



**ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΥΛΙΚΩΝ
ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
«ΠΡΟΗΓΜΕΝΑ ΥΛΙΚΑ»**

**ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΦΩΤΟΑΝΙΧΝΕΥΤΙΚΗΣ ΔΙΑΤΑΞΗΣ
ΜΕ ΒΑΣΗ ΤΟ ΓΡΑΦΕΝΙΟ**

ΠΑΝΑΓΙΩΤΙΔΟΥ ΟΥΡΑΝΙΑ

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΙΩΑΝΝΙΝΑ 2021

Η παρούσα Μεταπτυχιακή Διατριβή εκπονήθηκε στο πλαίσιο των σπουδών για την απόκτηση του Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης στην εξειδίκευση:

«Οπτοηλεκτρονικά & Μαγνητικά Υλικά»

που απονέμει το Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

Εγκρίθηκε τηναπό την εξεταστική επιτροπή:

1.Λοιδωρίκης Ελευθέριος, Καθηγητής του ΤΜΕΥ της Πολυτεχνικής Σχολής του Παν/μίου Ιωαννίνων, **Επιβλέπων**

2.Λέκκα Χριστίνα, Αναπληρώτρια Καθηγήτρια του ΤΜΕΥ της Πολυτεχνικής Σχολής του Παν/μίου Ιωαννίνων

3.Παπαγεωργίου Δημήτρης, Αναπληρωτής Καθηγητής, του Τ.Μ.Ε.Υ της Πολυτεχνικής Σχολής του Παν/μίου Ιωαννίνων

ΥΠΕΥΘΥΝΗ ΔΗΛΩΣΗ

"Δηλώνω υπεύθυνα ότι η παρούσα διατριβή εκπονήθηκε κάτω από τους διεθνείς ηθικούς και ακαδημαϊκούς κανόνες δεοντολογίας και προστασίας της πνευματικής ιδιοκτησίας. Σύμφωνα με τους κανόνες αυτούς, δεν έχω προβεί σε ιδιοποίηση ξένου επιστημονικού έργου και έχω πλήρως αναφέρει τις πηγές που χρησιμοποίησα στην εργασία αυτή."

(Υπογραφή υποψηφίου)

ΠΑΝΑΓΙΩΤΙΔΟΥ ΟΥΡΑΝΙΑ

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Η παρούσα διατριβή εκπονήθηκε στο Εργαστήριο Υπολογιστικής Επιστήμης Υλικών του Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης των Υλικών στα πλαίσια απόκτησης Μεταπτυχιακού Διπλώματος. Θα ήθελα στο σημείο αυτό να ευχαριστήσω όλους όσους συνέβαλλαν στην πραγματοποίηση της διπλωματικής εργασίας μου.

Ευχαριστώ τον επιβλέποντα Καθηγητή μου, κ. Ελευθέριο Λοιδωρική και τον υποψήφιο διδάκτορα Ιωάννη Βαγγελίδη τόσο για την υπόδειξη του θέματος όσο και για την κατανόηση και τη συνεχή καθοδήγηση που μου έδειξαν σε όλη την διάρκεια της συνεργασίας μας.

Ακόμη, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά την Ελευθερία Λαμπαδαρίου, μέλος του εργαστηρίου υπολογιστικής φυσικής του τμήματος Μ.Ε.Υ αλλά και την συμφοιτήτρια μου Πηνελόπη Πανή, καθώς και όλους τους φίλους για την συνεχή βοήθεια, συμπαράσταση και αμέριστη υποστήριξη που μου έδειξαν κατά τη διάρκεια ολοκλήρωσης των σπουδών μου.

Τέλος, θα ήθελα να αφιερώσω τη διπλωματική αυτή εργασία στην οικογένεια μου, στον αδερφό μου Θοδωρή, που χωρίς την αγάπη και την υποστήριξή τους, δεν θα είχα καταφέρει να ολοκληρώσω τις μεταπτυχιακές μου σπουδές. Ένα ιδιαίτερο ευχαριστώ οφείλω στον Ορέστη για την υπομονή, ανοχή και στήριξη που μου έδειξε καθ' όλη την διάρκεια της συγγραφής της διπλωματικής εργασίας μου.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Τα τελευταία χρόνια, υπάρχει έντονο ερευνητικό ενδιαφέρον για τη χρήση του γραφενίου σε εφαρμογές φωτοανίχνευσης, καθώς η απουσία ενεργειακού διάκενου επιτρέπει την απορρόφηση του φωτός και την παραγωγή φωτορευμάτων σε μεγάλο εύρος του οπτικού φάσματος.

Στην παρούσα διπλωματική εργασία μελετήθηκε ο σχεδιασμός ενός φωτοανιχνευτή γραφενίου βασισμένο στο φωτοθερμοηλεκτρικό φαινόμενο στο εγγύς υπέρυθρο φάσμα ακτινοβολίας και συγκεκριμένα τα 1550 nm. Το γραφένιο μέσω του φωτοθερμοηλεκτρικού φαινομένου δημιουργεί φωτοαπόκριση σε pn επαφή, όπου παρουσιάζει ασυμμετρία στο επίπεδο Fermi και καθοδηγείται από διαβάθμιση της θερμοκρασίας. Στόχος ήταν η τοπική ενίσχυση της απορρόφησης σε μονοστρωματικό γραφένιο, η οποία επιδιώχθηκε μέσω του μηχανισμού της κρίσιμης σύζευξης (critical coupling), ενσωματώνοντας το γραφένιο σε οπτική κοιλότητα. Με την εφαρμογή εξωτερικής διαφοράς δυναμικού (doping by gating), που χρησιμοποιείται για τον έλεγχο των ηλεκτρικών ιδιοτήτων του γραφενίου, μπορούν να ελέγχονται οι αναστρέψιμες μεταβολές της συγκέντρωσης των φορέων και του επιπέδου Fermi, ακολουθώντας την αλλαγή της τάσης της πύλης (gate voltage) από αρνητική σε θετική, που αντιστοιχεί σε γραφένιο τύπου p και τύπου n. Τέλος, προσδιορίστηκαν τα μορφολογικά και οπτικά χαρακτηριστικά που συνιστούν την βελτιστοποίηση της φωτοαπόκρισης του γραφενίου στο κέντρο της pn επαφής και οδηγεί σε σχεδόν 91.2 % απορρόφηση.

Η συγκεκριμένη διπλωματική εργασία έχει χωριστεί σε δύο μέρη. Στο πρώτο μέρος γίνεται αναφορά στο θεωρητικό πλαίσιο που συνέβαλλε στο σχεδιασμό της διάταξης. Ενώ, το δεύτερο μέρος αποτελεί την ερευνητική διαδικασία, καθώς και τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τις προσομοιώσεις που βασίζονται στην μέθοδο FDTD και στη αναλυτική μέθοδο Μεταφοράς Πινάκων.

Λέξεις κλειδιά: φωτοανιχνευτής, γραφένιο, φωτοθερμοηλεκτρικό φαινόμενο, καθρέφτες Bragg, οπτική κοιλότητα, κρίσιμη σύζευξη, FDTD μέθοδος, Μέθοδος Μεταφοράς Πινάκων.

ABSTRACT

In recent years, there has been strong research interest in the use of graphene in photodetection applications, as the absence of an energy gap allows the absorption of light and the production of light streams over a wide range of optical spectra.

In the present dissertation the design of a graphene photodetector based on the photo-thermoelectric (PTE) effect in the near-infrared radiation spectrum and specifically at 1550 nm was studied. This mechanism generates a photoresponse in graphene pn-junctions, driven by Fermi level asymmetry and a temperature gradient across the channel. The aim was to locally enhance the absorption of monolayer graphene, which was sought through the mechanism of critical coupling, integrating graphene into the optical cavity. By doping by gating, which is used to control the electrical properties of graphene, the reversible changes of the carrier concentration and the Fermi level can be controlled, following the change of the gate voltage from the gate voltage, negative to positive, corresponding to p-type and n-type graphene. Finally, the geometry and optical characteristics that optimize the graphene photoresponse at the center of the pn junction and lead to almost 91.2% absorption were determined.

This dissertation is divided into two parts. The first part refers to the theoretical framework that contributed to the design of the device. While, the second part is the research process, as well as the results obtained from the simulations based on the FDTD method and the analytical method of Transfer Matrix Method.

Key Words: photodectetor, graphene, photo-thermoelectric effect, Distributed Bragg Reflector, optical cavity, critical coupling, FDTD method, Transfer Matrix Method.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΠΡΟΛΟΓΟΣ.....	III
ΠΕΡΙΛΗΨΗ.....	V
ABSTRACT.....	VII
ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ.....	IX
ΠΙΝΑΚΑΣ ΣΥΜΒΟΛΙΣΜΩΝ.....	XI
ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΣΧΗΜΑΤΩΝ.....	XIII
ΜΕΡΟΣ Α'.....	1
ΘΕΩΡΗΤΙΚΟ ΠΛΑΙΣΙΟ.....	1
1. ΦΩΤΟΑΝΙΧΝΕΥΤΕΣ.....	3
2. ΓΡΑΦΕΝΙΟ.....	5
3. ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ.....	6
3.1. ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ.....	6
3.2. ΟΠΤΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ.....	8
4. ΕΜΠΛΟΥΤΙΣΜΟΣ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ.....	12
5. ΒΑΣΙΚΑ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ ΦΩΤΟΑΝΙΧΝΕΥΤΩΝ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ.....	14
6. ΦΥΣΙΚΟΙ ΜΗΧΑΝΙΣΜΟΙ ΓΙΑ ΦΩΤΟΑΝΙΧΝΕΥΣΗ ΣΕ ΓΡΑΦΕΝΙΟ.....	16
6.1. ΦΩΤΟΒΟΛΤΑΪΚΟ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ.....	17
6.2. ΦΩΤΟΘΕΡΜΟΗΛΕΚΤΡΙΚΟ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ.....	17
6.3. ΒΟΛΟΜΕΤΡΙΚΟ (ΒΟΛΟΜΕΤΡΙΚ) ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ.....	17
6.4. ΦΩΤΟΑΓΩΓΙΜΟΤΗΤΑΣ (PHOTOCONDUCTIVE/PHOTOGATING) ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ.....	17
7. ΦΩΤΟΘΕΡΜΟΗΛΕΚΤΡΙΚΟ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ.....	18
7.1. ΔΙΑΤΑΞΕΙΣ ΦΩΤΟΑΝΙΧΝΕΥΤΩΝ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ ΠΟΥ ΒΑΣΙΖΟΝΤΑΙ ΣΤΟ ΦΩΤΟΘΕΡΜΟΗΛΕΚΤΡΙΚΟ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ.....	24
8. ΔΙΗΛΕΚΤΡΙΚΑ ΚΑΤΟΠΤΡΑ (ΚΑΘΡΕΦΤΕΣ BRAGG).....	27
9. ΟΠΤΙΚΗ ΚΟΙΛΟΤΗΤΑ – ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗΣ ΠΟΙΟΤΗΤΑΣ.....	30
10. ΜΗΧΑΝΙΣΜΟΣ ΚΡΙΣΙΜΗΣ ΣΥΖΕΥΞΗΣ.....	34
11. ΜΕΘΟΔΟΣ ΧΡΟΝΙΚΗΣ ΕΞΕΛΙΞΗΣ ΜΕ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΕΣ ΔΙΑΦΟΡΕΣ – FDTD...36	
ΜΕΡΟΣ Β'.....	39

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΗ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ	39
1. ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ	41
2. ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΔΙΑΤΑΞΗΣ ΜΕ ΟΠΤΙΚΗ ΚΟΙΛΟΤΗΤΑ.....	46
3. ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΚΑΙ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΦΩΤΟΑΝΙΧΝΕΥΤΗ ΜΕ ΟΠΤΙΚΗ ΚΟΙΛΟΤΗΤΑ ΜΕ ΤΗΝ ΜΕΘΟΔΟ FDTD	51
ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.....	79
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	81
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ.....	85
I. ΜΕΘΟΔΟΣ ΠΙΝΑΚΩΝ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ (TRANSFER MATRIX METHOD).....	85
II. ΜΕΘΟΔΟΣ ΧΡΟΝΙΚΗΣ ΕΞΕΛΙΞΗΣ ΜΕ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΕΣ ΔΙΑΦΟΡΕΣ – FDTD	91

ΠΙΝΑΚΑΣ ΣΥΜΒΟΛΙΣΜΩΝ

FDTD	Finite-Difference Time-Domain Μέθοδος Πεπερασμένων Χρονικών Διαφορών
TMM	Transfer Matrix Method Μέθοδος Μεταφοράς Πινάκων
HM	Ηλεκτρομαγνητική
SLG	Single Layer Graphene Μονοστρωματικό Γραφένιο
PTE	Photothermoelectric Effect Φωτοθερμοηλεκτρικό φαινόμενο
E_F	Ενέργεια Fermi
E_F^{center}	Ενέργεια Fermi στο κεντρικό γραφένιο
E_F^{sides}	Ενέργεια Fermi στα ακριανά τμήματα του γραφενίου
1D	Μονοδιάστατο
2D	Δισδιάστατο
n-Si	Νοθευμένο πυρίτιο
Si	Πυρίτιο
SiO ₂	Διοξείδιο του πυριτίου
λ	Μήκος κύματος
L	Περίοδος
gap	Χάσμα ή κενό

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΣΧΗΜΑΤΩΝ

Σχήμα 1 Ένας φωτοανιχνευτής που έχει διασωθεί από ένα δίσκο CD ROM. Ο φωτοανιχνευτής περιέχει τρεις φωτοδίοδους, ορατές στο κέντρο της φωτογραφίας [47]. ...	3
Σχήμα 2 Διάφοροι τύποι φωτοανιχνευτών [48].	4
Σχήμα 3 Σχηματική απεικόνιση της υβριδικής δομής του γραφενίου [40].	6
Σχήμα 4 (a) Δομή ενεργειακών ζωνών για ένα εξαγωνικό πλέγμα ανθράκων του γραφενίου που εμφανίζει το επίπεδο που σχηματίζουν τα σημεία Dirac (σημεία K και K') των ατόμων του. (b) Κωνικό ενεργειακό διάγραμμα ενός ατόμου γραφενίου ως συνάρτηση του κυματανύσματος k.	7
Σχήμα 5 Επιτρεπτόμενες ενεργειακές μεταβάσεις 1. Ενδοζωνικές μεταβάσεις, 2. Απαγορευτική Αρχή Pauli (Pauli blocking) και 3. Διαζωνικές μεταβάσεις σε SLG [16].	8
Σχήμα 6 Αγωγιμότητα γραφενίου συναρτήσει του μήκους κύματος/ενέργειας φωτονίων [9, 46].	10
Σχήμα 7 Το ποσοστό διέλευσης του λευκού φωτός στον αέρα, σε ένα φύλλο και σε διστρωματικό γραφένιο συναρτήσει της απόστασης.	11
Σχήμα 8 Πάνω: Μεταβολή του επιπέδου Fermi στο γραφένιο μεταβάλλοντας τη διαφορά δυναμικού V_g . Κάτω: Σχηματική απεικόνιση τυπικής διάταξης Graphene/SiO ₂ /Si για τον εμπλουτισμό του γραφενίου με πύλη (Doping by gating).	12
Σχήμα 9 Μεταβολή της ηλεκτρικής αγωγιμότητας με αλλαγή της εφαρμοζόμενης διαφοράς δυναμικού V_g (gate voltage) [9].	14
Σχήμα 10 Σχηματική απεικόνιση των 4 μηχανισμών παραγωγής φωτορεύματος που μπορεί να επιτευχθεί σε γραφένιο, (α) φωτοβολταϊκό, (b) φωτοθερμοηλεκτρικό, (c) βολομετρικό και (d) φωτοαγώγιμο [1].	16
Σχήμα 11 Σχηματική απεικόνιση θερμοηλεκτρικού συντελεστή Seebeck συναρτήσει της ενέργειας Fermi του γραφενίου για διαφορετικές τιμές της θερμοκρασίας των ηλεκτρονίων.	21
Σχήμα 12 Σχηματική απεικόνιση της παραγωγής φωτοθερμοηλεκτρικών ρευμάτων σε γραφένιο [50].	22
Σχήμα 13 a. Σχηματική απεικόνιση του φωτοανιχνευτή. b. Σχεδιασμός της διάταξης με ενδείξεις για τα πάχη των υλικών.	25

Σχήμα 14 Σχηματική απεικόνιση α. φωτοανιχνευτή γραφενίου με βάση το PTE φαινόμενο. b. Σχηματική διατομή του φωτοανιχνευτή γραφενίου με διαχωρισμένες πύλες. c. Απεικόνιση διάταξης χωρίς το φύλλο γραφενίου [50].	26
Σχήμα 15 Τυπική δομή διηλεκτρικού κατόπτρου με N αριθμό ζεύγη διηλεκτρικών στρωμάτων [16].	27
Σχήμα 16 Μεταβολή του συντελεστή διέλευσης $n_{Si} = 3.42$, $n_{SiO_2} = 1.46$, για τέσσερις διαφορετικούς αριθμούς περιόδων των διηλεκτρικών (N=3,4,5 και 6), όπου $\alpha = d_{Si} + d_{SiO_2}$ η περίοδος του συστήματος.	28
Σχήμα 17 Μεταβολή του συντελεστή διέλευσης για τις 4 περιπτώσεις περιόδων σε λογαριθμική κλίμακα συναρτήσει της συχνότητας/μήκους κύματος.	29
Σχήμα 18 Απεικόνιση (a) του περιοδικού συστήματος διηλεκτρικών στρωμάτων (ανακλαστήρας Bragg), (b) της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου γύρω από τη ατέλεια.	30
Σχήμα 19 Συντελεστής διέλευσης συναρτήσει της συχνότητας/μήκους κύματος (α) για διηλεκτρικό κάτοπτρο Bragg με αριθμό N = 6 περιόδων (β) για οπτική κοιλότητα πάχους 530.8 nm.	31
Σχήμα 20 Συντελεστής απορρόφησης συναρτήσει του μήκους κύματος συντονισμού για διαφορετικό αριθμό περιόδων.	32
Σχήμα 21 Συντελεστής απορρόφησης συναρτήσει της ενέργειας στο εύρος συχνοτήτων του συντονισμού, για διαφορετικό αριθμό περιόδων.	33
Σχήμα 22 Οπτική απόκριση για διατάξεις με και χωρίς συμμετρία. (a) Συμμετρική διάταξη ως προς τα εισερχόμενα κύματα. (b) Κατάργηση συμμετρίας με την προσθήκη του μεταλλικού κατόπτρου [32].	34
Σχήμα 23 Απεικόνιση ενός 3D κελιού Yee με την κατανομή των συνιστωσών του ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου [41].	37
Σχήμα 24 Απεικόνιση υπολογιστικού κελιού με τη μέθοδο FDTD.	41
Σχήμα 25 Βάση δεδομένων υλικών στο πρόγραμμα της lumerical.	42
Σχήμα 26 Πραγματικό μέρος (αριστερά) και φανταστικό μέρος (δεξιά) της επιφανειακής αγωγιμότητας του γραφενίου (παράμετροι υλικού που δίνονται στο Σχήμα 25).	43
Σχήμα 27 Πραγματικό μέρος (αριστερά) και φανταστικό μέρος (δεξιά) του δείκτη διάθλασης του νοθευμένου πυριτίου με $N_d = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$.	44
Σχήμα 28 Πραγματικό μέρος (αριστερά) και φανταστικό μέρος (δεξιά) του δείκτη διάθλασης του χρυσού.	44
Σχήμα 29 Μοντελοποίηση πυριτίου.	45
Σχήμα 30 Μοντελοποίηση διοξειδίου του πυριτίου.	45

Σχήμα 31 Απεικόνιση της 1D διάταξης.	47
Σχήμα 32 Σχηματική απεικόνιση ποσοστών απορρόφησης συναρτήσει της ενέργειας Fermi από την έρευνα [42]. Η απορροφητικότητα του γραφενίου είναι κανονικοποιημένη στη μονάδα, η μέγιστη τιμή της είναι 2.3%.....	48
Σχήμα 33 Συνολική απορρόφηση συναρτήσει του μήκους κύματος για $EFSLG = 0.432eV$	49
Σχήμα 34 Σύγκριση αποτελεσμάτων αναλυτικής μεθόδου με την FDTD μέθοδο.	50
Σχήμα 35 Απεικόνιση διάταξης, στην οποία έχουν τοποθετηθεί «σκαλοπάτια» (fingers) νοθευμένου πυριτίου στο κάτω μέρος της κοιλότητας.....	52
Σχήμα 36 Διάγραμμα συνολικής απορρόφησης του συστήματος συναρτήσει του μήκους κύματος, μεταβάλλοντας την περίοδο του συστήματος L (670-810) nm.....	53
Σχήμα 37 Σχηματική απεικόνιση των δύο 1D διατάξεων.	54
Σχήμα 38 Διάγραμμα απορρόφησης τόσο του συστήματος, όσο και του μήκους του γραφενίου στο κέντρο της κοιλότητας για τις δύο διατάξεις (Σχήμα 37).	54
Σχήμα 39 Διάγραμμα συνολικής απορρόφησης του γραφενίου στο κέντρο της κοιλότητας, μεταβάλλοντας την περίοδο του συστήματος L (670-810) nm.	55
Σχήμα 40 Διάγραμμα απορρόφησης του γραφενίου στο μήκος που αντιστοιχεί στο χάσμα (gap) της διάταξης, μεταβάλλοντας την περίοδο του συστήματος L (670-810) nm.	56
Σχήμα 41 Χρωματικός χάρτης του ποσοστού απορρόφησης συνολικά στο φύλλο του γραφενίου, μεταβάλλοντας την περίοδο του συστήματος L (300-850) nm.....	57
Σχήμα 42 Χρωματικός χάρτης του ποσοστού απορρόφησης στο μήκος του γραφενίου που αντιστοιχεί στο μήκος του gap, μεταβάλλοντας την περίοδο του συστήματος L (300-850) nm.	58
Σχήμα 43 Απεικόνιση της διάταξης με τρία τμήματα γραφενίου στο κέντρο της κοιλότητας και απεικόνιση ηλεκτρικού πεδίου συγκεντρωμένο στην κοιλότητα.	59
Σχήμα 44 Χρωματικός χάρτης μεταβολής της απορρόφησης (α) συνολικά των τμημάτων γραφενίου στο κέντρο της διάταξης και (β) του κεντρικού γραφενίου, αλλάζοντας την ενέργεια Fermi των τμημάτων γραφενίου στα άκρα $EFsides$ και διατηρώντας σταθερό τον εμπλουτισμό στο κεντρικό τμήμα γραφενίου $EFcenter = 0.05 eV$	60
Σχήμα 45 Σχηματική απεικόνιση ποσοστών απορρόφησης μεταβάλλοντας την ενέργεια Fermi του γραφενίου που βρίσκονται στα άκρα, $EFsides$ και $EFcenter = 0.05eV$	61
Σχήμα 46 Χρωματικός χάρτης μεταβολής της απορρόφησης (α) συνολικά των τμημάτων του γραφενίου στο κέντρο της διάταξης και (β) του κεντρικού γραφενίου, αλλάζοντας την	

ενέργεια Fermi των τμημάτων γραφενίου στα άκρα, EF_{sides} , και διατηρώντας σταθερή την ενέργεια Fermi στο κεντρικό τμήμα γραφενίου, $EF_{center} = 0.431 eV$	62
Σχήμα 47 Σχηματική απεικόνιση ποσοστών απορρόφησης μεταβάλλοντας την ενέργεια Fermi του γραφενίου που βρίσκονται στα άκρα, EF_{sides} και $EF_{center} = 0.431 eV$	63
Σχήμα 48 Χρωματικός χάρτης του ποσοστού απορρόφησης (α) συνολικά των τμημάτων του γραφενίου στο κέντρο της διάταξης και (β) του γραφενίου στο κέντρο μεταβάλλοντας τις ενέργειες Fermi στα επιμέρους τμήματα του γραφενίου.	64
Σχήμα 49 Δισδιάστατη διάταξη με σταθερές τιμές ενέργειας Fermi στα τμήματα του γραφενίου.	65
Σχήμα 50 Χρωματικός χάρτης του ποσοστού απορρόφησης (α) συνολικά στα τμήματα του γραφενίου και (β) του γραφενίου στο κέντρο, μεταβάλλοντας την περίοδο της διάταξης. .	65
Σχήμα 51 Χρωματικός χάρτης του ποσοστού απορρόφησης (α) συνολικά στα τμήματα του γραφενίου και (β) του γραφενίου στο κέντρο, μεταβάλλοντας το μήκος του κεντρικού γραφενίου από gap (200 - 1600) nm. Η περίοδος του συστήματος ορίστηκε $L = 2000$ nm. .	66
Σχήμα 52 Μεταβολή της μέγιστης απορρόφησης τόσο στα τμήματα του γραφενίου συνολικά (συνεχής γραμμή), όσο και του κεντρικού γραφενίου (διακεκομμένη) συναρτήσει του duty cycle με δύο τρόπους, (α) μεταβάλλοντας το μήκος του κεντρικού γραφενίου (κόκκινη γραμμή) και (β) μεταβάλλοντας την περίοδο (κόκκινη γραμμή).....	67
Σχήμα 53 Διάγραμμα συνολικής απορρόφησης συναρτήσει του μήκους κύματος για $EF_{sides} = 0.6 eV$, $EF_{center} = 0 eV$ και duty cycle=35%.	68
Σχήμα 54 Μεταβολή της μέγιστης απορρόφησης τόσο συνολικά των τμημάτων του γραφενίου, όσο και του κεντρικού γραφενίου συναρτήσει της νόθευσης του πυριτίου για μήκος κεντρικού γραφενίου gap = 500 nm.....	69
Σχήμα 55 Μεταβολή των layers της διάταξης με προσθήκη (α) 3N Bragg (6Layers) και (β) 5N Bragg (10Layers).....	70
Σχήμα 56 (α) Μεταβολή της απορρόφησης τόσο συνολικά των τμημάτων του γραφενίου, όσο και του κεντρικού φύλλου γραφενίου συναρτήσει του μήκους κύματος για δύο περιπτώσεις για προσθήκη (I) layers 6 και (II) layers 10. Μεγέθυνση της μεταβολής της μέγιστης απορρόφησης (β) συνολικά των γραφενίων και (γ) του κεντρικού φύλλου γραφενίου, αντίστοιχα συναρτήσει του μήκους κύματος για τις δύο περιπτώσεις.	70
Σχήμα 57 Απεικόνιση ηλεκτρικού πεδίου (αριστερά) και απεικόνιση της δισδιάστατης διάταξης (δεξιά).	71
Σχήμα 58 Μεταβολή της μέγιστης απορρόφησης συνολικά των τμημάτων του γραφενίου, όσο και του κεντρικού φύλλου γραφενίου συναρτήσει του duty cycle της διάταξης.	72

Σχήμα 59 Απεικόνιση της δισδιάστατης βελτιστοποιημένης διάταξης.....	73
Σχήμα 60 Μεταβολή της απορρόφησης στα τρία παράλληλα τμήματα του γραφενίου, το αριστερό (κόκκινο), το κεντρικό στην κορυφή (μαύρο) και το δεξιό (μπλε) συναρτήσει του μήκους κύματος.	74
Σχήμα 61 Απεικόνιση της δισδιάστατης προτεινόμενης διάταξης.....	75
Σχήμα 62 Μεταβολή της μέγιστης απορρόφησης στο κεντρικό τμήμα του γραφενίου συναρτήσει του ενέργειας Fermi στα υπόλοιπα τμήματα του γραφενίου.	76
Σχήμα 63 Προτάσεις διατάξεων για την ρύθμιση του εμπλουτισμένου γραφενίου.	77
Σχήμα 64 Μεταβολή του επιπέδου Fermi μεταβάλλοντας τη διαφορά δυναμικού, όπου $d = 10 \text{ nm}$	78
Σχήμα 65 Απεικόνιση της κάθετης διάδοσης επίπεδων κυμάτων σε περιοδική διάταξη με εναλλαγή δύο διηλεκτρικών στρωμάτων με περίοδο $a = d_1 + d_2$	85
Σχήμα 66 Απεικόνιση ενός 3D κελιού Yee με την κατανομή των συνιστωσών του ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου.	92
Σχήμα 67 Διακριτοποίηση των πεδίων στον χώρο σε ένα μονοδιάστατο πλέγμα Yee. Στα σημεία ..., $i-1$, i , $i+1$, ... τοποθετείται το ηλεκτρικό πεδίο και στα σημεία ..., $i-1/2$, $i+1/2$, ... τοποθετείται το μαγνητικό πεδίο.	93
Σχήμα 68 Διακριτοποίηση των πεδίων στον χρόνο σε ένα μονοδιάστατο πλέγμα Yee. ..	94

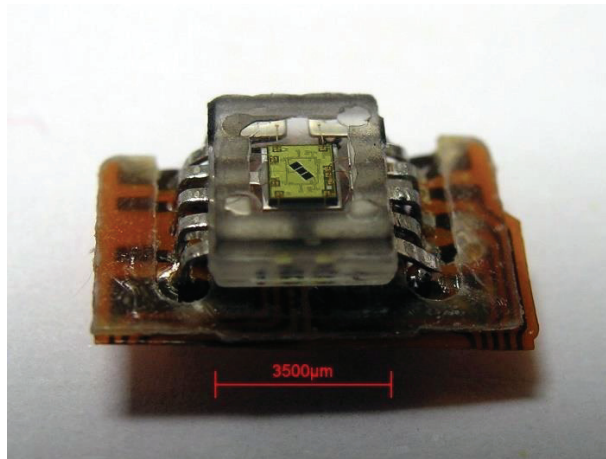
ΜΕΡΟΣ Α΄

ΘΕΩΡΗΤΙΚΟ ΠΛΑΙΣΙΟ

1. ΦΩΤΟΑΝΙΧΝΕΥΤΕΣ

Οι φωτοανιχνευτές είναι συσκευές που ανιχνεύουν και μετρούν τη ροή των φωτονίων σε ένα εύρος του οπτικού φάσματος, μετατρέποντας την απορροφημένη οπτική ενέργεια σε ηλεκτρικό σήμα [1]. Χωρίζονται σε δυο βασικές κατηγορίες, στους φωτονικούς ανιχνευτές, όπου τα προσπίπτοντα φωτόνια δημιουργούν φορείς αγωγιμότητας, τα οποία ανιχνεύονται από εξωτερικό ηλεκτρικό κύκλωμα και στους θερμικούς ανιχνευτές, όπου η οπτική ενέργεια μετατρέπεται σε θερμική αλλάζοντας τις ηλεκτρικές ιδιότητες του υλικού, παράγοντας ηλεκτρικό σήμα [2].

