Archive of SID

مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران

مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۷، شمارهٔ ۳، پاییز ۱۳۸۶

یادداشت پژوهشی

تعیین تابع توزیع بهینهٔ نمار شکست و عمق نفوذ آنیونها در بلور نوری آلومینای حفره‌دار

حمیده کاویانی، عبدالعلی رمضانی و محمد الماسی کاشی

پژوهشکده علوم و فناوری نانو، دانشگاه کاشان

پست الکترونیکی: rmzn@kashanu ac.ir

(دریافت مقاله: ۸۵/۱۰/۲۸ ؛ دریافت نسخهٔ نهایی: ۸۶/۶/۱۰)

چکیده

با استفاده از روش مرتبهٔ N و محاسبات ساختار نواری بلور نوری آلومینای حفره‌دار در راستای ΓX و بررسی تطابق نتایج آن با نتایج تجربی اندازه‌گیری ضرایب جذب و بازتاب، تغییرات نمار شکست آلومینا در ناحیه اکسید خارجی حول حفره‌ها مورد مطالعه قرار گرفت. در این محاسبات برای توزیع آنیونهای اسیدی فسفات در ناحیه اکسید خارجی تابعیت گاوسی در نظر گرفته شد و تعیین تغییرات نمار شکست، منجر به مشخص شدن عمق نفوذ آنیونها در این ناحیه گردید. با تعیین ترکیب نمار شکست آلومینا در ناحیه اکسید خارجی، ساختار نواری این بلور نوری برای چهار نوار اول در هر دو مد TE و TM محاسبه شد که نتایج محاسبات وجود یک گاف نواری کامل و باریک در مد TM را نشان می‌دهد.

واژه‌های کلیدی: بلور نوری، ساختار نواری نوری، آلومینای حفره دار

۱. مقدمه

حرکت الکترون و حفره در شبکهٔ تناوبی یک بلور نیمه هادی منجر به تشکیل نوارهای انرژی مجاز و ممنوع می‌شود. به طور مشابه، عبور فوتون از میان یک ساختار تناوبی مصنوعی با ضریب شکست متفاوت منجر به تشکیل نواحی انرژی مجاز می‌شود که به وسیله یک نوار انرژی ممنوع (گاف نواری نوری[۱]) از هم جدا شده‌اند. یک محیط دی‌الکتریک که ساختار آن به این صورت طراحی شده باشد یک بلور نوری نامیده می‌شود و می‌تواند مانع از عبور نور با طول موجهای واقع در گستره گاف نواری نوری شود [۱ و ۲]. در بلورهای نوری ایجاد ترازهای انرژی در گاف نواری (یعنی نا کاملی یا نقص بلور نوری) امکان پذیر است و این معادل قطع تناوب ایده‌آل و یا ورود ناخالصی در شبکهٔ بلوری یک نیمه هادی می‌باشد.

قابلیت کنترل جریان الکترونها در یک ماده نیمه هادی منجر به ساخت انواع قطعات نیمه هادی شده است، به طور مشابه قابلیت کنترل انتشار نور در یک بلور نوری (حتی با انعطاف پذیری بیشتر) می‌تواند به تحولی بزرگ در ساخت ادوات نوری منجر شود. بلورهای نوری به لحاظ کنترل فوق‌العاده بر روی جریان نور کاربردهای متعددی در صنایع اپتیک جهت ساخت لیزرها، افزایش راندمان و کاهش ولتاژ آنها، استفاده در صنایع مخابرات فیبر نوری برای تغییر جهت بدون اتلاف نور، تغییر خصوصیات فیبر نوری باگرما برای تولید کلیدهای نوری گرمایی، ساخت آینه‌ها با انعکاس فوق‌العاده بالا در بازه فرکانس محدود در لیزرها دارد [۳]. با توسعه نانوفناوری انتظار می‌رود تولید بلورهای نوری در بازه‌های فرکانسی مختلف تسهیل گردد و در آینده این ادوات سهم چشمگیری در طراحی رایانه‌های نوری داشته باشند.

۱. PBG (Photonic Band Gap)

www.SID.ir

Archive of SID

پس از پیشنهاد ایده بلورهای نوری در سال ۱۹۸۷ [۴] کوششهای زیادی جهت ساخت این بلورها در یک، دو و سه بعد انجام گرفت و امکان تحقیقات تجربی در این زمینه را فراهم آورد. ساخت بلورهای نوری سیلیکانی بر اساس تکنولوژی نیمه‌هادی [۵]، استفاده از روش الواری [۶]، روش لیتوگرافی [۷] و بهره گیری از آرایش کره‌های دی الکتریک محلول [۸] از جمله روشهای ساخت مطرح در حال حاضر می‌باشد.

