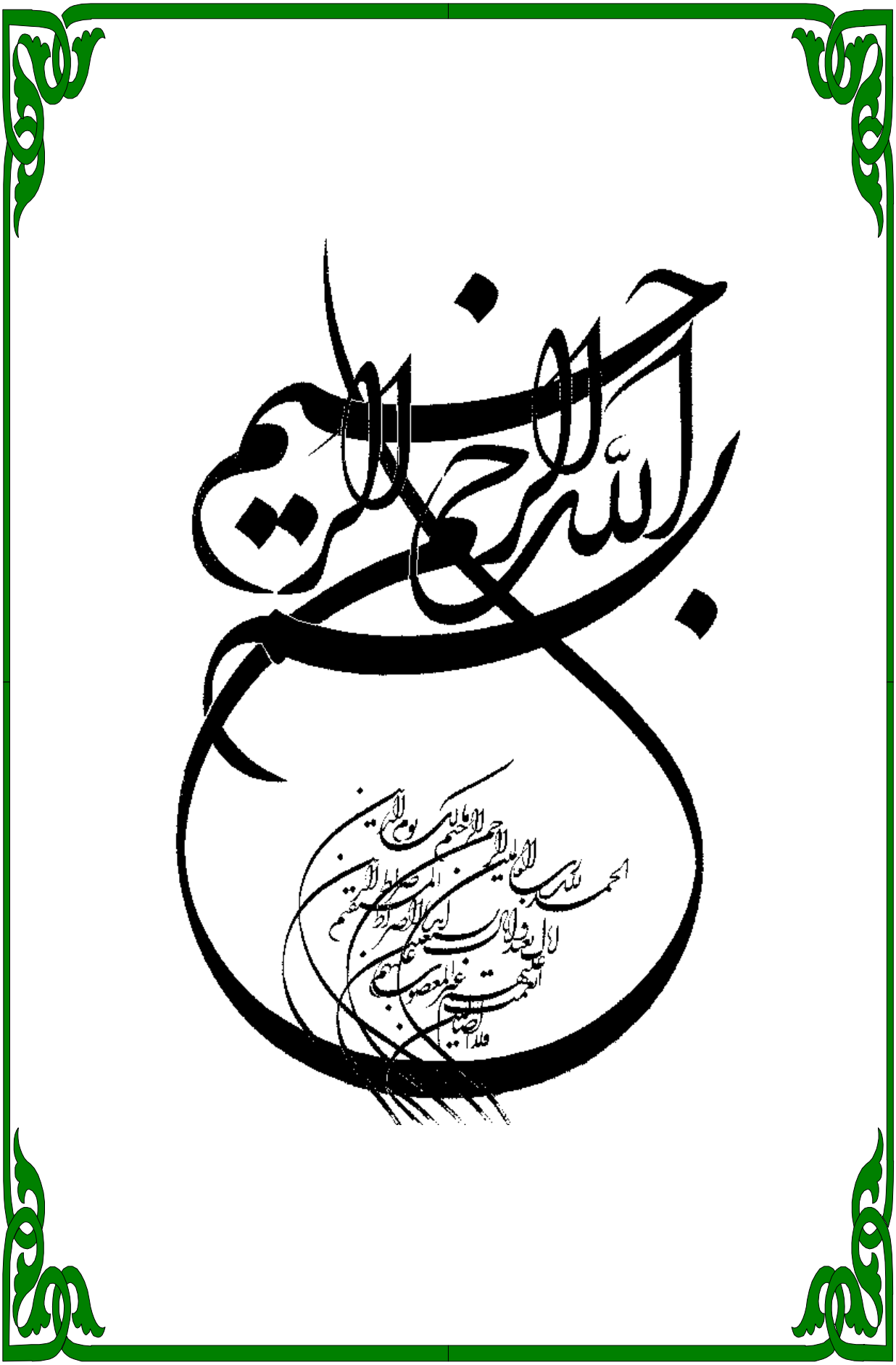

دانشکده فیزیک

گروه حالت جامد و الکترونیک

رساله

برای دریافت درجه دکتری تخصصی(PhD) در رشته فیزیک حالت جامد

عنوان

بررسی خواص بلورهای فوتونی پاشنده دوبعدی

استاد راهنما

دکتر منوچهر کلافی

استاد مشاور

دکتر علی سلطانی والا

پژوهشگر

علی اصغر صدقی

بهمن ۱۳۸۹

ستاره ای بدرخشید و ماه مجلس شد — دل رمیده ما را انیس و مونس شد

نگار من که به مکتب نرفت و خط ننوشت — بغمزه مسئله آموز صد مدرّس شد

با سپاس فراوان از:

- استاد ارجمند جناب آقای دکتر منوچهر کلافی که راهنمایی این پایان‌نامه را بعهده داشتند و بدون شک هر چه آموخته ام از ایشان بوده است.

