

Εθνικό Μετσοβίο Πολύτεχνείο Σχολή Ηλεκτρολογών Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών Τομέας Συστηματών Μεταδόσης Πληροφορίας και Τεχνολογίας Υλικών

ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΚΑΙ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΕΝΗΣ ΔΙΑΤΑΞΗΣ ΦΩΤΟΝΙΚΩΝ ΚΡΥΣΤΑΛΛΩΝ ΠΥΡΙΤΙΟΥ ΓΙΑ ΑΝΙΧΝΕΥΣΗ ΑΕΡΙΩΝ ΜΕΣΩ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΚΗΣ ΑΠΟΡΡΟΦΗΣΗΣ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Κωνσταντίνος Δ. Τσουκαλάς

Επιβλέπων Ηρακλής Αβραμόπουλος Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα Ιούλιος 2017



Εθνικό Μετσοβίο Πολύτεχνείο Σχολή Ηλεκτρολογών Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών Τομέας Συστηματών Μεταδόσης Πληροφορίας και Τεχνολογίας Υλικών

ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΚΑΙ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΕΝΗΣ ΔΙΑΤΑΞΗΣ ΦΩΤΟΝΙΚΩΝ ΚΡΥΣΤΑΛΛΩΝ ΠΥΡΙΤΙΟΥ ΓΙΑ ΑΝΙΧΝΕΥΣΗ ΑΕΡΙΩΝ ΜΕΣΩ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΚΗΣ ΑΠΟΡΡΟΦΗΣΗΣ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Κωνσταντίνος Δ. Τσουκαλάς

Επιβλέπων Ηρακλής Αβραμόπουλος Καθηγητής

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή την 11^η Ιουλίου 2017.

.....

.....

Ηρακλής Αβραμόπουλος Καθηγητής Ε.Μ.Π. Κωνσταντίνος Δέρβος Καθηγητής Ε.Μ.Π. Γεώργιος Φικιώρης Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....

Αθήνα Ιούλιος 2017

.....

Κωνσταντίνος Δ. Τσουκαλάς

Διπλωματούχος Ηλεκτρολόγος Μηχανικός και Μηχανικός Υπολογιστών Ε.Μ.Π.

Copyright © Κωνσταντίνος Τσουκαλάς, 2017

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς τον συγγραφέα.

Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτό το έγγραφο εκφράζουν τον συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευθεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

Περίληψη

Στην παρούσα εργασία σχεδιάζουμε μέσω προσομοίωσης έναν κυματοδηγό σχισμής φωτονικού κρυστάλλου χρησιμοποιώντας τεχνολογία πυριτίου πάνω σε μονωτικό. Η δομή αυτή μας δίνει την δυνατότητα να κατασκευάσουμε τον φωτονικό κρύσταλλο πάνω σε μία αιωρούμενη δομή πυριτίου, αφού είναι τεχνολογικά εφικτό να απομακρύνουμε επιλεκτικά το μονωτικό στρώμα που βρίσκεται ακριβώς κάτω απο αυτό το στρώμα του πυριτίου που γίνεται η κυματοδήγηση. Αυτή η τεχνική αποσκοπεί στο να διευκολύνει ένα αέριο που υπάρχει στον περιβάλλοντα χώρο να εισέλθει στη διάταξή μας και να αλληλεπιδράσει με το πεδίο αφού μελλοντικός στόχος είναι η χρήση της διατάξης ως αισθητήρα πτητικών ενώσεων. Εστιάζουμε την μελέτη στο μήκος κύματος των 1550 nm που έχει ιδιαίτερο ενδιαφέρον αφού χρησιμοποιείται ευρέως στις τηλεπικοινωνίες και συνεπώς οι τεχνολογικές διατάξης που είναι προσαρμοσμένες σε αυτό είναι πολυ αναπτυγμένες και οικονομικές. Ωστόσο επιθυμούμε η διάταξή μας να μπορεί να λειτουργεί και σε ένα εύρος κοντά στα 1550 nm κρατώντας τις βασικές της ιδιότητες όπως είναι η δημιουργία αργού φωτός. Αυτή την ιδιότητα την επιτυγχάνουμε βασιζόμενοι στη θεωρία των ατελειών (defects) σε περιοδικές δομές όπως είναι οι φωτονικοί κρύσταλλοι οι οποίοι παρουσιάζουν συχνοτικό χάσμα. Βάση αυτής της θεωρίας μία παρέμβαση στον φωτονικό κρύσταλλο "σπάει" την περιοδικότητα της διάταξης και έχει ως αποτέλεσμα την εισαγωγή νέων καταστάσεων μέσα στο συχνοτικό χάσμα της σχέσης διασποράς. Στην περιπτωσή μας χρησιμοποιούμε μια γραμμική ατέλεια (line defect) που αποτελείται απο την απουσία μια σειράς οπών του εξαγωνικού πλέγματος στην οποία και κυματοδηγείται το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Στην συνέχεια αντικαθιστούμε την γραμμική ατέλεια με μία σχισμή αέρα η οποία εμφανίζει μια νέα κατασταση μέσα στο χάσμα. Αυτή η νέα κατάσταση επιτρέπει την κυματοδηγηση του πεδίου για μήκος κύματος 1550 nm και επιτυγχάνει το φαινόμενο του αργού φωτός για τη συχνότητα αυτή.

Η σχεδίαση της διάταξης γίνεται με τη μέθοδο Finite Difference Time Domain (FDTD) ή αλλιώς τη μέθοδο πεπερασμένων διαφορών στο πεδίο του χρόνου. Αρχικά ξεκινήσαμε την σχεδίαση σε μια δισδιάστατη διάταξη καθώς αυτό επιταχύνει της προσομοιώσεις μας και στην συνέχεια προχωρήσαμε σε τρισδιάστατες προσομοιώσεις. Η ανίχνευση αερίου στηρίζεται στην φασματοσκοπία απορρόφησης στην ιδιότητα δηλ. πτητικές ενώσεις όπως το διοξείδιο του άνθρακα, το μεθάνιο ή η αμμωνία να απορροφούν επιλεκτικά την ακτινοβολία στην περιοχή των 1550 nm που σχεδιάσθηκε η διάταξη

Λέξεις κλειδιά: Φωτονικοί κρύσταλλοι, κυματοδηγός σχισμής, φασματοσκοπία απορρόφησης

Abstract

In the present study, we design a slot photonic crystal waveguide in Silicon-On-Insulator (SOI), which is free standing after having removed the buried oxide of SOI. This technique aims to make it easier for an ambient gas to enter our structure and interact more efficiently with the field, as a potential use of this device is the detection of volatile compounds.

We focus our design on the wavelength of 1550 nm, which is of particular interest since it is of broad use in telecommunications. However, we want our device to be able to operate in a range close to 1550 nm by maintaining its basic properties such as the generation of slow light. We first design a photonic crystal made from a periodic structure of holes on the silicon layer of SOI, which exhibits a frequency gap. Subsequently we break this periodicity by creating a linear defect and thus generating an allowed frequency within the frequency gap of the dispersion relationship. In our case, we use a line defect consisting of removed line of holes in the hexagonal mesh along which the electromagnetic field is propagating. In the next step, we replace the linear defect with an air slot that displays a new state within the gap. This new state allows the field to be guided at a wavelength of 1550 nm achieving at the same time slow light behavior for the corresponding frequency.

The layout has been designed using the Finite Difference Time Domain (FDTD) method. We have first designed a two-dimensional layout as it accelerates our simulations and then proceeded to three-dimensional simulations. Gas detection is based on absorption spectroscopy i.e. the property of volatile compounds such as carbon dioxide, methane or ammonia, to selectively absorb radiation around 1550 nm.

Keywords: Photonic Crystal, Slot Waveguide, FDTD, SOI, Absorption Spectroscopy

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω πρώτα τον καθηγητή Ηρακλή Αβραμόπουλο, Διευθυντή του Εργαστηρίου Φωτονικών Επικοινιών της ΣΗΜΜΥ για την ανάθεση του ενδιαφέροντος αυτού θέματος Διπλωματικής εργασίας που μου έδωσε την ευκαιρία να εμβαθύνω και επεκτείνω τις γνώσεις μου στο πεδίο του ηλεκτρομαγνητισμού, της φωτονικής αλλά και της Φυσικής Στερεάς Κατάστασης. Ιδιαίτερες ευχαριστίες ανήκουν στον κ. Ιωάννη Πουλόπουλο υποψήφιο διδάκτορα στο εργαστήριο Φωτονικών Επικοινωνιών για την βοήθειά του σε όλη την διάρκεια της Διπλωματικής αλλά και στον κ. Δημήτρη Καλβρουζιώτη Ερευνητή στο ίδιο εργαστήριο για την καθοδήγησή του ιδιαίτερα στο ξεκίνημα της εργασίας.

Επίσης ευχαριστώ τους καθηγητές της ΣΗΜΜΥ Κωνσταντίνο Δέρβο και Γεώργιο Φικιώρη που δέχθηκαν να είναι μέλη της εξεταστικής επιτροπής της Διπλωματικής εργασίας.

Τέλος ευχαριστώ ιδιαίτερα την οικογένειά μου αλλά και τους φίλους μου που με την στάση τους με εμψύχωναν σε όλη την διάρκεια αυτής της εργασίας αλλά και για την βοήθεια που μου παρείχαν όλα τα προηγούμενα χρόνια των σπουδών μου.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

		Σελ.
КΕΦ	ΑΛΑΙΟ 1 ΦΩΤΟΝΙΚΟΙ ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΙ: ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΚΑΙ ΔΙΑΤΑΞΕΙΣ	1
1.1	Ολοκληρωμένη Οπτική τεχνολογία Πυριτίου	1
1.2	Πυρίτιο Πάνω σε Μονωτικό	3
1.3	Διαδικασίες σχηματοποίησης	4
1.4	Φωτονικοί Κρύσταλλοι και εφαρμογές τους σε αισθητήρες	6
1.5	Φασματοσκοπία Απορρόφησης	9
1.6	Στόχος της Διπλωματικής Εργασίας	14
КΕФ	ΑΛΑΙΟ 2 ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΚΥΜΑΤΟΔΗΓΗΣΗ	17
2.1	Ηλεκτρομαγνητικές εξισώσεις	17
2.2	Ανάκλαση κύματος σε Διηλεκτρικό Υλικό	19
2.3	Κυματοδήγηση	22
2.4	Κυματοδηγός Σχισμής	25
2.5	Η αριθμητική Μέθοδος Πεπερασμένων Διαφορών (FDTD)	27
КΕΦ	ΑΛΑΙΟ 3 ΘΕΩΡΙΑ ΦΩΤΟΝΙΚΩΝ ΚΡΥΣΤΑΛΛΩΝ	33
3.1	Διακριτή Συμμετρία Μετατόπισης	33
3.2	Φωτονικές Ενεργειακές Ζώνες	36
3.3	Περιστροφική Συμμετρία και μη αναγώγιμη Ζώνη Brillouin	37
3.4	Καθρεπτική Συμμετρία και Διαχωρισμός των ρυθμών	39
3.5	Δισδιάστατοι Φωτονικοί Κρύσταλλοι	40
3.6	Τετραγωνικό Πλέγμα Διηλεκτρικών Στηλών	42
3.7	Εντοπισμός του φωτός από Ατέλειες	43
3.8	Γραμμικές Ατέλειες και Κυματοδηγοί	46
КΕФ	ΑΛΑΙΟ 4 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΔΙΑΤΑΞΗΣ ΦΩΤΟΝΙΚΩΝ ΚΡΥΣΤΑΛΛΩΝ	50
4.1	Δισδιάστατο Τετραγωνικό Πλέγμα	51
4.2	Δισδιάστατο Τριγωνικό Πλέγμα	55
4.3	Θεώρημα Κλίμακας	56
4.4	Κατασκευή Εξαγωνικού Φωτονικού Κρυστάλλου	59
4.5	Τρισδιάστατο Εξαγωνικό Πλέγμα	63
4.6	Διάταξη Πεπερασμένου Πλάτους	66
4.7	Διάταξη Μετάδοσης	68
КΕФ	ΑΛΑΙΟ 5 ΓΡΑΜΜΙΚΕΣ ΑΤΕΛΕΙΕΣ ΚΑΙ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΚΥΜΑΤΟΔΗΓΟΥ ΣΧΙΣΜΗΣ	72
5.1	Γραμμική Ατέλεια Πυριτιου	72
5.2	Γραμμική Ατέλεια Σχισμής	75
5.3	Αργό Φώς	79
5.4	Διάταξη Μετάδοσης	81
5.5	Αργό Φώς και Απώλειες Μετάδοσης	82
КΕΦ	ΑΛΑΙΟ 6 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΠΡΟΟΠΤΙΚΕΣ	87

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1 ΦΩΤΟΝΙΚΟΙ ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΙ: ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΚΑΙ ΔΙΑΤΑΞΕΙΣ

1.1 Ολοκληρωμένη Οπτική Τεχνολογία Πυριτίου

Η παρούσα εργασία στοχεύει στην προσομοίωση διατάξεων φωτονικών κρυστάλλων για χρήση σε αισθητήρες αερίων που κατασκευάζονται χρησιμοποιώντας την τεχνολογία πυριτίου. Για τον λόγο αυτό, στο εισαγωγικό αυτό κεφάλαιο αναφερόμαστε εν συντομία στους λόγους που έχουν οδηγήσει τους ερευνητές στην επιλογή του πυριτίου, στις βασικές διεργασίες που χρησιμοποιούνται για την κατασκευή διατάξεων με βάση φωτονικούς κρυστάλλους αλλά και τις εφαρμογές που αυτοί βρίσκουν ιδιαίτερα στην περιοχή αισθητήρων πτητικών ουσιών.

Ο νόμος του Moore που αναφέρει ότι ο αριθμός των τρανζίστορ ανα μονάδα επιφάνειας σε ένα ολοκληρωμένο κύκλωμα διπλασιάζεται κάθε δύο χρόνια έχει οδηγήσει την εξέλιξη της βιομηχανίας ηλεκτρονικών για μια 50ετία. Τα ολοκληρωμένα κυκλώματα έχουν αναπτυχθεί εκθετικά από τις 30 διατάξεις τρανζίστορ του 1965 στους σημερινούς μικροεπεξεργαστές υψηλής τεχνολογίας που υπερβαίνουν το ένα δισεκατομμύριο τρανζίστορ ανά ψηφίδα. Δεκαετίες επενδύσεων έρευνας και κατασκευής με οδηγό τον νόμο του Moore έχουν οδηγήσει σε σημαντικά κέρδη λειτουργικής απόδοσης και συγχρόνως σε σημαντική μείωση του κόστους των ψηφίδων.

Από την άλλη, η έκρηξη του Διαδικτύου άλλαξε τον τρόπο με τον οποίο δουλεύουμε. Η ανάγκη να «συνδέονται τα πάντα» δημιουργεί μια νέα εποχή επικοινωνίας. Αυτή η νέα εποχή θα συνεχίσει να αυξάνει την ανάγκη για τεχνολογίες μεγαλύτερου εύρους ζώνης ώστε να συμβαδίζουν με την απόδοση του επεξεργαστή. Λόγω του νόμου του Moore, η υπολογιστική ισχύς περιορίζεται πλέον λιγότερο από την απόδοση του υπολογιστή παρά από το ρυθμό με τον οποίο τα δεδομένα μπορούν να ταξιδεύουν μεταξύ του επεξεργαστή και του εξωτερικού κόσμου. Οι λύσεις οπτικών ινών αντικαθιστούν λύσεις με βάση το χαλκό, οι οποίες δεν μπορούν πλέον να ικανοποιήσουν τις απαιτήσεις εύρους ζώνης και απόστασης που απαιτούνται για τις επικοινωνίες δεδομένων. Το μέλλον της οπτικής δικτύωσης στηρίζεται στην ικανότητά μας να εφαρμόσουμε την οπτική τεχνολογία από τα Δίκτυα, στα κέντρα δεδομένων, στο σπίτι και, ει δυνατόν, ίσως κάποια μέρα απευθείας μέσα στον μικροεπεξεργαστή. Για να μπορεόει όμως να γίνει αυτό εφικτό πρέπει η οπτική τεχνολογία να μπορεί να κατασκευασθεί φθηνά ακολουθώντας παρόμοια λογική με αυτήν των ολοκληρωμένων κυκλωμάτων. Προς την κατεύθυνση αυτή η χρήση του πυριτίου ως υλικού κατασκευής θα ήταν η ιδανική [1].

Αν και είναι γνωστό ότι το πυρίτιο είναι το βέλτιστο υλικό για ηλεκτρονικά, μόνο πρόσφατα το πυρίτιο θεωρήθηκε ως μια πρακτική επιλογή για την οπτική. Το πυρίτιο έχει στην πραγματικότητα πολλές ιδιότητες που ευνοούν την οπτική ίνα. Το χάσμα ζώνης πυριτίου (1,1

eV) είναι τέτοιο ώστε το υλικό να είναι διαφανές σε μήκη κύματος που χρησιμοποιούνται συνήθως για οπτική μεταφορά (περίπου 1,3-1,6 μm). Κάποιος μπορεί να χρησιμοποιήσει τυποποιημένες τεχνικές CMOS επεξεργασίας για τη δημιουργία οπτικών κυματοδηγών πάνω στην επιφάνεια του πυριτίου. Παρόμοια με μια οπτική ίνα, αυτοί οι οπτικοί κυματοδηγοί μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να περιορίσουν και να κατευθύνουν το φως καθώς περνάει μέσα από το πυρίτιο. Λόγω των μηκών κύματος που χρησιμοποιούνται συνήθως για την οπτική μεταφορά και του υψηλού δείκτη διάθλασης του πυριτίου, τα μεγέθη χαρακτηριστικών που απαιτούνται για την επεξεργασία αυτών των κυματοδηγών πυριτίου είναι της τάξεως των 0,5-1 μm. Οι απαιτήσεις λιθογραφίας που απαιτούνται για την επεξεργασία κυματοδηγών με αυτά τα μεγέθη υπάρχουν σήμερα. Εάν προχωρήσουμε ενσωματώνοντας διατάξεις φωτονικών κρυστάλλων -που αποτελεί και το αντικείμενο αυτής της διπλωματικής εργασίας-, η τεχνολογία πυριτίου 90 nm πληροί τις τεχνικές απαιτήσεις που απαιτούνται για την επεξεργασία τέτοιων διατάξεων. Αυτή η τεχνολογία είναι διαθέσιμη εδώ και μία δεκαετία και επομένως διαθέτουμε όλες τις τεχνολογίες επεξεργασίας υλικών που απαιτούνται για την παραγωγή φωτονικών διατάξεων με βάση το πυρίτιο.

Η ολοκληρωμένη οπτική στο πυρίτιο είναι ενδιαφέρουσα για έναν συνδυασμό τεχνολογικών και οικονομικών λόγων. Τα ζητήματα κόστους είναι σχετικά προφανή και σχετίζονται με το κόστος των πλακιδίων πυριτίου και Πυριτίου Πάνω σε Μονωτικό (SOI) σε σύγκριση με πιο εξωτικά υλικά όπως οι ενώσεις ΙΙΙ-V ή το νιοβικό λίθιο (LiNbO3), με το κόστος επεξεργασίας των πλακιδίων καθώς και με την πυκνότητα συσκευασίας που μπορεί να επιτευχθεί. Το πυρίτιο είναι καλά γνωστό και ανθεκτικό υλικό και η επεξεργασία του έχει αναπτυχθεί από τη βιομηχανία ηλεκτρονικών σε επίπεδο που είναι περισσότερο από αρκετό για τις πιο ολοκληρωμένες οπτικές εφαρμογές. Θα μπορούσε να υποστηριχθεί ότι μια εναλλακτική τεχνολογία με το πυρίτιο είναι αυτή των ολοκληρωμένων οπτικών με βάση το διοξείδιο του πυριτίου που είναι χαμηλότερου κόστους, αλλά το διοξείδιο πυριτίου είναι ένα παθητικό υλικό με ελάχιστες προοπτικές για την κατασκευή ενεργών συσκευών όπως πηγές, ανιχνευτές ή οπτικοί διαμορφωτές. Οι πηγές και οι ανιχνευτές (πάνω από 1,1μm) σε πυρίτιο δεν έχουν αναφερθεί ακόμη με επαρκή απόδοση ώστε να καταστούν εμπορικά βιώσιμες, αλλά αυτό είναι ένα ενεργό ενεργό ερευνητικό θέμα σε όλο τον κόσμο. Παρόλα αυτά, η δυνατότητα ακριβούς μικροεπεξεργασίας του πυριτίου έχει επιτρέψει ώστε οι πηγές και οι ανιχνευτές να μπορούν να ευθυγραμμιστούν με ακρίβεια στους κυματοδηγούς πυριτίου σε ένα υβριδικό κύκλωμα. Και οι πηγές πυριτίου και οι ανιχνευτές που μπορούν να ανακαλυφθούν στο μέλλον θα πρέπει να είναι πολύ οικονομικά αποδοτικές για να εκτοπίσουν αυτήν την προσέγγιση ή να προσφέρουν πολύ σημαντικές βελτιώσεις στην απόδοση.

Οι πιο ελκυστικές πτυχές της κατασκευής οπτικών διατάξεων από πυρίτιο είναι το χαμηλό πρωτογενές κόστος του υλικού, οι ώριμες και καλά χαρακτηρισμένες τεχνικές επεξεργασίας που υποστηρίζονται από δεκαετίες έρευνας, ανάπτυξης και κατασκευής στον τομέα της

μικροηλεκτρονικής και η δυνατότητα ενσωμάτωσής τους με ηλεκτρικές διατάξεις στο ίδιο υπόστρωμα.

Θα αναφερθούμε στην συνέχεια σε πολύ βασικές τεχνολογίες πυριτίου που επιτρέπουν την κατασκευή είτε απλών κυματοδηγών είτε διατάξεων φωτονικών κρυστάλλων με τους οποίους ασχολούμαστε στην παρούσα εργασία.

1.2 Πυρίτιο Πάνω σε Μονωτικό

Η μεγάλη πλειοψηφία των φωτονικών διατάξεων πυριτίου έχουν κατασκευαστεί χρησιμοποιώντας την πλατφόρμα Πυριτίου Πάνω σε Μονωτικό (SOI). Αυτό το υλικό θα χρησιμοποιήσουμε σαν βάση για τα πειράματα προσομοίωσης διατάξεων φωτονικών κρυστάλλων και στην παρούσα εργασία. Θεωρούμε επομένως σκόπιμο να αναφερθούμε στην παράγραφο αυτή στο SOI. Το SOI είναι ένας γενικός όρος που χρησιμοποιείται για να περιγράψει δομές που αποτελούνται από ένα λεπτό στρώμα κρυσταλλικού πυριτίου πάνω σε ένα μονωτικό στρώμα. Η πιο συνηθισμένη δομή SOI που χρησιμοποιείται στη μικροηλεκτρονική είναι το πυρίτιο πάνω σε διοξείδιο του πυριτίου (SiO₂), όπου ένα στρώμα SiO₂ βρίσκεται ανάμεσα σε ένα παχύ υπόστρωμα κρυσταλλικού πυριτίου (εκατοντάδες μικρών) και ένα λεπτό επιφανειακό στρώμα κρυσταλλικού πυριτίου (σχήμα 1). Τα πάχη τόσο του κρυσταλλικού πυριτίου όσο και του θαμμένου στρώματος διοξειδίου του πυριτίου είναι της τάξη του ενός μικρού, αλλά αυτή η τιμή μπορεί να ποικίλει σημαντικά ανάλογα με τη διαδικασία κατασκευής.

Crystalline Si	
SiO ₂	
Si substrate	

Σχήμα 1. Σχηματικό διάγραμμα Πυριτίου πάνω σε Μονωτικο (διοξείδιο πυριτίου)

Το θαμμένο SiO₂ έχει δείκτη διάθλασης 1,46, σημαντικά χαμηλότερο από αυτόν του στρώματος

κρυσταλλικού πυριτίου (περίπου 3,5). Ως εκ τούτου, αυτός ο τύπος SOI σχηματίζει κλασσική δομή κυματοδηγού. Ο κυματοδηγός μπορεί να γίνει συμμετρικός με θερμική οξείδωση της επιφάνειας του πυριτίου ώστε να σχηματισθεί και ένα επιφανειακό στρώμα οξειδίου πυριτίου στην επιφάνεια του κρυσταλλικού πυριτίου. Στην πράξη όμως οι δείκτες διάθλασης τόσο του αέρα (n = 1) όσο και του διοξειδίου του πυριτίου (n ≈ 1.5) είναι τόσο διαφορετικοί από εκείνους του πυριτίου (n ≈ 3.5) ώστε οι δύο διαμορφώσεις (με οξείδιο ή όχι στην επιφάνεια) είναι αρκετά παρόμοιες.

Το SOI κατασκευάζεται χρησιμοποιώντας διάφορες τεχνολογίες από τις οποίες αναφέρουμε τις πλέον διαδεδομένες [1]:

(α) Την τεχνολογία SIMOX όπου το οξείδιο του πυριτίου σχηματίζεται μετά από εμφύτευση οξυγόνου εντός δισκιδίου πυριτίου και στην συνέχεια θέρμανση υψηλής θερμοκρασίας που βοηθάει στην χημική αντίδραση του οξυγόνου με το πυρίτιο με αποτέλεσμα τον σχηματισμό θαμμένου SiO₂ και

(β) την τεχνολογία επικόλλησης δύο οξειδωμένων δισκιδίων πυριτίου και λέπτυνσης του ενός εκ των δύο στην συνέχεια όπως φαίνεται στο σχήμα 2.



Σχήμα 2. Διαδικασίες κατασκευή Πυριτίου σε Μονωτικό (α) με χρήση 2 οξειδωμένων δισκιδίων πυριτίου (β) μεταξύ τους επικόλληση (γ) λέπτυνση του ενός δισκιδίου [1]

1.3 Διαδικασίες Σχηματοποίησης

Τέτοιες δομές SOI μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την καθοδήγηση του φωτός, αλλά χωρίς καθορισμό χαρακτηριστικών δομών που παρέχουν πλευρικό περιορισμό του φωτός, αυτοί οι κυματοδηγοί έχουν λίγες εφαρμογές στη φωτονική του πυριτίου.

Το ενδιαφέρον λοιπόν εστιάζεται σε τεχνολογικές διαδικασίες που επιτρέπουν να σχηματοποιήσουμε το επιφανειακό στρώμα κρυσταλλικού πυριτίου. Χωρίς να επεκταθούμε πολύ αναφέρουμε τις διαδικασίες σχηματοποίησης που είναι η λιθογραφία και η εγχάραξη.



Σχήμα 3. Διαδικασία οπτικής λιθογραφίας για την σχηματοποίηση ενός λεπτού στρώματος [1]. Κατά την οπτική λιθογραφία η αποτύπωση γίνεται μέσω της διέλευσης φωτός από την μάσκα στην οποία έχουν αποτυπωθεί τα γεωμετρικά σχήματα, με σκοτεινές (μη διαπερατές στο φως) και φωτεινές (διαπερατές στο φως) περιοχές. Η φωτεινή ακτινοβολία διαπερνάει μόνο τις φωτεινές περιοχές και ενεργοποιεί αντίστοιχα μια φωτοευαίσθητη πολυμερική ρητίνη (resist), η οποία έχει εναποτεθεί επί του δισκιδίου. Ακολουθεί η επεξεργασία του δισκιδίου με την ενεργοποιημένη τοπικά ρητίνη στο τέλος της οποίας έχουν απομακρυνθεί (development) οι περιοχές της ρητίνης που επιθυμούμε. Υπάρχουν δύο γενικές κατηγορίες ρητινών: η θετική ρητίνη, στην οποία μετά την εμφάνιση αφαιρείται η ρητίνη από της περιοχές που έχουν εκτεθεί στο φως, και η αρνητική ρητίνη κατά την επεξεργασία της οποίας απομένει ρητίνη μόνο στις περιοχές που αντιστοιχούν στις φωτεινές περιοχές της μάσκας. Η έκθεση της ρητίνης πραγματοποιείται με υπεριώδη ακτινοβολία (<400nm), ώστε να εκμεταλλευτούμε το μικρότερο μήκος κύματος και να γίνει εφικτή η εμφάνιση όσο το δυνατόν μικρότερων δομών.

Στην ηλεκτρονική λιθογραφία η αποτύπωση γίνεται με κατευθυνόμενη δέσμη ηλεκτρονίων πολύ μικρής διαμέτρου η οποία βομβαρδίζει την ρητίνη. Μ΄ αυτό τον τρόπο είναι εφικτή η επίτευξη πολύ μικρών δομών (<0.1μm), αλλά η όλη διαδικασία είναι χρονοβόρα και απαιτεί ακριβό εξοπλισμό. Η κύρια χρήση της είναι η κατασκευή των μασκών που χρησιμοποιούνται στην οπτική λιθογραφία, εφόσον είναι ο πλέον ακριβής τρόπος αποτύπωσης ενός γεωμετρικού σχήματος στην μάσκα.

Με τη λιθογραφία αποτυπώνεται το γεωμετρικό σχέδιο της μάσκας (pattern) επάνω στην ρητίνη όπως περιγράψαμε στις προηγούμενες παραγράφους. Μετά την λιθογραφία ακολουθεί η αφαίρεση ή εγχάραξη (etching) του υμενίου που βρίσκεται κάτω από την ρητίνη. Οι περιοχές του υμενίου που έχουν ρητίνη προστατεύονται από την διαδικασία της εγχάραξης, ενώ οι περιοχές που είναι εκτεθειμένες (δεν έχουν ρητίνη) εγχαράσσονται. Το λιθογραφημένο υμένιο της ρητίνης λειτουργεί ως μάσκα προστασίας των περιοχών εκείνων που δεν θέλουμε να υποστούν εγχάραξη.

Με βάση τις διαδικασίες της λιθογραφίας και της εγχάραξης μπορεί κανείς χρησιμοποιώντας ένα δισκίδιο SOI να κατασκευάσει περιοδικές δομές οπών στο επιφανειακό κρυσταλλικό πυρίτιο όπως ενδεικτικά φαίνεται στο σχήμα 4. Παρόμοιες δομές αποτελούν την βάση για τις διατάξεις φωτονικών κρυστάλλων που θα προσομοιωθούν στην παρούσα εργασία.



Σχήμα 4. Σχηματική αναπαράσταση ενός κυματοδηγού φωτονικού κρυστάλλου πάνω σε σε πυρίτιο σε μονωτικό. Το φως περιορίζεται στο ανώτερο στρώμα πυριτίου με ολική εσωτερική ανάκλαση, ενώ οριζόντια περιορίζεται από τον φωτονικό κρύσταλλο (κεφάλαιο 3).

1.4 Φωτονικοί Κρύσταλλοι και Εφαρμογές τους σε Αισθητήρες

Παρόλον ότι η θεωρία των φωτονικών κρυστάλλων θα αναπτυχθεί στο κεφάλαιο 3, στην παράγραφο αυτή κάνουμε μία γενική εισαγωγή της έννοιας παρουσιάζοντας παράλληλα το επιστημονικό διεθνές ενδιαφέρον που έχει αναπτυχθεί γύρω από την χρήση τους σε τεχνολογικές εφαρμογές αισθητήρων αναδεικνύοντας και την επικαιρότητα της παρούσας μελέτης.



Σχήμα 5. Φωτονικοί κρύσταλλοι με κολώνες και οπές

Ο φωτονικός κρύσταλλος είναι μια περιοδική διηλεκτρική δομή (σχήμα 5) με την ικανότητα καθοδήγησης και χειρισμού του φωτός στην κλίμακα του οπτικού μήκους κύματος [2]. Από την πρώτη φορά που προτάθηκε το 1987 [3], ο φωτονικός κρύσταλλος έχει μελετηθεί εκτενώς τόσο θεωρητικά όσο και πειραματικά. Τις τελευταίες δύο δεκαετίες, οι διατάξεις φωτονικών κρυστάλλων έχουν προσελκύσει σημαντικό ενδιαφέρον εξαιτίας των μοναδικών ιδιοτήτων διασποράς τους που επιτρέπουν τον έλεγχο και τον χειρισμό των αλληλεπιδράσεων φωτός-ύλης σε κλίμακες του μήκους κύματος του φωτός [4]. Διάφορες μικροσκοπικές εφαρμογές έχουν καταδειχθεί με φωτονικούς κρυστάλλους και κυματοδηγούς σχισμής για εκπομπή φωτός [5], κβαντική ηλεκτροδυναμική κοιλοτήτων, [6] και ηλεκτρο-οπτική διαμόρφωση [7].