در کنار توسعه روشهای ساخت، مطالعات گسترده‌ای در مورد تعیین ساختار نواری بلورهای نوری به عمل آمده است و ساختار گاف نواری برای محیطهای ناهمگن و تناوبی مختلف به دست آمده است. علاوه بر استفاده از روشهای به کار رفته در فیزیک ماده چگال برای تعیین ساختار نواری الکترونی بلورها نظیر روش موج تخت[۱] [۹،۱۰]، روشهایی با کارایی بهتر و سادگی بیشتر نظیر روش ماتریس انتقال[۲] [۱۱] و روش مرتبهٔ $\underline{\underline{N}}$[۳] [۱۲،۱۳] برای تعیین ساختار نواری بلوری پا به عرصه گذاشته‌اند.

ساختار آلومینای حفره‌دار آندایز شده، یکی از ساختارهای طبیعی منظم است که با توجه به ضریب جذب پایین آلومینا، پایداری حرارت عالی، مقرون به صرفه بودن و آسانی ساخت به عنوان بلور نوری دو بعدی در گستره طول موجهای مادون قرمز تا نور مریی مورد توجه و مطالعهٔ گسترده قرار گرفته است. علاوه بر این آلومینای حفره‌دار قالب مناسبی جهت تولید بلورهای نوری فلز- دی الکتریک به منظور افزایش پهنای گاف انرژی در آن می‌باشد. این بلور نوری دو بعدی به صورت تک بلور و چند بلور به وسیله روشهای لیتوگرافی و آندایز دو مرحله‌ای [۱۴ و ۱۵] ساخته شده است و اندازه‌گیریهای اپتیکی برای تعیین ضرایب جذب و انعکاس نسبت به تغییرات فرکانس بر روی آن انجام شده است.

در این مقاله با استفاده از محاسبات ساختار نواری به روش مرتبهٔ N، چگونگی تغییرات نمار شکست آلومینا حول حفره‌های آن در بلور نوری دو بعدی ساخته شده به روش ترکیبی لیتوگرافی و آندیزاسیون مورد بررسی قرار گرفته است. مقایسهٔ نتایج محاسبات و نتایج تجربی اندازه‌گیری گاف نواری [۱۱]، به پیش بینی تابعیت نمار شکست آلومینا نسبت به شعاع و تعیین عمق نفوذ آنیونها در لایهٔ اکسید خارجی آلومینا منجر می‌شود. در نهایت با مشخص شدن شکل تغییرات نمار شکست آلومینا، ساختار نواری نوری برای دو قطبش TE و TM به ازای شعاعهای متفاوتی از حفره‌ها محاسبه گردید.

۲. روش محاسبات

با توجه به این که عملیات محاسباتی روش موج تخت از مرتبهٔ N^3 است (N تعداد موجهای تخت است) و روش ماتریس انتقال به عملیات محاسباتی از مرتبهٔ N^2 نیاز دارد (N تعداد نقاط گره در سلول اولیه شبکه)، محاسبات ساختار نواری به روش مرتبهٔ N نسبت به روشهای پیش گفته با راندمان بالاتر و سهولت و دقت بیشتر قابل انجام است، بنابراین به اجمال به معرفی روش مرتبهٔ N می‌پردازیم.

اساس روشهای محاسباتی برای تعیین ساختار نواری یک آرایهٔ دی‌الکتریک حل معادلات ماکسول است:

$$\vec{\nabla}\times\vec{\mathrm{H}} = -\varepsilon\varepsilon_{\circ}\partial\vec{E}/\partial t\,, \qquad (۱)$$

$$\vec{\nabla}\times\vec{E} = \mu\mu_{\circ}\partial\vec{H}/\partial t\,, \qquad (۲)$$

اگر این معادلات در سیستم مختصات تعمیم یافتهٔ $q_1(x,y,z)$ و $q_2(x,y,z)$ و $q_3(x,y,z)$ در نظر گرفته شود، خواهیم داشت:

$$\vec{\nabla}_q\times\hat{\vec{H}} = \varepsilon_{\circ}\hat{\varepsilon}\partial\hat{\vec{E}}/\partial t\,, \qquad \vec{\nabla}_q\times\hat{\vec{E}} = -\mu_{\circ}\hat{\mu}\partial\hat{\vec{H}}/\partial t\,, \qquad (۳)$$

که در آن تانسورهای $\hat{\mu}$ و $\hat{\varepsilon}$ و میدانهای الکترومغناطیسی بهنجار $\hat{\vec{H}}$ و $\hat{\vec{E}}$ به صورت زیر تعریف می‌شود

$$\hat{\vec{\mathrm{H}}}_j = Q_j\vec{\mathrm{H}}_j\,, \qquad (۵)$$

$$\hat{\vec{E}}_j = Q_j\vec{E}_j\,, \qquad (۶)$$

$$\hat{\varepsilon}^{ij} = \varepsilon g^{ij}\backslash\vec{u}_1.(\vec{u}_2\times\vec{u}_3)\backslash Q_1Q_2Q_3(Q_iQ_j)^{-1}\,, \qquad (۷)$$

$$\hat{\mu}^{ij} = \varepsilon g^{ij}\backslash\vec{u}_1.(\vec{u}_2\times\vec{u}_3)\backslash Q_1Q_2Q_3(Q_iQ_j)^{-1}\,, \qquad (۸)$$

که Q_jها ضرایب سنجه و $\vec{u}_1$ ، $\vec{u}_2$ و $\vec{u}_3$ بردارهای شبکهٔ

۱. Plane wave method
۲. Transfer matrix
۳. Order_N method

www.SID.ir

Archive of SID

اولیه و g^{ij} متریک فضاست.

