محاسبه ساختار باند و چگالی حالتهای فوتونی در یک کریستال فوتونی دوبعدی هگزاگونال

صدقی، علی اصغر؛ رضائی، بهروز؛ کلافی،منوچهر

پژوهشکده فیزیک کاربردی وستاره شناسی دانشگاه تبریز

چکیده

بااستفاده از روش امواج تخت، ساختار باند و چگالی حالات فوتونی امواج الکترومغناطیسی در یک ساختار هگزاگونال دوبعدی بامیله های دی الکتریک ازجنس GaAs وسطح مقطع بیضوی محاسبه شده است. این ساختار درناحیه مادون قرمز، باند ممنوعه فرکانسی از خود نشان می دهد.

مقدمه

در طی سالهای اخیر مطالعه ساختارهای دی الکتریک پریودیک مانند کریستالهای فوتونی بسیار مورد توجه بوده است. این ساختارها بعلت دارا بودن آرایه منظم از مواد دی الکتریک متفاوت، نواحی مجاز و ممنوع فرکانسی از خود نشان می دهند. کریستالهای فوتونی دارای گستره وسیعی از کاربردهای عملی می باشند که می توانند باعث تحول عظیم در صنعت و تکنولوژی شوند. از جمله موارد کاربرد کریستالهای فوتونی در ساخت موجبر های نوری است[۱] که باعث هدایت طول موج مطلوب و دلخواه در ناحیه باند ممنوعه خواهد شد و هر چه این ناحیه بزرگ باشد برای اهداف عملی مفید خواهد بود. بنابر این هدف از انجام این تحقیق بهینه کردن پارامترهای ساختاری کریستال فوتونی برای بدست آوردن گاف فوتونی بزرگ می باشد.

روش محاسبات

الف) ساختار باند فوتونی

برای محاسبه ساختار باند فوتونی به جای معادله شرودینگر از معادلات ماکسول استفاده می کنیم. معادله ماکسول درمواد دی الکتریک غیر همگن برای میدان مغناطیسی به صورت زیر است[۲] :

$$\vec{\nabla}\times[\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})}\vec{\nabla}\times\vec{H}(\vec{r})]=\frac{\omega^2}{c^2}\vec{H}(\vec{r}) \qquad (۱)$$

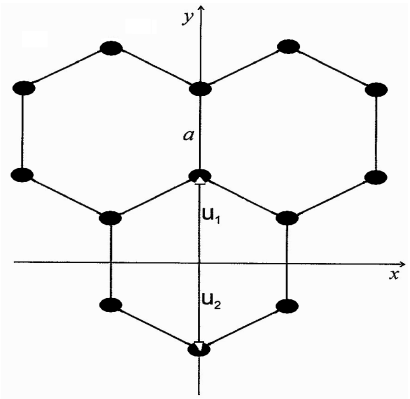
که c سرعت نور و $\varepsilon(\vec{r})$ تابع دی الکتریک شبکه است. با بسط $\vec{H}$ و $\varepsilon(\vec{r})$بر حسب امواج تخت(روش بسط امواج تخت) معادله فوق منجر به معادله ویژه مقداری برای قطبش H (میدان مغناطیسی موازی با محور میله ها) می شود که ماتریس آن بصورت زیر است:

$$A_{\vec{G},\vec{G}'}=(\vec{k}+\vec{G})\cdot(\vec{k}+\vec{G})L(\vec{G}-\vec{G}') \qquad (۲)$$

و به روش مشابه برای قطبش E (میدان الکتریکی موازی با محور میله ها) داریم :

$$A_{\vec{G},\vec{G}'} = |\vec{k}+\vec{G}|\,|\vec{k}+\vec{G}'|\,L(\vec{G}-\vec{G}') \qquad (۳)$$

ماتریس A برای هر دو قطبش، متقارن بوده و ویژه مقادیر آن برابر با ω^2/c^2 می باشد. $L(\vec{G}-\vec{G}')$ تبدیل فوریه عکس تابع دی الکتریک است و در تعیین ساختار باند فوتونی نقش اساسی دارد. شبکه فوتونی مورد بررسی در این مقاله به شکل هگزاگونال، متشکل از میله های دی الکتریک با سطح مقطع بیضوی می باشد (شکل۱).



