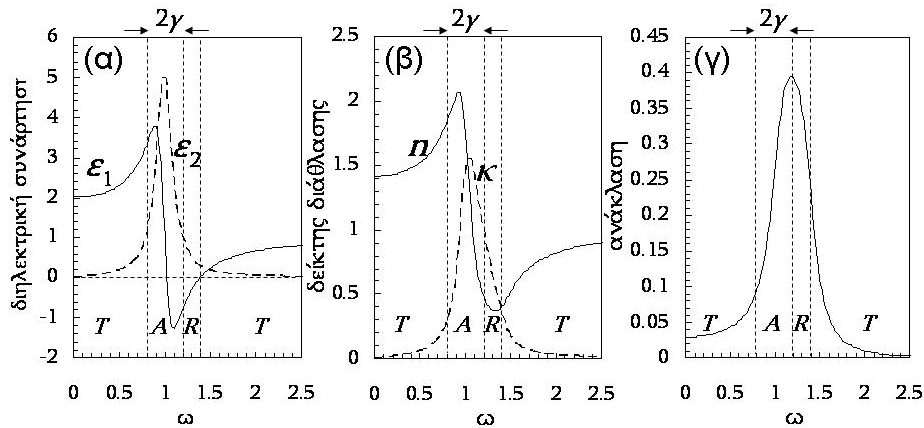
Στη τελευταία αυτή περιοχή το πραγματικό μέρος του δείκτη διάθλασης είναι μικρότερο της μονάδας $n < 1$. Εδώ η φασική ταχύτητα είναι μεγαλύτερη της ταχύτητας του φωτός στο κενό. Αυτό όμως δεν σημαίνει και ταχύτητα μετάδοσης πληροφορίας πιο γρήγορα απο το φως στο κενό, καθώς αυτή είναι ίση με την ταχύτητα μετάδοσης ενέργειας που είναι η ταχύτητα ομάδας. Απο τον ορισμό της

$$v_G = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{dk/d\omega} \quad (7.16)$$

και καθώς $k = n(\omega)\omega/c$

$$v_G = \frac{c}{n + \omega \frac{dn}{d\omega}} < c \quad (7.17)$$

Στην περίπτωση που το n είναι ανεξάρτητο της συχνότητας γυρίζουμε στο πιο γνώριμο $v_G = c/n$.



Σχήμα 7.2. Ανατομία του μοντέλου Lorentz. Τέσσερις χαρακτηριστικές ζώνες προκύπτουν, οι T, A, R και T, για διάφανη, απορροφητική, ανακλαστική και διάφανη αντίστοιχα.

Μπορούμε να κατανοήσουμε τις επιπτώσεις που έχει ο διασκεδασμός του Σχ. 7.1 στην διάδοση του φωτός, δηλαδή τι γίνεται όταν ένα επίπεδο κύμα πέσει πάνω σε διεπιφάνεια υλικού του οποίου η διηλεκτρική συνάρτηση είναι της μορφής της Εξ. 7.11. Υπάρχουν δύο αλλαγές ως προς τις απλές σχέσεις που είχαμε γράψει στο Κεφ. 2. Πρώτον, τώρα έχουμε και απορρόφηση, Δεύτερον, καθώς ο δείκτης διάθλασης είναι τώρα συνάρτηση της συχνότητας, οι συντελεστές ανάκλασης και διάθλασης θα είναι και αυτοί συναρτήσεις της συχνότητας. Πιο συγκεκριμένα, ο συντελεστής ανάκλασης θα είναι

$$R = \left| \frac{\tilde{n} - 1}{\tilde{n} + 1} \right|^2 = \frac{(n - 1)^2 + \kappa^2}{(n + 1)^2 + \kappa^2} \quad (7.18)$$

όπου

$$\begin{aligned} n &= \sqrt{[(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2)^{1/2} + \varepsilon_1]/2} \\ \kappa &= \sqrt{[(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2)^{1/2} - \varepsilon_1]/2} \end{aligned} \quad (7.19)$$

Οι τιμές των $\varepsilon_1, \varepsilon_2, n, \kappa, R$ για $\omega_0 = 1, \gamma = 0.2$ και $\sqrt{4\pi N e^2 / m} = 1$ (το $4\pi N e^2 / m$ έχει μονάδες συχνότητα στο τετράγωνο) φαίνονται στο Σχ. 7.2. Ξεχωρίζουμε τέσσερις ζώνες:

(1) $\omega \ll \omega_0, \varepsilon_2, \kappa \approx 1$ (περιοχή T). Η απορρόφηση είναι μηδαμινή, και άρα το υλικό εμφανίζεται διάφανο. Έχουμε απλή ανάκλαση και διάθλαση όπως περιγράφηκε στο Κεφ. 2. Αυτή είναι και χαρακτηριστική περιοχή όλων των μονωτών.

(2) $\omega \approx \omega_0, \varepsilon_2, \kappa \gg 1$ (περιοχή A). Η απορρόφηση είναι ισχυρή, και άρα το υλικό εμφανίζεται αδιαφανές. Το εύρος αυτής της περιοχής είναι 2γ .

(3) $\omega > \omega_0, \varepsilon_1 < 0, \varepsilon_1, n \approx 0, \kappa \gg 1$ (περιοχή R). Το πραγματικό μέρος της διηλεκτρικής συνάρτησης εδώ είναι αρνητικό, ενώ το φανταστικό είναι μικρό. Αντίστοιχα για τον δείκτη διάθλασης, το πραγματικό μέρος είναι πολύ μικρό και το

φανταστικό πολύ μεγάλο. Το μεγάλο κ υποδηλώνει ότι το κύμα φθίνει εκθετικά πολύ γρήγορα μέσα στο υλικό. Από την Εξ. 7.18 βλέπουμε ότι ο συντελεστής ανάκλασης για πολύ μικρό n τείνει στην μονάδα. Άρα η ισχυρή εξασθένηση δεν σχετίζεται με ισχυρή απορρόφηση αλλά με ισχυρή ανάκλαση. Το εύρος αυτής της περιοχής είναι μέχρι το σημείο όπου $\varepsilon_1 = 0$. Το υλικό είναι τελείως αδιαφανές και αντανακλάει ισχυρά το φως. Η φυσική ερμηνεία είναι ότι τα ηλεκτρόνια ταλαντώνονται αρκετά γρήγορα ώστε να μην νοιώθουν πια την δύναμη επαναφοράς¹ και να συμπεριφέρονται ως ελεύθερα. Όπως θα δούμε παρακάτω, τα ελεύθερα ηλεκτρόνια αντιδρούν στο εισερχόμενο πεδίο και πολώνονται έτσι ώστε να το αντισταθμίζουν (είναι σε διαφορά φάσης π) και το πεδίο μέσα στον αγωγό να είναι μηδέν. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα το κύμα να μην μπορεί να εισέλθει στο υλικό και να ανακλάται ισχυρά. Σε αυτή την περιοχή λοιπόν το υλικό συμπεριφέρεται παρόμοια με ένα μέταλλο.

(4) $\omega \gg \omega_0$, $\varepsilon_1, n \rightarrow 1$, $\varepsilon_2, \kappa \approx 0$ (περιοχή T). Το υλικό και πάλι εμφανίζεται διαφανές, καθώς τα ηλεκτρόνια είναι πλέον ανήμπορα να παρακολουθήσουν τις γρήγορες ταλαντώσεις του φωτός, και άρα δεν προκαλούν πια διασκεδασμό. Τα ε_1, n τείνουν προς την μονάδα, δηλ. τις τιμές που θα έπερναν στο κενό. Όλα τα υλικά εμφανίζονται διαφανή στις μεγάλες συχνότητες, π.χ. ακόμα και τα μέταλλα είναι διαφανή στις ακτίνες Χ.

7.3. Διηλεκτρικά

Στα παραπάνω λάβαμε υπόψη μόνο ένα ηλεκτρονικό τροχιακό. Στα πραγματικά διηλεκτρικά υλικά όμως υπάρχουν πολλά τροχιακά. Η συνεισφορά του κάθε τροχιακού συνεισφέρει από έναν όρο ταλαντωτή *Lorentz* στην Εξ. 7.9, δηλ.

$$\varepsilon = 1 + \frac{4\pi e^2}{m} \sum_j \frac{N_j}{\omega_{0j}^2 - \omega^2 - i\gamma_j \omega} \quad (7.20)$$

όπου N_j είναι η πυκνότητα ηλεκτρονίων με συχνότητα συντονισμού ω_{0j} και ισχύει ο κανόνας του αθροίσματος

$$\sum_j N_j = N_T \quad (7.21)$$

όπου N_T είναι η συνολική πυκνότητα δέσμιων ηλεκτρονίων $N_T = N \cdot Z$, όπου N η ατομική πυκνότητα και Z ο αριθμός ηλεκτρονίων σε κάθε άτομο.

Διηλεκτρικά υλικά χαρακτηρίζονται αυτά τα οποία η ελάχιστη συχνότητα συντονισμού είναι μεγαλύτερη από τις οπτικές συχνότητες. Είναι δηλαδή τα υλικά τα οποία για οπτικές συχνότητες έχουν μηδαμινή απορρόφηση και ο δείκτης διάθλασης επιδεικνύει ελάχιστη διασπορά. Τέτοια είναι διάφορα οξειδία, ιοντικοί

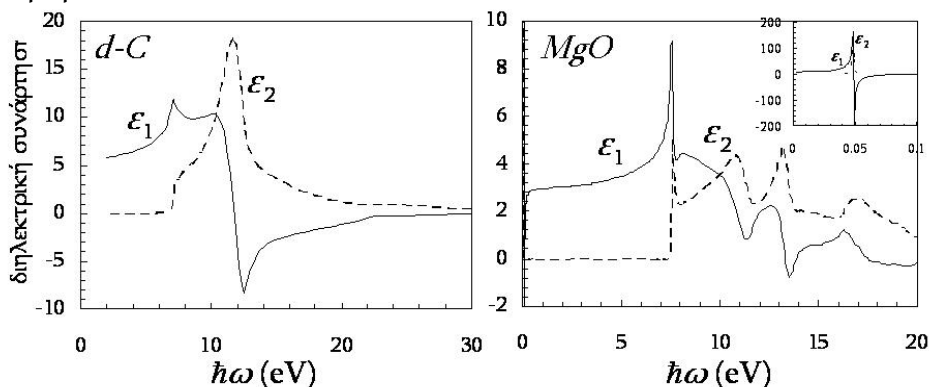
¹ λόγω της μη μηδενικής μάζας αδρανείας του ηλεκτρονίου, το ηλεκτρονικό νέφος δεν προλαβαίνει να τεντωθεί αρκετά μέχρι την κατάσταση πόλωσης που επιβάλλει το πεδίο, πριν η φορά του πεδίου έχει αλλάξει φορά.

κρύσταλλοι, και γενικά οποιουδήποτε υλικού με μη-ελεύθερα ηλεκτρόνια (ομοιοπολικοί ή/και ιοντικοί δεσμοί) με μεγάλο χάσμα ζώνης.

Μέχρι τώρα μιλήσαμε μόνο για την συνεισφορά των ηλεκτρονίων. Οι συνήθεις συχνότητες στις οποίες εμφανίζεται είναι οι οπτικές και οι υπεριώδης. Υπάρχουν και άλλες δύο συνεισφορές που σχετίζονται με τα ιόντα. Η πρώτη έχει να κάνει με την διέγερση ταλαντώσεων πλέγματος (φωνόνια) σε ιοντικούς κρυστάλλους. Το ηλεκτρικό πεδίο του εισερχόμενου κύματος σπρώχνει σε αντίθετες κατευθύνσεις τα δύο διαφορετικά ιόντα, και η δύναμη επαναφοράς είναι τώρα η δύναμη *Coulomb* μεταξύ των ιόντων. Η ίδια Εξ. 7.1 ισχύει και εδώ, με την διαφορά ότι η μάζα m σχετίζεται τώρα με την ανηγμένη μάζα των ιόντων, η ιδιοσυχνότητα $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ με την δύναμη επαναφοράς k (*Coulomb*), και η σταθερά γ με τον ρυθμό απώλειας της ενέργειας των ταλαντώσεων πλέγματος (τριβή, μη-αρμονική συμπεριφορά κτλ). Το αποτέλεσμα είναι και πάλι απορρόφηση και διασκεδασμός του φωτός. Οι χαρακτηριστικές συχνότητες που αυτό εμφανίζεται είναι στο υπεριώδες, λόγω των κατά πολύ μεγαλύτερων μαζών των ιόντων.

Η δεύτερη έχει να κάνει με υλικά με μόρια που έχουν μια μόνιμη διπολική ροπή, οι οποίες τείνουν να στραφούν κατά την φορά του ηλεκτρικού πεδίου του κύματος. Οι σταθερές της Εξ. 7.1 έχουν και εδώ τον ανάλογο ορισμό: η μάζα είναι η περιστροφική μάζα αδράνειας του μορίου, και η δύναμη επαναφοράς είναι η ροπή που ασκεί ο υπόλοιπος κρύσταλλος στο περιστραμένο μόριο. Καθώς η μάζα αδράνειας και οι δυνάμεις επαναφοράς πολύ μικρές, αυτή η στροφή είναι πολύ αργή, και η χαρακτηριστική συχνότητα εμφανίζεται στα μικροκύματα.

Στο Σχ. 7.3 σχεδιάζεται η διηλεκτρική συνάρτηση για δύο μονωτές, το διαμάντι και το οξείδιο του μαγνησίου. Το πρώτο αποτελείται από ισχυρούς ομοιοπολικούς δεσμούς, και η απορρόφηση δεν ξεκινάει πριν περίπου τα 6 eV. Το δεύτερο είναι ιοντικός κρύσταλλος και έχει την χαρακτηριστική συνεισφορά των φωνονίων στο υπέρυθρο. Παρατηρήστε τις πολύ μεγάλες τιμές που πέρνει η διηλεκτρική συνάρτηση.

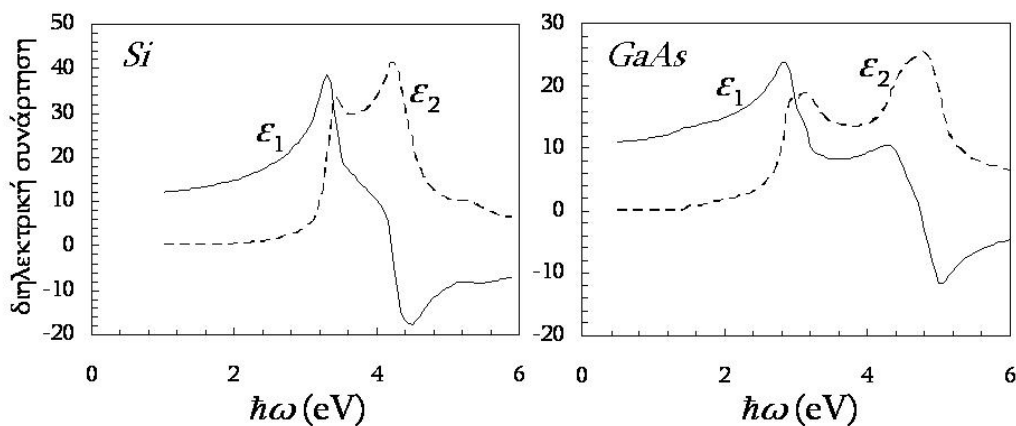


Σχήμα 7.3. Η διηλεκτρική συνάρτηση του διαμαντιού (αριστερά) και του οξειδίου του μαγνησίου (δεξιά). Στο ένθετο είναι η απόκριση λόγω οπτικών φωνονίων στον ιοντικό κρύσταλλο MgO.

7.4. Ημιαγωγοί

Οι Εξ. 7.20 και 7.21 παρ' όλο που αποδείχτηκαν μέσω του μονέλου του κλασσικού ταλαντωτή, έχουν μια καλή αντιστοιχία με την πραγματική κβαντική εικόνα. Η απορρόφηση ενός φωτονίου συνεδεύεται απο την μετάβαση ενός ηλεκτρονίου σε μια στάθμη υψηλότερης ενέργειας, εφ' όσον αυτή η μετάβαση είναι επιτρεπτή. Η συχνότητα ω_{0j} αντιστοιχεί ακριβώς σε μία από αυτές τις επιτρεπτές ηλεκτρονικές μεταβάσεις μεταξύ διαφορετικών σταθμών με διαφορά ενεργειών $\Delta E_j = \hbar\omega_{0j}$. Έτσι, με το κλασσικό μοντέλο *Lorentz* έχουμε έναν τρόπο να εισάγουμε όλες τις ηλεκτρονικές μεταβάσεις που προκαλούν απορρόφηση: σε κάθε μετάβαση αντιστοιχούμε και έναν ταλαντωτή με την κατάλληλη ιδιοσυχνότητα. Το μοντέλο *Lorentz* δηλ. δεν περιγράφει την κίνηση των ηλεκτρονίων καθ' αυτών, αλλά τις μεταπτώσεις τους απο την μια στάθμη στην άλλη.