Στις μέρες μας, οι φωτοανιχνευτές παρουσιάζουν πληθώρα εφαρμογών. Χρησιμοποιούνται σε τηλεπικοινωνίες, στο υπέρυθρο για φασματοσκοπία, μετάδοση δεδομένων, έλεγχο τροφίμων και φαρμάκων, εφαρμογές νυχτερινής όρασης, στα THz για κάμερες ασφαλείας, οθόνες αφής, ιατρικούς και περιβαλλοντικούς αισθητήρες [1]. Το γεγονός αυτό καθιστά αναμενόμενη τη μελέτη και την ανάπτυξη των φωτοανιχνευτών σε όλο το φάσμα συχνοτήτων της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας.



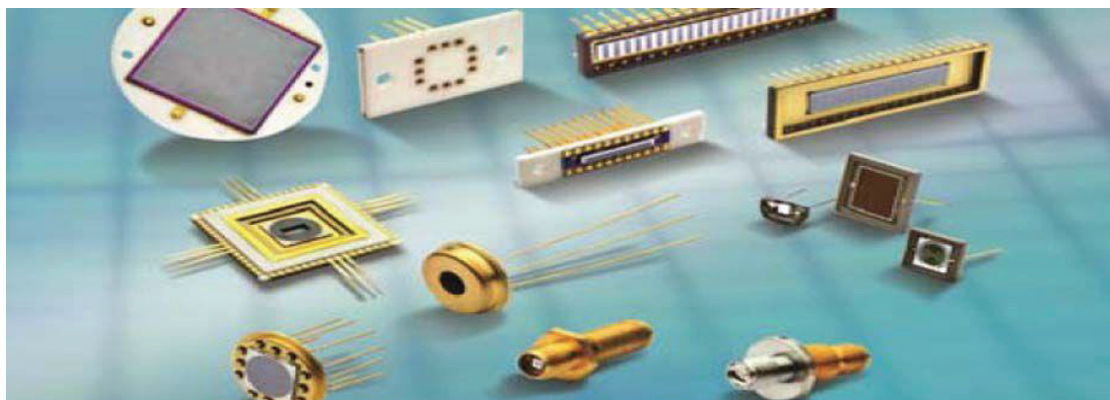
Σχήμα 1 Ένας φωτοανιχνευτής που έχει διασωθεί από ένα δίσκο CD ROM. Ο φωτοανιχνευτής περιέχει τρεις φωτοдиодους, ορατές στο κέντρο της φωτογραφίας [47].

Στις τηλεπικοινωνίες χαρακτηριστικό μήκος κύματος που χρησιμοποιείται είναι τα 1550nm, όπως θα χρησιμοποιηθεί και στη συγκεκριμένη εργασία. Έτσι, οι φωτοανιχνευτές πυριτίου δεν μπορούν να χρησιμοποιηθούν, διότι το πυρίτιο πάει να

απορροφά ακτινοβολία σε μήκος κύματος από 1100nm και άνω. Συνεπώς σε τέτοια μήκη κύματος χρησιμοποιούνται είτε ετεροεπαφές με εξωτικά υλικά (πχ. HgCdTe), γεγονός που αυξάνει το κόστος κατασκευής, είτε θερμικοί αισθητήρες (βολόμετρα), οι οποίοι μειώνουν την ταχύτητα απόκρισης του φωτοανιχνευτή. Σήμερα, για φωτοανίχνευση στην οπτοηλεκτρονική και στις τηλεπικοινωνίες ($\lambda=1,31-1,55\mu\text{m}$) χρησιμοποιείται κυρίως η τεχνολογία πυριτίου-γερμανίου SiGe. Σε εξέλιξη βρίσκονται οι έρευνες για αύξηση της ταχύτητας τους.

Στις τηλεπικοινωνίες, το ζητούμενο είναι φωτοανιχνευτές με υψηλή ταχύτητα απόκρισης, μεγάλη ευαισθησία στο φως που περιγράφεται μέσω της υψηλής απόκρισης, χαμηλό επίπεδο θορύβου, μικρό μέγεθος και χαμηλό κόστος. Επιπλέον, αναγκαία αναδεικνύεται η εφαρμογή υλικών μικρού πάχους, μεγάλης ευκινησίας φορέων και μεγάλη ευκολία στον έλεγχο των (οπτοηλεκτρονικών) ιδιοτήτων.

Επιπλέον, οι φωτοανιχνευτές που βασίζονται σε τεχνολογία πυριτίου λειτουργούν μόνο σε συγκεκριμένο φάσμα ακτινοβολίας και παρουσιάζουν περιορισμούς στη διαδικασία παραγωγής. Πολλές φορές, ο ημιαγωγός που χρησιμοποιείται πρέπει να είναι κρυσταλλικός και γίνεται εναπόθεση πάνω σε υπόστρωμα πυριτίου ώστε να αναπτυχθεί ο κρύσταλλος. Εάν οι κρυσταλλικές σταθερές των δύο υλικών δεν είναι οι σωστές, δεν μπορεί να αναπτυχθεί ο κρύσταλλος. Ένα άλλο μειονέκτημα είναι η ασυμβατότητα μεταξύ των υλικών. Αυτό τους καθιστά φωτοανιχνευτές αυξημένης πολυπλοκότητας.



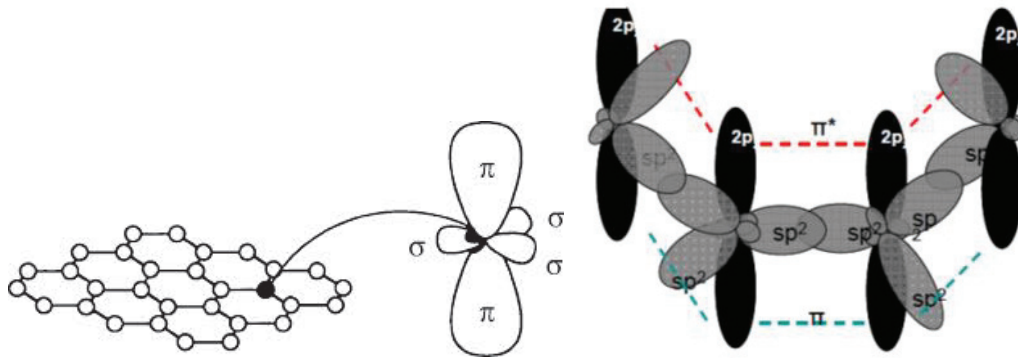
Σχήμα 2 Διάφοροι τύποι φωτοανιχνευτών [48].

Τα τελευταία χρόνια το ενδιαφέρον της επιστημονικής κοινότητας έχει στραφεί στο γραφένιο, καθώς αποτελεί ένα ιδανικό υποψήφιο υλικό για χρήση σε εφαρμογές φωτοανιχνευτών, διότι λειτουργεί σε όλες τις συχνότητες, παρουσιάζει εξαιρετικές οπτοηλεκτρονικές ιδιότητες, δεν χρειάζεται επιταξία και είναι συμβατό με όλες τις τεχνολογίες πυριτίου.

2. ΓΡΑΦΕΝΙΟ

Το γραφένιο αποτελεί μια αλλοτροπική μορφή του άνθρακα και είναι ένας δισδιάστατος κρύσταλλος, μονοατομικού πάχους $d_G = 0.335 \text{ nm}$. Απομονώθηκε για πρώτη φορά το 2004 [3], χαρίζοντας στους εφευρέτες του, Novoselov και Geim, το βραβείο Νόμπελ Φυσικής το 2010 [4].

Τα άτομα του άνθρακα στο γραφένιο σχηματίζουν sp^2 υβριδισμό και είναι τοποθετημένα πάνω στις κορυφές κανονικών εξάγωνων, δημιουργώντας κυψελοειδή δομή. Η πλησιέστερη απόσταση μεταξύ δύο ατόμων άνθρακα είναι 1.42 \AA με εσωτερική γωνία ίση με 120° [6, 7]. Κάθε άτομο άνθρακα σχηματίζει τέσσερις ομοιοπολικούς δεσμούς με τα γειτονικά του άτομα. Τρεις ισχυρούς σ δεσμούς με τρία άτομα άνθρακα του επιπέδου, οι οποίοι είναι υπεύθυνοι για τις μηχανικές ιδιότητες του γραφενίου και ένα π δεσμό εκτός του επιπέδου, ο οποίος προσδίδει τις οπτοηλεκτρονικές ιδιότητες στο γραφένιο. Όπως φαίνεται και στο Σχήμα 3, οι σ δεσμοί δημιουργούνται από επικάλυψη $sp^2 - sp^2$ υβριδικών τροχιακών. Το τέταρτο ηλεκτρόνιο κάθε ατόμου άνθρακα κινείται στο τροχιακό $2p_z$, που έχει σχήμα διπλού λοβού και σχηματίζει π δεσμικά και π^* αντιδεσμικά μοριακά τροχιακά [5, 10].



Σχήμα 3 Σχηματική απεικόνιση της υβριδικής δομής του γραφενίου [40].

Η δομή του γραφενίου παίζει καθοριστικό ρόλο στις ιδιότητες του. Παρακάτω αναλύονται οι βασικές ιδιότητες του γραφενίου.

3. ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ

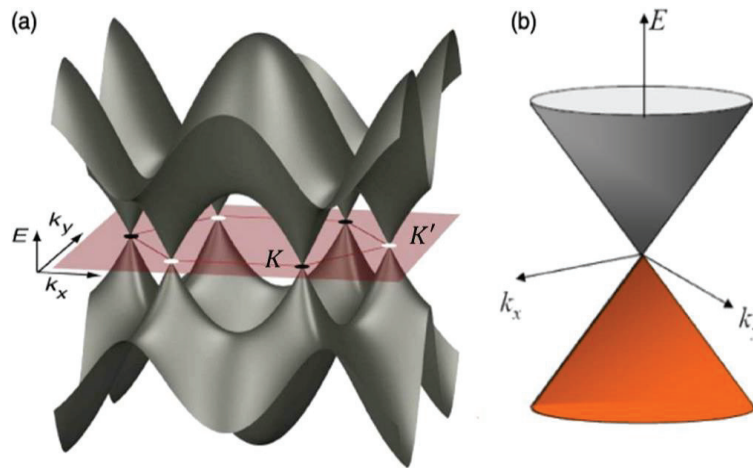
3.1. ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ

Όπως έχει προαναφερθεί, στο γραφένιο κάθε άτομο άνθρακα δημιουργεί τρεις σ δεσμούς με τα γειτονικά άτομα άνθρακα του ίδιου επιπέδου και έναν π δεσμό εκτός του επιπέδου, όπως φαίνεται στο Σχήμα 3. Οι π δεσμοί κυριαρχούν σε δομές χαμηλών ενεργειακών ζωνών (< 1 eV). Αυτό αποδεικνύεται και από τη βιβλιογραφία, όπου χρησιμοποιείται η προσέγγιση ισχυρού δεσμού (tight binding) για την ανάλυση της ηλεκτρονιακής δομής του μονοστρωματικού γραφενίου [10, 11] και παραλείπονται οι καταστάσεις σ που σχηματίζουν ζώνες με μεγάλη (> 12 eV στο κέντρο της πρώτης ζώνης Brillouin) ενέργεια διαχωρισμού. Τα αποτελέσματα δείχνουν ότι η ζώνη σθένους και η ζώνη αγωγιμότητας στο γραφένιο συναντιούνται στα σημεία K και K' της πρώτης ζώνης Brillouin, όπου μηδενίζεται η πυκνότητα των καταστάσεων και το επίπεδο Fermi ορίζεται μηδέν [11]. Έτσι, αποδεικνύεται και η γραμμικότητα της ενεργειακής διασποράς στα σημεία αυτά, όπως φαίνεται στο Σχήμα 4.

Η εξίσωση, που περιγράφει την γραμμική εξάρτηση της ενέργειας των φορέων αγωγιμότητας με την ορμή, δίνεται μέσω της σχέσης Dirac

$$E = \pm \hbar |k| v_f = \vec{p} \vec{v}_f \quad (1)$$

όπου τα ηλεκτρόνια (ή οπές) στο γραφένιο συμπεριφέρονται ως άμαζα σωματίδια (Massless Dirac Fermions) με $v_f = 10^6$ m/s η ταχύτητα Fermi [10, 11] και \vec{k} το κυματόνιο που έχει ως αρχή τα σημεία K και K' [9], τα οποία ονομάζονται και σημεία Dirac.



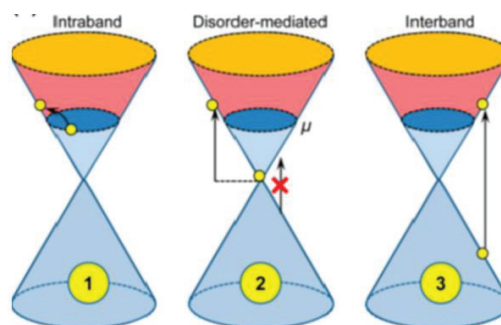
Σχήμα 4 (a) Δομή ενεργειακών ζωνών για ένα εξαγωνικό πλέγμα ανθράκων του γραφενίου που εμφανίζει το επίπεδο που σχηματίζουν τα σημεία Dirac (σημεία K και K') των ατόμων του. (b) Κωνικό ενεργειακό διάγραμμα ενός ατόμου γραφενίου ως συνάρτηση του κυματανύσματος k .

Συμπερασματικά, το γραφένιο ξεχωρίζει για τις ηλεκτρικές ιδιότητες του, λόγω της μοναδικής φύσης των φορέων αγωγιμότητας του, οι οποίοι μπορεί να είναι είτε ηλεκτρόνια, είτε οπές. Χαρακτηρίζεται ως ένα ημι-μέταλλο ή αλλιώς ημιαγωγός μηδενικού χάσματος. Σε συνθήκες περιβάλλοντος, η συγκέντρωση των φορέων του μπορεί να φτάσει μέχρι $n = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ με τιμή ευκινησίας που ξεπερνά τα $15000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ [39].

3.2. ΟΠΤΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ

Οι οπτικές ιδιότητες του γραφενίου, λόγω της απουσίας διακένου, καθορίζονται από δύο κύριους μηχανισμούς. Ο πρώτος μηχανισμός αφορά τις διαζωνικές (interband) μεταβάσεις, δηλαδή μεταπτώσεις ηλεκτρονίων από τη ζώνη αγωγιμότητας στη ζώνη σθένους και ο δεύτερος αφορά τις ενδοζωνικές (intraband) μεταβάσεις, δηλαδή τις μεταβάσεις των ηλεκτρονίων εντός της ζώνης αγωγιμότητας ή εντός της ζώνης σθένους.

Οι μεταβάσεις αυτές σχετίζονται με το χημικό δυναμικό μ του γραφενίου και την συχνότητα της προσπίπτουσας ακτινοβολίας. Αν υποθέσουμε ότι το χημικό δυναμικό είναι μ , τότε έχουμε δύο περιπτώσεις μεταβάσεων των ηλεκτρονίων. Στην περίπτωση όπου η ενέργεια είναι μικρότερη από 2μ , έχουμε μόνο ενδοζωνικές μεταβάσεις (Σχήμα 5.1), καθώς οι διαζωνικές μεταβάσεις δε μπορούν να συμβούν λόγω της απαγορευτικής αρχής του Pauli (Σχήμα 5.2), αφού όλες οι καταστάσεις με μικρότερη ενέργεια είναι κατειλημμένες. Για να έχουμε διαζωνικές μεταβάσεις, θα πρέπει η προσπίπτουσα ακτινοβολία να έχει ενέργεια μεγαλύτερη ή ίση από 2μ (Σχήμα 5.3) [16].



Σχήμα 5 Επιτρεπόμενες ενεργειακές μεταβάσεις 1. Ενδοζωνικές μεταβάσεις, 2. Απαγορευτική Αρχή Pauli (Pauli blocking) και 3. Διαζωνικές μεταβάσεις σε SLG [16].

Οι δύο αυτοί μηχανισμοί περιγράφονται μαθηματικά από την οπτική αγωγιμότητα μέσω της σχέσης Kubo [15, 17]

$$\begin{aligned}
\sigma(\omega, \mu, \tau, T) &= \sigma_{intra} + \sigma_{inter} = \\
&= -\frac{ie^2}{\pi\hbar^2} \frac{1}{(\omega + i\tau^{-1})} \left[\int_0^{\infty} \varepsilon \left(\frac{\partial f_d(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} - \frac{\partial f_d(-\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon \right. \\
&\quad \left. - \int_0^{\infty} \frac{f_d(-\varepsilon) - f_d(\varepsilon)}{(\omega + i\tau^{-1})^2 - 4(e/\hbar)^2} d\varepsilon \right] \tag{2}
\end{aligned}$$

όπου ω είναι η συχνότητα προσπίπτουσας ακτινοβολίας, μ το χημικό δυναμικό, τ ο χρόνος χαλάρωσης των ηλεκτρονίων, ο οποίος είναι ο μέσος χρόνος μεταξύ δύο διαδοχικών σκεδάσεων των ηλεκτρονίων, T η θερμοκρασία, e το φορτίο του ηλεκτρονίου, ε η ενέργεια και $f_d(\varepsilon)$ η κατανομή Fermi-Dirac

$$f_d = \frac{1}{1 + e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}}} \tag{3}$$

με k_B η σταθερά του Boltzmann.

Στην εξίσωση (2) ο πρώτος όρος περιγράφει τις ενδοζωνικές μεταβάσεις [18, 19], ενώ ο δεύτερος τις διαζωνικές μεταβάσεις [20].

Επίσης, όταν $\mu \gg k_B T$, τότε το χημικό δυναμικό ισούται με την ενέργεια Fermi $\mu \approx E_F \approx \sqrt{\pi\hbar^2 v_F^2 n}$, όπου n η πυκνότητα των φορέων αγωγιμότητας και ο χρόνος χαλάρωσης εξαρτάται από την ευκινησία των ηλεκτρονίων και δίνεται από τη σχέση

$$\tau = \frac{\mu_e \cdot E_F}{e \cdot v_F^2} \tag{4}$$

όπου μ_e η ευκινησία των ηλεκτρονίων, E_F η ενέργεια Fermi και $v_F = 10^6 \frac{m}{s}$.

Όσο λιγότερες είναι οι ατέλειες στο γραφένιο, τόσο μεγαλύτερος είναι ο χρόνος χαλάρωσης και η κινητικότητα των φορέων. Ένας συνηθισμένος χρόνος χαλάρωσης για πρακτικές εφαρμογές είναι κοντά στα 200 fs. Αυτός ο χρόνος, δηλαδή $\tau = 200$ fs, χρησιμοποιείται στην παρούσα εργασία.

Η διηλεκτρική συνάρτηση του γραφενίου συνδέεται με την αγωγιμότητα και δίνεται από τον τύπο

$$\varepsilon_G = \varepsilon_\infty + \frac{i\sigma}{\varepsilon_0\omega d_G} \quad (5)$$

όπου σ η οπτική αγωγιμότητα του γραφενίου, ω η συχνότητα της ακτινοβολίας και $d_G = 0.335 \text{ nm}$ το πάχος του γραφενίου.

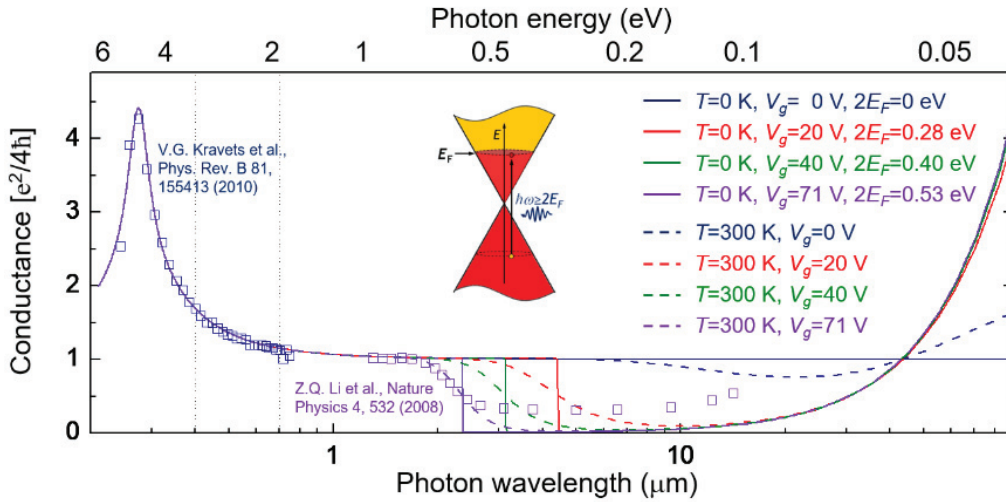
Επομένως, μπορεί να ελεγχθεί η διηλεκτρική ή/και μεταλλική οπτική συμπεριφορά του γραφενίου μέσω του χημικού δυναμικού, από το οποίο εξαρτάται η αγωγιμότητα.

Τέλος, η απορρόφηση του γραφενίου συνδέεται με την διηλεκτρική συνάρτηση του γραφενίου και συνεπώς και με την αγωγιμότητα με τον τύπο

$$A_G = \frac{\text{Im}(\varepsilon_G)2\pi d_G}{\lambda} \stackrel{(5)}{\Rightarrow} A_G = \frac{2\pi \text{Re}(\sigma)}{\varepsilon_0\omega\lambda} \quad (6)$$

όπου ε_G η διηλεκτρική συνάρτηση του γραφενίου, $d_G = 0.335 \text{ nm}$ το πάχος του γραφενίου και λ το μήκος κύματος της ακτινοβολίας.

Παρακάτω παρουσιάζεται το διάγραμμα της αγωγιμότητας συναρτήσει του μήκους κύματος/ενέργειας φωτονίων, όπου γίνεται ξεκάθαρο ότι οι διαζωνικές μεταβάσεις κυριαρχούν στις υψηλές ενέργειες, ενώ οι ενδοζωνικές μεταβάσεις κυριαρχούν στις χαμηλές ενέργειες.



Σχήμα 6 Αγωγιμότητα γραφενίου συναρτήσει του μήκους κύματος/ενέργειας φωτονίων [9, 46].

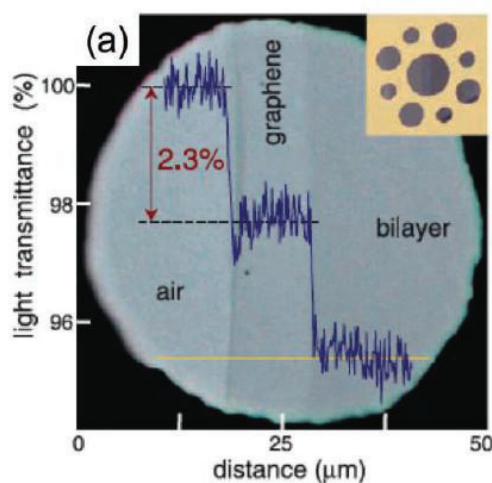
Στο Σχήμα 6 παρατηρείται ότι το φάσμα αγωγιμότητας του γραφενίου παρουσιάζει μέγιστο στο υπεριώδες φάσμα, σταθερή αγωγιμότητα στο ορατό φάσμα, Pauli blocking λόγω του εμπλουτισμού στο κοντινό υπέρυθρο και αγωγιμότητα λόγω ελεύθερων Drude ηλεκτρονίων στο υπέρυθρο.

Να τονιστεί ότι στην απόλυτη θερμοκρασία, $T=0$ K, το χημικό δυναμικό των ηλεκτρονίων είναι ίσο με την ενέργεια Fermi, $\mu = E_F$. Λόγω αυτής της ιδιότητας αναφερόμαστε πολλές φορές στην ενέργεια Fermi, E_F , αντί το χημικό δυναμικό, μ . Σε αυτή την περίπτωση είναι επιτρεπτές μόνο οι διαζωνικές μεταβάσεις. Ωστόσο, το χημικό δυναμικό εξαρτάται από την θερμοκρασία και σε πεπερασμένες θερμοκρασίες, όπως για παράδειγμα στη θερμοκρασία περιβάλλοντος $T = 300$ K, μπορούν να καταληφθούν και καταστάσεις πάνω από την ενέργεια Fermi λόγω της θερμικής διέγερσης των ηλεκτρονίων, οπότε είναι επιτρεπτές και ενδοζωνικές μεταβάσεις.

Στο μη εμπλουτισμένο γραφένιο, $\mu = 0$, σε θερμοκρασία $T = 0$ K και σε μια φασματική περιοχή μεταξύ 300 nm και 2.5 μm [12], η απορρόφηση του είναι σταθερή και είναι ίση με

$$A_G = 1 - T = \pi\alpha = 2.3\% \quad (7)$$

όπου το T είναι το ποσοστό της διέλευσης της HM ακτινοβολίας, ενώ παραλείπεται η μικρή ανάκλαση του μονοστρωματικού γραφενίου SLG ($< 0.1\%$) και $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$ η σταθερά λεπτής υφής, η οποία χαρακτηρίζει την ισχύ της HM αλληλεπίδρασης.



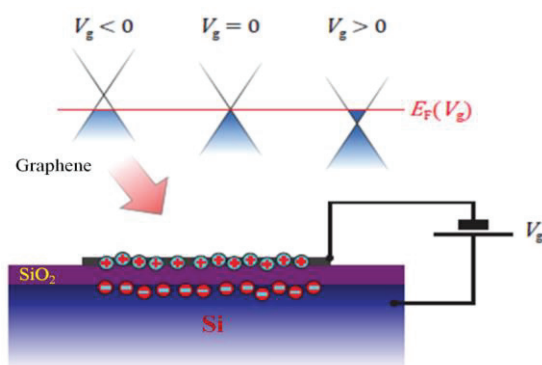
Σχήμα 7 Το ποσοστό διέλευσης του λευκού φωτός στον αέρα, σε ένα φύλλο και σε διστρωματικό γραφένιο συναρτήσει της απόστασης.

Το γραφένιο παρουσιάζει ισχυρή απορρόφηση σε σύγκριση με το μικρό του πάχος. Αυτή η ευρυζωνική απορρόφηση είναι αποτέλεσμα της γραμμικής ενεργειακής διασποράς και της απουσίας διακένου του μονοστρωματικού γραφενίου. Έτσι, το γραφένιο κατατάσσεται ως ένα πολλά υποσχόμενο υλικό για φωτοανιχνευτικές διατάξεις.