شکل ۱: شبکه فوتونی دو بعدی هگزاگونال

حال حالتی را در نظر می گیریم که در آن محور افقی دو میله واقع در سلول اولیه با یکدیگر زاویه φ می سازند یعنی محور افقی بیضی اول منطبق بر محور x بوده و محور افقی بیضی دوم با محورx زاویه φ می سازد. برای چنین ساختاری تابع $L(\vec{G})$ به صورت زیر می باشد[۳]:

$$L(\vec{G}) = \begin{cases} \dfrac{1}{\varepsilon_a} f + \dfrac{1}{\varepsilon_b}(1-f) & , \quad \vec{G}=0 \\ \dfrac{1}{a_c}\left(\dfrac{1}{\varepsilon_a}-\dfrac{1}{\varepsilon_b}\right)\sum_i \left[\dfrac{2a_{R_1}}{g_i'\rho_1} J_1(g_i'\rho_1)\right] \mathbf{e}^{-i\vec{G}\cdot\vec{u}_i} & , \quad \vec{G}\neq 0 \end{cases} \qquad (۴)$$

که در آن داریم:

$$g_i'^2 = G_x^2(\cos^2\varphi_i + (\frac{\rho_2}{\rho_1})^2\sin^2\varphi_i) + G_y^2(\sin^2\varphi_i + (\frac{\rho_2}{\rho_1})^2\cos^2\varphi_i) + 2G_xG_y\cos\varphi_i\sin\varphi_i(1-(\frac{\rho_2}{\rho_1})^2) \qquad (۵)$$

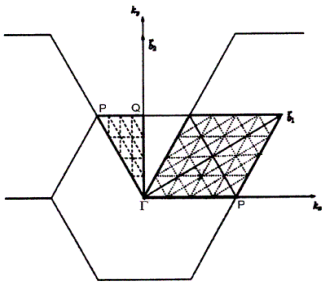
در روابط اخیر ρ_1 و ρ_2 به ترتیب شعاعهای افقی و عمودی بیضی هستند. $J_1(x)$ تابع بسل مرتبه اول و $u_i\,(i=1,2)$ بردار مکان میله های بیضوی در سلول اولیه است. $f = 2\pi\rho_1\rho_2 / a_c$ نیز نسبت مساحت اشغال شده توسط دو بیضی واقع درسلول اولیه به مساحت سلول اولیه a_c می باشد که فاکتور پرشدگی نام دارد. ε_a و ε_b هم به ترتیب ثابتهای دی الکتریک میله ها و ماده زمینه است.

ب)چگالی حالات فوتونی

چگالی حالات فوتونی(DOS) کل با رابطه زیر داده می شود[۴]:

$$g(\omega) = \sum_{n} \int_{1\text{-}BZ} d^2k \delta(\omega - \omega_n(\vec{k})) \qquad (۶)$$

منظور از $1\text{-}BZ$ همان منطقه اول بریلوئن می باشد. برای محاسبه این انتگرال از روش چهار وجهی خطی [۵] و شکل موازنه شده تقارن صحیح آن [۶] استفاده شده است. در این روش انتگرال حول منطقه اول بریلوئن مساوی است با مجموع انتگرالها حول سه گوشهای غیر همپوشیده که پر کننده قسمت غیر قابل تقلیل منطقه اول بریلوئن می باشند. منظور از قسمت غیر قابل تقلیل همان ناحیه ای از منطقه اول بریلوئن است که توسط سه جهت تقارن $(\Gamma Q, PQ, \Gamma P)$ احاطه شده است(شکل۲).