Χρησιμοποιώντας την παραπάνω αναλογία, θα μπορούσε ένας ημιαγωγός με χάσμα ζώνης E_g σε πρώτη προσέγγιση να περιγραφεί απο έναν ταλαντωτή *Lorentz* με συχνότητα $\omega_0 = E_g / \hbar$. Στην πράξη όμως δεν μπορούμε να αγνοήσουμε την συνεισφορά όλων των άλλων μεταβάσεων και πολώσεων, καθώς πολλές φορές αυτές καθορίζουν την τελική μορφή της διηλεκτρικής συνάρτησης. Σαν παράδειγμα στο Σχ.7.4 σχεδιάζουμε την διηλεκτρική συνάρτηση δύο ημιαγωγών, του Si και του GaAs. Τα ενεργειακά τους χάσματα είναι στα 1.1 και 1.5 eV αντίστοιχα. Παρατηρήστε οτι η συνεισφορά των χασμάτων είναι πολύ μικρή (ιδίως στο Si που όπως θα δούμε παρακάτω δεν έχει άμμεσο χάσμα, στο GaAs μπορεί να παρατηρηθεί μια μικρή συνεισφορά στα 1.5 eV), και η διηλεκτρική συνάρτηση καθορίζεται επι το πλείστον απο διεγέρσεις σε μεγαλύτερες ενέργειες. Τους ημιαγωγούς και τις φωτονικές τους εφαρμογές θα τις εξετάσουμε σε περισσότερο βάθος στο επόμενο κεφάλαιο.



Σχήμα 7.4. Η διηλεκτρικές συναρτήσεις για τους ημιαγωγούς Si και το GaAs.

7.5. Μέταλλα

Η κύρια συνεισφορά στα μέταλλα έρχεται απο τα ελεύθερα ηλεκτρόνια. Καθώς δεν υπάρχει η δύναμη επαναφοράς, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε το μοντέλο Lorentz με $\omega_0 = 0$

$$\varepsilon = 1 - \frac{4\pi N e^2}{m} \frac{1}{\omega^2 + i\gamma\omega} \quad (7.22)$$

όπου τώρα το N είναι η πυκνότητα των ελεύθερων ηλεκτρονίων. Η σταθερά τριβής γ προκύπτει απο τους διάφορους μηχανισμούς σκέδασης των ηλεκτρονίων: ατέλειες κρυστάλλου, φωνόνια, κτλ. Συνήθως για ηλεκτρόνια αγωγιμότητας χρησιμοποιούμε τον μέσο χρόνο χαλάρωσης $\tau = 1/\gamma$, οπότε θα το ακολουθήσουμε και εδώ. Ορίζουμε την συχνότητα πλάσματος

$$\omega_p = \left(\frac{4\pi N e^2}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (7.23)$$

οπότε η διηλεκτρική συνάρτηση γράφεται

$$\varepsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega/\tau} \quad (7.24)$$

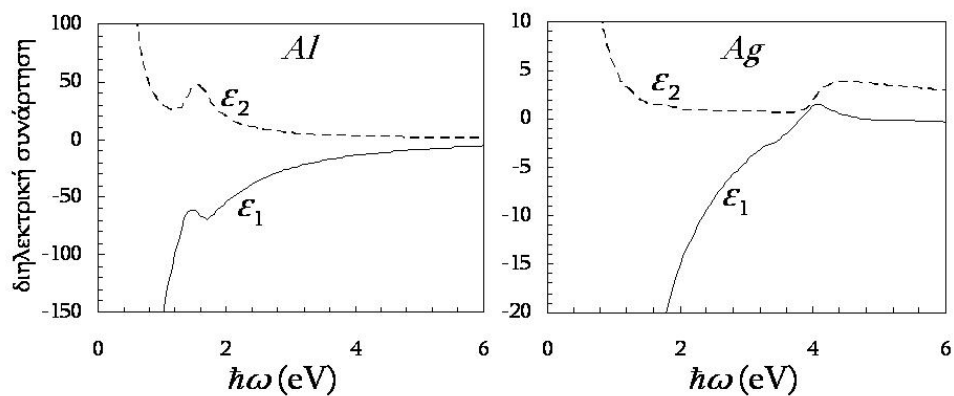
Αυτό είναι το μοντέλο Drude για την διηλεκτρική συνάρτηση των μετάλλων. Καθώς μιλάμε για ελεύθερα ηλεκτρόνια (αγωγιμότητας) είναι προφανές οτι η διηλεκτρική σταθερά σχετίζεται με την ηλεκτρική αντίσταση του μετάλλου. Θα διερευνήσουμε αυτήν την συσχέτιση σε περισσότερο βάθος στο κεφάλαιο 9 όπου μελετάμε πλασματικά υλικά και διατάξεις.

Για συχνότητες μικρότερες της συχνότητας πλάσματος η διηλεκτρική σταθερά είναι αρνητική. Συνάμα, το πραγματικό μέρος του δείκτη διάθλασης πλησιάζει το μηδέν, ενώ το φανταστικό γίνεται πολύ μεγάλο. Σε αυτή την περιοχή ένα προσπίπτων κύμα δεν μπορεί να διαδοθεί και υφίσταται πολύ ισχυρή ανάκλαση. Αυτό είναι κάτι απο την κοινή μας εμπειρία οτι τα μέταλλα ανακλούν ισχυρά το φως. Ο λόγος είναι οτι τα ηλεκτρόνια κινούνται πολύ γρήγορα σε ανταπόκριση του εισερχόμενου πεδίου προσπαθώντας να αντιδράσουν σε αυτό, έτσι ώστε το πεδίο μέσα στο μέταλλο να είναι μηδέν, με αποτέλεσμα την ισχυρή ανάκλασή του.

Για $\omega = \omega_p$ η διηλεκτρική συνάρτηση γίνεται σχεδόν μηδέν (εάν υποθέσουμε το τ αρκετά μεγάλο), και κύματα υφίστανται ισχυρή απορρόφηση. Ο λόγος είναι οτι σ' αυτήν την συχνότητα το κύμα επάγει σύμφωνες ταλαντώσεις πλάσματος, τα λεγόμενα πλασμόνια. Θα τα εξετάσουμε σε πιο μεγάλο βάθος στο Κεφ. 9. Για συχνότητες πάνω απο την συχνότητα πλάσματος η διηλεκτρική σταθερά είναι θετική και το μέταλλο είναι σχετικά διάφανο στην ακτινοβολία. Ο λόγος είναι οτι η ταλάντωση του πεδίου του εισερχόμενου κύματος είναι αρκετά γρήγορη ώστε τα ηλεκτρόνια, λόγω της μη-μηδενικής μάζας τους, δεν μπορούν πια να την ακολουθήσουν και άρα σταματούν να αλληλεπιδρούν μαζί της.

Η διέγερση των ελεύθερων ηλεκτρονίων (αγωγιμότητας) όπως περιγράφηκε παραπάνω συνίσταται ουσιαστικά σε ενδοζωνικές διεγέρσεις: τα ηλεκτρόνια υπό την επίδραση του εξωτερικού πεδίου μεταπηδούν σε άλλες επιτρεπτές καταστάσεις της ίδιας ζώνης (αγωγιμότητας). Παρόλο που αυτή είναι πολύ σημαντική συνεισφορά στην διηλεκτρική συνάρτηση του μετάλλου, δεν πρέπει να αγνοούμε και τις εξωζωνικές μεταβάσεις. Αυτές είναι ουσιαστικά μεταβάσεις που ξεκινάνε από τις εσωτερικές στοιβάδες προς την ζώνη αγωγιμότητας. Ένα πλήρες μοντέλο για την διηλεκτρική συνάρτηση πρέπει να συνδιάζει το μοντέλο Drude της Εξ. 7.24 με τους αναγκαίους ταλαντωτές Lorentz για τις εξωζωνικές μεταβάσεις.

Προφανώς υπάρχει μια ελάχιστη ενέργεια, αναλόγως το μέταλλο, πριν ξεκινήσουν αυτές οι μεταβάσεις. Για συχνότητες πάνω από το εξωζωνικό ελάχιστο η απορρόφηση θα αυξηθεί σημαντικά, και το μέταλλο θα πάψει να έχει την ιδιότητα της πλήρους ανάκλασης. Εάν το όριο πέφτει στο υπερίωδες, τότε το μέταλλο θα αντανακλάει σε όλο το ορατό φάσμα και θα έχει το χαρακτηριστικό ασημί χρώμα. Εάν το όριο πέφτει στο υπέρυθρο, τότε θα απορροφάει ισχυρά όλες τις συχνότητες και θα εμφανίζεται μελανό. Εάν τέλος το όριο πέφτει μέσα στο ορατό, τότε θα απορροφά τις συχνότητες πάνω από το όριο και θα αντανακλά αυτές κάτω του ορίου. Αυτός είναι και ο λόγος που κάποια μέταλλα εμφανίζουν χρώμα, π.χ. στον χρυσό οι εξωζωνικές μεταβάσεις αρχίζουν στο μπλέ το οποίο και άρα απορροφάται ισχυρά, αντανακλώντας τα υπόλοιπα χρώματα που παίρνουν το κίτρινο χρώμα, ή το τον χαλκό, του οποίου οι εξωζωνικές μεταβάσεις αρχίζουν στο πράσινο, και άρα απορροφά το μπλέ και το πράσινο αντανακλώντας ισχυρά το κόκκινο. Στο Σχ. 7.5 σχεδιάζεται η διηλεκτρική σταθερά των δύο καλύτερων μετάλλων από άποψη ανακλαστικότητας, του Al και του Ag.



Σχήμα 7.5. Οι διηλεκτρικές συναρτήσεις για τα μέταλλα αλουμίνιο και άργυρο.

8. ΗΜΙΑΓΩΓΟΙ

Οι ημιαγωγοί είναι η πλέον σημαντικότερη κατηγορία υλικών όσο αναφορά την σύγχρονη ηλεκτρονική τεχνολογία. Η χρησιμότητά τους είναι μικρότερη και στις σύγχρονες φωτονικές τεχνολογίες. Κυρίως σε εφαρμογές δημιουργίας και ανίχνευσης φωτός, αλλά και σαν μέσο επεξεργασίας για συχνότητες κάτω από το χαρακτηριστικό ενεργειακό χάσμα. Θα επαναλάβουμε περιληπτικά λοιπόν τις βασικές τους ιδιότητες σε αυτό το κεφάλαιο.

8.1. Ηλεκτρονική δομή

Δύο συστήματα υλικών κυριαρχούν στις εφαρμογές:

- (α) ανόργανοι ημιαγωγοί με απεντοπισμένα ηλεκτρόνια και οπές
- (β) συζευγμένα οργανικά μόρια με απεντοπισμένα π -τροχιακά

Σε αυτό το κεφάλαιο θα ασχοληθούμε μόνο με την πρώτη κατηγορία καθώς είναι τα πιο διαδεδομένα οπτο-ηλεκτρονικά υλικά. Η ηλεκτρονική δομή ενός ημιαγωγού αποτελείται από ενεργειακές ζώνες οι οποίες απορρέουν από την περιοδική επαλληλία των αντίστοιχων ατομικών τροχιακών. Σε μηδέν απόλυτη θερμοκρασία, τα ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν όλες τις πιθανές θέσεις της τελευταίας ζώνης, την λεγόμενη *ζώνη σθένους*. Η επόμενη ζώνη ενεργειακών καταστάσεων, η λεγόμενη *ζώνη αγωγιμότητας*, παραμένει άδεια (βλ. Σχ. 8.1 για $T=0$). Σε μηδενική θερμοκρασία ο ημιαγωγός συμπεριφέρεται σαν μονωτής: η ζώνη σθένους είναι γεμάτη και τα ηλεκτρόνια δεν μπορούν να αλλάξουν κατάσταση (είναι όλες κατειλημένες), δηλαδή δεν μπορεί να μεταβληθεί η κίνησή τους ακόμα και κατά την εφαρμογή ηλεκτρικού πεδίου.

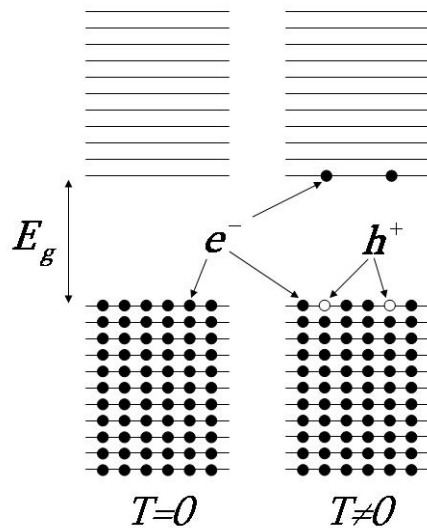
Αυτό αλλάζει όταν η θερμοκρασία αυξηθεί ($T \neq 0$): ηλεκτρόνια μπορούν να μεταπηδήσουν στην ζώνη αγωγιμότητας, αφήνοντας πίσω κενές θέσεις. Το ποσοστό των ηλεκτρονίων που μεταπηδούν καθορίζεται από την *κατανομή Boltzmann* $\Delta N / N = e^{-E_g / 2k_B T}$. Σε πεπερασμένη θερμοκρασία τα ηλεκτρόνια στην ζώνη αγωγιμότητας είναι λίγα, και οι πιθανές καταστάσεις που μπορούν να βρεθούν πολλές. Άρα εν γένει συμπεριφέρονται σαν ελεύθερα ηλεκτρόνια.

Με την εφαρμογή ενός εξωτερικού πεδίου μπορούν να αλλάξουν κινητική κατάσταση δημιουργώντας ηλεκτρικό ρεύμα. Όσο αυξάνει η θερμοκρασία, τόσο αυξάνουν τα ηλεκτρόνια που μεταπηδούν στην ζώνη αγωγιμότητας και άρα τόσο αυξάνει η ηλεκτρική αγωγιμότητα.

Η μεταφορά ενός ηλεκτρονίου την ζώνη αγωγιμότητας αφήνει μια κενή κατάσταση (οπή) στην ζώνη σθένους. Αυτό σημαίνει ότι τώρα τα ηλεκτρόνια της ζώνης σθένους μπορούν να αλλάξουν την κατάστασή τους (υπάρχουν κενές θέσεις) συνεισφέροντας έτσι σε κάποια επιπλέον αγωγιμότητα. Η κίνηση αυτή των ηλεκτρονίων στην ζώνη σθένους περιγράφεται καλύτερα ως την κίνηση που κάνουν μια κενή θέση. Το ηλεκτρονικό αυτό κενό ονομάζεται *οπή (hole)* και περιγράφεται

με σωματιδιακούς όρους: συμβολίζεται με \hbar , έχει θετικό φορτίο $+e$ και κάποια ενεργό μάζα m_h^* .

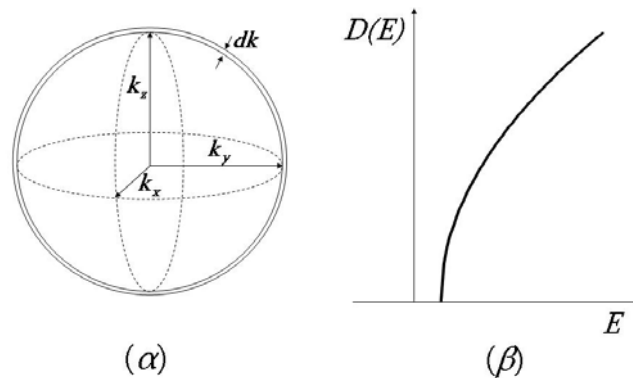
Ένας άλλος τρόπος δημιουργίας ελεύθερων ηλεκτρονίων στην ζώνη αγωγιμότητας είναι η προσθήκη προσμίξεων που λειτουργούν ως δότες ηλεκτρονίων. Επίσης μπορούμε να δημιουργήσουμε οπές στην ζώνη σθένους με προσθήκη προσμίξεων που λειτουργούν ως δέκτες ηλεκτρονίων.