- استاد عزیز جناب آقای دکتر علی سلطانی والا که مشاورهٔ این پایان‌نامه را به نحو احسن انجام دادند.

- آقایان دکتر محمد آقا بلوری زاده از دانشگاه صنعتی تحصیلات تکمیلی کرمان، دکتر کاظم جمشیدی قلعه از دانشگاه تربیت معلم آذربایجان و دکتر عبدالرحمن نامدار از دانشگاه تبریز که زحمت داوری پایان‌نامه را کشیدند.

- خانوادهٔ عزیزم، بخصوص پدر و مادرم، که درتمام مراحل زندگی همیشه مایه دلگرمی بنده بوده‌اند.

- همسر عزیزم و دختر عزیزم که با صبر و حوصله و پشتیبانی خود مرا در به انجام رساندن این پایاننامه یاری نموده اند.

- تمامی کارکنان پژوهشکدهٔ فیزیک کاربردی و دانشکدهٔ فیزیک دانشگاه تبریز.
- و تمامی دوستانی که مرا یاری کرده‌اند.

- و این تز ناقابل را به همهٔ این عزیزان تقدیم می‌کنم.

نام خانوادگی دانشجو: صدقی **نام:** علی اصغر

عنوان پایان نامه: بررسی خواص بلورهای فوتونی پاشنده دو بعدی

استاد راهنما: آقای دکتر منوچهر کلافی **استاد مشاور:** آقای دکتر علی سلطانی والا

مقطع تحصیلی: دکتری **رشته:** فیزیک **گرایش:** حالت جامد والکترونیک **دانشگاه:** تبریز

دانشکده: فیزیک **تاریخ فارغ التحصیلی:** بهمن ۱۳۸۹ **تعداد صفحه:** ۱۲۱

کلید واژه‌ها: بلورهای فوتونی پاشنده، ضریب شکست، ثابت گذردهی الکتریکی، ثابت نفوذپذیری مغناطیسی، ساختار باند فوتونی، گاف باند فوتونی، باندهای تخت، روش موج تخت تغییر یافته، روش نگاشت دیریکله – نویمن

چکیده:

در این پایاننامه، ما با استفاده از روش موج تخت تغییر یافته ساختار باند بلورهای فوتونی پاشنده فلزی، فلز–دی الکتریک و نیمه هادی را در حالت قطبش E (مد TM) و با استفاده از روش نگاشت دیریکله–نویمن ساختار باند بلورهای فوتونی پاشنده فلزی را در حالت قطبش H (مد TE) و بلورهای فوتونی مغناطیسی را در حالت قطبش E مطالعه کرده ایم. شبکه های مختلفی با شکل، اندازه و جهتگیریهای مختلف برای میله ها در نظر گرفته شده و اثر تغییر ثابت دی الکتریک ماده زمینه بر روی ساختارهای باند فوتونی بررسی شده است. همچنین خواص باندهای تخت در بلورهای فوتونی فلزی و مغناطیسی نیز مطالعه شده است.

نتایج عمده بدست آمده را می توان به این صورت خلاصه کرد که در بلورهای فوتونی فلزی بیشترین مقدار پارامتر نسبت پهنا به مرکز گاف (ω_R) مربوط به گاف باند فوتونی TM در ساختار شش گوش از میله های فلزی شش گوش که در زمینه هوا قرار گرفته اند، بدست می آید. به علاوه دوران مراکز پراکندگی غیر دایروی به طور قابل ملاحظه ای باعث افزایش اندازه نسبی گاف باند فوتونی در شبکه مربعی از میله های فلزی مربعی و شبکه مثلثی از میله های فلزی بیضوی می شود. همچنین یک توافق خوب بین قله های تشدید پلاسمونهای سطحی مربوط به مدل میله فلزی واحد و باندهای تخت محاسبه شده از ساختار باند بلور فوتونی فلزی در حالت قطبش H وجود دارد. همچنین توزیع میدان این

مدها در سطح مشترک بین میله های فلزی و هوا به شدت جایگزیده می باشد. در بلورهای فوتونی فلز–دی الکتریک با افزایش ثابت دی الکتریک ماده زمینه و نیز اندازه میله ها می توان هم تعداد گافهای باند را افزایش داده و هم پهنای آنها را بیشتر کرد. در بلورهای فوتونی نیمه هادی بر خلاف بلورهای فوتونی فلزی برای قطبش E گاف ممنوعه بزرگ که در زیر اولین باند مجاز قرار می گیرد، وجود ندارد. همچنین در بلورهای فوتونی نیمه هادی یک گاف ممنوعه موسوم به گاف پلاریتونی و باندهای مجاز در اطراف آن ایجاد می شود که در بلورهای فوتونی فلزی دیده نمی شود. ساختار باند فوتونی بلورهای فوتونی مغناطیسی که تحت تاثیر یک میدان مغناطیسی خارجی استاتیک قرار دارند، دارای دو گروه از باندهای تخت برای قطبش E می باشد. توزیع میدان مدهای مربوط به گروه اول در سطح مشترک میله های فریت و زمینه هوا بسیار جایگزیده بوده و گروه دوم از باندهای تخت دارای مشخصه مدهای کاواک تشدید مربوط به موجبر فلزی دایروی پر شده از ماده فریت می باشند.