4. ΕΜΠΛΟΥΤΙΣΜΟΣ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ

Στο εμπλουτισμένο γραφένιο, το επίπεδο Fermi μπορεί να βρίσκεται είτε πάνω από το Dirac σημείο, στη ζώνη αγωγιμότητας (n-doping), είτε κάτω από το Dirac σημείο, στη ζώνη σθένους (p-doping). Με τον εμπλουτισμό ελέγχεται η πυκνότητα και ο τύπος των φορέων αγωγιμότητας του γραφενίου. Ο εμπλουτισμός του γραφενίου μπορεί να ρυθμιστεί εύκολα με την εφαρμογή εξωτερικής διαφοράς δυναμικού (doping by gating) ανάμεσα σε δυο αγωγίμα υλικά, μεταξύ των οποίων παρεμβάλλεται ένα διηλεκτρικό [3, 13, 14].

Η πιο συνηθισμένη διάταξη που χρησιμοποιείται, όπως θα χρησιμοποιηθεί και στη συγκεκριμένη εργασία, αποτελείται από νοθευμένο πυρίτιο Si και γραφένιο, ενώ το διηλεκτρικό που παρεμβάλλεται ανάμεσα τους είναι το διοξείδιο του πυριτίου SiO₂. Η διάταξη αυτή μπορεί να θεωρηθεί ως ένας επίπεδος πυκνωτής. Το Σχήμα 8 παρουσιάζει τις μεταβολές της ενέργειας Fermi με την αλλαγή της τάσης πύλης V_g (gate voltage) [15].



Σχήμα 8 Πάνω: Μεταβολή του επιπέδου Fermi στο γραφένιο μεταβάλλοντας τη διαφορά δυναμικού V_g . Κάτω: Σχηματική απεικόνιση τυπικής διάταξης Graphene/SiO₂/Si για τον εμπλουτισμό του γραφενίου με πύλη (Doping by gating).

Η πυκνότητα των φορέων n δίνεται από τον τύπο

$$n = C_g \cdot \frac{V_g}{e} = \frac{\epsilon_r \epsilon_0 V_g}{d e} \quad (8)$$

όπου C_g η χωρητικότητα του πυκνωτή και e το φορτίο των ηλεκτρονίων, ϵ_0 η διηλεκτρική σταθερά του κενού, ϵ_r η διηλεκτρική σταθερά του διηλεκτρικού και d το πάχος του διηλεκτρικού. Η μεταβολή του εμπλουτισμού εξαρτάται από το πάχος και το είδος του διηλεκτρικού.

Επίσης, η πυκνότητα των φορέων αγωγιμότητας n δίνεται από τη σχέση

$$n = \frac{k_F^2}{\pi} \Rightarrow k_F = \sqrt{\pi n} \quad (9)$$

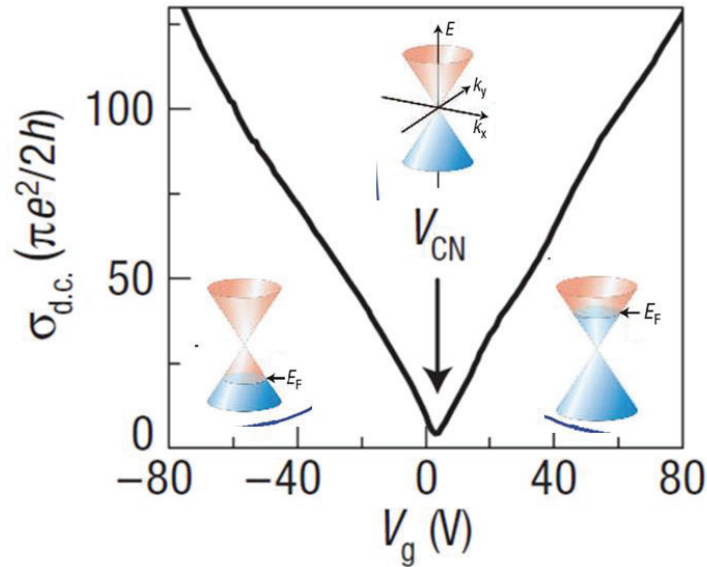
όπου k_F το κυματοδιάνυσμα Fermi.

Συνδέοντας τις σχέσεις (1), (8) και (9) θα καταλήξουμε στη σχέση

$$\begin{aligned} (1) \Rightarrow E_F &= \hbar v_f k_F \stackrel{(9)}{\Rightarrow} E_F = \hbar v_f \sqrt{\pi n} \stackrel{(8)}{\Rightarrow} E_F = \\ &\hbar v_f \sqrt{\pi C_g \cdot V_g / e} \Rightarrow E_F \propto \sqrt{V_g} \end{aligned} \quad (10)$$

Επομένως, το επίπεδο Fermi του γραφενίου μεταβάλλεται με την εφαρμογή εξωτερικής διαφοράς δυναμικού.

Στο Σχήμα 9 απεικονίζονται πειραματικές μετρήσεις κατά τον εμπλουτισμό με doping by gating [9]. Χρησιμοποιώντας αυτή τη μέθοδο, το επίπεδο Fermi του γραφενίου μπορεί εύκολα να μετακινηθεί από τη ζώνη αγωγιμότητας στη ζώνη σθένους, ακολουθώντας την αλλαγή της τάσης της πύλης (gate voltage) από αρνητική σε θετική, που αντιστοιχεί σε γραφένιο τύπου p και τύπου n.



Σχήμα 9 Μεταβολή της ηλεκτρικής αγωγιμότητας με αλλαγή της εφαρμοζόμενης διαφοράς δυναμικού V_g (gate voltage) [9].

Συμπεραίνεται ότι με τον εμπλουτισμό του γραφενίου μπορούν να καθοριστούν οι οπτικές και ηλεκτρικές ιδιότητες του. Η ευκολία και η δυνατότητα ελέγχου στη ρύθμιση της οπτικής απόκρισης είναι βασική προϋπόθεση ώστε να μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε ηλεκτρονικές εφαρμογές και πιο συγκεκριμένα για το σχεδιασμό και τη λειτουργία μιας φωτοανιχνευτικής διάταξης.

5. ΒΑΣΙΚΑ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ ΦΩΤΟΑΝΙΧΝΕΥΤΩΝ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ

Οι φωτοανιχνευτές γραφενίου [24-26], έχει αποδειχτεί ότι μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε πολλών ειδών οπτικές εφαρμογές. Η ευελιξία των φωτοανιχνευτών αυτών, παρέχει τη δυνατότητα εφαρμογής σε περιοχές υπερταχείας (ultrafast) φωτοανίχνευσης, λόγω της υψηλής ευκινησίας των φορέων γραφενίου και υπερευαίσθητης (ultrasensitive) φωτοανίχνευσης, για φωτόνια με συχνότητες στην υπεριώδη, ορατή, υπέρυθη και terahertz φασματική περιοχή. Κάποιοι από αυτούς, μπορούν ήδη να ανταγωνιστούν τις υπάρχουσες τεχνολογίες και αποκτούν ιδιαίτερο ενδιαφέρον για εμπορευματοποίηση.

Οι φωτοανιχνευτές που έχουν επικρατήσει ευρέως στην τεχνολογία οπτικής ανίχνευσης χαρακτηρίζονται από συγκεκριμένα χαρακτηριστικά. Τα κυριότερα από αυτά είναι η απόκριση, το ελάχιστο επίπεδο θορύβου και η ταχύτητα απόκρισης [2, 28, 29].

Για τις περισσότερες εφαρμογές, η Απόκριση \mathbb{R} (Responsivity) είναι το πιο σημαντικό χαρακτηριστικό ενός φωτοανιχνευτή, καθώς καθορίζει τη σχέση μεταξύ της οπτικής εισόδου και της ηλεκτρικής εξόδου στην περιοχή του μήκους κύματος που πρόκειται να χρησιμοποιηθούν. Εκφράζει την ένταση του παραγόμενου φωτορεύματος I_{ph} ανά μονάδα προσπίπτουσας οπτικής ισχύος P_{in} . Δίνεται δηλαδή από τη σχέση

$$\mathbb{R} = \frac{I_{ph}}{P_{in}} \quad (11)$$

με μονάδα μέτρησης το AW^{-1} . Όσο μεγαλύτερη είναι η αποκρισιμότητα του ανιχνευτή, τόσο καλύτερη είναι η ευαισθησία του δέκτη.

Η σωστή αξιολόγηση της απόδοσης του φωτοανιχνευτή δεν παρέχεται μόνο από την απόκριση, αλλά και με τη μέτρηση του ελάχιστου επιπέδου θορύβου, NEP (Noise Equivalent Power). Ο καθορισμός του επιπέδου θορύβου, ορίζεται ως το ποσό του φωτός που απαιτείται για την παραγωγή σήματος (φωτόρευμα) ίσου με το συνολικό ρεύμα θορύβου του ανιχνευτή σε συγκεκριμένο μήκος κύματος και σε εύρος ζώνης 1 Hz.

$$NEP = \frac{I_{noise}}{\mathbb{R}} \quad (12)$$

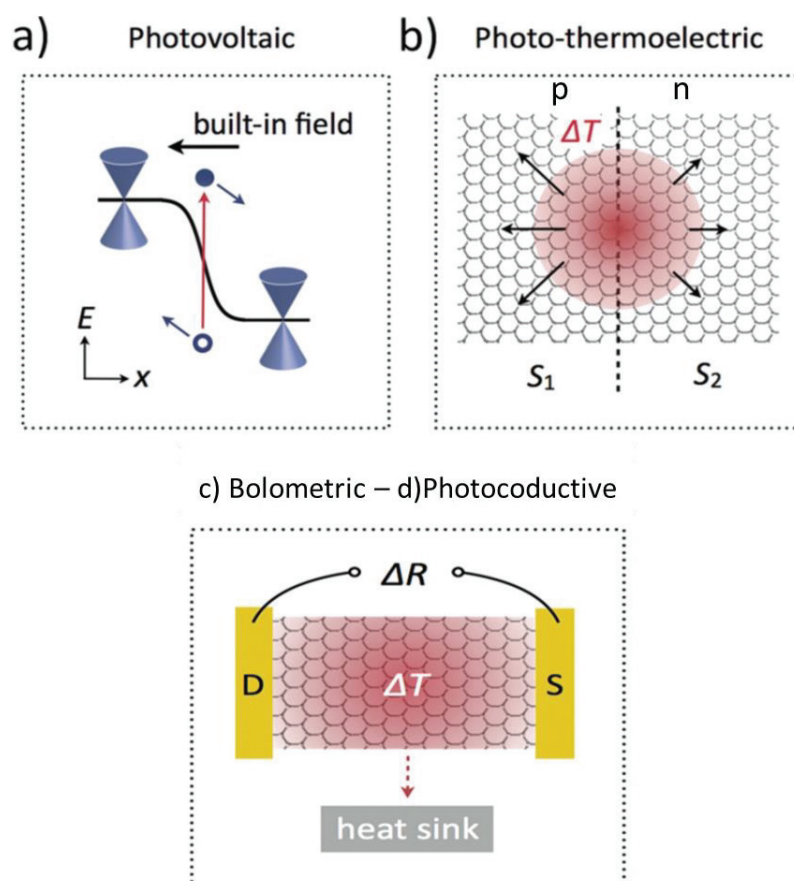
Εκφράζεται σε W/\sqrt{Hz} . Από τον ορισμό του NEP είναι φανερό ότι όσο πιο μικρή είναι η τιμή του, τόσο πιο καλή είναι η απόδοση του φωτοανιχνευτή κατά την ανίχνευση μικρών σημάτων παρουσία θορύβου.

Τέλος, από τα σημαντικότερα χαρακτηριστικά είναι η ταχύτητα απόκρισης (Speed Response) των φωτοανιχνευτών. Πρόκειται για την ταχύτητα με την οποία ο φωτοανιχνευτής αποκρίνεται στις μεταβολές της έντασης του φωτός. Όταν ηλεκτρομαγνητικά κύματα προσπίπτουν στον φωτοανιχνευτή, απαιτείται κάποιος πεπερασμένος χρόνος ώστε να παραχθεί φωτορεύμα [1] και χρόνος μέχρι να εφησυχάσουν τα διεγερμένα ηλεκτρόνια. Ένα ελάχιστο όριο στον χρόνο απόκρισης σε

φωτοανιχνευτές τύπου μέταλλο-γραφένιο-μέταλλο μετρήθηκε να είναι περίπου 2 ps και εντοπίστηκε σε εύρος ζώνης ~ 262 GHz [49].

6. ΦΥΣΙΚΟΙ ΜΗΧΑΝΙΣΜΟΙ ΓΙΑ ΦΩΤΟΑΝΙΧΝΕΥΣΗ ΣΕ ΓΡΑΦΕΝΙΟ

Η μετατροπή των απορροφημένων φωτονίων σε ηλεκτρικό σήμα είναι η φυσική αρχή πάνω στην οποία βασίζεται η φωτοανίχνευση. Παρακάτω θα αναφερθούν, εν συντομία, οι τέσσερις φυσικοί μηχανισμοί, με τους οποίους επιτυγχάνεται φωτοανίχνευση στο γραφένιο (Σχήμα 10).



Σχήμα 10 Σχηματική απεικόνιση των 4 μηχανισμών παραγωγής φωτορεύματος που μπορεί να επιτευχθεί σε γραφένιο, (α) φωτοβολταϊκό, (β) φωτοθερμοηλεκτρικό, (γ) βολομετρικό και (δ) φωτοαγώγιμο [1].

6.1. ΦΩΤΟΒΟΛΤΑΪΚΟ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ

Το φωτοβολταϊκό φαινόμενο είναι ο μηχανισμός κατά τον οποίο η παραγωγή φωτορεύματος βασίζεται στον διαχωρισμό των ζευγών ηλεκτρονίων-οπών (e-h), από την επίδραση εσωτερικού ηλεκτρικού πεδίου στη διεπαφή, μεταξύ αρνητικών (τύπου n) και θετικών (τύπου p) περιοχών του γραφενίου.

6.2. ΦΩΤΟΘΕΡΜΟΗΛΕΚΤΡΙΚΟ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ

Με βάση το φωτοθερμοηλεκτρικό φαινόμενο [1], τα φωτόνια που εισέρχονται στο γραφένιο προκαλούν αρχικά ηλεκτρονιακή διέγερση, η οποία μετατρέπεται πολύ γρήγορα σε θερμική ενέργεια, γεγονός που οδηγεί στην αύξηση της τοπικής θερμοκρασίας στο γραφένιο και στην άμεση παραγωγή ηλεκτρικού σήματος μέσω του φαινομένου Seebeck.

6.3. ΒΟΛΟΜΕΤΡΙΚΟ (BOLOMETRIC) ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ

Το βολομετρικό φαινόμενο [1] βασίζεται στην αλλαγή της ηλεκτρικής αγωγιμότητας, λόγω της αύξησης θερμοκρασίας του γραφενίου και κατ' επέκταση στη μείωση της ευκινησίας των φορέων του. Η παραγωγή του φωτορεύματος οφείλεται στη διαφορά του ρεύματος που προκύπτει όταν εφαρμόζεται τάση στα δύο άκρα του, λόγω της διαφοράς στην ευκινησία των φορέων του γραφενίου.

6.4. ΦΩΤΟΑΓΩΓΙΜΟΤΗΤΑΣ (PHOTOCONDUCTIVE/PHOTOGRAPHING) ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ

Η διαδικασία φωτοαγωγιμότητας σχετίζεται με την αύξηση της πυκνότητας των φορέων Δn ενός αγωγού, επομένως και στην αύξηση της αγωγιμότητας του, σ [1]. Και

σε αυτή την περίπτωση, θεωρείται αναγκαία η επίδραση μιας εξωτερικής διαφοράς δυναμικού για την παραγωγή ηλεκτρικού σήματος.

Πρέπει να επισημανθεί ότι οι φωτοανιχνευτές γραφενίου παράγουν ρεύμα (ακόμη και όταν δεν υπάρχει φως) όταν εφαρμόζεται στα άκρα τους διαφορά δυναμικού, το οποίο ονομάζεται ρεύμα σκότους (dark current) και αποτελεί μια πηγή θορύβου για τη συσκευή. Αυτό σημαίνει πως στα φωτοαγωγιμα φαινόμενα (bolometric και photoconductive), που απαιτούν και την επίδραση εξωτερικής τάσης για την εφαρμογή τους, οι πηγές θορύβου αυξάνονται. Στην παρούσα μελέτη απαιτείται η εκμετάλλευση των φαινομένων με το ελάχιστο δυνατό επίπεδο θορύβου, γι' αυτό το λόγο προσεγγίζεται το φωτοβολταϊκό και το φωτοθερμοηλεκτρικό φαινόμενο. Έρευνες έχουν αποδείξει [27] ότι το φωτοβολταϊκό φαινόμενο είναι μια τάξη μεγέθους λιγότερο ισχυρό από το φωτοθερμοηλεκτρικό. Επομένως, υπερισχύει το φωτοθερμοηλεκτρικό φαινόμενο.

7. ΦΩΤΟΘΕΡΜΟΗΛΕΚΤΡΙΚΟ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ

Στο φωτοθερμοηλεκτρικό φαινόμενο [1], η ενέργεια των απορροφημένων φωτονίων μεταφέρεται στα ελεύθερα ηλεκτρόνια του γραφενίου, προκαλώντας τοπικά την γρήγορη αύξηση της θερμοκρασίας και κατ' επέκταση την αύξηση της θερμικής τους ενέργειας. Τα ηλεκτρόνια αυτά, που ονομάζονται και θερμοί φορείς, μέσω σκέδασης ηλεκτρονίου - ηλεκτρονίου, διεγείρουν γειτονικά ηλεκτρόνια και μεταφέρουν την επιπλέον ενέργεια τους στην παραγωγή πρόσθετων θερμών σωματιδίων ή ζευγών ηλεκτρονίου - οπής. Τα θερμά ηλεκτρόνια μπορούν να παραμείνουν για 1-5 ps σε θερμοκρασία υψηλότερη από αυτή του πλέγματος. Λόγω της μεγάλης θερμοχωρητικότητας του πλέγματος σε σύγκριση με το ηλεκτρόνιο, θεωρείται ότι η θερμοκρασία του κρυστάλλου παραμένει σταθερή στη θερμοκρασία περιβάλλοντος. Η τοπική θέρμανση των ηλεκτρονίων προκαλεί διάχυση των θερμών ηλεκτρονίων από τις θερμές προς τις ψυχρές περιοχές και παράγεται ένα ρεύμα θερμότητας συνοδευόμενο από ηλεκτρικό ρεύμα (που μεταφέρεται από τα ίδια τα ηλεκτρόνια) που είναι ανάλογο με την τάση. Η αναλογία μεταξύ της τάσης και της διαφοράς της

θερμοκρασίας που αναπτύσσεται ονομάζεται θερμοηλεκτρική ισχύ ή φαινόμενο Seebeck και οδηγεί στην άμεση παραγωγή ηλεκτρικού σήματος. Το φωτοθερμοηλεκτρικό ρεύμα που δημιουργείται μπορεί να συλλεχθεί εάν τοποθετηθούν δύο μεταλλικές επαφές, ηλεκτρόδια, στα άκρα του καναλιού του γραφενίου.

Η εξίσωση διάχυσης της θερμότητας δίνεται από τον παρακάτω τύπο [28]

$$-\nabla \cdot (\kappa \nabla T_e) = \nabla \Pi \cdot j_q - \tau_{e-ph}^{-1} c_e \Delta T + \alpha P_{dens} \quad (13)$$

όπου κ [$\text{W/K} \cdot \text{m}^2$] είναι η θερμική αγωγιμότητα των ηλεκτρονίων, T_e [K] η θερμοκρασία των ηλεκτρονίων, $\Pi = S T_e$ ο συντελεστής Peltier, όπου S [V/K] ο συντελεστής Seebeck, $j_q = -\sigma S \nabla T_e$ [A] το τοπικό θερμοηλεκτρικό ρεύμα, σ [A/V] η ηλεκτρική αγωγιμότητα, τ_{e-ph} [s^{-1}] ο μέσος χρόνος χαλάρωσης των θερμών ηλεκτρονίων όταν έρχονται σε επαφή με το υπόστρωμα (3 ps), c_e [$\text{J/K} \cdot \text{m}^2$] η θερμοχωρητικότητα των ηλεκτρονίων, $\Delta T = T_e - T_l$, όπου T_l είναι η θερμοκρασία πλέγματος, α η απορρόφηση του γραφενίου και P_{dens} [W/m^2] η πυκνότητα της ισχύος της εισερχόμενης ακτινοβολίας. Οι παράμετροι γραφενίου σ , S , c_e , κ και α είναι συναρτήσεις της θέσης, και εξαρτώνται από το τοπικό επίπεδο Fermi E_F και την τοπική θερμοκρασία των ηλεκτρονίων T_e , καθιστώντας αυτό ένα εξαιρετικά μη γραμμικό πρόβλημα [28].

Στην εξίσωση (13), ο όρος στην αριστερή πλευρά αντιστοιχεί στο πόση ενέργεια διαχέεται στο χώρο, ενώ στη δεξιά πλευρά ο πρώτος όρος σχετίζεται με την ενέργεια που μετατρέπεται σε ρεύμα, λόγω της κίνησης των ηλεκτρονίων και το πρόσημο του εξαρτάται από τη φορά του ρεύματος, ο δεύτερος στο ρυθμό ενέργειας που χάνει το σύστημα και πηγαίνει στο υπόστρωμα και ο τρίτος όρος σχετίζεται με την ενέργεια που πέφτει στο σύστημα.

Η λύση της εξίσωσης (13) δίνει μια κατανομή της θερμοκρασίας των ηλεκτρονίων από την οποία λαμβάνεται μια θερμοηλεκτρική τάση [28]

$$V_{PTE} = W^{-1} \int_0^W \int_0^L S \nabla T_e dx dy \quad (14)$$

όπου το L είναι το μήκος μεταξύ των ηλεκτροδίων και W το πλάτος του γραφενίου. Το φωτορεύμα που προκύπτει υπολογίζεται

$$I_{PTE} = \frac{V_{PTE}}{R_D} \quad (15)$$

όπου $R_D = R_g + 2R_c$, η συνολική αντίσταση της διάταξης με $R_g = \int_0^L \sigma^{-1}(x) dx$, όπου $\sigma(x) = \int_0^W \sigma(x, y) dy$, η αντίσταση του γραφενίου και R_c η αντίσταση της κάθε επαφής.

Όπως αναφέρθηκε, όλοι οι παράμετροι στις παραπάνω εξισώσεις εξαρτώνται από το τοπικό επίπεδο Fermi και την θερμοκρασία των ηλεκτρονίων. Για δεδομένη θερμοκρασία, πρώτα υπολογίζεται το χημικό δυναμικό μ από τη σχέση [28]

$$\int_0^\infty v(\varepsilon) f(\varepsilon; \mu, T_e) - f(\varepsilon; -\mu, T_e) d\varepsilon = \frac{E_F^2}{\pi \hbar^2 v_F^2} \quad (16)$$

όπου $v(\varepsilon) = \frac{2|\varepsilon|}{\pi \hbar^2 v_F^2}$ είναι η πυκνότητα των καταστάσεων του γραφενίου σε ενέργεια ε και $v_F^2 = 1 \times 10^6 m/s$ η ταχύτητα Fermi του γραφενίου.

Γνωρίζοντας πλέον το χημικό δυναμικό, υπολογίζεται η ηλεκτρική αγωγιμότητα του γραφενίου που δίνεται από τον τύπο [28]

$$\sigma(\mu, T_e) = \int_{-\infty}^\infty \sigma(\varepsilon) \partial_\varepsilon f(\varepsilon; \mu, T_e) d\varepsilon \quad (17)$$

όπου $\sigma(\varepsilon) = q[\mu_{e(h)} n(\varepsilon) + \bar{\mu} n^*(\varepsilon)]$,

με ευκινησία φορέων για $\varepsilon > 0$ των ηλεκτρονίων μ_e , ενώ για $\varepsilon < 0$ των οπών μ_h και μέση τιμή ευκινησίας των δύο φορέων $\bar{\mu} = (\mu_e + \mu_h)/2$. Το απομένον τοπικό φορτίο διακύμανσης (effective residual local charge fluctuation) σε ενέργεια ε δίνεται από τη σχέση [28]

$$n^*(\varepsilon) = \sqrt{n(\varepsilon)^2 + n_0^{*2}} - n(\varepsilon) \quad (18)$$

όπου $n(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^2}{\pi \hbar^2 v_F^2}$ είναι η πυκνότητα φορτίου γραφενίου σε ενέργεια ε και n_0^* είναι η απομένουσα τοπική διακύμανση φορτίου για $\varepsilon=0$.

Ο συντελεστής Seebeck S σχετίζεται με την αγωγιμότητα σ με τον τύπο Mott [28]

$$S(\mu, T_e) = -(|e|T_e\sigma)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon - \mu)\sigma(\varepsilon)\partial_{\varepsilon}f(\varepsilon; \mu, T_e)d\varepsilon \quad (19)$$

Η θερμοχωρητικότητα δίνεται από τον παρακάτω τύπο [28]

$$c_e(\mu, T_e) = \partial_{T_e} \int_0^{\infty} (v(\varepsilon) \varepsilon [f(\varepsilon; \mu, T_e) + f(\varepsilon; -\mu, T_e)])d\varepsilon \quad (20)$$

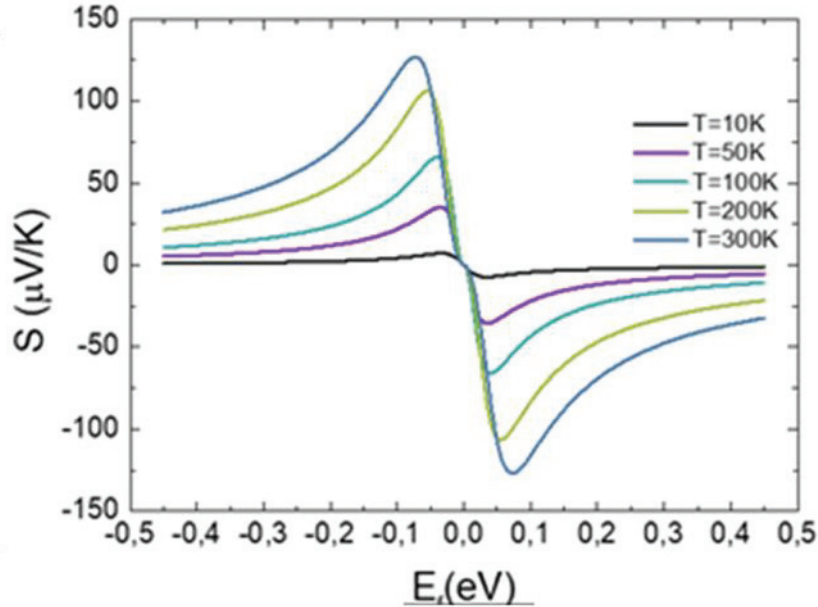
όπου $v(\varepsilon)$ η πυκνότητα των καταστάσεων,

ενώ η θερμική αγωγιμότητα του γραφενίου δίνεται από τον νόμο Wiedemann-Franz

$$\kappa(\mu, T_e) = L_0\sigma(\mu, T_e)T_e \quad (21)$$

όπου $L_0 = 2.44 \times 10^{-8} W\Omega K^{-2}$ είναι ο αριθμός Lorentz.

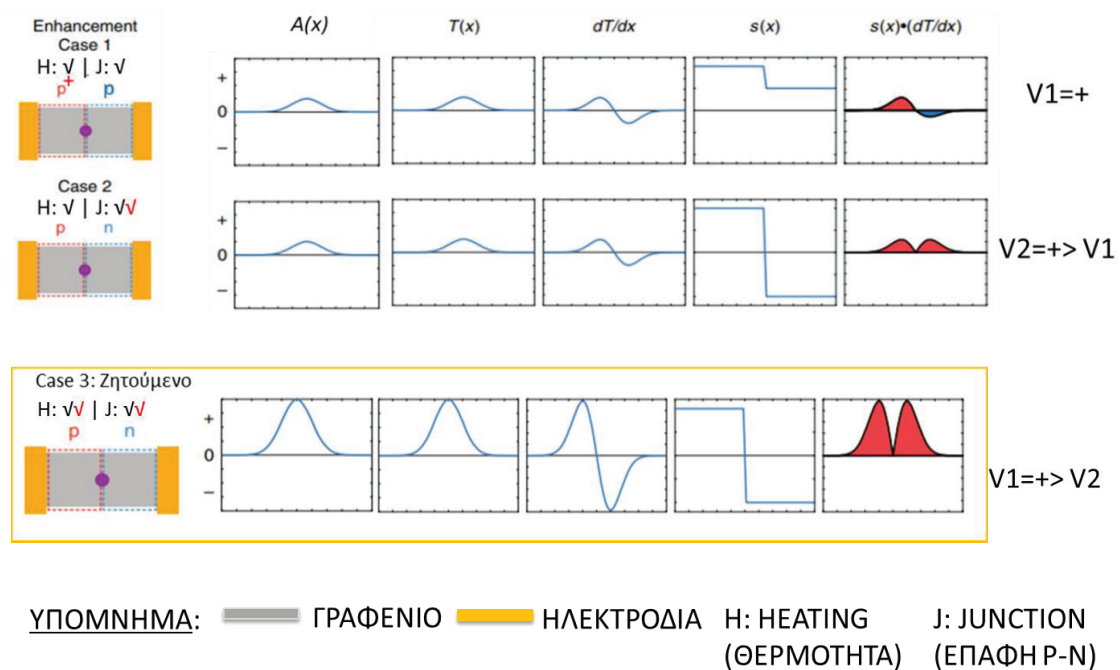
Ο θερμοηλεκτρικός συντελεστής Seebeck δίνεται από την εξίσωση (19). Το διάγραμμα του θερμοηλεκτρικού συντελεστή Seebeck συναρτήσει της ενέργειας Fermi του γραφενίου για διάφορες τιμές της θερμοκρασίας για μια τιμή ευκινησίας των φορέων $\mu_e = 30000 cm^2 V^{-1} s^{-1}$, απεικονίζεται στο παρακάτω Σχήμα 11. Παρατηρείται ότι ο συντελεστής Seebeck παρουσιάζει μέγιστη απόλυτη τιμή κοντά στο 0.07 eV σε όλες τις περιπτώσεις.