برای حل معادلات ماکسول و به دست آوردن $\hat{E}$ و $\hat{H}$ از روش گسسته سازی اختلاف محدود بر روی یک سلول اولیه شبکه استفاده می‌شود و میدانهای الکتریکی و مغناطیسی در زمان $t+\delta t$ به صورت زیر به مقدار آنها در زمان t مربوط می‌شود

$$\begin{aligned}\hat{E}_1(\vec{r},t+\delta t)=&\hat{E}_1(\vec{r},t)+[\hat{\varepsilon}^{-1}(\vec{r})]^{11}\{\hat{H}_2(\vec{r},t)-\hat{H}_3(\vec{r}-\vec{b},t)-\hat{H}_2(\vec{r},t)+\\&\hat{H}_2(\vec{r}-\vec{c},t)\}+[\hat{\varepsilon}^{-1}(\vec{r})]^{12}\{\hat{H}_1(\vec{r},t)-\hat{H}_1(\vec{r}-\vec{c},t)-\hat{H}_3(\vec{r},t)+\\&\hat{H}_3(\vec{r}-\vec{a},t)\}+[\hat{\varepsilon}^{-1}(\vec{r})]^{13}\{\hat{H}_2(\vec{r},t)-\hat{H}_2(\vec{r}-\vec{a},t)-\hat{H}_1(\vec{r},t)+\\&\hat{H}_1(\vec{r}-\vec{b},t)\},\end{aligned} \tag{۹}$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_1(\vec{r},t+\delta t)=&\hat{H}_1(\vec{r},t)-\left(\frac{\delta t\ c_0}{Q_0}\right)^2\times\\&\Big[+[\hat{\mu}^{-1}(\vec{r})]^{11}\{\hat{E}_3(\vec{r}+\vec{b},t)-\hat{E}_3(\vec{r},t)-\hat{E}_2(\vec{r}+\vec{c},t)+\hat{E}_2(\vec{r},t)\}\\&+[\hat{\mu}^{-1}(\vec{r})]^{12}\{\hat{E}_1(\vec{r}+\vec{c},t)-\hat{E}_1(\vec{r},t)-\hat{E}_3(\vec{r}+\vec{a},t)+\hat{E}_3(\vec{r},t)\}\\&+[\hat{\mu}^{-1}(\vec{r})]^{13}\{\hat{E}_2(\vec{r}+\vec{a},t)-\hat{E}_2(\vec{r},t)-\hat{E}_1(\vec{r}+\vec{b},t)+\hat{E}_1(\vec{r},t)\}\Big]\end{aligned} \tag{۱۰}$$

که $\vec{a}$ ، $\vec{b}$ و $\vec{c}$ المانهای طول در جهت بردارهای شبکهٔ اولیه می‌باشد. با در نظر گرفتن مقادیر اولیه برای میدانهای الکترومغناطیسی به صورت زیر [۱۳]

$$\vec{H}_{(r)}=\sum\vec{h}_0\left(\vec{k}+\vec{G}\right)e^{i\left(\vec{k}+\vec{G}\right).\vec{r}}\ , \tag{۱۰}$$

$$\vec{E}_{(r)}=0 \tag{۱۱}$$

و اعمال شرایط مرزی بلوخ

$$\hat{\vec{H}}(\vec{r}+\vec{R})=e^{i\vec{k}.\vec{r}}\,\hat{\vec{H}}(r)\ , \tag{۱۲}$$

$$\hat{\vec{E}}(\vec{r}+\vec{R})=e^{i\vec{k}.\vec{r}}\,\vec{E}(r)\ , \tag{۱۳}$$

تحول زمانی این میدانها برای گامهای متوالی به دست می‌آید. با اعمال شرایط مرزی بلوخ بر میدانهای الکتریکی و مغناطیسی، تناوب شبکه نوری و بردار موج $\vec{k}$ به روش مرتبهٔ N وارد می‌شود و با تغییر آن در محاسبات می‌توان بستگی انرژی امواج الکترومغناطیسی به بردار موج را تعیین نمود.

اگر محاسبات برای تعداد گامهای به اندازه کافی بزرگ (هزاران گام) انجام گردد و سپس تعدادی از نقاط گره واقع در سلول اولیه به صورت اتفاقی انتخاب شود، می‌توان با استفاده از تبدیلات فوریه سریع، مدهای ارتعاشی میدانهای الکترومغناطیسی را به دست آورد و با تکرار محاسبات برای مقادیر مختلف بردار موج، ساختار نواری بلور نوری را تعیین نمود.