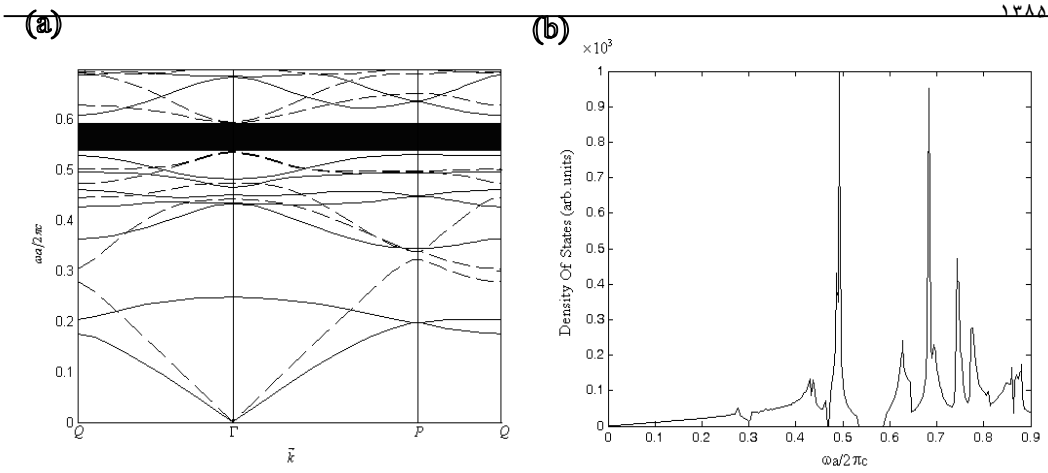


شکل ۲: ناحیه ای از فضای $\mathbf{k}$ دو بعدی در منطقه اول بریلوئن

چون مقادیر بدست آمده از این روش برای چگالی حالات در تقارن کریستال صدق نمی کنند، لذا برای غلبه بر این نقص ناحیه انتگرالگیری از قسمت غیرقابل تقلیل به یک متوازی الاضلاع (شکل ۲) تبدیل شده است[۴]. بدیهی است که مقادیر $\omega(\vec{k})$ برای نقاط $\vec{k}$ از سه گوشهای اضافه شده را می توان با استفاده از تقارن، از روی مقادیر $\omega(\vec{k})$ در ناحیه غیر قابل تقلیل بدست آورد. انتگرال حول یک مثلث کوچک با استفاده از درون یابی خطی بین رئوس آن محاسبه می شود[۴]. با معلوم بودن مقدار انتگرال برای تمام مثلث های کوچک، سهم همه آنها را با هم جمع می کنیم تا چگالی حالات فوتونی برای یک باند یا n مشخص بدست آید.