Σχήμα 11 Σχηματική απεικόνιση θερμοηλεκτρικού συντελεστή Seebeck συναρτήσει της ενέργειας Fermi του γραφενίου για διαφορετικές τιμές της θερμοκρασίας των ηλεκτρονίων.

Για καλύτερη απεικόνιση του φαινομένου δημιουργήθηκε μια σειρά 1D σχηματικών απεικονίσεων στο Σχήμα 12. Επιλέγεται μια επαφή γραφενίου, όπου οι δύο περιοχές είναι διαφορετικά εμπλουτισμένες. Αυτό καθίστανται αναγκαίο καθώς τα ηλεκτρόνια θερμαίνονται από το προσπίπτον φως στο κέντρο της επαφής και μπορούν να διαχυθούν προς τις ψυχρές περιοχές, εφόσον η θερμοκρασία των υπόλοιπων ηλεκτρονίων στις δύο περιοχές παραμένουν σε ισορροπία με την θερμοκρασία του περιβάλλοντος, με αποτέλεσμα να έχουμε κατανομή της θερμοκρασίας, κίνηση των φορέων και κατά συνέπεια δημιουργία τοπικών ρευμάτων με βάσει το PTE φαινόμενο.

Στην πρώτη περίπτωση απεικονίζεται μία επαφή $p^+ - p$ στο γραφένιο, που σημαίνει ότι η p^+ περιοχή είναι εμπλουτισμένη με περισσότερους φορείς-οπές από την p - περιοχή του γραφενίου. Ενώ, στην δεύτερη περίπτωση απεικονίζεται μια $p-n$ επαφή, όπου p είναι η περιοχή του γραφενίου εμπλουτισμένο με οπές και n η περιοχή με φορείς πλειονότητας ηλεκτρόνια.



Σχήμα 12 Σχηματική απεικόνιση της παραγωγής φωτοθερμοηλεκτρικών ρευμάτων σε γραφένιο [50].

Σε όλες τις γραφικές παραστάσεις, οι οριζόντιοι άξονες δηλώνουν τη χωρική συντεταγμένη x και οι κατακόρυφοι άξονες υποδηλώνονται από τις αντίστοιχες

κεφαλίδες της στήλης. Η στήλη $A(x)$ απεικονίζει την απορρόφηση του γραφενίου, $T(x)$ την κατανομή της θερμοκρασίας ηλεκτρονίων και η στήλη dT / dx είναι η χωρική παράγωγος του $T(x)$. Το $S(x)$ αντιπροσωπεύει τον συντελεστή Seebeck και η στήλη $S(x) \cdot (dT / dx)$ λαμβάνεται ως παράγωγο του γινομένου των στηλών $S(x)$ και dT / dx όπου το ολοκλήρωμα αυτής της ποσότητας είναι ανάλογο της παραγόμενης φωτοθερμοηλεκτρικής τάσης, από την εξίσωση (14). Η σκιασμένη περιοχή, με κόκκινο (μπλε) υποδηλώνει τη θετική (αρνητική) συνεισφορά στο φωτοθερμοηλεκτρικό ρεύμα [50].

Υπενθυμίζεται ότι το παραγόμενο φωτοθερμοηλεκτρικό ρεύμα δίνεται από τον τύπο

$$I_{PTE} = \frac{1}{R} \int S(x) \cdot \nabla T_e(x) dx \quad (22)$$

Όπως φαίνεται στο Σχήμα 12, εφόσον έχει δημιουργηθεί κατανομή θερμοκρασίας των ηλεκτρονίων, η κλίση στη μία πλευρά είναι θετική και στην άλλη αρνητική. Στην πρώτη περίπτωση, οι περιοχές είναι εμπλουτισμένες με τους ίδιους φορείς και ο συντελεστής Seebeck είναι θετικός και στις δύο περιοχές. Επομένως, για δεδομένη κατανομή θερμοκρασίας γύρω από ένα σημείο, το γινόμενο της εξ. (22) από τη μία πλευρά θα ήταν θετικό και από την άλλη αρνητικό, οπότε το συνολικό ρεύμα θα μειωνόταν. Αντίστοιχα, και η $n^+ - n$ επαφή εξάγει τα ίδια αποτελέσματα, μόνο που ο συντελεστής Seebeck είναι αντισυμμετρικός. Στη δεύτερη περίπτωση, ο συντελεστής Seebeck παρουσιάζει ανισοκατανομή και μάλιστα με αντισυμμετρικές τιμές, οπότε η συνολική συνεισφορά στο ρεύμα θα είναι θετική.

Στο γραφένιο είναι σημαντικό να υπάρχει ανισοκατανομή του επιπέδου Fermi για να δημιουργηθεί ένα μη μηδενικό ρεύμα. Διαφορετικά, εάν το επίπεδο Fermi του γραφενίου είναι ομοιόμορφο, για δεδομένη κλίση της θερμοκρασίας γύρω από ένα σημείο, ο συντελεστής Seebeck θα είχε την ίδια τιμή και η συνεισφορά από τη μια πλευρά θα είναι θετική, από την άλλη αρνητική με αποτέλεσμα ένα μηδενικό συνολικό φορτίο.

Στόχος είναι η εξασφάλιση θετικής (ή αρνητικής) συμβολής στο φωτοθερμοηλεκτρικό ρεύμα και στις δύο πλευρές της επαφής, όπως απεικονίζεται στην περίπτωση 3. Σε μια pn επαφή μπορεί να προκύψει ισχυρότερο PTE ρεύμα από τη θέρμανση των ηλεκτρονίων λόγω βελτίωσης της οπτικής απορρόφησης τοπικά στο γραφένιο, καθώς με αυτό τον τρόπο αυξάνεται και η θερμοκρασιακή διαφορά των

ηλεκτρονίων. Επιπλέον βελτίωση μπορεί να επιτευχθεί και με την επιλογή της κατάλληλης ενέργειας Fermi στις δύο περιοχές του γραφενίου, ώστε ο θερμοηλεκτρικός συντελεστής Seebeck να έχει την μεγαλύτερη απόλυτη τιμή.

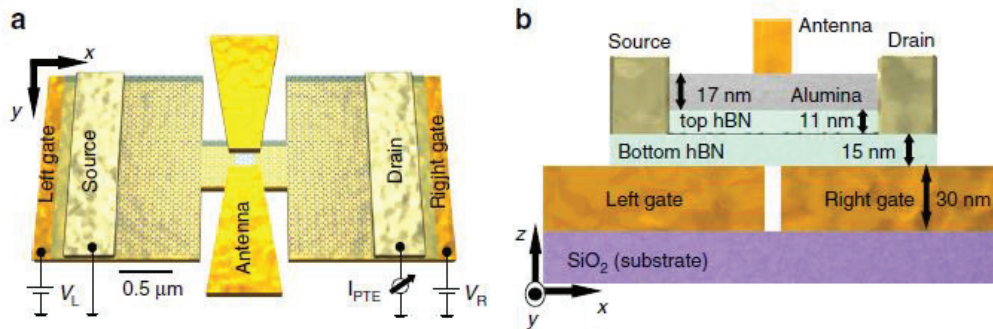
7.1. ΔΙΑΤΑΞΕΙΣ ΦΩΤΟΑΝΙΧΝΕΥΤΩΝ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ ΠΟΥ ΒΑΣΙΖΟΝΤΑΙ ΣΤΟ ΦΩΤΟΘΕΡΜΟΗΛΕΚΤΡΙΚΟ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ

Έρευνες που έχουν δημοσιευθεί [28,50] και παρουσιάζουν διατάξεις που εκμεταλλεύονται το φωτοθερμοηλεκτρικό φαινόμενο παρουσιάζονται παρακάτω. Τα πλασμόνια και κυρίως τα επιφανειακά πλασμόνια, είτε τα επιφανειακά πλασμόνια-πολαριτόνια (SPP), είτε τα εντοπισμένα επιφανειακά πλασμόνια (LSP), μελετώνται πολύ τα τελευταία χρόνια καθώς θεωρείται ότι αποτελούν μια μέθοδο για να ξεπεραστούν πολλές δυσκολίες που προκύπτουν στον τομέα της Νανοτεχνολογίας. Έτσι, στις παρακάτω διατάξεις έχει βελτιστοποιηθεί η φωτοαπόκριση των φωτοανιχνευτών γραφενίου [28, 50] με πλασμονικό συντονισμό και pn επαφές στο κανάλι του γραφενίου.

Στο Σχήμα 13 απεικονίζεται η δομή του φωτοανιχνευτή της δημοσιευμένης έρευνας [28]. Ο φωτοανιχνευτής (Σχήμα 13.α.) αποτελείται από μεταλλικές ηλεκτροστατικές πύλες (χρυσού) σχήματος – H, μήκους 4.2μm, και ένα κανάλι γραφενίου σχήματος – H. Το γραφένιο τοποθετείται ανάμεσα σε h-BN, το οποίο βρίσκεται σε επαφή με τα δύο ηλεκτρόδια. Πάνω από το hBN τοποθετείται αλουμίνα (Alumina) και ως υπόστρωμα διοξείδιο του πυριτίου, SiO₂. Κεραία, συνολικού μήκους 2.7μm, τοποθετείται στην κορυφή της 2D διάταξης. Οι τοπικές πύλες χρησιμεύουν για να δημιουργήσουν μια επαφή pn στο κεντρικό τμήμα του καναλιού του γραφενίου (εφαρμόζοντας τάσεις V_L και V_R), όπου βρίσκονται το κενό της κεραίας και το κενό της πύλης. Και τα δύο κενά είναι της τάξης των ~ 100 nm.

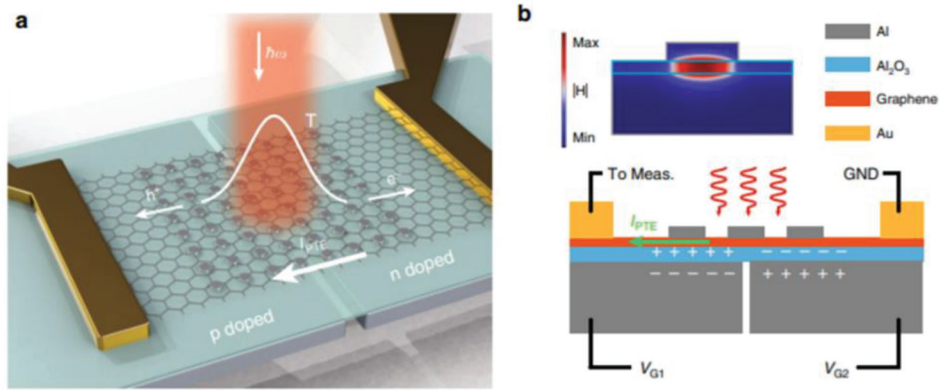
Τα αποτελέσματα της έρευνας [28] δείχνουν ότι επιτεύχθηκε ενίσχυση και συγκέντρωση υψηλού πεδίου με πλασμονική κεραία στο κενό, για εύρος μήκους κύματος $\lambda \approx 5,5-7,5$ μm με συντονισμό επιφανειακών πλασμονίων, επομένως και τοπική αύξηση της θερμοκρασίας του γραφενίου. Αυτή η διάταξη αποδίδει

αξιοσημείωτη απόδοση λειτουργίας με υψηλή ευαισθησία θερμοκρασίας ($NEP \sim 82 \text{ pW}/\sqrt{Hz}$) και γρήγορο χρόνο απόκρισης 17ns στους υπερσύγχρονους ανιχνευτές μέσου υπερύθρου φάσματος και γραφένιο και η απόκριση αυξάνεται στα $17 \text{ mA} / W$.



Σχήμα 13 a. Σχηματική απεικόνιση του φωτοανιχνευτή. b. Σχεδιασμός της διάταξης με ενδείξεις για τα πάχη των υλικών.

Μία άλλη διάταξη φωτοανιχνευτή γραφενίου με μήκος κύματος λειτουργίας στα 700nm που δείχνει την κυριαρχία του PTE φαινομένου (Σχήμα 14), καθώς παρατηρήθηκε 25πλάσια αύξηση στα 700nm στο παραγόμενο φωτορεύμα σε σύγκριση με τις μη ενισχυμένες (οπτικά και ηλεκτρικά) περιπτώσεις παρουσιάζεται στη δημοσιευμένη έρευνα [50]. Στην έρευνα [50], η διάταξη αποτελείται από p-n γραφενίου, ένα ζευγάρι διαχωρισμένων πυλών χρυσού (Au), και τα υλικά από κάτω προς τα πάνω είναι το αργίλιο (Al), το οξείδιο του αργιλίου (Al₂O₃), το γραφένιο και εναποθέτονται νανοδίσκια Al πάνω στο γραφένιο. Τα αποτελέσματα δείχνουν ότι ενισχύεται τοπικά η απορρόφηση του γραφενίου μέσω δημιουργίας συντονισμού επιφανειακών πλασμονίων πάνω στα νανοδίσκια. Σε αντίθεση με την προηγούμενη διάταξη, στη συγκεκριμένη η εστίαση του φωτός επιτυγχάνεται από την πηγή.



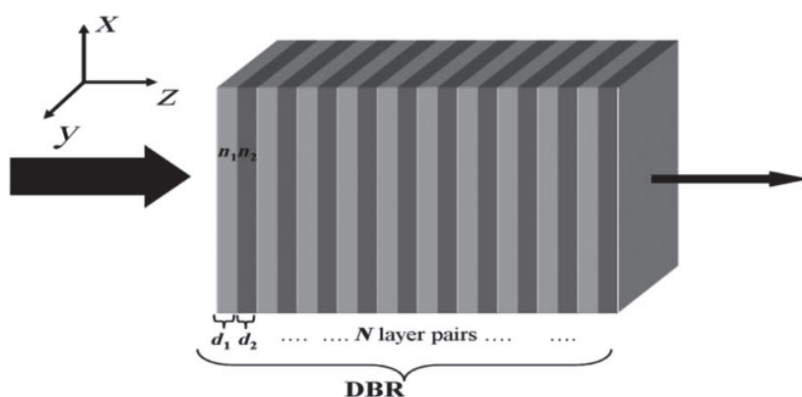
Σχήμα 14 Σχηματική απεικόνιση α. φωτοανιχνευτή γραφενίου με βάση το PTE φαινόμενο. β. Σχηματική διατομή του φωτοανιχνευτή γραφενίου με διαχωρισμένες πύλες. γ. Απεικόνιση διάταξης χωρίς το φύλλο γραφενίου [50].

Υπάρχουν διάφορες διατάξεις σε διαφορετικά μήκη κύματος που εκμεταλλεύονται το φωτοθερμοηλεκτρικό φαινόμενο. Το μειονέκτημα των δύο παραπάνω διατάξεων είναι ότι για την δημιουργία των πλασμονίων χρησιμοποιείται κάποιο μέταλλο, συνήθως τα ευγενή μέταλλα (χρυσό, άργυρος, αλουμίνιο), τα οποία απορροφούν ένα ποσοστό της ΗΜ ακτινοβολίας.

Σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι ο σχεδιασμός μιας φωτοανιχνευτικής διάταξης με κύριο απορροφητή το γραφένιο που θα εκμεταλλεύεται το φωτοθερμοηλεκτρικό φαινόμενο στο εγγύς υπέρυθρο φάσμα ακτινοβολίας και συγκεκριμένα στα 1550 nm. Επιδιώκεται η εστίαση και όσο το δυνατόν μεγαλύτερη συγκέντρωση του φωτός, άρα και απορρόφηση τοπικά στο γραφένιο μέσω μιας οπτικής κοιλότητας που δημιουργείται από καθρέφτες Bragg και περαιτέρω βελτίωση από την αύξηση της ασυμμετρίας του συντελεστή Seebeck, επιλέγοντας pn επαφή στο γραφένιο με το κατάλληλο επίπεδο Fermi κοντά στις θεωρητικές τιμές. Παρακάτω αναλύεται τι είναι ένας καθρέφτης Bragg και πως δημιουργείται μια οπτική κοιλότητα.

8. ΔΙΗΛΕΚΤΡΙΚΑ ΚΑΤΟΠΤΡΑ (ΚΑΘΡΕΦΤΕΣ BRAGG)

Τα διηλεκτρικά κάτοπτρα (dielectric mirrors) ή καθρέφτες Bragg (Distributed Bragg Reflector ή DBR) αποτελούν τη πιο γνωστή και χρησιμοποιούμενη περιοδική διάταξη που αποτελείται από διηλεκτρικά υλικά. Ένα τέτοιο σύστημα αποτελείται από διάφανα πλακίδια και κάθε προσπίπτων κύμα με την κατάλληλη συχνότητα θα ανακλάται. Είναι μια εναλλακτική διάταξη έναντι των μεταλλικών κατόπτρων στην περιοχή του ορατού και υπέρυθρου φάσματος του φωτός. Το κυριότερο πλεονέκτημα τους, σε σύγκριση με τα μεταλλικά κάτοπτρα, είναι ότι παρουσιάζουν πολύ χαμηλότερες απώλειες, καθώς τα μέταλλα απορροφούν ένα μέρος της εισερχόμενης ΗΜ ακτινοβολίας.



Σχήμα 15 Τυπική δομή διηλεκτρικού κατόπτρου με N αριθμό ζεύγη διηλεκτρικών στρωμάτων [16].

Η συνηθέστερη δομή των καθρεφτών Bragg, αποτελείται από επαναλαμβανόμενα στρώματα υψηλού και χαμηλού δείκτη διάθλασης. Στην παρούσα μελέτη χρησιμοποιούνται το πυρίτιο (Si) και το διοξείδιο του πυριτίου (SiO_2) με δείκτες διάθλασης $n_{\text{Si}} = 3.42$ και $n_{\text{SiO}_2} = 1.46$, αντίστοιχα. Για να επιτευχθεί μέγιστη διέλευση στο σύστημα, το οπτικό πάχος κάθε στρώματος υπολογίζεται με βάση την συνθήκη μέγιστης ανάκλασης. Σύμφωνα με αυτή τη συνθήκη, το οπτικό πάχος ισούται με το ένα τέταρτο του μήκους κύματος ($\lambda/4$) για το οποίο έχει σχεδιαστεί ο καθρέφτης. Η έρευνα σχεδιάζεται για μήκος κύματος $\lambda_0 = 1550 \text{ nm}$, στο εγγύς υπέρυθρο φάσμα ακτινοβολίας. Έτσι, τα πάχη των διηλεκτρικών διαμορφώνονται ως εξής

$$d_{Si} = \frac{\lambda_0}{4n_{Si}} = 113.3nm$$

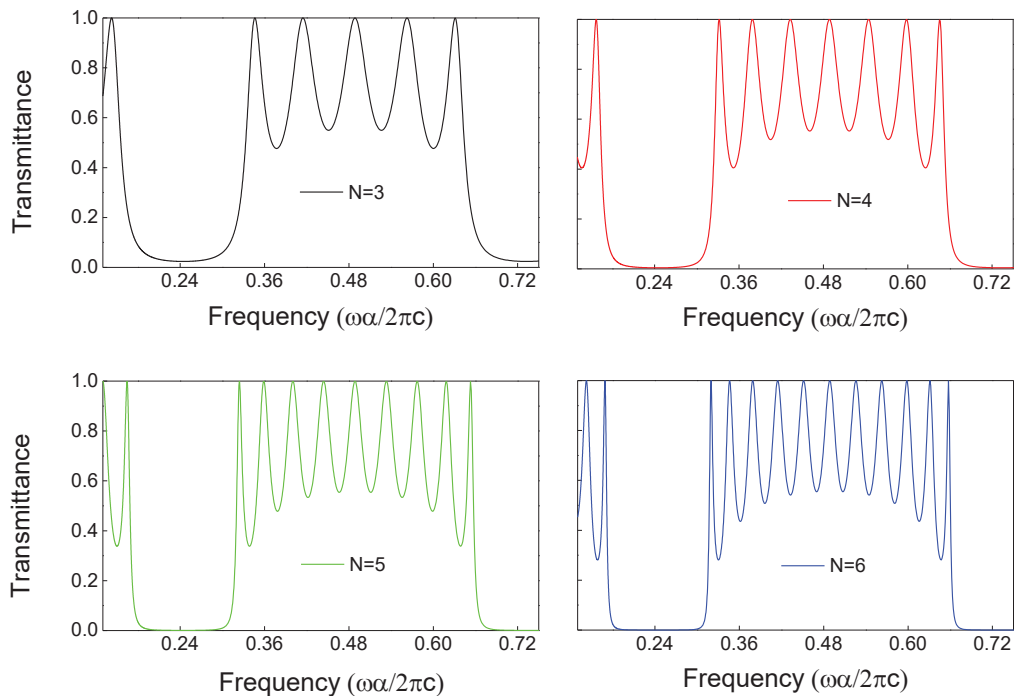
$$d_{SiO_2} = \frac{\lambda_0}{4n_{SiO_2}} = 265.4nm \quad (23)$$

Για υλικά χωρίς απορρόφηση μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την αρχή διατήρησης της ενέργειας

$$T + R = 1 \quad (24)$$

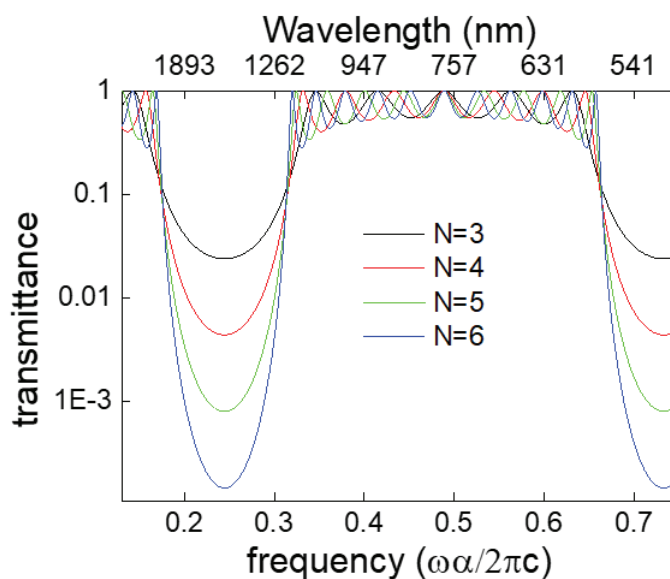
όπου T ο συντελεστής διέλευσης και R ο συντελεστής ανάκλασης.

Χρησιμοποιώντας τη Μέθοδο Πινάκων Μεταφοράς (Transfer Matrix Method - TMM), μία αναλυτική μέθοδο που περιγράφει τους φυσικούς μηχανισμούς για τη διάδοση των ΗΜ κυμάτων σε μια πολυστρωματική επιφάνεια, (βλέπε ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Ι) υπολογίζεται ο συντελεστής διέλευσης συναρτήσει της συχνότητας για τέσσερις διαφορετικές περιπτώσεις αριθμών περιόδων, N, όπως φαίνεται στο Σχήμα 16. Παρατηρείται ότι ο αριθμός των κροσσών συμβολής στην κάθε ζώνη είναι (2N-1).



Σχήμα 16 Μεταβολή του συντελεστή διέλευσης $n_{Si} = 3.42$, $n_{SiO_2} = 1.46$, για τέσσερις διαφορετικούς αριθμούς περιόδων των διηλεκτρικών (N=3,4,5 και 6), όπου $a=d_{Si} + d_{SiO_2}$ η περίοδος του συστήματος.

Στο Σχήμα 17 αναπαρίστανται τα ίδια αποτελέσματα σε λογαριθμική κλίμακα.



Σχήμα 17 Μεταβολή του συντελεστής διέλευσης για τις 4 περιπτώσεις περιόδων σε λογαριθμική κλίμακα συναρτήσει της συχνότητας/μήκους κύματος.

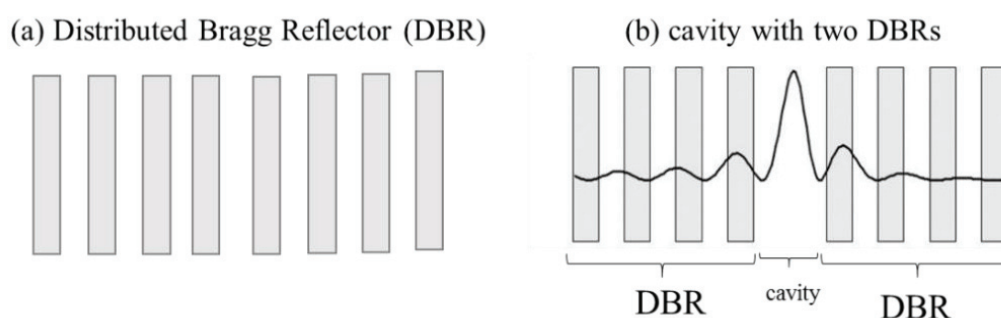
Παρατηρείται ότι όσο αυξάνεται ο αριθμός των περιόδων (N) των επιστροφών μειώνεται ο συντελεστής διέλευσης στη περιοχή του φωτονικού χάσματατος και τόσο μεγαλύτερη είναι η ανάκλαση.

Συμπεραίνεται ότι για να σχεδιαστεί ένας ανακλαστήρας Bragg πρέπει να ληφθούν υπόψιν τα εξής [31]

- i)* το μήκος κύματος ή αλλιώς το κεντρικό μήκος κύματος σχεδιασμού λ_0 στο οποίο θα λειτουργήσει η διάταξη,
- ii)* τους δείκτες διάθλασης των υλικών που θα χρησιμοποιηθούν και
- iii)* την συνθήκη μέγιστης ανάκλασης για να καθοριστεί το πάχος των διηλεκτρικών στρωμάτων.

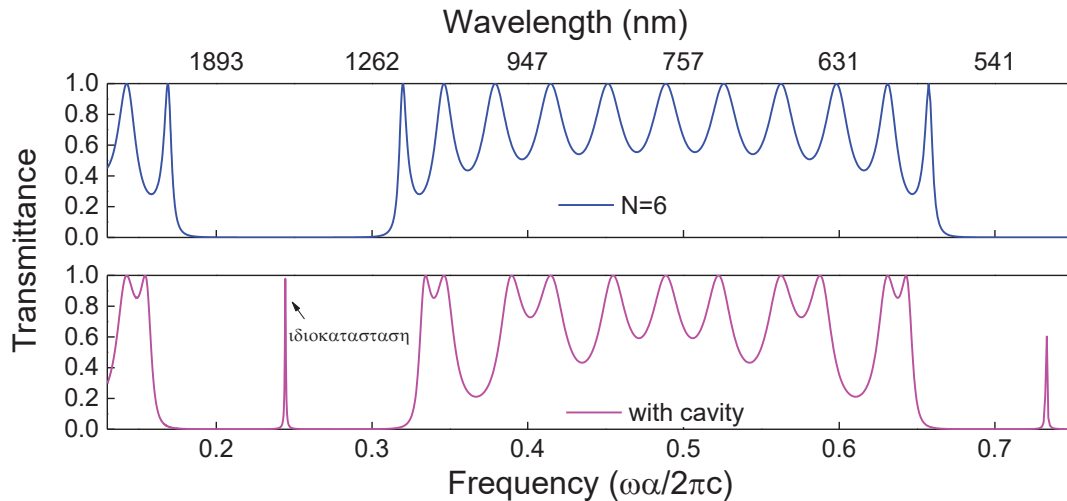
9. ΟΠΤΙΚΗ ΚΟΙΛΟΤΗΤΑ – ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗΣ ΠΟΙΟΤΗΤΑΣ

Η περιοδική εναλλαγή δύο διαφορετικών διηλεκτρικών στρωμάτων, όπως αναφέρθηκε, οδηγεί στο σχεδιασμό ένας διηλεκτρικού κατόπτρου Bragg. Αλλάζοντας το πάχος ενός πλακιδίου του καθρέφτη Bragg, διαταράσσεται η περιοδικότητα της διάταξης. Έτσι, δημιουργείται μια οπτική κοιλότητα με χαρακτηριστική συχνότητα. Στα πλαίσια αυτής της μελέτης διπλασιάστηκε το πάχος του διηλεκτρικού, χρησιμοποιώντας τη συνθήκη μέγιστης διέλευσης ($\lambda/2$), προκειμένου να παρατηρηθεί ότι η ένταση του ηλεκτρικού πεδίου παγιδεύεται και μεγιστοποιείται στη μέση του φωτονικού χάσματος, όπως φαίνεται στο Σχήμα 18(b) [31].