Ιδιαίτερα, με τη χρήση κατάλληλων υλικών και την προσαρμογή των γεωμετρικών παραμέτρων, ο κυματοδηγός φωτονικών κρυστάλλων (PCW) που έχει την μορφή που φαίνεται στο σχήμα 5 μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την πραγματοποίηση αισθητήρων υψηλής ευαισθησίας και μικροσκοπικού μεγέθους λόγω του μεγάλου εύρους ζώνης και της πραγματοποίησης αργού φωτός σε αυθαίρετο μήκος κύματος [8]. Πρόσφατα, έχει βρεθεί ότι ο κυματοδηγός φωτονικού κρυστάλλου θα μπορούσε να ενισχύσει την αλληλεπίδραση φωτός- ύλης λόγω της εξαιρετικά χαμηλής ομαδικής ταχύτητας κοντά στην άκρη της ζώνης PCW, η οποία θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί για την πραγματοποίηση αισθητήρα υψηλής ευαισθησίας και μικροσκοπικών διαστάσεων [9]. Ωστόσο, σε συμβατικούς PCW, το αργό φως είναι συνήθως περιορισμένο στο μέσο υψηλού δείκτη διάθλασης, το οποίο είναι ένα μείζον μειονέκτημα σε αυτή την εφαρμογή όπου η αλληλεπίδραση με το αέριο προς ανίχνευση δοκιμή είναι ασθενής λόγω κακής επικάλυψης.





Ταυτόχρονα, με την ανάπτυξη της τεχνολογίας φωτονικής με βάση το πυρίτιο, οι ερευνητές διαπίστωσαν ότι ο κυματοδηγός σχισμής φωτονικού κρυστάλλου (slot photonic crystal waveguide/SPCW) που φαίνεται στο σχήμα 6 μπορεί να συνδυάσει την ικανότητα περιορισμού του φωτός στην σχισμή χαμηλού δείκτη διάθλασης με την αργή ταχύτητα φωτός που δημιουργεί ο φωτονικός κρύσταλλος [10].

Επί του παρόντος, αισθητήρες υψηλής ευαισθησίας με βάση την νανοκοιλότητα που δημιουργείται σε έναν SPCW έχουν μελετηθεί εντατικά, όπως αισθητήρας μετατόπισης [11], βιοχημικός αισθητήρας [12,13] και ο αισθητήρας διάθλασης [14,15]. Ωστόσο, υπάρχει ανάγκη για περαιτέρω έρευνα στην χρησιμοποίηση της ιδιότητας του αργού φωτός για εφαρμογή βιοχημικών αισθητήρων, στην οποία η βελτιστοποίηση της δομής του SPCW είναι βασική για την επίτευξη αισθητήρα υψηλής ευαισθησίας. Ειδικά στους χημικούς αισθητήρες αερίων η δημιουργία αργού φωτός αναμένεται να ενισχύσει την αλληλεπίδρασή του με το υπό ανίχνευση αέριο αυξάνοντας την ευαισθησία.

Οι διατάξεις φωτονικών κρυστάλλων έχουν δείξει σημαντικά αποτελέσματα στις εφαρμογές αισθητήρων λόγω της υψηλής ευαισθησίας στις μεταβολές του δείκτη διάθλασης στο περιβάλλον [16]. Αλλαγή του δείκτη διάθλασης ενός μέσου που προκαλείται από έναν αναλύτη δεν είναι, ωστόσο, αρκετά επαρκής για την ταυτοποίηση του αναλύτη. Αντιθέτως, το φάσμα απορρόφησης μιας αναλυόμενης ουσίας βασίζεται σε μοριακές ταλαντώσεις που σχετίζονται επακριβώς με τον αναλύτη με αποτέλεσμα τον προσδιορισμό του με μοναδικό τρόπο. Προς την κατεύθυνση αυτή οι Lai et al, έδειξαν ότι ένας κυματοδηγός σχισμής φωτονικού κρυστάλλου επιτρέπει την φασματοσκοπία οπτικής απορρόφησης σε τσιπ [17]. Σχετικά με την αρχή λειτουργίας της φασματοσκοπίας απορρόφησης αναφέρομαστε στην παράγραφο 1.5. Η εξασθένηση του οπτικού σήματος λόγω απορρόφησης όταν αυτό διέρχεται από ένα αέριο δίνεται από τον νόμο Lambert-Beer

 $I = I_o \exp [-\gamma \alpha CL]$

(1.1)

όπου οι παράμετροι Ι₀ είναι το σήμα εισόδου, C είναι η συγκέντρωση του αερίου, α είναι ο συντελεστής απορρόφησης, L το μήκος του κυματοδηγού σχισμής φωτονικού κρυστάλλου και γ έχει υπολογισθεί [18] ως

$$\gamma = f c/v_g$$

(1.2)

όπου f ο συντελεστής πλήρωσης του οπτικού μέσου και ν $_{g}$ η ταχύτητα ομάδας.

Η εξίσωση (1.2) δείχνει ότι η αργή διάδοση του φωτός (μικρά vg) ενισχύει σημαντικά την απορρόφηση. Επιπλέον, όσο μεγαλύτερο είναι το ηλεκτρικό πεδίο που επικαλύπτεται με την αναλυόμενη ουσία, τόσο μεγαλύτερη είναι η αποτελεσματική απορρόφηση από το μέσο. Και τα δύο χαρακτηριστικά του μικρού vg και του υψηλού f ικανοποιούνται από τον κυματοδηγό σχισμής φωτονικού κρυστάλλου.

Προς την κατεύθυνση αυτή τα τελευταία χρόνια έχουν εμφανισθεί εργασίες που ανιχνεύουν αέρια όπως π.χ. το ξυλένιο ως μία αντιπροσωπευτική μολυσματική ουσία για το περιβάλλον και την ανθρώπινη υγεία [18] χρησιμοποιώντας έναν κυματοδηγό φωτονικού κρυστάλλου σχισμής κατασκευασμένο σε SOI όπως φαίνεται στην εικόνα ηλεκτρονικού μικροσκοπίου στο σχήμα 7.



Σχήμα 7. SEM της κατασκευασμένης διάταξης κυματοδηγού, που δείχνει ένα εγχαραγμένο πρότυπο κυματοδηγού φωτονικού κρυστάλλου σχισμής. Τα ένθετα δείχνουν την απόσταση μεταξύ των οπών αέρα στις δύο πλευρές της υποδοχής [17, 19].

Η διάταξη αυτή επιτρέπει την δημιουργία αργού φωτός στα μήκη κύματος 1674, 1697, and 1720 nm, αντίστοιχα -όπου το ξυλένιο απορροφά- τα οποία μπορούν να επιτευχθούν σύμφωνα με τους συγγραφείς χρησιμοποιώντας μήκος περιόδου δομής a = 455, 458, and 460 nm αντίστοιχα. Η ευαισθησία του αισθητήρα ξυλενίου, ήταν της τάξης των μερικών ppm. Σε μια παρόμοια προσπάθεια [19] η διάταξη σχεδιάσθηκε ώστε να επιτρέπει την διέλευση φωτός μήκους κύματος 1667 nm όπου απορροφά το μεθάνιο με αποτέλεσμα την επίτευξη αισθητήρα μεθανίου ευαισθησίας μερικών δεκάδων ppm.

Μία πλήρης μετρητική διάταξη για έναν αισθητήρα αερίου φαίνεται στο σχήμα 8 όπως προτάθηκε από τους Zhang et al [20] οι οποίοι αναφέρουν την ανίχνευση ακετυλενίου στα 1530 nm με την χρήση κυματοδηγού φωτονικού κρυστάλλου σχισμής.



Σχήμα 8. Σχηματικό μετρητικής διάταξης αερίου με βάση φωτονικό κυματοδηγό σχισμής [20].

1.5 Φασματοσκοπία Απορρόφησης

Με τον όρο φασματοσκοπία αναφερόμαστε στη διαδικασία ανάλυσης της αλληλεπίδρασης μεταξύ ύλης και ενός μέρους του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος. Παραδοσιακά η φασματοσκοπία σχετίζονταν με το ορατό φάσμα αλλά πλέον η χρήση ακτίνων χ, γάμμα και υπεριώδους ακτινοβολίας αποτελούν και αυτες συχνές φασμοτοσκοπικές τεχνικές. Η φασματοσκοπία μπορεί να εμπεριέχει όλον των ειδών αλληλεπίδρασης του φωτός με την ύλη δηλαδη απορρόφηση, εκπομπή, διάθλαση κ.α.

1.5.1 Διακριτό και Συνεχές φάσμα

Όπως έγινε γνωστό από τη θεωρία της κβαντομηχανικής (1925) τα ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν διακριτές καταστάσεις σε κάθε άτομο (τροχιακά). Αυτό σημαίνει ότι ένα ηλεκτρόνιο χρειάζεται συγκεκριμένη ποσότητα ενέργειας προκειμένου να μεταβεί από μία κατάσταση σε μία άλλη. Αυτή η ενέργεια μπορεί να είναι σε μορφή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας είτε κατα την απορρόφηση της από το ηλεκτρόνιο ώστε αυτό να ανέβει ενεργειακή κατάσταση είτε κατά την εκπομπή της όπου το ηλεκτρόνιο μεταβαίνει από μια κατάσταση υψηλότερης ενέργειας σε μια χαμηλότερης.

Λίγα χρόνια πριν 1906 ο Αινστάιν είχε διατυπώσει τη θεωρία ότι το φώς αποτελείται από στοιχειώδη σωμάτια τα οποία έχουν ενέργεια $E_{ph} = h \cdot f$ όπου h η σταθερά του Plank και f η συχνότητα του κύματος. Βάση αυτής της παραδοχής μπόρεσε να εξηγηθεί και το πρόβλημα της ακτινοβολίας του μέλανος σώματος που αποτέλεσε και την αρχή της φασματοσκοπίας.

Έτσι όλα τα άτομα απορροφούν και εκπέμπουν φωτόνια αντίστοιχης ενέργειας όταν μεταβαίνουν από μια κατάσταση χαμηλότερης σε μία υψηλότερης.

$$E_h - E_l = h \cdot f$$

Έτσι το φάσμα εκπομπής και απορρόφησης των περισσοτέρων στοιχείων είναι όπως λέμε διακριτό. Υπάρχουν υλικά που έχουν συνεχές τέτοιο φάσμα και αυτό συμβαίνει διότι περιέχουν πολλά επιμέρους στοιχεία τα οποία καλύπτουν όλο το φασματικό χώρο. Ένα παράδειγμα συνεχούς φάσματος θεωρούνταν οι αστέρες αλλά τελευταία έχει διαπιστωθεί ότι και αυτοί δεν εκπέμπουν σε κάποιες συχνότητες.

1.5.2 Αρχή λειτουργίας φασματοσκοπικού αισθητήρα αερίου

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε μια διάταξη η οποία αποτελείται από 'ενα δοχείο' το οποίο έχει δυο αντιδιαμετρικά μικρά ανοίγματα στις άκρες του. Εξω από το το δοχείο τοποθετούμε μια πηγή φωτός και ένα δέκτη αντίστοιχα στην ευθεία των ανοιγμάτων που χρησιμεύουμε ωστε το παραγόμενο φως να μπορεί να εισέλθει και να εξέλθει από το δοχείο.Το δοχείο στην αρχή είναι κενό.



Σχήμα 9 Διάταξη φασματοσκοπίας. Αριστερά μία πηγή φωτός εκπέμπει έναν παλμό με ευρύ φασματικό περιεχόμενο οποίος εισέρχεται σε ένα άδειο δοχείο. Δεξιά έναν δέκτης που λαμβάνει το φασματικό περιεχόμενο του παλμού που θα εξέλθει από το δοχείο

Εκπέμπουμε λοιπόν έναν παλμό φασματος $\Delta f = f_2 - f_1$ και αφού αυτός διαδοθεί στον κενό χώρο τον ανιχνεύουμε στον δέκτη.



Σχήμα 10 Το φασματικό περιεχόμενο του παλμού εκπομπής Δf

Στη συνέχεια εγχέουμε ένα αέριο στη διάταξή μας του οποίου τα μόρια (τα άτομά τους) να απορροφούν σε αυτό το φάσμα .



Σχήμα 11 Η προηγούμενη διάταξη φασματοσκοπίας αυτή τη φορά με κάποιο αέριο εντός δοχείου.

Εκπέμπουμε ξανά τον ίδιο παλμό όπως πριν ο οποίος θα προσπέσει στο αέριο. Οπότε και ακολουθεί η διαδικασία που περιγράψαμε κατα την οποία το ηλεκτρόνια απορροφούν τα εισερχόμενα φωτόνια συχνότητας η οποία αντιστοιχεί στην ενεργειακή διαφορά των καταστάσεων τους έστω Ε₁ και Ε₂. Έστω **ν** αυτή η συχνότητα .Τότε



Σχήμα 12 Αναπαράσταση της φυσικής διαδικασίας στην οποία στηρίζεται η φασματοσκοπία. Ένα φωτόνιο κατάλληλης συχνότητας -έστω νδιεγείρει ένα ηλεκτρόνιο από την ενεργειακή στάθμη Ε1 στην Ε2 τις οποίες χωρίζει ενέργεια ΔΕ=hν.

Τελικά στο δέκτη μας αυτή τη φορά βλέπουμε το εξής σήμα.



Σχήμα 13 Το φασματικό περιεχόμενο του παλμού εξόδου Δf. Με μαύρο χρώμα αναπαριστούμε την έλλειψη της συχνότητας **v** η οποία έχει απορροφηθεί από το αέριο.

Όπως αναμέναμε λαμβάνουμε το ίδιο παλμό που εκπέμψαμε αλλά αυτή τη φορά δεν υπάρχει καθόλου πεδίο για την συχνότητα *ν* όπου έχει απορροφήσει το αέριο μας (υποθέσαμε ότι απορροφήθηκαν όλα τα φωτόνια της συγκεκριμένης συχνότητας). Υποθέσαμε ότι το σήμα μας είναι μικρού φασματικού περιεχομένου οπότε διεγείρει ηλεκτρόνια που μπορούν να κάνουν μόνο μία ενεργειακή μετάβαση.

Συχνά απεικονίζουμε σαν αποτέλεσμα της φασματοσκοπίας το αρνητικό του παραπάνω σχήματος, δηλαδη απεικονίζουμε τις συχνότητες που απορροφήθηκαν και όχι αυτές που διαπέρασαν το υλικό. Αυτό συμβαίνει καθώς για αντικείμενα που δεν μπορούμε να τα τοποθετήσουμε σε μία διάταξη σαν την παραπάνω χρησιμοποιούμε μια άλλη τεχνική. Αυτό που κάνουμε είναι να τους ρίχνουμε φώς παρόμοιας μορφής με την παραπάνω και μετα αναμένουμε μέχρί αυτά να εκπέμψουν ακτινοβολία που όπως εξηγήσαμε και πιο πάνω θα είναι ίδιου φασματικού περιεχομένου με αυτή που απορρόφησε καθώς θα ακολουθείται η αντίστροφη διαδικασία που δείξαμε στο σχήμα.

1.5.3 Αέρια που απορροφούν κοντά στα 1550 nm

Η επιλογή μας να σχεδιάσουμε μια διάταξη που να λειτουργεί στην περιοχή των 1550 nm στηρίζεται σε δύο παράγοντες. Πρώτον σε αυτήν την φασματική περιοχή απορροφούν αρκετά αέρια που παρουσιάζουν ενδιαφέρον για ανίχνευση με πλειάδα εφαρμογών. Θα αναφέρουμε αυτά τα αέρια στη συνέχεια. Δέυτερος παράγοντας που μας έδωσε το κίνητρο να να επιλέξουμε το μήκος κύματος των 1550 nm για σημείο λειτουργίας είναι διότι αυτό χρησιμοποιείται ευρέως στις τηλεπικοινωνίες καθώς είναι το βέλτιστο (από πλευράς απορρόφησης και διασποράς) για την λειτουργία των οπτικών ινών. Αυτό συνεπάγεται ότι τα τεχνολογικά μέσα τα οποία χρησιμεύουν στη μέτρηση, διάδοση αλλά και δημιουργία παλμών σε αυτό το μήκος κύματος είναι πολύ εξελιγμένα. Θα θέλαμε να εκμεταλλευτούμε αυτή την τεχνολογική άνεση που μας παρέχει το συγκεκριμένο μήκος κύματος καθώς και το χαμηλό κόστος για να βελτιστοποιήσουμε όσο γίνεται περισσότερο την ανίχνευση των αερίων που μας ενδιαφέρουν και απορροφούν στην περιοχή των 1550 nm.

Όπως εξηγήσαμε και προηγουμένως κάθε στοιχείο απορροφά ακτινοβολία σε διακριτές συχνότητες. Στον παρακάτω πίνακα απεικονίζονται τα αέρια που απορροφούν σε ένα φάσμα από 1549.98 μέχρι 1550.02 nm όπως αυτό αναφέρονται στο http://spectralcalc.com



Σχήμα 14 Απεικόνιση των αερίων που απορροφούν στην περιοχή από 1.54998 έως 155002 um. Κάθε αέριο αντιστοιχεί σε ένα διαφορετικό χρώμα. Ο αριθμός των συχνοτήτων που απορροφά κάθε αέριο εμφανίζεται στα δεξιά του σχήματος.

Τα αέρια που απορροφούν γύρω από τα 1550 nm είναι το διοξείδιο του άνθρακα, η αμμωνία, το μεθάνιο, το υδροχλώριο και το ακετυλένιο.

Για διάφορες εφαρμογές η ανίχνευση καθενός από αυτά τα αέρια παρουσιάζει ενδιαφέρον. Σε γενικές γραμμές η ανίχνευσή τους είναι απαραίτητη για προστασία της ανθρώπινης υγείας αφού έκθεση σε αυτά μπορεί να προκαλέσει βλάβες είτε για την παρακολούθηση του πειβάλλοντος και της κλιματικής αλλαγής.

Αυξημένο ενδιαφέρον έχει ο προσδιορισμός του διοξείδιου του άνθρακα που είναι ένα μη τοξικό και μη εύφλεκτο αέριο. Ωστόσο, η έκθεση σε αυξημένες συγκεντρώσεις μπορεί να προκαλέσει κίνδυνο για τη ζωή. Κάθε φορά που χρησιμοποιείται αέριο CO₂ ή ξηρός πάγος, παράγεται, αποστέλλεται ή αποθηκεύεται, η συγκέντρωση του CO₂ μπορεί να αυξηθεί σε επικίνδυνα υψηλά επίπεδα. Επειδή το CO₂ είναι άοσμο και άχρωμο, είναι αδύνατο να

εντοπιστούν διαρροές, πράγμα που σημαίνει ότι χρειάζονται κατάλληλοι αισθητήρες για να διασφαλιστεί η ασφάλεια του προσωπικού.

Η περίπτωση της ανίχνευσης αμμωνίας έχει ενδιαφέρον για βιομηχανικές εφαρμογές όπου γίνεται ευρεία χρήση της (π.χ. βιομηχανία ημιαγωγών). Η ελαχιστοποίηση των εκπομπών μεθανίου αποτελεί εξάλλου απαραίτητο βήμα στην πορεία προς την επιβράδυνση Κλιματικών αλλαγών τις επόμενες δεκαετίες.

Υψηλά επίπεδα υδροχλωρίου μπορούν να παρουσιασθούν σε πετροχημικές εγκαταστάσεις, βαμβακοπαραγωγή, αποστείρωση μετάλλων, παραγωγή καουτσούκ και κατασκευή ημιαγωγών. Το ακετυλένιο (C₂H₂) χρησιμοποιείται πολύ στη χημική βιομηχανία ως πρώτη ύλη στη σύνθεση πολλών οργανικών ενώσεων (ιδιαίτερα του χλωροαιθυλενίου και του ακρυλικού).



spectralcalc.com

Σχήμα 15 Οι συχνότητες αλλά και η ένταση με την οποία απορροφούν το διοξείδιο του άνθρακα, η αμμωνία και το μεθάνιο.

1.6 Στόχος της Διπλωματικής Εργασίας

Στην παρούσα εργασία θα σχεδιάσουμε μέσω προσομοίωσης *έναν κυματοδηγό σχισμής φωτονικού κρυστάλλου* που έχει κατασκευασθεί σε Πυρίτιο Πάνω σε Μονωτικό, αλλά τελικά βρίσκεται στον αέρα αφού έχουμε αφαιρέσει το μεγαλύτερο μέρος του μονωτικού κάτω από το πυρίτιο. Αυτή η τεχνική είναι γνωστή ως suspended air διάταξη δηλαδή μία διάταξη που περιβάλλεται από αέρα και πάνω και κάτω. Αυτή η τεχνική αποσκοπεί στο να διευκολύνει ένα αέριο που υπάρχει στον περιβάλλοντα χώρο να εισέλθει στη διάταξή μας και να αλληλεπιδράσει με το πεδίο. Μία τέτοια δομή φαίνεται στο σχήμα 16.



Σχήμα 16. Μία δομή τύπου suspended air [20]. (α) Εικόνα Ηλεκτρονικού Μικροσκοπίου (β) Σχηματικό διάγραμμα

Θα εστιάσουμε την παρούσα μελέτη στο μήκος κύματος των 1550 nm που όπως ήδη ανφέραμε έχει ιδιαίτερο ενδιαφέρον αφού χρησιμοποιείται στις τηλεπικοινωνίες. Ωστόσο επιθυμούμε η διάταξή μας να μπορεί να λειτουργεί και σε ένα εύρος κοντά στα 1550 nm κρατώντας τις βασικές της ιδιότητες όπως είναι η δημιουργία αργού φωτός.

Στα κεφάλαια 2,3 παρουσιάζουμε την βασική θεωρία η οποία μας βοηθάει να κατανοήσουμε έννοιες που ήδη αναφέραμε σε αυτό το εισαγωγικό κεφάλαιο.

Στα κεφάλαια 4,5 σχεδιάσουμε την διάταξη εξάγοντας ταυτόχρονα κάποια χρήσιμα συμπεράσματα καθώς πραγματοποιούμε μια πιο ευρεία μελέτη του αντικειμένου.

Τέλος στο τελευταίο κεφάλαιο αναφέρουμε πιθανούς τρόπους που αυτός ο τομέας θα κινηθεί μελλοντικά και τεχνικές βελτιστοποίησης της λειτουργίας της διάταξης που προσομοιάσαμε.

[1] G. Reed, A. Knight, Silicon Photonics, An Introduction, J. Wiley (2004).

[2] S.A. Schulz, L.O. Faolain, D.M. Beggs, et al., Dispersion engineered slow light in photonic crystals: a comparison, Journal of Optics 12 (10) (2010) 104004.

[3] S. John, Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices, Physical Review Letters 58 (23) (1987) 2486–2489.

[4]E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. 58, 2059 (1987).

[5] S. Chakravarty, P. Bhattacharya, and Z. Mi, IEEE Photonics Technol. Lett. 18, 2665 (2006).

[6]T. Yamamoto, M. Notomi, H. Taniyama, E. Kuramochi, Y. Yoshikawa, Y. Torii, and T.Kuga, Opt. Express **16**, 13809 (2008).

[7]C.-Y. Lin, X. Wang, S. Chakravarty, B.-S. Lee, W.-C. Lai, J. Luo, A. K.-Y.Jen, and R. T. Chen, Appl. Phys. Lett. **97**, 093304 (2010).

[8] T. Baba, Slow light in photonic crystals, Nature Photonics 2 (8) (2008) 465–473.

[9] Y. Zhao, Y.N. Zhang, Q. Wang, Research advances of photonic crystal gas and liquid sensors, Sensors and Actuators B 160 (1) (2011) 1288–1297.

[10] J.D. Ryckman, S.M. Weiss, Localized field enhancements in guided and defect modes of a periodic slot waveguide, IEEE Photonics Journal 3 (6) (2011) 986–995.

[11] D.Q. Yang, H.P. Tian, Y.F. Ji, Microdisplacement sensor based on high-Q nanocavity in slot photonic crystal, Optical Engineering 50 (5) (2011) 054402.

[12] M.G. Scullion, A. Di Falco, T.F. Krauss, Slotted photonic crystal cavities with integrated

microfluidics for biosensing applications, Biosensors and Bioelectronics 27 (1) (2011) 101–105.

[13] A. Di Falco, L. O'Faolain, T.F. Krauss, Chemical sensing in slotted photonic crystal heterostructure cavities, Applieg Physics Letters 94 (6) (2009) 063503.

[14] J. Jagerska, H. Zhang, Z.L. Diao, et al., Refractive index sensing with an air-slot photonic crystal nanocavity, Optics Letters 35 (15) (2010) 2523–2525.

[15] B.W. Wang, M.A. Dóndar, R. N¢tzel, et al., Photonic crystal slot nanobeam slow light waveguides for refractive index sensing, Applied Physics Letters 97 (15) (2010) 151105.

[16] S. Chakravarty, J. Topoľančik, P. Bhattacharya, S. Chakrabarti, Y. Kang, and M. E. Meyerhoff, Opt. Lett. **30**, 2578 _2005.

[17] Wei-Cheng Lai, Swapnajit Chakravarty, Xiaolong Wang, Cheyun Lin, and Ray T. Chen 'Photonic crystal slot waveguide absorption spectrometer for on-chip near-infrared spectroscopy of xylene in water' Applied Physics Let. 98, (2011)

[18] N. A. Mortensen and S. S. Xiao, Appl. Phys. Lett. 90, 141108 (2007).

[19] Wei-Cheng Lai, Swapnajit Chakravarty, Xiaolong Wang, Cheyun Lin, and Ray T. Chen 'On-chip methane sensing by near-IR absorption signatures in a photonic crystal slot waveguide' Optics Letters 36 (2011)

[20] Ya-Nan Zhang, Yong Zhao*, Di Wu, Qi Wang 'Theoretical research on high sensitivity gas sensor due to slow light in slotted photonic crystal waveguide' Sensors and Actuators B 173 (2012)

[21] H. Altug, PhD Stanford Univ. 2007 (http://web.stanford.edu/group/nqp/jv_files/thesis/hatice-thesis.pdf)

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2 ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΚΥΜΑΤΟΔΗΓΗΣΗ

2.1 ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΗΛΕΚΤΟΜΑΓΝΗΤΙΚΟΥ ΚΥΜΑΤΟΣ

Με την συγγραφή των συγκεντρωτικών εξισώσεων που περιγράφουν την φυσική του ηλεκτρομαγνητισμού από τον James Clerk Maxwell το 1865 έγινε γρήγορα αντιληπτό ότι μία άμεση συνέπειά τους ήταν η ύπαρξη ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων που σύντομα ταυτοποιήθηκαν με το φώς.

Οι εξισώσεις του Maxwell είναι σε μονάδες SI:

$$\varepsilon \vec{\nabla} \vec{E} = \rho, \quad \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t} B$$

$$\vec{\nabla} \vec{B} = 0, \quad \vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{\partial}{\partial t} D + J$$
(2.1)

Με τις απαραίτητες αντικαταστάσεις και με δεδομένο οτι το εσωτερικό φορτίο και ρεύμα είναι μηδέν βλέπουμε πως σχηματίζεται η παρακάτω εξίσωση όσον αφορά το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο σε ένα ισοτροπικό υλικό:

$$\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \times \vec{E}) = -\mu \frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \times H = -\mu \frac{\partial}{\partial t} \varepsilon \frac{\partial}{\partial t} E \Rightarrow$$
$$\vec{\nabla}(\vec{\nabla}\vec{E}) - \nabla^2 E = -\mu \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial t^2} E$$

Έτσι τελικά καταλήγουμε στην εξίσωση:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \mu \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{E} = 0 \qquad (2.2)$$

Και με πανομοιότυπο συλλογισμό στην:

$$\nabla^2 \mathbf{H} - \mu \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{H} = 0 \qquad (2.3)$$

Όπου μ είναι η μαγνητική σταθερά και ε η διηλεκτρική σταθερά του μέσου όπου και οι δύο θεωρήθηκαν σταθερές στο χώρο και στο χρόνο.

Οι δύο αυτες εξισώσεις υποδηλώνουν την κυματική φύση του ηλεκτρικού και του μαγνητικού πεδίου τα οποία διαδίδονται με ταχύτητα,

$$u = \frac{1}{\sqrt{\mu \ \varepsilon}}$$

Μία λύση που μπορεί να εφαρμοστεί στις παραπάνω εξισώσεις είναι η:

E= $e^{(kr-kut)i}$ όπου,

r=(x,y,z) το διάνυσμα θέσης

 $k=(k_x,k_y,k_z)$ το κυματάνυσμα

k=√με·ω ,όπου ω η γωνιακή ταχυτητα

Η λύση αυτή ικανοποιεί την εξίσωσή (1) για $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \omega^2 \mu \epsilon$

Επίσης αν εισάγουμε αυτή την λύση στην πρώτη εξίσωση του Maxwell για μηδενικό φορτίο προκύπτει οτι $\mathbf{k} \cdot \mathbf{E} = (\mathbf{k}_x, \mathbf{k}_y, \mathbf{k}_z) \cdot (\mathbf{E}_x, \mathbf{E}_y, \mathbf{E}_z) = 0$ και άρα το κυματάνυσμα είναι κάθετο στο ηλεκτρικό πεδίο και όπως προκύπτει από την εξίσωση κύματος δείχνει προς την κατεύθυνση διάσοσης αφού $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = \sigma \tau \alpha \theta$



Σχήμα 1. Επίπεδο κύμα όπως αυτό ορίζεται από τις σχέσεις (2.1) και (2.2).Με k το κυματάνυσμα ,r το διάνυσμα θέσης και θ την σχετική γωνία τους. Το κύμα διαδίδεται στην κατευθυνση του k και όλα τα σημεία όπου $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = \sigma \tau \alpha \theta$ είναι συμφασικά.

Σε αυτό το σημείο θα αναφέρουμε μια εξίσωση με την οποία θα ασχοληθούμε και στη συνέχεια και είναι γνωστή ως *εξίσωση Helmholtz.*

Αν στις κυματικές εξισώσεις θέσουμε την εξάρτηση των πεδίων από το χρόνο με τον τρόπο που συστήνει η προηγούμενη αναλυσή μας τοτε

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},\mathbf{t}) = \mathbf{E}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$$

Και άρα η κυματική εξίσωση γίνεται

$$∇2 \mathbf{E} - με \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{E} = 0 \Rightarrow ∇2 \mathbf{E} - με \cdot ω2 \mathbf{E} = 0$$
 και τελικά
 $∇2 \mathbf{E} - k^2 \mathbf{E} = 0$ εξίσωση Helmholtz (2.4)

Οριακές Συνθήκες

Αν εφαρμόσει κανείς τις εξισώσεις του Maxwell για μία επιφάνεια διεπαφής μεταξύ δύο διηλεκτρικών υλικών με διηλεκτρικές σταθερές ε, ε', τότε οι οριακές συνθήκες που προκύπτουν για τα πεδία είναι οι εξής

 $εE_{\perp} = ε'E_{\perp}'$ (καθετο) $E_{\parallel} = E_{\parallel}'$ (παραλληλο) B=B'

Όπου θεωρούμε υλικά ίδιας μαγνητικής διαπερατότητας μ=μ'

2.2 Ανάκλαση κύματος σε διηλεκτρικό υλικό

Έστω ότι ένα κύμα προσπίπτει σε μια επιφάνεια που διαχωρίζει δύο υλικά διηλεκτρικής σταθεράς ε1 και ε2 αντίστοιχα όπου ένα μέρος του ανακλάται και ένα διαδίδεται.