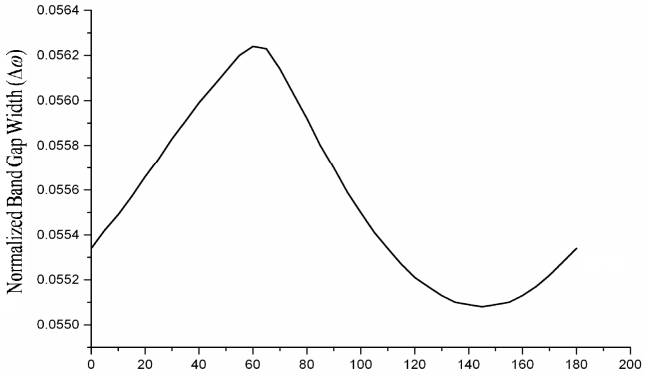
نتیجه گیری

ساختار فوتونی مورد بررسی در این تحقیق ، از میله های دی الکتریک GaAs $(\varepsilon_a = 13.6)$ تشکیل یافته که در زمینه ای ازهوا $(\varepsilon_b = 1)$ قرار گرفته اند. علت استفاده ما از میله هایی با جنس GaAs این است که این ماده خواص نوری جالبی را در ناحیه مادون قرمز از خود نشان می دهد. محاسبات عددی انجام یافته در این تحقیق و برنامه نویسی و الگوریتم مربوط به آن در نرم افزار مطلب نوشته شده است. هدف ما در این مقاله بهینه سازی پارامترهای ساختار فوتونی برای بدست آوردن گاف باند ممنوعه بیشینه است. پارامترهای قابل تنظیم شعاعهای بیضی هستند. فرآیند کار چنین بوده که ρ_1 را ثابت نگه داشته و برای مقادیر مختلف از ρ_2 ساختار باند را محاسبه کرده ایم. این فرآیند برای مقادیر مختلف از ρ_1 تکرار شده است. با نزدیک شدن مقدار شعاعها به یکدیگر (حد دایروی) افزایش نسبی پهنای گافها مشاهده شده است. بزرگترین گاف باند کامل مشاهده شده بازای $\rho_1 = \rho_2 = .24a$ یا $f = .14$ بوده و در محدوده فرکانسی $0.5328 - 0.5885(2\pi c/\omega)$ قرار دارد که پهنای آن نیز برابر با $\Delta\omega = 0.0557(2\pi c/a)$ می باشد. گاف باند کامل بهینه مشاهده شده برای حالت بیضوی بازای $\rho_1 = 0.24a$ و $\rho_2 = 0.23a$ اتفاق می افتد که دارای پهنای $\Delta\omega = 0.0553(2\pi c/a)$ می باشد. این گاف در شکل۳ (a) با نوار سیاه رنگ نشان داده شده است و شکل۳ (b) نیز چگالی حالات فوتونی مربوطه را برای قطبش H نشان می دهد.



شکل۳ : a- ساختار باند فوتونی شبکه هگزاگونال دو بعدی از میله های GaAs در هوا بازای $\rho_1 = 0.24a$ و $\rho_2 = 0.23a$ برای قطبش E (خط پر) و قطبشH (خط بریده) b- چگالی حالات فوتونی برای قطبشH.

در گام بعدی با در نظر گرفتن حالت بهینه بیضوی، تغییرات گاف کامل را بر حسب تابعی از زاویه φ بین محور افقی دو میله واقع در سلول واحد بررسی کرده ایم(شکل۴). نتایج بدست آمده نشان می دهند که پهنای گاف باند کامل در مقایسه با دو حالت بهینه قبلی باز هم افزایش یافته و ماگزیمم مقدار آن برابر با $\Delta\omega = 0.05624(2\pi c/a)$ می باشد. این مقدار بیشینه به ازای زاویه $\varphi = 60^\circ$ رخ می دهد.



شکل۴ : تغییرات پهنای گاف باند کامل به عنوان تابعی از زاویه بین شعاعهای افقی بیضی دوم و بیضی اول.

با اعمال تغییرات مناسب در ساختار کلی چنین کریستال هایی امید آن می رود که بتوان به گاف های باند بزرگتری نیز دست یافت که در فرکانس های بالا نیز متمرکز شده باشند.

مرجعها

[1] A. Mekis, J. C. Chen, I. Kurland, S. Fan, P. R. Villeneuve and J. D. Joannopoulos, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3787 (1996).
[2] M. Plihal and A. A. Maradudin, *Phys. Rev. B* **44**, 8565 (1991).
[3] R. Hillebrand, W. Hergert and W. Harms, *Phys. Stat. Sol. (b)* 217, 981 (2000).
[4] K. Busch and S. John, *Phys. Rev. E* **58**, 3896 (1998).
[5] G. Lehmann and M. Taut, *Phys. Status Solidi. B* **54**, 469 (1972).
[6] J. Hama, M. Watanabe and T. Kato, *J. Phys. Condens. Matter.* **2**, 7445 (1990).