Σχήμα 18 Απεικόνιση (a) του περιοδικού συστήματος διηλεκτρικών στρωμάτων (ανακλαστήρας Bragg), (b) της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου γύρω από τη ατέλεια.

Στο Σχήμα 19 απεικονίζεται ο συντελεστής διέλευσης συναρτήσει της συχνότητας χρησιμοποιώντας την αναλυτική μέθοδο πινάκων μεταφοράς (βλ. ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Ι). Συγκεκριμένα, το Σχήμα 19(a) αναφέρεται στον καθρέφτη Bragg αποτελούμενος από Si και SiO₂ και αριθμό περιόδων $N=6$, με αντίστοιχα υπολογισμένα πάχη $d_1 = 113.3 \text{ nm}$ και $d_2 = 365.4 \text{ nm}$. Ενώ, το Σχήμα 19(β) αντιστοιχεί σε κοιλότητα πάχους 530.8 nm , η οποία δημιουργείται διαταράσσοντας την περιοδική διάταξη Bragg.



Σχήμα 19 Συντελεστής διέλευσης συναρτήσει της συχνότητας/μήκους κύματος (α) για διηλεκτρικό κάτοπτρο Bragg με αριθμό $N = 6$ περιόδων (β) για οπτική κοιλότητα πάχους 530.8 nm .

Παρατηρείται ότι στο φωτονικό χάσμα της οπτικής κοιλότητας εμφανίζεται ένας όρος ενισχυτικής συμβολής. Ο όρος αυτός προκύπτει από τα παγιδευμένα εισερχόμενα επίπεδα κύματα, που υφίστανται πολλαπλές ανακλάσεις στις διεπιφάνειες των διηλεκτρικών. Ο κροσσός συμβολής εμφανίζεται στο κέντρο του χάσματος σε συγκεκριμένο μήκος κύματος και εξαρτάται από το πάχος της κοιλότητας.

Για να περιγραφεί η καμπύλη συντονισμού και το εύρος της πρέπει να οριστούν δύο μεγέθη, ο συντελεστής ποιότητας (quality factor) Q και το εύρος συντονισμού στο ήμισυ της καμπύλης συντονισμού (Full Width at Half Maximum - FWHM) [31].

Ο συντελεστής ποιότητας ορίζεται ως

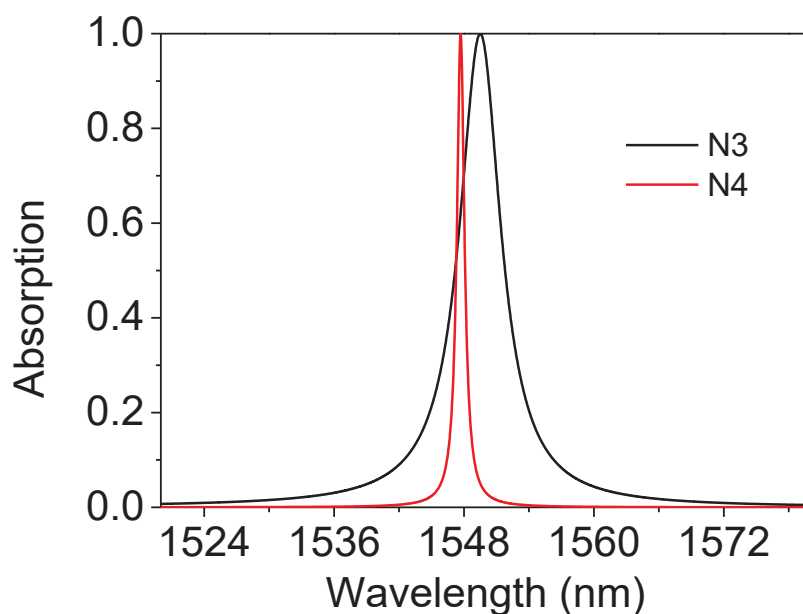
$$Q = \frac{\omega_0}{\Delta\omega} \quad (25)$$

όπου ω_0 η συχνότητα συντονισμού και $\Delta\omega$ το εύρος συντονισμού. Ο συντελεστής ποιότητας εκφράζει τον αντίστροφο του ρυθμού με τον οποίο η παγιδευμένη ενέργεια διαφεύγει από την κοιλότητα και ορίζεται ως

$$Q = 2\pi \frac{\text{Αποθηκευμένη ενέργεια}}{\text{διαφεύγουσα ενέργεια σε κάθε κύκλο}} \quad (26)$$

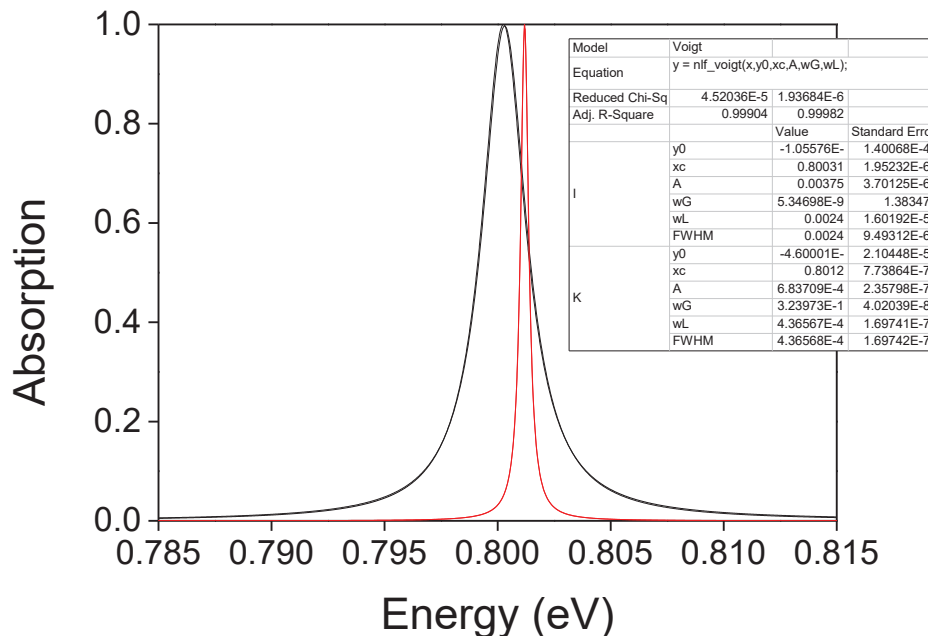
Από τη σχέση (25) και (26) παρατηρείται ότι αυξάνοντας τον αριθμό των περιόδων (N) παίρνει περισσότερο χρόνο για να διαφύγει η δέσμη φωτός από την κοιλότητα, και μικρότερο $\Delta\omega$, επομένως και πιο στενό το φασματικό εύρος της καμπύλης συντονισμού και άρα καλύτερος καθρέφτης.

Στο Σχήμα 20 που ακολουθεί εξετάστηκε η μεταβολή του συντελεστή ποιότητας συναρτήσει του μήκους κύματος στην συχνότητα συντονισμού για διαφορετικό αριθμό περιόδων.



Σχήμα 20 Συντελεστής απορρόφησης συναρτήσει του μήκους κύματος συντονισμού για διαφορετικό αριθμό περιόδων.

Με τη βοήθεια του origin και αφού ο άξονας του μήκους κύματος μετατράπηκε σε άξονα ενέργειας, μέσω της σχέσης $E = \frac{1240 [nm][eV]}{\lambda [nm]}$, μετρήθηκε το $\Delta\omega$ (FWHM).



Σχήμα 21 Συντελεστής απορρόφησης συναρτήσει της ενέργειας στο εύρος συχνοτήτων του συντονισμού, για διαφορετικό αριθμό περιόδων.

Στο Σχήμα 21 απεικονίζονται οι καμπύλες που αντιστοιχούν στον συντελεστή απορρόφησης συναρτήσει της ενέργειας, για διαφορετικό αριθμό περιόδων N . Η μαύρη καμπύλη αντιστοιχεί σε Bragg με $N=3$ περιόδους, ενώ η κόκκινη σε $N=4$ περιόδους. Για $N=3$, το εύρος συντονισμού μετρήθηκε $\Delta\omega = \text{FWHM} = 0,0024$ [eV] και η συχνότητα συντονισμού μετατρέπεται σε $\omega_0 = 1240 / 1548=0.8$ [eV]. Οπότε, ο συντελεστής ποιότητας υπολογίζεται από την εξ. (25)

$$Q_{N=3} = \frac{0.8}{0.0024} = 333$$

αντίστοιχα για $N=4$, $\Delta\omega = \text{FWHM} = 4.36568E-4$ [eV] και $\omega_0 = 1240 / 1549=0.8$ [eV]

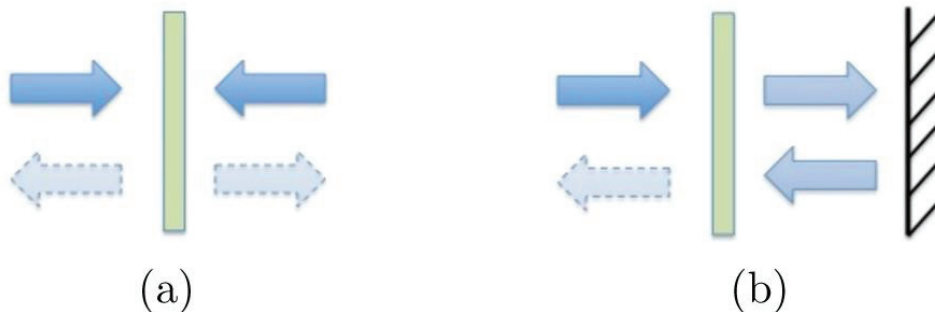
$$Q_{N=4} = \frac{0.8}{4.36568E-4} = 1831$$

Συμπεραίνουμε ότι με την αύξηση των περιόδων, αυξάνεται και ο συντελεστής ποιότητας Q .

10.ΜΗΧΑΝΙΣΜΟΣ ΚΡΙΣΙΜΗΣ ΣΥΖΕΥΞΗΣ

Σε αυτό το κεφάλαιο, παρατίθενται απλά παραδείγματα για το πως μπορεί να βελτιωθεί η οπτική απόκριση μιας διάταξης και μάλιστα να επιτευχθεί 100% απορρόφηση στο σύστημα, με κύριο απορροφητή το γραφένιο [32, 33, 34]. Επιδιώκεται η εκμετάλλευση του φαινομένου για εφαρμογή σε συσκευές φωτοανίχνευσης.

Στην πρώτη περίπτωση, Σχήμα 22(a), παρατηρείται ότι τα εισερχόμενα κύματα μπορούν να εισέλθουν και να εξέλθουν και από δυο πλευρές της διάταξης. Η διάταξη αυτή θεωρείται ένα σύστημα δυο εισόδων και αποτελείται από περιοδική διάταξη, στην οποία τοποθετείται μονοατομικού πάχους γραφένιο. Στη δεύτερη περίπτωση, Σχήμα 22(b), προστέθηκε ένα μεταλλικό κάτοπτρο ως υπόστρωμα. Αυτή η προσθήκη δημιουργεί ένα σύστημα μιας εισόδου, αφού τα εισερχόμενα κύματα μπορούν να εισέλθουν και να εξέλθουν μόνο από τη μια (αριστερή) πλευρά.



Σχήμα 22 Οπτική απόκριση για διατάξεις με και χωρίς συμμετρία. (a) Συμμετρική διάταξη ως προς τα εισερχόμενα κύματα. (b) Κατάργηση συμμετρίας με την προσθήκη του μεταλλικού κατόπτρου [32].

Όταν ακτινοβολία προσπέσει κάθετα σε συμμετρική διάταξη, οι συντελεστές Fresnel, δηλαδή οι συντελεστές ανάκλασης, διέλευσης και απορρόφησης, δίνονται από τις σχέσεις $R = |r|^2$, $T = |t|^2 = |1 - r|^2$ και $A = 1 - R - T$, αντίστοιχα. Εάν τα εισερχόμενα κύματα διέρχονται από το γραφένιο και από τις δύο πλευρές, η απορρόφηση υπολογίζεται από τον τύπο

$$A = \frac{2\gamma_\alpha\gamma_d}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma_\alpha + \gamma_d)^2} \quad (27)$$

όπου, ω_0 είναι η συχνότητα συντονισμού, γ_α ο συνολικός ρυθμός απορρόφησης του συστήματος και γ_d ο ρυθμός με τον οποίο διαφεύγει η ενέργεια από τη διάταξη.

Σε κατάσταση συντονισμού, δηλαδή $\omega = \omega_0$, όταν ο ρυθμός απορρόφησης ταιριάζει απόλυτα με τον ρυθμό διαφυγής της ενέργειας ($\gamma_\alpha = \gamma_d$), τότε ο συντελεστής απορρόφησης φτάνει σε ποσοστό μέχρι και $A = 50\%$. Συμπεραίνεται ότι δεν μπορεί να επιτευχθεί ποτέ ταυτόχρονα $R = T = 0$.

Στην περίπτωση που καταργείται η συμμετρία με την προσθήκη του μεταλλικού κατόπτρου, τα εισερχόμενα κύματα διέρχονται από το γραφένιο, προσπίπτουν πάνω στην τέλεια μεταλλική επιφάνεια και ανακλώνται πίσω σε αυτό. Τα ανακλώμενα κύματα προστίθενται στα επίπεδα κύματα που εισέρχονται, ενισχύοντας το ποσοστό της απορρόφησης. Το συνολικό ποσοστό απορρόφησης μπορεί να φτάσει το $A = 100\%$, όταν μηδενιστεί και το ποσοστό της ανάκλασης, $R = 0$, καθώς έχει μηδενιστεί το ποσοστό της διέλευσης, $T = 0$ με την προσθήκη του μετάλλου.

Παρατηρήθηκε, ότι απόλυτη απορρόφηση συμβαίνει όταν ο ρυθμός απορρόφησης στο γραφένιο είναι ίσος με το ρυθμό με τον οποίο η ενέργεια εισέρχεται στην κοιλότητα [32, 34].

Η απορρόφηση υπολογίζεται από τον παρακάτω τύπο

$$A = \frac{4\gamma_\alpha\gamma_d}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma_\alpha + \gamma_d)^2} \quad (28)$$

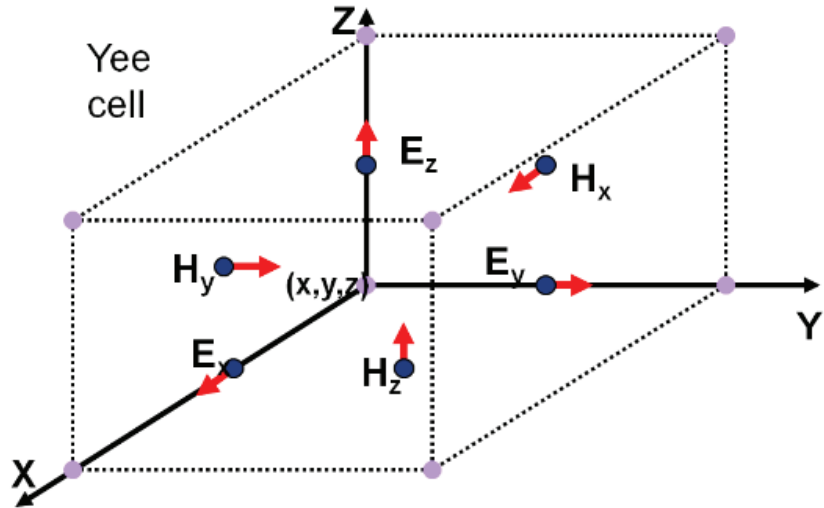
όπου, ω_0 είναι η συχνότητα συντονισμού της κοιλότητας, γ_α ο συνολικός ρυθμός απορρόφησης του συστήματος και γ_d ο ρυθμός διαφυγής της ενέργειας από την κοιλότητα.

Επομένως, σε κατάσταση συντονισμού, $\omega = \omega_0$, αν φροντίσουμε ώστε ο ρυθμός απορρόφησης να ταιριάζει απόλυτα με τον ρυθμό διαφυγής της ενέργειας μέσα στην κοιλότητα ($\gamma_\alpha = \gamma_d$), τότε θα έχουμε ολική απορρόφηση. Ο μηχανισμός αυτός είναι γνωστός ως κρίσιμη σύζευξη ή *critical coupling*, στον οποίο εμφανίζεται σημαντική μεταβολή στο πλάτος της ανάκλασης και αυτό έχει ως αποτέλεσμα να οδηγήσει στο 100% της συνολικής απορρόφησης της διάταξης.

11.ΜΕΘΟΔΟΣ ΧΡΟΝΙΚΗΣ ΕΞΕΛΙΞΗΣ ΜΕ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΕΣ ΔΙΑΦΟΡΕΣ – FDTD

Η μελέτη οποιασδήποτε διάταξης, της οποίας η συμπεριφορά καθορίζεται από ηλεκτρομαγνητικά (ΗΜ) φαινόμενα, βασίζεται στον υπολογισμό των μακροσκοπικών ΗΜ πεδίων που υπάρχουν στον εσωτερικό και τον εξωτερικό της χώρο. Όπως είναι γνωστό, τα πεδία αυτά υπακούν στις εξισώσεις Maxwell. Επομένως, για να προβλεφθούν τα χαρακτηριστικά της λειτουργίας των διατάξεων αυτών, θα πρέπει να επιλυθούν οι εξισώσεις Maxwell. Η FDTD μέθοδος είναι ένα από τα ισχυρότερα εργαλεία της υπολογιστικής ηλεκτροδυναμικής και είναι η καταλληλότερη για την επίλυση των εξισώσεων Maxwell.

Στον αλγόριθμο της FDTD μεθόδου εφαρμόζεται διακριτοποίηση (Yee Lattice) του χώρου και του χρόνου [35,36]. Κάθε σημείο του χώρου αναπαρίσταται ως ένα grid, στο οποίο οι συνιστώσες του ηλεκτρικού, E , και του μαγνητικού πεδίου, H , τοποθετούνται όπως φαίνεται στο Σχήμα 23. Στη συνέχεια, προσεγγίζονται μέσω διαφορικών εξισώσεων οι χωρικές και χρονικές παράγωγοι των εξισώσεων Maxwell. Οι σχέσεις επιλύονται για τα μεγέθη των πεδίων στην «επόμενη» χρονική στιγμή με βάση τις τιμές των «προηγούμενων» βημάτων. Έτσι, προκύπτει αλγόριθμος «leapfrog» μορφής, ο οποίος χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό του πεδίου σε όλο το χωρόχρονο, αφού έχουν προσδιοριστεί οι αρχικές οριακές συνθήκες στο υπό μελέτη χώρο στην αρχή της επίλυσης του προβλήματος. Τέλος, το τέλει προσαρμοσμένο στρώμα (Perfectly Matched Layer, PML) του Berenger [37] αποδεικνύεται ότι είναι ένα πολύ αποτελεσματικό μέσο για να περικόψει τον υπολογιστικό χώρο στην FDTD μέθοδο και παρέχουν ένα τερματισμό στο μέσο χωρίς ανάκλαση.



Σχήμα 23 Απεικόνιση ενός 3D κελιού Yee με την κατανομή των συνιστωσών του ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου [41].

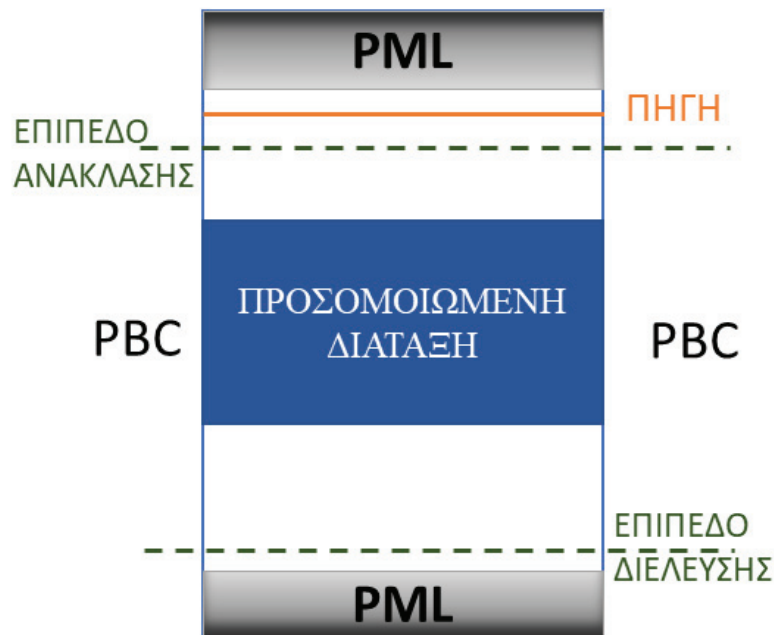
Η FDTD μέθοδος έχει τη δυνατότητα να μοντελοποιήσει όλα τα υλικά χρησιμοποιώντας την διηλεκτρική τους συνάρτηση και σε οποιαδήποτε γεωμετρία σχημάτων τριών διαστάσεων. Επιπλέον, υπολογίζει τη ροή απορρόφησης σε κάθε σημείο του υλικού, αλλά και το ποσοστό μετάδοσης ή ανάκλασης του φωτός της διάταξης μόνο με μία προσομοίωση σε μεγάλο εύρος συχνοτήτων.

ΜΕΡΟΣ Β΄

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΗ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ

1. ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ

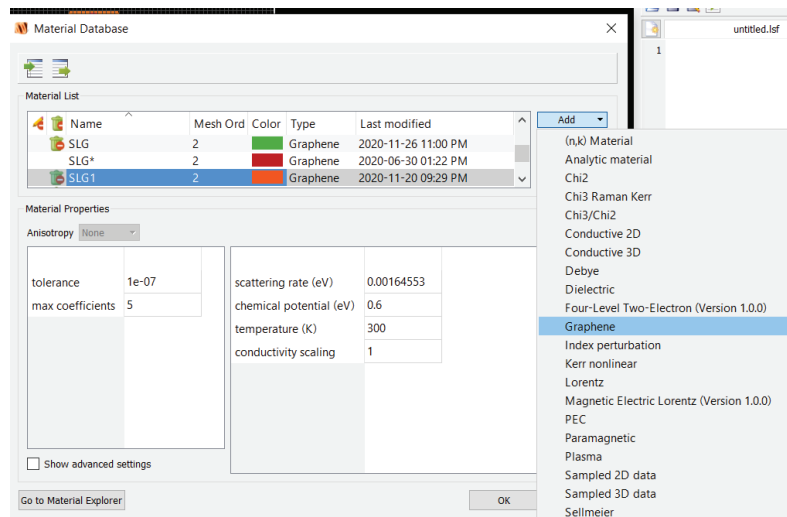
Οι υπολογισμοί για τη βελτιστοποίηση της οπτικής απόκρισης πραγματοποιήθηκαν χρησιμοποιώντας τη μέθοδο FDTD solver της lumerical. Αρχικά, ορίστηκαν οι διαστάσεις της προσομοιωμένης διάταξης. Έπειτα από μελέτη σύγκλισης, το πλέγμα προσομοίωσης που δημιουργήθηκε, ορίστηκε 1nm/grid. Ως πηγή επιλέχθηκε επίπεδο ΗΜ κύμα, το οποίο διαδιδόταν μέσω του αέρα, προσπίπτοντας κάθετα στη διάταξη, σε μήκος κύματος εύρους από 1500 έως 1600 nm. Στη συνέχεια, εφαρμόστηκαν Περιοδικές Οριακές Συνθήκες (PBC) κάθετα της διεύθυνσης διάδοσης κυμάτων, ενώ PML τοποθετήθηκαν κατά τη διεύθυνση διάδοσης της ακτινοβολίας για να απορροφούν το προσπίπτον φως με ελάχιστες ανακλάσεις.



Σχήμα 24 Απεικόνιση υπολογιστικού κελιού με τη μέθοδο FDTD.

Η μοντελοποίηση της οπτικής απόκρισης των υλικών δημιουργήθηκε μέσω μιας βάσης δεδομένων, που παρέχεται από το πρόγραμμα της lumerical, το οποίο επιτρέπει την εισαγωγή και επεξεργασία των υλικών (Σχήμα 25). Τα υλικά της διάταξης στη

συγκεκριμένη μελέτη ήταν το γραφένιο SLG, το νοθευμένο πυρίτιο n-Si, ο χρυσός Au, και τα διηλεκτρικά, πυρίτιο Si και διοξείδιο του πυριτίου SiO₂.



Σχήμα 25 Βάση δεδομένων υλικών στο πρόγραμμα της lumerical.

Το γραφένιο διαφοροποιείται από τα περισσότερα οπτικά υλικά, καθώς πρόκειται για ένα πολύ λεπτό στρώμα υλικού με πάχος τόσο μικρό όσο ένα άτομο και χαρακτηρίζεται με τη χρήση της επιφανειακής αγωγιμότητας. Το γραφένιο μοντελοποιήθηκε με τη μέθοδο του FDTD solver της lumerical, που του επιτρέπει να προσομοιώνεται με ακρίβεια ως 2D υλικό, χωρίς την ανάγκη για εξαιρετικά μικρό πλέγμα, με αποτέλεσμα πολύ ταχύτερες προσομοιώσεις.

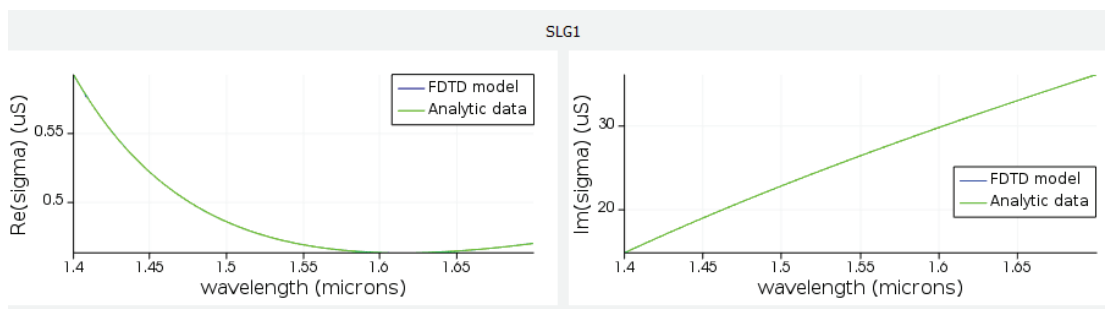
Όπως έχει προαναφερθεί και στην εξίσωση (2), η αγωγιμότητα για μονοστρωματικό γραφένιο δίνεται από τη σχέση Kubo

$$\sigma(\omega, \Gamma, \mu_c, T) = \sigma_{intra}(\omega, \Gamma, \mu_c, T) + \sigma_{inter}(\omega, \Gamma, \mu_c, T) \quad (29)$$

όπου ω η γωνιακή συχνότητα, Γ ο ρυθμός σκέδασης, μ_c το χημικό δυναμικό και T η θερμοκρασία.

Η παραπάνω συνάρτηση ήταν διαθέσιμη στη βάση δεδομένων των υλικών, όπως φαίνεται και στο Σχήμα 25.

Αφού προσδιορίστηκε ο επιθυμητός ρυθμός σκέδασης, $G = \frac{\hbar}{2\tau}$ [eV], με $\tau = 200$ fs ο χρόνος χαλάρωσης των ηλεκτρονίων, το χημικό δυναμικό $\mu = 0.6$ eV, η θερμοκρασία δωματίου $T = 300$ K και η αντίστοιχη επιφανειακή αγωγιμότητα απεικονίστηκε στον εξερευνητή υλικού. Το πρόγραμμα της lumerical λύνει την αναλυτική σχέση Kubo, τα αποτελέσματα της οποίας προσαρμόζονται και εισάγονται στην επίλυση της προσομοίωσης στο FDTD μοντέλο. Τα διαγράμματα αγωγιμότητας που φαίνονται στο Σχήμα 26 δημιουργήθηκαν στον εξερευνητή υλικού.