Σχήμα 8.1. Σε μηδέν απόλυτη θερμοκρασία η ζώνη αγωγιμότητας είναι άδεια και ο ημιαγωγός συμπεριφέρεται σαν μονωτής. Για πεπερασμένη θερμοκρασία ηλεκτρόνια μεταβαίνουν στην ζώνη αγωγιμότητας. Το κενό που αφήνουν πίσω συμπεριφέρεται σαν σωματίδιο και ονομάζεται οπή. Και τα δύο συνισφέρουν στην αγωγιμότητα.

Τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας και οι οπές συμπεριφέρονται σε πρώτη προσέγγιση ως ελεύθερα σωματίδια. Για τα ελεύθερα σωματίδια η σχέση ενέργειας-ορμής δίνεται από την $E = \hbar^2 k^2 / 2m$, όπου χρησιμοποιήσαμε την $p = \hbar k$. Αυτή η σχέση δίδεται στο Σχ. 8.2. Μπορούμε να υπολογίσουμε την πυκνότητα καταστάσεων ως συνάρτηση της ενέργειας. Ο αριθμός καταστάσεων στον σφαιρικό φλοιό του Σχ. 8.2.α είναι $dN(k) \propto k^2 dk$. Για να το μετατρέψουμε σε όρους ενέργειας $dN(E)$ χρησιμοποιούμε τις σχέσεις $k \propto \sqrt{E}$, $dk \propto dE / \sqrt{E}$. Η πυκνότητα καταστάσεων $D(E)$ ορίζεται ως το ηλίκο $dN(E) / dE$ και προκύπτει

$$D(E) = \frac{dN(E)}{dE} \propto \sqrt{E} \quad (8.1)$$



Σχήμα 8.2. α) Ο χώρος φάσεων για τρισδιάστατο αέριο ηλεκτρονίων είναι μια σφαίρα. β) Η πυκνότητα καταστάσεων είναι ανάλογη της τετραγωνικής ρίζας της ενέργειας.

Στην πραγματικότητα τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας και οι οπές δεν είναι πλήρως ελεύθερα, αλλά υφίστανται την επίδραση του περιοδικού δυναμικού του κρυστάλλου. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα μια διαφοροποίηση της κίνησής τους, η οποία μπορεί να συμπεριληφθεί εύκολα με έναν επαναπροσδιορισμό της μάζας τους. Ορίζουμε λοιπόν τις ενεργές μάζες m_e^* και m_h^* . Οι αντίστοιχες ενέργειες των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας και οπών κοντά στο ελάχιστο και μέγιστο των αντίστοιχων ζωνών είναι

$$E_e = E_c + \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m_e^*} \quad \text{και} \quad E_h = E_v + \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_h^*} \quad (8.2)$$

όπου η ενεργή μάζα της οπής (δηλ. της απουσίας ενός ηλεκτρονίου) είναι αρνητική. Όταν η δομή των ζωνών είναι γνωστή, μπορούμε να υπολογίσουμε τις ενεργές μάζες από τις Εξ. 8.2 ως:

$$m^* = \hbar^2 / (\partial^2 E / \partial k^2) \quad (8.3)$$

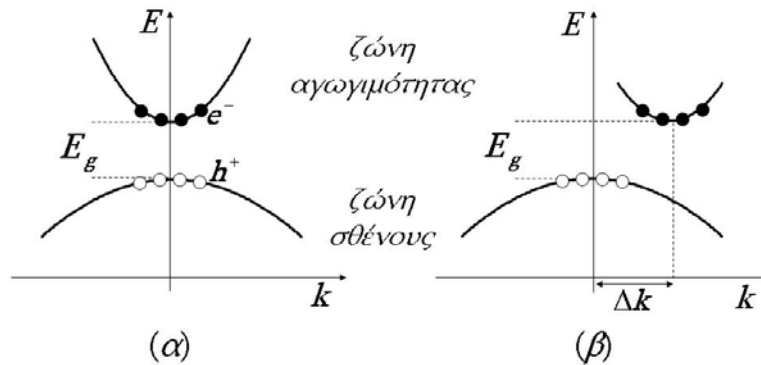
8.2. Οπτικές ιδιότητες

Ανάλογα με την σχετική θέση του ελάχιστου της ζώνης αγωγιμότητας και του μέγιστου της ζώνης σθένους, ξεχωρίζουμε δύο πιθανότητες:

(α) είναι στο ίδιο k (στο $k=0$) και ονομάζονται *ημιαγωγοί ευθέως χάσματος*

(β) είναι σε διαφορετικά k , και ονομάζονται *ημιαγωγοί μη-ευθέως χάσματος*

Οι δύο δομές ζώνης απεικονίζονται στο Σχ. 8.3. Παραδείγματα ημιαγωγών ευθέως χάσματος είναι οι *GaAs*, *GaN*, *InP* και τα τριαδικά τους με *Al* και *In*. Παραδείγματα ημιαγωγών μη-ευθέως χάσματος είναι οι *Si*, *Ge*, *AlAs*, *GaP*, *AlP*.



Σχήμα 8.3. Υπάρχουν εν γένει δύο ειδών ημιαγωγών αναλόγως με το αν το μέγιστο της ζώνης σθένους και το ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας συμπίπτουν στο ίδιο k : α) ευθέως χάσματος και β) μη-ευθέως χάσματος.

Η σχετική θέση των δύο ζωνών είναι υψίστης σημασίας σε ότι αναφορά τις οπτικές ιδιότητες των ημιαγωγών. Η μετάβαση ενός ηλεκτρονίου από την μία στάθμη στην άλλη μπορεί να γίνει με την ανταλλαγή ενός φωτονίου, εάν υπακούονται οι κανόνες διατήρησης ορμής και ενέργειας

(α) Διατήρηση ενέργειας: Η ενέργεια του φωτονίου είναι $E = \hbar\omega$, και πρέπει να είναι ίση με την διαφορά των ενεργειακών σταθμών. Η ελάχιστη τιμή διαφοράς ενέργειας είναι όταν το ηλεκτρόνιο ξεκίνησε από την κορυφή της ζώνης σθένους. Τότε, η συνθήκη διατήρησης της ενέργειας γίνεται

$$\hbar\omega = E_g \quad (8.4)$$

Τιμές ενεργειακού χάσματος σε ημιαγωγούς κυμαίνονται μεταξύ 0.175eV ($InSb$) και 6.2eV (AlN). Τα μήκη κύματος ακτινοβολίας που αντιστοιχούν σε αυτές τις ενέργειες βρίσκεται χρησιμοποιώντας την Εξ. 8.4 και την $\lambda = c/\nu = 2\pi c/\omega$. Μετατρέποντας όλες τις μονάδες βρίσκουμε μια χρήσιμη σχέση που συνδέει το μήκος κύματος σε νανόμετρα και το ενεργειακό χάσμα σε eV

$$\lambda \cong \frac{1240}{E_g} \text{ nm} \quad (8.5)$$

Χρησιμοποιώντας τις Εξ. 8.4 και 8.5 βρίσκουμε ότι τα μήκη κύματος ακτινοβολίας που αντιστοιχούν σε μετάβαση ηλεκτρονίου από το ενεργειακό χάσμα κυμαίνονται μεταξύ του υπέρυθρου 7.085nm ($InSb$) και του υπεριώδους 200nm (AlN).

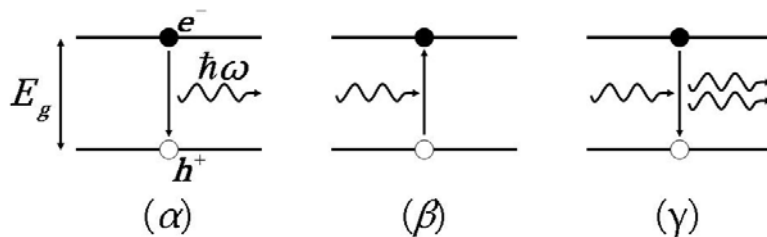
(β) Διατήρησης ορμής: Η ορμή του φωτονίου είναι πολύ μικρή, καθότι έχει μηδενική μάζα. Σε πρώτη προσέγγιση την θεωρούμε μηδέν. Άρα για να διατηρείται η συνολική ορμή, θα πρέπει το ηλεκτρόνιο που μεταβαίνει από την μία στάθμη στην άλλη με την συμμετοχή ενός φωτονίου, να μην αλλάζει την κατάσταση ορμής του. Εάν αυτό δεν είναι δυνατό (όπως στους ημιαγωγούς μη-ευθέως χάσματος), τότε είναι απαραίτητη η συμμετοχή ενός φωνονίου. Τέτοιες μεταβάσεις όμως έχουν πολύ

μικρότερη πιθανότητα, οπότε στην πράξη οι μόνες μεταβάσεις που ουσιαστικά λαμβάνουν χώρα είναι αυτές που είναι κάθετες στο ενεργειακό διάγραμμα ζώνης.

Άρα ηλεκτρονικές μεταβάσεις με συμμετοχή φωτονίων μεταξύ του ενεργειακού χάσματος είναι σημαντικές μόνο στους ημιαγωγούς ευθέως χάσματος. Για αυτόν τον λόγο οι ημιαγωγοί ευθέως χάσματος είναι αυτοί που συνήθως χρησιμοποιούνται σε οπτο-ηλεκτρονικές εφαρμογές που αφορούν εκπομπή φωτός. Μεταβάσεις επιτρέπονται και στους ημιαγωγούς μη-ευθέως χάσματος, αλλά με τροποποιήσεις: μεταβάσεις σε υψηλότερες στάθμες ή ταυτόχρονη συμμετοχή φωτονίου και φωνονίου¹. Η πιθανότητα για τέτοιου είδους μεταβάσεις όμως είναι σχετικά μικρή, οπότε δεν είναι βολικές για πρακτικές εφαρμογές.

Στο εξής υποθέτουμε μόνο ημιαγωγούς ευθέως χάσματος. Μπορούμε να χωρίσουμε τις ηλεκτρονικές μεταβάσεις σε τρεις κατηγορίες, ανάλογα με τον ρόλο που παίζει το φωτόνιο (και άρα την οπτική απόκριση).

- (α) αυθόρμητη εκπομπή
- (β) απορρόφηση
- (γ) εξαναγκασμένη εκπομπή



Σχήμα 8.4. Τρεις τρόποι αλληλεπίδρασης ημιαγωγού με φως: α) αυθόρμητη εκπομπή, β) απορρόφηση, γ) εξαναγκασμένη εκπομπή.

Αυτές φαίνονται στο Σχ. 8.4. Πιο συγκεκριμένα.

(α) Αυθόρμητη εκπομπή: ένα διεγερμένο ηλεκτρόνιο από την ζώνη αγωγιμότητας μεταπέφτει πίσω στην ζώνη σθένους με την εκπομπή ενός φωτονίου ενέργειας E_g . Κατά την μετάπτωση, το ηλεκτρόνιο συνενώνεται (καλύπτει) μια οπή στην ζώνη σθένους. Η πόλωση και φάση του φωτονίου είναι τυχαία.

(β) Απορρόφηση: ένα ηλεκτρόνιο διεγείρεται στην ζώνη αγωγιμότητας απορροφώντας ένα φωτόνιο ενέργειας E_g , αφήνοντας πίσω μια οπή στην ζώνη σθένους.

(γ) Εξαναγκασμένη εκπομπή: ένα διεγερμένο ηλεκτρόνιο από την ζώνη αγωγιμότητας μεταπέφτει πίσω στην ζώνη σθένους εξαναγκασμένο από ένα περαστικό φωτόνιο της κατάλληλης ενέργειας E_g . Κατά την μετάπτωση εκπέμπεται

¹ Το φωνόνιο είναι η κβαντισμένη διακύμανση των ατόμων ή ιόντων του κρυστάλλου, και συνεπώς είναι ικανό να κουβαλά πάνω του μεγάλη ποσότητα ορμής.

και ένα δεύτερο φωτόνιο, το οποίο έχει την ίδια ακριβώς πόλωση και φάση με το αρχικό.

Οι δύο πρώτες περιπτώσεις μπορούν απλά να ειπωθούν ως ένα παράδειγμα μετατροπής ενέργειας: ένα φωτόνιο μετατρέπεται σε ζεύγος ηλεκτρονίου-οπής, και αντίστροφα. Η τρίτη περίπτωση είναι αυτή που χρησιμοποιείται σε εφαρμογές laser και μπορεί να ειπωθεί στην κλασσική του αντιστοιχία ως εξής: το ηλεκτρικό πεδίο του περαστικού φωτονίου σπρώχνει το διεγερμένο ηλεκτρόνιο σε εξαναγκασμένη ταλάντωση, η οποία αυξάνει την πιθανότητα για μετάπτωση πίσω στην ζώνη σθένους. Η μετάβαση γίνεται σε συμφωνία με το πεδίο που την προκάλεσε, και άρα το εκπεμπόμενο φωτόνιο είναι σε συμφωνία με αυτό που το προκάλεσε.

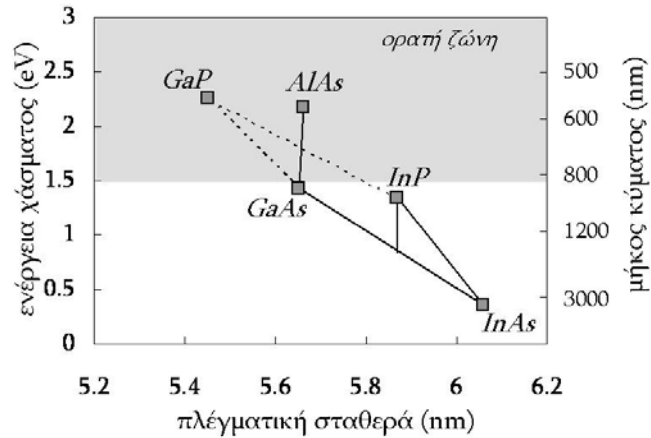
8.3. Υλικά συστήματα

Το μήκος κύματος του φωτονίου που αλληλεπιδρά με έναν ημιαγωγό εξαρτάται από το ενεργειακό χάσμα του ημιαγωγού $\omega \geq E_g / \hbar$. Στην περίπτωση που ο αριθμός των ηλεκτρονίων στην ζώνη αγωγιμότητας είναι μικρός και άρα αυτά βρίσκονται στο ελάχιστο της ζώνης, τότε ισχύει η ισότητα $\omega = E_g / \hbar$. Για πολλές εφαρμογές (όπως π.χ. μερικές *δίοδοι εκπομπής φωτός (LED)*) αυτή είναι και η πιο ενδιαφέρουσα περίπτωση. Είναι προφανές ότι για διαφορετικές εφαρμογές θα χρειάζεται διαφορετικό μήκος κύματος εκπομπής/απορρόφησης. Ένας τρόπος για να επιτευχθεί αυτό είναι με διαφοροποιήσεις της σύστασης του ημιαγωγού. Υπάρχουν διάφορα συστήματα υλικών που αποτελούν ημιαγωγούς. Τα δύο πλέον εμπορικά διαδεδομένα συστήματα υλικών ημιαγωγών είναι

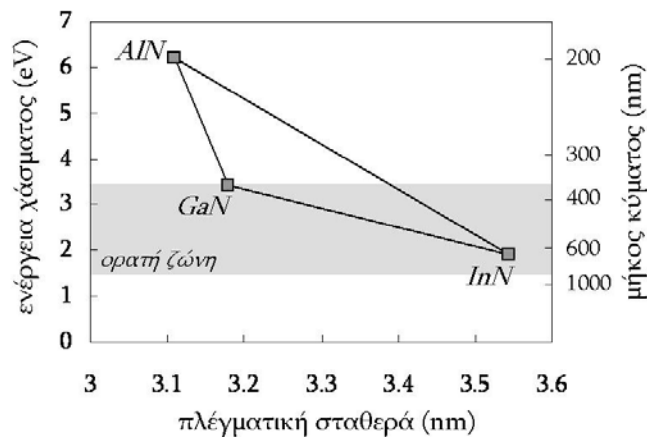
(α) **το σύστημα *AlInGaAsP*** : Η συχνότητα εκπομπής και απορρόφησης είναι στο κόκκινο χρώμα του οπτικού φάσματος και στο υπέρυθρο. Τριαδικά και τετραδικά συστήματα φτιάχνονται με προσμίξεις αλουμινίου (*Al*), ίνδιου (*In*) και φωσφόρου (*P*). Ως γενικός κανόνας μπορεί να λεχθεί ότι προσθήκη *Al* και *P* αυξάνει το μέγεθος του χάσματος, ενώ προσθήκη *In* το ελατώνει. Καθότι τα άτομα των προσμίξεων έχουν διαφορετικές ατομικές ακτίνες, η μέση πλεγματική σταθερά του υλικού που δημιουργείται αλλάζει ανάλογα με την σύσταση. Το διάγραμμα φάσεων του ενεργειακού χάσματος ως συνάρτηση της πλεγματικής σταθεράς για τα διάφορα τριαδικά και τετραδικά συστήματα δείχνεται στο Σχ. 8.5 Κάθε γραμμή στο διάγραμμα συμβολίζει μια συνεχή μεταβολή της σύστασης μεταξύ των δύο ακριανών σημείων. Προφανώς και όλες ενδιάμεσες συστάσεις μεταξύ των σχεδιασμένων γραμμών μπορούν να δημιουργηθούν.