Συμβολίζουμε το προσπίπτον, ανακλώμενο και διαδιδόμενο πεδίο με **Ε**_i, **Ε**_r και **Ε**_t αντίστοιχα άρα έχουμε,

 $E = E_{i} + E_{r} \qquad E' = E_{t}$ $E = E_{0i} e^{(k_{x'} \cdot x + k_{z'} \cdot z - \omega t)i} + E_{0r} e^{(k_{x''} \cdot x + k_{z''} \cdot z - \omega t)i}$ $E' = E_{0t} e^{(k_{x'} \cdot x + k_{z'} \cdot z - \omega t)i}$

Αλλά,

$$E \parallel = E \parallel' \Rightarrow E_{x} = E_{x}' \quad \gamma \iota \alpha \ z = 0$$
$$E_{oi} e^{(k_{x} \cdot x - \omega t)i} + E_{or} e^{(k_{x''} \cdot x - \omega t)i} = E_{oi} e^{(k_{x'} \cdot x - \omega t)i}$$

για να ισχύει για κάθε t πρέπει:

$$E_{oi} + E_{or} = E_{ot}$$
 $k_x = k_x' = k_x''$ (συνθήκη προσαρμογής φάσης) $ksinθ_1 = k'sinθ_2$ (Νόμος Snell)(2.5)

Είναι επίσης γνωστό ότι:

$$\begin{split} k^2 &= k^{\prime\prime 2} = k^{\prime 2} \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \quad \acute{\eta} \\ k_i^2 &= k_r^2 = k_t^2 \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \end{split}$$

 $E\pi i\sigma\eta\varsigma \qquad k_{tz}{}^2 = k_t{}^2 - k_{tx}{}^2$



Σχήμα 2. Διάγραμμα ανάκλασης-διάθλασης επιπέδου κύματος σε επίπεδη διαχωριστική επιφάνεια μεταξύ δύο ισοτροπικών, ομογενών υλικών χωρίς απώλειες. Η επιτρεπτότητα και η διαπερατότητα κάθε μέσου δίδονται από τις ε_i και μ_i αντίστοιχα (όπου i =1,2). Το επίπεδο κύμα προσπίπτει από το μέσο 1 προς το μέσο 2 υπό γωνία θ1. Υποτίθεται ότι δεν υπάρχει y-συνιστώσα του προσπίπτοντος κυματανύσματος. Η γωνίες ανάκλασης και διάθλασης είναι οι θr και θ2 αντίστοιχα. Η πόλωση του ηλεκτρικού πεδίου του προσπίπτοντος επιπέδου κύματος μπορεί να είναι κάθετη (ως προς το επίπεδο πρόσπτωσης xz, ΤΕ ή |). [2]

Γωνία ολικής ανάκλασης (Critical Angle)

Από τις οριακές συνθήκες για το ηλεκτρομαγνητικό πεδιο προέκυψε η συνθήκη προσαρμογής φάσης από την οποία προήλθαν οτι η γωνια ανάκλασης είναι ίση με την γωνία πρόσπτωσης και ο νόμος του Snell. Η συνθήκη προσαρμογής φάσης εκφρασμένη με τα κυματανύσματα γράφεται ως εξής:

$$k_{ix} = k_{rx} = k_{tx} \Rightarrow \omega \sqrt{\mu_1 \epsilon_1} \sin \theta_1 = \omega \sqrt{\mu_2 \epsilon_2} \sin \theta_2$$

Άν $\sqrt{\mu_1 \varepsilon_1} > \sqrt{\mu_2 \varepsilon_2}$ τότε υπάρχει $\theta_1 = \theta_{cr}$ (γωνία ανάκλασης) ώστε $\theta_2 = 90^\circ$.

Τότε στη περίπτωση μη μαγνητικών υλικών όπου $\mu_1 = \mu_2 = \mu_0 \quad \theta_{cr} = \sin^{-1}(\frac{n^2}{n^1})$ όπου $n_i = \sqrt{\mu_i \varepsilon_i}$ ο δείκτης διάθλασης.

Άν η γωνία προσπτωσης $\theta_1 > \theta_{cr}$ τότε sin $\theta_2 > 1$ που σντιστοιχει σε μη πραγματική τιμή της γωνίας θ_2 . Βέβαια ο νόμος του Snell ισχύει πάντα και $k_{ix} = k_{tx} = k_{n_1} sin \theta_1 > k_{n_2}$

Όμως για το διαθλώμενο κύμα ισχύει,

 $k_{tz}^2 + k_{tx}^2 = k_t^2 = k^2 n_2^2 \Rightarrow k_t^2 = k^2 n_2^2 - k^2 n_1^2 sin^2 \theta_1 < 0$

Επομένως η συνιστώσα k_{tz} του διαθλώμενου κυματανύσματος για πρόσπτωση θ > θ_{cr} γίνεται αμιγώς φανταστική: $k_{tz}=\pm jk[n_1^2sin^2\theta_1 - n_2^2]^{1/2}$

και τελικά το πεδίο είναι:

 $\mathbf{E}_{t}(\mathbf{x},\mathbf{z}) = \mathbf{E}_{ot}(\mathbf{x})e^{-k_{tz}\cdot\mathbf{z}}$ (evanescent wave)



Σχήμα 3. Δισδιάστατο διάγραμμα κυματαν ανυσμάτων που παρουσιάζει την πρόσπτωση, την ανάκλαση,και την διάθλαση ενός επιπέδου κύματος στην επίπεδη διαχωριστική επιφάνεια μεταξύ δύο μέσων. Για απλούστευση το κάθε μέσο θεωρείται ισοτροπικό, ομογενές, μη-μαγνητικό, και χωρίς απώλειες. Τα χαρακτηριστικά του κάθε μέσου συνοψίζονται στον δείκτη διάθλασης ni = (εri)1/2 όπου εri η σχετική επιτρεπτότητα του μέσου i (i = 1,2). Σε αυτήν την περίπτωση το επίπεδο κύμα προσπίπτει από το αραιότερο οπτικά μέσο στο πυκνότερο οπτικά μέσο (n1 < n2). [2]



Σχήμα 4. Διάγραμμα κυματανυσμάτων στην περίπτωση που το επίπεδο κύμα προσπίπτει από το πυκνότερο οπτικά μέσο στο αραιότερο οπτικά μέσο (n1 > n2). [2]



Σχήμα 5. Διάγραμμα κυματανυσμάτων στην περίπτωση που το επίπεδο κύμα προσπίπτει από το πυκνότερο οπτικά μέσο στο αραιότερο οπτικά μέσο (n1 > n2). Σε αυτήν την περίπτωση η γωνία πρόσπτωσης θ1 είναι μεγαλύτερη από την γωνία ολικής ανάκλασης θ_{cr} = sin-1(n2/n1) με αποτέλεσμα το κύμα στην περιοχή 2 να γίνεται απόσβένον (evanescent wave) [2]

2.3 Κυματοδήγηση

Με τον όρο κυμματοδήγηση αναφερόμαστε στο φαινόμενο κατα το οποίο το φως διαδίδεται μόνον ως προς μία κατεύθυνση που την θέτουμε παράλληλη με τον αξονα z .

και άρα θέτουμε: $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}(\mathbf{x},\mathbf{y})e^{i\beta z}$

Θα αναλύσουμε το φαινόμενο της κυματοδήγησης του πεδίου σε μία διάταξη όπου ένα πλακίδιο διηλεκτρικής σταθεράς ε₁ περιβάλεται από υλικό διηλεκτρικής σταθεράς ε₂


Βάση της προηγούμενης ανάλυσης και με βάση την ακτινική φύση του φωτός μπορούμε να πούμε οτι αν θέλουμε το πεδίο να παραμένει μόνο μέσα στο υλικό ε₁ τότε θα πρέπει η γωνία της ακτίνας θ να είναι μεγαλύτερη της κρίσιμης θ > θ_{cr} = sin⁻¹ $\left(\frac{n^2}{n_1}\right)$.

Αυτό συνεπάγεται για τη σταθερά διάδοσης β:

 $kn_1 sin(\theta_{cr}) < \beta < kn_1 sin(90^\circ) \implies kn_2 < \beta < kn_1$

Ωστόσο για να μπορέσουμε να αναλύσουμε σε βάθος το φαινόμενο θα καταφύγουμε στην επίλυση των εξισώσεων του Maxwell για την συγκεκριμένη διάταξη. Θα αναλύσουμε λοιπόν ξεχωριστά τους δύο ρυθμούς *ΤΕ, ΤΜ* όπου εδώ υποδεικνύουν την απουσία ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου στην κατεύθυνση διάδοσης αντίστοιχα.

Ρυθμοί ΤΕ

Το ηλεκρικό πεδίο για τον ΤΕ ρυθμό θα πρέπει να ικανοποιεί την εξίσωση:

$$\frac{\partial^2 Ey}{\partial x^2} + (\omega^2 \mu \varepsilon - \beta^2) Ey = 0$$

Αυτή η εξίσωση ισχύει σε όλες τις περιοχές με τη διαφορά ότι η διηλεκτρική σταθερά ε είναι διαφορετική σε καθε περιοχή.

Οι λύσεις που θα δοκιμάσουμε εντός τις διάταξης είναι:

 $Ey = A \cos k 1xx$ $\dot{\eta}$ $Ey = B \sin k 1xx$

Μετά από αντικατάσταση στην παραπάνω εξίσωση έχουμε:

$$k_{1x}^2 = \omega^2 \mu \varepsilon_1 - \beta^2 = k_1^2 - \beta^2$$

Οι λύσεις που θα δοκιμάσουμε εκτός της διάταξης είναι:

$$Ey = C e^{-jk2x} , |x| > d$$

Μετά από αντικατάσταση στην παραπάνω εξίσωση έχουμε,

$$k_{2x}^2 = \omega^2 \mu \varepsilon_2 - \beta^2 = k_2^2 - \beta^2$$

Στην αρχή συμπεράναμε για τη σταθερά διάδοσης οτι kn2 < β

άρα $k_{2x} = \pm j\alpha$, όπου $\alpha = \pm \sqrt{\beta^2 - k_2^2}$

και επομένως το πεδίο είναι:

$$Ey = C e^{-j\alpha|x|} , |x| > d$$

Άρα για όλο τον χώρο το ηλεκτρικό πεδίο είναι:

$$\vec{E} = \hat{y} \begin{cases} E'' e^{-ax - j\beta z} &, |x| > d \\ E' \begin{cases} \sin k_x x \\ \cos k_x x \end{cases} e^{-j\beta z} &, |x| < d \end{cases}$$
(2.6)

Όπου η πάνω και η κάτω λύσεις ονομάζονται αντισυμμετρικη και συμμετρικη αντίστοιχα. Το μαγνητικό πεδίο μπορεί να βρεθεί εύκολα από τον τύπο:

$$\vec{H} = \frac{-1}{j\omega\mu} \vec{\nabla} \times \vec{E}$$

Άν εφαρμοστούν οι οριακές συνθήκες στις διεπιφάνειες της διάταξης προκύπτει ότι

$$k_x^2 + \alpha^2$$
= $\omega^2 \mu \varepsilon (\varepsilon_1 - \varepsilon_1)$ που ισχύει πάντα και οι

 $\alpha d = k_x d \tan(k_x d)$

συμμετρικοί ΤΕ ρυθμοί

 $\alpha d = -k_x d \cot(k_x d)$ αντισυμμετρικοί ΤΕ ρυθμοί

Το σύστημα των εξισώσεων λύνεται μονο αριθμητικά.

Ρυθμοί ΤΜ

Μπορούμε να επαναλάβουμε την παραπάνω διαδικασία για τους ΤΜ ρυθμούς και τότε βρίσκουμε για το μαγνητικό πεδίο :

$$\vec{H} = \hat{y} \begin{cases} H'' e^{-ax - j\beta z} &, |\mathbf{x}| > \mathbf{d} \\ H' \begin{cases} \sin k_x x \\ \cos k_x x \end{cases} e^{-j\beta z} &, |\mathbf{x}| < \mathbf{d} \end{cases}$$
(2.7)

Και για το ηλεκτρικό πεδίο:

$$\vec{E} = \frac{1}{j\omega\varepsilon_1} \vec{\nabla} \times \vec{\mathrm{H}}$$

Άν εφαρμοστούν οι οριακές συνθήκες στις διεπιφάνειες της διάταξης προκύπτει ότι

 $k_x^2 + \alpha^2 = \omega^2 \mu \varepsilon (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)$ που ισχύει πάντα και οι:

 $\alpha d = -\frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^1} d \cot(k_x d)$ αντισυμμετρικοί ΤΜ ρυθμοί Αποκοπή λέμε οτι έχουμε, όταν ένας ρυθμός δεν κυματοδηγείται πια το οποίο συμβαίνει όταν η σταθερά α γίνεται αρνητική. Ορίζουμε λοιπον τη συχνότητα αποκοπής την συχνότητα για την οποία α = tan(k_xd) = 0 και προκύπτει

$$f_{c,m} = rac{c(m-1)}{4d\sqrt{\mu(\varepsilon 1 - \varepsilon 2) - 1}}$$
για τους ΤΕ ρυθμούς

Επίσης όταν α = 0 ισχύει οτι $k_2 = \beta$ και $k_1 = \sqrt{\beta^2 + k_x^2}$ και άρα

$$θ_i = sin^{-1} \frac{k_2}{k_2} = sin^{-1} \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}} = θc$$
 που προβλέψαμε και με το μοντέλο ακτίνας

2.4 Κυματοδηγός σχισμής (Slot waveguide)

Το φαινόμενο της κυματοδήγησης του φωτός μέσα σε ένα πυκνό μέσο είναι γνωστό εδω και καιρό και είναι το πλεόν διαδεδομένο.Τα τεέυταία χρόνια όμως μια καινούργια διάταξη έχει προταθεί η οποία επιτυγχάνει κυματοδήγηση στο αραιό μέσο(που είναιο αέρας στις περισσοτερες περιπτώσεις).Η διάταξη αυτή ονομάζεται κυματοδηγός σχισμής (Slot Waveguide) και αποτελείται από δύο διηλεκτρικούς κυματοδηγούς οι οποίοι απέχουν μια πολύ μικρή απόσταση. Σε εκείνο το σημείο όπου το περιβάλλον υλικό είναι αέρας παρατηρείται οτι ο ΤΕ ρυθμός του πεδίου συγκεντρώνει πολυ μεγάλη ισχύ και πληροί όλες τις συνθήκες κυματοδήγησης.



Σχήμα 7 Κυματοδηγός σχισμής (a) απείρου ύψους (b) πεπερασμενου ύψους η διάδοση γίνεται προς το z [4]

Άν κανείς κάνει την ανάλυση που κάναμε στη προηγούμενη παράγραφο για τη διάταξη σχισμής απείρου ύψους (a) καταλήγει στην παρακάτω εξίσωση για τον ΤΕ ρυθμό ηλεκτρικού πεδίου:

$$E_{x}(x) = A \begin{cases} \frac{1}{n_{s}^{2}} \cosh(\gamma_{s} x) &, |x| < \alpha \\ \frac{1}{n_{H}^{2}} \cosh(\gamma_{s} \alpha) \cos[k_{H}(|x|-\alpha)] + \frac{\gamma_{s}}{k_{H} n_{s}^{2}} \sinh[k_{H}(|x|-\alpha)] & \alpha < |x| < b \\ \frac{1}{n_{C}^{2}} \cosh(\gamma_{s} \alpha) \cos[k_{H}(b-\alpha)] + \frac{n_{H}^{2} \gamma_{s}}{k_{H} n_{s}^{2}} \sinh(\gamma_{s} \alpha) \sinh[k_{H}(b-\alpha)] e^{[-\gamma_{C}(|x|-b)]}, |x| > b \end{cases}$$
(2.8)

Όπου $A = A_0 \frac{\sqrt{k_0^2 n_H^2 - k_H^2}}{k_0}$ και

k_H = ο εγκάρσιος κυματάρυθμος του πυκνού μέσου
 γ_C = η σταθερά απόσβεσης στο εξωτερικό αρεό μέσο
 γ_S = η σταθερά απόσβεσης στη σχισμή
 k₀ = ο κυματάριθμος στο κενό

Και οι οποίες ικανοποιούν την σχέση: $k_0^2 n_H^2 - k_H^2 = k_0^2 n_C^2 + \gamma_C^2 = k_0^2 n_S^2 + \gamma_S^2 = \beta^2$

Όπου β η σταθερά διάδοσης που όπως πριν μπορεί να υπολογισθεί λύνοντας την εξίσωση:

$$\tan [k_H(b-a) - \Phi] = \frac{n_H^2 \gamma_S}{k_H n_S^2} \tanh(\gamma_S \alpha)$$
όπου
Φ=arctan $[\frac{n_H^2 \gamma_C}{k_H n_C^2}]$

Aπό τη μορφή του πεδίου φαίνεται οτι το πεδίο αμέσως μέσα στη σχισμή ($|x|=\alpha^{-}$) είναι n_{H}^{2}/n_{S}^{2} φορές μεγαλύτερο από ότι αμέσώς μέσα ($|x|=\alpha^{+}$) σε κάποιο κυματοδηγό. Όταν το μήκος της σχισμής είναι πολυ μικρότερο από ότι το χαρακτηριστικό μήκος απόσβεσης του πεδίου (α <<1/γ_S)τότε το πεδίο παραμένει υψηλό μέσα στη σχισμή. Το παρακάτω γράφημα απεικονίζει το πεδίο E_x του TE ρυθμού για n_H= 3.48, n_C=n_S=1.44, α=25nm<<1/p>



Σχήμα 8 Κανονικοποιημένη μορφή της κατανομής του διαμήκους (Ε_x) ηλεκτρικού πεδίου για τον θεμελιώδη TM ρυθμό για σχισμή πλάτους 25 nm και δείκτες διάθλασης των οπών και του πλακιδίου αντίστοιχα n_s = n_c = 1.44 και n_H =3.48.Φαίνονται επίσης και η ξεχωριστές λύσεις σε κάθε περιοχή.[4] Η παραπάνω αναλυτική λύση βρέθηκε για την διάταξη απείρου υψους.Το πεδίο για την τρισδιάστατη περίπτωση είναι πολυ πιο περιπλοκο ν αυπολογισθεί ααναλυτικά αλλα η λυση είνα πολύ παρόμοια.Η κυριότερη διαφορά είναι οτι το ρόλο των ΤΕ ρυθμών θα παίξουν τώρα οι quasi-TE ρυθμοί οι οποίοι στους τρισδιάστατους ορθογώνιους κυματοδηγούς έχουν το μεγαλύτερο ηλεκτρικό πεδίο τους στην κατευθυνση xx'. Η μορφή του πεδίου απεικονίζεται πιο κάτω



Σχήμα 9. Το προφίλ του διαμήκους ηλεκτρικού πεδίο του quasi ΤΕ ρυθμού στη διάταξη κυματοδηγού σχισμής. Το κέντρο των συντεταγμένων βρίσκεται στο μέσον της σχισμής με έναν οριζόντιο x και έναν κάθετο y άξονα.(a) Διάγραμμμα του πλάτους και των δυναμικών γραμμών του πεδίου (b) Διάγραμμα της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου με κόκκινο συμβολίζεται η μεγαλύτερη ένταση[4]

2.5 Μέθοδος Πεπερασμένων Διαφορών (FDTD)

Ο αλγόριθμος του Yee [5] αποτελεί τον κορμό της μεθόδου FDTD. Ο Yee προσέγγισε το σύστημα των εξισώσεων στροφής του Maxwell με ένα σύνολο εξισώσεων πεπερασμένων διαφορών, για την περίπτωση υλικού χωρίς απώλειες, δηλαδή *σ* = *σ* * = 0. Προσδιορίζει και τις δύο πεδιακές εντάσεις (ηλεκτρική και μαγνητική) στο χώρο και το χρόνο, χρησιμοποιώντας τις συζευγμένες εξισώσεις στροφής του Maxwell αντί να προσδιορίσει μόνο τη μία από αυτές χρησιμοποιώντας την εξίσωση κύματος. Διαθέτει έτσι σε κάθε στιγμή περισσότερη πληροφορία που μπορεί να οδηγήσει σε μεγαλύτερη ακρίβεια της λύσης. Επιπλέον, επιτρέπει τη μοντελοποίηση συμπεριφορών που χαρακτηρίζουν το ένα μόνο από τα δύο πεδία.

Σύμφωνα με την FDTD, ο συνεχής τρισδιάστατος στη γενική περίπτωση χώρος παρατήρησης αρχικά διακριτοποιείται σε σημεία με βήματα Δx, Δy και Δz για τους τρεις άξονες x,y, και z αντίστοιχα. Κατά τον τρόπο αυτόν προσεγγίζεται, πλέον, από ένα πλέγμα σημείων – κόμβων, καθένας από τους οποίους έχει συντεταγμένες (i, j, k) στο πλέγμα και (iΔx, jΔy, kΔz) ως προς το αρχικό καρτεσιανό σύστημα αναφοράς, όπου i, j, k ακέραιοι. Οι συνιστώσες των E και H δεν τοποθετούνται πάνω στους ίδιους κόμβους, αλλά σε αποστάσεις οι οποίες απέχουν ½ του βήματος Δx, Δy ή Δz ανάλογα με τη συνιστώσα, δημιουργώντας έτσι στοιχειώδη ορθογώνια

παραλληλεπίπεδα διαστάσεων (Δx, Δy, Δz), με σημείο αναφοράς τους την κορυφή (i,j,k) τα οποία καλούνται μοναδιαία κελιά ή κελιά του Yee (unit cells – Yee cells). Στο σχήμα 10 φαίνεται ένα τέτοιο μοναδιαίο κελί στην περίπτωση τετραγωνικού πλέγματος (Δx = Δy = Δz = Δ).

Παρατηρούμε ότι ο τρόπος τοποθέτησης των συνιστωσών των *E* και *H* στο πλέγμα είναι τέτοιος ώστε κάθε συνιστώσα του *E* να περιβάλλεται από 4 συνιστώσες του *H*, καθώς επίσης και το αντίστροφο. Είναι δυνατό έτσι, να συσχετιστούν οι συνιστώσες του *E* με περικλείοντες βρόχους ροής ρεύματος μετατόπισης *H* καθώς, επίσης, και εκείνες του *H* με βρόχους μαγνητικής ροής *E*. Είναι σε θέση, δηλαδή, ο αλγόριθμος του Yee να προσομοιώσει τόσο τη διαφορική όσο και την μακροσκοπικά ολοκληρωτική μορφή των εξισώσεων του Maxwell. Αποτελεί, λοιπόν, έναν ιδιαίτερα εύχρηστο τρόπο απεικόνισης.



Σχήμα 10. Η θέση των ηλεκτρικών και μαγνητικών διανυσματικών συνιστωσών στο κελί του Yee.[6]

Έστω *u* μια οποιαδήποτε από τις έξι συνιστώσες του ηλεκτρικού ή του μαγνητικού πεδίου στο ορθογώνιο σύστημα συντεταγμένων. Έστω επίσης ότι αναφέρεται στη χρονική στιγμή *n t* και στο κελί που βρίσκεται στη θέση (*i x, j y, k z*). Η συνιστώσα αυτή θα συμβολίζεται με *uⁿ* (*i, j, k*).

Οι μερικές χρονικές και χωρικές παράγωγοι μετατρέπονται σε κεντρικές διαφορές. Για μια τυχαία μονοδιάστατη συνάρτηση ψ η μερική χωρική παράγωγος μετασχηματίζεται σε κεντρική διαφορά ως εξής:

Αντίστοιχα ο Yee για τις μερικές παραγώγους της υ όρισε ότι

$$\frac{\partial u^n(i,j,k)}{\partial x} = \frac{u^n\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right) - u^n\left(i - \frac{1}{2}, j, k\right)}{\Delta x}$$
(2.9)

$$\frac{\partial u^{n}(i,j,k)}{\partial t} = \frac{u^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) - u^{n-\frac{1}{2}}(i,j,k)}{\Delta t}$$
(2.10)

Παρατηρούμε ότι η πληροφορία για κάθε σημείο προέρχεται από τα γειτονικά του σε αποστάσεις $\pm \Delta x/2$ γι' αυτό και στον παρονομαστή του τύπου 2.9 υπάρχει ο όρος Δx αντί του 2 x . Επίσης το ηλεκτρικό και το μαγνητικό πεδίο παρεμβάλλονται σε χρονικά διαστήματα $\Delta t/2$.

Στη συνέχεια, θα εφαρμόσουμε τα παραπάνω στο μονοδιάστατο πρόβλημα της διάδοσης του ρυθμού ΤΕ στον κενό χώρο. Από τις εξισώσεις (2.1) :

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = 0$$
$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial H_z}{\partial x}$$
$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \frac{\partial E_y}{\partial x}$$

Θεωρώντας μηδενικές αρχικές τιμές, η πρώτη εξίσωση δίνει Ex = 0, ενώ οι άλλες δύο με αντικατάσταση των παραγώγων, γίνονται

$$\frac{E_{y}^{n+1}(i) - E_{y}^{n}(i)}{\Delta t} = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{H_{z}^{n+\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2}\right) - H_{z}^{n+\frac{1}{2}}\left(i-\frac{1}{2}\right)}{\Delta x}$$
$$\frac{H_{z}^{n+\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2}\right) - H_{z}^{n-\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2}\right)}{\Delta t} = -\frac{1}{\mu} \frac{E_{y}^{n}(i+1) - E_{y}^{n}(i)}{\Delta x}$$

Λύνοντας τις παραπάνω εξισώσεις ως προς $E_y^{n+1} \kappa \alpha i H_z^{n+\frac{1}{2}} \kappa \alpha \tau \alpha \lambda$ ήγουμε στις

$$E_{y}^{n+1}(i) = E_{y}^{n}(i) - \frac{\Delta t}{\varepsilon} \frac{H_{z}^{n+\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2}\right) - H_{z}^{n+\frac{1}{2}}\left(i-\frac{1}{2}\right)}{\Delta x}$$

$$H_z^{n+\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2}\right) = H_z^{n-\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2}\right) - \frac{\Delta t}{\mu} \frac{E_y^n(i+1) - E_y^n(i)}{\Delta x}$$

Αυτές είναι και οι τελικές εξισώσεις που χρησιμοποιούνται σε προγράμματα στον υπολογιστή. Παρατηρούμε ότι το μαγνητικό πεδίο σε δεδομένη χρονική στιγμή και θέση υπολογίζεται από την προηγούμενη τιμή του στη συγκεκριμένη θέση και από τις προηγούμενες τιμές του ηλεκτρικού πεδίου στις γειτονικές θέσεις στο πλέγμα που απέχουν ± Δx/2. Τα ίδια ισχύουν και για το ηλεκτρικό πεδίο το οποίο υπολογίζεται σε χρονικές στιγμές που απέχουν Δt/2 από τις στιγμές υπολογισμού του μαγνητικού πεδίου.

Μέγεθος κελιού, χρονικό βήμα

Ο καθορισμός του μεγέθους του κελιού υπαγορεύεται από δύο παράγοντες. Πρέπει να είναι αρκετά μικρό, ώστε να επιτρέπει την επιθυμητή ακρίβεια και αρκετά μεγάλο, ώστε να μη δημιουργεί υψηλές υπολογιστικές απαιτήσεις. Ο περιορισμός που τίθεται αρχικά, ανεξάρτητα από τη φύση της εφαρμογής, είναι ότι το μέγεθος του κελιού πρέπει να είναι πολύ μικρότερο από το ελάχιστο μήκος κύματος για το οποίο απαιτούνται ακριβή αποτελέσματα. Το προτεινόμενο όριο για την τάξη μεγέθους του κελιού είναι το 1/10 του μήκους κύματος που αντιστοιχεί στη μέγιστη συχνότητα του προβλήματος. Θα πρέπει δηλαδή οι ακμές του κελιού να είναι ίσες ή μικρότερες από αυτό το όριο.

Προκειμένου να κατανοήσουμε το λόγο για τον οποίο το μέγεθος του κελιού πρέπει να είναι πολύ μικρότερο από ένα μήκος κύματος, αρχικά θεωρούμε ότι σε κάθε χρονικό βήμα το πλέγμα που έχουμε δημιουργήσει είναι ένα διακριτό χωρικό δείγμα της συνεισφοράς του πεδίου. Σύμφωνα με το θεώρημα δειγματοληψίας του Nyquist πρέπει να ληφθούν τουλάχιστον δύο δείγματα για κάθε μήκος κύματος. Βέβαια, επειδή η δειγματοληψία δεν είναι και τόσο ακριβής και επειδή το μικρότερο μήκος κύματος δεν είναι επακριβώς καθορισμένο, απαιτούνται περισσότερα από δύο δείγματα.

Ένας ακόμα παράγοντας που πρέπει να ληφθεί υπόψη, είναι η όσο το δυνατόν ακριβέστερη προσομοίωση των αντικειμένων που υπάρχουν στο χώρο καθώς και τα ιδιαίτερα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του προβλήματος.

Αφού ορίσουμε τελικά τις διαστάσεις των κελιών, υπολογίζουμε πόσα κελιά απαιτούνται για την μοντελοποίηση των αντικειμένων που υφίστανται στο χώρο, ενώ ενδιάμεσα και γύρω γύρω τοποθετούμε κελιά ελευθέρου χώρου (αν η εφαρμογή λαμβάνει χώρα στο κενό). Έτσι τελικά, αφού έχουμε υπολογίσει τον επιθυμητό αριθμό κελιών για κάθε διάσταση και τοποθετήσαμε σε κάθε κελί το απαιτούμενο υλικό, έχουμε ουσιαστικά δημιουργήσει το πλέγμα του χώρου υπολογισμών.

Ο αλγόριθμος της *FDTD*, όπως είδαμε παραπάνω, στηρίζεται στην ανανέωση των τιμών των μεγεθών στους κόμβους ενός πλέγματος με βάση τις προηγούμενες ήδη αποθηκευμένες τιμές και τις εξισώσεις πεπερασμένων διαφορών του Maxwell. Ο αλγόριθμος αυτός δεν είναι ευσταθής σε κάθε περίπτωση. Εάν τα μεγέθη Δx, Δy, Δz και Δt ληφθούν αυθαίρετα, τότε είναι δυνατόν να προκληθεί αστάθεια και, κατά συνέπεια, να καταστεί αδύνατη η επίλυση οποιουδήποτε προβλήματος, καθώς οι τιμές των *E* και *H* στους κόμβους του πλέγματος αργότερα ή ταχύτερα θα λάβουν λανθασμένες τιμές. Η αριθμητική αστάθεια είναι ένα ανεπιθύμητο φαινόμενο, συνηθισμένο σε εφαρμογές επίλυσης διαφορικών εξισώσεων με αριθμητικό υπολογισμό της διαφορικής εξίσωσης να αυξάνει ανεξέλεγκτα με την πάροδο του χρόνου.

Το μέγιστο χρονικό βήμα που εξασφαλίζει ευστάθεια παρέχεται από τη συνθήκη ευστάθειας του Courant η οποία για πλέγμα τριών διαστάσεων με διαστάσεις κελιού Δ*x*, Δ*y*, Δ*z* γράφεται :

$$\Delta t \leq \frac{1}{c\sqrt{\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} + \frac{1}{(\Delta z)^2}}}$$

Εάν Δx= Δy= Δz= Δ, δηλαδή χρήση τετραγωνικού κελιού, τότε η σχέση απλοποιείται

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{c\sqrt{3}}$$

Η συνθήκη αυτή προκύπτει από την απλή παρατήρηση ότι στη διάρκεια ενός χρονικού βήματος το ηλεκτρομαγνητικό κύμα δεν θα πρέπει να διανύσει απόσταση μεγαλύτερη από αυτή μεταξύ δύο γειτονικών σημείων υπολογισμού των πεδιακών μεγεθών.