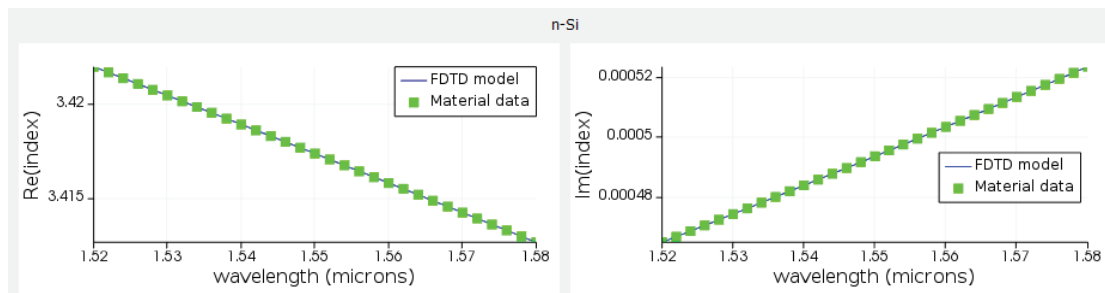
Σχήμα 26 Πραγματικό μέρος (αριστερά) και φανταστικό μέρος (δεξιά) της επιφανειακής αγωγιμότητας του γραφενίου (παράμετροι υλικού που δίνονται στο Σχήμα 25).

Το στρώμα του n-Si στο κάτω μέρος της κοιλότητας είναι ηλεκτροστατικά εμπλουτισμένο. Θεωρήθηκε ένα άκρως ενισχυμένο στρώμα διόδου n-Si με εμπλουτισμό φορέων $N_d = 10^{20}$ cm⁻³ και η απορρόφηση του λήφθηκε υπόψιν από το μοντέλο Drude για τη διηλεκτρική του συνάρτηση [42]

$$\epsilon_{Si} = n_{Si}^2 \left[1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \frac{i\omega}{\tau_{Si}}} \right] \hbar\omega_p = \hbar n_{Si}^{-1} \sqrt{\frac{N_d e^2}{\epsilon_0 m^*}} \cong 0.21 \text{ eV} \quad (30)$$

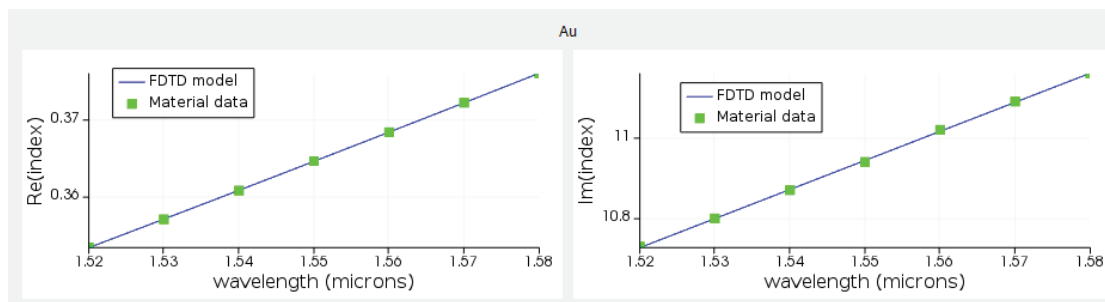
όπου $m^* = 0.26m_e$, $\tau_{Si} = \frac{m^* \mu_{Si}}{e} \cong 200 \text{ fs}$ και $\mu_{Si} = \frac{1350 \text{ cm}^2}{V_S}$.

Από τη σχέση (30) εξήχθησαν οι δείκτες n και k του νοθευμένου πυριτίου. Στη συνέχεια, εισήχθηκε στη lumerical μια λίστα δεδομένων (n , k) συναρτήσει του μήκους κύματος. Τα διαγράμματα του πραγματικού και φανταστικού μέρους του δείκτη διάθλασης παρουσιάζονται στο Σχήμα 27.



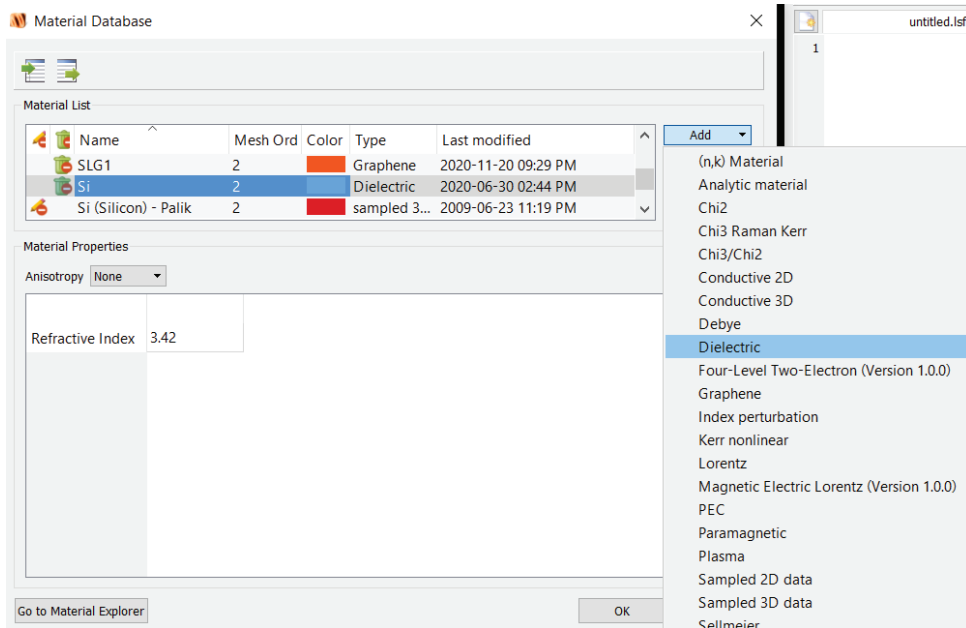
Σχήμα 27 Πραγματικό μέρος (αριστερά) και φανταστικό μέρος (δεξιά) του δείκτη διάθλασης του νοθευμένου πυριτίου με $N_d = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$.

Για τη μοντελοποίηση του Au, ακολουθήθηκε η ίδια διαδικασία, όπου εισήχθησαν πειραματικές μετρήσεις των δεικτών διάθλασης (n, k) του υλικού στη βάση δεδομένων, όπως και με το n-Si.

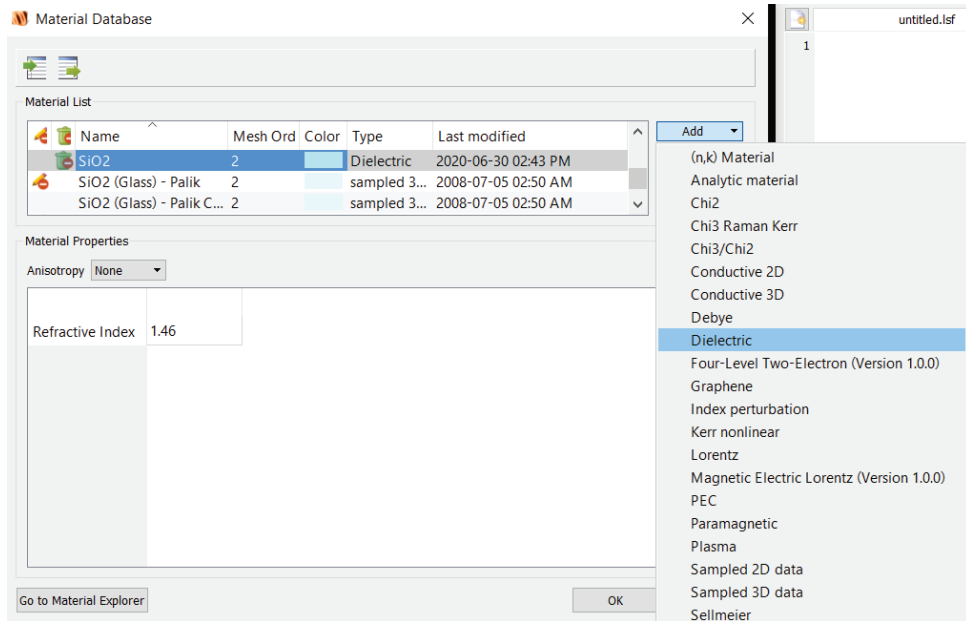


Σχήμα 28 Πραγματικό μέρος (αριστερά) και φανταστικό μέρος (δεξιά) του δείκτη διάθλασης του χρυσού.

Τέλος, τα διηλεκτρικά στρώματα του Si και του SiO₂ μοντελοποιήθηκαν μέσω της δυνατότητας που παρέχει το πρόγραμμα της lumerical να εισαχθεί ο σταθερός δείκτης διάθλασης του κάθε διηλεκτρικού που ορίστηκε για τη διάταξη, όπως φαίνεται και στα παρακάτω Σχήματα 29 και 30.



Σχήμα 29 Μοντελοποίηση πυριτίου.

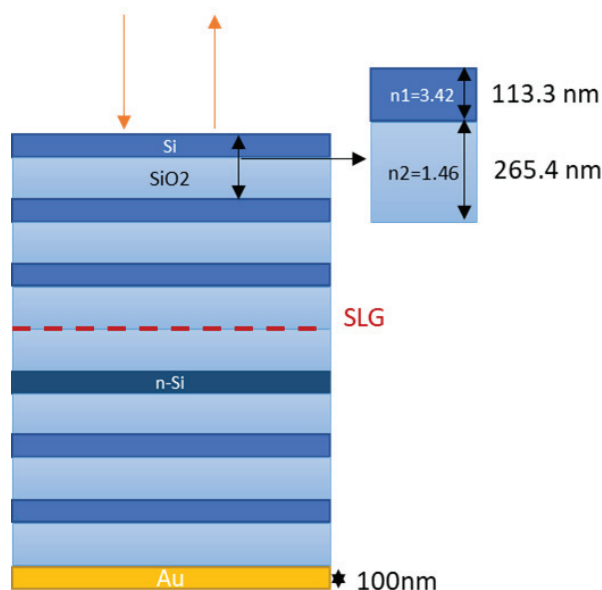


Σχήμα 30 Μοντελοποίηση διοξειδίου του πυριτίου.

2. ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΔΙΑΤΑΞΗΣ ΜΕ ΟΠΤΙΚΗ ΚΟΙΛΟΤΗΤΑ

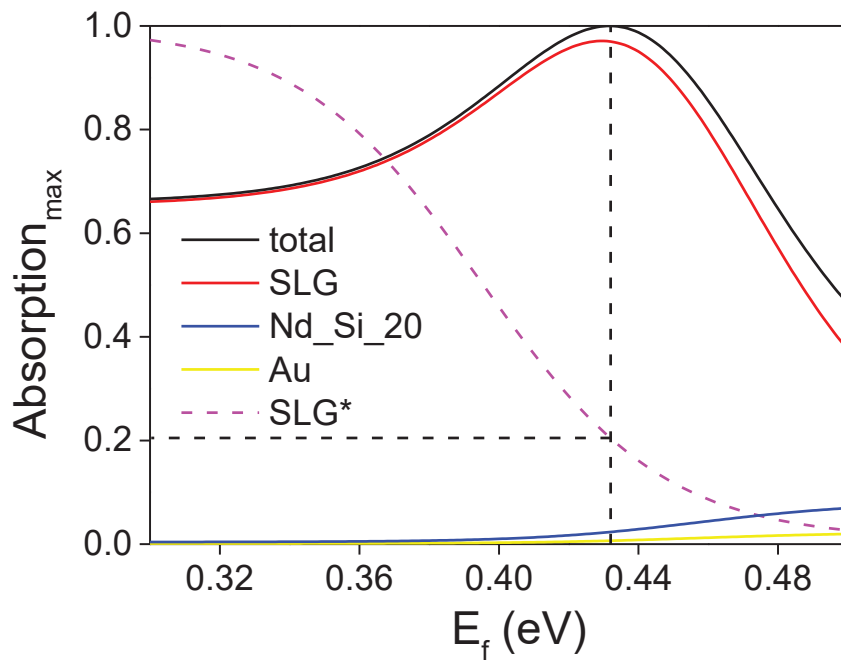
Η διάταξη της μελέτης στην παρούσα διπλωματική εργασία βασίστηκε στα αποτελέσματα δημοσιευμένης έρευνας [34], η οποία χρησιμοποίησε το γεγονός ότι για κάθε δεδομένη κοιλότητα υπάρχει πάντα μια κρίσιμη απορροφητικότητα των στοιχείων της διάταξης που οδηγεί στην τέλεια απορρόφηση του συστήματος. Ο σχεδιασμός της έγινε με τέτοιο τρόπο ώστε να επιτευχθεί μέγιστη δυνατή απορρόφηση σε μονοστρωματικό φύλλο γραφενίου. Τα αποτελέσματα της έρευνας [34] διεξήχθησαν από την χρήση ενός αναλυτικού μοντέλου για μονοδιάστατο σύστημα βασισμένο στη μέθοδο Πινάκων Μεταφοράς (Transfer Matrix Method-TMM), της οποίας η εφαρμογή και η μέθοδος δίνεται αναλυτικά στο ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Ι.

Το υπό μελέτη σύστημα αποτελείται από μια οπτική κοιλότητα, η οποία περιβάλλεται και από τις δύο πλευρές από τρεις περιόδους των διηλεκτρικών στρωμάτων Si/SiO₂ (bilayer) και ένα μεταλλικό κάτοπτρο χρυσού, Au, που τοποθετείται στο κάτω μέρος της διάταξης, το οποίο βοηθάει στην εκμηδένιση των απωλειών διέλευσης (transmission). Στη μέση της κοιλότητας τοποθετείται μονοστρωματικό γραφένιο. Οι δείκτες διάθλασης των δύο διηλεκτρικών υλικών Si / SiO₂ ορίστηκαν $n_{Si}=3.42$ και $n_{SiO_2}=1.46$, αντίστοιχα. Επίσης, τα πάχη των διηλεκτρικών υπολογίστηκαν με βάση τη συνθήκη μέγιστης ανάκλασης, $d_{Si} = \frac{\lambda_0}{4n_{Si}} = 113.3nm$ και $d_{SiO_2} = \frac{\lambda_0}{4n_{SiO_2}} = 265.4nm$, ενώ το πάχος της κοιλότητας υπολογίστηκε με βάση τη συνθήκη μέγιστης διέλευσης και είναι ίσο με $d_{cavity} = \frac{\lambda_0}{2n_{SiO_2}} = 530.8nm$ με μήκος κύματος συντονισμού της κοιλότητας $\lambda_0 = 1550nm$. Στο Σχήμα 31 απεικονίζεται η διάταξη.



Σχήμα 31 Απεικόνιση της 1D διάταξης.

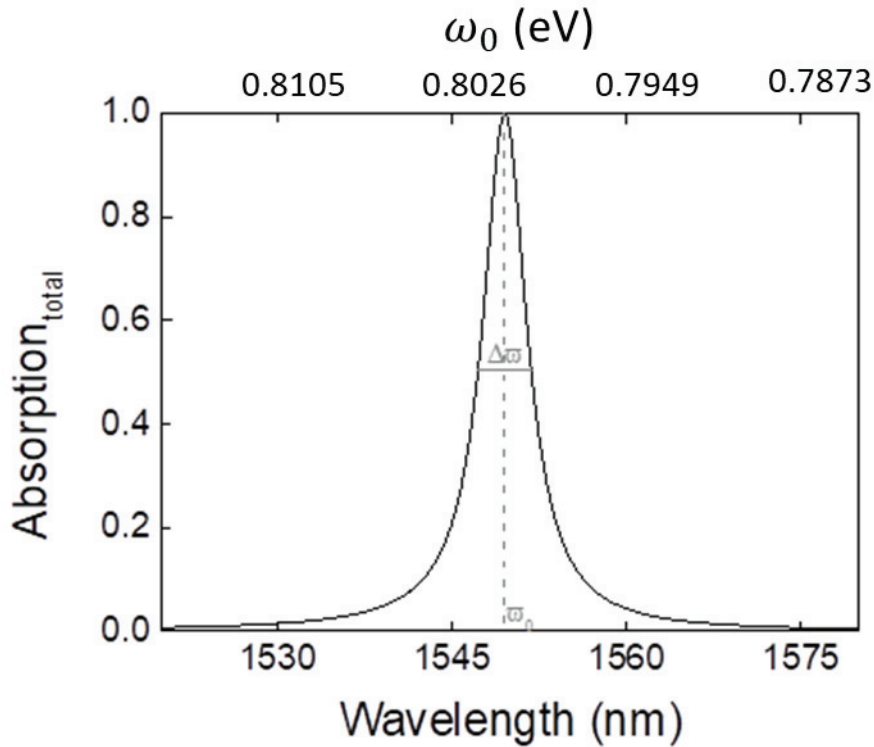
Πρώτο βήμα της συγκεκριμένης διπλωματικής εργασίας είναι η αναπαραγωγή των ίδιων αποτελεσμάτων με τη δημοσιευμένη έρευνα [34]. Στόχος ήταν να βρεθεί σε ποια ενέργεια Fermi του γραφενίου θα επιτευχθεί απόλυτη απορρόφηση του συστήματος. Επειδή το μήκος κύματος συντονισμού μετατοπίζεται καθώς ντοπάρεται το γραφένιο, για κάθε διαφορετική ενέργεια Fermi σαρώθηκε το εύρος του μήκους κύματος. Στο παρακάτω Σχήμα 32 παρουσιάζεται το ποσοστό απορρόφησης κάθε υλικού, καθώς και η συνολική απορρόφηση του συστήματος συναρτήσει της ενέργειας Fermi, η κατακόρυφη μαύρη διακεκομμένη γραμμή αντιστοιχεί σε ενέργεια Fermi $E_F = 0.431$ eV, ενώ η πράσινη διακεκομμένη γραμμή που σημειώνεται ως SLG* είναι η απορροφητικότητα του γραφενίου (κανονικοποιημένη στη μονάδα, ως απόλυτη τιμή είναι το 2.3% για $E_F = 0$). Η απορροφητικότητα είναι η ικανότητα απορρόφησης του υλικού χωρίς την επίδραση άλλων υλικών (όταν είναι στο κενό), δηλαδή ιδιότητα του υλικού, ενώ η απορρόφηση είναι το ποσοστό του φωτός που έχει απορροφηθεί από το υλικό στη συγκεκριμένη διάταξη. Η απορροφητικότητα εξαρτάται από το μήκος κύματος και το χημικό δυναμικό του γραφενίου. Με Nd_Si_20 συμβολίζεται η νόθευση του πυριτίου, δηλαδή $N_d^{Si} = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$.



Σχήμα 32 Σχηματική απεικόνιση ποσοστών απορρόφησης συναρτήσει της ενέργειας Fermi από την έρευνα [42]. Η απορροφητικότητα του γραφενίου είναι κανονικοποιημένη στη μονάδα, η μέγιστη τιμή της είναι 2.3%.

Μεταβάλλοντας την ενέργεια Fermi (doping) του γραφενίου, παρατηρήθηκε ότι για $E_F^C = 0.431$ eV, η συνολική απορρόφηση του συστήματος φτάνει στο 100%. Η απορρόφηση στο γραφένιο φτάνει το 97%, ενώ η απορροφητικότητα του στο συγκεκριμένο μήκος κύματος είναι μόλις 21% επί της κανονικοποιημένης τιμής (δηλαδή $0.21 \times 2.3\% = 0.48\%$ απόλυτη τιμή). Δηλαδή αύξηση της απορρόφησης στο γραφένιο κατά 200 φορές σε σχέση με την απορρόφηση που θα είχε στο κενό. Το νοθευμένο πυρίτιο απορρόφησε το 2.5%, ενώ ο χρυσός μόλις 0.5%. Έτσι, επιτεύχθει το φαινόμενο της κρίσιμης σύζευξης (critical coupling). Σε αυτό το σημείο λειτουργίας, ο ρυθμός, με τον οποίο η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία διαφεύγει από την κοιλότητα, γίνεται ίσος με τον ρυθμό που η διάταξη απορροφά, με κύριο απορροφητή το γραφένιο [49,50].

Στην περίπτωση της κρίσιμης σύζευξης, η συνολική απορρόφηση συναρτήσει του μήκους κύματος δίνεται στο Σχήμα 33. Έπειτα, υπολογίστηκε ο συντελεστής ποιότητας Q, όπως προαναφέρθηκε στην υποενότητα 9.



Σχήμα 33 Συνολική απορρόφηση συναρτήσεως του μήκους κύματος για $E_F^{SLG} = 0.432\text{eV}$.

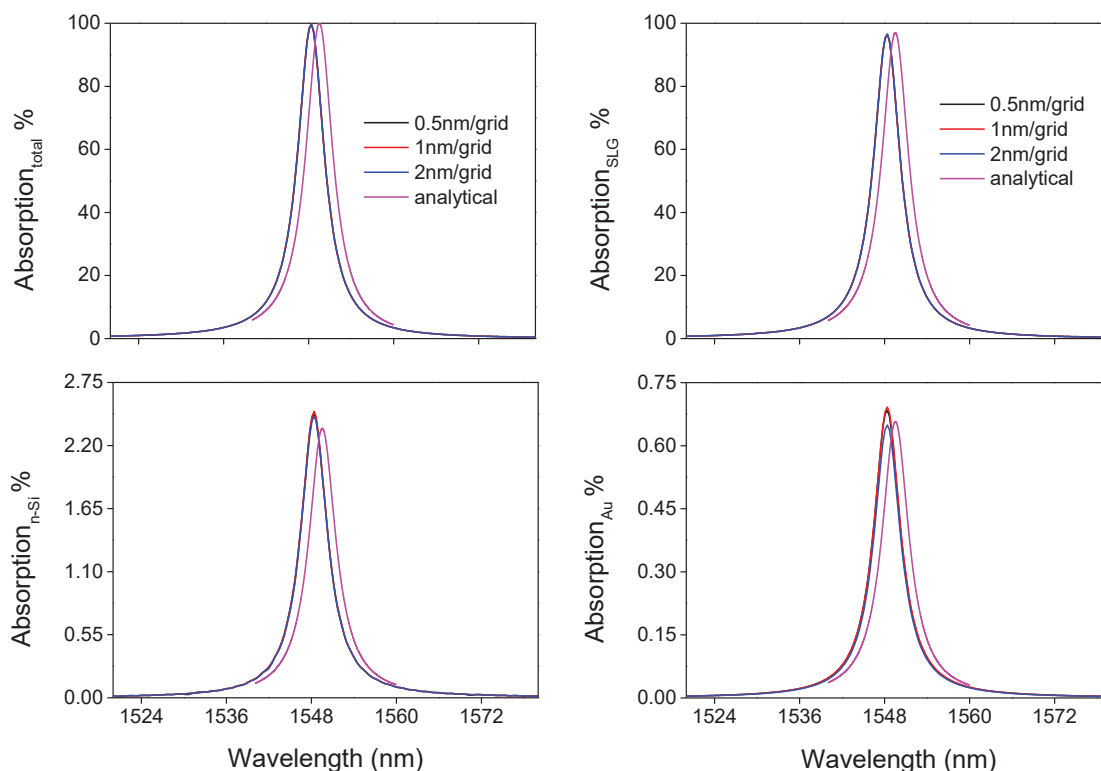
Ο συντελεστής ποιότητας υπολογίστηκε $Q = \frac{\omega_0}{\Delta\omega} \sim 325$, όπου ω_0 η συχνότητα συντονισμού στην κοιλότητα και $\Delta\omega$ το εύρος συχνοτήτων, δηλαδή το FWHM (βλ. υποενότητα 9 στη Θεωρία).

Η οριακή οπτική συχνότητα λειτουργίας της διάταξης δίνεται από τον τύπο

$$f_{opt} = \frac{c}{2n_{SiO_2}LQ} \sim 600\text{ GHz}$$

όπου $\frac{c}{n_{SiO_2}}$ η ταχύτητα του φωτός στο διηλεκτρικό της κοιλότητας (SiO_2), $2L = 1060$ nm το μήκος της διαδρομής στην κοιλότητα (τα 2 στρώματα SiO_2 στο κέντρο) και $Q \sim 325$ ο συντελεστής ποιότητας. Αυτή η τιμή είναι κοντά στα θεμελιώδη όρια ταχύτητας, δηλαδή στην κλίμακα των ps, που θέτει τις διαδικασίες παραγωγής των φωτοφορέων και χαλάρωσης του συστήματος [34].

Αφού σχεδιάστηκε η αναλυτική μέθοδος, ακολούθησε η σύγκριση των αποτελεσμάτων της με τα αποτελέσματα της FDTD μεθόδου. Μελετήθηκαν τρεις περιπτώσεις διακριτοποίησης για 0.5nm/grid, 1nm/grid και 2nm/grid.



Σχήμα 34 Σύγκριση αποτελεσμάτων αναλυτικής μεθόδου με την FDTD μέθοδο.

Στο Σχήμα 34 απεικονίζονται τα ποσοστά απορρόφησης για κάθε απορροφητικό υλικό συναρτήσει του μήκους κύματος και συγκρίνεται η αναλυτική μέθοδος που βασίζεται στη Μέθοδο Πινάκων Μεταφοράς (βλ. ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ I) με την FDTD μέθοδο (βλ. ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ II). Από το τεστ σύγκλισης παρατηρήθηκε μετατόπιση του μήκους κύματος στις δύο μεθόδους με σχετικό σφάλμα 0.08%, γεγονός που οφείλεται στις μικρές αλλαγές που υπάρχουν στη λύση της σχέσης kubo. Στο γράφημα της απορρόφησης του νοθευμένου πυριτίου και του χρυσού παρατηρήθηκε μια μικρή διαφορά στην τιμή της απορρόφησης των υλικών με σχετικό σφάλμα 4% και στις δύο περιπτώσεις. Το σφάλμα αυτό θεωρήθηκε μικρό καθώς οι τιμές είναι πολύ μικρές με διαφορά τεσσάρων τάξεων μεγέθους σε σχέση με την απορρόφηση στο γραφένιο.

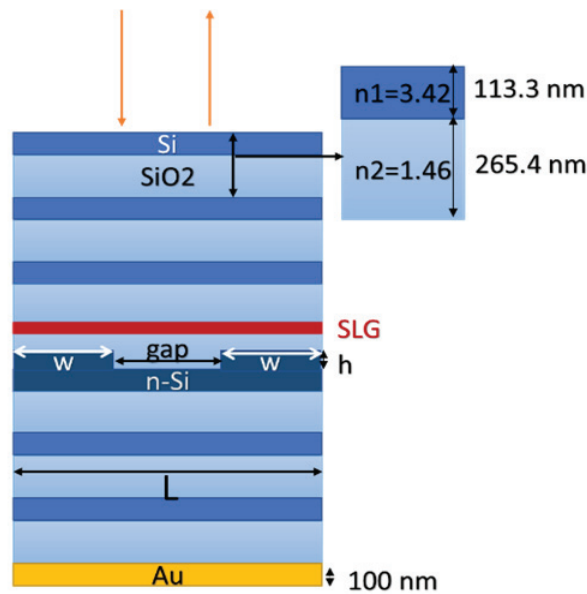
Συνολικά, συμπεραίνεται καλή συμφωνία μεταξύ των μεθόδων. Από το τεστ σύγκλισης επιλέχθηκε $1\text{nm}/\text{grid}$. Το γεγονός αυτό ήταν ένα γεγονός υψίστης σημασίας, διότι επέτρεψε τη χρήση της FDTD μεθόδου της lumerical στη συγκεκριμένη μελέτη.

Το επόμενο βήμα ήταν η τροποποίηση της διάταξης, σε ένα δισδιάστατο σύστημα με στόχο την εστίαση του φωτός μέσω της κρίσιμης σύζευξης για την ενίσχυση της απορρόφησης τοπικά στο γραφένιο.

3. ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΚΑΙ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΦΩΤΟΑΝΙΧΝΕΥΤΗ ΜΕ ΟΠΤΙΚΗ ΚΟΙΛΟΤΗΤΑ ΜΕ ΤΗΝ ΜΕΘΟΔΟ FDTD

Επιδιώκεται ο σχεδιασμός και η βελτιστοποίηση της δισδιάστατης πλέον διάταξης, χωρίς να χαθεί η οπτική της απόκριση που παρατηρήθηκε στο μονοδιάστατο σύστημα. Γενικός στόχος ήταν η εστίαση του φωτός και η συγκέντρωση του πεδίου τοπικά στο γραφένιο με απώτερο σκοπό τη βέλτιστη μετατροπή του οπτικού σήματος σε θερμικό μέσω του φωτοθερμοληκτρικού φαινομένου. Οι προσομοιώσεις της συγκεκριμένης διάταξης πραγματοποιήθηκαν με την FDTD solver της lumerical για 2D σύστημα.