(β) **το σύστημα *AlInGaN*** : Η συχνότητα εκπομπής και απορρόφησης είναι κυρίως στο μπλέ του ορατού φάσματος και στο υπεριώδες. Τριαδικά και τετραδικά συστήματα φτιάχνονται με προσμίξεις αλουμινίου (*Al*) και ίνδιου (*In*). Και εδώ ισχύει ο ίδιος κανόνας πρίν, προσθήκη *Al* αυξάνει το μέγεθος του χάσματος, ενώ προσθήκη *In* το ελατώνει. Το διάγραμμα φάσεων του ενεργειακού χάσματος ως

συνάρτηση της πλεγματικής σταθεράς για τα τριαδικά και τετραδικά συστήματα δείχνεται στο Σχ. 8.6.



Σχήμα 8.5. Το υλικό σύστημα $AlInGaAsP$.

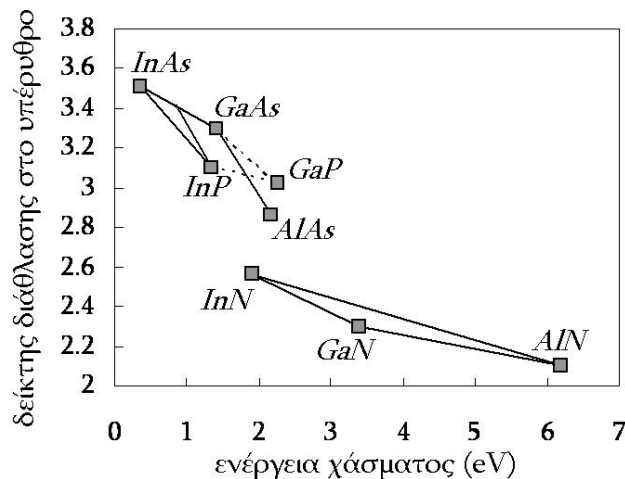


Σχήμα 8.6. Το υλικό σύστημα $AlInGaN$.

Κατά κανόνα, αύξηση της πλεγματικής σταθεράς συνοδεύεται απο μείωση του ενεργειακού χάσματος. Διαφορές στις πλεγματικές σταθερές μεταξύ ημιαγωγών είναι εξαιρετικά σημαντικές όταν θέλουμε να αναπτύξουμε διαφορετικές ενώσεις στο ίδιο σύστημα. Παράδειγμα αυτού είναι η εφαρμογή του laser κάθετης-κοιλότητας επιφανειακής-εκπομπής στο Κεφ. 4 όπου σχηματίσαμε διηλεκτρικός καθρέπτης Bragg απο την περιοδική ανάπτυξη στρωμάτων $GaAs$ και $AlAs$. Τα υλικά αυτά είναι συμβατά μεταξύ τους γιατί το σύστημα $Al_xGa_{1-x}As$ όπως φαίνεται στο Σχ. 8.5 έχει σχεδόν την ίδια πλεγματική σταθερά ανεξάρτητα της συγκέντρωσης του Al (δηλ. της τιμής του x). Εάν τα υλικά είχαν διαφορετική πλεγματική σταθερά, τότε με θα δημιουργόνταν ισχυρές μηχανικές τάσεις και η ανάπτυξη θα ήταν προβληματική.

Σε πολλές εφαρμογές είναι σημαντικό να ξέρουμε τον δείκτη διάθλασης του ημιαγωγού. Ποσοτικά αυτός είναι διαφορετικός για κάθε συχνότητα, αλλά η

ποιοτική του διαφορά μεταξύ διαφορετικών ημιαγωγών είναι σταθερή. Ένας γενικός κανόνας, όπως προκύπτει και απο το μοντέλο Lorentz του Κεφ. 6 είναι οτι για ένα συγκεκριμένο τριαδικό ή τετραδικό, αύξηση του χάσματος συνοδεύεται με αντίστοιχη μείωση του δείκτη διάθλασης (όσο πιο μεγάλο το χάσμα, τόσο μεγαλύτερη η αντίστοιχη συχνότητα ω_0 , τόσο πιο μακριά απο την συχνότητα που μελετάμε, άρα και τόσο μικρότερο το ϵ_1). Αυτό φαίνεται στο Σχ. 5.8, όπου ο δείκτης διάθλασης για κάθε υλικό είναι προσεγγιστικά υπολογισμένος στο υπέρυθρο.



Σχήμα 8.7. Δείκτης διάθλασης στο υπέρυθρο ως συνάρτηση του ενεργειακού χάσματος. Για οποιοδήποτε τριαδικό σύστημα αύξηση του ενός συνεπάγεται μείωση του άλλου.

8.4. Κβαντικός περιορισμός-πηγάδια, σύρματα, τελείες

Εκτός απο μεταβάλλοντας την σύσταση του ημιαγωγού, μπορούμε να αλλάξουμε την ηλεκτρονική δομή του μεταβάλλοντας τις διαστάσεις του. Όταν οι διαστάσεις είναι μικρότερες απο την μέση ελεύθερη διαδρομή των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας και των οπών, τότε τα ηλεκτρόνια και οι οπές θα αλλάξουν τις ενεργειακές τους ιδιοκαταστάσεις, όπως ακριβώς κάνει ένα κβαντικό σωματίδιο μέσα στο πηγάδι του δυναμικού. Οι μεταβάσεις εκπομπής και απορρόφησης δεν θα γίνονται πιά μεταξύ των ακροτάτων των ζωνών αγωγιμότητας και σθένους, αλλά μεταξύ των νέων κβαντισμένων ιδιοκαταστάσεων που δημιουργούνται λόγω του περιορισμού. Σε πρώτη προσέγγιση το αποτέλεσμα του περιορισμού σε κάθε διάσταση είναι ανεξάρτητη των άλλων διαστάσεων.

Διακρίνουμε τρεις περιπτώσεις κβαντικά περιορισμένων νανοδιατάξεων:

- (α) κβαντικά πηγάδια: περιορισμός σε μία διάσταση
- (β) κβαντικά σύρματα: περιορισμός σε δύο διαστάσεις
- (γ) κβαντικές τελείες: περιορισμός σε τρεις διαστάσεις

α) Κβαντικά πηγάδια: Στην πράξη αυτό επιτυγχάνεται δημιουργώντας ένα λεπτό στρώμα ημιαγωγού ανάμεσα σε δύο στρώματα ημιαγωγών με μεγαλύτερο

ενεργειακό χάσμα, για παράδειγμα $GaAs$ ανάμεσα σε $Al_xGa_{1-x}As$. Όσο μεγαλύτερη η διαφορά των ενεργειακών χασμάτων (δηλαδή όσο μεγαλώνει το ποσοστό x του Al), τόσο βαθύτερο το κβαντικό πηγάδι που δημιουργείται, και άρα περισσότερες οι επιτρεπτές δέσμιες καταστάσεις. Εάν θεωρήσουμε την διεύθυνση του περιορισμού την διεύθυνση z , τότε η ενέργεια των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας θα αποτελείται από δύο μέρη: ένα σχετιζόμενο με την ελεύθερή τους κίνηση στις άλλες δύο διευθύνσεις x και y , και μία σχετιζόμενη με τις κβαντισμένες ιδιοκαταστάσεις λόγω του περιορισμού στην διεύθυνση z . Έστω ότι το πλάτος του πηγαδιού είναι L_z . Θεωρώντας προσεγγιστικά ότι οι πρώτες ενεργειακές καταστάσεις είναι αυτές του πηγαδιού απείρου βάθους, βρίσκουμε τις ενεργειακές ιδιοτιμές των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας

$$E_n \cong E_c + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_e^*} + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m_e^*L_z^2} \quad (8.6)$$

Προφανώς η Εξ. 8.6 ισχύει μόνο για τις πρώτες στάθμες, δηλαδή για τα n όπου υπάρχει δέσμια κατάσταση (δηλαδή για $E < V$). Παρόμοια σχέση ισχύει για τις οπές, αντικαταστάοντας τα E_c , m_e^* με E_v , m_h^* . Για μεγαλύτερες ενέργειες ($E > V$) δεν υπάρχουν δέσμιες καταστάσεις και η ενέργεια ξαναπαίρνει την παραβολική μορφή $E \cong E_c + \hbar^2 |\vec{k}|^2 / 2m_e^*$.

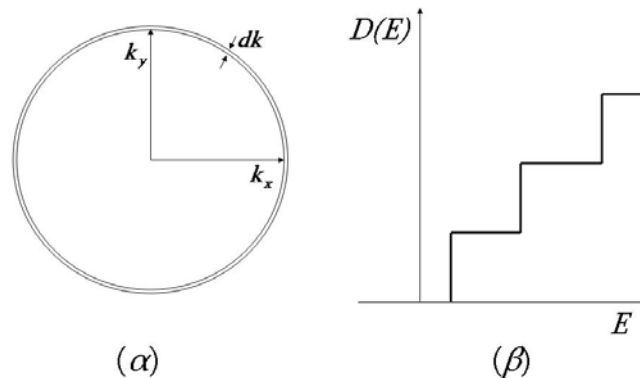
Σε κάθε τιμή του n υπάρχει ένα ελάχιστο ενέργειας για $k_x = k_y = 0$, και μετά αυξάνει βάσει του δεύτερου όρου στο δεξί μέρος της Εξ. 8.6. Ο αριθμός και η πυκνότητα καταστάσεων εξαρτώνται λοιπόν από τα k_x, k_y . Όπως και πριν υπολογίζουμε τον αριθμό των καταστάσεων στον δακτύλιο του Σχ. 8.8.α $dN^{(2)}(k) \propto kdk$, και χρησιμοποιούμε τα $k \propto \sqrt{E}$ και $dk \propto dE / \sqrt{E}$. Η πυκνότητα καταστάσεων στα κβαντικά πηγάδια για συγκεκριμένο n είναι

$$D^{(2)}(E) = \frac{dN^{(2)}(E)}{dE} = \text{σταθερά} \quad (8.7)$$

όπου ο δείκτης (2) υποδηλώνει ότι μόνο οι δύο διαστάσεις είναι ελεύθερες.

Για να είναι πλήρης η Εξ. 8.7, πρέπει να συμπεριλάβουμε το αποτέλεσμα του όταν η ενέργεια περνάει στο επόμενο n . Οι νέες ελεύθερες καταστάσεις του $n+1$ προστίθενται στις ήδη υπάρχουσες καταστάσεις του n (στις οποίες ήδη υπήρχαν αυτές του $n-1$ κοκ). Επειδή η συνεισφορά του κάθε n είναι σταθερή, το συνολικό αποτέλεσμα για την πυκνότητα καταστάσεων είναι η σκαλοειδής μορφή του Σχ. 8.8.β, όπου το κάθε σκαλοπάτι εμφανίζεται στην ενέργεια $\approx E_c + n^2\pi^2\hbar^2 / 2m_e^*L_z^2$ όπως προκύπτει από την Εξ. 8.6. Μια σημαντική αλλαγή στα κβαντικά πηγάδια εν συγκρίσει με τους ομοιογενείς ημιαγωγούς, είναι ότι η πυκνότητα καταστάσεων αυξάνεται απότομα στα σημεία όπου εμφανίζεται μια νέα υποστοιβάδα. Καθότι η δύναμη μιας οπτικής μετάβασης εξαρτάται γραμμικά από την πυκνότητα

καταστάσεων, αυτό έχει ως συνέπεια την ενίσχυση των οπτικών μεταβάσεων στα κβαντικά πηγάδια.



Σχήμα 8.8. α) χώρος φάσεων και β) πυκνότητα καταστάσεων για δισδιάστατο αέριο ηλεκτρονίων.

Οι ηλεκτρονικές μεταβάσεις τώρα δεν είναι πια μεταξύ των ζωνών σθένους και αγωγιμότητας, αλλά μεταξύ των επιτρεπτών καταστάσεων. Η ελάχιστη ενέργεια ηλεκτρονιοακής μετάβασης διαμέσου χάσματος είναι

$$E_g^{\text{ενεργό}} = E_C - E_V + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2L_z^2} \left(\frac{1}{m_e^*} - \frac{1}{m_h^*} \right) \quad (8.8)$$

Μεταπτώσεις μεταξύ διαφορετικών υποστοιβάδων (π.χ. από $n=3$ στην $n=2$) στην ζώνη αγωγιμότητας είναι τώρα επίσης επιτρεπτές. Τέτοιες μεταπτώσεις έχουν βρεί εφαρμογή σε Κβαντικά Λείζερ Καταράκτη (*Quantum Cascade Laser*), όπου τα ηλεκτρόνια μεταπέφτουν διαδοχικά από την στοιβάδα με το υψηλότερο επιτρεπτό n στην χαμηλότερη στοιβάδα με $n=1$. Λόγο της μικρής ενεργειακής απόστασης μεταξύ των υποστοιβάδων η εκπεμπόμενη ακτινοβολία σε αυτά τα συστήματα είναι στο υπέρυθρο.

β) Κβαντικά σύρματα: Τα κβαντικά σύρματα είναι συστήματα όπου ο κβαντικός περιορισμός επιβάλλεται σε δύο διαστάσεις. Ως συνέπεια, τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας συμπεριφέρονται ως ένα μονοδιάστατο αέριο. Έστω ότι ο περιορισμός είναι στις y και z διευθύνσεις. Οποιοδήποτε σχήμα της διατομής είναι πιθανό, αλλά η ανάλυση είναι σημαντικά απλούστερη για ορθογώνιο διατομή. Έστω λοιπόν ότι οι διαστάσεις είναι L_y και L_z στις y και z διευθύνσεις αντίστοιχα. Όπως και στα κβαντικά πηγάδια, η ενέργεια χωρίζεται σε δύο συνεισφορές, μια από τα ελεύθερα ηλεκτρόνια ή οπές στην x διεύθυνση, και μια από τις δέσμιες καταστάσεις στην y και z διεύθυνση. Οι ενεργειακές καταστάσεις ηλεκτρονίων στα κβαντικά σύρματα

$$E_{n,m} \cong E_c + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e^*} + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m_e^* L_z^2} + \frac{m^2 \pi^2 \hbar^2}{2m_e^* L_y^2} \quad (8.9)$$

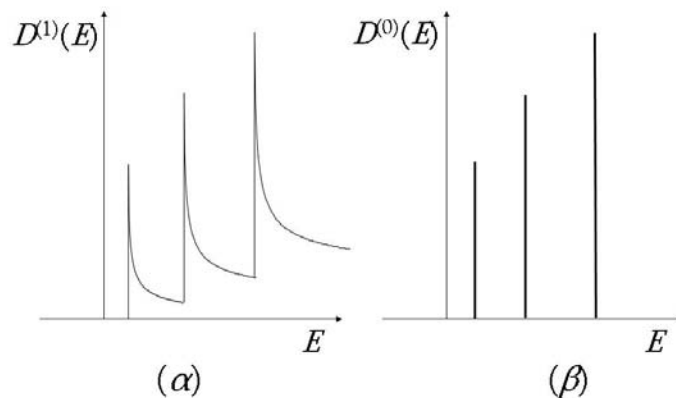
Αντίστοιχη σχέση ισχύει και για τις οπές. Η Εξ. 8.9 ισχύει μόνο για τις χαμηλές τιμές των n, m για τις οποίες η ενέργεια είναι μικρότερη του πηγαδιού ($E < V$) και άρα έχουμε δέσμια κατάσταση. Για μεγαλύτερες ενέργειες τα ηλεκτρόνια είναι πλήρως ελεύθερα σε όλες τις διαστάσεις.

Μεγάλη διαφοροποίηση στην πυκνότητα καταστάσεων υπάρχει και εδώ. Για κάποια τιμή των n, m ο αριθμός των καταστάσεων εξαρτάται μόνο από το k_x . Ο αριθμός καταστάσεων μεταβάλλεται ως $dN^{(1)}(k) \propto dk$, και χρησιμοποιώντας τα $k \propto \sqrt{E}$ και $dk \propto dE / \sqrt{E}$, βρίσκουμε την πυκνότητα καταστάσεων στα κβαντικά σύρματα για συγκεκριμένο n, m

$$D^{(1)}(E) = \frac{dN^{(1)}(E)}{dE} \propto \frac{1}{\sqrt{E}} \quad (8.10)$$

όπου ο δείκτης (1) υποδηλώνει ότι μόνο μία διάσταση είναι ελεύθερη.