مقدمه ۱

فصل اول : بررسی منابع (پایه های نظری و پیشینه پژوهش)

۱-۱ تاریخچه..... ۵
۱-۲ مشخصات سیستم‌های متناوب..... ٦
۱-۲-۱ شبکه های بلوری..... ٦
۱-۲-۲ یاخته واحد بسیط..... ۱۱
۱-۲-۳ ساختمان بلوری، شبکه با یک پایه..... ۱۵
۱-۲-٤ بلورهای محدود و نامحدود..... ۱۵
۱-۲-۵ شبکه معکوس..... ۱٦
۱-۲-٦ منطقه بریلوئن..... ۱۹
۱-۳ پارامترها و ویژگی‌های مهم بلورهای فوتونی..... ۲۰
۱-۳-۱ ابعاد..... ۲۰
۱-۳-۲ الکترو مغناطیس..... ۲۲
۱-۳-۳ اساس نور..... ۲۳
۱-۳-٤ گذردهی..... ۲٤
۱-۳-۵ نفوذ پذیری..... ۲٤
۱-٤ خواص نوری بلورهای فوتونی..... ۲۵
۱-٤-۱ مقدمه..... ۲۵
۱-٤-۲ ساختار باند..... ۲٦
۱-٤-۳ گاف باند فوتونی..... ۲۷
۱-٤-٤ منشأ فیزیکی گاف‌های باند فوتونی..... ۳۰
۱-۵ اصول اولیه محاسبه ساختار باند فوتونی..... ۳۳

۱-۵-۱ پتانسیل (تابع دی الکتریک) پریودیک و قضیه بلوخ.....۳۳
۱-۵-۲ روش بسط موج تخت.....٤٠
۱-۵-۳ عامل ساختار هندسی.....٤۲

فصل دوم : مبانی و روشها

۲-۱ مقدمه.....٤٥
۲-۲ روش خطی سازی.....٤۷
۲-۳ روش اختلال.....٤۹
۲-٤ روش بسط موج تخت تغییر یافته.....٥٠
۲-٥ روش پایه های بسط داده شده.....٥٤
۲-٦ روش نگاشت دیریکله-نویمن.....٥٥
۲-٦-۱ شبکه مربعی.....٥٦
۲-٦-۲ شبکه مثلثی.....٦۲

فصل سوم : نتایج و بحث

۳-۱ مقدمه.....۷۱
۳-۲ ساختار باند بلورهای فوتونی فلزی با شبکه های مختلف از میله هایی با سطح مقطعهای مختلف.....۷۲
۳-۲-۱ شبکه مربعی.....۷٤
۳-۲-۲ شبکه مثلثی.....۷۸

۳-۲-۳ شبکه شش گوش.....۸۲

۳-۳ تاثیر دی الکتریک زمینه بر ساختار باند بلورهای فوتونی فلز-دی الکتریک در قطبش E.....۸۹

۳-٤ بررسی ساختار باند بلورهای فوتونی نیمه هادی.....۹٦

۳-۵ بررسی ساختار باند فوتونی و خواص باندهای تخت در بلورهای فوتونی فلزی در حالت قطبش H.....۹۹

۳-٦ بررسی ساختار باند فوتونی و خواص باندهای تخت در بلورهای فوتونی مغناطیسی در حالت قطبش E که تحت تاثیر یک میدان مغناطیسی خارجی قرار گرفته است.....۱۰۵