ΤΟ ΤΕΛΕΙΑ ΠΡΟΣΑΡΜΟΣΜΕΝΟ ΣΤΡΩΜΑ (PML)

Στις προηγούμενες παραγράφους είδαμε πώς η μέθοδος *FDTD* μπορεί να επιλύσει ένα πρόβλημα διάδοσης ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων μέσα στον υπολογιστικό χώρο ενός πλέγματος Yee. Ο χώρος αυτός, όμως, εξυπακούεται πως είναι πεπερασμένος καθώς δεν είναι δυνατόν να υπάρξει υπολογιστής ο οποίος να κρατά στη μνήμη του δεδομένα για άπειρα σημεία του πλέγματος. Επομένως, κρίνεται αναγκαία η εύρεση μιας τεχνικής η οποία να προσομοιώνει όσο το δυνατόν καλύτερα τη διάδοση στο άπειρο. Το τέλεια προσαρμοσμένο στρώμα είναι ένα μέσο με απώλειες, τέλεια προσαρμοσμένο, που αποσβένει τα ηλεκτρομαγνητικά κύματα έτσι ώστε να μην προκύπτουν ανακλάσεις. Ο συντελεστής ανάκλασης στη διαχωριστική επιφάνεια μεταξύ του στρώματος αυτού και του ελεύθερου χώρου θεωρητικά είναι μηδέν ανεξάρτητα από τη συχνότητα και από τη γωνία πρόσπτωσης. Πρακτικά, έχει διαπιστωθεί ότι η τεχνική του PML δίνει πολύ ακριβή αποτελέσματα σε όλες τις περιπτώσεις των προβλημάτων.

ΟΡΙΑΚΕΣ ΣΥΝΘΗΚΕΣ BLOCH (BLOCH BOUNDARY CONDITIONS)

Ένα άλλο είδος οριακών συνθηκών που χρησιμοποιείται πολύ συχνά στα προβλήματα περιοδικών δομών είναι αυτό της συνθήκης Bloch. Σύμφωνα με αυτή τη συνθήκη η λύση του πεδίου στα άκρα της θεμελιώδης γεωμετρίας (κυψελίδα) που αν επαναληφθεί διαμορφώνει την περιοδική διάταξη ισούται την λύσης στο απέναντι άκρα της αλλά με μια διαφορετική φάση

$$E_{-x} = e^{-ia_x k_{bloch}} \cdot E_{+x}$$

Έτσι ολόκληρο το πρόβλημα ανάγεται σε μια μόνο θεμελιώδη γεωμετρία και τις παραπάνω οριακές συνθήκες στα άκρα της. Η χρήση των συνθηκών αυτών επιταχύνουν σε μεγάλο βαθμό

την επίλυση του προβλήματος. Οι συνθήκες Bloch όταν χρησιμοποιούνται απαιτούν διπλάσια μνήμη απο τις περιοδικές π.χ. συνθήκες. Αυτό συμβαίνει καθώς επιλύουμε το πρόβλημα με μιγαδικά πεδία και έτσι πρέπει να αποθηκεύουμε και το πραγματικό και το φανταστικό τους μέρος.

[1] http://scientificsentence.net/Waves/index.php?key=yes&Integer=waves

[2] Ηλίας Γλύτσης Σημειώσεις, ΕΜΠ, http://users.ntua.gr/eglytsis/EM_Fields_A.htm

[3] Walter Schottky Institute of Munich Technical University lecture notes

http://www.wsi.tum.de/Portals/0/Media/Lectures/20091/a0907cf6-0c73-482b-aa53-

8c7eee498054/Dielectric_Slab_Waveguide.pdf

[4] Vilson R. Almeida, Qianfan Xu, Carlos A. Barrios, and Michal Lipson, Optics Letters. 29, 1209 (2004).

[5] Kane Yee (1966). "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media". IEEE Transactions on Antennas and Propagation. 14 (3): 302–307 (1966)
 [6]Μαριάνθη Ζιώγα, Διπλωματική Εργασία ΑΠΘ (2005).

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3 ΘΕΩΡΙΑ ΦΩΤΟΝΙΚΩΝ ΚΡΥΣΤΑΛΛΩΝ

Σε αυτό το κεφάλαιο θα αναλύσουμε τις διατάξεις των φωτονικών κρυστάλλων. Με τον όρο φωτονικοί κρύσταλλοι παριγράφουμε μια περιοδική διάταξη ενός διηλεκτρικού υλικού σε περιβάλλον ενός άλλου διηλεκτρικού υλικού. Η περιοδική διάταξη αυτη δημιουργεί για το πεδίο σχέση διασποράς που παρουσιάζει πολλές ενδιαφέρουσες ιδιότητες και με την έκβαση της οποίας θα ασχοληθούμε στις προσεχείς παραγράφους [1].

Ουμίζουμε λοιπόν ότι η εξίσωση του μαγνητικού πεδίου αν ο δείκτης διάθλασης είναι περιοδικός είναι η εξής

$$\vec{\nabla} \times \frac{1}{\varepsilon(r)} \vec{\nabla} \times \overrightarrow{\mathrm{H}(r)} = (\frac{\omega}{c})^2 \overrightarrow{\mathrm{H}(r)}$$
 (3.1)

Συχνά θα αναφερόμαστε σε αυτή την εξίσωση με τον όρο "βασική εξισωση του κεφαλαίου".

Όπου $\varepsilon(r) = \varepsilon(r+R)$ δηλαδή υπάρχει περιοδική διάταξη

Ο τρόπος που θα προσπαθήσουμε να προσδιορίσουμε τις λύσεις για το πεδίο και τη σχέση διασποράς του θα είναι μέσω μίας μαθηματικής προσέγγισης που χρησιμοποιήται στη κβαντομηχανική και στηρίζεται στη **μετάθεση των τελεστών**. Όπως είναι γνωστό άν δύο τελεστές μετατίθενται τότε έχουν κοινές ιδιοσυναρτήσεις άρα μπορούμε να προσδιορίσουμε τις λύσεις ενός πιο σύνθετου προβλήματος λύνοντας κάποια πιο απλά.

Θέτουμε λοιπόν τον τελεστή $\hat{\Theta}$

$$\widehat{\Theta} = \overrightarrow{\nabla} \times \frac{1}{\varepsilon(r)} \overrightarrow{\nabla} \times$$

Η έρευνά μας θα επικεντρωθεί στη προσπάθεια εξέυρεσης πιο απλών τελεστών που συνήθως θα εκφράζουν κάποια **συμμετρία** του συστήματος και που θα είναι πιο εύκολο να υπολογιστούν οι ιδιοσυναρτήσεις τους.

3.1 Διακριτή Συμμετρία μετατόπισης

Οι φωτονικοί κρύσταλλοι, όπως οι παραδοσιακοί κρύσταλλοι ατόμων ή μορίων, δεν έχουν συνεχή συμμετρία μετατόπισης αλλά διακριτή, δηλαδή δεν είναι αμετάβλητοι σε μετατοπίσεις οποιασδήποτε απόστασης, αλλά μόνο για αποστάσεις που είναι ένα πολλαπλάσιο ορισμένου σταθερού βήματος. Το απλούστερο παράδειγμα ενός τέτοιου συστήματος είναι μια δομή που είναι επαναλαμβανόμενη προς τη μία κατεύθυνση, όπως στο σχήμα 1. Για αυτό το σύστημα, έχουμε συνεχή συμμετρική μετατόπιση στην κατεύθυνση x, αλλά έχουμε διακριτή συμμετρική μετατόπιση στην κατεύθυνση z, αλλά έχουμε διακριτή συμμετρική είναι το βασικό διάνυσμα πλέγματος, το οποίο στην περίπτωση αυτή είναι **α** σχ⁰. Λόγω αυτής της διακριτής συμμετρίας ισχύει ε(**r**) = ε(**r** ± **a**). Επαναλαμβάνοντας την

μετατόπιση βλέπουμε ότι ε(r) = ε(r + R) για κάθε R που είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του a; δηλ, $\mathbf{R} = /\mathbf{a}$, όπου / ακέραιος.



τότε μετατοπίζοντας το σύστημα με ένα ακέραιο πολλαπλάσιο του α προς την κατεύθυνση y το αφήνει αμετάβλητο. Η επαναλαμβανόμενη μοναδιαία κυψελίδα αυτού του περιοδικού συστήματος πλαισιώνεται με παραλληλεπίπεδο.

Η διηλεκτρική μονάδα που θεωρούμε ότι επαναλαμβάνεται, φαίνεται στο σχήμα 1 εντός του παραλληλεπίπεδου, και είναι γνωστή ως μοναδιαία κυψελίδα. Σε αυτό το παράδειγμα, η μοναδιαία κυψελίδα είναι μία πλάκα διηλεκτρικού υλικού με πλάτος a στην κατεύθυνση y. Λόγω των συμμετριών μετατόπισης, ο τελεστής Θ πρέπει να εναλλαγεί με τους τελεστές μετατόπισης στην κατεύθυνση x, καθώς και τους τελεστές μετατόπισης για διανύσματα πλέγματος $\mathbf{R} = la\hat{\mathbf{y}}$ στην κατεύθυνση y. Με βάση αυτό, μπορούμε να προσδιορίσουμε τους ρυθμούς διάδοσης του τελεστή Θ σαν ταυτόχρονες ιδιοσυναρτήσεις των δύο τελεστών μετατόπισης. Όπως και πριν, αυτές οι ιδιοσυναρτήσεις είναι επίπεδα κύματα:

$$\hat{T}_{d\hat{x}}e^{ik_xx} = e^{ik_x(x-d)} = (e^{-ik_xd})e^{ik_xx}$$
(3.2)

$$\hat{T}_{R}e^{ik_{y}y} = e^{ik_{y}(y-la)} = (e^{-ik_{y}la})e^{ik_{y}y}$$
(3.3)

Μπορούμε να αρχίσουμε να ταξινομούμε τους ρυθμούς καθορίζοντας τα k_x και k_y. Ωστόσο, δεν είναι όλες οι τιμές του k_y που δίνουν διαφορετικές ιδιοτιμές. Αν πάρουμε για παράδειγμα δύο ρυθμούς, έναν με κυματάνυσμα k_y και τον άλλο με κυματάνυσμα k_y + 2π/α, με εισαγωγή στην σχέση (3.3) βλέπουμε ότι έχουν τις ίδιες ιδιοτιμές του T_R. Στην πραγματικότητα, όλοι οι ρυθμοί με κυματανύσματα της μορφής k_y + m(2π/α), όπου m ακέραιος, σχηματίζουν ένα εκφυλισμένο σύνολο, έχουν δηλ. την ίδια ιδιοτιμή του T_R, την $e^{-i (kya)}$. Προσθέτοντας δηλ. στο k_y ένα ακέραιο πολλαπλάσιο του $b = 2\pi/\alpha$ αφήνει την κατάσταση αμετάβλητη. Καλούμε τότε, το **b** = b**ŷ**, μοναδιαίο διάνυσμα του αντίστροφου πλέγματος. Δεδομένου ότι οποιοσδήποτε γραμμικός συνδυασμός αυτών των εκφυλισμένων ιδιοσυναρτήσεων είναι επίσης ιδιοσυνάρτηση με την ίδια ιδιοτιμή, μπορούμε να πάρουμε γραμμικούς συνδυασμούς των αρχικών ρυθμών διάδοσης κάτω από την παρακάτω μορφή:

$$H_{k_{x}k_{y}}(r) = e^{ik_{x}x} \sum_{m} c_{k_{y},m}(z) e^{i(k_{y}+mb)y}$$

= $e^{ik_{x}x} e^{ik_{y}y} \sum_{m} c_{k_{y},m}(z) e^{imby}$
= $e^{ik_{x}x} e^{ik_{y}y} u_{k_{y}}(y,z)$ (3.4)

Όπου οι c είναι συντελεστές που καθορίζονται με αναλυτική λύση, και **u**(y,z) είναι (από κατασκευής) μια περιοδική συνάρτηση του y: με επισκόπηση της εξίσωσης (3.4), μπορούμε να επαληθεύσουμε ότι **u** (y + a, z) = **u** (y, z). Η διακριτή περιοδικότητα στην κατεύθυνση y οδηγεί σε εξάρτηση για το Η από το y που είναι απλά το γινόμενο ενός επίπεδου κύματος με μια περιοδική συνάρτηση ως προς y. Μπορούμε να το θεωρήσουμε σαν ένα επίπεδο κύμα, όπως θα ήταν στον ελεύθερο χώρο, αλλά διαμορφωμένο από μια περιοδική συνάρτηση λόγω του περιοδικού πλέγματος:

$$H(..., y, ...) \sim e^{ik_y y} u_{k_y}(y, ...)$$
 (3.5)

Αυτό το αποτέλεσμα είναι κοινώς γνωστό ως θεώρημα του Bloch. Στην φυσική στερεάς κατάστασης, η μορφή της σχέσης (3.5) είναι γνωστή ως κατάσταση Bloch [2]. Ένα βασικό στοιχείο για τις καταστάσεις Bloch είναι ότι η κατάσταση Bloch με κυματάνυσμα k_y και η κατάσταση Bloch με κυματάνυσμα $k_y + mb$ είναι πανομοιότυπες. Οι κυψέλες που διαφέρουν ακέραια πολλαπλάσια $b = 2\pi/\alpha$ δεν διαφέρουν από φυσική άποψη. Έτσι, οι συχνότητες διάδοσης πρέπει επίσης να είναι περιοδικές στο k_y : $\omega(k_y) = \omega(k_y + mb)$. Πράγματι, πρέπει μόνο να θεωρήσουμε ότι τα k_y περιορίζονται στο εύρος $-\pi/\alpha < k_y < \pi/\alpha$. Αυτή η περιοχή τιμών του k_y που όλες τους είναι σημαντικές (δηλ. καμμία τιμή δεν πλεονάζει) ονομάζεται ζώνη Brillouin.

Ας δούμε σε συντομία τι γίνεται όταν το διηλεκτρικό είναι περιοδικό σε τρεις διαστάσεις. Σε αυτή την περίπτωση το διηλεκτρικό είναι αμετάβλητο κάτω από μετατοπίσεις μέσω ενός πλήθους διανυσμάτων πλέγματος R σε τρεις διαστάσεις. Οποιοδήποτε από αυτά τα πλεγματικά διανύσματα μπορεί να γραφτεί ως ένας συγκεκριμένος συνδυασμός τριών μοναδιαίων διανυσμάτων πλέγματος (a₁, a₂, a₃) που "καλύπτουν" το χώρο των διανυσμάτων πλέγματος. Με άλλα λόγια, θεωρούμε ότι κάθε R = la₁ + ma₂ + na₃ για ακέραιους l, m και n. Τα διανύσματα (a₁, a₂, a₃) δίνουν αφορμή να δημιουργηθούν τρία μοναδιαία διανύσματα πλέγματος (b₁, b₂, b₃) που ορίζονται έτσι ώστε $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$. Αυτά τα διανύσματα αντιστρόφου πλέγματος δημιουργούν ένα δικό τους πλέγμα που καταλαμβάνεται από κυματανύσματα.

Οι ρυθμοί ενός τρισδιάστατου περιοδικού συστήματος είναι καταστάσεις Bloch που αντιστοιχούν σε ένα κυματάνυσμα Bloch, $\mathbf{k} = k_1 \mathbf{b_1} + k_2 \mathbf{b_2} + k_3 \mathbf{b_3}$, όπου το \mathbf{k} βρίσκεται μέσα στην ζώνη Brillouin. Για παράδειγμα, για ένα κρύσταλλο που η μοναδιαία κυψελίδα του είναι ένας κύβος, η ζώνη Brillouin δίνεται από $|k_i| \le 1/2$. Κάθε τιμή του κυματανύσματος \mathbf{k} στο εσωτερικό της ζώνης Brillouin προσδιορίζει μία ιδιοτιμή του Θ με συχνότητα ω(\mathbf{k}) και ένα ιδιοδιάνυσμα $\mathbf{H}_{\mathbf{k}}$

$$H_k(r) \sim e^{ikr} u_k(r) \tag{3.6}$$

όπου \mathbf{u}_k (r) είναι μια περιοδική συνάρτηση στο πλέγμα: \mathbf{u}_k (r) = \mathbf{u}_k (r + R) για όλα τα διανύσματα πλέγματος R.

3.2 Φωτονικές Ενεργειακές Ζώνες

Από πολύ γενικές αρχές συμμετρίας, όπως φαίνεται στην εξίσωση (3.6) οι ηλεκτρομαγνητικοί ρυθμοί ενός φωτονικού κρυστάλλου με διακριτή περιοδικότητα σε τρεις διαστάσεις μπορούν να γραφτούν ως καταστάσεις Bloch. Όλες οι πληροφορίες σχετικά με έναν τέτοιο ρυθμό δίδονται από τον κυματάνυσμα k και την περιοδική συνάρτηση u_k (**r**). Για να λύσουμε για το u_k (**r**), εισάγουμε την κατάσταση Bloch στην κύρια εξίσωση (3.3)

$$\widehat{\Theta}H_{k} = \left(\frac{\omega(k)}{c}\right)^{2} H_{k}$$

$$\nabla \times \frac{1}{\varepsilon(r)} \nabla \times e^{ikr} u_{k}(r) = \left(\frac{\omega(k)}{c}\right)^{2} e^{ikr} u_{k}(r)$$

$$(ik + \nabla) \times \frac{1}{\varepsilon(r)} (ik + \nabla) \times e^{ikr} u_{k}(r) = \left(\frac{\omega(k)}{c}\right)^{2} u_{k}(r)$$

$$\widehat{\Theta}u_{k}(r) = \left(\frac{\omega(k)}{c}\right)^{2} u_{k}(r)$$
(3.7)

Όπου ορίζουμε το Θ_k σαν έναν νέο Ερμιτιανό τελεστή που εμφανίζεται στην παραπάνω σχέση και εξαρτάται από το k:

$$\widehat{\Theta}_{k} \triangleq (ik + \nabla) \times \frac{1}{\varepsilon(r)} (ik + \nabla) \times$$
(3.8)

Η συνάρτηση u, και συνεπώς η κατανομή των ρυθμών, καθορίζονται από την ιδιοτιμή

στην τέταρτη εξίσωση του (3.7), που υπόκειται στην αντιμεταθετική σχέση $(ik + \nabla) \cdot u_k = 0$ και στην ακόλουθη σχέση περιοδικότητας

$$u_k(r) = u_k(r+R) \tag{3.9}$$

Λόγω αυτής της περιοδικής οριακής συνθήκης, μπορούμε να θεωρήσουμε το πρόβλημα ιδιοτιμής ως περιοριζόμενο σε μια μοναδιαία κυψελίδα του φωτονικού κρυστάλλου. Όπως συζητήθηκε στην ενότητα.Ο περιορισμός ενός Ερμιτιανού προβλήματος ιδιοτιμών σε ένα πεπερασμένο όγκο οδηγεί σε ένα ξεχωριστό φάσμα ιδιοτιμών. Μπορούμε να αναμένουμε ότι θα βρούμε, για κάθε τιμή του **k**, ένα άπειρο σύνολο ρυθμών διακριτών συχνοτήτων, τις οποίες μπορούμε να επισημάνουμε με ένα δείκτη ζώνης n.

Δεδομένου ότι το **k** εισάγεται ως συνεχής παράμετρος στο Θ, αναμένουμε ότι η συχνότητα κάθε ζώνης, για ένα δεδομένο n, μεταβάλλεται συνεχώς καθώς το **k** αλλάζει. Με αυτό τον τρόπο φτάνουμε στην περιγραφή των ρυθμών ενός φωτονικού κρυστάλλου: Πρόκειται για μια οικογένεια συνεχών συναρτήσεων, ω_n (**k**), κατά σειρά αυξανόμενης συχνότητας από τον αριθμό της ζώνης. Οι πληροφορίες που περιέχονται σε αυτές τις συναρτήσεις ονομάζονται δομή ζώνης του φωτονικού κρυστάλλου. Μελετώντας τη δομή της ζώνης ενός κρυστάλλου έχουμε τις περισσότερες πληροφορίες που χρειαζόμαστε για να προβλέψουμε τις οπτικές του ιδιότητες, όπως θα δούμε.

Για ένα δεδομένο φωτονικό κρύσταλλο ε (r), πώς μπορούμε να υπολογίσουμε τις συναρτήσεις της δομής ζώνης ω_n(k) ; Ισχυρές υπολογιστικές τεχνικές είναι διαθέσιμες, αλλά δεν θα τις συζητήσουμε εκτενώς αφού το κέντρο βάρους αυτού του κειμένου είναι σε έννοιες και αποτελέσματα, όχι στις αριθμητικές μελέτες των εξισώσεων. Ένα σύντομο περίγραμμα της τεχνικής που χρησιμοποιήθηκε για τη δημιουργία των δομών της ζώνης σε αυτό το κείμενο βρίσκεται στο προσάρτημα D. Στην ουσία, η τεχνική βασίζεται στο γεγονός ότι η τελευταία εξίσωση (3.7) είναι μια τυπική εξίσωση ιδιοτιμών που εύκολα επιλύεται από μια Επαναληπτική τεχνική ελαχιστοποίησης για κάθε τιμή του k.

3.3 Περιστροφική συμμετρία και μη αναγώγιμη ζώνη Brillouin

Οι φωτονικοί κρύσταλλοι μπορεί να έχουν συμμετρίες διαφορετικές από τις διακριτές μετατοπίσεις. Ένας δεδομένος κρύσταλλος μπορεί επίσης να αφεθεί αμετάβλητος μετά από περιστροφή, καθρεπτική ανάκλαση ή πραγματοποίηση αναστροφής. Εξετάζουμε πρώτα τα συμπεράσματα που μπορούμε να συνάγουμε σχετικά με τους ρυθμούς ενός συστήματος με περιστροφική συμμετρία.

Ας υποθέσουμε ότι ο τελεστής (3 × 3 μήτρας) *R* (ň, α) περιστρέφει τους διανύσματα κατά γωνία α γύρω από τον άξονα ň. Ας ονομάσουμε το *R* (ň, α) σαν *R*. Για να περιστρέψουμε ένα πεδίο διανυσμάτων f (**r**), παίρνουμε το διάνυσμα f και το περιστρέφουμε με R για να πάρουμε f' = *R*f. Περιστρέφουμε επίσης την μεταβλητή του διανυσματικού πεδίου: r' = R^{-1} **r**. Επομένως, f' (**r'**) = *R*f (**r'**) = *R* f(R^{-1} **r**). Συνεπώς, ορίζουμε τον περιστροφέα του διάνυσματικού πεδίου \hat{O} ως

 $\hat{O}_{R} \cdot f(r') = R f(R^{-1}r)$ (14)

Εάν η περιστροφή από το *R* αφήνει το σύστημα αμετάβλητο, τότε συμπεραίνουμε ότι [Θ, $\hat{\mathbf{O}}_R$] = 0. Επομένως, μπορούμε να πραγματοποιήσουμε την ακόλουθη πράξη:

$$\widehat{\Theta}(\widehat{O_R}H_{kn}) = \widehat{O_R}(\widehat{\Theta}H_{kn}) = \left(\frac{\omega(k)}{c}\right)^2 \left(\widehat{O_R}H_{kn}\right) \quad (3.10)$$

Βλέπουμε ότι το $\hat{O}_R H_{kn}$ ικανοποιεί επίσης την κύρια εξίσωση, με την ίδια ιδιοτιμή όπως το H_{kn} . Αυτό σημαίνει ότι ο ρυθμός που περιστράφηκε είναι ένας επιτρεπόμενος τρόπος, με την ίδια συχνότητα. Μπορούμε περαιτέρω να αποδείξουμε ότι η κατάσταση $\hat{O}_R H_{kn}$ δεν είναι άλλη από την κατάσταση Bloch με κυματάνυσμα \mathbf{R}_k . Για να γίνει αυτό, πρέπει να δείξουμε ότι το $\hat{O}_R \mathbf{H}_{kn}$ είναι μια ιδιοσυνάρτηση του τελεστή μεταφοράς TR με την ιδιοτιμή e^{-iRk} · **R** όπου **R** είναι ένα διάνυσμα πλέγματος. Μπορούμε να κάνουμε ακριβώς αυτό, χρησιμοποιώντας το γεγονός ότι το Θ και το \hat{O}_R εναλλάσονται και έτσι το $R^{-1}\mathbf{R}$ πρέπει επίσης να είναι ένα διάνυσμα πλέγματος:

$$\widehat{T_{R}}(\widehat{O_{R}}H_{kn}) = \widehat{O_{R}}(\widehat{T_{R^{-1}R}}H_{kn})$$

$$= \widehat{O_{R}}(e^{-i(k\cdot R^{-1}R)}H_{kn})$$

$$= e^{-i(k\cdot R^{-1}R)}(\widehat{O_{R}}H_{kn})$$

$$= e^{-i(Rk\cdot R)}\widehat{O_{R}}H_{kn}$$
(3.11)

Δεδομένου ότι το $\hat{\mathbf{O}}_{R}$ Η_{kn} είναι η κατάσταση Bloch με το κυματάνυσμα *R***k** και έχει τις ίδιες ιδιοτιμές όπως το Η_{kn},

$$\omega_{n}(R\mathbf{k}) = \omega_{n}(\mathbf{k}) \tag{3.12}$$

Συμπεραίνουμε ότι όταν υπάρχει περιστροφική συμμετρία στο πλέγμα, οι ζώνες συχνοτήτων ω_n(**k**) έχουν επιπλέον πλεονασμούς εντός της ζώνης Brillouin. Με παρόμοιο τρόπο, μπορούμε να δείξουμε ότι κάθε φορά που ένας φωτονικός κρύσταλλος έχει περιστροφή, ανακλαστική ανακλαστικότητα ή συμμετρία αναστροφής, οι συναρτήσεις ω_n(**k**) έχουν αυτή τη συμμετρία επίσης. Αυτή η συγκεκριμένη συλλογή λειτουργιών συμμετρίας (περιστροφές, ανακλάσεις και αναστροφές) καλείται ομάδα σημείων του κρυστάλλου. Δεδομένου ότι οι συναρτήσεις ω_n(**k**) έχουν την πλήρη συμμετρία της ομάδας σημείων, δεν χρειάζεται να τις εξετάσουμε σε κάθε σημείο k της ζώνης Brillouin. Η μικρότερη περιοχή εντός της ζώνης Brillouin για την οποία το ω_n (**k**) δεν σχετίζεται με συμμετρία ονομάζεται μη αναγώγιμη ζώνη Brillouin. Για παράδειγμα, ένας φωτονικός κρύσταλλος με τη συμμετρία ενός απλού τετραγωνικού πλέγματος έχει μια τετράγωνη ζώνη Brillouin με κέντρο το **k** = 0, όπως απεικονίζεται στο σχήμα 6. (Bλέπε παράρτημα B για μια πληρέστερη συζήτηση του αμοιβαίου πλέγματος και της ζώνης Brillouin). Η μη αναγώγιμη ζώνη είναι τριγωνική σφήνα με επιφάνεια το 1/8 της επιφάνειας της πλήρους ζώνης Brillouin.

3.4 Καθρεπτική Συμμετρία και διαχωρισμός των ρυθμών

Η συμμετρία καθρεπτικής ανάκλασης σε ένα φωτονικό κρύσταλλο αξίζει ιδιαίτερης προσοχής. Υπό ορισμένες συνθήκες μας επιτρέπει να διαχωρίσουμε την εξίσωση ιδιοτιμών για το Θ_k σε δύο ξεχωριστές εξισώσεις, μία για κάθε πόλωση πεδίου.



Σχήμα 2: Αριστερά: Φωτονικός κρύσταλλος κατασκευασμένος με τετραγωνικό πλέγμα. Φαίνεται ένας αυθαίρετο διάνυσμα r. Δεξιά: Η ζώνη Brillouin του τετράγωνου πλέγματος, με κέντρο την αρχή (Γ). Φαίνεται επίσης ένα αυθαίρετο κυματάνυσμα **k**. Η μη μειώσιμη περαιτέρω ζώνη είναι η γαλάζια τριγωνική σφήνα. Τα ειδικά σημεία στο κέντρο, τη

γωνία και εμπρός είναι συμβατικά γνωστά ως Γ, Μ, και Χ.

Στη μια περίπτωση το H_k είναι κάθετο στο επίπεδο καθρέφτη και το E_k είναι παράλληλο. Ενώ στην άλλη περίπτωση, το H_k βρίσκεται στο επίπεδο και το E_k είναι κάθετο. Αυτή η απλούστευση είναι βολική, διότι εξασφαλίζει άμεση πληροφόρηση σχετικά με τις συμμετρίες ρυθμών και διευκολύνει επίσης τον αριθμητικό υπολογισμό των συχνοτήτων τους.

Έστω λοιπόν ότι έχουμε έναν τελεστή που καθρεπτίζει ένα διάνυσμα από ένα επίπεδο για παράδειγμα. Ισχύει ότι **αν εφαρμόσουμε τον τελεστή ξανά θα πρέπει να πάρουμε το αρχικό μας διάνυσμα.** Οπότε κάποιος μπορεί έυκολα να συμπεράνει ότι οι ιδιοτιμές αυτού του τελεστή (έστω Ô_{Mz}) είναι

 $\hat{O}_{Mx}H_k(\mathbf{r}) = \pm H_k(\mathbf{r})$

και άρα το πεδίο μας είναισυμμετρικό η αντισυμματρικό με το απίπεδο z=0.

Μπορεί εύκολα να αποδειχθεί ότι οι συνθήκες αυτές μπορούν πάντα να πληρούνται για τους δισδιάστατους φωτονικούς κρυστάλλους. Οι δισδιάστατοι κρύσταλλοι είναι περιοδικοί σε ένα συγκεκριμένο επίπεδο, αλλά είναι ομοιόμορφοι κατά μήκος ενός άξονα κάθετου προς αυτό το επίπεδο. Ονομάζοντας αυτόν σαν τον άξονα z, γνωρίζουμε ότι η πράξη αντιστοίχισης $\hat{z} \rightarrow -\hat{z}$ είναι μια συμμετρία του κρυστάλλου όποιο και να είναι το αρχικό σημείο. Οπότε οι ρυθμοί κάθε δισδιάστατου φωτονικού κρυστάλλου μπορούν να ταξινομηθούν με βάση δύο ξεχωριστές πολώσεις: είτε (E_x, E_y, H_z) είτε (H_x, H_y, E_z). Οι πρώτοι, στους οποίους το ηλεκτρικό πεδίο βρίσκεται στο επίπεδο xy, ονομάζονται εγκάρσιοι ηλεκτρικοί ρυθμοί (TE). Οι δεύτεροι, όπου το μαγνητικό πεδίο περιορίζεται στο επίπεδο xy, ονομάζονται εγκάρσιοι εγκάρσιοι μαγνητικοί μαγνητικο

3.5 ΔΙΣΔΙΑΣΤΑΤΟΙ ΦΩΤΟΝΙΚΟΙ ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΙ

Σε αυτό το κεφάλαιο θα δούμε πώς αλλάζει η κατάσταση όταν ο κρύσταλλος είναι περιοδικός σε δύο κατευθύνσεις και ομοιογενής στην τρίτη. Οι φωτονικές ενεργειακές ζώνες εμφανίζονται στο επίπεδο της περιοδικότητας. Για την διάδοση του φωτός σε αυτό το επίπεδο, οι αρμονικοί ρυθμοί μπορούν να χωριστούν σε δύο ανεξάρτητες πολώσεις, κάθε μία με τη δική της δομή της ζώνης. Όπως και πριν, μπορούμε να εισαγάγουμε ατέλειες για να εντοπίσουμε τους ρυθμούς διάδοσης, αλλά σε αυτή την περίπτωση μπορούμε να εντοπίσουμε έναν ρυθμό σε δύο διαστάσεις, αντί για μία μόνο διάσταση.

Ένας δισδιάστατος φωτονικός κρύσταλλος είναι περιοδικός κατά μήκος δύο από τους άξονες του και ομογενής κατά μήκος του τρίτου άξονα. Ένα τυπικό δοκίμιο, που αποτελείται από ένα τετράγωνο πλέγμα διηλεκτρικών στηλών, φαίνεται στο σχήμα 1. Φανταζόμαστε ότι οι στήλες είναι απείρως ψηλές. Για ορισμένες τιμές της απόστασης μεταξύ των στηλών, αυτός ο κρύσταλλος μπορεί να έχει μία απαγορευμένη φωτονική ενεργειακή ζώνη στο επίπεδο xy. Μέσα σε αυτην την ζώνη δεν επιτρέπονται εκτεταμένες καταστάσεις και αντανακλάται το προσπίπτον φως. Σε αντίθεση με την πολυστρωματική μεμβράνη, αυτός ο δισδιάστατος φωτονικός κρύσταλλος μπορεί να εμποδίσει το φως να διαδοθεί σε οποιαδήποτε κατεύθυνση μέσα στο επίπεδο.

Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τις συμμετρίες του κρυστάλλου για να χαρακτηρίσουμε τους ηλεκτρομαγνητικούς ρυθμούς. Επειδή το σύστημα είναι ομοιογενές στην κατεύθυνση z, γνωρίζουμε ότι οι ρυθμοί πρέπει να ταλαντώνονται προς την κατεύθυνση αυτή, χωρίς περιορισμούς στο κυματάνυσμα k_z . Επιπλέον, το σύστημα έχει διακριτή συμμετρική μετατόπιση στο επίπεδο xy. Συγκεκριμένα, ε (r) = ε (r + R), εφ' όσον το R είναι οποιοσδήποτε γραμμικός συνδυασμός των μοναδιαίων διανυσμάτων πλέγματος ax και ay. Εφαρμόζοντας το θεώρημα του Bloch, μπορούμε να εστιάσουμε την προσοχή μας στις τιμές του k_{\parallel} που βρίσκονται στη ζώνη Brillouin. Όπως και πριν, χρησιμοποιούμε τον δείκτη η για να επισημάνουμε τους ρυθμούς κατά σειρά αυξανόμενης συχνότητας.



Σχήμα 3: Ένας δισδιάστατος φωτονικός κρύσταλλος. Το υλικό αυτό είναι ένα τετράγωνο πλέγμα διηλεκτρικών στηλών, με ακτίνα r και διηλεκτρική σταθερά ε. Το υλικό είναι ομοιογενές κατά μήκος της κατεύθυνσης z (φανταζόμαστε ότι οι κύλινδροι είναι πολύ ψηλοί), και περιοδικό κατά μήκος των x και y με σταθερό πλέγμα a. Το αριστερό ένθετο δείχνει το τετράγωνο πλέγμα από πάνω, με το κελί της μονάδας πλαισιωμένο με κόκκινο χρώμα

Ονοματίζοντας τους ρυθμούς του κρύσταλλου από τα k_z, k_{ll}, και n, παίρνουν την πλέον γνωστή μορφή των καταστάσεων Bloch

$$H_{(n,k_z,k_{\parallel})}(r) = e^{ik_{\parallel}\rho}e^{ik_z z}u_{(n,k_z,k_{\parallel})}(\rho)$$

Σε αυτή την εξίσωση, **ρ** είναι η προβολή του **r** στο xy επίπεδο και **u** (**p**) είναι μια περιοδική συνάρτηση, **u** (**p**) = **u** (**p** + **R**), για όλα τα διανύσματα πλέγματος **R**. Οποιοιδήποτε ρυθμοί με k_z = 0 (δηλ. που διαδίδονται αυστηρά παράλληλα προς το επίπεδο xy) είναι αμετάβλητοι κάτω από ανακλάσεις μέσω του επιπέδου xy. Αυτή η συμμετρία καθρέφτη μας επιτρέπει να ταξινομήσουμε τους ρυθμούς διαχωρίζοντάς τους σε δύο ξεχωριστές πολώσεις. Οι εγκάρσιοι ηλεκτρικοί ρυθμοί (TE) έχουν **H** κάθετο στο επίπεδο, **H** = **H** (**p**) **z** και **E** πάνω στο επίπεδο **E** (**p**) **z** = 0. Οι εγκάρσιοι μαγνητικοί ρυθμοί (TM) έχουν ακριβώς το αντίστροφο **E** = **E** (**p**) **z** και **H** (**p**) **z** εαι **H** (**p**) **z** = 0.

Οι δομές της ζώνης για τους ρυθμούς ΤΕ και ΤΕ μπορεί να είναι εντελώς διαφορετικές. Είναι δυνατόν, για παράδειγμα, να υπάρχουν φωτονικά χάσματα ζώνης για μία πόλωση αλλά όχι για την άλλη πόλωση. Στα επόμενα, θα διερευνήσουμε τις δομές ζώνης ΤΕ και ΤΜ για δύο διαφορετικούς δισδιάστατους φωτονικούς κρυστάλλους, περιοριζόμενοι σε διάδοση στο επίπεδο (k_z = 0). Τα αποτελέσματα θα δώσουν χρήσιμες γνώσεις σχετικά με την εμφάνιση των χασμάτων ζώνης.



Σχήμα 4: Η δομή της φωτονικής ζώνης για μια τετραγωνική συστοιχία διηλεκτρικών στηλών με r = 0.2a. Οι μπλε ζώνες αντιπροσωπεύουν τους ρυθμούς TM και οι κόκκινες ζώνες αντιπροσωπεύουν τους ρυθμούς TE. Το αριστερό ένθετο δείχνει τη ζώνη Brillouin, με τη μη αναγώγιμη ζώνη σκιασμένη με ανοιχτό μπλε χρώμα. Το δεξί ένθετο δείχνει μια όψη διατομής της διηλεκτρικής συνάρτησης. Οι στήλες (ε = 8,9, για την αλουμίνα) είναι εντός του αέρα (ε = 1).

3.6 ΤΕΤΡΑΓΩΝΙΚΟ ΠΛΕΓΜΑ ΔΙΗΛΕΚΤΡΙΚΩΝ ΣΤΗΛΩΝ

Εξετάζουμε το φως που μεταδίδεται στο επίπεδο xy ενός τετραγωνικού πλέγματος διηλεκτικών στηλών, όπως η δομή που απεικονίζεται στο σχήμα 2, με σταθερά πλέγματος a. Η δομή ζώνης για έναν κρύσταλλο αποτελούμενο από ράβδους αλουμίνας (ε = 8,9) στον αέρα, με ακτίνα r / a = 0,2, απεικονίζεται στο σχήμα 3. Τόσο οι δομές ζώνης ΤΕ όσο και ΤΕ παρουσιάζονται. (η συχνότητα εκφράζεται ως λόγος χωρίς διαστάσεις ωa / 2πc.) Ο οριζόντιος άξονας δείχνει την τιμή του κυματανύσματος στο επίπεδο \mathbf{k}_{\parallel} . Καθώς προχωράμε από αριστερά προς τα δεξιά, το \mathbf{k}_{\parallel} κινείται κατά μήκος του τριγωνικού άκρου της μη αναγώγιμης ζώνης Brillouin, από Γ σε X έως M, όπως φαίνεται στο ένθετο του σχήμα 2.

Στην συνέχεια θα περιγράψουμε τη φύση των ρυθμών όταν \mathbf{k}_{\parallel} βρίσκεται ακριβώς στα ειδικά σημεία συμμετρίας της ζώνης Brillouin και θα διερευνήσουμε την εμφάνιση των χασμάτων στην ζώνη. Ο λόγος για τον οποίο έχουμε σχεδιάσει \mathbf{k}_{\parallel} μόνο κατά μήκος της άκρης της ζώνης Brillouin είναι ότι τα ελάχιστα και τα μέγιστα μιας δεδομένης ζώνης (που καθορίζουν το χάσμα της ζώνης) σχεδόν πάντα συμβαίνουν στις άκρες της ζώνης και συχνά σε μια γωνία.

Η τετράγωνη συστοιχία πλέγματος έχει μια τετράγωνη ζώνη Brillouin, η οποία απεικονίζεται στο ένθετο του σχήματος 2. Η μη αναγώγιμη ζώνη Brillouin είναι η τριγωνική σφήνα στην επάνω δεξιά γωνία. Η υπόλοιπη ζώνη Brillouin μπορεί να σχετίζεται με αυτήν την σφήνα με περιστροφική συμμετρία. Τα τρία ειδικά σημεία Γ, Χ και Μ αντιστοιχούν στο $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$, $\mathbf{k}_{\parallel} = \pi / \alpha \mathbf{x}$ και $\mathbf{k}_{\parallel} = \pi / \alpha \mathbf{x} + \pi / \alpha \mathbf{y}$.

Για τους ρυθμούς στο σημείο Γ, η μορφή πεδίου είναι ακριβώς η ίδια σε κάθε μονάδα κυψελών. Για τους ρυθμούς στο σημείο Χ (άκρη της ζώνης), τα πεδία εναλλάσσονται σε πρόσημο σε κάθε μονάδιαία κυψελίδα κατά μήκος της κατεύθυνσης του κυματανύσματος k_x, σχηματίζοντας μέτωπα κύματος παράλληλα προς την κατεύθυνση y. Για ρυθμούς στο σημείο Μ, τα πρόσημα των πεδίων εναλλάσσονται στις γειτονικές κυψελίδες. Παρόλο που η εικόνα στα Χ και Μ μπορεί να μοιάζει με μέτωπα κύματος ενός διαδιδόμενου κύματος, στην πραγματικότητα οι ρυθμοί σε αυτά τα συγκεκριμένα σημεία **k** δεν διαδίδονται καθόλου - είναι στάσιμα κύματα με μηδενική ταχύτητα ομάδας. Για τους ρυθμούς TM, αυτός ο φωτονικός κρύσταλλος έχει ένα πλήρες χάσμα ζώνης μεταξύ της πρώτης και της δεύτερης ζώνης, με αναλογία 31.4% gap-midgap. Αντίθετα, για τους ρυθμούς ΤΕ δεν υπάρχει πλήρες χάσμα ζώνης. Το πεδίο που σχετίζεται με τον χαμηλότερο ρυθμό ΤΕ (την διηλεκτρική ζώνη) συγκεντρώνεται έντονα στις διηλεκτρικές περιοχές. Αυτό είναι σε έντονη αντίθεση με το μοτίβο πεδίου της ζώνης αέρα. Εκεί, ένα επίπεδο που περνάει από κόμβους κόβει τις διηλεκτρικές στήλες, αποβάλλοντας ένα μέρος του πλάτους του πεδίου μετατόπισης από την περιοχή υψηλής ε.

3.7 ΕΝΤΟΠΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΦΩΤΟΣ ΑΠΟ ΑΤΕΛΕΙΕΣ

Προηγουμένως, βρήκαμε δισδιάστατους φωτονικούς κρυστάλλους με χάσματα ζώνης για επίπεδη διάδοση. Μέσα στο χάσμα ζώνης, δεν επιτρέπονται ρυθμοί. Η πυκνότητα των καταστάσεων (ο αριθμός των πιθανών ρυθμών ανά μονάδα συχνότητας) είναι μηδέν. Με τη διατάραξη μιας μοναδικής θέσης πλέγματος, μπορούμε να δημιουργήσουμε έναν ενιαίο εντοπισμένο ρυθμό ή ένα σύνολο από κοντινούς ρυθμούς που έχουν συχνότητες μέσα στο χάσμα.



Σχήμα 5: Σχηματική απεικόνιση πιθανών σημείων σημείων, γραμμών επιφανειακών και ατελειών. Η διατάραξη μίας στήλης στον κύριο όγκο του κρύσταλλου (κίτρινο) μπορεί να επιτρέψει την εντοπισμό κατάστασης μιας ατελειών τόσο στο x όσο και στο y. Η διατάραξη μιας σειράς στο κύριο μέρος του κρυστάλλου (κόκκινο) ή η περικοπή του κρυστάλλου σε μια επιφάνεια (πράσινη) μπορεί να επιτρέψει μια κατάσταση να εντοπιστεί σε μία κατεύθυνση (x).

Οι ράβδοι υποτίθεται ότι επεκτείνονται απεριόριστα στην κατεύθυνση z.

Σε δύο διαστάσεις, έχουμε πολλές επιλογές. Όπως απεικονίζεται στο σχήμα 5, μπορούμε να αφαιρέσουμε μία στήλη από τον κρύσταλλο ή να την αντικαταστήσουμε με μία άλλη, της οποίας το μέγεθος, το σχήμα ή η διηλεκτρική σταθερά είναι διαφορετική από την αρχική. Η διαταραχή μόνο μιας θέσης καταστρέφει τη συμμετρία μεταφοράς του πλέγματος. Δεν μπορούμε πλέον να ταξινομούμε τους ρυθμούς από ένα κυματάνυσμα στο επίπεδο. Ωστόσο, η συμμετρία καθρεπτικής ανάκλασης εξακολουθεί να παραμένει άθικτη για το k_z = 0. Συνεπώς μπορούμε ακόμα να περιορίσουμε την προσοχή μας στη διάδοση στο επίπεδο, και οι ρυθμοί ΤΕ και TM εξακολουθούν να είναι απόσυνδεδεμένοι. Δηλαδή, μπορούμε να συζητήσουμε ανεξάρτητα τις δομές των ζωνών για τις δύο πολώσεις, όπως και πριν. Η διατάραξη μίας θέσης πλέγματος προκαλεί μία ατέλεια κατά μήκος μιας γραμμής στην κατεύθυνση z. Αλλά επειδή εξετάζουμε την διάδοση μόνο στο επίπεδο της περιοδικότητας και η διαταραχή εντοπίζεται σε ένα συγκεκριμένο σημείο στο επίπεδο αυτό, αναφερόμαστε σε αυτήν την διαταραχή ως σημειακής ατέλειας.

Η αφαίρεση μιας στήλης μπορεί να εισάγει μια κορυφή στην πυκνότητα καταστάσεων εντός του φωτονικού διακένου ζώνης. Εάν συμβεί αυτό, τότε η κατάσταση που προκαλείται από ατέλειες

πρέπει να είναι αποσβένουσα (evanescent). Ο ρυθμός λόγω ατέλειας δεν μπορεί να διεισδύσει στο υπόλοιπο του κρυστάλλου, δεδομένου ότι έχει συχνότητα στο χάσμα ζώνης. Η ανάλυση γενικεύεται εύκολα στην περίπτωση δύο διαστάσεων, επιτρέποντάς μας να καταλήξουμε στο συμπέρασμα ότι οι τυχόν ρυθμοί λόγω ατελειών φθίνουν εκθετικά καθώς απομακρυνόμαστε από την ατέλεια. Βρίσκονται στο επίπεδο xy, αλλά εκτείνονται στην κατεύθυνση z.

Συμπερασματικά, επαναλαμβάνουμε την εξήγηση για την εντοπιστική ισχύ των ατελειών: ο φωτονικός κρύσταλλος, λόγω του χάσματος ζώνης του, αντανακλά το φως ορισμένων συχνοτήτων. Αφαιρώντας μια ράβδο από το πλέγμα, δημιουργούμε μια κοιλότητα που περιβάλλεται αποτελεσματικά από ανακλαστικά τοιχώματα. Εάν η κοιλότητα έχει το σωστό μέγεθος για να υποστηρίξει έναν ρυθμό στο χάσμα ζώνης, τότε το φως δεν μπορεί να διαφύγει και μπορούμε να 'δέσουμε' τον ρυθμό στην ατέλεια.



Σχήμα 6: Οι ρυθμοίι ΤΜ μιας τετραγωνικής συστοιχίας διηλεκτρικών (ε = 8,9) στηλών σε αέρα, με r = 0,38a. Το κεντρικό ένθετο δείχνει τη μη αναγώγιμη ζώνη Brillouin (σκιασμένη με ανοιχτό μπλε). Τα άλλα δύο ένθετα υποδεικνύουν τα πεδία που αντιστοιχούν στους ρυθμούς, σε κάθε στήλη (κόκκινο / μπλε για θετικά / αρνητικά πεδία). Το αριστερό ένθετο δείχνει την μορφή πεδίου για τη ζώνη 3. Το δεξιό σχήμα αντιστοιχεί στο κάτω μέρος της λωρίδας 4.

Θεωρούμε ένα σύστημα το οποίο έχει μελετηθεί τόσο πειραματικά όσο και θεωρητικά: ένα τετράγωνο πλέγμα από στήλες αλουμίνας στον αέρα. Σε αντίθεση με τις απείρως μακρές στήλες του σχήματος 3, οι πραγματικές κολώνες τοποθετούνται ανάμεσα σε μεταλλικές πλάκες, οι οποίες εισήγαγαν μια συχνότητα αποκοπής ΤΕ μεγαλύτερη από τις συχνότητες που ερευνήθηκαν. Οι πλάκες επίσης εξασφαλίζουν διάδοση $k_z = 0$. Με αυτόν τον τρόπο, οι πειραματικοί δημιούργησαν ένα σύστημα που εμφανίζει μόνο ρυθμούς TM με $k_z = 0$.

Η δομή ζώνης αυτού του συστήματος αναπαράγεται στο σχήμα 6. Το σύστημα έχει ένα χάσμα φωτονικής ζώνης 10,1% μεταξύ της τρίτης και της τέταρτης ζώνης. Με την εξέταση της μορφής του πεδίου, όπως κάναμε και στις δύο πρώτες ενότητες αυτού του κεφαλαίου, θα διαπιστώσουμε ότι η πρώτη ζώνη αποτελείται κυρίως από καταστάσεις που δεν έχουν κόμβους που περνούν από τις στήλες υψηλής ε. Μία ατέλεια σε αυτή τη συστοιχία εισάγει έναν εντοπισμένο ρυθμό, όπως φαίνεται στο σχήμα 7. Πειραματικά, αυτή η ατέλεια δημιουργήθηκε αντικαθιστώντας μία από τις στήλες με μια στήλη διαφορετικής ακτίνας. Υπολογιστικά, η ατέλεια εισήχθη μεταβάλλοντας τη διηλεκτρική σταθερά μίας μόνο στήλης. Όσον αφορά τον δείκτη διάθλασης n = $\sqrt{\epsilon}$, η ατέλεια κυμάνθηκε από Δn = n_{alumina} -n_{defect} = 0 έως Δn = 2 (μια στήλη καταργήθηκε εντελώς). Τα αποτελέσματα του υπολογισμού παρουσιάζονται στο σχήμα 8.

Το μεγαλύτερο φωτονικό χάσμα ζώνης σε αυτή τη δομή είναι μεταξύ της τρίτης (π-τύπου) ζώνης καταστάσεων με μια γραμμή κόμβων και της τέταρτης (δ-τύπου) ζώνης καταστάσεων με δύο κόμβους στις περιοχές υψηλού ε. Όταν ο δείκτης διάθλασης είναι μικρότερος από 3, μια κατάσταση εγκαταλείπει την π ζώνη και εισέρχεται στο χάσμα της φωτονικής ζώνης. Καθώς το Δη αυξάνεται μεταξύ 0 και 0,8, αυτός ο διπλά εκφυλισμένος ρυθμός σαρώνει το χάσμα. Στο Δη = 1.4, μια μη εκφυλισμένη κατάσταση εισέρχεται στο χάσμα, το σαρώνει και διεισδύει στη ζώνη δ για Δη = 1.8. Αυτός ο ρυθμός εμφανίζεται στο Δη = 1,58, πριν εισέλθει στη ζώνη δ, στο αριστερό πλαίσιο του σχήματος 7.



Σχήμα 7: Πεδία μετατόπισης (Dz) καταστάσεων εντοπισμένων γύρω από μία ατέλεια σε ένα τετράγωνο πλέγμα των ράβδων αλουμίνας (ε = 8,9) στον αέρα. Το χρώμα υποδεικνύει το μέγεθος του πεδίου. Η ατέλεια στα αριστερά δημιουργήθηκε με τη μείωση της διηλεκτρικής σταθεράς μίας μόνο ράβδου. Αυτος ο ρυθμός έχει μονοπολική μορφή με ένα μόνο λοβό στην ατέλεια και περιστροφική συμμετρία. Н

ατέλεια στα δεξιά δημιουργήθηκε με την αύξηση της διηλεκτρικής σταθεράς μιας μόνο ράβδου. Αυτός ο ρυθμός έχει μορφή τετραπολική με δύο κομβικά επίπεδα στην ατέλεια και μετασχηματίζεται όπως η συνάρτηση ƒ (ρ) = xy με περιστροφές.



Σχήμα 8: Η εξέλιξη των εντοπισμένων ρυθμών που σχετίζονται με μια στήλη ατελειών σε ένα άλλο τέλειο τετράγωνο πλέγμα, καθώς μειώνεται ο δείκτης διάθλασης της ατέλειας. Μια μεταβολή δείκτη Δn = 0 αντιστοιχεί στον τέλειο κρυστάλλο. Δn = 2 αντιστοιχεί στην πλήρη αφαίρεση μιας στήλης. Οι οριζόντιες γραμμές υποδεικνύουν τα άκρα του χάσματος ζώνης. Στο χάσμα, οι συχνότητες (κόκκινες γραμμές) συνδέονται με τις εντοπισμένες καταστάσεις, αλλά όταν φθάνει στο συνεχές φάσμα,

γίνεται συντονισμός με την συχνότητα ευρείας ζώνης (πράσινη γραμμή). Η κατάσταση στο Δn = 1.58 έχει την μορφή πεδίου που φαίνεται στο αριστερό πλαίσιο του σχήματος 7.

Η συχνότητα του ρυθμού ατέλειας αυξάνεται καθώς το ε_{defect} μειώνεται, όπως μπορούμε να δούμε στο σχήμα 8.

Αν και η ατέλεια καταστρέφει τη συμμετρία μετατόπισης του κρυστάλλου, πολλοί τύποι ατελειών εξακολουθούν να επιτρέπουν στο κρύσταλλο να διατηρεί μερικούς άξονες συμμετρίας. Για παράδειγμα στην ένθετη εικόνα 7, βλέπουμε ότι μετά την αφαίρεση μιας στήλης από το πλέγμα μπορούμε ακόμα να περιστρέψουμε τον κρύσταλλο κατά 90° γύρω από τον άξονα z και να τον αφήσουμε αμετάβλητο. Εάν μία ατέλεια διατηρεί μια θέση συμμετρίας, τότε μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε αυτή τη συμμετρία για να ταξινομήσουμε τους ρυθμούς της ατέλειας.

Για παράδειγμα, επειδή η ατέλεια στο αριστερό πλαίσιο του σχήματος 7 παραμένει αμετάβλητη υπό περιστροφές 90°, μπορούμε αμέσως να προβλέψουμε τις ιδιότητες συμμετρίας των διπλά εκφυλισμένων ρυθμών που διασχίζουν το χάσμα για 0 <Δn < 0.8. Πρέπει να είναι ένα ζεύγος διπολικών ρυθμών (με ένα κομβικό επίπεδο στην ατέλεια) που εναλλάσονται υπό περιστροφή 90°, καθώς αυτός είναι ο μόνος διπλά εκφυλισμένος τρόπος αναπαραγωγής της συμμετρίας περιβάλλοντος χώρου.

Οταν ο ρυθμός της ατέλειας φθάσει την ζώνη δ (αέρα) η συχνότητά του είναι πάνω από το κάτω μέρος της ζώνης δ, ο ρυθμός ατέλειας δεν παγιδεύεται πλέον στο χάσμα ζώνης. Μπορεί να μπεί στη συνέχεια στις καταστάσεις που αποτελούν τη ζώνη δ. Η ατέλεια δεν δημιουργεί πλέον έναν εντοπισμένο ρυθμό. Ωστόσο, δεδομένου ότι αναμένουμε μια ομαλή μετάβαση μεταξύ της τοπικής και της συνεχούς συμπεριφοράς, ο ρυθμός εξακολουθεί να επικεντρώνεται σε μεγάλο μέρος της ενέργειας του πεδίου κοντά στην ατέλεια. Αλλά σε αυτή την περίπτωση, η ατέλεια δεν περιβάλλεται από ανακλαστικά τοιχώματα, έτσι ώστε η ενέργεια θα εισέλθει στις συνεχείς καταστάσεις σε κάποιο βαθμό γ. Ονομάζουμε αυτόν τον ρυθμό ως ρυθμό διαρροής ή συντονισμό. Η κορυφή που δημιουργεί η ατέλεια στην πυκνότητα καταστάσεων του κρυστάλλου διευρύνεται ανάλογα με το γ. Καθώς ο ρυθμός διεισδύει περισσότερο στο συνεχές διευρύνεται και εξαφανίζεται στο συνεχές.

Σε έναν κρύσταλλο με πεπερασμένο αριθμό ράβδων, τότε ακόμη και οι ρυθμοί ατέλειας μέσα στο χάσμα είναι συντονισμοί, αντί για πραγματικά εντοπισμένους ρυθμούς. Κάθε συντονισμός έχει μηδενικό ρυθμό διαρροής γ στο περιβάλλον μέσο. Επειδή αυτές οι καταστάσεις ατέλειας φθίνουν εκθετικά μέσα στον κρύσταλλο, και επίσης η τιμή του γ μειώνεται επίσης εκθετικά με τον αριθμό περιβαλλόντων κρυσταλλικών περιόδων, ο ρυθμός απώλειας μπορεί να γίνει όσο μικρός επιθυμούμε.

3.8 ΓΡΑΜΜΙΚΕΣ ΑΤΕΛΕΙΕΣ ΚΑΙ ΚΥΜΑΤΟΔΗΓΟΙ

Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε σημειακές ατέλειες σε φωτονικούς κρυστάλλους για να παγιδεύσουμε το φως, όπως είδαμε. Χρησιμοποιώντας γραμμικές ατέλειες, μπορούμε επίσης να κατευθύνουμε το φως από τη μια θέση στην άλλη. Η βασική ιδέα είναι να χαράξουμε έναν

κυματοδηγό μέσα σε ένα κατά τα άλλα τέλειο φωτονικό κρύσταλλο τροποποιώντας μια γραμμική ακολουθία μοναδιαίων κυψελίδων, όπως φαίνεται σχηματικά στο σχήμα 5. Το φως που διαδίδεται στον κυματοδηγό με συχνότητα εντός του χάσματος ζώνης του κρυστάλλου περιορίζεται στην ατέλεια και μπορεί να κατευθύνεται κατά μήκος της. Ένα παράδειγμα απεικονίζεται στο σχήμα 9, στο οποίο μια στήλη από ράβδους έχει αφαιρεθεί κατά μήκος της κατεύθυνσης γ από τον κρύσταλλο τετραγωνικού πλέγματος.



Σχήμα 9: Σχέδιο ηλεκτρικού πεδίου (Ez) που συνδέεται με μία γραμμική ατέλεια που σχηματίζεται αφαιρώντας μια στήλη από ράβδους από ένα άλλο τέλειο τετράγωνικό πλέγμα ράβδων στον αέρα. πεδίο, То προκύπτον που παρουσιάζεται εδώ ένα για κυματάνυσμα k_y = 0,3 (2π / α) κατά μήκος της ατέλειας, είναι ένας ρυθμός κυματοδηγού που διαδίδεται κατά μήκος της ατέλειας. Οι ράβδοι εμφανίζονται διακεκομμένες με γραμμές.

Ένα σύστημα με γραμμική ατέλεια εξακολουθεί να έχει μία κατεύθυνση μέσα στο επίπεδο στο οποίο διατηρείται διακριτή συμμετρία μετατόπισης. Σε αυτή την περίπτωση, είναι η κατεύθυνση γ. Έτσι, το αντίστοιχο κυματάνυσμα k_y είναι ακόμα μια διατηρημένη ποσότητα. Έχουμε επίσης διατηρήσει συνεχή συμμετρία μετατόπισης στο z. Επομένως, το k_z είναι συντηρημένο και μπορούμε να περιορισθούμε σε διάδοση στο επίπεδο (k_z = 0). Θεωρούμε μόνο την πόλωση TM. Το διάγραμμα ζωνών του ω με το k_y δίδεται στο σχήμα 10, όπου η εισαγωγή της ατέλειας έχει σαν αποτέλεσμα μια διακεκριμένη οδηγημένη ζώνη που βρίσκεται μέσα στο χάσμα ζώνης TE. Λόγω του χάσματος, ο ρυθμός που παριστάνεται από αυτή τη ζώνη ευρίσκεται εντός του κρυστάλλου και εντοπίζεται εντός της ατέλειας, όπως φαίνεται στο σχήμα 9. Ο εντοπισμός εξηγεί γιατί ο ρυθμός υπάρχει ως διακεκριμένη ζώνη αντί για ένα συνεχές φάσμα συχνοτήτων για ένα δεδομένο κυματάνυσμα. Εκτός χάσματος, στην κυανή περιοχή του σχήματος 10, οι ρυθμοί εκτείνονται μέσα στον κρύσταλλο και αντίστοιχα καλύπτουν ένα συνεχές φάσμα συχνοτήτων.

Πρέπει να τονίσουμε μια βασική διαφορά μεταξύ των γραμμικών και των σημειακών ατελειών που συζητήθηκαν στην προηγούμενη ενότητα. Για μία σημειακή ατέλεια, ένας ρυθμός μπορεί να εντοπιστεί όποτε η συχνότητά του βρίσκεται μέσα στο χάσμα της φωτονικής ζώνης. Για μία γραμμική ατέλεια, θεωρούμε τη συμπεριφορά του ρυθμού όχι μόνο ως συνάρτηση της συχνότητας, αλλά και ως συνάρτηση του κυματανύσματος k_y. Ενας καθοδηγούμενος ρυθμός απαιτεί την ύπαρξη ενός μόνο συνδυασμού (k_y, ω₀) που να μην είναι επιτρεπτός στον κρύσταλλο, δεν είναι αναγκαίο να απαγορεύεται μόνο το ω₀. Για να ελέγξουμε την ύπαρξη καθοδηγούμενου ρυθμού, επιλέγουμε ένα συγκεκριμένο (k_y, ω₀) και ψάχνουμε αν υπάρχει κάποιο ky που θα τοποθετήσει αυτόν τον ρυθμό μέσα σε μία ζώνη. Δηλαδή, με μια κατάλληλη επιλογή του k_x μπορούμε να κανονίσουμε κάποια ζώνη n έτσι ώστε ω₀ = ω_n (k_x, k_y); Εάν μπορούμε, τότε υπάρχει τουλάχιστον μία εκτεταμένη κατάσταση στον κρύσταλλο με αυτόν τον συνδυασμό (k_y, ω₀). Ενας καθοδηγούμενος ρυθμός με αυτές τις παραμέτρους, θα προχωρήσει μέσα στον κρύσταλλο. Αυτή η διαδικασία επιλογής μιας τιμής k_y (η οποία διατηρείται) και η εξέταση όλων των πιθανών k_x (η οποία δεν διατηρείται) ονομάζεται προβολή της δομής της ζώνης του άπειρου κρυστάλλου. Το αποτέλεσμα είναι η κυανή περιοχή του σχήματος 10, η οποία είναι η προβολή των καταστάσεων του κρυστάλλου στις συντεταγμένες (k_y, ω).



Σχήμα 10: Η προβαλλόμενη δομή ζώνης της γραμμικής ατέλειας (ένθετο) που σχηματίζεται με την αφαίρεση μιας σειράς (ή στήλης) από ράβδους από ένα τέλειο τετράγωνικό πλέγμα, σε συνάρτηση με την συνιστώσα του κυματανύσματος k κατά μήκος της ατέλειας. Οι εκτεταμένες καταστάσεις στον κρύσταλλο γίνονται περιοχές συνεχούς (μπλε), ενώ μέσα στο χάσμα ζώνης (κίτρινο) εισάγεται μια ζώνη ατέλειας (κόκκινη) που αντιστοιχεί σε μια εντοπισμένη κατάσταση όπως στο σχήμα 9.

Η διατήρηση του k_y είναι επίσης ο λόγος που δικαιολογείται να καλούμε αυτή τη δομή κυματοδηγό. Είναι πραγματικά ένα κανάλι στο οποίο μεταδίδεται το φως, σε αντίθεση με την ύπαρξη μιας περιοχής όπου εντοπίζεται το φως. Ένας ρυθμός με θετική ταχύτητα ομάδας dω / dk_y είναι ένας διαδιδόμενος ρυθμός προς τα εμπρός, στην περίπτωση αυτή ισχύει k_y> 0, αλλά αυτό δεν είναι πάντα έτσι. Με την αναστροφή του σημείου k_y, αποκτούμε έναν ρυθμό με dω / dk_y <0, έναν ρυθμό προς τα πίσω. Αυτοί οι δύο ρυθμοί δεν ζευγαρώνουν ο ένας με τον άλλο, επειδή έχουν διαφορετικές τιμές της διατηρημένης ποσότητας k_y. Κάθε ρυθμός θα διαδοθεί προς την ίδια κατεύθυνση για πάντα ή τουλάχιστον μέχρις ότου διατηρείται η συμμετρία μεταφοράς.