Στο ελάχιστο κάθε υποστοιβάδας η πυκνότητα καταστάσεων αποκτάει μια μέγιστη τιμή, και κατόπιν πέφτει με το αντίστροφο της τετραγωνικής ρίζας. Όπως και στα κβαντικά πηγάδια, κάθε φορά που η ενέργεια “περνάει” στο επόμενο ζεύγος n, m , προστίθεται και η συνεισφορά όλων των προηγούμενων υποστοιβάδων. Καθότι όμως η πυκνότητα πέφτει με την ενέργεια, αυτή η συνεισφορά είναι μικρή. Η πυκνότητα καταστάσεων για τα κβαντικά σύρματα φαίνεται στο Σχ. 8.9.α. Λόγω της μεγάλης πυκνότητας καταστάσεων στα ελάχιστα της κάθε υποστοιβάδας, οι δύναμη των οπτικών μεταβάσεων στις συγκεκριμένες συχνότητες είναι πολύ μεγάλη. Αυτό εμφανίζεται ως έντονες κορυφές στο φάσμα εκπομπής.



Σχήμα 8.9. Πυκνότητα καταστάσεων για α) κβαντικά σύρματα και β) κβαντικές τελείες.

γ) Κβαντικές τελείες: Ο πλήρης περιορισμός επιτυγχάνεται στις κβαντικές τελείες. Αυτές είναι ουσιαστικά “νανο-κουτιά” ημιαγωγού, εμφυτευμένα μέσα σε άλλο ημιαγωγό μεγαλύτερου ενεργειακού χάσματος, αναπτυσσόμενες σε επιφάνειες, εμφυτευμένες σε πολυμερή και υάλους, ή τέλος αιωρούμενα σε διάλυμα. Οι διαστάσεις του κουτιού πρέπει να είναι μικρότερες από το de Broglie μήκος κύματος

των ηλεκτρονίων, και είναι συνήθως μικρότερες απο 10nm. Μια κβαντική τελεία δεν έχει ελεύθερα ηλεκτρόνια σε καμία διεύθυνση, και άρα οι επιτρεπτές ενέργειες απορέουν μόνο απο την συνεισφορά των δέσμίων καταστάσεων, και άρα παίρνουν μόνο διακριτές τιμές. Υπό αυτή την έννοια οι κβαντικές τελείες μοιάζουν με τεχνητά άτομα: τα ηλεκτρόνια είναι περιορισμένα στον μικρό όγκο της τελείας και καταλαμβάνουν μόνο διακριτές ιδιοτιμές ενέργειας. Οι ενεργειακές καταστάσεις κβαντικής τελείας με διαστάσεις L_x , L_y και L_z

$$E_{n,m,l} \cong E_c + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m_e^*L_z^2} + \frac{m^2\pi^2\hbar^2}{2m_e^*L_y^2} + \frac{l^2\pi^2\hbar^2}{2m_e^*L_x^2} \quad (8.11)$$

Η πυκνότητα καταστάσεων είναι μια σειρά απο δ -συναρτήσεις, μια για κάθε αντίστοιχη ενεργειακή ιδιοτιμή. Πυκνότητα καταστάσεων κβαντικής τελείας

$$D^{(0)}(E) \propto \sum_{E_{n,m,l}} \delta(E - E_{n,m,l}) \quad (8.12)$$

Σχηματικά αυτή απεικονίζεται στο Σχ. 8.9.β.

Η ύπαρξη διακριτών καταστάσεων με απειρίζουσα πυκνότητα καταστάσεων οδηγεί σε έντονες γραμμές απορρόφησης και εκπομπής. Στην πράξη όμως, ατέλειες και μη-ομοιομορφίες στο σχήμα των τελειών δίνουν πεπερασμένο πάχος και ύψος στην πυκνότητα καταστάσεων και άρα η απορρόφηση και εκπομπή δεν είναι τόσο έντονες όσο θα μπορούσαν θεωρητικά. Σε κάθε περίπτωση, το φάσμα εκπομπής και απορρόφησης είναι αρκετά στενό και πολύ εύκολα ματαβαλλόμενο με έλεγχο του ακριβούς σχήματος και μεγέθους των τελειών. Στο Σχ. 8.10 φαίνονται φυαλίδια με υγρό διάλυμα που εμπεριέχουν κβαντικές τελείες CdSe διαφορετικών μεγεθών. Υπό την έκθεση σε υπεριώδη ακτινοβολία, διαφετικά μεγέθη αντιστοιχούν σε διαφορετικό φάσμα εκπομπής, και άρα σε διαφορετικό χρωματισμό.



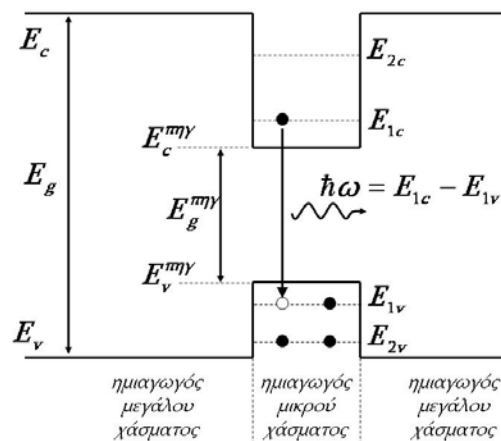
Σχήμα 8.10. Φθορισμός απο φυαλίδια με κβαντικές τελείες CdSe, τα οποία έχουν εκτεθεί σε υπεριώδης ακτινοβολία (πηγή: *D. Talapin, University of Hamburg*).

8.5. Κβαντικά πηγάδια σε διόδους εκπομπής φωτός

Τα δύο επικρατέστερα συστήματα υλικών για διόδους εκπομπής φωτός είναι το $InGaN$ που καλύπτουν απο το υπεριώδες ως και πράσινο φώς, και το $AlGaInP$ που καλύπτει απο το κίτρινο ως και το κόκκινο. Ως παράδειγμα ας θεωρήσουμε το σύστημα $In_xGa_{1-x}N$ για εκπομπή σε μήκος κύματος λ . Τα κβαντικά πηγάδια σχεδιάζονται έτσι ώστε η απόσταση μεταξύ των χαμηλότερων σταθμών να αντιστοιχεί στο ζητούμενο μήκος κύματος, όπως φαίνονται στο Σχ. 8.11. Οι παράμετροι που μπορούν να αλλαχτούν είναι το ποσοστό ινδίου x και το πάχος L_z . Το ενεργειακό χάσμα του καθαρού GaN είναι 3.4eV ενώ του InN είναι 1.9eV. Σε πρώτη προσέγγιση χρησιμοποιούμε μια γραμμική εξάρτηση με το ποσοστό x του In ,

$$1240 / \lambda = 3.4 - 1.5x + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2L_z^2} \left(\frac{1}{m_e^*} - \frac{1}{m_h^*} \right) \quad (8.13)$$

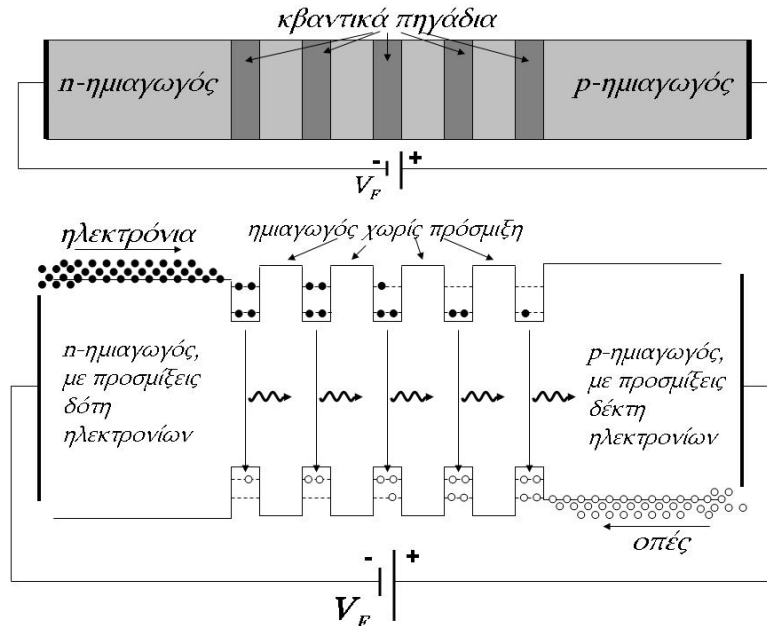
Σε πρακτικές εφαρμογές το x και το πάχος L_z μεταβάλλονται ώστε να μεγιστοποιείται η λειτουργία: μέγιστη σύλληψη των ηλεκτρονίων και οπών στά πηγάδια, και μέγιστο συντελεστή οπτικής εκπομπής.



Σχήμα 8.11. Κβαντικό πηγάδι ημιαγωγού: μια λεπτή στρώση ημιαγωγού είναι ανάμεσα σε άλλον ημιαγωγό μεγαλύτερου χάσματος.

Το κβαντικό πηγάδι βρίσκεται ανάμεσα σε ημιαγωγό μεγαλύτερου χάσματος, στην περίπτωση μας GaN . Απο την μία μεριά έχει προσμίξεις δότη και απο την άλλη προσμίξεις δέκτη, ώστε να είναι υψηλή η αγωγιμότητα ηλεκτρονίων και οπών αντίστοιχα, τα οποία διοχετεύονται απο εξωτερική πηγή όπως φαίνεται στο Σχ. 8.12. Αυτά παγιδεύονται στα κβαντικά πηγάδια, όπου και επανασυνδέονται με την δημιουργία φωτός \rightarrow ηλεκτροφωταύγεια. Η παγίδευση μέσα στο κβαντικό πηγάδι είναι σημαντική γιατί πέρα απο την μεγαλύτερη πυκνότητα καταστάσεων, περιορισμός ηλεκτρονίου-οπής στον ίδιο χώρο συνεπάγεται και μεγαλύτερη αλληλεπικάλυψη των κυματοσυναρτήσεών τους και άρα μεγαλύτερη πιθανότητα

επανασύνδεσης. Στην πράξη χρησιμοποιούνται πάνω από ένα κβαντικά πηγάδια, όπως φαίνεται στο Σχ. 8.12, ώστε να εξασφαλίζεται ότι δεν υπάρχει διαρροή ηλεκτρονίων έξω από το πηγάδι όπου θα μπορούσαν να επανασυνδεθούν με σπές χωρίς όμως να παράγουν το επιθυμητό φως.



Σχήμα 8.12. Σχηματικό μιας πλήρους διάταξης διόδου εκπομπής φωτός.

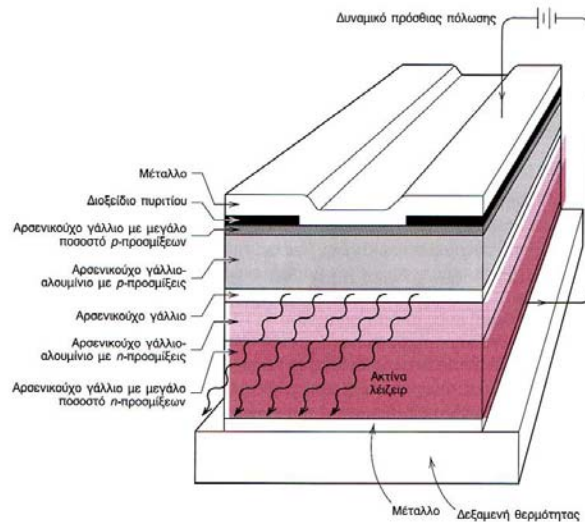
Στο Σχ. 8.13 φαίνονται οι διόδου-εκπομπής-φωτός στην τελική τους μορφή ως προϊόν και σε διάφορες εφαρμογές τους. Στα αριστερά είναι μια ειδική κατηγορία διόδου που εκπέμπει άσπρο φως. Στην πραγματικότητα είναι μια δίοδος GaN όπως ακριβώς περιγράφηκε πιο πάνω, η οποία εκπέμπει στο υπεριώδες. Ο ημιαγωγός στην κορυφή του είναι επικαλυμμένος από κάποια οργανική φθορίζουσα ουσία η οποία απορροφάει το φως και το επαναεκπέμπει σαν άσπρο φως, όπως ακριβώς και οι κοινές λάμπες φθορισμού.



Σχήμα 8.13. Τελικό προϊόν διόδου εκπομπής φωτός και διάφορες εφαρμογές της.

8.6. Laser διόδου

Ένα laser διόδου¹ έχει παρόμοια δομή με μια δίοδο εκπομπής φωτός, με λίγες τροποποιήσεις ώστε να επιτυγχάνεται εξαναγκασμένη εκπομπή. Στην περίπτωση του laser *GaAs* / *AlGaAs* η κατακόρυφη δομή έχει στο κέντρο τα κβαντικά πηγάδια από *GaAs* ανάμεσα στα δύο στρώματα *AlGaAs*, το ένα με προσμίξεις δότη και το άλλο με προσμίξεις δέκτη. Πάνω και κάτω από το σύστημα αυτό είναι οι μεταλλικές επαφές που τροφοδοτούν τα ηλεκτρόνια και οπές. Τα στρώματα *AlGaAs* έχουν μεγαλύτερο ενεργειακό χάσμα και άρα μικρότερο δείκτη διάθλασης, οπότε οπότε μέρος από το εκπεμπόμενο φως μένει παγιδευμένο λόγω ολικής ανάκλασης (όπως και στις οπτικές ίνες, το *GaAs* είναι ο πυρήνας και το *AlGaAs* το περίβλημα). Το σύστημα κόβεται ως μακρόστενη λουρίδα, με αποτέλεσμα τα κβαντικά πηγάδια να γίνονται ένα είδος κυματοδηγού, όπως φαίνεται στο Σχ. 8.14.



Σχήμα 8.14. Σχηματικό διάγραμμα ενός laser ημιαγωγού (πηγή: *W. Callister, Επιστήμη και τεχνολογία Υλικών*).

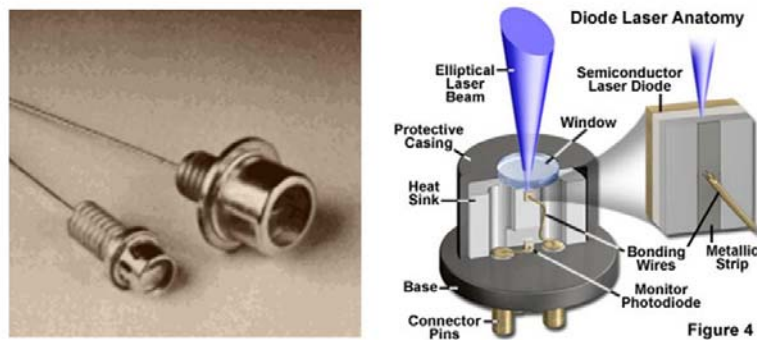
Συνήθες μήκος είναι γύρω στα 500 μm , και πλάτος στο 1 μm . Τα άκρα είναι κομμένα κάθετα και λειασμένα πολύ καλά ώστε να αυξάνει η ανακλαστικότητα. Πολλές φορές επικαλύπτονται από ανακλαστικές επιστρώσεις (μέταλλα ή διηλεκτρικούς καθρέπτες). Το εκπεμπόμενο φως ταξιδεύει στον κυματοδηγό πάνω-κάτω εξαναγκάζοντας νέες αποδιεγέρσεις και ενισχύοντας έτσι την δέσμη του laser. Η συνθήκη λειτουργίας είναι ότι το κέρδος από τις εξαναγκασμένες αποδιεγέρσεις σε έναν κύκλο πρέπει να ισοδυναμεί με τις απώλειες λόγω απορρόφησης συν την απώλεια του ωφέλιμου φωτός που διαφεύγει από τα άκρα/καθρέπτες. Μια δεύτερη συνθήκη που καθορίζει το εκπεμπόμενο μήκος κύματος είναι ότι η φάση που αποκτάει το κύμα σε ένα κύκλο πρέπει να είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του 2π : μόνο

¹ ή ισοδύναμα *laser ημιαγωγού*.