۳-٦-۱ پلاسمون سطحی مغناطیسی.....۱۰۹

۳-٦-۲ مدهای کاواک تشدید.....۱۱۳

نتیجه گیری.....۱۱۵

پیشنهادات.....۱۱٦

منابع.....۱۱۹

فهرست شکل ها

فصل اول

شکل۱-۱- یک شبکه براوه دوبعدی عمومی بدون تقارن ویژه.....۷

شکل۱-۲- شبکه براوه سه بعدی مکعبی ساده.....۷

شکل۱-۳- رئوس یک شش ضلعی دوبعدی که تشکیل شبکه براوه نمی دهند.....۸

شکل۱-٤- شبکه براوه هگزاگونال ساده.....۸
شکل۱-۵- چندین انتخاب ممکن از بردارهای اولیه برای یک شبکه براوه دوبعدی.....۹
شکل۱-٦- شبکه براوه مکعبی مرکز حجمی (bcc).....۱۰
شکل۱-۷- چند راه انتخاب سلول اولیه برای یک شبکه براوه دو بعدی.....۱۲
شکل۱-۸- دو نوع سلول وا حد ممکن برای یک شبکه براوه دو بعدی.....۱۲
شکل۱-۹- سه بردار اولیه برای شبکه براوه bcc.....۱۲
شکل۱-۱۰- سلولهای واحد بسیط و قراردادی برای شبکه براوه fcc.....۱۳
شکل۱-۱۱- سلولهای واحد بسیط و قراردادی برای شبکه براوه bcc.....۱۳
شکل۱-۱۲- سلول ویگنر- سایتز برای یک شبکه براوه دو بعدی.....۱٤
شکل۱-۱۳- منطقه اول بریلوئن برای شبکه های bcc و fcc.....۲۰
شکل۱-۱٤- منطقه اول بریلوئن دوبعدی برای شبکه ها ی هگزاگونال و سه گوش.....۲۰
شکل۱-۱۵- بلور فوتونی یک بعدی، مرکب از لایه‌های مواد یک در میان با ثابت‌های دی‌الکتریک متفاوت.....۲۱
شکل۱-۱٦- بلور فوتونی دوبعدی با شبکهٔ مربعی از استوانه‌های دی‌الکتریک.....۲۲
شکل۱-۱۷- بلور فوتونی سه بعدی با شبکه مثلثی.....۲۲
شکل۱-۱۸- بردارهای اصلی و برخی نقاط شبکهٔ وارون برای یک شبکهٔ مربعی دو بعدی.....۲۷
شکل۱-۱۹- ساختار باند در راستای ΓX با طیف عبوری محاسبه شده برای مد TE در شبکه مربعی.....۲۸
شکل۱-۲۰- ساختار باند به ازای مقادیر مختلف کنتراست δ، برای یک شبکهٔ مربعی از استوانه‌هایی با شعاع $r = 0.3a$.....۲۹
شکل۱-۲۱- ساختارهای باند فوتونی برای سه فیلم چند لایهٔ متفاوت که ضخامت همهٔ

لایه‌ها a ۰/۵ است..... ۳۰

شکل۱-۲۲- نمایش مدهای مربوط به پایین‌ترین گاف باند از نمودار میانی شکل ۱-۲۱..... ۳۲

شکل۱-۲۳- ساختار باند فوتونی یک فیلم چند لایه با ثابت شبکهٔ a و لایه‌های یک در میان با پهنای مختلف..... ۳۳

فصل دوم

شکل۲-۱- نمودار تغییرات ثابت دی الکتریک فلزات بر حسب فرکانس..... ۵۱

شکل۲-۲- منطقه اول بریلوئن مربوط به شبکه مربعی به همراه نقاط با تقارن بالا..... ۵۳

شکل۲-۳- منطقه اول بریلوئن شبکه مربعی در دو حالت دوران و بدون دوران دستگاه مختصات..... ۵۳

شکل۲-٤- سلول واحد مربعی برای یک شبکه مربعی..... ۵۹

شکل۲-۵- سلول واحد شش گوش برای یک شبکه مثلثی..... ٦٤

شکل۲-٦- منطقه اول بریلوئن مربوط به شبکه مثلثی به همراه نقاط با تقارن بالا..... ٦٦

فصل سوم

شکل۳-۱- تغییرات ω_R بر حسب فاکتور پرشدگی، f ، در شبکه های مربعی از میله های فلزی در زمینه هوا و حفره های هوا در زمینه فلز برای گاف باند فوتونی بین باندهای اول و دوم..... ۷۵

شکل۳-۲- ساختار باند فوتونی برای شبکه مربعی از میله های فلزی مربعی در زمینه هوا با مقادیر بهینه $R = 0.71a$ و $\theta = 39^\circ$..... ۷٦

شکل۳-۳- ساختار باند فوتونی برای شبکه مربعی از حفره های هوای دایروی با شعاع $R = 0.34a$ در زمینه فلز..... ۷۷

شکل۳-٤- تغییرات ω_R بر حسب فاکتور پرشدگی، f ، در شبکه های مثلثی از میله های فلزی در زمینه هوا و حفره های هوا در زمینه فلز برای گاف باند فوتونی بین باندهای اول و دوم.....۷۹

شکل۳-۵- ساختار باند فوتونی برای شبکه مثلثی از میله های فلزی بیضوی در زمینه هوا با مقادیر بهینه $R_1 = 0.23a$ ، $R_2 = 0.5a$ و $\theta = 58^\circ$ و حفره های هوای بیضوی در زمینه فلز با مقادیر بهینه $R_1 = 0.31a$ ، $R_2 = 0.37a$ و $\theta = 60^\circ$.....۸۱

شکل۳-٦- تغییرات ω_R بر حسب فاکتور پرشدگی، f ، در شبکه های شش گوش از میله های فلزی در زمینه هوا و حفره های هوا در زمینه فلز برای گاف باند فوتونی بین باندهای دوم و سوم.....۸۳

شکل۳-۷- ساختار باند فوتونی برای شبکه شش گوش از میله های فلزی شش گوش در زمینه هوا با پارامترهای بهینه $R = 0.57a$ و $\theta = 30^\circ$.....۸٤