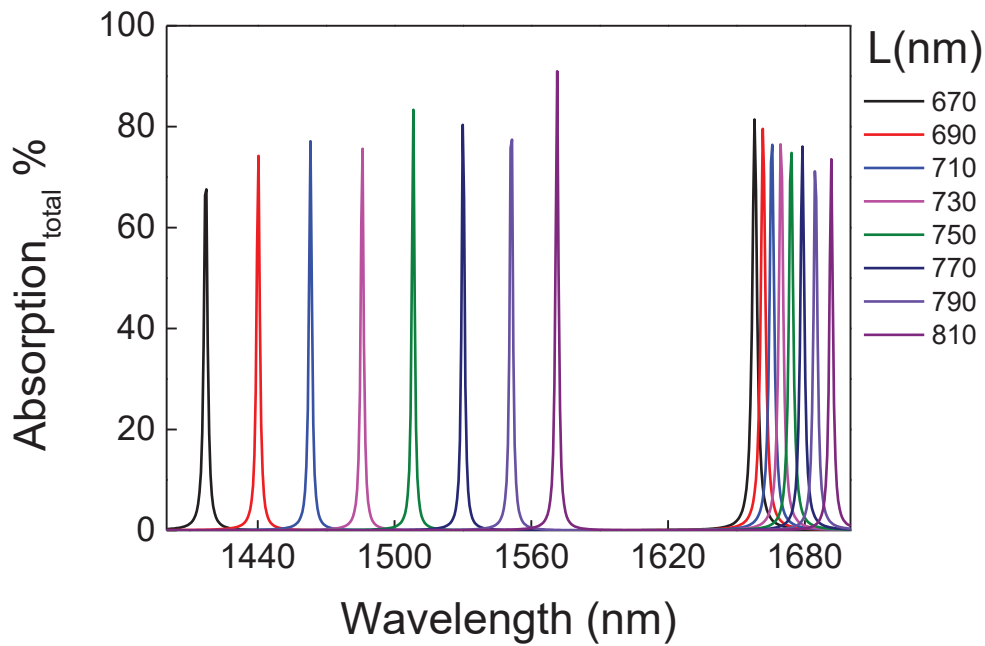
Μια πρώτη προσέγγιση στη μελέτη ήταν η δημιουργία «σκαλοπατιών» νοθευμένου πυριτίου στο κάτω μέρος της κοιλότητας. Με αυτή τη γεωμετρία θεωρήθηκε ότι μπορεί να επιτευχθεί μέγιστη απορρόφηση στο μήκος του γραφενίου, το οποίο αντιστοιχεί στο χάσμα (gap) που σχηματίζεται μεταξύ των δύο σκαλοπατιών. Στο Σχήμα 35, φαίνεται η τοποθέτηση των «σκαλοπατιών» νοθευμένου πυριτίου μήκους w , ύψους h και η περίοδος της διάταξης L .



Σχήμα 35 Απεικόνιση διάταξης, στην οποία έχουν τοποθετηθεί «σκαλοπάτια» (fingers) νοθευμένου πυριτίου στο κάτω μέρος της κοιλότητας.

Τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της διάταξης ορίστηκαν να είναι το ύψος του σκαλοπατιού $h = \frac{h_{cavity}}{4} = 132.7 \text{ nm}$, το $gap = 200 \text{ nm}$ και το πλάτος των σκαλοπατιών υπολογίστηκε από τη σχέση $w = (L - gap) / 2$, όπου L η ρυθμιζόμενη κάθε φορά περίοδος της διάταξης. Οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν για εύρος συχνοτήτων που αντιστοιχεί σε μήκος κύματος, λ (1400 ως 1700) nm.

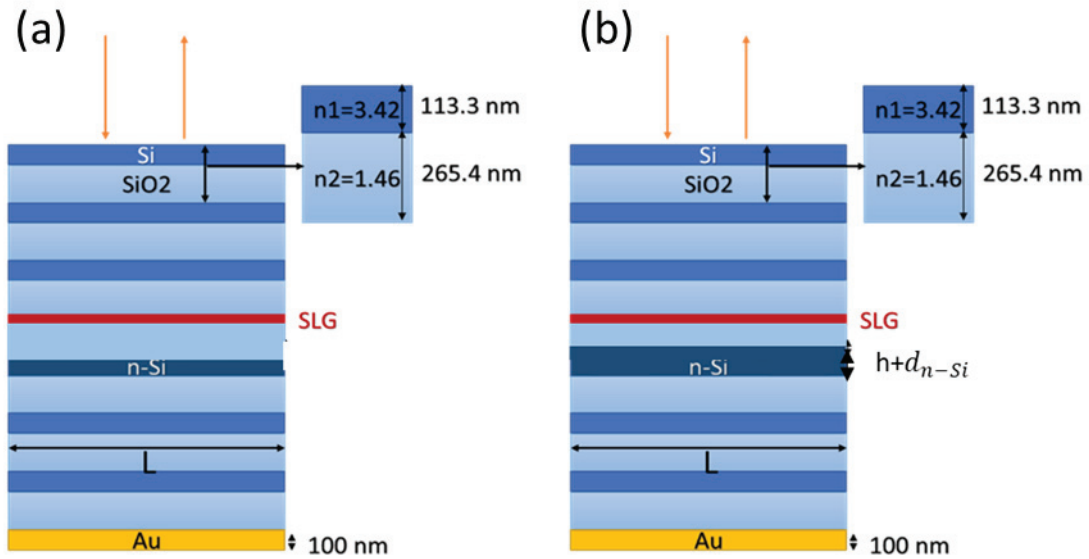
Το διάγραμμα της συνολικής απορρόφησης συναρτήσει του μήκους κύματος για L (670 ως 810) nm παρουσιάζεται στο Σχήμα 36.



Σχήμα 36 Διάγραμμα συνολικής απορρόφησης του συστήματος συναρτήσει του μήκους κύματος, μεταβάλλοντας την περίοδο του συστήματος L (670-810) nm.

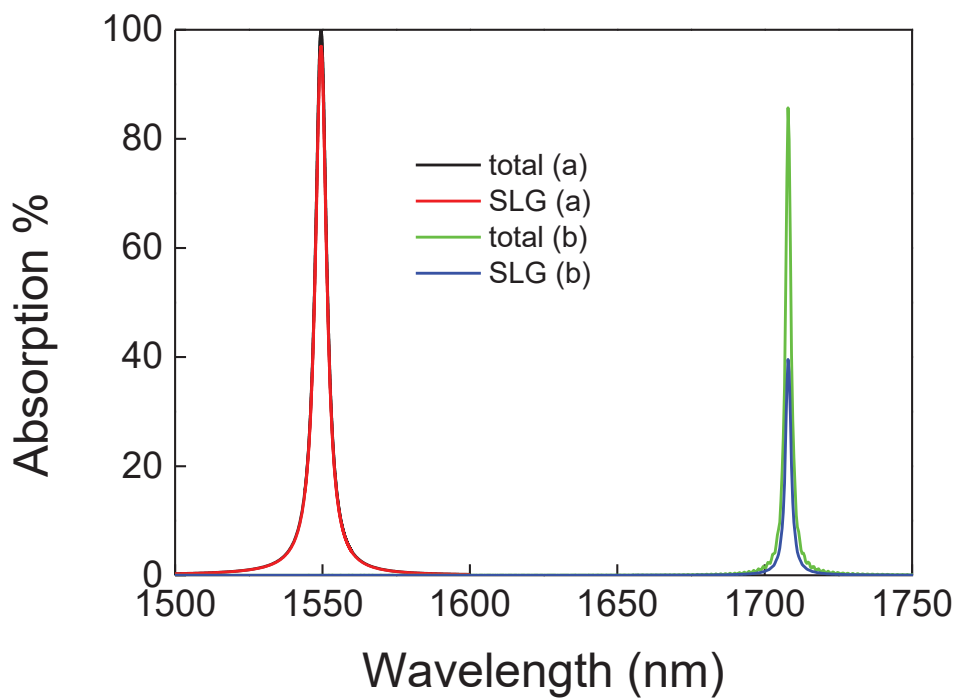
Παρατηρείται ότι για κάθε αλλαγή στην περίοδο εμφανίζονται δύο διακριτές κορυφές στην ένταση της ακτινοβολίας σε διαφορετικά μήκη κύματος.

Έπειτα, μελετήθηκαν για 1D σύστημα οι τιμές της απορρόφησης, στην πρώτη περίπτωση η διάταξη δεν περιέχει τα σκαλοπάτια και στην δεύτερη αυξήθηκε το πάχος του νοθευμένου πυριτίου και είναι το άθροισμα του πάχους του στρώματος n-Si με το ύψος του σκαλοπατιού ($h + d_{n-si}$). Στο Σχήμα 37 φαίνεται η σχηματική απεικόνιση των δύο διατάξεων.



Σχήμα 37 Σχηματική απεικόνιση των δύο 1D διατάξεων.

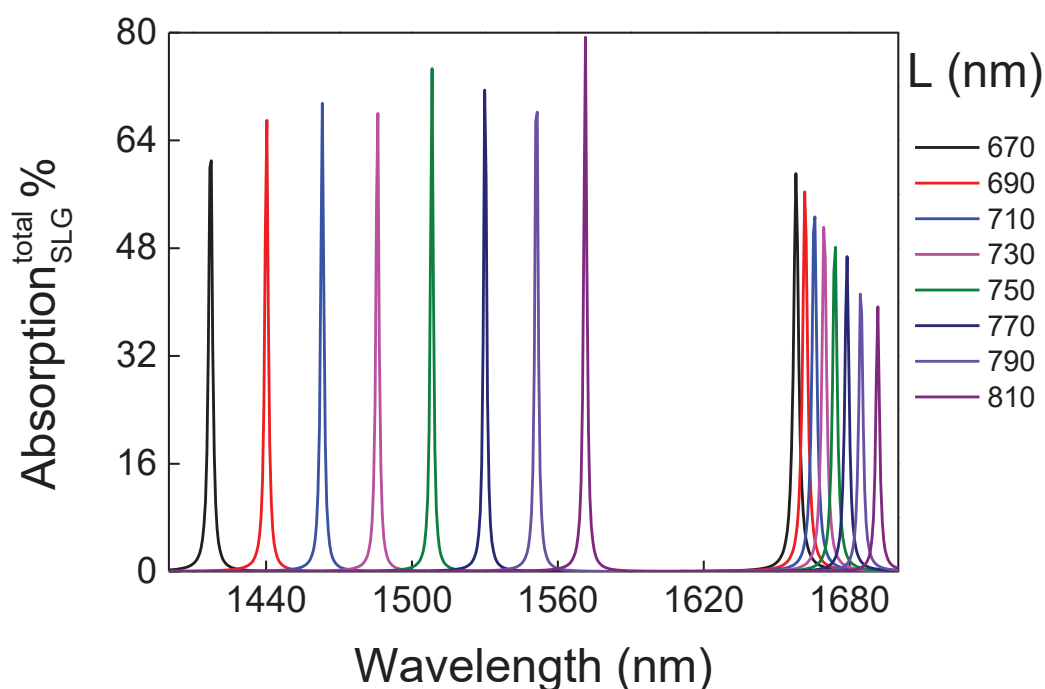
Στο παρακάτω διάγραμμα (Σχήμα 38) φαίνεται η απορρόφηση τόσο του συστήματος συνολικά, όσο και του φύλλου γραφενίου συναρτήσει του μήκους κύματος.



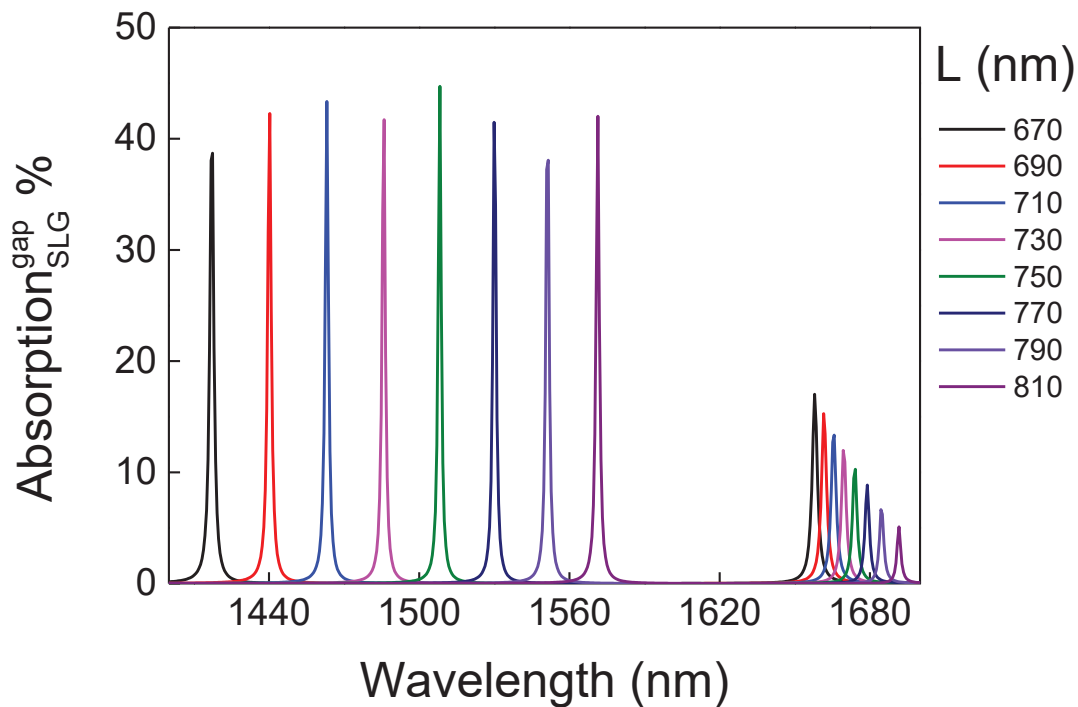
Σχήμα 38 Διάγραμμα απορρόφησης τόσο του συστήματος, όσο και του μήκους του γραφενίου στο κέντρο της κοιλότητας για τις δύο διατάξεις (Σχήμα 37).

Στην πρώτη περίπτωση, η συνολική απορρόφηση ανέρχεται στο 100% και το φύλλο του γραφενίου απορροφά έως και 97% σε μήκος κύματος συντονισμού 1550 nm. Το αποτέλεσμα αυτό ήταν αναμενόμενο, καθώς η γεωμετρία του συστήματος είναι τέτοια ώστε να επιτυγχάνεται ο μηχανισμός της κρίσιμης σύζευξης, όπως παρατηρήθηκε και στην προηγούμενη υποενότητα. Στη δεύτερη περίπτωση, το συνολικό ποσοστό της απορρόφησης είναι 81% και το ποσοστό απορρόφησης στο φύλλο γραφενίου είναι 43% σε μήκος κύματος συντονισμού 1709 nm. Η τιμή της απορρόφησης είναι αναμενόμενη, καθώς δεν ικανοποιείται πλέον η συνθήκη μέγιστης διέλευσης και έχει αλλάξει η τιμή του πάχους της κοιλότητας. Αυτά είναι τα δύο όρια του κροσσού συμβολής.

Παρακάτω στο Σχήμα 39 παρουσιάζονται οι απορροφήσεις του γραφενίου στο κέντρο της κοιλότητας και στο Σχήμα 40 η απορρόφηση του γραφενίου στο τμήμα του γραφενίου που αντιστοιχεί στο μήκος του χάσματος συναρτήσει του μήκους κύματος, μεταβάλλοντας την περίοδο της διάταξης και $gap = 200$ nm.



Σχήμα 39 Διάγραμμα συνολικής απορρόφησης του γραφενίου στο κέντρο της κοιλότητας, μεταβάλλοντας την περίοδο του συστήματος L (670-810) nm.



Σχήμα 40 Διάγραμμα απορρόφησης του γραφενίου στο μήκος που αντιστοιχεί στο χάσμα (gap) της διάταξης, μεταβάλλοντας την περίοδο του συστήματος L (670-810) nm.

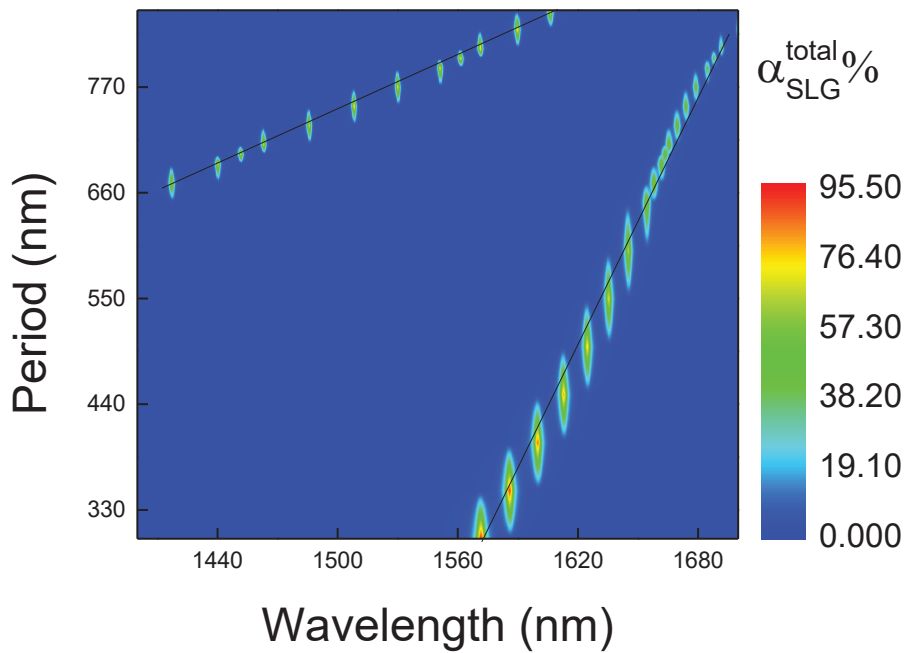
Έχοντας θέσει τα όρια για τα δύο διαφορετικά πάχη της κοιλότητας, (1550-1710 nm), κατανοήθηκε ότι οι ενδιάμεσες τιμές που παρουσιάζονται ανάμεσα σε αυτά τα μήκη κύματος αφορούν τους όρους ενισχυτικής συμβολής της κοιλότητας.

Διατηρώντας την περιοχή του χάσματος σταθερή, $gap = 200$ nm, όσο αυξάνουμε την περίοδο του συστήματος, L (670 ως 810) nm, παρατηρείται ότι το μήκος κύματος συντονισμού μετατοπίζεται σε μεγαλύτερες τιμές και το σύστημα ξεφεύγει από το φαινόμενο της κρίσιμης σύζευξης, επομένως ο ρυθμός απορρόφησης του γραφενίου θα είναι πιο αργός ή πιο γρήγορος σε σχέση με τον ρυθμό διαφυγής του φωτός από την κοιλότητα. Οι δύο αυτοί ρυθμοί δεν συντονίζονται όσο αυξάνεται η περίοδο του συστήματος καθώς η διάταξη δεν έχει τα κατάλληλα γεωμετρικά χαρακτηριστικά.

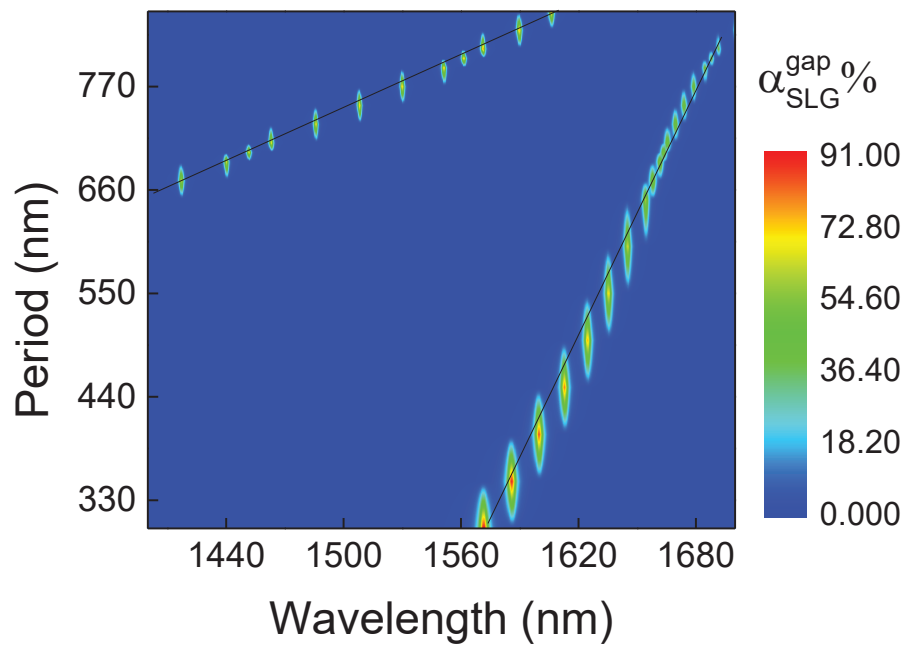
Επίσης, παρατηρήθηκε ότι για κάθε αλλαγή στην περίοδο εμφανίζονται δύο διακριτές κορυφές στην ένταση της ακτινοβολίας σε διαφορετικά μήκη κύματος. Συμπεραίνεται ότι εμφανίζεται το μη επιθυμητό φαινόμενο της σκέδασης, που είναι αποτέλεσμα περίθλασης καθώς διαπιστώνεται απόκλιση ακτινών φωτός από την

κατακόρυφη πορεία τους και απορρόφηση και σε άλλο μήκος κύματος λόγω grating εξαιτίας των σκαλοπατιών με δείκτη διάθλασης $n_{eff} = \frac{\lambda}{L} \sim 2$.

Στο Σχήμα 41 απεικονίζεται ο χρωματικός χάρτης της απορρόφησης συναρτήσει της περιόδου και του μήκους κύματος.

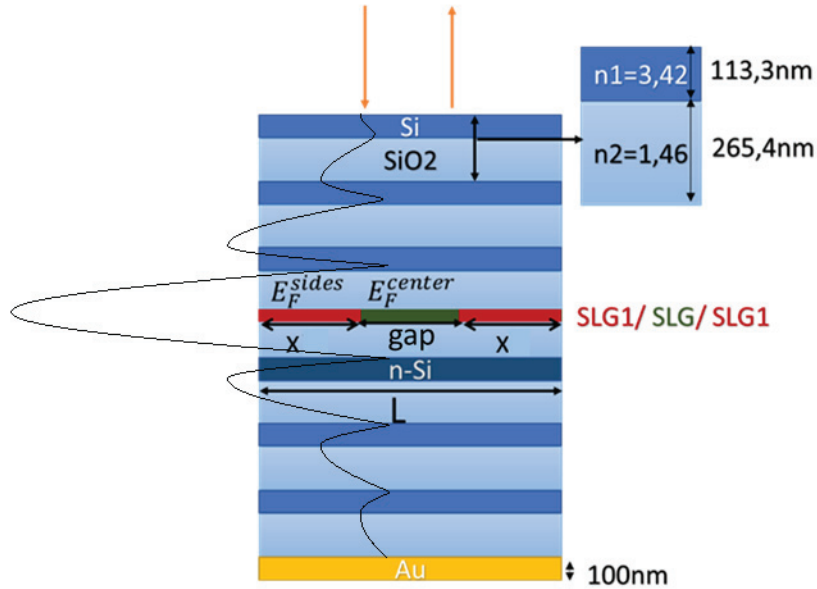


Σχήμα 41 Χρωματικός χάρτης του ποσοστού απορρόφησης συνολικά στο φύλλο του γραφενίου, μεταβάλλοντας την περίοδο του συστήματος L (300-850) nm.



Σχήμα 42 Χρωματικός χάρτης του ποσοστού απορρόφησης στο μήκος του γραφενίου που αντιστοιχεί στο μήκος του gap, μεταβάλλοντας την περίοδο του συστήματος L (300-850) nm.

Στην επόμενη προσέγγιση αφαιρέθηκαν τα σκαλοπάτια, ώστε να αποφευχθεί το φαινόμενο της σκέδασης και επιλέχθηκε να χωριστεί το γραφένιο σε τρία διαφορετικά τμήματα με διαφορετικό εμπλουτισμό το καθένα στο κέντρο της κοιλότητας. Η διαμόρφωση της συγκεκριμένης διάταξης φαίνεται στο Σχήμα 43, όπου με gap συμβολίζεται το μήκος του κεντρικού γραφενίου, ενώ με E_F^{center} , η ενέργεια Fermi του (πράσινη περιοχή). Το πρώτο και το τελευταίο τμήμα γραφενίου χαρακτηρίζονται από την ίδια ενέργεια Fermi, E_F^{sides} , και έχουν το ίδιο μήκος x (κόκκινη περιοχή) που εξαρτάται τόσο από την περίοδο L, όσο και από το μήκος του κεντρικού γραφενίου x και υπολογίζεται κάθε φορά από τον τύπο $x = [(L - gap) / 2]$.

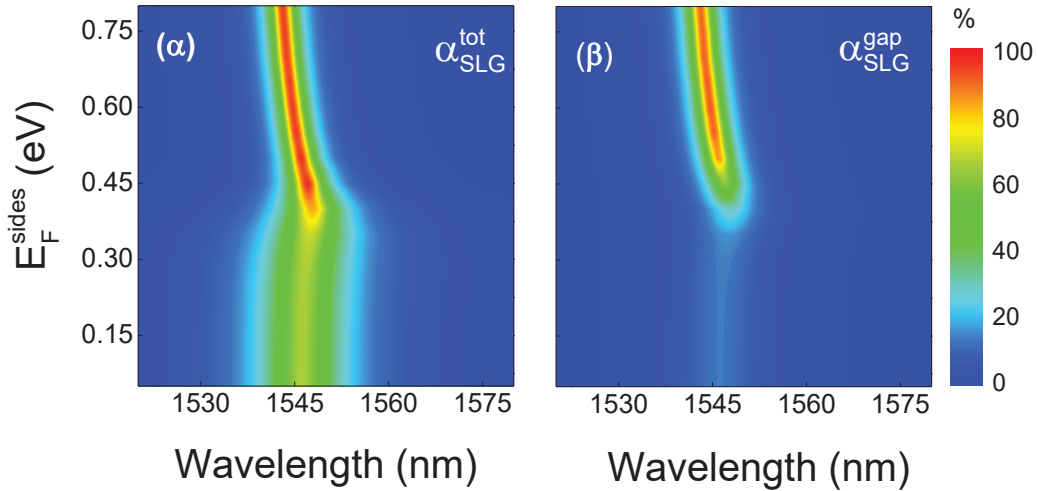


Σχήμα 43 Απεικόνιση της διάταξης με τρία τμήματα γραφενίου στο κέντρο της κοιλότητας και απεικόνιση ηλεκτρικού πεδίου συγκεντρωμένο στην κοιλότητα.

Στόχος ήταν να μελετηθεί και να κατανοηθεί η συμπεριφορά του γραφενίου μεταβάλλοντας την ενέργεια Fermi των επιμέρους πλέον τμημάτων του. Στο σύστημα ορίστηκαν σταθερά, η περίοδος $L = 500 \text{ nm}$, το μήκος του κεντρικού γραφενίου $\text{gap} = 100 \text{ nm}$ και το μήκος του κάθε γραφενίου στα άκρα ως $x = 200 \text{ nm}$.

Η ενέργεια Fermi του κεντρικού γραφενίου, αρχικά, τέθηκε σταθερή και ίση με $E_F^{\text{center}} = 0.05 \text{ eV}$, ενώ μεταβλήθηκε η ενέργεια Fermi στα ακριανά τμήματα γραφενίου, E_F^{sides} .