έτσι η εξαναγκασμένη εκπομπή θα είναι συνέχεια σε φάση με το οδηγούμενο κύμα, και άρα θα λειτουργεί η εξαναγκασμένη εκπομπή. Η συνθήκη αυτή εφαρμόζεται μόνο για συγκεκριμένα μήκη κύματος, και αυτός είναι και ο λόγος που η εκπομπή ενός laser είναι ουσιαστικά μονοχρωματική. Εάν το μήκος είναι L και ο μέσος δείκτης των κβαντικών πηγαδιών n , τότε η συνθήκη γράφεται

$$2Lk = 2m\pi \Rightarrow \frac{2Ln}{\lambda_0} = m \Rightarrow \lambda_0 = \frac{2Ln}{m} \quad (8.14)$$

Το ακριβές μήκος κύματος εκπομπής του laser βρίσκεται από την Εξ. 8.14 για τον ακέραιο m για τον οποίο το λ_0 συμπίπτει καλύτερα με το μήκος κύματος εκπομπής από τα κβαντικά πηγάδια της Εξ. 8.13. Τέτοια lasers έχουν βρεί ευρεία εφαρμογή σε τηλεπικοινωνίες, οπτική εγγραφή και ανάγνωση σε CD players και DVDs, αναγνώριση barcode, φωτισμό κτλ. Στο Σχ. 8.15 φαίνεται ένα σχηματικό της πλήρους διάταξης, καθώς και πακεταρισμένα προϊόντα.



Σχήμα 8.15. Σχηματικό διάγραμμα ενός laser δίοδου και πακεταρισμένα laser (πηγή: Olympus, www.olympusfluoview.com).

9. ΜΕΤΑΛΛΑ ΚΑΙ ΠΛΑΣΜΟΝΙΑ

Τα μέταλλα έχουν μια ιδιαίτερη απόκριση στο φώς η οποία υπόσχεται αρκετές νέες τεχνολογικές εφαρμογές. Είναι ηλεκτροδυναμική στην φύση της, και βασίζεται στην κίνηση των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας κάτω απο την επίδραση του ηλεκτρικού πεδίου του εισερχόμενου φωτός. Βασικό δημιούργημα αυτής της αλληλεπίδρασης είναι η δημιουργία μιας δέσμιας κατάστασης μεταξύ φωτονίου-ηλεκτρονίων (πλάσματος) το οποίο ονομάζεται πλάσμιο.

9.1. Μεταλλική απόκριση στο φως

Η πυκνότητα ελεύθερων ηλεκτρονίων στα μέταλλα εξαρτάται απο το σθένος Z , την πυκνότητα μάζας ρ και το ατομικό βάρος A :

$$n = \frac{N}{V} = \frac{Z\rho N_A}{A} \quad (9.1)$$

Στα ευγενή μέταλλα, για παράδειγμα, $Z=1$. Τα ηλεκτρόνια σκεδάζονται απο τα θετικά ιόντα (ατέλειες πλέγματος, φωνόνια, κτλ). Χωρίς να προσδιορίσει κανείς την ακριβή φύση της σκέδασης αυτής, μπορεί απλά να ορίσει έναν μέσο χρόνο τ μεταξύ δύο γεγονότων σκέδασης που ονομάζεται *μέσος ελεύθερος χρόνος* ή *χρόνος χαλάρωσης*. Βάσει αυτού, η πιθανότητα για σκέδαση μέσα σε χρονικό διάστημα dt είναι dt/τ . Ο μέσος ελεύθερος χρόνος τ συνήθως παίρνεται ως ανεξάρτητος της θέσης και ταχύτητας του ηλεκτρονίου. Η κατανομή ταχυτήτων των ηλεκτρονίων καθορίζεται απο την θερμοδυναμική ισορροπία, η οποία επιτυγχάνεται μέσω των πολλαπλών σκεδάσεων.

Κατά την εφαρμογή ενός ηλεκτρικού πεδίου \vec{E} , τα ηλεκτρόνια υφίστανται επιτάχυνση $\vec{a} = -e\vec{E}/m_e$. Η ταχύτητά τους μετά από χρόνο t και εφόσον δεν σκεδαστούν είναι $\vec{v}(t) = -e\vec{E}t/m_e$. Λόγω σκεδάσεων, η επιτάχυνση ασκείται κατά μέσο χρόνο τ . Υποθέτουμε οτι μετά απο κάθε γεγονός σκέδασης η ταχύτητα του ηλεκτρονίου είναι τελείως τυχαία άσχετα με ποιά ταχύτητα είχε πρίν. Άρα η μέση τιμή της ταχύτητας είναι $\langle \vec{v} \rangle = -e\vec{E}\tau/m_e$. Η κίνηση των ηλεκτρονίων αντιστοιχεί σε ρεύμα

$$\vec{j} = -ne \langle \vec{v} \rangle = \left(\frac{ne^2\tau}{m_e} \right) \vec{E} \quad (9.2)$$

Ορίζουμε την *αγωγιμότητα* σ (αντίστροφο της *ειδικής αντίστασης* $\sigma=1/\rho$) ως την σχέση μεταξύ ρεύματος και πεδίου

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}, \quad \sigma = \frac{ne^2\tau}{m_e} \quad (9.3)$$

Αντίστροφα, μετρώντας την αγωγιμότητα ενός μετάλλου μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την Εξ. 9.3 για να υπολογίσουμε τον μέσο ελεύθερο χρόνο. Τυπικές τιμές του είναι μεταξύ 10^{-14} και 10^{-15} sec.

Η Εξ. 9.3 δίνει την αγωγιμότητα στην περίπτωση στατικών (χρονικά αμετάβλητων) πεδίων. Για να μελετήσουμε την περίπτωση χρονικά μεταβαλλόμενων ηλεκτρομαγνητικών πεδίων (οπτική ακτινοβολία) θα πρέπει πρώτα να κατασκευάσουμε μια διαφορική εξίσωση για την μέση ορμή των ηλεκτρονίων $\bar{p} = m_e < \bar{v} >$. Εάν κάποια χρονική στιγμή η ορμή είναι $\bar{p}(t)$, τότε μετά απο χρόνο dt θα επιταχυνθούν λόγω της δύναμης $-e\vec{E}$ απο το ηλεκτρικό πεδίο του κύματος, αλλά ένα κλάσμα dt/τ απο αυτά θα σκεδαστούν και θα χάσουν την ορμή τους. Συγκεκριμένα, η ορμή την χρονική στιγμή $t + dt$ θα είναι σε πρώτη προσέγγιση

$$\bar{p}(t + dt) = \bar{p}(t) - \frac{dt}{\tau} \bar{p}(t) - e\vec{E}dt \quad (9.4)$$

Αφαιρούμε το $\bar{p}(t)$ και απο τα δύο μέρη και διαιρούμε με dt . Η εξίσωση κίνησης των ηλεκτρονίων υπο την επίδραση ηλεκτρικού πεδίου προκύπτει

$$\frac{d\bar{p}}{dt} = -\frac{\bar{p}}{\tau} - e\vec{E} \quad (9.5)$$

Αυτή η εξίσωση δεν είναι άλλη από την εξίσωση για τον ταλαντωτή Lorentz που μελετήσαμε στο Κεφ. 7 για μηδενική σταθερά ελατηρίου. Η σκέδαση λειτουργεί απλά ως ένας μηχανισμός τριβής στην εξαναγκασμένη κίνηση των ηλεκτρονίων υπό την επίδραση του ηλεκτρικού πεδίου.

Υποθέτουμε οτι το ηλεκτρικό πεδίο είναι αρμονική συνάρτηση του χρόνου $\vec{E}(t) = \vec{E}(\omega)e^{-i\omega t}$, και κατά συνέπεια, το ίδιο θα είναι και η ορμή $\bar{p}(t) = \bar{p}(\omega)e^{-i\omega t}$. Αντικαθιστώντας στην Εξ. 9.5 βρίσκουμε

$$-i\omega\bar{p}(\omega) = -\frac{\bar{p}(\omega)}{\tau} - e\vec{E}(\omega) \quad (9.6)$$

Η πυκνότητα ρεύματος δίνεται απο $\vec{j} = -ne\bar{p}/m_e$, και θα είναι επίσης αρμονική συνάρτηση $\vec{j}(t) = \vec{j}(\omega)e^{-i\omega t}$, άρα

$$\vec{j}(\omega) = -\frac{ne\bar{p}(\omega)}{m_e} = \frac{ne^2/m_e}{(1/\tau) - i\omega} E(\omega) \quad (9.7)$$

Ορίζουμε την αγωγιμότητα ως συνάρτηση της συχνότητας (βλ. και Εξ. 9.3)

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau}, \quad \sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m_e} \quad (9.8)$$

Σε μηδενική συχνότητα (χρονικά ανεξάρτητο πεδίο) επανακτούμε την Εξ. 9.3. Στην παραπάνω λύση έχουμε αγνοήσει την επιδραση του μαγνητικού πεδίου, η οποία είναι τάξης u/c και άρα κατά πολύ ασθενέστερη. Επίσης, έχουμε θεωρήσει ότι το ηλεκτρικό πεδίο μεταβάλεται χρονικά αλλά όχι χωρικά. Αυτό σημαίνει ότι υποθέτουμε ότι το μήκος κύματος λ της ακτινοβολίας είναι κατά πολύ μεγαλύτερο από την μέση ελεύθερη διαδρομή των ηλεκτρονίων, δηλ. $\lambda \gg |\bar{v}| \tau$, το οποίο γενικά είναι αληθινό για την ορατή ακτινοβολία στα μέταλλα.

Το τελευταίο βήμα είναι να χρησιμοποιήσουμε τις εξισώσεις του Maxwell:

$$\nabla \vec{E} = 0, \quad \nabla \vec{H} = 0, \quad \nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}, \quad \nabla \times \vec{H} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (9.9)$$

Συνδυάζοντας τις Εξ. 9.9 για να κατασκευάσουμε την εξίσωση κύματος, και χρησιμοποιώντας την Εξ. 9.7 βρίσκουμε

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = -\nabla^2 \vec{E} = \frac{i\omega}{c} \nabla \times \vec{H} = \frac{i\omega}{c} \left(\frac{4\pi\sigma}{c} \vec{E} - \frac{i\omega}{c} \vec{E} \right) = \frac{\omega^2}{c^2} \left(1 + i \frac{4\pi\sigma}{\omega} \right) \vec{E} \quad (9.10)$$

Καθώς η εξίσωση κύματος γράφεται ως $\nabla^2 \vec{E} + \omega^2 \varepsilon(\omega) / c^2 \vec{E} = 0$, ορίζουμε την *μεταλλική διηλεκτρική συνάρτηση*

$$\varepsilon(\omega) = 1 + i \frac{4\pi\sigma(\omega)}{\omega} \quad (9.11)$$

Χρησιμοποιώντας τον ορισμό της Εξ. 9.8 για την αγωγιμότητα, καταλήγουμε στην γνωστή από το Κεφ. 7 μεταλλική διηλεκτρική συνάρτηση

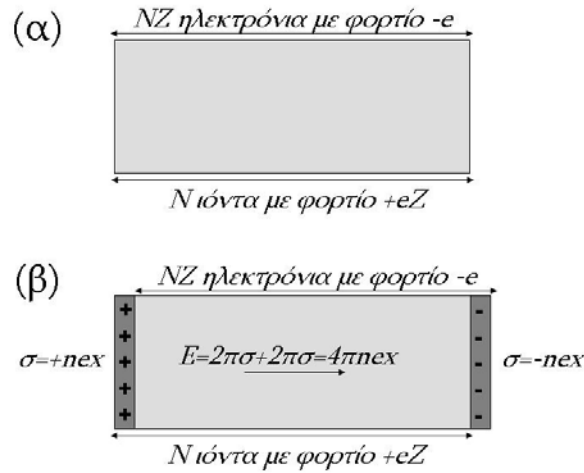
$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega/\tau} \quad (9.12)$$

όπου $\omega_p^2 = 4\pi n e^2 / m_e$ είναι η λεγόμενη *συχνότητα πλάσματος*. Η Εξ. 9.11 συνδέει την ηλεκτρική αγωγιμότητα με την οπτική απόκριση.

Για $\omega < \omega_p$ η διηλεκτρική σταθερά προκύπτει αρνητική, και η λύση είναι κύματα που αποσβάνουν εκθετικά στον χώρο. Για ένα εισερχόμενο κύμα σημαίνει μηδενική διάδοση και ισχυρή ανάκλαση, με ένα μικρό ποσοστό απορρόφησης: όσο μεγαλύτερος είναι ο μέσος ελεύθερος χρόνος τ , τόσο μικρότερη η απορρόφηση. Στα πολλά μέταλλα, η ανάκλαση από επίπεδη μεταλλική επιφάνεια είναι μεταξύ 90 και 95%. Για $\omega > \omega_p$ η διηλεκτρική σταθερά είναι θετική, και η λύση είναι διαδιδόμενα κύματα: για αυτές τις συχνότητες το μέταλλο εμφανίζεται διαφανές. Πράγματι, τα αλκαλικά μέταλλα εμφανίζονται διαφανή στην υπεριώδη ακτινοβολία.

Στην ιδιαίτερη περίπτωση που $\omega = \omega_p$ αυτό που δημιουργείται είναι μια αρμονική ταλάντωση της πυκνότητας των ελεύθερων ηλεκτρονίων, γνωστή ως *ταλάντωση πλάσματος*. Το κβάντο αυτής της ταλάντωσης είναι το *πλάσμα* με ενέργεια

$$E_{\text{πλάσμ}} = \hbar \omega_p \quad (9.13)$$



Σχήμα 9.1. Σχηματική απεικόνιση του μηχανισμού δημιουργίας ταλαντώσεων πλάσματος.

Μια απλή εικόνα της ταλάντωσης πλάσματος δίνεται ως εξής: υποθέτουμε ότι με κάποιον τρόπο όλα τα ελεύθερα ηλεκτρόνια μετατοπίζονται κατά απόσταση x σε σχέση με το ομοιόμορφο θετικό υπόστρωμα των ιόντων (βλ. Σχ. 9.1.β). Τότε δημιουργείται περίσσια θετικών φορτίων από την μία και έλλειψη από την άλλη. Η επιφανειακή πυκνότητα φορτίου είναι $\sigma = \pm nex$ (να μην μπερδευτεί με την αγωγιμότητα) αντίστοιχα, η οποία από την θεωρία πυκνωτών ξέρουμε ότι επάγει ηλεκτρικό πεδίο $E = 4\pi\sigma = 4\pi nex$. Η δύναμη επαναφοράς για όλα τα NZ ηλεκτρόνια είναι ίση με το γινόμενο του συνολικού τους φορτίου επί το μέγεθος του ηλεκτρικού πεδίου που έχει δημιουργηθεί. Σε μορφή διαφορικής εξίσωσης έχουμε

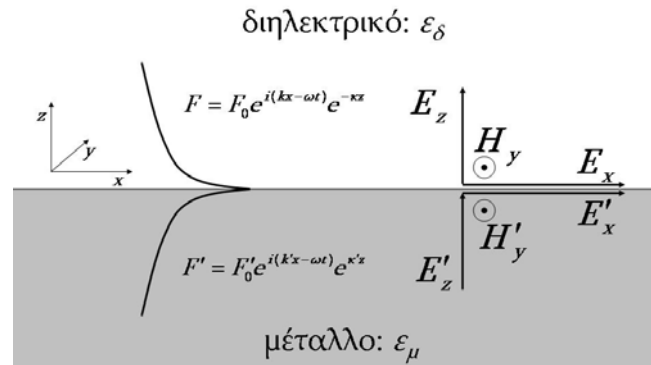
$$(NZm_e) \frac{d^2 x}{dt^2} = -(NZe)4\pi nex \Rightarrow \ddot{x} + \frac{4\pi ne^2}{m_e} x = 0 \quad (9.14)$$

η οποία είναι ακριβώς μια ταλάντωση με ιδιοσυχνότητα $\omega_p = \sqrt{4\pi ne^2 / m_e}$. Όταν λοιπόν ακτινοβολία προσπίπτει με την συχνότητα πλάσματος, επάγει ιδιοταλαντώσεις πλάσματος. Το κβάντο αυτής της ταλάντωσης είναι το πλασμόνιο με ενέργεια $\hbar\omega_p$. Πράγματι, σε πολλά πειράματα σκέδασης ηλεκτρονίων από λεπτά μεταλλικά υμένα έχουν παρατηρηθεί απώλειες ενέργειας σε ακέραια πολλαπλάσια του $\hbar\omega_p$, που συνεπάγει την δημιουργία πλασμονίων.