شکل۳-۸- ساختار باند فوتونی برای شبکه شش گوش از حفره های هوای دایروی با شعاع $R = 0.37a$ در زمینه فلز.....۸٦

شکل۳-۹- ساختار باند فوتونی شبکه مربعی از میله های فلزی مربعی با گاف باند بیشینه اول به ازای پارامترهای بهینه $f = 0.923$ و $\varepsilon_b = 11$.....۹۰

شکل۳-۱۰- تغییرات پهنای چهار گاف اول بر حسب ثابت دی الکتریک در بلور فوتونی فلز-دی الکتریک با شبکه مربعی از میله های فلزی مربعی.....۹۱

شکل۳-۱۱- تغییرات سه بعدی پهنای گاف باند اول بر حسب ثابت دی الکتریک زمینه و کسر پر شدگی در بلور فوتونی فلز-دی الکتریک با شبکه مربعی از میله های فلزی مربعی.....۹۲

شکل۳-۱۲- ساختار باند بلور فوتونی فلز-دی الکتریک با شبکه مثلثی از میله های

فلزی دایروی در زمینه ای با ثابتهای دی الکتریک $\varepsilon_b = 1$ و $\varepsilon_b = 2$.....۹۳

شکل ۳-۱۳- ساختار باند بلور فوتونی فلز-دی الکتریک با شبکه مثلثی از میله های فلزی دایروی در زمینه ای با ثابت دی الکتریک $\varepsilon_b = 12$.....۹٤

شکل۳-۱٤- تغییرات فرکانس قطع ولبهٔ باندهای اول و دوم بر حسب ثابت دی الکتریک زمینه در بلور فوتونی فلز-دی الکتریک با شبکه مثلثی از میله های فلزی دایروی.....۹۵

شکل۳-۱۵- وابستگی پهنای نسبی گاف باند فوتونی به تغییرات ثابت دی الکتریک زمینه برای گاف باندهای اول و دوم در بلور فوتونی فلز-دی الکتریک با شبکه مثلثی از میله های فلزی دایروی.....۹۵

شکل۳-۱٦- ساختار باند فوتونی شبکه مربعی در قطبش E و به ازای $f = 0.282$ برای میله های دی الکتریک با $\varepsilon_a = \varepsilon_0 = 12.66$ و میله هایی از جنس نیمه هادی قطبی GaAs با $\varepsilon_0 = 12.66$، $\varepsilon_\infty = 10.9$ و $\omega_T = 0.23(2\pi c/a)$ در زمینه ای از هوا.....۹۸

شکل۳-۱۷- ساختار باند فوتونی مد TE برای شبکه مربعی از میله های فلزی دایروی با شعاع $R = 0.3a$ در زمینه هوا.....۱۰۰

شکل۳-۱۸- تغییرات A_m/B_m بر حسب فرکانس برای مقادیر مختلف مرتبه تابع بسل، m، از ۲ تا ۱۱ برای یک میله فلزی دایروی واقع در زمینه هوا.....۱۰۱

شکل۳-۱۹- تغییرات فرکانس تشدید بر حسب مقادیر مختلف مرتبه تابع بسل، m، برای یک میله فلزی دایروی واقع در زمینه هوا با شعاعهای مختلف.....۱۰۲

شکل۳-۲۰- ساختار باند فوتونی مد TE برای شبکه مربعی از میله های فلزی دایروی در ناحیه حاوی باندهای تخت در محدوده فرکانسی $\omega a / 2\pi c = 0.690 - 0.708$.....۱۰۲

شکل۳-۲۱- توزیع میدان مربوط به برخی مدهای پلاسمونی سطحی در نقطه Γ..۱۰٤

شکل۳-۲۲- بلور فوتونی دوبعدی با شبکه مربعی از میله های فریت دایروی و سلول واحد مربوطه.....۱۰٦

شکل۳-۲۳- ساختار باند فوتونی یک بلور فوتونی مغناطیسی با شبکه مربعی از میله های فریت دایروی واقع در زمینه هوا برای مد TM و وابستگی تراوائی مغناطیسی میله ها به فرکانس بهنجار شده.....۱۰۸

شکل۳-۲٤- تغییرات A_m/B_m بر حسب فرکانس برای مقادیر مختلف از مرتبه تابع بسل، m برای یک میله فریت دایروی واقع در زمینه هوا.....۱۱۰

شکل۳-۲۵- وابستگی فرکانس تشدید به مرتبه تابع بسل m برای شعاعهای مختلف از میله واحد.....۱۱۰

شکل۳-۲٦- ناحیه فرکانسی باندهای تخت در محدوده فرکانسی $\omega a / 2\pi c = 0.151 - 0.161$ در جهت ΓX و بزرگنمایی شده ناحیه پر تراکم از باندهای تخت در محدوده $\omega a/2\pi c = 0.1593$.....۱۱۱