در انتگرال‌گیری زمانی از معادلات (۹) و (۱۰) در روش مرتبه N، دو عامل نقش کلیدی در دقت تعیین مدهای ارتعاشی ایفا می‌کنند:

۱- فاصله زمانی مربوط به هر گام (Δt): حد بالای Δt از شرط همگرایی روش مرتبهٔ N، یعنی $(\Delta t)<\left(\frac{c_0^2}{Q_1^2}+\frac{c_0^2}{Q_2^2}+\frac{c_0^2}{Q_3^2}\right)^{-1}$ و حد پایین $\underline{\underline{\Delta t}}$ با بزرگ‌ترین فرکانس مورد بررسی $f_{\max}=\frac{1}{\Delta t}$ تعیین می‌شود.

۲- تعداد گامهای زمانی (N_t): تعداد گامهای زمانی مورد محاسبه در روش مرتبه N نیز از دو لحاظ حائز اهمیت است. اول آن که با افزایش N_t قدرت تفکیک روش تبدیل فوریه سریع افزایش می‌یابد (بستگی قدرت تفکیک و N_t یک بستگی خطی است) ولی حجم محاسبات با N_t رابطه غیرخطی داشته و بنابراین قدرت تفکیک را محدود می‌کند. از لحاظ دیگر افزایش N_t حداقل فرکانس مورد بررسی در سیستم شبکه نوری را تعیین می‌کند ($f_{\min}\propto\frac{1}{N_t}$).

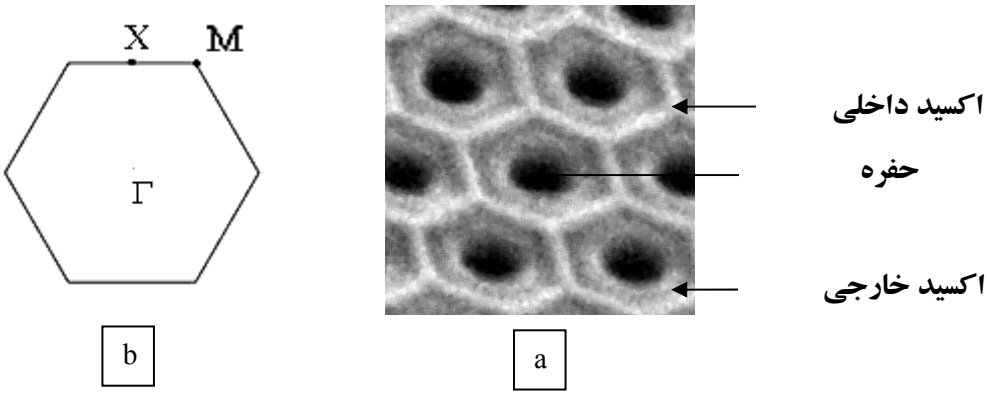
با تعیین متناسب دو پارامتر فوق می‌توان گستره فرکانسی مورد بررسی و دقت محاسباتی مورد نظر را تعیین نمود.

۳. چگونگی محاسبات و نتایج

اگر یک سلول اولیه در ساختار شش گوشی آلومینا در نظر گرفته شود، مطابق شکل (۱) سه ناحیه قابل تمیز است: حفره، ناحیهٔ اکسید خارجی و ناحیهٔ اکسید داخلی. حفره حاوی هوا و دارای ضریب دی‌الکتریک یک است. ناحیه اکسید داخلی از اکسید خالص آلومینیوم تشکیل شده و نزدیک مرز هسته است و دارای ضخامتی حدود ۵۰ نانومتر با ضریب دی‌الکتریک ثابت است. ناحیه اکسید خارجی دارای ناخالصی آنیونهای PO_4^{3-} و OH^- و O^{2-} ناشی از آندیزاسیون در محیط اسید فسفریک است که باعث کاهش چگالی آلومینیم می‌شود. با توجه به این

www.SID.ir

Archive of SID



شکل ۱. (a) نواحی مختلف اکسید الومینیم در آلومینای حفره‌دار (b) منطقه اول بریلوئن برای شبکه شش گوشی و نقاط مختلف آن.

که PO_4^{3-} دارای نمار شکست کمتری نسبت به دیگر آنیونها می‌باشد و علاوه بر آن جذب آنیون PO_4^{3-} در مقایسه با OH^- و O^{2-} به آرامی صورت می‌گیرد، در درون ناحیهٔ خارجی، آنیون PO_4^{3-} تجمع بیشتری را نشان می‌دهد و این باعث کاهش نمار شکست در این ناحیه می‌شود و هر چه به مرز هسته نزدیک‌تر می‌شویم، آنیونها کمتر شده و در نتیجه نمار شکست افزایش می‌یابد. این ساختار توسط فوکودا[1] و تاکاشی[2] در سال ۱۹۷۴ پیشنهاد شده است [۱۶, ۱۷]، ولی جزئیات مربوط به این تغییرات هنوز به طور کامل شناخته نشده است. شکل تغییرات ضریب دی‌الکتریک در آلومینای حفره‌دار نقش بسزایی در تعیین ساختار نواری این بلور نوری دارد و تعیین آن می‌تواند در محاسبات ساختار نواری دسته‌ای از بلورهای نوری به کار گرفته شود که از پر کردن حفره‌های آلومینا با مواد دی‌الکتریک و فلزی دیگر تولید شده باشد.