Ο κυματοδηγός που απεικονίζεται στο σχήμα 9 είναι μια επίδειξη μιας αξιοσημείωτης ιδιότητας των φωτονικών κρυστάλλων: η ικανότητα να κατευθύνει το φως κυρίως στον αέρα. Οι συμβατικοί διηλεκτρικοί κυματοδηγοί κατευθύνουν το φως μέσω του μηχανισμού του δείκτη κυματοδήγησης (συνολική εσωτερική ανάκλαση), αλλά αυτός ο μηχανισμός μπορεί να περιορίσει το φως μόνο σε μια περιοχή υψηλότερης ε. Αντίθετα, ο μηχανισμός καθοδήγησης στην περίπτωση αυτή είναι το χάσμα ζώνης του περιβάλλοντος κρυστάλλου και είναι ανεξάρτητος από τις ιδιότητες του υλικού πλήρωσης του πυρήνα. Αυτή η ικανότητα είναι σημαντική για πολλές εφαρμογές στις οποίες είναι επιθυμητό να μειωθούν οι αλληλεπιδράσεις, όπως η απορρόφηση ή η μη γραμμικότητα, μεταξύ του φωτός και των διηλεκτρικών υλικών.

Μπορούμε να φανταστούμε μια ποικιλία ρυθμών με τους οποίους μια γραμμική ατέλεια θα μπορούσε να εισαχθεί σε ένα κρύσταλλο και μια αντίστοιχη ποικιλία κυματοδηγημένων ρυθμών. Η μόνη απαίτηση είναι ότι διατηρούμε διακριτή συμμετρία μετατόπισης προς τη μία κατεύθυνση. Μια πιθανότητα θα ήταν να αφαιρέσουμε κάθε ράβδο ή κάθε νιοστή ράβδο κατά μήκος μιας μόνο σειράς. Μια άλλη πιθανότητα είναι να αφαιρέσουμε κάθε ράβδο κατά μήκος πολλαπλών σειρών ράβδων. Η προηγούμενη επιλογή μας να καταργήσουμε μόνο μια σειρά είχε ως αποτέλεσμα κυματοδηγό μονής κατεύθυνσης, ο οποίος έχει την ιδιότητα ότι υπάρχει το πολύ ένας καθοδηγούμενος ρυθμός σε μια δεδομένη συχνότητα. Η κατάργηση πολλαπλών σειρών έχει ως αποτέλεσμα έναν κυματοδηγό πολλαπλών ρυθμών. Αυτά είναι γενικά ανεπιθύμητα για εφαρμογές που περιλαμβάνουν μετάδοση πληροφοριών, διότι αν τα σήματα μπορούν να μεταδοθούν με περισσότερες από μία ταχύτητες, τότε θα συγχέονται (διασπορά ρυθμών). Για τον υπολογισμό του απαιτούμενου πλάτους ενός κυματοδηγού μονής κατεύθυνσης, μπορούμε να θεωρήσουμε τον κυματοδηγό ως κενό χώρο μεταξύ δύο απόλυτα ανακλαστικών τοίχων. Η κατάλληλη οριακή συνθήκη για έναν τέτοιο ρυθμό κυματοδήγησης είναι ότι το πεδίο εξαφανίζεται στους τοίχους. Για μέγιστο περιορισμό, θα πρέπει να λειτουργούμε κοντά στη συχνότητα midgap $\omega_m = 0.38 (2\pi c / a) = a / \lambda_m$. Για τη λειτουργία χαμηλότερης συχνότητας, το μισό μήκος κύματος πρέπει να καλύπτει το πλάτος του κυματοδηγού. Συμπεραίνουμε ότι το πλάτος θα πρέπει να είναι περίπου $\lambda_m / 2 = 1.3a$, το οποίο επιτυγχάνεται αφαιρώντας μόνο μία σειρά διηλεκτρικών ράβδων.

[1] John D. Joannopoulos, Steven G. Johnson, Joshua N. Winn, and Robert D. Meade Photonic Crystals: Molding the Flow of Light, Priceton Univ. Press (2008)

[2] C. Kittel 'Εισαγωγή στην Φυσική Στερεάς Κατάστασης' ελληνική μετάφραση Χ. Παπαγεωργόπουλος

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΔΙΑΤΑΞΗΣ ΦΩΤΟΝΙΚΩΝ ΚΡΥΣΤΑΛΛΩΝ

Στο προηγούμενο κεφάλαιο αναφέραμε τις αρχές πίσω από τη θεωρία φωτονικών κρυστάλλων και την μορφή των σχέσεων διάσποράς τους (μορφή ζωνων) σε κάθε περίπτωση. Σε αυτο το κεφάλαιο θα σχεδιάσουμε μια διάταξη φωτονικών κρυστάλλων η οποία θέλουμε να τηρεί ορισμένες προδιαγραφές. Πιο συγκεκριμένα επιθυμούμε το συχνοτικό χάσμα που εμφανίζεται στη σχέση διαποράς να μεγιστοποιείται και να έχει κέντρο τα 1550 nm ή 193.55 Thz καθώς εκεί είναι η επιθυμητή συχνότητα λειτουργίας της διάταξης. Επίσης πρέπει να διευκρινιστεί οτι η ανάλυσή μας θα γίνει μόνον για τους ΤΕ ρυθμούς (σχέση 2.6, κεφάλαιο 2) καθώς η διάταξη κυματοδηγού σχισμής που τελικά θέλουμε να συνδυάσουμε λειτουργεί με αυτούς τους ρυθμούς.

Η σχεδίαση της διάταξης θα γίνει με τη μέθοδο Finite Difference Time Domain (FDTD) ή αλλιώς τη μέθοδο πεπερασμένων διαφορών στο πεδίο του χρόνου. Λόγω των διαστάσεων της διάταξής μας θα επιλέξουμε σαν μέγιστο βήμα πλέγματος (mesh maximum step) περίπου 0.2 um.

Αρχικά θα ξεκινήσουμε την σχεδίαση σαν μια δισδιάστατη διάταξη καθώς αυτό θα επιταχύνει της προσομοιώσεις μας και μόλις καταληξουμε σε μία πιο συγκεκριμένη δομή θα προχωρήσουμε σε τρισδιάστατες προσομοιώσεις.

Κατά τη διαδικασία σχεδίασης θα προσπαθήσουμε να δώσουμε μία εικόνα για το πώς κάθε παράμετρος του συστήματος επιδρά στα τελικά αποτελέσματα ώστε ο αναγνώστης να έχει μια πιο ολοκληρωμένη εικόνα για το αντικείμενο. Σαν τελευταίο κομματι της παραγράφου και αφού έχουμε σχεδιάσει την διάταξη που αντιστοιχεί στην επιθυμητή σχέση διασποράς θα επιχειρήσουμε να τρέξουμε μια προσομοίωση διάδοσης δηλαδή έκχυσης ενός παλμού από την είσοδο και ανίχνευση της εξόδου.

Σε γενικές γραμμές η διάταξη που θα σχεδιάσουμε θα αποτελέιται από ένα πλακίδιο πυριτίου το οποίο έχει περιοοδικές κυκλικές οπές αέρα. Η ανάλυσή μας μπορεί να διευκολυνθεί πολύ αν λύσουμε το πρόβλημα για την θεμελιώδη κυψελίδα και μετά θωρήσουμε οριακές συνθήκες Bloch όπως ακριβώς αναφέραμε στο προηγούμενο κεφάλαιο (εξίσωση 3..).

4.1 Δισδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα

Η πρώτη περιοδικότητα που θα δοκιμάσουμε είναι αυτη του τετραγωνικού πλέγματος. Σε αυτή την περίπτωση κάθε περιοδικό στοιχείο, στην περιπτωσή μας οι οπές, ισαπέχουν από τα γειτονικά τους στοιχεία τα οποία σχηματίζουν τετράγωνο.Η απόσταση αυτή ονομάζεται πλεγματική σταθερά και συμβολίζεται με το ελληνικό γράμμα **α** και φαίνεται στο παρακάτω σχήμα 1.



Σχήμα. 1. Διάταξη τετραγωνικού πλέγματος με α συμβολίζουμε την πλεγματική σταθερά

Ένα άλλο μέγεθος που θα μας απασχολήσει είναι το μέγεθος των οπών. Αυτο θα καθορίζεται από την ακτίνα τους που συμβολίζουμε με το αγγλικό γράμμα r. Όπως έχουμε αναλύσει στο προηγούμενο κεφάλαιο το όλο προβλημα μίας –αρχικά άπειρης - περιοδικής διάταξης μπορεί να περιοριστεί στην επίλυση και απεικόνηση του αντίστοιχου προβλήματος για μια πολύ μικρότερη γεωμετρία με ειδικά χαρακτηριστικά. Από την βασική αυτή γεωμετρία εξάγουμε (κάνοντας μια διαδικασία ανάλυσης Fourier) μια άλλη γεωμετρία στον **ανάστροφο** χώρο αυτη τη φορά οποία ονομάζεται ζώνη **Brillouin** και την οποία αν την επαναλάβεις άπειρες φορές λαμβάνεις την περιοδική δομή σου. Η ένοια του αναστρόφου χώρο σημαίνει ότιενώ μπορείς να απεικονίσεις τη γεωμετρία της ζώνης στις κανονικές διαστάσεις κάθε φορά που τη διατρέχεις θα μεταβάλονται κάποια κυματανύσματα. Για παράδειγμα στο κέντρο της ζώνης **Brillouin** αντιστοιχεί πάντα το κυματάνυσμα k=0 ενώ στά άκρα της το κυματάνυσμα k=π/α όπου α η πλεγματική σταθερά. Η ζώνη **Brillouin** για το τετραγωνικό πλέγμα είναι τετργαωνική και απεικονίζεται ξανά παρακάτω. Ωστόσο λόγω της περιστροφικής συμμετρίας που αναλύσαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο δεν χρειάζεται να απεικονήσουμε όλη την ζώνη αλλά μόνο ενα υποσύνολο αυτής το οποίο φαίνεται παρακάτω.



Σχήμα 2. Αριστερά Η ζώνη Brillouin του τετράγωνου πλέγματος, με κέντρο το (Γ). Η μη μειώσιμη περαιτέρω ζώνη είναι η γαλάζια τριγωνική σφήνα. Τα ειδικά σημεία στο κέντρο, τη γωνία και εμπρός είναι συμβατικά γνωστά ως Γ, Μ, και Χ. Δεξιά το τετραγωνικό πλέγμα [1]

Το σχήμα 2 υποδηλώνει ότι η απεικόνιση της τελικής σχέσης διασποράς θα γίνει μόνον για τις ευθείες Γ-Μ-Χ-Γ και φαίνεται παραπάνω.



Λόγω της περιστροφικής συμμετρίας αρκεί να απεικονίσουμε το πεδίο κατα μήκος των ευθειών (βρισκόμαστε πάντα στον ανάστροφο χώρο) Γ-Μ-Χ-Γ. Έτσι κάθε διάγραμμά μας θα αποτελείται από τρία υποδιαγράμματα όπως φαίνεται στο σχήμα 3. Ωστόσο θα υπάρχει συνέχεια στις ζώνες οπότε αυτό δεν θα γίνεται αισθητό. Επίσης πρέπει να επισημανθεί ότι η συχνότητα απεικονίζεται σε Thz.

Σχήμα 3. Στόν κάθετο άξονα η συχνότητα και στον οριζόντιο είναι ευθείεςτου σχήματος 2.Θυμίζουμε ότι οι ευθείες είναι στον ανάστροφο χώρο και άρα ο οριζόντιος άξονας αποτελειται από κυματανύσματα.

Τα παραπάνω σχήμα υποδηλώνει ότι η απεικόνιση της τελικής σχέσης διασποράς θα γίνει μόνον για τις ευθείες Γ-Μ-Χ-Γ. Ενώ για μία αναλυτική λύση η επιλογή της ζώνης **Brillouin** είναι μέγιστης σημασίας για να επιλύσουμε το πρόβλημα, στο πρόγραμμα προσομοίωσης δεν διευκολύνει τις πράξεις, οπότε και επιλέγουμε μια ορθογωνική γεωμετρία που να επαναλαμβάνεται στο χώρ και η οποία εν γένει δεν μας οδηγεί στην βέλτιστη ζώνη **Brillouin**. Στην περίπτωση του τετραγωνικού πλέγματος η ζώνη Brillouin και η ορθογωνική ζώνη που επιλέγουμε στο πρόγραμμα συμπίπτουν και απεικονίζονται πιο κάτω



Σε αυτό το σημείο θυμίζουμε ότι θα ασχοληθούμε μόνο με τις σχέσεις διασποράς των *quasi TE* ρυθμών δηλαδή των ρυθμών οι οποίοι έχουν το περισσότερο ηλεκτρικό πεδίο τους στο επίπεδο της διάταξής μας.

Στη συνέχεια δείχνουμε τις σχέσεις διασποράς που προέκυψαν για πλεγματικές σταθερές **α** = **600, 400 και 300 nm** αντίστοιχα για σταθερή ακτίνα οπής **r** = **100 nm**. Η απεικόνιση γίνεται λόγω συμμετρίας για την παρακάτω γεωμετρία Γ-Μ-Χ-Γ με 50 σημεία σε κάθε ευθεία.

Οπότε έχουμε:



Σχήμα 5. Απεικονίζουμε τη σχέση διασποράς του τετραγωνικού πλέγματος με πλεγματική σταθερά α=600nm ακτίνα r=100nm. Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.

Για α=600 nm

• Για α=400 nm



Σχήμα 6 Απεικονίζουμε τη σχέση διασποράς του τετραγωνικού πλέγματος με πλεγματική σταθερά α=400nm ακτίνα r=100nm. Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.

• Για α=300 nm



Σχήμα 7 Απεικονίζουμε τη σχέση διασποράς του τετραγωνικού πλέγματος με πλεγματική σταθερά α=300nm ακτίνα r=100nm. Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.

Από τα γραφήματα των σχημάτων 5,6,7 .παρατηρούμε λοιπόν ότι το χάσμα αρχίζει να εμφανίζεται όταν το α πλησιάζει τα 300 nm (2.93-2.61 Thz) και έχει κέντρο περίπου στα 2.775 Thz δηλαδή πολύ μακριά από τα 1.9355 Thz (ή 1550 nm) που επιδιώκουμε. Το αποτέλεσμα φυσικά είναι αναμενόμενο καθώς όπως παρουσιάσαμε και στο προηγούμενο κεφάλαιο το τετραγωνικό πλεγμα οπών δεν εμφανίζει σημαντικό συχνοτικό χάσμα παρα μόνον σε οριακές περιστάσεις όπου ο λόγος **r/a** πλησιάζει την μονάδα.

Επίσης όταν προσομοιάζουμε την παραπάνω δομή τετραγωνικού πλέγματος στις 3 διαστάσεις -δίνοντας ύψος στη διάταξή μας- αναμένουμε το χάσμα να μικρύνει και να μετατοπισθεί προς υψηλότερες συχνότητες. Αυτή η σκέψη μας οδηγεί να απορρίψουμε τελικά το τετραγωνικό πλέγμα. Για τον λόγο αυτό προχωρούμε στην συνέχεια ακολουθώντας παρόμοια μεθοδολογία και δοκιμάζουμε μία δομή με τριγωνικό πλέγμα.

4.2 Δισδιάστατο τριγωνικό πλεγμα

Είδαμε οτι χρησιμοποιώντας το τετραγωνικό πλέγμα δεν μπορέσαμε να παράξουμε μια σχέση διασποράς των προδιαγραφών που επιδιώκουμε, δηλ. να εμαφανίζει συχνοτικό χάσμα γύρω από τα 1.9355 Thz (ή 1550 nm) οπότε δοκιμάζουμε στην συνέχεια το τριγωνικό ή εξαγωνικό, όπως είναι γνωστό, πλέγμα. Το εξαγωνικό πλέγμα ονομάζεται έτσι διότι τα γειτονικά στοιχεία κάθε περιοδικού στοιχείου σχηματίζουν μεταξύ τους ένα εξάγωνο. Η πλεγματική σταθερά **α** καθώς και η ζώνη **Brillouin** του εξαγωνικού πλέγματος απεικονίζονται γεωμετρικά παρακάτω



Σχήμα 8 Αριστερά Η ζώνη Brillouin του εξαγωνικο πλέγματος, με κέντρο το (Γ). Η μη αναγώγιμη ζώνη είναι η γαλάζια τριγωνική σφήνα. Τα ειδικά σημεία στο κέντρο, τη γωνία και εμπρός είναι συμβατικά γνωστά ως Γ, Μ, και Κ. Δεξιά το εξαγωνικό πλέγμα [1]

Όπως αναφέραμε και προηγουμένως θα χρησιμοποιήσουμε την ζώνη **Brillouin** και έχει να κάνει με την απεικόνιση της λύσης μας .



Η γεωμετρία αυτή καλύπτει όλο το χώρο αν επαναληφθεί και έχει πλάτος **α** και ύψος $\mathbf{a}\sqrt{3}$. Έδω πρέπει αν σχολιάσουμε ότι αυτή δεν αποτελεί τη βέλτιστη επαναλαμβανόμενη διάταξη που θα μπορούσαμε αλλά είναι αυτή που θα εισάγουμε στο πρόγραμμα .Όπως και πριν θα απεικονίσουμε τη σχέση διασποράς κατα μήκος της διαδρομής Γ-M-K-Γ.

4.3 Θεώρημα κλίμακας

Αρχικά θα δείξουμε ένα φαινόμενο που ισχύει γενικά στις διατάξεις φωτονικών κρυστάλων με βάση την ηλεκτρομαγνητική θεωρία. Αυτό ονομάζεται θεώρημα κλίμακας σύμφωνα με το οποίο αυξάνεται (κατα την ίδια αναλογία) η γεωμετρία και η τιμή των συχνοτήτων στη σχέση διασποράς της. Πιό συγκεκριμένα αν παρατηρήσουμε πάλι την εξίσωση του πεδίου που έχουμε παρουσιάσει προηγουμένως (σχέση (2.3)) βλέπουμε ότι

$$\vec{\nabla} \times \frac{1}{\varepsilon(\rho)} \vec{\nabla} \times \vec{\mathrm{H}(\rho)} = (\frac{\omega}{c})^2 \vec{\mathrm{H}(\rho)}$$

Άν όπου ρ'⇒ρ/s τότε

$$\frac{1}{s}\overrightarrow{\nabla} \times \frac{1}{\varepsilon\left(\frac{\rho'}{s}\right)} \frac{1}{s}\overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{\mathrm{H}\left(\frac{\rho'}{s}\right)} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \ \overrightarrow{\mathrm{H}\left(\frac{\rho'}{s}\right)} \dot{\eta}$$

ή

$$\vec{\nabla} \times \frac{1}{\varepsilon(\rho)} \vec{\nabla} \times \overline{\mathrm{H}(\rho)} = (\frac{\omega \cdot s}{c})^2 \, \overline{\mathrm{H}(\rho)}$$

Οπότε συμπεραίνουμε ότι αν αλλάξουμε την κλίμακα στην διάταξή μας δηλαδή άν στην συγκεκριμένη περίπτωση η πλεγματική σταθερά γίνει **α'=α·s** και η ακτίνα των οπών **r'=r·s,** τότε η νέα ιδιοσυχνότητα θα είναι **ω'=ω/s**. Για αυτό το λόγο πολύ συχνά η σχέση διασποράς των φωτονικών κρυστάλλων εμφανίζεται πολλαπλασιασμένη με την πλεγματική σταθερά, όπως θα κάνουμε και εμείς στη συνέχεια.

Παραθέτουμε στην συνέχεια κάποια παραδείγματα με **α/r= σταθερό=2.5** για διάφορες τιμές των **α, r**.



α=250nm r=10nm s=1 gap [298-494] Thz

Σχήμα 10 (i) Η σχέση διασποράς του εξαγωνικού πλέγματος, πλεγματική σταθερά α=250nm ακτίνα r=10nm.

Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.Το χάσμα εμφανίζεται από τα 298 μέχρι τα 494 Thz

Στην επικεφαλίδα κάθε σχήματος παρουσιάζουμε την σταθερά κλίμαας s η οποία λειτουργεί με αντίστροφο τρόπο οσον αφορά τις διαστάσεις και τη σχέση διασποράς όπως έχουμε αναφέρει.



α=500nm r=20nm s=2 gap [149-247] Thz

Σχήμα 10 (ii) Η σχέση διασποράς του εξαγωνικού πλέγματος, πλεγματική σταθερά α=500nm ακτίνα r=20nm.

Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.Το χάσμα εμφανίζεται από τα 149 μέχρι τα 247 Thz



α=750nm r=30nm s=3 gap [99.6-164.6] Thz

Σχήμα 10 (iii) Η σχέση διασποράς του εξαγωνικού πλέγματος, πλεγματική σταθερά α=250nm ακτίνα r=10nm. Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.Το χάσμα εμφανίζεται από τα 99.6 μέχρι τα 164.6 Thz



α=1000nm r=400nm s=4 gap [0.745-1.235] Thz

Σχήμα 10 (iv) Η σχέση διασποράς του εξαγωνικού πλέγματος, πλεγματική σταθερά α=250nm ακτίνα r=10nm. Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.Το χάσμα εμφανίζεται από τα 74.5 μέχρι τα 123.5 Thz
Αφού αναδείξαμε αυτήν την ιδιότητα πρέπει να σημειώσουμε ότι μπορούμε να κανικοποιήσουμε όλες τις παραπάνω σχέσεις διασποράς τις πολλαπλασιάσουμε με μία γεωμετρική παράμετρο,όπως η πλεγματική σταθερά. Με αυτόν τον τρόπο θα απλοποιηθεί η σταθερά s καιόλες οι παραπάνω σχέσης θα αναχθούν σε μία.

Η κανονικοποιημένη γραφική παράσταση όλων των παραπάνω διατάξεων είναι η παρακάτω όπου έχει γίνει η μετατροπή f \rightarrow f*a/c



4.4 Κατασκευή εξαγωνικού φωτονικού κρυστάλλου

Τώρα λοιπόν είμαστε έτοιμοι να προχωρήσουμε στη κατασκευή της επιθυμητής σχέσης διασποράς. Αρχικά από τα προηγούμενα παραδείγματα αυτο που πλησιάζει πιο πολύ στο επιθυμητο αποτέλεσμα είναι το παράδειγμα με **α = 0.5 um** οπότε θα ξεκινήσουμε την έρευνά μας από αυτή την τιμή πλεγματικής σταθεράς. Από το προηγούμενο παράδειγμά μας αλλά και για τους λόγους που αναλύσαμε στο κεφάλαιο 2 αναμένουμε το χάσμα να μεγαλώνει και να ανεβαίνει στη συχνοτική κλίμακα. Θα μπορούσαμε να παρουσιάσουμε ένα χαρακτηριστικό δέιγμα της διαδικασίας που ακολουθήσαμε.

Θα ξεκινήσουμε λοιπόν από μια ακτίνα οπών **r = 100 nm** και θα την αυξάνουμε με βήμα **10 nm.** Ουμίζουμε ότι αυτές οι προσομοιώσεις αποτελούν δισδιάστατες προσομοιώσεις δηλαδή θεωρούμε τη διάταξή μας με άπειρο ύψος. Αυτό που θέλουμε να προσδιορίσουμε από τις προσομοιώσεις έιναι μία ικανοποιητκή τιμή χάσματος και όχι τοσο η θέση του καθώς αυτή όπως θα δούμε και στη συνέχεια θα αλλάξει σημαντικά στις 3 διαστάσεις [1]. Όπως και πριν σαν επικεφαλίδα κάθε διαγράμματος σχέσης διασποράς θα δίνουμε την ακτίνα και τα όρια του χάσματος που προέκυψε.



r=100nm gap [117-126] Thz

Σχήμα 11 (i) Η σχέση διασποράς του εξαγωνικού πλέγματος δύο διαστάσεων, πλεγματική σταθερά α=500nm ακτίνα r=100nm. Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.Το χάσμα εμφανίζεται από τα 117 μέχρι τα 126 Thz

Παρατηρούμε ότι ήδη έχει κάνει την εμφάνισή του ένα μικρό χάσμα της τάξης των 9 Thz γύρω από τη συχνότητα των 121 Thz. *Συνεχίζουμε αυξάνοντας την ακτίνα κατά 10 nm.*



r=110nm gap [118-133] Thz

Σχήμα 11 (ii) Η σχέση διασποράς του εξαγωνικού πλέγματος δύο διαστάσεων, πλεγματική σταθερά α=500nm ακτίνα r=100nm. Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.Το χάσμα εμφανίζεται από τα 118 μέχρι τα 133 Thz Το χάσμα αυτή τη φορά έχει μεγαλύτερο εύρος το οποίο είναι της τάξης των 15 Thz και βρίσκεται γύρω από την συχνότητα των 1.255 Thz. *Συνεχίζουμε, αυξάνοντας την ακτίνα των* οπών κατά 10 nm.



r=120nm gap [119-138] Thz

Σχήμα 11 (iii) Η σχέση διασποράς του εξαγωνικού πλέγματος δύο διαστάσεων, πλεγματική σταθερά α=500nm ακτίνα r=120nm.Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.Το χάσμα εμφανίζεται από τα 119 μέχρι τα 138 Thz

Πια το χάσμα έχει εύρος 19 Thz και βρίσκεται γύρω από την συχνότητα 128.5 Thz.



r=130nm gap [120 -145.5] Thz

Σχήμα 11 (iv) Η σχέση διασποράς του εξαγωνικού πλέγματος δύο διαστάσεων, πλεγματική σταθερά α=500nm ακτίνα r=130nm. Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση. Το χάσμα εμφανίζεται από τα 120 μέχρι τα 145.5 Thz Το διάστημα των μη επιτρεπτών συχνοτήτων είναι πια της τάξης των 25.5Thz γύρω από τα 137.5 Thz. Σε αυτό το σημείο θα θέλαμε να παρατηρήσουμε ότι μέχρι στιγμής η ζώνη κάτω και αυτή πάνω του χάσματος ανέβαιναν και οι δυο 0.01 και 0.05 -0.07 Thz αντίστοιχα σε κάθε βήμα δίνοντας μια σχεδόν γραμμική σχέση αύξησης του φάσματος. Στα επόμενα βήματα αυτό πρόκειται να αλλάξει.



r=140nm gap [122.6-156.5] Thz

Σχήμα 11 (ν) Η σχέση διασποράς του εξαγωνικού πλέγματος δύο διαστάσεων, πλεγματική σταθερά α=500nm ακτίνα r=140nm. Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση. Το χάσμα εμφανίζεται από τα 122.6 μέχρι τα 156.5 Thz

Σε αυτό το βήμα η μεταβολή του χάσματος ήταν αρκετά μεγαλύτερη καθώς είναι πια της τάξης των 0.34 Thz γύρω από τη συχνότητα των 1.496 Hhz. Αν και αυτό θα μπορούσε να μας ήταν αρκετό για δισδιάστατες προσομοιώσεις θα κάνουμε ένα τελευταίο βήμα αυξάνοντας την ακτίνα των οπών στα 150 nm.



r=150nm gap [124-166] Thz

Σχήμα 11 (vi) Η σχέση διασποράς του εξαγωνικού πλέγματος δύο διαστάσεων, πλεγματική σταθερά α=500nm ακτίνα r=150nm.Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.Το χάσμα εμφανίζεται από τα 124 μέχρι τα 166 Thz Το χάσμα πλέον είναι της τάξης των 42 Thz και βρίσκεται γυρω από τα 145 Thz. Βλέπουμε την σταδιακή άυξηση του χάσματος καθώς το μέγεθος των οπών μεγαλώνει. Επίσης το ίδιο παρατηρούμε ότι συμβαίνει και με τη μέση συχνότητα του χάσματος

Οι δισδιάστατες δομές χρησιμοποιήθηκαν πιο πολύ για μια εξοικείωση με το εξαγωνικό πλέγμα και τις αρχές που το διέπουν. Στη συνέχεια θα προχωρήσουμε σε προσομοιώσεις διατάξεων πεπερασμένου ύψους όπου οι ζώνες δεν θα έχουν ούτε την καθαρότητα ούτε την ισχύ που είχαμε μέχρι στιγμής, ωστόσο θα είναι πολύ πιο ρεαλιστικές και θα μπορέσουμε να βγάλουμε πιο ασφαλή συμπεράσματα. Ωστόσο οι ιδιότητες που αποδείξαμε και ο τρόπος μεταβολής των ζωνών θα συνεχίσουν να ισχύουν.

4.5 Τρισδιάστατο εξαγωνικό πλεγμα

Σε αυτό το σημείο θα διακόψουμε τις δισδιάστατες προσομοιώσεις και θα ξεκινήσουμε τις τρισδιάστατες με το ίδιο περιοδικό πλέγμα. Η διαφορά αυτή τη φορά είναι ότι η διάταξή μας έχει συγκεκριμένο ύψος το οποίο θα είναι **h** = **0.22 um**.Είναι γνωστό ότι τα χάσμα μεγιστοποιήται για **h** = **0.4-0.6 α** όπου α η πλεγματική σταθερά.Επιλέξαμε όμως το ύψος αυτό είναι ρεαλιστικό τόσο από τεχνολογικά/κατεσκευαστικά αλλά και για σχεδιαστικούς λόγους.

Αρχικά λοιπόν θα επαναλάβουμε την τελευταία μας προσομοίωση με πλεγματική σταθερά α = 500 nm και ακτίνα r = 150 nm. Πριν οποιαδήποτε προσομοίωση θα ήθελα να αναφέρω μεχρι ένα σημείο τις βασικές διαφορές που αναμένουμε. Αρχικά είναι προφανές ότι οι ζώνες μας θα είναι πιο ασθενεις καθώς ενα μέρος του πεδίου θα χάνεται από τη διάταξη και θα 'αποδρά' στον περιβάλλοντα αέρα. Αυτό που όμως θα ήθελα να επισημάνω είναι η συμπεριφορά του χάσματος. Τώρα που η διάταξή μας έχει μια διάσταση επιπλέον αυτό που θα συμβεί είναι ότι ένα μέρος του κύματος θα μπορεί να είναι στην νέα διάσταση z'z αυτό σημαίνει ότι για τα ίδιο **k**_x **k**_y η συχνότητα του κύματος θα είναι μεγαλύτερη, καθότι,

 $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2 = \omega^2 \mu \epsilon$. Άρα αναμένουμε το χάσμα μας να βρίσκεται γύρω από μεγαλύτερες συχνότητες. Επαναλαμβάνουμε την προσομοίωση χρησιμοποιώντας τις εξής παραμέτρους:



r=150nm gap [163-211] Thz-3D h=0.22um

Σχήμα 12 Η σχέση διασποράς του εξαγωνικού πλέγματος οπών σε πλακίδιο πυριτίου ύψους h-220 nm , πλεγματική σταθερά α=500nm ακτίνα r=150nm.Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.Το χάσμα εμφανίζεται από τα 124 μέχρι τα 166 Thz. Το χάσμα είναι περίπου 40 *Thz* ανυψωμένο για τους λόγους που εξηγήσαμε προηγουμένως. Πιο συγκεκριμένα έχει εύρος 48 Thz και βρίσκεται γύρω από την συχνότητα των 1.87 Thz. Η παραπάνω σχέση διασποράς είναι σε γενικές γραμμές μέσα στις προδιαγραφές που επιθυμούμε. Για τις επόμενες προσομοιώσεις θα αναπαραστούμε μόνον το διάστημα M-K (το μεσαίο κομμάτι) καθώς αναμένουμε ότι μόνο αυτή η συμμετρία θα διατηρείται στην τελική μας διάταξη. Αυτή η τεχνική απεικόνισης ονομάζεται *projected bandstructure*.