شکل۳-۲۷- توزیع میدان مدهای پلاسمون سطحی مغناطیسی.....۱۱۲

شکل۳-۲۸- ناحیه فرکانسی باندهای تخت در محدوده $\omega a / 2\pi c = 0.109 - 0.114$ و در جهت ΓX.....۱۱۳

شکل۳-۲۹- توزیع میدان مدهای کاواک تشدید در هشت باند تخت اول.....۱۱۵

فهرست جدولها

جدول۳-۱- پارامتر نسبت پهنا به مرکز گاف بیشینه و گاف باند فوتونی وابسته به آن و فرکانس مرکز گاف در سه نوع شبکه از میله های فلزی در زمینه هوا با پارامترهای هندسی بهینه.....۸۷

جدول۳-۲- پارامتر نسبت پهنا به مرکز گاف بیشینه و گاف باند فوتونی وابسته به آن و فرکانس مرکز گاف در سه نوع شبکه از حفره های هوا در زمینه فلز با پارامترهای هندسی بهینه.....۸۸

جدول۳-۳- پهنای چهار گاف اول بر حسب پارامترهای بهینه در بلور فوتونی فلز-دی الکتریک با شبکه مربعی از میله های فلزی مربعی.....۹۱

جدول۳-٤- مقادیر محاسبه شدهٔ فرکانس قطع، پهنا و پهنای نسبی گاف باندهای اول و دوم به ازای مقادیر مختلف ثابت دی الکتریک ماده زمینه در بلور فوتونی فلز-دی الکتریک با شبکه مثلثی از میله های فلزی دایروی.....۹٦

جدول۳-۵- مدهای تشدید میله فلزی واحد به ازای مقادیر مختلف مرتبه تابع بسل، m، و فرکانسهای متناظر با آنها که از محاسبه ساختار باند فوتونی یک بلور فوتونی فلزی به دست آمده اند.....۱۰۳

جدول۳-٦- مدهای کاواک تشدید و ویژه فرکانسهای متناظر با آنها برای هشت مد اول به ترتیب افزایش مرتبه.....۱۱۵

مقدمه

نمونه ای از ساختار فوتونی، بلور فوتونی[1] است که به منظور کنترل امواج الکترو مغناطیسی در نظر گرفته شده است. بلورهای فوتونی طبقه خاصی از ساختارهای مصنوعی با خواص دی الکتریک متناوب می باشند که مقیاس آن در اندازه طول موج نور تابشی است. این بلورها می توانند ترکیبی از مواد دی الکتریک با ضرایب شکست مستقل از فرکانس یا ترکیبی از این نوع مواد با مواد پاشنده[2] از قبیل فلزات و نیمه هادیها و مواد مغناطیسی با ضرایب شکست وابسته به فرکانس باشند. نوع اول را بلورهای فوتونی دی الکتریک یا غیر پاشنده و نوع دوم را بلورهای فوتونی پاشنده خواهیم گفت. بلورهای فوتونی آنچه را که نیمه هادیها در مقابل امواج الکترون در الکترونیک انجام می دهند در مورد امواج نور در فوتونیک انجام می دهند. این ساختارهای مصنوعی بلورین راههای جدید و منحصر به فردی را برای کنترل تعداد زیادی از جنبه های تابش الکترو مغناطیسی ارائه می دهند. این ساختارها مشکل مربوط به کنترل گسیل خودبخودی از اتمها و مولکولها را برطرف می کنند و با توجه به خواصی که دارند از آنها می توان به عنوان ابزارهایی با کارایی بالا در ارتباطات و تولید تراشه های تمام نوری استفاده کرد. در واقع بلورهای فوتونی ابزار خوش آتیه ای جهت کنترل نور در قطعات نوری مجتمع می باشند. از ویژگیهای مهم بلورهای فوتونی پاشنده نیز می توان به درصد جذب بسیار بالا در آنها اشاره کرد که از این خاصیت می توان در پدیده فوتوولتائیک، تابش گرمایی و آشکار سازهای نوری استفاده کرد. در طبیعت نمونه‌هایی وجود دارند که از آنها به عنوان بلورهای فوتونی نام برده نمی‌شود ولی همان خواصی را دارند که بلورهای فوتونی نیز دارا می‌باشند. به عنوان مثال، می‌توان به سنگی به نام اوپال[3] اشاره کرد که دارای شکاف‌های ریزی در بدنهٔ خود می‌باشد و یا می‌توان به پروانه‌ها اشاره کرد که بال‌های آن شبیه بلورهای فوتونی است، یعنی دارای روزنه‌های بسیار ریز است که وقتی نور به پرنده می‌تابد بال‌های پروانه به رنگ‌های مختلفی در می‌آید و بیان