9.2. Πλασμόνια επιφανείας

Μιά ιδιαίτερα ενδιαφέρουσα αλληλεπίδραση φωτός-ύλης λαμβάνει χώρα στην διεπιφάνεια μετάλλου-διηλεκτρικού. Πρόκειται για ένα δέσμιο κύμα, ουσιαστικά είναι μια δέσμια κατάσταση φωτονίου-πλασμονίου, και ονομάζεται *πλασμόνιο επιφάνειας*. Τα πλασμόνια επιφανείας είναι εντοπισμένα στην διεπιφάνεια μετάλλου-διηλεκτρικού και διαδίδονται κατά μήκος της, με τα πεδία να φθίνουν εκθετικά μακριά από αυτήν. Για να το περιγράψουμε αρκεί να γράψουμε τις

εξισώσεις Maxwell και να εφαρμόσουμε τις συνοριακές συνθήκες στην διεπιφάνεια, όπως φαίνεται στο Σχ. 9.2.



Σχήμα 9.2. Συνοριακές συνθήκες στην διεπιφάνεια μετάλλου-διηλεκτρικού. Τα πεδία φθίνουν εκθετικά μακριά από την διεπιφάνεια, όπως φαίνεται στα αριστερά του σχήματος.

Υπάρχουν δύο δυνατές πολώσεις που θα μπορούσαν να υπάρχουν, η εγκάρσια ηλεκτρική (TE) και η εγκάρσια μαγνητική (TM). Πλασμόνια επιφάνειας προκύπτουν μόνο για την εγκάρσια μαγνητική πόλωση (TM). Σε αυτήν το μαγνητικό πεδίο είναι στην y διεύθυνση ενώ το ηλεκτρικό είναι και στην z αλλά και στην x , όπως φαίνεται στα δεξιά του Σχ. 9.2.

Το κάθε ένα από τα τρία πεδία μπορεί να γραφεί ως ένα επίπεδο κύμα κατά την διεύθυνση x και ένα εκθετικά φθίνων κύμα κατά την διεύθυνση z .

$$\begin{aligned} E_x &= E_{x0} e^{i(kx - \omega t)} e^{-\kappa z}, & z > 0 \\ E'_x &= E'_{x0} e^{i(k'x - \omega t)} e^{\kappa' z}, & z < 0 \end{aligned} \quad (9.15)$$

όπου τα κ, κ' είναι θετικοί πραγματικοί αριθμοί. Παρόμοια σχέση ισχύει και για τα E_z και H_y . Χρησιμοποιούμε τις εξισώσεις Maxwell για να βρούμε την σχέση μεταξύ των τριών πεδίων και να εφαρμόσουμε τις συνοριακές συνθήκες. Οι συνοριακές συνθήκες επιβάλλουν ως συνθήκη ύπαρξης του πλασμονίου επιφάνειας την σχέση

$$\frac{\kappa}{\epsilon_\delta} = -\frac{\kappa'}{\epsilon_\mu} \quad (9.16)$$

όπου τα ϵ_δ και ϵ_μ είναι οι διηλεκτρικές συναρτήσεις του διηλεκτρικού και του μετάλλου αντίστοιχα. Καθώς τα κ, κ' ορίστηκαν ως θετικά και το ϵ_δ είναι εξ' ορισμού θετικό, η συνθήκη της Εξ. 9.16 επιβάλλει για την ύπαρξη πλασμονίου επιφάνειας την διηλεκτρική σταθερά του μετάλλου να είναι αρνητική, το οποίο από την Εξ. 9.12 ισχύει για $\omega < \omega_p$. Πλασμόνια επιφάνειας μπορούν δηλαδή να παρατηρηθούν μόνο σε διεπιφάνεια από δύο υλικά με διηλεκτρικές σταθερές διαφορετικού προσήμου.

Για να τελειώσουμε την λύση, πρέπει να βρεθεί η σχέση μεταξύ $\kappa, \kappa', k, \omega$. Για να γίνει αυτό χρειαζόμαστε δύο νέες εξισώσεις, τις οποίες παίρνουμε αντικαθιστώντας την Εξ. 9.15 στην εξίσωση κύματος $\nabla^2 \vec{E} + \omega^2 \epsilon(\omega) / c^2 \vec{E} = 0$. Βρίσκουμε:

$$\begin{aligned} -k^2 + \kappa^2 + \omega^2 \epsilon_\delta / c^2 &= 0 \\ -k^2 + \kappa'^2 + \omega^2 \epsilon_\mu / c^2 &= 0 \end{aligned} \quad (9.17)$$

Συνδιάζοντας τις Εξ. 9.16 και 9.17 βρίσκουμε την σχέση διασποράς του πλασμονίου επιφάνειας:

$$k = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_\delta \epsilon_\mu}{\epsilon_\delta + \epsilon_\mu}} \quad (9.18)$$

Μια δεύτερη βασική συνθήκη προκύπτει από την Εξ. 9.18, η οποία είναι όχι μόνο η μεταλλική διηλεκτρική σταθερά να είναι αρνητική, αλλά και μικρότερη από το μείον της διηλεκτρικής σταθεράς του διηλεκτρικού, έτσι ώστε το κυματοδιάνυσμα της Εξ. 9.17 να είναι πραγματικό (δηλ. να υπάρχει διάδοση στην x διεύθυνση όπως υποθέσαμε εξ' αρχής):

$$\epsilon_\mu \leq -\epsilon_\delta \quad (9.19)$$

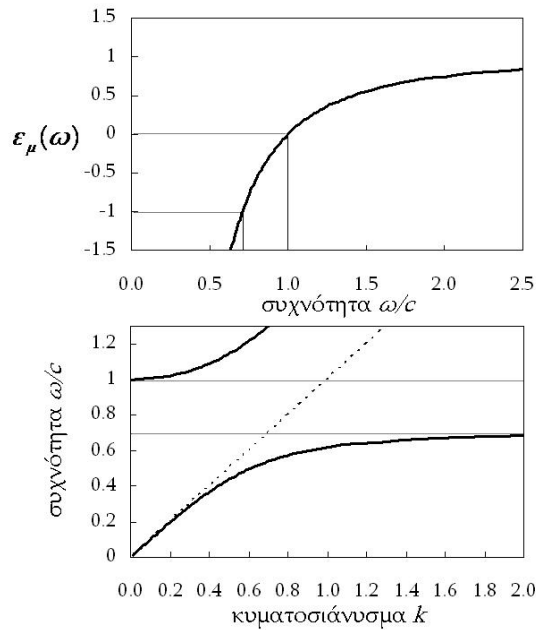
Η οριακή συνθήκη του πλασμονίου επιφανείας είναι

$$\epsilon_\mu(\omega) = -\epsilon_\delta \quad (9.20)$$

Για την μελέτη των παραπάνω λύσεων χρησιμοποιείται η ιδιαίτερα απλή περίπτωση της μεταλλικής διηλεκτρικής συνάρτησης της Εξ. 9.12 με τον μέσο ελεύθερο χρόνο άπειρο, δηλαδή χωρίς απώλειες σκέδασης:

$$\epsilon_\mu(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (9.21)$$

Σε αυτή την περίπτωση το ϵ_μ είναι πραγματικό. Στο Σχ. 9.3.α δείχνεται η διηλεκτρική συνάρτηση σαν συνάρτηση της συχνότητας, ενώ στο Σχ. 9.3.β σχεδιάζεται η σχέση διασποράς της Εξ. 9.18 για την περίπτωση που $\omega_p = 1$ και το διηλεκτρικό μέσο είναι το κενό $\epsilon_\delta = 1$.



Σχήμα 9.3. Πάνω: η μεταλλική διηλεκτρική συνάρτηση της Εξ. 6.20 ως συνάρτηση της συχνότητας. Κάτω: η σχέση διασποράς του πλασμονίου επιφανείας της Εξ. 9.18, για $\omega_p=1$ και $\varepsilon_\delta = 1$. Με διακεκομμένη είναι η διασπορά επίπεδων κυμάτων στο κενό $k = \omega / c$.

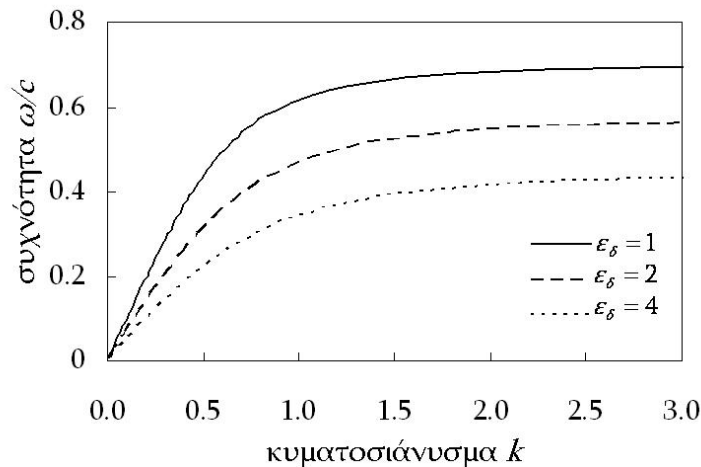
Υπάρχουν τέσσερις ενδιαφέροντες περιοχές στην σχέση διασποράς:

- (α) Στα χαμηλά κυματοδιανύσματα η σχέση διασποράς είναι ίδια με αυτή του επίπεδου κύματος, δηλ. $k = \omega / c$ (βλ. διακεκομμένες γραμμές).
- (β) Για αυξανόμενα κυματοδιανύσματα όμως αποκλίνει από αυτήν, συγκλίνοντας στην οριακή συχνότητα του πλασμονίου επιφανείας $\omega_{\pi\lambda-\varepsilon\pi} = \omega_p / \sqrt{2} = 0.707c$. Εδώ υπάρχουν λύσεις για οσοδήποτε μεγάλο κυματοδιάνυσμα με την ίδια σχεδόν συχνότητα. Αυτή η ιδιότητα έχει μεγάλες τεχνολογικές εφαρμογές.
- (γ) Μεταξύ των συχνοτήτων $\omega_{\text{πλασμόνιο}}$ και ω_p , δηλαδή για $-1 < \varepsilon_\mu < 0$, υπάρχει χάσμα όπου δεν επιτρέπονται λύσεις.
- (δ) Για μεγαλύτερες συχνότητες το $\varepsilon_\mu > 0$ και υπάρχουν πάλι επιτρεπτές λύσεις.

Το πιο ενδιαφέρον μέρος είναι το δεύτερο. Στην περίπτωση που το έξω υλικό δεν είναι κενό (δηλαδή $\varepsilon_\delta \neq 1$), η συχνότητα πλασμονίου επιφανείας εξαρτάται από το διηλεκτρικό

$$\omega_{\pi\lambda-\varepsilon\pi} = \omega_p / \sqrt{1 + \varepsilon_\delta} \quad (9.22)$$

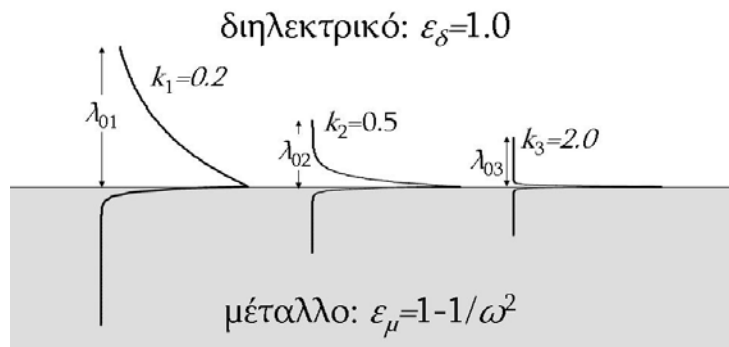
Η αντίστοιχες σχέσεις διασποράς για τρεις διαφορετικές τιμές του ε_δ φαίνονται στο Σχ. 9.4.



Σχήμα 9.4. Σχέσεις διασποράς πλασμονίου επιφάνειας για τρεις διαφορετικές τιμές του διηλεκτρικού υλικού. Στις μικρές συχνότητες η σχέση διασποράς είναι $k = \sqrt{\epsilon_\delta} \omega / c$.

Στην κάθετη διεύθυνση το κύμα φθίνει εκθετικά. Για την περίπτωση $\omega_p = 1$ και $\epsilon_\delta = 1$ υπολογίζουμε το αριθμητικό του προφίλ για τρεις διαφορετικές τιμές του κυματοδιανύσματος ($k = 0.2, 0.5$ και 2.0) στο Σχ. 9.5. Οι αντίστοιχες συχνότητες είναι $\omega / c = 0.195, 0.435$ και 0.685 αντίστοιχα. Στην κάθε περίπτωση σχεδιάζουμε για απόσταση ίση με το αντίστοιχο μήκος κύματος στο κενό απο την κάθε πλευρά της διεπιφάνειας (όσο μεγαλώνει η συχνότητα μικραίνει το μήκος κύματος). Όσο μεγαλώνει το κυματοδιάνυσμα η λύση γίνεται όλο και πιο εντοπισμένη στην επιφάνεια, σε διαστάσεις που είναι κατά πολύ μικρότερες του μήκους κύματος. Συγχρόνως η ταχύτητα ομάδας $v_G = d\omega / dk$ μικραίνει.

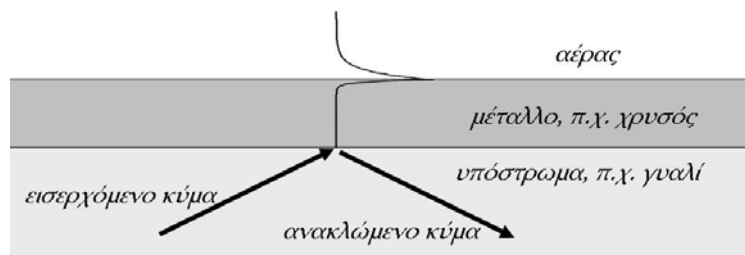
Στην οριακή περίπτωση του άπειρου κυματοδιανύσματος έχουμε περιορισμό πεδίων σε μηδενικό χώρο και μηδενική ταχύτητα. Καθώς η εμβέλεια των κυμάτων μικραίνει, η έντασή τους μεγαλώνει. Επίσης, όσο μεγαλώνει το κυματοδιάνυσμα, η χωρική περιοδικότητα $\lambda = 2\pi / k$ μικραίνει. Για παράδειγμα, στην τρίτη περίπτωση του Σχ. 9.5 ($k=2.0, \omega/c=0.685$), εάν υποθέσουμε ότι αντιστοιχεί σε πράσινο φως με $\lambda_0 = 500\text{nm}$, τότε το ενεργό μήκος κύματος λ του πλασμονίου πάνω στην επιφάνεια είναι $\lambda = \lambda_0 \frac{\omega}{ck} = 170\text{nm}$. Εάν χρησιμοποιούσαμε $k=10$ ($\omega/c=0.7062$) τότε $\lambda = 35\text{nm}$, και με $k=100$ ($\omega/c=0.7069$) $\lambda = 3.5\text{nm}$. Τα πλασμόνια επιφάνειας έχουν χαρακτηριστεί σαν το χωρικό αντίστοιχο των ακτίνων X, αλλά σε οπτικές συχνότητες.



Σχήμα 9.5. Πλάτος πεδίων για τρεις τιμές του κυματοδιανύσματος. Όσο μεγαλύτερο το k τόσο πιο εντοπισμένη η λύση, και άρα πιο ευαίσθητη σε αλλαγές στην διεπιφάνεια.

9.3. Πλασμονικοί χημικοί και βιολογικοί αισθητήρες

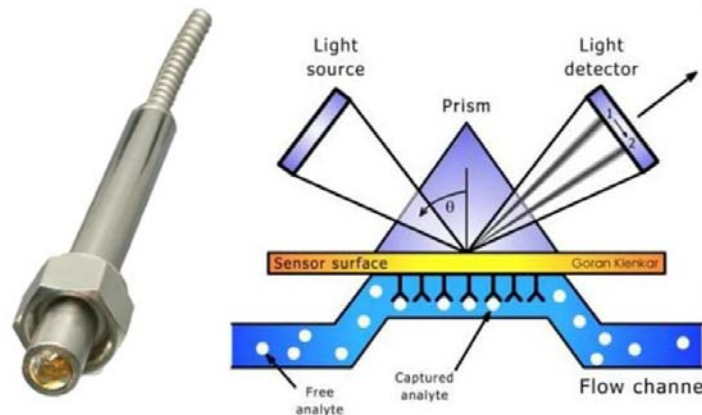
Για την δέγερση πλασμονίων επιφάνειας ισχύουν οι συνήθεις κανόνες διατήρησης ενέργειας (δηλ. συχνότητας) και ορμής (δηλ. παράλληλη συνιστώσα του Κυματοδιανύσματος). Συνεπακόλουθα, η δέγερση πλασμονίων επιφάνειας δεν είναι δυνατή απο ένα απλό επίπεδο κύμα εισερχόμενο από την πλευρά του διαηλεκτικού, καθότι για κάθε συχνότητα το πλασμόνιο έχει $k > \omega/c$ ενώ το επίπεδο κύμα έχει $k = \omega/c$. Ο συνήθης τρόπος δέγερσης είναι μέσω ενός πρίσματος ή απλά άλλου διαηλεκτικού μεγαλύτερου δείκτη, όπως φαίνεται στο Σχ. 6.6. όπου πάνω του τοποθετείται πολύ λεπτό μεταλλικό υμένιο. Το εισερχόμενο κύμα έρχεται από τον υλικό με τον μεγαλύτερο δείκτη διάθλασης n , και άρα έχει $k = n\omega/c > \omega/c$. Για κάποια συγκεκριμένη γωνία πρόσπτωσης αυτό θα μπορέσει να επάγει ένα πλασμόνιο επιφάνειας στην την άλλη πλευρά του υμενίου, με την προϋπόθεση οτι το υμένιο είναι αρκετά λεπτό (συνήθως $\sim 50\text{nm}$). Το αποτέλεσμα αυτού θα είναι μια απότομη πτώση στην ένταση της ανακλώμενης ακτινοβολίας.