4.5.1 Projected bandstructure του εξαγωνικού πλέγματος

Σε αυτό το σημείο θα αλλάξουμε για ακόμη μια φορά τεχνική απεικόνισης-και όχι δεν θα είναι η τελευταία- για λόγους που θα γίνουν προφανείς στη συνέχεια θα θέλαμε να υπολογίζουμε τις ζώνες του κρυστάλλου σαν αυτός να ήταν περιοδικός μόνος σε μία διάσταση. Προσοχή δεν κάνουμε μονοδιάστατες προσομοιώσεις αλλά απλώς απεικονίζουμε το πεδίο μόνο κατα μήκος της ευθείας M-K πάντα στον ανάστροφο χώρο (δηλαδή για τα κυματανύσματα που ανήκουν σε αυτή την ευθεία)



Σχήμα 13 Αριστερά Η ζώνη Brillouin του εξαγωνικού πλέγματος, με κέντρο το (Γ). Η μη μειώσιμη περαιτέρω ζώνη είναι η γαλάζια τριγωνική σφήνα

Η Projected bandstructure θα έχει δηλαδή τη μορφή



Σχήμα 14 (i) Στόν κάθετο άξονα η συχνότητα και στον οριζόντιο είναι η ευθεία του Μ-Κ σχήματος 2.Θυμίζουμε ότι οι ευθείες είναι στον ανάστροφο χώρο και άρα ο οριζόντιος άξονας αποτελειται από κυματανύσματα.

Και σε αυτή την περίπτωση θα πάρουμε 50 σημεία πάνω στην ευθεία. Άρα η Projected bandstructure του προηγούμενου παραδείγματος θα είναι:



Όπου φυσικά έχει το ίδιο χάσμα.

Σχήμα 14 (ii) Η σχέση διασποράς του εξαγωνικού πλέγματος οπών σε πλακίδιο πυριτίου ύψους h-220 nm μόνο για τα κυματανύσματα επι της ευθείας M-K, πλεγματική σταθερά α=500nm ακτίνα r=150nm.Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.Το χάσμα εμφανίζεται από τα 124 μέχρι τα 166 Thz.

Προηγουμένως αναφέραμε οτι η διάταξη που είχε σαν κέντρο χάσματος τα 187 Thz είναι σε γενικές γραμμές μέσα στις προσιαγραφές μας ωστόσο θα επιχειρήσουμε να πλησιάσουμε ακόμη πιο πολυ τον στόχο μας -που θυμιζουμε είναι τα 193.6 Thz-. Για να το πετύχουμε αυτό θέλουμε βάση των προηγούμενων να μειώσουμε το λόγο α/r χωρίς να αυξήσουμε την ακτίνα. Δοκιμάζουμε λοιπόν μια διάταξη με α = 0.49um και r = 0.15um



α=490nm r=150nm gap [168-220] Thz

Σχήμα 14(iii) Η σχέση διασποράς του εξαγωνικού πλέγματος οπών σε πλακίδιο πυριτίου ύψους h-220 nm μόνο για τα κυματανύσματα επι της ευθείας M-K, πλεγματική σταθερά α=500nm ακτίνα r=150nm.Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.Το χάσμα εμφανίζεται από τα 124 μέχρι τα 166 Thz. Με αυτά τα μεγέθη λοιπόν έχουμε ένα χάσμα 60 Thz γύρω από τη συχνότητα 194 Thz. Το παραπάνω είναι και το πιο βασικό σχήμα που έχουμε εξάγει μέχρι στιγμής καθώς αναπαριστά με σαφήνεια το χάσμα της διάταξης με την οποία θα συνεχίσουμε.Όπως είναι γνωστό[2][3] το χάσμα μπορεί να μεγαλώσει κι άλλο ,αλλά ο σκοπός μας δεν είναι η μεγιστοποίηση του αλλά το συχνοτικό του κέντρο να βίσκεται γύρω σπο τα 194 Thz.

4.6 Διάταξη πεπερασμένου πλάτους

Μέχρι στιγμής έχουμε προσομοιώσει διατάξεις περιοδικές ως προς τις επίπεδες μεταβλητές τους (x,y) επαναλαμβάνοντας μια θεμελιώδη γεωμετρία άπειρες φορές. Τώρα θα σταματήσουμε να θεωρούμε οτι η διάταξή έχει περιοδικό πλάτος. Πλέον η διάταξη θα έχει την παρακάτω μορφή:



Όπως εξηγήσαμε και πριν από εδώ και πέρα θα απεικονίζουμε μόνο την projected bandstructure στην διαμήκη κατεύθυνση καθώς δεν υπάρχει πλεόν περιοδικότητα σε κάποια άλλη. Για 27 γραμμές οπών έχουμε λοιπόν την παρακάτω σχέση διασποράς.



α=490nm r=150nm gap [164.8-219.7] Thz

Σχήμα 16 Η σχέση διασποράς του εξαγωνικού πλέγματος οπών σε πλακίδιο πυριτίου ύψους h-220 nm και πλάτους 22.915 μm μόνο για τα κυματανύσματα επι της ευθείας M-K, πλεγματική σταθερά α=500nm ακτίνα r=150nm.H χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.Το χάσμα εμφανίζεται από τα 124 μέχρι τα 166 Thz.

Βλέπουμε μία ελαφρά μεταβολή στο χάσμα που τώρα είναι της τάξης των 54 Thz και πάλι γύρω από τα 194 Thz αλλά κυριότερα παρατηρούμε πως πια υπάρχουν πολύ περισσότερες καταστάσεις στο εσωτερικό των ζωνών επιτρεπτών συχνοτήτων. Θα θέλαμε να σταθούμε λίγο σε αυτό προσπαθώντας να δώσουμε μία ποιοτική εξήγηση. Αρχικά θυμίζουμε ότι προηγουμένως η απεικόνιση του πεδίου γινόνταν μεν για την περιοδικότητα επι της γραμμής M-K όπως αναλύσαμε αλλά κρατούσε για την άλλη διάσταση έναν σταθερό κυματάριθμο έτσι ώστε να μήν επιρεάζεται η απεικόνηση , κάτι λογικό αφού η μεταβολή κάθε κυματάριθμου γινόνταν σε διαφορετικό ΤΕ. Σε αυτή την περίπτωση όμως υπάρχει μόνο μία περιοδικότητα και σε αυτή θα απεικονιστεί ολόκληρη η σχέση διασποράς. Ενώ λοιπόν το προβλημα είναι το ίδιο κατά μήκος, κατα πλάτος τώρα έχουμε μία μεγάλη διαφορα η διάταξη είναι πεπερασμένη.



Από την ηλεκτρομαγνητική θεωρία γνωρίζουμε για τους τρόπους ταλάντωσης σε μία κοιλότητα ότι

 $E = \operatorname{Asin}(k_y y) \quad \text{και άρα} \quad k_y = \frac{n\pi}{L}$ Άρα $k_x^2 + k_y^2 = k \|^2 = \omega^2 \mu \varepsilon \Rightarrow$ $(\frac{n\pi}{L})^2 + k_y^2 = \omega^2 \mu \varepsilon$

Σχήμα 17 Στάσιμα κύματα πακτωμένης χορδής

Παρατηρούμε λοιπόν ότι πλέον η σχέση διασποράς αναμένεται να έχει διακριτές καταστάσεις , όπως ακριβώς βλέπουμε και στο παραπάνω διάγραμμα.Τέλος παρατηρούμε για τους ίδιους λόγους όπως και πριν ότι η ένταση του πεδίου είναι αισθητά μικρότερη αφού τώρα υπάρχουν πιο πολλοι τρόποι το πεδίο να διαφύγει στο περιβάλλον. Έτσι καταλήγουμε οριστικά στις διαστάσεις που θα επιλέξουμε για τον κρύσταλλο (α=490 nm r=150nm α/r=0.307), διαστάσεις που φαίνονται λογικές αν κάποιος μελετήσει και άλλες προσεγγίσεις στο θέμα [4][5].

4.8 Διάταξη μετάδοσης

Σε αυτό το σημεία θα προχωρήσουμε στην τελευταία και πιο ρεαλιστική προσομοίωση. Τώρα λοιπόν θα εφαρμόσουμε συνθήκες πεπερασμένου πλάτους αλλά και μήκους εξαφανίζοντας τις συνθήκες Bloch. Ο τρόπος που θα υπολογίσουμε τώρα τα χαρακτηριστικά του φωτονικού κρυστάλλου είναι ο εξής. Στίς δύο άκρες του πλακιδίου θα εισάγουμε δύο ορθογώνιους κυματοδηγούς πυριτίου. Στον έναν θα τοποθετήσουμε μία πηγή που θα εκπέμπει έναν ΤΕ παλμό και στον άλλο θα τοποθετήσουμε έναν δέκτη.



Σχήμα 18 Συνολική διάταξη οπών αέρα εξαγωνικού πλεγματος σε πυρίτιο ύψους 220nm πλάτους 22.195 και μήκους um 25.28

um

Η διάταξη θα είναι ως εξης:

Θα παραστήσουμε το πεδίο στη διάταξη και καθώς αυτό διαδίδεται σε συχνότητες κάτω , μέσα και πάνω από το συχνοτικό μας χάσμα .

Αρχικά θα επικεντρωθούμε σε μια συχνότητα η οποία να είναι κάτω από το συχνοτικό χάσμα το οποίο θυμίζουμε ξεκινά στο **164.8 Thz**. Επιλέγουμε λοιπόν τη συχνότητα **150 Thz**. Όπως έχουμε αναλύσει και προηγουμένως αναμένουμε το πεδίο να έχει μία κατάσταση σε αυτή τη συχνότητα. Έχουμε λοιπόν:



Συχνότητα 150 Thz

Σχήμα 19 Μορφή του ηλεκτρικού πεδίου Ε για τον θεμελιώδη ΤΕ ρυθμό για την συχνότητα 150 Thz

Όπως αναμέναμε το πεδίο απλώνεται μέσα στον κρύσταλλο δημιουργώντας περιοδικά σχέδια καθώς επίσης αποσβαίνεται στα άκρα. Αυτή η περιοδικότητα του πεδίου αναμένουμε για λόγους που εξηγήσαμε να είναι ανάλογη της συχνότητας.

Τώρα θα προχωρήσουμε σε μία συχνότητα εντός του χάσματος που είναι στα **[164.8-219.7] Thz**. Επιλέγουμε λοιπόν να δούμε το συστημα για μια συχνότητα στα **190 Thz**. Αυτό που αναμένει κανείς είναι προφανές. Δεν πρέπει να δουμε **καθόλου** πεδίο μέσα στη περιοδική μας διαταξη. Η σχέση διασποράς μας κάνει σαφές ότι δεν υπαρχει καμμία κατάσταση που να υποστηρίζει το πεδίο μας μεσα στη διάταξη.

Τα αποτελεσματα φαίνονται παρακάτω:



Συχνότητα 190 Thz

Σχήμα 20 Μορφή του ηλεκτρικού πεδίου Ε γαι ατον θεμελιώδη ΤΕ ρυθμό για την συχνότητα 190 Thz

Βλέπουμε λοιπόν ότι η διάταξη μας δεν φαίνεται καθόλου, για να είμαστε ακριβέστεροι σχεδόν καθόλου. Ο λόγος που το πεδίο φαίνεται να μπορεί να εισχωρήσει στη περιοδική δομή ενώ δεν υπάρχει επιτρεπτή κατάσταση είναι ο ίδιος με το φαινόμενο της ολικής ανάκλασης που έχουμε αναλύσει. Ενώ δεν υπάρχει πραγματικό κυματάνυσμα k που να επιτρέπει τη διάδοση του πεδίου υπάρχει φανταστικό κυματάνυσμα kj το οποίο οδηγεί σε ένα αποσβένον κύμα (evanescent wave) δηλαδη πεδίο της μορφής $E_t(x,y)=E_t(x,y)e^{-ktx\cdot x}$ το οποίο μπορεί να διεισδύσει για λίγο στη διάταξη.

Τέλος θα παρουσιάσουμε και μία συχνότητα πανω από χάσμα το οποίο τελειώνει στα **229 Thz.** Φυσικά αναμένουμε όπως και προηγουμένως να δούμε το πεδίο να διαδίδεται στη διάταξη.



Συχνότητα 230 Thz

Σχήμα 21 Μορφή του ηλεκτρικού πεδίου Ε γαι ατον θεμελιώδη ΤΕ ρυθμό για την συχνότητα 229 Thz

Το αποτέλεσμα είναι το αναμενόμενο καθώς το πεδίο διαδίδεται εντός του κρυστάλλου με ευκολία. Αυτό που θέλουμε να σχολιάσουμε εδώ είναι ότι τα περιοδικά σχήματα που παρατηρουμε είναι πολύ πιο λεπτομερή (δηλαδη μικρά) από αυτά του πρώτου παραδείγματος. Αυτο συμβαίνει διότι βρισκόμαστε σε υψηλότερες συχνότητες και κατ'επέκταση σε μικρότερα μήκη κύματος το ίχνος των οποίων βλέπουμε εδώ.

Σε αυτό το σημείο θεωρούμε σωστό να παρουσιάσουμε την μορφή που θα έχει η τελική διάταξη φωτονικών κρυστάλλων ύψους *h=220 nm*. Στη τελευταία παράγραφο επικεντρωθήκαμε στην κατασκευή του περιοδικού πλέγματος των οπών αέρα. Η απόσταση που χωρίζει το πλακίδιο πυριτίου (Si) από τη βάση είναι αρκετά μεγάλη ώστε στην προσομοίωση να μπορούν να χρησιμοποιηθούν συνθήκες PML (κεφάλαιο 2 παράγραφος 2.5). Στο επόμενο κεφάλαιο θα μελετήσουμε την διαδικασία εισαγωγής γραμμικών ατελειών στο πλακίδιο.



Σχήμα 22 Τελική διάταξη φωτονικών κρυστάλλων πυριτίου σε περιβάλλον αέρα (suspended air)[6]

Συμπερασματικά παρατηρούμε ότι οι συχνότητες εντός χάσματος δεν μπορούν να διαδοθούν εντός του φωτονικού κρυστάλλου. Αντίθετα για συχνότητες εκτός χάσματος το πεδίο έχει καταστάσεις που συγκεντρώνουν μεγάλη ισχύ.

[1] John D. Joannopoulos, Steven G. Johnson, Joshua N. Winn, and Robert D. Meade Photonic Crystals: Molding the Flow of Light, Priceton Univ. Press (2008), κεφαλαιο 6

[2] C. Jamois, R.B. Wehrspohn , L.C. Andreani, C. Hermannd, O. Hess, U. Gösele 'Silicon-based twodimensional photonic crystal waveguides Photonics and Nanostructures – Fundamentals and Applications 1 (2003) 1–13

[3] M. Loncar, T. Doll, J. Vuckovic, A. Scherer 'Design and Fabrication of Silicon Photonic Crystal Optical Waveguides' Journal of Lightwave Technology, 18, (2000)

[4 M. G. Scullion T. F. Krauss A. Di Falco High Effi ciency Interface for Coupling into Slotted Photonic Crystal Waveguides IEEE Photonics Journal 3, (2011)

[5] A. Di Falco, L. O'Faolain, and T. F. Krauss Dispersion control and slow light in slotted photonic crystal waveguides' Appl. Phys. Lett. 92, 083501 (2008)

[6] Zhi-Yuan Li, Chen Wang and Lin Gan 'Silicon-photonic-crystals-towards-optical-integration' in Advances in Photonic Crystals, book edited by Vittorio M.N. Pissaro, ISBN 978-953-51-0954-9

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5 ΓΡΑΜΜΙΚΕΣ ΑΤΕΛΕΙΕΣ ΚΑΙ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΚΥΜΑΤΟΔΗΓΟΥ ΣΧΙΣΜΗΣ

Σε αυτό το κεφάλαιο θα προχωρήσουμε στο καθοριστικό βήμα για τη δημιουργία της διάταξής που επιτυγχάνει το φαινόμενο του αργού φωτός, που είναι εισαγωγή μιας μορφής κυματοδηγού στη διάταξή μας. Αυτό το πετυχαίνουμε βασιζόμενοι στη θεωρία των ατελειών (defects) για περιοδικές δομές . Βάση αυτής της θεωρίας λοιπόν (κεφάλαιο 3)- μία παρέμβαση στη περιοδική δομή "σπάει" την περιοδικότητα της διάταξης και έχει ως αποτέλεσμα την εισαγωγή νέων καταστάσεων μέσα στο συχνοτικό χάσμα της σχέσης διασποράς. Στην περιπτωσή μας αυτό που θα επιδιώξουμε είναι η δημιουργία μια γραμμικής ατέλειας (line defect) στην οποία και θα κυματοδηγείται το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Ο τελικός στόχος μας είναι να αντικαταστήσουμε μια σειρά οπών του εξαγωνικού πλέγματος με μία σχισμή αέρα η οποία θα εμφανίζει μια νέα κατασταση μέσα στο χάσμα μας .Αυτή η νέα κατάσταση θα επιτρέπει την κυματοδηγηση του πεδίου για μήκος κύματος 1550 nm και θα επιτυγχάνει το φαινόμενο του αργού φωτός για τη συχνότητα αυτή.

Ουμίζουμε λοιπόν τη projected bandstructure για πλεγματική σταθερά α = 0.49 μm και ακτίνα οπής r = 0.15 μm και για αριθμό πλατους οπών 27.



Σχήμα 1 Η σχέση διασποράς του εξαγωνικού πλέγματος οπών σε πλακίδιο πυριτίου ύψους h-220 nm και πλάτους 22.915 μm μόνο για τα κυματανύσματα επι της ευθείας M-K, πλεγματική σταθερά α=500nm ακτίνα r=150nm.Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.Το χάσμα εμφανίζεται από τα 124 μέχρι τα 166 Thz.

5.1 Γραμμική ατέλεια πυριτίου (Silicon line defect)

Σαν πλεγματική ατέλεια μπορεί να θεωρηθεί **οποιαδήποτε** μεταβολή σε ένα ή παραπάνω πλεγματικά στοιχεία του κρυστάλλου[1]. Πλεγματική ατέλεια δηλαδή δημιουργείται αν μεταβληθεί το μέγεθος μιας οπής ή ο δείκτης διάθλασής της η οποιαδήποτε άλλη ενέργεια σπάει την περιοδική συμμετρία της διάταξης. Θα αναφέρουμε στη συνέχεια μία ενδιαφέρουσα συνέπεια της εισαγωγής μίας ατέλειας καθώς και τις ποιοτικές συνέπειές της.

Θα μείνουμε στο παράδειγμα μίας περιοδικής διάταξης οπών σε ένα δισκίδιο πυριτίου. Σε αυτή τη διάταξη λοιπόν θα παρέμβουμε 'γεμίζοντας' μια οπή με πυρίτιο ή παραλείποντας να την δημιουργήσουμε. Είναι η περίπτωση της σημειακής ατέλειας. Τότε παρατηρούμε ότι συμβαίνει το εξής φαινόμενο. **Μόνο για την γειτονική περιοχή εκείνου του σημείου** μπορούμε να ισχυρισθούμε ότι ο κρύσταλλος έχει μια διαφορετική περιοδικότητα με διαφορετική πλεγματική σταθερά **α'.** Άρα η διάταξη μπορεί για εκείνη την περιοχή χώρου να υποστηρίξει μια διαφορετική κατάσταση η οποία ωστόσο με μεγάλη πιθανότητα θα είναι απαγορευμένη στον υπόλοιπο κρύσταλλο. Αυτό θα έχει σαν αποτέλεσμα αυτή η κατάσταση να μείνει όπως λέμε 'εντοπισμένη' καθώς δεν μπορεί να διαφύγει στον υπόλοιπο κρύσταλλο αφου δεν την υποστηρίζει.

Το αποτέλεσμα θα είναι όπως αναφέραμε και πίο αναλυτικά στο κεφάλαιο 3 η εμφάνιση μίας νέας κατάστασης μέσα στο προηγουμένως απαγορευμένο συχνοτικό χάσμα. Με αυτή τη λογική αναλύουμε και στο κεφάλαιο 3 μια άλλη μορφή ατελειών που προκύπτουν αν κάποιος μεταβάλει τα τα χαρακτηριστικά μίας ολόκληρης σειράς κάτι που ονομάζεται γραμμική ατέλεια. Οι γραμμικές ατέλειες είναι το θέμα αυτού του κεφαλαίου με τελικό στόχο την κυματοδήγηση του πεδίου μέσα σε αυτές.

Αρχικά θα επιχειρήσουμε να δημιουργήσουμε μια γραμμική ατέλεια παραλείποντας να δημιουργήσουμε μια σειρά οπών δημιουργώντας έτσι έναν εν δυνάμει κυματοδηγό πυριτίου. Οπότε η διάταξη θα έχει την παρακάτω μορφή.



Σχήμα 2 Συνολική διάταξη οπών αέρα εξαγωνικού πλεγματος σε πυρίτιο ύψους 220nm πλάτους 22.195 um και μήκους 25.28 um με την κεντρική σειρά οπών να έχει δώσει τη θέσει της σε έναν κυματοδηγό πυριτίου δημιουργόντας μια γραμμική ατέλεια.

Και η σχέση διασποράς που προκύπτει είναι η εξής



Σχήμα 3 Η σχέση διασποράς γραμμικής ατέλειας πυριτίου σε εξαγωνικό πλέγμα οπών σε πλακίδιο πυριτίου ύψους h=220 nm και πλάτους 22.915 μm μόνο για τα κυματανύσματα επι της ευθείας M-K, πλεγματική σταθερά α=500nm ακτίνα r=150nm.Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.Το χάσμα εμφανίζεται από τα 124 μέχρι τα 166 Thz.

Μπορούμε λοιπόν να παρατηρήσουμε οτι δύο

νέες καταστασεις έχουν κάνει την εμφάνισή τους μέσα στο χάσμα . Στη συνέχεια θα δείξουμε τη μορφή που έχει το πεδίο όταν κυματοδηγείται σε μία από αυτές αλλά και σε άλλες περιπτώσεις. Το πεδίο σε συχνότητα που αντιστοιχεί σε μία από αυτές τις καταστάσεις είναι



Συχνότητα 190 Thz

Σχήμα 4 Μορφή του ηλεκτρικού πεδίου Ε γαι ατον θεμελιώδη ΤΕ ρυθμό για την συχνότητα 190 Thz για τη διάταξη κεματοδηγού πυριτίου με φωτονικούς κρυστάλλους οπών εξαγωνικού πλέγματος.

Η συχνότητα 190 Thz είναι μια συχνότητα που από ότι συμπεράναμε προηγουμένως δεν μπορούσε να υποστηριχθεί από τον κρύσταλλο. Μετά την εμφάνιση όμως των νέων καταστάσεων μέσα στο χάσμα η συχνότητα 190 Thz έχει μία κατάσταση μέσα στη διάταξη. Όμως παρατηρούμε και κάτι που αναφέραμε ήδη παραπάνω. Αφού η κατάσταση στην οποία βρισκόμαστε εμφανίστηκε λόγω της ατέλειας όπως συζητήσαμε πιο πάνω αναμένουμε να εντοπίζεται σε αυτή. Έτσι βλέπουμε οτι το πεδίο παραμένει καθόλη τη διάδοσή του μέσα στον 'κυματοδηγό' και μάλιστα ένα μεγάλο μέρος του συνεχίζει στον κυματοδηγό εξόδου.

Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε το πεδίο για μία κατασταση που αντιστοιχεί στο πλέγμα και όχι στο κυματοδηγό .

Συχνότητα 230 Thz



Σχήμα 5 Μορφή του ηλεκτρικού πεδίου Ε γαι ατον θεμελιώδη ΤΕ ρυθμό για την συχνότητα 230 Thz για τη διάταξη κεματοδηγού πυριτίου με φωτονικούς κρυστάλλους οπών εξαγωνικού πλέγματος.

Η συχνότητα 230 Thz μπορεί να συγκεντρώσει ισχύ μέσα στη διάταξη όπως και προηγουμένως αλλα αυτή είναι απλωμένη σε όλο τον κρύσταλλο καθώς οι καταστάσεις σε εκείνες τις συχνότητες δέν είναι του κυματοδηγού αλλά του περιοδικού πλέγματος. Επίσης βλέπουμε ότι ενα πολύ μικρό μέρος της ισχύος του πεδίου μπορεί να φτάσει μέχρι τον κυματοδηγό εξόδου. Οι διατάξεις σαν και την παραπάνω έχουν μελετηθεί σε μεγάλο βαθμό[2]. Ένας τομέας όπου χρησιμοποιούνται αρκετά συχνά είναι για την στρέψη του φωτός κατά μεγάλες γωνίες όπου μια απλή οπτική ίνα θα εμφάνιζε μεγάλες απώλειες[3][4].

5.2 Γραμμική ατέλεια σχισμής (Slot line defect)

Αφού διαπιστώσαμε ότι πράγματι μια γραμμική ατέλεια δημιουργεί καταστάσεις στο χάσμα που επιτρέπουν στο φώς να κυματοδηγηθεί εκεί, τώρα μπορούμε να προχωρήσουμε στο κύριο

κομμάτι της έρευνάς μας που είναι η δημιουργία μίας λεπτής σχισμής στο κομμάτι εκείνο που προηγουμένως είχε πυρίτιο. Θυμίζουμε ότι ο τελικός μας σκοπός να να δημιουργήσουμε μία διάταξη που να μπορεί να κυματοδηγεί το φως με τέτοιο τρόπο ώστε να μπορεί να αλληλεπιδράσει με ένα αέριο του περιβάλλοντος. Οπότε ο κυματοδηγός σχισμής που παρουσιάσαμε στο πρωτο κεφάλαιο φαντάζει ιδανική διάταξη που μπορούμε να συνδυάσουμε με τον φωτονικό κρύσταλλο. Ο συνδυασμός αυτός θα επιθυμούσαμε να μας δώσει μια σχέση διασποράς που θα επιτρέπει στο φως για την περιοχή συχνοτήτων που αντιστοιχούν στα 1550 nm να έχει μικρή ομαδική ταχύτητα [5]. Περισσότερα για αυτό θα δούμε αργότερα.

Έτσι επιδιώκουμε να δημιουργήσουμε έαν κυματοδηγό σχισμής που όπως δείξαμε και στο κεφάλαιο 1 μπορεί να τηρεί τις συνθήκες κυματοδήγησης και να συγκεντρώνει μεγάλη ισχύ στον αέρα. Έτσι θα μπορεί και να αλληλεπιδράσει με οποιοδήποτε αέριο υπάρχει στην περιοχή. Η διάταξή μας θα είναι της μορφής



Σχήμα 6 Συνολική διάταξη οπών αέρα εξαγωνικού πλεγματος σε πυρίτιο ύψους 220nm πλάτους 22.195 um μήκους 25.28 um με την κεντρική σειρά οπών να έχει δώσει τη θέσει της σε μία σχισμή αέρα δημιουργόντας μια γραμμική ατέλεια.

Αρχικά λοιπόν θα δοκιμάσουμε μια σχισμή πλάτους **0.3 μm** δηλαδή όσο και η ακτίνα των οπών. Προκύπτει λοιπόν τότε:



Σχήμα 7 Η σχέση διασποράς γραμμικής ατέλειας σχισμής πλάτους 0.3 um σε εξαγωνικό πλέγμα οπών σε πλακίδιο πυριτίου ύψους h=220 nm και πλάτους 22.915 μm μόνο για τα κυματανύσματα επι της ευθείας M-K, πλεγματική σταθερά α=500nm ακτίνα r=150nm.H χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.

Εδώ βλέπουμε μια τελείως διαφορετική εικόνα από

ότι προηγουμένως. Το χάσμα είναι φυσικά ταυτόσημο με προηγουμένως ωστόσο οι νέες καταστάσεις που έχουν εισαχθεί δεν είναι όμοιες με το προηγούμενο παράδειγμα. Βλέπουμε μια νέα κατάσταση να διασχίζει το χάσμα ξεκινώντας από την κάτω ζώνη και οδηγούμενη στην πάνω.

Σαν δέυτερο παράδειγμα θα δοκιμάσουμε μια σχισμή με πλάτος **0.2 μm** .Παίρνουμε λοιπόν την παρακάτω σχέση διασποράς.



Σχήμα 8 Η σχέση διασποράς γραμμικής ατέλειας σχισμής πλάτους 0.2 um σε εξαγωνικό πλέγμα οπών σε πλακίδιο πυριτίου ύψους h=220 nm και πλάτους 22.915 μm μόνο για τα κυματανύσματα επι της ευθείας Μ-Κ, πλεγματική σταθερά α=500nm ακτίνα r=150nm.Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.

Τώρα η εικόνα είναι πολύ πιο ξεκάθαρη. Στο παραπάνω διάγραμμα μπορεί κανείς να δεί τις δύο νέες καταστάσεις που αναμέναμε να προκαλέσει η εμφάνιση της ατέλειας. Εδώ θα πρέπει να τονισθεί ότι οι δυο καταστάσεις δεν τέμνονται. Ας επιστήσουμε για λίγο την προσοχή μας στην χαμηλώτερη εκ των δυο-δηλαδή αυτή που ξεκινά από τη κάτω ζώνη. Αυτη η κατάσταση παρουσιάζει εξαιρετικό ενδιαφέρον καθώς φαίνεται να σταθεροποιείται στη συχνότητα 2.05 Thz.. Θα δοκιμάσουμε να μειώσουμε κι άλλο το πλάτος της σχισμής.



Δοκιμάζουμε τώρα ένα πλάτος σχισμής 0.15 um δηλαδή όσο η ακτίνα των οπών .

Σχήμα 9 Η σχέση διασποράς γραμμικής ατέλειας σχισμής πλάτους 0.15 um σε εξαγωνικό πλέγμα οπών σε πλακίδιο πυριτίου ύψους h=220 nm και πλάτους 22.915 μm μόνο για τα κυματανύσματα επι της ευθείας M-K, πλεγματική σταθερά α=500nm ακτίνα r=150nm.Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.

Στο παραπάνω διάγραμμα η κατάσταση σταθεροποιείται στα 197.7 Thz. Είναι ξεκάθαρο ότι κινούμαστε στη σωστή κατεύθυνση. Ένα ακόμα μέγεθος το οποίο θα πρέπει να παρακολουθούμε είναι το χάσμα που υπάρχει μεταξύ των δύο καταστάσεων που έχει εισάγει η ατέλεια. Ο λόγος που αυτό μας απασχολέι είναι αρχικά διότι θα θέλαμε οι δύο καταστάσεις να μήν συμπέσουν αλλά και να υπάρχει ένα ικανοποιητικό χάσμα μεταξύ των δύο καταστάσεων ώστε ένας παλμός που βρίσκεται στην περιοχή των 1550 nm να μπορεί να κυματοδηγηθεί μόνο σε μία από αυτές. Στη συγκεκριμένη περίπτωση το χάσμα των δύο νέων καταστάσεων είναι της τάξης των 13 Thz. Παρατηρούμε λοπόν ότι έχουμε πλησιάσει το στόχο μας (που είναι η περιοχή των 193.6 Thz) οπότε θα μικρύνουμε το βήμα μας και άλλο.

Στη συνέχεια θα δοκιμάσουμε πλάτος σχισμής στα 0.135 um.



Σχήμα 10 Η σχέση διασποράς γραμμικής ατέλειας σχισμής πλάτους 0.135 um σε εξαγωνικό πλέγμα οπών σε πλακίδιο πυριτίου ύψους h=220 nm και πλάτους 22.915 μm μόνο για τα κυματανύσματα επι

της ευθείας Μ-Κ , πλεγματική σταθερά α=500nm ακτίνα r=150nm.Η χρωματική μεταβολή (σε λογαριθμική κλίμακα) δείχνει την ένταση του πεδίου σε κάθε κατάσταση.