اندازه‌گیریهای گاف نواری در راستای ΓX منطقه اول بریلوئن (شکل ۱) با استفاده از میکروسکوپ[3] FTIR این زمینه را فراهم آورده است که بتوان با محاسبات ساختار نواری و تعیین گاف نواری شکل تغییرات ضریب دی‌الکتریک را در آلومینای حفره‌دار تعیین کرد. بر این اساس ما با ارائه مدل نفوذ آنیونها در ناحیه خارجی و انجام محاسبات ساختار نواری و مقایسه نتایج محاسبات با نتایج تجربی در پی تعیین تابع توزیع بهینه آنیونها در ناحیهٔ اکسید خارجی و به دست آوردن چگونگی تغییرات نمار شکست در این ناحیه هستیم.

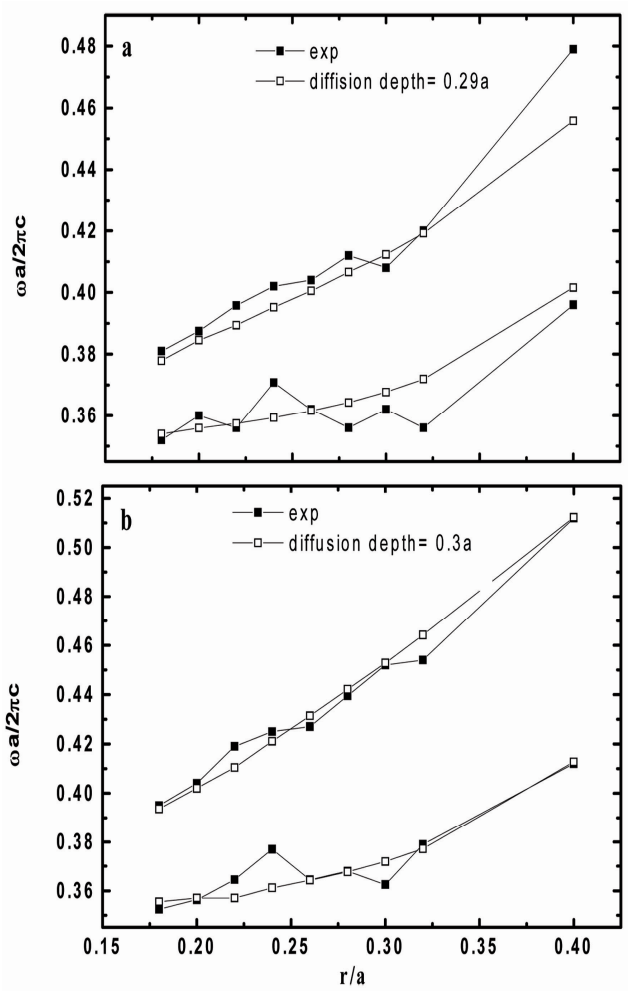
مدل توزیع نمار شکست به این صورت در نظر گرفته شد که سطح دیوارهٔ حفره شامل آلومینای هیدراته است که نمار شکست آن تقریباً ۱/۶۱ می‌باشد [۱۵] و با افزایش عمق دیوارهٔ حفره، غلظت آنیونهای PO_4^{3-} نفوذی افزایش یافته و در نتیجه نمار شکست کاهش می‌یابد. نمار شکست آلومینا با ناخالصی یونهای فسفات حدوداً ۱/۵۴ می‌باشد. بنابراین برای توزیع یونهای PO_4^{3-} یک تابع توزیع گاوسی در نظر گرفته شد، بدین صورت که نمار شکست از سطح حفره با r = ۰/۱۸a از مقدار ۱/۶۱ با یک تابعیت گاوسی به مقدار حداقل ۱/۵۴ در عمق نفوذ یونهای فسفات کاهش یافته و سپس با همین تابعیت تا مرز ناحیه اکسید داخلی و خارجی به مقدار بیشینه آن ۱/۶۷ (r=۰/۴a) افزایش می‌یابد. نمار شکست در ناحیه اکسید داخلی ثابت و برابر ۱/۶۷ در نظر گرفته شده است.