1- Photonic crystal
2- Dispersive materials
3- Opal

کنندهٔ این حقیقت است که برخی از طول موج‌های نور، منعکس شده و برخی منتشر می‌شوند. عمل انعکاس در نتیجه وجود همان گاف باند ممنوعه می باشد[۱]. از نقطه نظر فیزیک نظری، بلورهای فوتونی توسط ساختار باند[۱] شان توصیف می‌شوند و مشخصهٔ عمدهٔ بلورهای فوتونی گاف باند[۲] یا نوار ممنوعه آنها (ناحیهٔ فرکانسی که انتشار مدهای الکترومغناطیسی در آن ممنوع است) می‌باشد. معمولا گاف های باند ایجاد شده در بلور های فوتونی دی الکتریک در ناحیه مادون قرمز می باشد و بیشتر تلاش ها برای این است تا بتوان مواد دی الکتریک منظم ساخت که گاف باند در آنها در ناحیه مرئی از طیف نوری واقع شود زیرا در این ناحیه است که بیشتر مواد ثابت های دی الکتریک وابسته به فرکانس دارند. در نزدیک ناحیه های مرئی و مادون قرمز برای دیدن گستره وسیعی از پدیده های خطی و غیرخطی می توان از انواع مختلفی از لیزرها و آشکارسازها استفاده کرد. در کاربردهای عملی ساختارهای باند، گاف باند فوتونی به صورت گستره‌ای جهت ایجاد موجبرهای بلور فوتونی، سویچ‌های نوری فراسریع، صفحات براگ بازتابشی و آشکارسازها به کار برده می شود. توانایی و کاربردهای بالقوه اثرات الکترواپتیکی در کنترل ساختارهای باند و گاف باند فوتونی حائز اهمیت است[۲]. اگر چه بلورهای فوتونی سه بعدی ممکن است کاربردهای بیشتری داشته باشند، اما بلورهای فوتونی دو بعدی و یک بعدی نیز مورد توجه بسیاری واقع شده‌اند، زیرا از نظر ساخت آسانتر بوده و ممکن است در ابزارهای نوری و الکتریکی مورد استفاده واقع شوند.

هدف اصلی ما در این پایاننامه مطالعه خواص بلورهای فوتونی پاشنده دو بعدی می باشد. به منظور شناخت خواص بلورهای فوتونی و بکار بردن آنها ضروری است تا ساختار باند بلورهای فوتونی را بشناسیم. چندین روش نظری برای مطالعه ساختارهای باند فوتونی بلورهای فوتونی پاشنده با ثابتهای گذردهی الکتریکی و نفوذ پذیری مغناطیسی وابسته به فرکانس پیشنهاد شده است که می توان روش بسط مدهای هدایت شده تغییر یافته[۳]، روش کورینگا-کوهن-روستوکر[۴]، روش

1- Band structure
2- Band gap
3- Revised guided mode expansion method
4- Korringa-Kohn-Rostoker

پراکندگی چندگانه[1] و روش چند قطبی چندگانه[2] را نام برد. اخیراً شکل تغییر یافته روش موج تخت[3] پیشنهاد شده است که قادر است ساختار باند مواد پاشنده دلخواه را محاسبه کند. مشکل عمده این روش، محاسبه ساختار باند در مسیرهایی از منطقه بریلوئن است که باید هر دو مؤلفه بردار موج بدست آورده شود. در این پایاننامه ما یک راه حل مناسب را برای رفع این مشکل معرفی کرده ایم که نتیجه آن کاهش قابل ملاحظه زمان محاسبات می باشد. ما از این روش برای محاسبه ساختار باند بلورهای فوتونی پاشنده برای مد TM (میدان الکتریکی موازی با محور میله ها) استفاده کرده ایم زیرا این روش برای مد TE (میدان مغناطیسی موازی با محور میله ها) همگرا نمی شود. اخیراً روش نگاشت دیریکله–نویمن[4] پیشنهاد شده است که ابزار قدرتمندی برای محاسبه ساختار باند بلورهای فوتونی پاشنده در هر دو حالت مدهای TM و TE می باشد. نگاشت دیریکله–نویمن عملگری است که میدانهای الکتریکی و مغناطیسی را در روی مرزهای سلول واحد به مشتقات قائم آنها تصویر می کند. در فصل اول مفاهیم اساسی در مورد شبکه های بلوری، سیستمهای متناوب و امواج الکترومغناطیسی را بیان کرده و در فصل دوم به تشریح روشهای بررسی شده جهت محاسبه ساختار باند فوتونی بلورهای فوتونی پاشنده خواهیم پرداخت. و بالاخره در فصل سوم ساختار باند فوتونی را در ساختارهای گوناگون از جمله مربعی[5]، مثلثی[6] و شش گوش[7] بدست آورده و مقایسه ای بین گافهای باند ایجاد شده در آنها انجام خواهیم داد. همچنین اشکال و جهتگیریهای مختلفی را نیز برای حفره ها یا میله ها در نظر خواهیم گرفت. علاوه بر این موارد می خواهیم با تغییر مقدار ثابت دی الکتریک ماده زمینه گاف باند را تنظیم و بهینه کنیم. بررسی ماهیت باندهای تخت[8] در بلورهای فوتونی فلزی و مغناطیسی نیز از مواردی است که در فصل سوم به آن خواهیم پرداخت.