Η κατάστασή μας σταματά (αποκόπτεται) στη συχνότητα των 194.35 Thz (ή 1544.5 nm). Μετά από αυτήν τη συχνότητα έχουμε ένα χάσμα περίπου 10 Thz καθώς η επόμενη κατάσταση βρίσκεται στα 194.35 Thz. Αν κάποιος έχει ακολουθήσει τον συλλογισμό μας θα αναμένει να συνεχίσουμε να μικραίνουμε τη σχισμή μας λίγο ακόμα ώστε η κατάστασή μας να αποκόπτεται στα 193.6 Thz ακριβώς. Ωστόσο θα σταματήσουμε σε αυτό το σημείο καθώς για λόγους που θα αναλύσουμε σε επόμενη παράγραφο η διάταξη λειτουργει καλύτερα στα 1550 nm (193.6 Thz) αν το συστημά μας χαρακτηρίζεται από την παραπάνω σχέση διασπορας. Με βάση προηγούμενες μελέτες στο θέμα τον κυματοδηγών σχισής σε φωτονικούς κρυστάλλους [7,8] μπορεί κανείς να δεί ότι τα αποτελέσματα μας μοιάζουν να έχουν σωστη βάση.

5.3 Αργό φως

Όπως έχουμε ήδη αναφέρει ο λόγος που επιθυμούμε η κατάσταση που εμφανίστηκε μέσα στο χάσμα να σταθεροποιείται σε κάποια συχνότητα είναι διότι με αυτό τον τρόπο θα μειώναμε πολύ την ομαδική ταχύτητα του πεδίου.

Θυμίζουμε ότι η ομαδική ταχύτητα δίνεται από την σχέση

$$u_g = \frac{d\omega}{dk}$$

και ο δείκτης διάθλασης

$$n_g = \frac{c}{u_g}$$

Είναι δηλαδή η κλίση της συνάρτησης διασποράς για τα συγκεκριμένα κυματανύσματα. Η ομαδική ταχύτητα εκφράζει την ταχύτητα διάδοσης ενός ηλεκτρομαγνητικού παλμού σε μία συγκεκριμένη διάταξη. Έτσι λοιπόν όταν έχουμε μια σχέση διασπορας η οποία εμφανίζει πολύ μικρή κλίση συμπεραίνουμε ότι ένας παλμός γύρω από αυτές τις συχνότητες θα διαδίδεται με ταχύτητα πολυ μικρότερη από αυτή του φωτός αλληλεπιδρώντας έτσι πολύ περισσότερο με το περιβάλλον. Για την παραπάνω σχέση διασποράς απεικονίζουμε τον ομαδικό δείκτη διάθλασης



Σχήμα 11 Γραφική παράσταση που στον κάθετο άξονα αναπαρηστάται ο ομαδικός δείκτης διάθλασης και στον οριζόντιο το μήκος κύματος σε μέτρα

Όπως βλέπουμε ο δείκτης διάθλασης λαμβάνει τιμές πάνω από 100 κοντά στα μήκη κύματος όπου η κατάσταση αποκόπτεται δηλαδή στα 1543.5 nm. Ας επικεντρωθούμε όμως λίγο στα 1550 nm όπου θα θέλαμε να λειτουργεί η διάταξη. Απεικονίζουμε λιπόν μια εστιασμένη εκδοχή του παραπάνω γραφήματος στα 1550 nm.



Σχήμα 12 Γραφική παράσταση που στον κάθετο άξονα αναπαριστάται ο ομαδικός δείκτης διάθλασης και στον οριζόντιο το μήκος κύματος στην περιοχή των 1550 nm σε μέτρα.

Παρατηρούμε λοιπόν ότι στα 1550 nm ο ομαδικός δείκτης διάθλασης έιναι n_g=17.1.Αυτό σημαίνει ότι ένας παλμός στα 1550 nm θα διαδίδεται στη διάταξη με ταχύτητα 17.1 φορές μικρότερη από αυτή του φωτός.

Σίγουρα θα αναρωτιέστε όμως γιατί δεν επιδιώξαμε να δώσουμε στον ομαδικό δείκτη διάθλασης στα 1550 nm τις τεράστιες τιμές που ξεπερνούν και το 100 που είδαμε ότι μπορούν να επιτευχθούν.Η αιτία βρίσκεται σε ένα στοιχείο που έχουμε υπονοήσει αλλά δεν έχουμε αναφέρει ξεκάθαρα μέχρι στιγμής. Ένα μειονέκτιμα του μεγάλου δείκτη διάθλασης είναι όπως θα αναλύσουμε στη συνέχεια η μεγάλη αύξηση των απωλείων του πεδίου κατά την διάδοσή του.

5.4 Διάταξη μετάδοσης

Σε αυτό το σημείο και αφού έχουμε υπολογίσει της σχέσεις διασποράς της διάταξης αυτό που μας μένει είναι να τρέξουμε μία προσομοίωση μετάδοσης. Έτσι θα τοποθετήσουμε, όπως και πριν, δύο κυματοδηγούς πυριτίου στα δύο άκρα της διάταξής, έναν ο οποίος θα χρησιμοποιηθεί για την είσοδο του πεδίου στη διάταξη και ο άλλος για τη λήψη της εξόδου. Σαν είσοδο θα χρησιμοποιήσουμε έναν γκαουσιανό παλμό μεγάλου πλάτους ώστε να ανιχνεύσουμε διάφορες ιδιότητες της διάταξης όπως η συχνότητα αποκοπής. Θυμίζουμε πως σαν συχνότητα αποκοπής ονομάζουμε τη συχνότητα στην οποία η νέα κατάσταση που έχει εισαχθεί στο συχνοτικό χάσμα και ξεκινά από τη κάτω ζώνη σταθεροποιείται και τερματίζει. Όπως έχουμε αναφέρει και προηγουμένως για τις συχνότητες στη γειτονίκή περιοχή της συχνότητας αποκοπής παρατηρείται το φαινόμενο του αργού φωτός.

Απεικονίζουμε λοιπόν το σήμα που λαμβάνουμε στην έξοδο αν σαν είσοδο έχουμε ένα παλμό φάσματος 186-200 Thz (1550-1620 nm) . Το σχήμα αυτό απεικονίζει την συχνότητα αποκοπής ή μήκος κύματος εκκίνησης λειτουργίας της διάταξης.



Σχήμα 13 Η γραφική παράσταση της έντασης του πεδίου όταν αυτό φτάνει στο δέκτη σε συνάρτηση του μήκους κύματος.

Όπως βλέπουμε το πεδίο αποκόπτεται τελείως μετά το μήκος κύματος 1543.5 nm όπως είχαμε προβλέψει αφού οι συχνότητες 194.35-200 Thz (1500-1543.5 nm) ανήκουν στο χάσμα μη επιτρεπτών συχνοτήτων μεταξύ των δύο νέων καταστάσεων στη διάταξή μας.

Θα θέλαμε επίσης να απεικονίσουμε και το πεδίο καθώς διαδίδεται στο μήκος κύματος των 1550 nm.



Σχήμα 14 Η γραφική παράσταση της έντασης του πεδίου καθώς αυτό διαδίδεται στη σχισμή για μήκος κύματος 1550 nm

Βλέπουμε πως το πεδίο διαδίδεται μέσα στη κυρίως σχισμή με πολύ λίγη ένταση να διαφεύγει στο γειτονικό χώρο του περιοδικού κρυστάλλου. Κάτι που παρατηρούμε επίσης είναι οι μεγάλες απώλειες που υπάρχουν στην είσοδο αλλά και στην έξοδο από τη διάταξη φωτονικού κρυστάλλου. Τρόποι μείωσης αυτών των απωλειών θα παρουσιαστούν συνοπτικά στο τελευταίο κεφάλαιο καθώς αποτελούν έναν διαφορετικό κλάδο της ολοκληρωμένης οπτικής. Αυτές δεν είναι οι απώλειες για τις οποίες αναφερθήκαμε προηγουμένως καθώς δεν σχετίζονται με το φαινόμενο του αργού φωτός. Οι απώλειες αργού φωτός που παρουσιάστηκαν προηγουμένως αναλύονται στην αμέσως επόμενη παράγραφο.

5.5 Αργό φως και απώλειες μετάδοσης

Είχαμε ξεκαθαρίσει από την αρχή του κεφαλαιου ότι ο στόχος μας είναι να σχεδιάσουμε μια διάταξη που να επιτυγχάνι μικρή ομαδική ταχύτητα για το σήμα μας. Αυτή η ιδιότητα θα έδινε τη δυνατότητα στο πεδίο να αλληλεπιδράση πολύ περισσότερο χρόνο με ένα αέριο με το οποίο θα έρθει σε επαφή αλλά επίσης δημιουργεί και ένα πρόβλημα. Ο μεγάλος ομαδικός δείκτης θα οδηγήσει το σύστημα να έχει πολύ μεγάλες απώλειες κάτι που θα μειώσει δραματικά την επίδοσή του. Για να κάνουμε μια θεωρητική προσέγγιση για τον συντέλεστή απωλειών είναι λογικό να υποθέσουμε ,όπως έχει προταθεί [9], ότι αυτός αποτελείται από δύο μέρη. Ένα που σχετίζεται με τις απώλειες από οπισθοανάκλαση, δηλαδή όταν το πεδίο ανακλάται εν μέρη και επιστρέφει στην είσοδο της διάταξης, και οι οποίες εξαρτώνται γραμμικά από το δείκτη διάθλασης και ένα το οποίο σχετίζεται με το διαφυγόν πεδίο πρός την υπόλοιπη διάταξη και το περιβάλλον και το οποίο εξαρτάται τετραγωνικά από τον ομαδικό δείκτη διάθλασης ng.

$$\alpha = c_1 n_g + c_2 n_g^2$$

Όπου c1, c2 σταθεροί συντελεστές

Το μοντέλο αυτό αν και αποτελεί μια καλή αρχή δεν είναι πλήρως κατάλληλο για την περίπτωσή μας καθώς υποθέτει ανεξαρτησία του ρυθμού διάδοσης από το ομαδικό δείκτη διάθλασης. Ενώ στις περιπτώσεις οπτικών ινών αυτό είναι σε μεγάλο βασθμό αληθές κατι τέτοιο δεν συμβαίνει σε καμία περίπτωση σε διατάξη φωτονικών κρυστάλλων όπου ο ρυθμός μας έχει πολύ διαφορετικό προφίλ σε διαφορετικά σημεία της σχέσεις διασποράς.

Έτσι λοιπόν θα εισάγουμε δύο ακόμα παράγοντες στη σχέση του συντελεστή απόσβεσης.

Θα έχουμε λοιπόν

$$\alpha = c_1 \gamma(k) n_g + c_2 \rho(k) n_g^2$$

Ο συντελεστής **γ** παριγράφει το φαινόμενο της οπισθοανάκλασης και ο **ρ** αυτο του διαφυγόντος πεδίου στον υπόλοιπο κρύσταλλο. Θα προσπαθήσουμε ποιοτικά να πειργράψουμε σε τι αναλογούν.

Κατα την διάδοσή του μέσα στη διάταξη το πεδίο συναντά ανωμαλίες ως προς τους δείκτες διάθλασης. Θα αναρωτηθεί κανείς πως είναι δυνατόν να συμβαίνει αυτό αφού το πεδίο διαδίδεται μέσα στον κυματοδηγό σχισμή. Αυτό που παραβλέπεται είναι οτι το πεδίο έχει ένα σημαντικό μέρος της ισχύος του και στον παραπλήσιο χώρο εκατέρωθεν της σχισμής. Σε εκείνο τον χώρο λοιπόν το πεδίο συναντά έναν μεγάλο αριθμό οπών οι οποίες φυσικά έχουν διαφορετικό δείκτη διάθλασης από το πυρίτιο. Αυτή η διαδικασία οδηγεί στην ανάκλαση του πεδίου η οποία συμβαίνει σε αναλογία με τον δείκτη διάθλασης της συγκεκριμένης κατάστασης. Το ανακλόμενο πεδίο θα βρίσκεται στην ίδια κατάσταση με το διαδιδόμενο και αυτό θα επηρρεάσει και την μορφή του συντελεστή **γ** όπως μπορεί να δει κανείς αναλυτικά στο άρθρο [9].

Σε αντίθεση με την οπισθοανάκλαση οι απώλειες διαφυγόντος πεδίου συσχετίζουν την διαδιδόμενη κατάσταση με άλλες καταστάσεις. Καθώς το πεδίο διαδίδεται στην διάταξη μεταφέρει ένα μέρος της ισχύος του σε άλλες επιτρεπτές καταστάσεις στη διάταξη. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα τελικά το πεδίο να συγκεντρώνει ένταση και σε καταστάσεις που είναι επιτρεπτές για το περιοδικό πλέγμα και άρα να διαδοθεί έξω από τη σχισμή και τελικά στο περιβάλλον. Αυτό θα γίνει σε αναλογία με το τετράγωνο του δείκτη διάθλασης και ο συντελεστής ρεξαρτάται και από την προβολή της διαδιδόμενης καταστάσης σε άλλες και είναι αρκετά μικρός λόγο του χάσματος που υπάρχει πάνω απο τη συχνότητα λειτουργίας και τη μορφή του ρυθμού μας [9].



Στη συνέχεια θα απεικονίσουμε τις απώλειες διάδοσης

Σχήμα 15 Απώλειες διάδοσης του πεδίου σε dB/mm σε συνάρτηση με το μήκος κύματος.

Παρατηρούμε ότι η ένταση του πεδίου στα 1543.5 nm όπου ο ομαδικός δείκτης διάθλασης είναι πάνω απο ng>100 το πεδίο έχει άνω των 4.500 dB/mm . Αντίθετα στην περίπτωση που το πεδίο βρίσκεται στο μήκος κύματος 1550 nm το πεδίο έχει σημαντικά μικρότερες απώλειες.

Στη συνέχεια θα απεικονίσουμε τις απώλειες διάδοσης γύρω απο τα 1550 nm



Σχήμα 15 Απώλειες διάδοσης του πεδίου σε dB/mm σε συνάρτηση με το μήκος κύματος για την περιοχή απο 1549 εως 1551 nm.

Οι απώλειες που έχει το πεδίο στα 1550 nm είναι της τάξης των 118 dB/mm. Αυτό σημαίνει ότι οι απώλειες σε αυτό το μήκος κύματος όπου ο ομαδικός δείκτης διάθλασης είναι n_g =17.1 είναι περίπου 40 φορές μικρότερες απο την περιοχή όπου το πεδίο είχε ομαδικό δείκτη διάθλασης n_g > 100 , δικαιολογώντας έτσι την επιλογή μας να λειτουργήσουμε τη διάταξη στα 1550 nm. Επίσης να επισημανθεί ότι το αποτέλεσμα θεωρείται συμβατό με τη μεχρι τώρα βιβλιογραφία [5].

Τέλος πρέπει να επισημανθεί ότι στις απώλειες που περιγράφτηκαν δεν εμπεριέχονται οι απώλειες ζεύξης. Σαν απώλειες ζεύξης ορίζονται οι απώλειες που έχει το σήμα κατά την είσοδο στην φωτονική διάταξη αλλά -αν και λιγότερο- και κατά την έξοδο. Το πρόβλημα αυτό παρουσιάζει αρκετές ιδιαιτερότητες σε αυτήν την περίπτωση καθώς η διάταξη συνδυάζει κυματοδηγό σχισμής και φωτονικούς κρυστάλλους και αυτό καθιστά την επίλυση του προβλήματος μεγάλη πρόκληση.

[5] M.G. Scuillon, T.F. Krauss, A. Di Falco, 'Slotted Photonic Crystal Sensors' Sensors 13, 3675 (2013)

^[1] John D. Joannopoulos, Steven G. Johnson, Joshua N. Winn, and Robert D. Meade Photonic Crystals: Molding the Flow of Light, Priceton Univ. Press (2008)

^[2] Y. Jiang, W. Jiang, .L. Gu, X. Chen, R. T. Chen '80-micron interaction length silicon photonic crystal waveguide modulator' Appl. Phys. Lett. 87, 221105 (2005)

^[3] M. Loncar, T. Doll, J. Vuckovic, A. Scherer 'Design and Fabrication of Silicon Photonic Crystal Optical Waveguides' Journal of Lightwave Technology, 18, (2000)

^[4] C. Jamois, R.B. Wehrspohn , L.C. Andreani, C. Hermannd, O. Hess, U. Gösele 'Silicon-based twodimensional photonic crystal waveguides Photonics and Nanostructures – Fundamentals and Applications 1 (2003) 1–13

[6] C. Caër, S. Combrié, X. Le Roux, E. Cassan, A. De Rossi, 'Extreme optical confinement in a slotted photonic crystal waveguide' Appl. Phys. Lett. 105, 121111 (2014)

[7] M. G. Scullion T. F. Krauss A. Di Falco High Effi ciency Interface for Coupling into Slotted Photonic Crystal Waveguides IEEE Photonics Journal 3, (2011)

[8] A. Di Falco, L. O'Faolain, and T. F. Krauss Dispersion control and slow light in slotted photonic crystal waveguides' Appl. Phys. Lett. 92, 083501 (2008)

[9] L. O'Faolain, S. Schultz, D.M. Beggs, T.P. White, M. Spasenovic, L. Kuipers, F. Morichetti, Andrea Melloni, Simon Mazoyer, Jean-Paul Hugonin, et al. Loss engineered slow light waveguides Optics Express 18, 27627 (2010)

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6

Οι διατάξεις φωτονικών κρυστάλλων είναι μια τεχνική η οποία είναι ολοένα και πιο ευρέως χρησιμοποιούμενη λόγω των προτότυπων ιδιοτήτων αλλά και της ευκολίας κατασκευής τους. Σε αυτήν την εργασία επικεντρώσαμε το ενδιαφέρον μας στην εκδήλωση του φαινομένου του αργού φωτός με προοπτική να χρησιμοποιήσουμε την διάταξη σαν αισθητήρα αερίου. Με αυτή τη λογική αρχικά σχεδιάσαμε στο πρόγραμμα FDTD Solutions της Lumerical μια περιοδική διάταξη οπών αέρα εξαγωνικού πλέγματος σε ένα πλακίδιο Πυριτίου Πάνω σε Μονωτικό. Μελετήσαμε τον τρόπο που οι γεωμετρικές παράμετροι επηρεάζουν τη σχέση διασποράς της διάταξης η οποία έχει τη μορφή ζωνών. Τελικά καταλήξαμε στις παραμέτρους που δημιουργούν ένα ευρύ συχνοτικό χάσμα γύρω περίπου από τα 193.6 Thz (1550 nm) για ΤΕ ρυθμούς του πεδίου. Στη συνέχεια ερευνήσαμε τον τρόπο με τον οποίο επηρεάζει η εισαγωγή μίας γραμμικής ατέλειας την προηγούμενη σχέση διασποράς. Η ατέλεια που μας ενδιαφέρει περισσότερο είναι η ατέλεια σχισμής δηλαδή η διαδικασία αντικατάστασης μιας σειράς οπών από μια λεπτή σχισμή αέρα.

Συμπεράναμε ότι μια τέτοια ατέλεια εισάγει μια κατάσταση στο συχνοτικό χάσμα η οποία ξεκινάει από τη κάτω συχνοτική ζώνη και σταματά σε μία συχνότητα μέσα σε αυτό. Επίσης όλοι οι ρυθμοί οι οποίοι ανήκουν φασματικά σε αυτή τη κατάσταση να κυματοδηγούνται κατα κύριο λόγο μέσα στη σχισμή. Το ενδιαφέρον όμως είναι οτι αυτή η νέα κατάσταση φαίνεται να σταθεροποιείται και να παρουσιάζει πολυ μικρή κλίση για συχνότητες κοντά στη συχνότητα αποκοπής της. Αυτό σημαίνει ότι η ομαδική ταχύτητα η οποία ισούται με την παράγωγο της σχέσης διασποράς παρουσιάζει πολύ μικρές τιμές σε σχέση με την ταχύτητα του φωτός στον αέρα. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται αργό φως (slow light). Το φαινόμενο του αργού φωτός μας δίνει το πλεονέκτημα ότι το πεδίο μπορεί να αλληλεπιδρά πολύ περισσότερη ώρα με τον περιβάλλοντα χώρο ωστόσο έχει επίσης το μειονέκτημα της σημαντικής αύξησης των απωλειών σε σχέση με τον ομαδικό δείκτη διάθλασης. Μεταβάλλοντας λοιπόν το πλάτος της σχισμής καταφέραμε η νέα κατάστασή μας να παρουσιάζει συχνότητα αποκοπής 194.35 Thz τιμή που έχει σαν αποτέλεσμα το πεδίο να εμφανίζει για τα 1550 nm ομαδικό δείκτη διάθλασης ng=17.1 καθώς και αρκετά περιορισμένες απώλειες. Το αποτέλεσμα αυτό είναι σε συμφωνία με αντίστοιχες αναλύσεις όπως έχουν συνοψισθεί στην αναφορά [1] όπου επισημαίνεται η προσέγγιση χρυσής τομής μεταξύ τιμών ομαδικού δείκτη διάθλασης και απωλειών.

Η διάταξη είναι αιωρούμενη (suspended air) δηλαδή περιβάλλεται από αέρα και από πάνω και από κάτω κάτι που θα μας χρησιμεύσει όταν θα επιχειρήσουμε να εισάγουμε ένα αέριο στη σχισμή ώστε να αλληλεπιδράσει με το πεδίο και να μας δώσει φασματοσκοπικά αποτελέσματα. Ο υψηλός ομαδικός δείκτης διάθλασης σε συνδυασμό με τις περιορισμένες απώλειες που παρουσιάζει η διάταξή μας για την περιοχή κοντά στα 1550 nm καθώς και η δυνατότητα κατασκευής, αφού πρόκειται για διαδικασίες τεχνολογίας πυριτίου που είναι επαναλήψιμες και σε βιομηψχανική κλίμακα, μας οδηγούν στο συμπέρασμα ότι αξίζει να δοκιμασθεί η πειραματική πραγματοποίηση της διάταξης.

Η σύγκριση των αποτελεσμάτων με μία πειραματική διάταξη αποτελεί και την ουσιαστικότερη προοπτική για την παρούσα εργασία. Παρόλα αυτά υπάρχουν σημαντικά βήματα που θα μπορούσαν να γίνουν και σε επίπεδο προσομοίωσης πριν το κατασκευαστικό στάδιο.

Οπως έχει επισημανθεί και στην βιβλιογραφία [1] οι κατασκευαστικές διεργασίες είναι επαναλήψιμες αλλά εμπεριέχουν κατασκευαστικές ανοχές που μπορούν να δώσουν σημαντικές διαφορές με τα αποτελέσματα που προβλέπει η προσομοίωση. Είναι επομένως ενδιαφέρον να διερευνηθούν μέσω προσομοίωσης αποκλίσεις της συμπεριφοράς της διάταξης λόγω κατασκευαστικών ανοχών και να επισημανθεί το όριό τους για ικανοποιητική συμπεριφορά της διάταξης. Αυτό είναι φανερό ότι θα βοηθήσει στην καλύτερη ανάλυση των αποτελεσμάτων σε μία μελλοντική προσπάθεια κατασκευής και χαρακτηρισμού της διάταξης.

Στην ανάλυση της παρούσας εργασίας υποθέσαμε επίσης ότι η ζεύξη της διάταξης με μία εξωτερική πηγή φωτός δεν παρουσιάζει απώλειες. Σε μία πραγματική διάταξη θα πρέπει να αναλυθεί κατά πόσο το παραπάνω είναι δυνατόν και η προσομοίωση θα μπορούσε να βοηθήσει στην βελτιστοποίηση μιας τέτοιας προσπάθειας. Μία ενδιαφέρουσα προσέγγιση ζεύξης μικρών απωλειών που θα μπορούσε να προσομοιασθεί είναι αυτή που παρουσιάζεται στο σχήμα 1.



Σχήμα 1 Εικόνα Ηλεκτρονικού Μικροσκοπίου Σάρωσης όπου φαίνεται ο κυματοδηγός εισόδου στον φωτονικό κρύσταλλο σχισμής καθώς και οι ατέλειες λίγο πριν την σχισμή που βοηθούν στην κατευθυντικότητα της φωτεινής δέσμης. Παράμετροι βελτιστοποίησης είναι το πλάτος των οπών και του κυματοδηγού εισόδου [2].

Δεδομένου ότι η ανάλυση που κάναμε ξεκίνησε με τον σχεδιασμό της διάταξης στα 1550 nm για συμβατότητα με το τηλεπικοινωνιακό δίκτυο είμαστε περιορισμένοι στην χρήση της για ανίχνευση αερίων που απορροφούν γύρω από αυτό το μήκος κύματος. Αέρια που μπορούν να δοκιμασθούν αφού δείχνουν απορρόφηση στην περιοχή αυτή του φάσματος όπως αναφέρουμε στην παράγραφο 1.5, είναι το διοξείδιο του άνθρακα, το μεθάνιο, η αμμωνία, το ακετυλένιο η ακόμη και ατμοί υδροχλωρίου. Η προσομοίωση θα μπορούσε να περιλάβει και το κομμάτι αυτό και να δώσει μία εκτίμηση της ευαισθησίας του αισθητήρα για καθένα από αυτά τα αέρια.

Τέλος επισημαίνουμε ότι η προσφορά της διπλωματικής αυτής είναι κυρίως στην ανάπτυξη της μεθοδολογίας σχεδιασμού και προσομοίωσης της διάταξης η οποία μπορεί βέβαια να χρησιμοποιηθεί και για τον σχεδιασμό παρόμοιας διάταξης σε διαφορετική συχνότητα από τα 1550 nm που συνεπάγεται ανίχνευση διαφορετικού αερίου από τα παραπάνω ή ακόμη και ενός των παραπάνω όμως σε μία συχνότητα που απορροφά περισσότερο. Στην βάση αυτή μπορεί να αποτελέσει ένα ευέλικτο εργαλείο σχεδιασμού οπτικών αισθητήρων αερίων γενικότερα με χρήση της φασματοσκοπία απορρόφησης.

[1] Y. Zhao, Y. Zhang, Q. Wang, H. Hu 'Review on the optimization methods of slow light in photonic crystal waveguide' IEEE Transactions on Nanotechnology doi 10.1109/TNANO.2015.2394410, (2015)

[2] M.G. Scuillon, T.F. Krauss, A. Di Falco, 'Slotted Photonic Crystal Sensors' Sensors 13, 3675 (2013)

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

[1] G. Reed, A. Knight, Silicon Photonics, An Introduction, J. Wiley (2004).

[2] S.A. Schulz, L.O. Faolain, D.M. Beggs, et al., Dispersion engineered slow light in photonic crystals: a comparison, Journal of Optics 12 (10) (2010) 104004.

[3] S. John, Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices, Physical Review Letters 58 (23) (1987) 2486–2489.

[4]E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. 58, 2059 (1987).

[5] S. Chakravarty, P. Bhattacharya, and Z. Mi, IEEE Photonics Technol. Lett. 18, 2665 (2006).

[6]T. Yamamoto, M. Notomi, H. Taniyama, E. Kuramochi, Y. Yoshikawa, Y. Torii, and T.Kuga, Opt. Express **16**, 13809 (2008).

[7]C.-Y. Lin, X. Wang, S. Chakravarty, B.-S. Lee, W.-C. Lai, J. Luo, A. K.-Y.Jen, and R. T. Chen, Appl. Phys. Lett. **97**, 093304 (2010).

[8] T. Baba, Slow light in photonic crystals, Nature Photonics 2 (8) (2008) 465–473.

[9] Y. Zhao, Y.N. Zhang, Q. Wang, Research advances of photonic crystal gas and liquid sensors, Sensors and Actuators B 160 (1) (2011) 1288–1297.

[10] J.D. Ryckman, S.M. Weiss, Localized field enhancements in guided and defect modes of a periodic slot waveguide, IEEE Photonics Journal 3 (6) (2011) 986–995.

[11] D.Q. Yang, H.P. Tian, Y.F. Ji, Microdisplacement sensor based on high-Q nanocavity in slot photonic crystal, Optical Engineering 50 (5) (2011) 054402.

[12] M.G. Scullion, A. Di Falco, T.F. Krauss, Slotted photonic crystal cavities with integrated

microfluidics for biosensing applications, Biosensors and Bioelectronics 27 (1) (2011) 101–105.

[13] A. Di Falco, L. O'Faolain, T.F. Krauss, Chemical sensing in slotted photonic crystal heterostructure cavities, Applieg Physics Letters 94 (6) (2009) 063503.

[14] J. Jagerska, H. Zhang, Z.L. Diao, et al., Refractive index sensing with an air-slot photonic crystal nanocavity, Optics Letters 35 (15) (2010) 2523–2525.

[15] B.W. Wang, M.A. Dóndar, R. N¢tzel, et al., Photonic crystal slot nanobeam slow light waveguides for refractive index sensing, Applied Physics Letters 97 (15) (2010) 151105.

[16] S. Chakravarty, J. Topoľančik, P. Bhattacharya, S. Chakrabarti, Y. Kang, and M. E. Meyerhoff, Opt. Lett. **30**, 2578 _2005.

[17] Wei-Cheng Lai, Swapnajit Chakravarty, Xiaolong Wang, Cheyun Lin, and Ray T. Chen 'Photonic crystal slot waveguide absorption spectrometer for on-chip near-infrared spectroscopy of xylene in water' Applied Physics Let. 98, (2011)

[18] N. A. Mortensen and S. S. Xiao, Appl. Phys. Lett. 90, 141108 (2007).

[19] Wei-Cheng Lai, Swapnajit Chakravarty, Xiaolong Wang, Cheyun Lin, and Ray T. Chen 'On-chip methane sensing by near-IR absorption signatures in a photonic crystal slot waveguide' Optics Letters 36 (2011)

[20] Ya-Nan Zhang, Yong Zhao*, Di Wu, Qi Wang 'Theoretical research on high sensitivity gas sensor due to slow light in slotted photonic crystal waveguide' Sensors and Actuators B 173 (2012)

[21] H. Altug, PhD Stanford Univ. 2007 (http://web.stanford.edu/group/nqp/jv_files/thesis/hatice-thesis.pdf)

[22] John D. Joannopoulos, Steven G. Johnson, Joshua N. Winn, and Robert D. Meade Photonic Crystals: Molding the Flow of Light, Priceton Univ. Press (2008), κεφαλαιο 6

[23] C. Jamois, R.B. Wehrspohn , L.C. Andreani, C. Hermannd, O. Hess, U. Gösele 'Silicon-based twodimensional photonic crystal waveguides Photonics and Nanostructures – Fundamentals and Applications 1 (2003) 1–13

[24] M. Loncar, T. Doll, J. Vuckovic, A. Scherer 'Design and Fabrication of Silicon Photonic Crystal Optical Waveguides' Journal of Lightwave Technology, 18, (2000)

[25] M. G. Scullion T. F. Krauss A. Di Falco High Effi ciency Interface for Coupling into Slotted Photonic Crystal Waveguides IEEE Photonics Journal 3, (2011)

[26] A. Di Falco, L. O'Faolain, and T. F. Krauss Dispersion control and slow light in slotted photonic crystal waveguides' Appl. Phys. Lett. 92, 083501 (2008)

[27] Zhi-Yuan Li, Chen Wang and Lin Gan 'Silicon-photonic-crystals-towards-optical-integration' in Advances in Photonic Crystals, book edited by Vittorio M.N. Pissaro, ISBN 978-953-51-0954-9

[28] Y. Jiang, W. Jiang, .L. Gu, X. Chen, R. T. Chen '80-micron interaction length silicon photonic crystal waveguide modulator' Appl. Phys. Lett. 87, 221105 (2005)

[29] M.G. Scuillon, T.F. Krauss, A. Di Falco, 'Slotted Photonic Crystal Sensors' Sensors 13, 3675 (2013)

[30] C. Caër, S. Combrié, X. Le Roux, E. Cassan, A. De Rossi, 'Extreme optical confinement in a slotted photonic crystal waveguide' Appl. Phys. Lett. 105, 121111 (2014)

[31] M. G. Scullion T. F. Krauss A. Di Falco High Effi ciency Interface for Coupling into Slotted Photonic Crystal Waveguides IEEE Photonics Journal 3, (2011)

[32] L. O'Faolain, S. Schultz, D.M. Beggs, T.P. White, M. Spasenovic, L. Kuipers, F. Morichetti, Andrea Melloni, Simon Mazoyer, Jean-Paul Hugonin, et al. Loss engineered slow light waveguides Optics Express 18, 27627 (2010)