برای انجام محاسبات یک سلول اولیه از شبکه شش گوشی آلومینا در نظر گرفته می‌شود به طوری که یک حفره در مرکز آن باشد. برای این سلول اولیه یک شبکه ۵۰ × ۵۰ گره اختیار شد و معادلات ماکسول در ۲۵۰۰ نقطه آن گسسته سازی شد. مقدار ضریب دی الکتریک بر اساس مدل پیش گفته در هر یک از نقاط گره با متوسط گیری روی ۴۰۰ نقطه اطراف آن به دست آمد و به طور ثابت در طول محاسبات به کار گرفته شد. گام تحول زمانی برابر با ۰/۰۱a/c در نظر گرفته شد و محاسبات برای ۱۰۲۴ × ۲۵۶ گام زمانی انجام شد. بدین ترتیب قدرت

۱. Fukuda
۲. Takahashi
۳. Fourier Transform Infra Red

www.SID.ir

Archive of SID

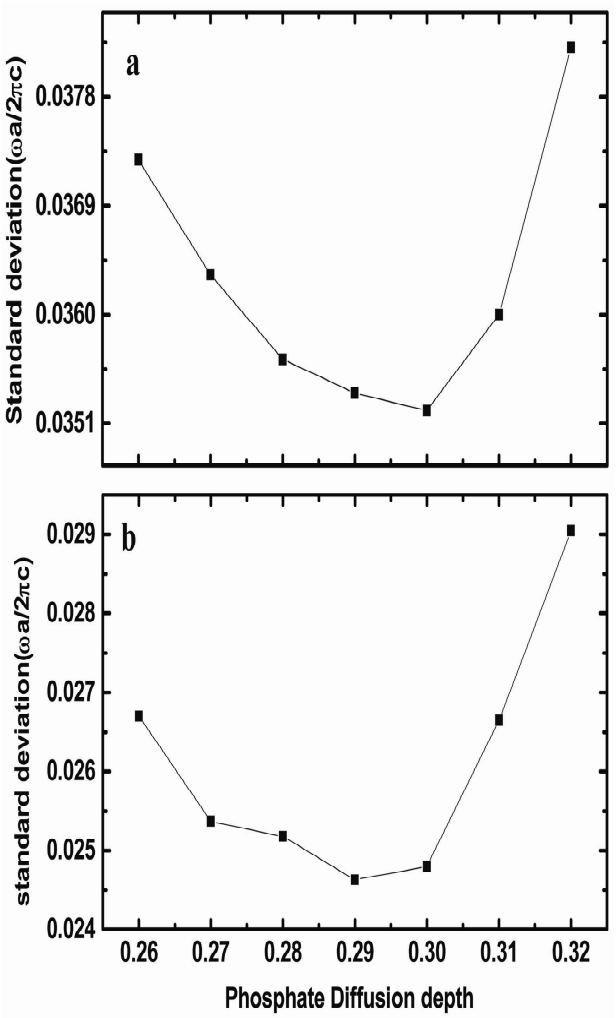


شکل ۲. نمودار تغییر گاف انرژی بلور نوری آلومینا در راستای ΓX (a) برای مد TE (b) برای مد TM.

تفکیک و یا اختلاف فرکانس بین دو نقطهٔ متوالی در طیف فوریه برابر ω a/۲ π c ۰/۰۰۰۳۸۱ می‌باشد.

گاف نواری بلور نوری آلومینا در راستای ΓX برای حفره‌های با شعاعهای ۰/۱۸a تا ۰/۴a برای دو مد TE و TM محاسبه گردید. نقاط مورد محاسبه منطبق بر داده‌های تجربی انتخاب شد [۱۵]. این محاسبات با انتخاب عمق نفوذ ۰/۲۵a تا ۰/۳۲a برای هر دو مد TE و TM انجام شد. برای نمونه در شکل (۲)a و (۲)b داده‌های تجربی به همراه نتایج محاسباتی به دست آمده با عمق نفوذ ۰/۲۹a و ۰/۳ a به ترتیب برای مدهای TE و TM نشان داده شده است.