1- Multiple scattering method
2- Multiple multipole method
3- Revised plane wave method
4- Dirichlet to Neumann map method
5- Square
6- Triangular
7- Hexagonal
8- Flat bands

فصل اول:

بررسی منابع (پیشینه پژوهش)

۱-۱- تاریخچه

تاریخچه بلورهای فوتونی را باید در دو پیشنهاد و نظریه مستقل که توسط یابلونوویچ و جان ارائه شد جستجو کرد[۳و٤]. یابلونوویچ می خواست انتقال خودبخودی را به منظور افزایش بهره در لیزر نشان دهد در حالیکه جان قصد داشت موضعی شدن و تراکم نور را ایجاد کند. به نظر یابلونوویچ اگر یک ساختار دی الکتریک متناوب سه بعدی وجود داشته باشد که دارای گاف باند فوتونی نزدیک به باند الکترونی باشد آنگاه این اهداف تحقق می یابند. برای این منظور در مدت دو سال ۲۱ نوع ساختار مختلف ساخته شد که در نهایت ساختار مکعبی مرکز سطحی (fcc) که دارای گاف باند فوتونی کامل بود شناسایی شد[۵]. تا کنون ساختارهای باند فوتونی با روشهای گوناگونی محاسبه شده اند. یکی از این روشها استفاده از تقریب موج اسکالر می باشد. این تقریب بیشتر برای محاسبه ساختار باند الکترونی مورد استفاده قرار گرفته بود. اگر چه الکترونها و فوتونها از لحاظ نوع اندرکنش خیلی با یکدیگر فرق دارند اما انتشار فوتونها با معادلات کاملاً مشابهی بررسی شده بود. پس از مدتی روشهایی صرفاً در مورد فوتونها بدست آورده شد و تئوریسینها یک روش موج تخت برداری برای معادلات ماکسول معرفی کردند[٦-۹]. با آنکه نتایج توافق خوبی با کارهای تجربی اخیر آن زمان داشت اما حاکی از آن بود که گاف باند شناسایی شده کامل نیست بلکه یک شبه گاف می باشد. یکی از مقالات[۸] پیش بینی کرد که ساختار الماسی[1] ممکن است گاف باند کامل داشته باشد. بالاخره نتیجه این شد که یک بلور فوتونی با گاف باند کامل ساخته شد[۱۰]. ساختار این بلور فوتونی شکلی از ساختار الماسی است که به خاطر کشف کننده آن یابلونوویت[2] نامگذاری شده است.

1- Diamond
2- Yablonovite

۱-۲- مشخصات سیستم‌های متناوب

۱-۲-۱- شبکه های بلوری[۱۱-۱۳]

در ابتدا لازم است فرق یک شبکه براوه[۲] و غیر براوه را بدانیم تا دسته بندی شبکه ها شکل بهتری به خود بگیرد. شبکه براوه اساس درک یک جامد بلورین است و ترتیب تناوبی را که در **آن** واحدهای تکراری شبکه مرتب شده اند، مشخص می سازد. واحدها ممکن است اتمهای منفرد، گروهی از اتمها، مولکولها، یونها و غیره باشند ولی شبکه براوه فقط هندسه ساختار تناوبی زمینه را بدون توجه به این که واحدهای واقعی چه هستند، توصیف می کند. دو تعریف برای شبکه براوه وجود دارد که هردو معادل هم می باشند:

a) شبکه براوه ترتیب نا محدودی از نقاط جدا از هم است بطوریکه از هر کدام از این نقاط که شبکه را بررسی کنیم، ترتیب و جهت گیری نقاط دقیقا یکسان می باشد.

b) یک شبکه براوه سه بعدی شامل تمام نقاط با بردار مکان $\vec{R}$ است که در آن $\vec{R}$ به صورت زیر می باشد:

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \qquad (۱-۱)$$

$\vec{a}_1$، $\vec{a}_2$ و $\vec{a}_3$ سه بردار دلخواه هستند که در یک صفحه قرار ندارند و n_1 ، n_2 و n_3 اعداد صحیح می باشند. بدیهی است برای شبکه دوبعدی تنها $\vec{a}_1$ و $\vec{a}_2$ را که در یک صفحه قرار دارند، داشته و برای شبکه یک بعدی تنها بردار $\vec{a}_1$ را خواهیم داشت. به این ترتیب برای رسیدن به نقطه $\sum_{i=1}^{3} n_i \vec{a_i}$ کافی است n_i بار طول$|\vec{a}_i|$ را در جهت $\vec{a}_i$ طی کنیم. بردارهای $\vec{a}_i$ در رابطه ۱-۱ بردارهای بسیط[۳]

1- Crystal lattices
2- Bravais lattice
3- Primitive vectors