Σχήμα 9.6. Γεωμετρία για δέγερση πλασμονίου επιφάνειας. Εάν το πλασμόνιο διεγερθεί, παρατηρείται ισχυρή μείωση της έντασης του ανακλώμενου κύματος.

Οι συνθήκες για να γίνει αυτή η σύζευξη είναι πολύ περιοριστικές και άμεσα εξαρτώμενες απο τον δείκτη διάθλασης του πάνω διαηλεκτικού στρώματος (αέρας στο Σχ. 9.6). Καθότι το πεδίο φθίνει πολύ γρήγορα με την απόσταση απο την επιφάνεια (της τάξης των 50nm) μόνο το στρώμα πολύ κοντά στην επιφάνεια είναι σημαντικό, κάνοντας ένα τέτοιο σύστημα ιδιαίτερα ευαίσθητο στις αλλαγες του δείκτη διάθλασης πολύ κοντά στην διεπιφάνεια. Τέτοια συστήματα έχουν βρεί

εφαρμογή σε χημικούς και βιολογικούς αισθητήρες. Ένας τέτοιος φαίνεται στο Σχ. 9.7. Η πάνω επιφάνεια (αισθητήρας) τροποποιείται ώστε να αντιδράει με κάποιο συγκεκριμένο χημικό ή βιολογικό μόριο. Κατόπιν συντονίζεται επακριβώς η συχνότητα και γωνία της προσπίπτουσας δέσμης από την κάτω επιφάνεια, ώστε να συζεύγεται με πλασμόνιο επιφανείας. Εάν μόρια της χημικής ή βιολογικής ουσίας προσκολληθούν στην πάνω επιφάνεια, θα αλλάξουν τον δείκτη διάθλασης τοπικά και θα καταστρέψουν την συνθήκη συντονισμού, και άρα η ένταση της ανακλώμενης δέσμης θα αυξηθεί. Συγκεκριμένα για τους βιολογικούς αισθητήρες (βλ. Σχ.9.7.β) η μεταλλική επιφάνεια επικαλύπτεται με βιολογικά μόρια (π.χ. πρωτεΐνες, DNA) τα οποία είναι αντισώματα της βιολογικής ουσίας που θέλουμε να ανιχνευτεί. Μεγάλο πλεονέκτημα αυτής της τεχνολογίας είναι η πολύ μεγάλη ευαισθησία και το πολύ μικρό μέγεθος, μαζί με την δυνατότητα ολοκλήρωσης πολλών διαφορετικών (απλά διαφοροποιώντας την επικάλυψη) αισθητήρων σε μια μικρή πλακέτα (όπως ακριβώς ολοκληρώνονται πολλά transistors σε ένα chip).



Σχήμα 9.7. Αριστερά: Χημικός αισθητήρας πλασμονίου επιφάνειας (πηγή: *Savannah River National Laboratory, US, www.srnl.gov*), Δεξιά: σχηματικό διάγραμμα βιολογικού αισθητήρα πλασμονίου επιφάνειας (πηγή: *Linköpings Universitet, Sweden, http://www.ifm.liu.se*).

9.4. Μεταλλικά νανοσωματίδια

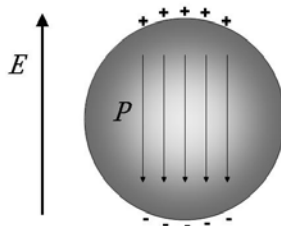
Πλασμόνια επιφανείας μπορούν να διεγερθούν και σε μεταλλικά νανοσωματίδια, όπου το ηλεκτρικό πεδίο του εισρχόμενου φωτός διεγείρει ταλαντώσεις των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας. Στην πιο απλή περίπτωση έχουμε σφαιρικά σωματίδια. Αναλόγως με τη διάμετρο d μπορούμε να τα χωρίσουμε σε τρεις κατηγορίες:

(α) Πολύ μικρά νανοσωματίδια $d < 2nm$: φαινόμενα κβαντικού περιορισμού υπερσχύουν όλων των άλλων. Όπως και στις ημιαγώγιμες κβαντικές τελείες έχουμε την δημιουργία υποστοιβάδων, των οποίων η απόσταση μεγαλώνει όσο μικραίνει το νανωσωματίδιο. Κάποια στιγμή γίνεται αρκετά μεγάλη και να δημιουργηθεί χάσμα πάνω από την τελευταία στάθμη ηλεκτρονίων, με αποτέλεσμα να χαθεί η μεταλλική

ιδιότητα και το νανοσωματίδιο να γίνει μονωτής, η λεγόμενη μετάβαση αγωγού-μονωτή.

(β) Ενδιάμεσα μεγέθη $2nm < d < 25nm$: οι διαφοροποιήσεις λόγω κβαντικού περιορισμού είναι μικρές, και το νανοσωματίδιο ανταποκρίνεται στην ακτινοβολία με δημιουργία εντοπισμένων πλασμονίων επιφάνειας, κυρίως διπολικής μορφής λόγω του μικρού μεγέθους. Τα δημιουργούμενα πεδία στο εσωτερικό είναι ομοιόμορφα

(γ) Μεγάλα νανοσωματίδια $d > 25nm$: εδώ εμφανίζονται και διεγέρσεις μεγαλύτερης τάξης (τετραπολικές ροπές κτλ). Το πεδίο μέσα στο πεδίο δεν είναι ομοιογενές.



Σχήμα 9.8. Το ηλεκτρικό πεδίο εισερχόμενου φωτός επάγει ομοιόμορφη πόλωση σε ένα μεταλλικό νανοσωματίδιο. Η συνθήκη για να ισχύει αυτό είναι το νανοσωματίδιο να είναι κατά πολύ μικρότερο του μήκους κύματος.

Η πιο ενδιαφέρουσα και περισσότερο μελετημένη είναι η δεύτερη κατηγορία. Στο Σχ. 9.8 δείχνεται απλοποιημένα η ταλάντωση φορτίου λόγω του εξωτερικού πεδίου E . Στην περίπτωση που το νανοσωματίδιο βρίσκεται μέσα σε διηλεκτρικό υλικό ϵ_δ , το μέγεθος της επαγόμενης διπολικής ροπής είναι

$$P = \frac{3}{4\pi} \left(\frac{\epsilon_\mu - \epsilon_\delta}{\epsilon_\mu + 2\epsilon_\delta} \right) E \quad (9.23)$$

Το εντοπισμένο πλασμόνιο επιφανείας εμφανίζεται όταν η διπολική ροπή μεγιστοποιείται, δηλαδή όταν μηδενίζεται ο παρονομαστής στην Εξ. 9.23

$$\epsilon_\mu(\omega) = -2\epsilon_\delta \quad (9.24)$$

Για την μεταλλική διηλεκτρική συνάρτηση της Εξ. 9.21, βρίσκουμε

$$\omega_{\pi\lambda-\epsilon\pi} = \omega_p / \sqrt{1 + 2\epsilon_\delta} \quad (9.25)$$

Είναι ενδιαφέρον να συγκρίνει κανείς τις Εξ. 9.24-9.25 για σφαιρικό νανοσωματίδιο με τις Εξ. 9.19-9.20 για επίπεδη επιφάνεια.

Η συνθήκη της Εξ. 6.24 για την ύπαρξη εντοπισμένου πλασμονίου επιφανείας είναι ανεξάρτητη της διαμέτρου του νανοσωματιδίου. Αυτό είναι αποτέλεσμα της ομοιομορφίας του πεδίου μέσα στο σωματίδιο, και ισχύει μόνο για τα ενδιάμεσα $2nm < d < 25nm$ μεγέθη τα οποία είναι μεγάλα για να εμφανίζεται κβαντικός

περιορισμός, αλλά συγχρόνως πολύ μικρότερα του μήκους κύματος. Η μόνη αλλαγή που παρατηρείται λόγω μεγέθους είναι μια μικρή μεταβολή της μεταλλικής διηλεκτρικής συνάρτησης ϵ_{μ} λόγω σκέδασης στην οριακή επιφάνεια του νανοσωματιδίου. Όσο μικρότερο το σωματίδιο τόσο μεγαλώνει η πιθανότητα σκέδασης, και άρα τόσο μικρότερος ο μέσος ελεύθερος χρόνος, όπως αυτός εμφανίζεται στην Εξ. 9.12.

Επίπεδα κύματα μπορούν να επάγουν πλασμόνια επιφανείας σε μεταλλικά νανοσωματίδια καθώς εδώ δεν υπάρχει περιοδικότητα και άρα δεν ισχύει ο νόμος διατήρησης της ορμής όπως στην περίπτωση της επίπεδης επιφάνειας. Το αποτέλεσμα της διέγερσης πλασμονίων επιφανείας σε μεταλλικά νανοσωματίδια είναι μια ισχυρή απορρόφηση σε μια ζώνη συχνοτήτων γύρω από την $\omega_{\text{πλ-επ}}$, η οποία ονομάζεται η ζώνη του πλασμονίου επιφανείας.

Όσο αναφορά την φυσιογνωμία τους, δεν έχουν μεγάλες διαφορές από τα αντίστοιχα στην επίπεδη επιφάνεια: ισχυρή ενίσχυση των πεδίων γύρω από το σωματίδιο και ευαυσθησία στο περιβάλλον, τα οποία τα κάνουν ιδιαίτερα ενδιαφέροντα σε τεχνολογικές εφαρμογές όπως αισθητήρες κτλ. Η ενίσχυση των πεδίων στην επιφάνεια του νανοσωματιδίου οδηγεί επίσης σε υψηλό συντελεστή οπτικής εκπομπής από φθορίζοντα μόρια που βρίσκονται σε κοντινή απόσταση, εάν η συχνότητα εκπομπής τους είναι κοντά στην συχνότητα του πλάσματος επιφανείας.

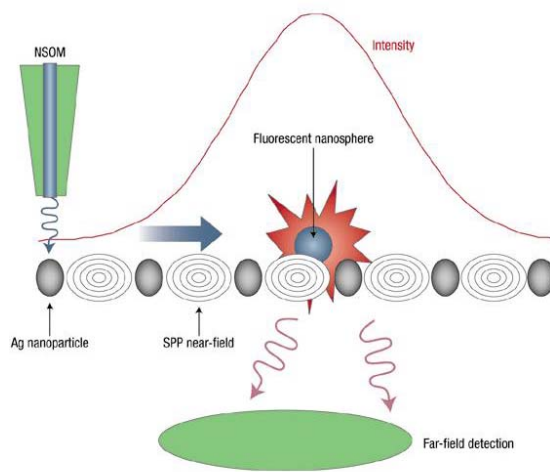
Μεγάλη ευαισθησία εμφανίζεται στο σχήμα που έχουν, καθότι όταν σπάει η σφαιρική συμμετρία εμφανίζονται νέες πλασμονικές συχνότητες ανάλογα με την πόλωση του εισερχόμενου πεδίου. Σε μεταλλικές νανοράβδους, για παράδειγμα, το πλασμόνιο επιφανείας σπάει σε δύο κομάτια, ένα που αντιστοιχεί στην εγκάρσια ταλάντωση πλάσματος, και είναι παρόμοιο σε μορφή και συχνότητα με αυτό ενός σφαιρικού νανοσωματιδίου της ίδιας διατομής, και ένα που εμφανίζεται σε μικρότερες συχνότητες και αντιστοιχεί σε διαμήκη ταλάντωση και εξαρτάται ισχυρά από τον λόγο των διαστάσεων που είναι το μήκος δια το πλάτος της νανοράβδου.

9.5. Κυματοδηγοί μεταλλικών νανοσωματιδίων

Το επαγόμενο δίπολο στην κατάσταση συντονισμού σε ένα μεταλλικό νανοσωματίδιο μπορεί να επάγει ταλαντώσεις σε ένα γειτονικό νανοσωματίδιο, συντελώντας έτσι σε διάδοση ακτινοβολίας - κυματοδηγούς. Καθότι τα νανοσωματίδια είναι διαστάσεων πολύ μικρότερων του μήκους κύματος, οι κυματοδηγοί αυτοί θα έχουν την δυνατότητα να μεταφέρουν και να επεξεργάζονται φως σε διαστάσεις πολύ μικρότερες απ' ό,τι μπορούν να προσφέρουν σήμερα συμβατοί κυματοδηγοί ή και κυματοδηγοί φωτονικών κρυστάλλων. Ως εκ τούτου είναι πολλά υποσχόμενοι για οπτική ολοκλήρωση πολύ υψηλής πυκνότητας. Το μόνο πρόβλημα προς την υλοποίηση αυτού είναι η υψηλή απορρόφηση που συνοδεύει την δημιουργία των πλασμονίων επιφανείας, με αποτέλεσμα η έρευνα να

επικεντρώνεται στην ελαχιστοποίηση του μήκους των διατάξεων ώστε η ζητούμενη λειτουργία (π.χ. οπτικός διακόπτης, μνήμη, λογική πράξη) να γίνεται γρήγορα πριν απορροφηθεί πλήρως και χαθεί όλη η πληροφορία.

Στο Σχ. 9.9 είναι η απεικόνιση ενός πρόσφατου πειράματος για την ανίχνευση και επιβεβαίωση της δυνατότητας χρήσης αλυσίδων μεταλλικών νανοσωματιδίων σαν κυματοδηγούς. Μια δέσμη φωτός απο μια ακίδα (αριστερά) διεγείρει ένα πλασμόνιο επιφανείας στην πρώτη νανοσφαίρα χρυσού της αλυσίδας. Το πλασμόνιο διαδίδεται κατα μήκος της αλυσίδας, μέχρι το σημείο που συναντά ένα κατάλληλα τοποθετημένο φθορίζων μόριο, το οποίο διεγείρεται απο το πλασμόνιο και στην συνέχεια επανεκπέμπει το φως, το οποίο ανιχνεύεται, επαληθεύοντας έτσι την πλασμονική διάδοση.



Σχήμα 9.9. Πειραματική διάταξη για την επαλήθευση της διάδοσης κυμάτων διαμέσου αλυσίδων μεταλλικών νανοσωματιδίων, με τον μηχανισμό των πλασμονίων επιφανείας (πηγή: *J.R. Krenn, Nature Materials 2, 210–211 (2003)*).

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- J.D. Jackson, “Classical Electrodynamics” (John Wiley & Sons, Inc. New York, 1962)
- Στέφανος Τραχανάς, “Κβαντομηχανική I και II” (Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο, 1988)
- W.D. Callister Jr. “*Materials Science and Engineering, an Introduction*” (John Wiley & Sons, Inc. New York, 2000)
- N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, “*Solid State Physics*”, (Saunders College, Philadelphia, 1976)
- J.D. Joannopoulos, R.D. Meade and J.N Winn, “*Photonic Crystals: Molding the flow of Light*” (Princeton University Press, 1995).
- F. Wooten, “*Optical Properties of Solids*”, (Academic Press, New York, 1972).
- Paras N. Prasad, “*Nanophotonics*”(John Wiley & Sons, Inc. New Jersey, 2004).
- B.E.A. Saleh and M.C. Teich, “*Fundamentals of Photonics*” (John Wiley & Sons, Inc. New York, 1991)
- L.A. Coldren and S.W. Corzine, “*Diode Lasers and Photonic Integrated Circuits*” (John Wiley & Sons, Inc. New York, 1995)
- Stefan A. Maier, “*Plasmonics: Fundamentals and Applications*”, (Springer, New York, 2007).