برای تعیین توزیع بهینه مجموع مربعات انحراف نتایج

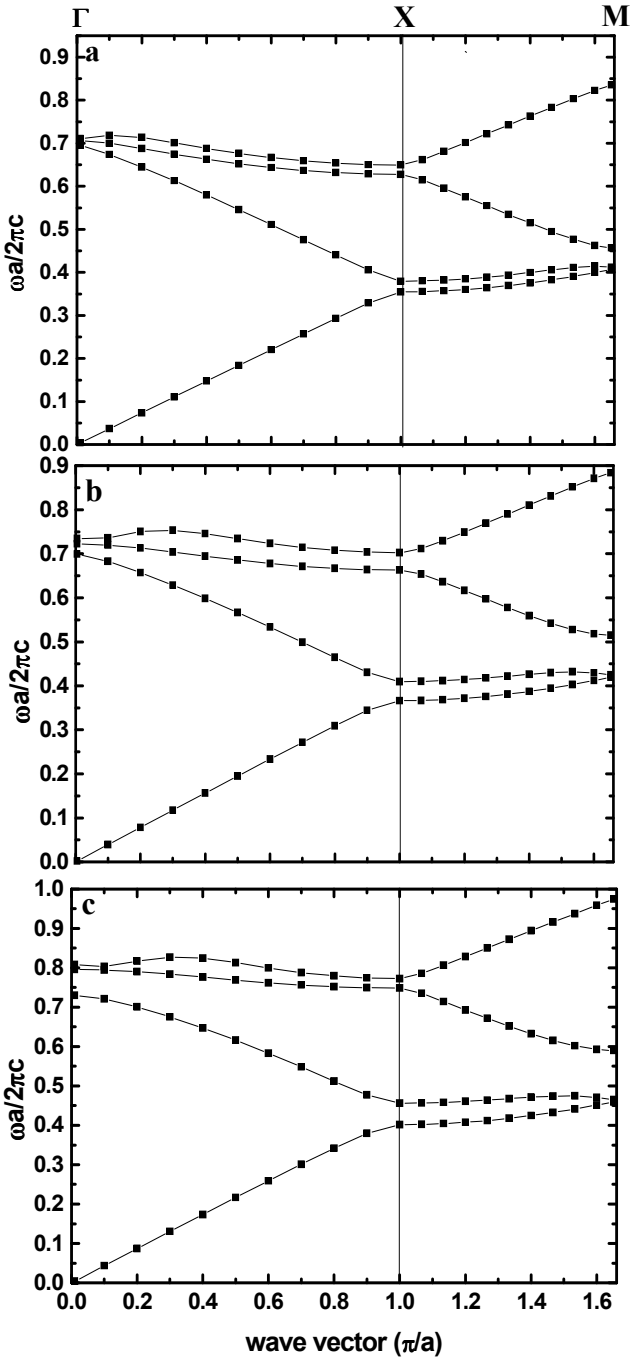


شکل ۳. انحراف معیار نتایج تجربی و محاسباتی نسبت به عمق نفوذ یونهای فسفات (a) در مد TE (b) در مد TM (عمق نفوذ بر حسب فاصلهٔ بین حفره‌ها تعیین شده است).

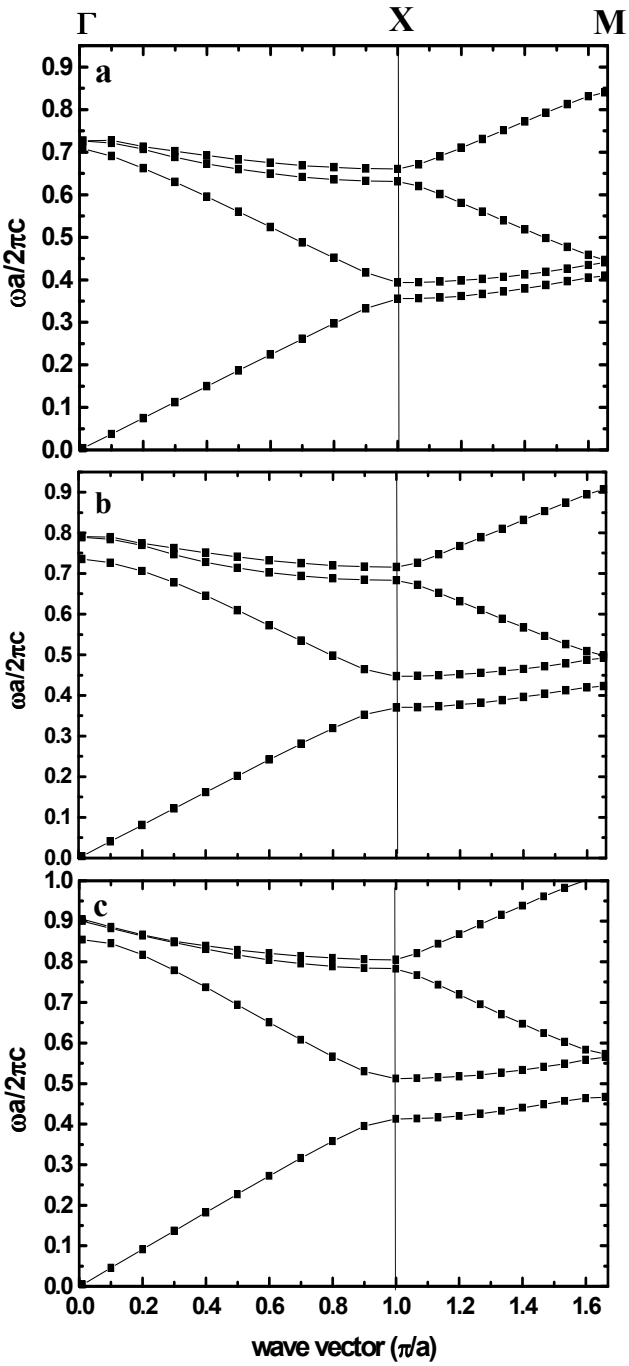
محاسباتی و نتایج تجربی برای تمام عمق نفوذهای انتخابی برای هر دو مد TE و TM محاسبه گردید و جذر آن به عنوان انحراف معیار به ترتیب در شکل (۳)a و (۳)b نشان داده شده است. چنانکه مشاهده می‌شود انحراف معیار برای هر دو مد TE و TM نسبت به تغییر عمق نفوذ رفتار تقریباً یکسانی را نشان می‌دهد. گر چه مقدار این پارامتر برای مد TM حدود ۳۰ درصد کمتر از مد TE است و این نشان دهنده توافق بهتر نتایج محاسبات با نتایج تجربی در این مد است، ولی مقدار آن برای مدهای TE و TM به ترتیب در عمق نفوذ ۰/۲۹a و ۰/۳ a به کمترین مقدار خود می‌رسد.

www.SID.ir

Archive of SID



شکل ۴. ساختار نواری در مد TE با توزیع گاوسی یونهای فسفات (a) در شعاع حفره ۰/۱۸a (b) در شعاع حفره ۰/۲۹a(c) در شعاع حفره ۰/۴a.



شکل ۵ . ساختار نواری در مد TM با توزیع گاوسی یونهای فسفات (a) در شعاع حفره ۰/۱۸a (b) در شعاع حفره ۰/۲۹a(c) در شعاع حفره ۰/۴a.

با توجه به نتایج حاصل از این بررسی، با در نظر گرفتن عمق نفوذ برابر با مقدار بهینه a ۰/۲۹ و a ۰/۳، ساختار نواری نوری برای هر دو مد TE و TM برای بلورهای نوری با شعاعهای حفره ۰/۱۸a، ۰/۲۹a و ۰/۴a محاسبه گردید. نتایج این محاسبات برای مدهای TE و TM به ترتیب در شکلهای (۴) و (۵) دیده می‌شود. برای هر دو مد با افزایش شعاع حفره‌ها، فاصله دو مد ارتعاشی به ازای تمام مقادیر k افزایش می‌یابد که این اختلاف در مد TE چشمگیرتر است. همچنین

www.SID.ir

Archive of SID

دیده می‌شود که برای مد TM به ازای تمام مقادیر r، گاف نواری کامل (Full band gap) دیده نمی‌شود، ولی برای مد TE در شعاع ۰/۴a یک گاف نواری کامل باریک از فرکانس ۰/۴۱۷ ω a/۲ π c تا ۰/۴۸۸ ω a/۲ π c مشاهده می‌گردد.

۴. نتیجه‌گیری

محاسبات ساختار نواری نوری به همراه داده‌های تجربی روشی برای بررسی و مطالعهٔ دقیق ساختار دی الکتریکها در بلورهای نوری را فراهم می‌آورد. محاسبات انجام شده با استفاده از روش مرتبهٔ N نشان می‌دهد که این روش با دقت بالا در تعیین لبه‌های نوارها به تغییرات کوچک در ترکیب نمار شکست بلور نوری کاملاً حساس می‌باشد و بنابراین با حداقل محاسبات توان بسیار خوبی در تعیین دقیق ساختار نواری بلورهای نوری دو بعدی دارد.

مراجع

1. E Yablonovitch, *J. Opt. Soc. Am*. B **10** (1993) 283.
2. J B Pendry, *J. Phys*.: *Cond. Mat*. **8** (1996) 1085.
3. R D Meada, A Devenyi, J D Joannopoulos, O L Alerhand, D A Smith and K Kash, *Appl. Phys*. **75** (1994) 4753.
4. E Yablonovitch, *Phys. Rev. Lett*. **58** (1987) 2059.
5. U Gruning, V Lehrnann, S Ohow and K Busch, *Appl. Phys. Lett*. **68** (1996) 747.
6. S Noda *et. al*., *Science*, **289** (2000) 604.
7. L Prodan et al., *Nanotechnology* **15** (2004) 639.
8. F G Santamaria, H T Miyazaki, A Urquía, M Ibisate, M Bel-. monte, N Shinya, F Mesequer, C Lopez, *Adv. Mater*. **14** (1990) 1144.
9. Z Zhang and S Satpathy, *Phys. Rev. Lett*. **65** (1990) 2650.
10. J B Pendry, *Mod. Optics* **41** (1994) 209.
11. J Choi, Y Luo, R B Wehrspohn, R Hillebrand, J Schilling, U Gosele,*J. Appl. Phys* ., **94** (2003) 4757.
12. A J Ward, J B Pendry, *Mod. Optics*. **43** (1996) 773.
13. C T Chan, Q L Yu, K M HO, *Phys. Rev*., B **51** (1995) 16635.
14. J Choi, J Schiling, K Nielsch, R Hillebrand, M Reiche, R B Wehrspohn, U Gosele, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc*. **722** (2002).
15. O Jessensky, F Muller, U Gosele, *Appl. Phys*., **72** (1998) 1173.
16. Y Fukuda, *Nippon Kagaku Kaishi*, **1868** (1974).
17. H Takahashi and M Nagayama, *Nippon Kagaku Kaishi*, **453** (1974).

www.SID.ir