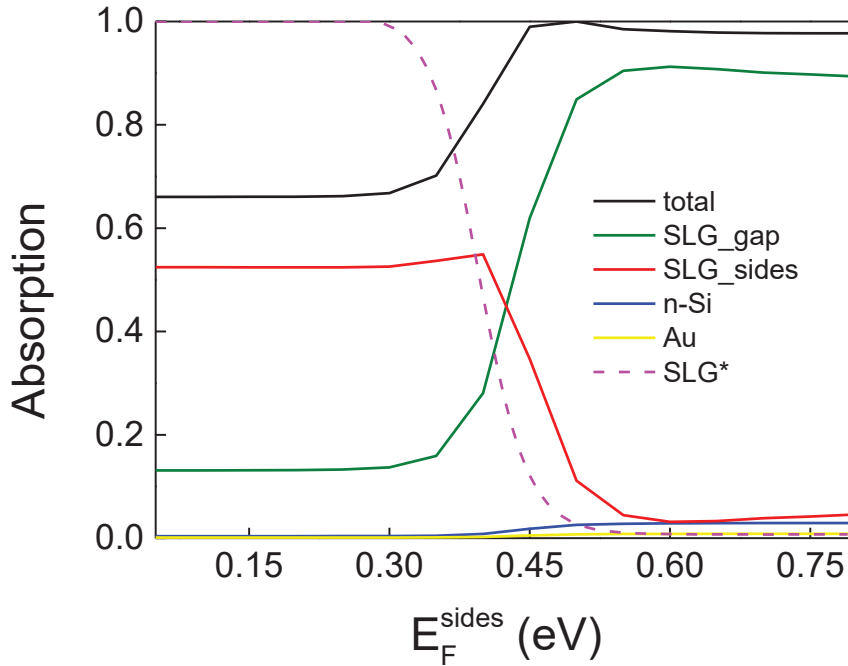
Στο παρακάτω Σχήμα 44, φαίνεται η μεταβολή της απορρόφησης συνολικά στα τμήματα των γραφενίων (Σχήμα 44α), αλλά και μεμονωμένα του κεντρικού τμήματος του γραφενίου (Σχήμα 44β), που αποτελεί ζητούμενο στην παρούσα μελέτη, αλλάζοντας την ενέργεια Fermi των ακριανών τμημάτων συναρτήσει του μήκους κύματος.



Σχήμα 44 Χρωματικός χάρτης μεταβολής της απορρόφησης (α) συνολικά των τμημάτων γραφενίου στο κέντρο της διάταξης και (β) του κεντρικού γραφενίου, αλλάζοντας την ενέργεια Fermi των τμημάτων γραφενίου στα άκρα E_F^{sides} και διατηρώντας σταθερό τον εμπλουτισμό στο κεντρικό τμήμα γραφενίου $E_F^{center} = 0.05 \text{ eV}$.

Από τους παραπάνω χρωματικούς χάρτες παρατηρείται ότι για μήκος κύματος κοντά στα 1545 nm και E_F^{sides} από 0.5 eV και πάνω, το ποσοστό της συνολικής απορρόφησης των τριών τμημάτων του γραφενίου φτάνει μέχρι και το 97%, ενώ στο κεντρικό μόνο γραφένιο με $E_F^{center} = 0.05 \text{ eV}$, το ποσοστό της απορρόφησης φτάνει ως και 92 %.

Στο Σχήμα 45 παρουσιάζονται τα διαγράμματα μεταβολής του ποσοστού της μέγιστης απορρόφησης, τόσο του συστήματος, όσο και των απορροφητικών υλικών μεταβάλλοντας τον εμπλουτισμό στα άκρα, E_F^{sides} . Με SLG* απεικονίζεται η απορροφητικότητα του γραφενίου.

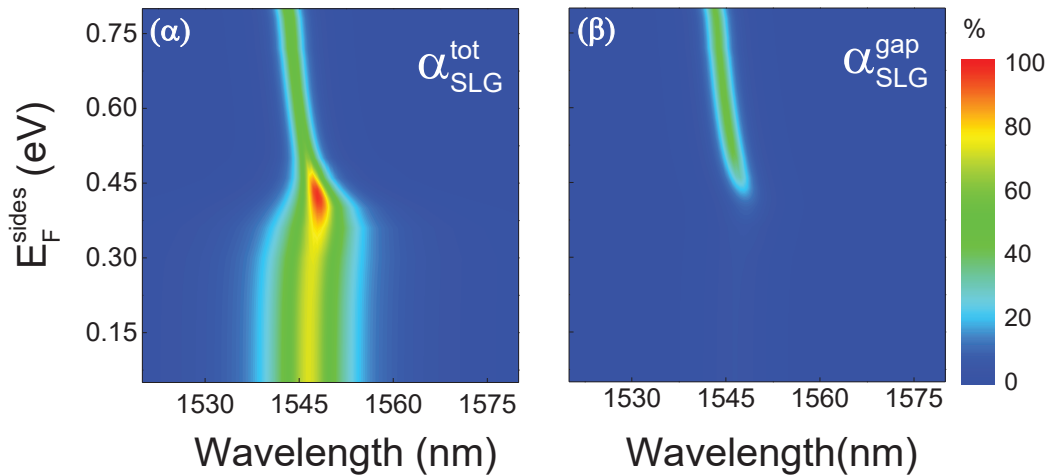


Σχήμα 45 Σχηματική απεικόνιση ποσοστών απορρόφησης μεταβάλλοντας την ενέργεια Fermi του γραφενίου που βρίσκονται στα άκρα, E_F^{sides} και $E_F^{center} = 0.05\text{eV}$.

Στο Σχήμα 45 γίνεται κατανοητό ότι για μία ορισμένη τιμή του E_F^{sides} , το ποσοστό της συνολικής απορρόφησης της ΗΜ ακτινοβολίας φτάνει σε μια μέγιστη τιμή και μετά από αυτήν, η καμπύλη της απορρόφησης θα σταθεροποιηθεί. Η απορρόφηση του κεντρικού γραφενίου αυξάνεται, ενώ πέφτει το ποσοστό απορρόφησης στα ακριανά τμήματα, όσο αυξάνεται η ενέργεια Fermi στα ακριανά τμήματα και σχεδόν το ποσοστό της απορρόφησης του συστήματος απορροφάται στο κεντρικό γραφένιο. Αυτό συμβαίνει διότι ο ρυθμός της εισόδου/διαφυγής των επίπεδων ΗΜ κυμάτων στην κοιλότητα πλησιάζει τον ρυθμό απορρόφησης του γραφενίου. Πιο συγκεκριμένα, για ενέργεια Fermi $E_F^{sides} = 0.5\text{ eV}$, η συνολική απορρόφηση του συστήματος φτάνει στο 100%. Η απορρόφηση στο κεντρικό τμήμα γραφενίου φτάνει το 85%, ενώ η απορροφητικότητα είναι 100% (2.3% απόλυτη τιμή). Η συνολική απορρόφηση των τμημάτων του γραφενίου στα άκρα είναι 10%, ενώ η απορροφητικότητά τους στο συγκεκριμένο μήκος κύματος είναι μόλις 2.5% ($0.025 \times 2.3\% = 0.058\%$ απόλυτη τιμή). Το νοθευμένο πυρίτιο απορρόφησε το 3%, ενώ ο χρυσός μόλις 1%. Συμπεραίνεται ότι όταν η απορροφητικότητα του κεντρικού είναι τέλεια για $E_F^{center} = 0.05\text{ eV}$, τότε τα τμήματα του γραφενίου στα άκρα θα πρέπει να μην απορροφούν,

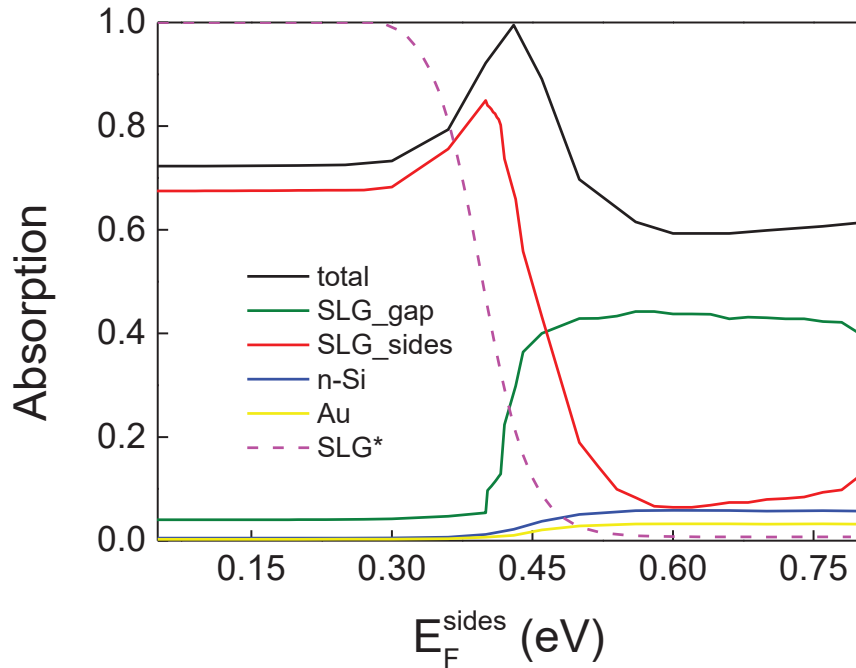
επομένως να είναι διάφανες, ώστε να επιτευχθεί ο μηχανισμός της κρίσιμης σύζευξης (critical coupling). Ο λόγος που η απορροφητικότητα πέφτει στα άκρα, όπως δείχνει και το διάγραμμα (Σχήμα 45), είναι λόγω του Pauli blocking που συμβαίνει όταν $E_F > \frac{\hbar\omega}{2}$, όπου $\hbar\omega = 0.8eV$.

Στη συνέχεια, η ενέργεια Fermi στο κεντρικό τμήμα γραφενίου ορίστηκε σταθερή και ίση με $E_F^{center} = 0.431 eV$. Η τιμή αυτή επιλέχθηκε καθώς στο μονοδιάστατο σύστημα παρατηρείται στο σύστημα ο μηχανισμός της κρίσιμης σύζευξης. Παρακάτω στο Σχήμα 46 φαίνονται τα διαγράμματα της απορρόφησης στο γραφένιο αλλάζοντας την ενέργεια Fermi των ακριανών γραφενίων.



Σχήμα 46 Χρωματικός χάρτης μεταβολής της απορρόφησης (α) συνολικά των τμημάτων του γραφενίου στο κέντρο της διάταξης και (β) του κεντρικού γραφενίου, αλλάζοντας την ενέργεια Fermi των τμημάτων γραφενίου στα άκρα, E_F^{sides} , και διατηρώντας σταθερή την ενέργεια Fermi στο κεντρικό τμήμα γραφενίου, $E_F^{center} = 0.431 eV$.

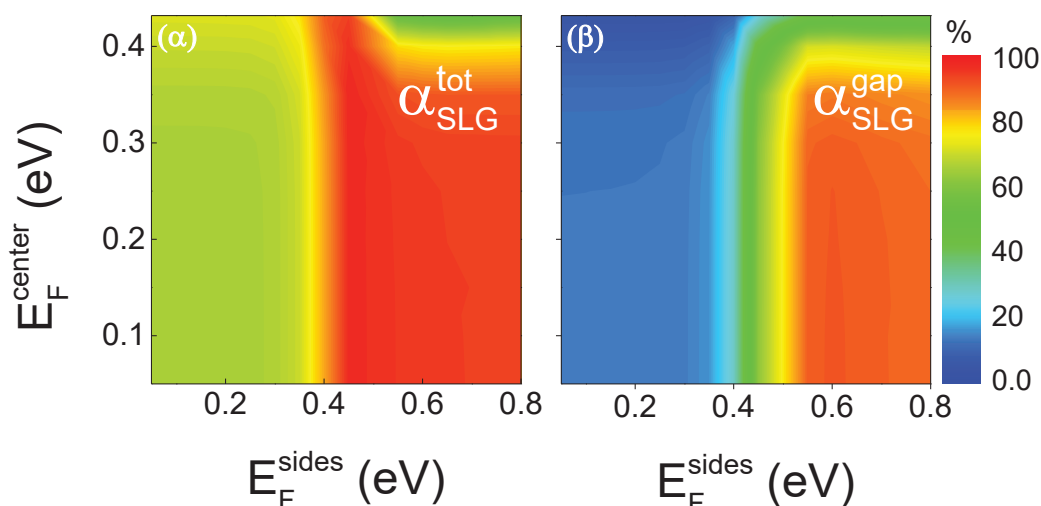
Φαίνεται ότι για $E_F^{center} = 0.431 eV$, μήκος κύματος 1546 nm και E_F^{sides} από 0.5 eV και πάνω, η συνολική απορρόφηση των τμημάτων του γραφενίου φτάνει μέχρι και 97%, ενώ το ποσοστό της απορρόφησης στο κεντρικό γραφένιο φτάνει στο 45%. Αυτό είναι αναμενόμενο καθώς το 0.431 eV ήταν η σωστή τιμή για ομοιόμορφα ντοπαρισμένο γραφένιο που καλύπτει όλη την επιφάνεια, ενώ εδώ δεν είναι αυτή η περίπτωση.



Σχήμα 47 Σχηματική απεικόνιση ποσοστών απορρόφησης μεταβάλλοντας την ενέργεια Fermi του γραφενίου που βρίσκονται στα άκρα, E_F^{sides} και $E_F^{center} = 0.431\text{eV}$.

Συγκεκριμένα, στο Σχήμα 47 παρατηρείται ότι για μία ορισμένη τιμή του E_F^{sides} , το ποσοστό της συνολικής απορρόφησης της HM ακτινοβολίας φτάνει σε μια μέγιστη τιμή και μετά από αυτήν, η καμπύλη της απορρόφησης φθίνει και σταθεροποιείται, ενώ βελτιώνεται και η απορρόφηση στο κεντρικό γραφένιο φτάνει κοντά στη συνολική απορρόφηση. Πιο συγκεκριμένα, για $E_F^{sides} = 0.43\text{ eV}$ και πάνω, η συνολική απορρόφηση του συστήματος φτάνει στο 100% και έπειτα πέφτει. Η απορρόφηση στο κεντρικό τμήμα γραφενίου φτάνει το 29%, ενώ η απορροφητικότητα του στο συγκεκριμένο μήκος κύματος είναι μόλις 20%. Το ποσοστό των ακριανών γραφενίων είναι 68% και έπειτα πέφτει, ενώ πέφτει και η απορροφητικότητα τους. Το νοθευμένο πυρίτιο απορρόφησε το 2%, ενώ ο χρυσός μόλις 1%.

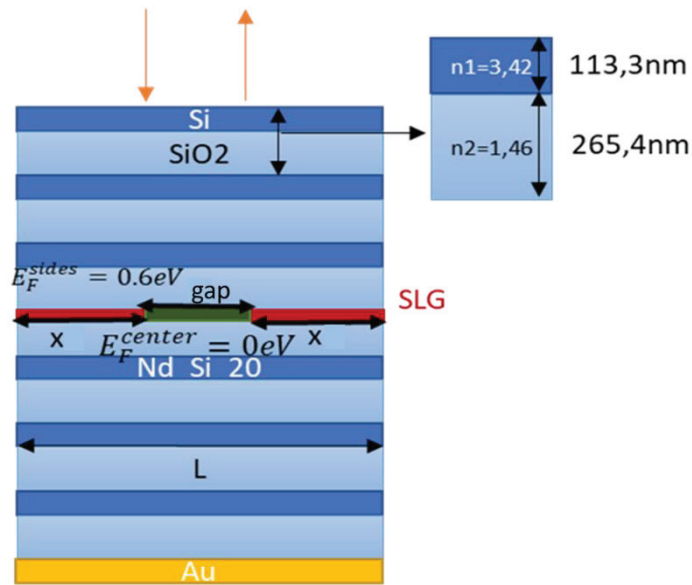
Για λόγους αριθμητικής βελτιστοποίησης ερευνήθηκαν όλες οι περιπτώσεις που παρουσιάζονται, Σχήμα 48, στους χρωματικούς χάρτες ελέγχοντας την ενέργεια Fermi όλων των τμημάτων του γραφενίου.



Σχήμα 48 Χρωματικός χάρτης του ποσοστού απορρόφησης (α) συνολικά των τμημάτων του γραφενίου στο κέντρο της διάταξης και (β) του γραφενίου στο κέντρο μεταβάλλοντας τις ενέργειες Fermi στα επιμέρους τμήματα του γραφενίου.

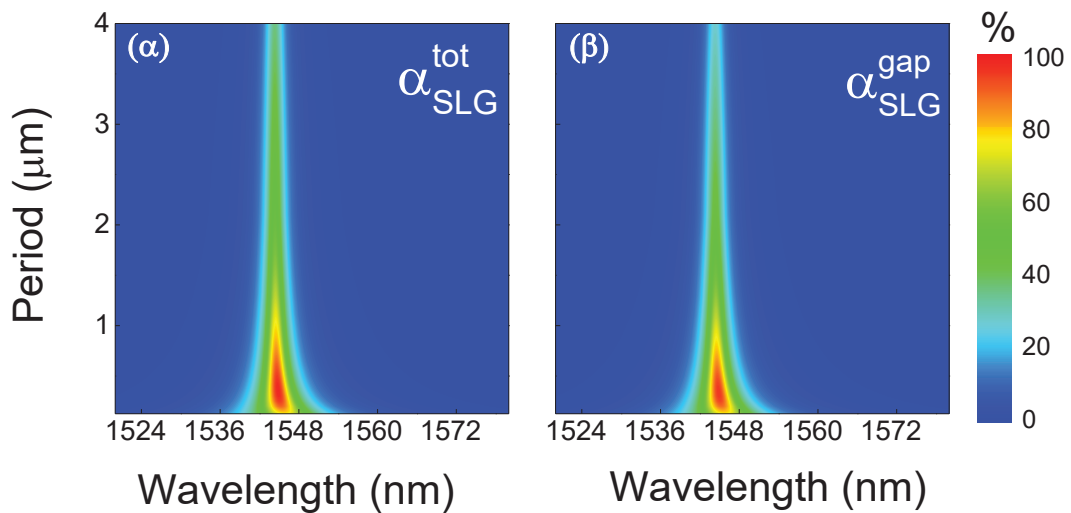
Από τους παραπάνω χάρτες παρατηρείται ότι για $E_F^{sides} = 0.5eV$ και άνω και για κάθε $E_F^{center} = (0 \text{ έως } 0.35) eV$ περίπου, επιτυγχάνεται ποσοστό απορρόφησης συνολικά στα τμήματα του γραφενίου 97% και μάλιστα το κεντρικό γραφένιο, απορροφά 91%. Αυτό συμβαίνει διότι επιτυγχάνεται ο μηχανισμός της κρίσιμης σύζευξης. Συμπεραίνεται ότι για να επιτευχθεί κρίσιμη σύζευξη χρειάζεται η διάταξη να έχει συνολικά μια συγκεκριμένη απορροφητικότητα. Εάν του κεντρικού γραφενίου είναι μικρή, θα πρέπει να γίνουν οι άκρες λίγο απορροφητικές. Εάν του κεντρικού είναι μεγάλη, τότε οι άκρες θα πρέπει να είναι διάφανες.

Έπειτα, με βάση αυτά τα αποτελέσματα ορίστηκαν στη διάταξη σταθερές τιμές στην ενέργεια Fermi των γραφενίων στη διάταξη, $E_F^{center} = 0 eV$ (πράσινη περιοχή), undoped φύλλο γραφενίου στο κέντρο και $E_F^{sides} = 0.6eV$, στα άκρα (κόκκινη περιοχή), όπως απεικονίζεται στο Σχήμα 49.



Σχήμα 49 Δισδιάστατη διάταξη με σταθερές τιμές ενέργειας Fermi στα τμήματα του γραφενίου.

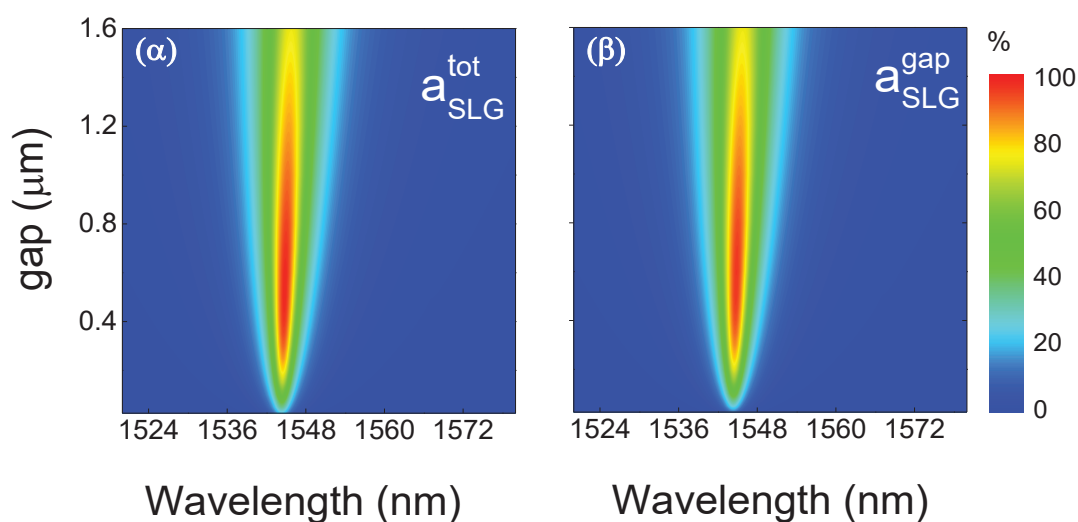
Στην πρώτη περίπτωση, μεταβλήθηκε η περίοδος, L (200 – 2100) nm, της διάταξης για μήκος του κεντρικού γραφενίου $gap = 100$ nm.



Σχήμα 50 Χρωματικός χάρτης του ποσοστού απορρόφησης (α) συνολικά στα τμήματα του γραφενίου και (β) του γραφενίου στο κέντρο, μεταβάλλοντας την περίοδο της διάταξης.

Παρατηρείται από τους παραπάνω χρωματικούς χάρτες ότι για μήκος κύματος κοντά στα 1545 nm και για περίοδο από 350 nm έως 1000 nm, το ποσοστό της συνολικής απορρόφησης στα τμήματα του γραφενίου φτάνει στο 98% για το σύστημα, ενώ για το κέντρο το ποσοστό της απορρόφησης από το φύλλο του γραφενίου ανέρχεται στο 95%.

Και στην δεύτερη περίπτωση εξετάστηκε η απορρόφηση του γραφενίου θέτοντας σταθερή την περίοδο, $L = 2000$ nm, και μεταβάλλοντας το μήκος του κεντρικού γραφενίου.



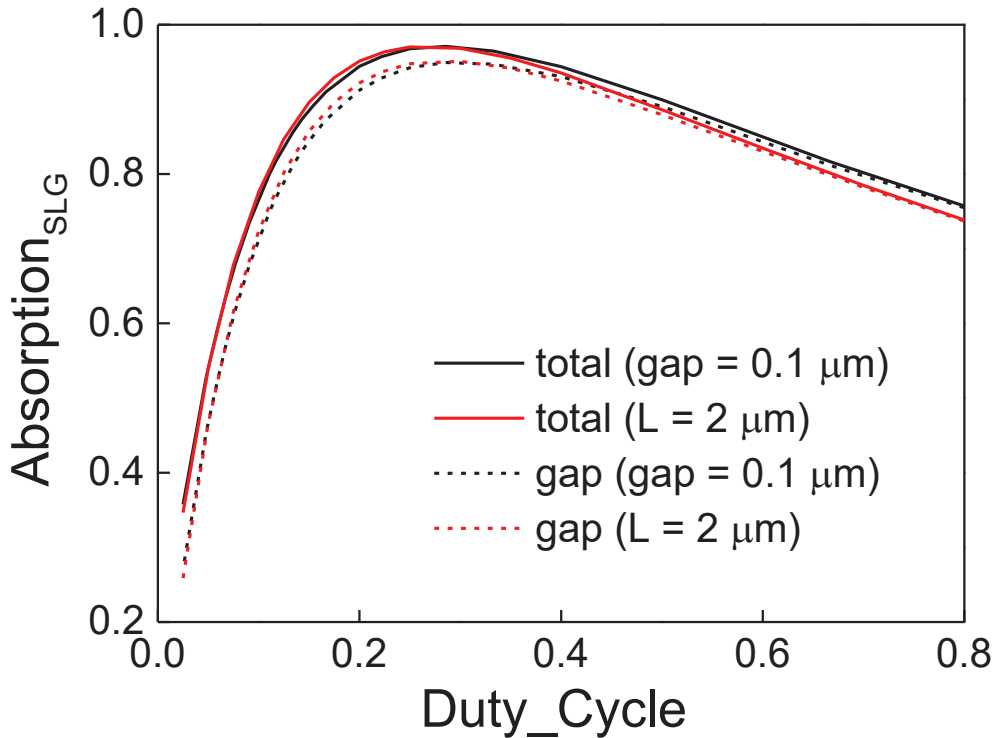
Σχήμα 51 Χρωματικός χάρτης του ποσοστού απορρόφησης (α) συνολικά στα τμήματα του γραφενίου και (β) του γραφενίου στο κέντρο, μεταβάλλοντας το μήκος του κεντρικού γραφενίου από gap (200 - 1600) nm. Η περίοδος του συστήματος ορίστηκε $L = 2000$ nm.

Και στις δύο περιπτώσεις, Σχήμα 50 και 51, παρατηρείται ότι για μήκος κύματος κοντά στα 1545 nm και περίοδος από 400 nm έως 1000 nm, το ποσοστό της συνολικής απορρόφησης στα τμήματα του γραφενίου φτάνει στο 98%, ενώ το ποσοστό της απορρόφησης στο φύλλο του γραφενίου στο κέντρο, ανέρχεται στο 96%.

Στη συνέχεια, συλλέχθηκαν όλα τα δεδομένα με τους δύο αυτούς τρόπους. Στο Σχήμα 52 απεικονίζεται η μεταβολή της μέγιστης απορρόφησης τόσο του συστήματος, όσο και του κεντρικού γραφενίου συναρτήσει του

$$Duty\ Cycle = \frac{gap}{L}$$

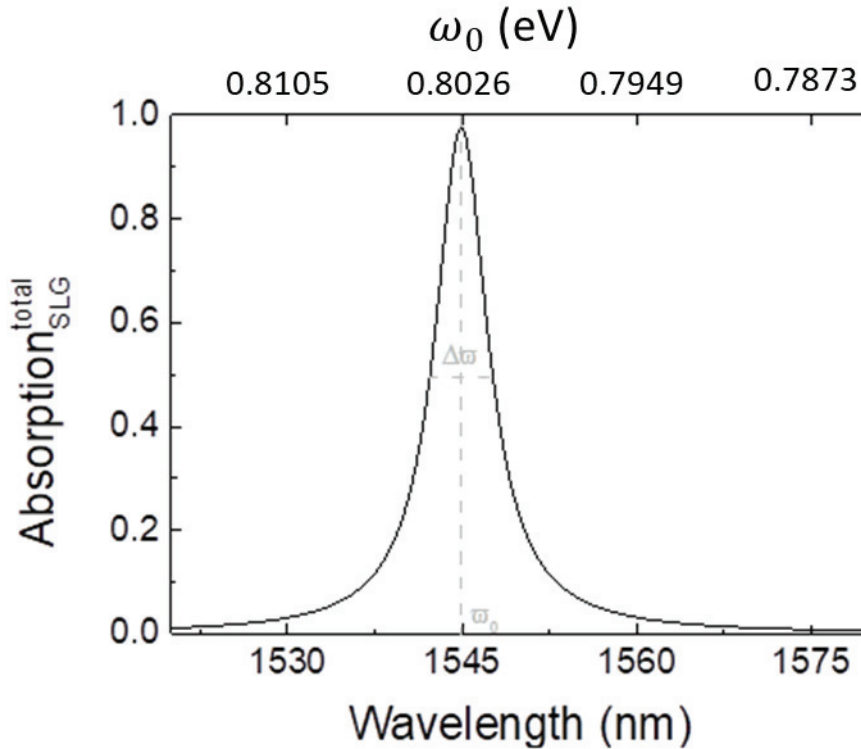
όπου gap το μήκος του κεντρικού γραφενίου και L η περίοδος του συστήματος.



Σχήμα 52 Μεταβολή της μέγιστης απορρόφησης τόσο στα τμήματα του γραφενίου συνολικά (συνεχής γραμμή), όσο και του κεντρικού γραφενίου (διακεκομμένη) συναρτήσει του duty cycle με δύο τρόπους, (α) μεταβάλλοντας το μήκος του κεντρικού γραφενίου (κόκκινη γραμμή) και (β) μεταβάλλοντας την περίοδο (κρόκκινη γραμμή).

Μελετώντας το παραπάνω διάγραμμα, Σχήμα 52, διαπιστώνεται ότι για ποσοστό 35% του duty cycle, η συνολική απορρόφηση τόσο στα τμήματα του γραφενίου, όσο και στο κεντρικό γραφένιο είναι αρκετά υψηλή με $E_F^{sides} = 0.6\ eV$ και $E_F^{center} = 0\ eV$. Επίσης, παρατηρείται ότι και με τους δύο τρόπους η απορρόφηση συγκλίνει. Να σημειωθεί ότι 35% duty cycle είναι μεγάλο, αφού το μήκος του κεντρικού γραφενίου είναι μεγάλο σε σχέση με τα άκρα και επιδιώκεται καλύτερη εστίαση, καθώς με την αύξηση τοπικά της απορρόφησης, η κλίση της θερμοκρασίας θα αυξάνει.

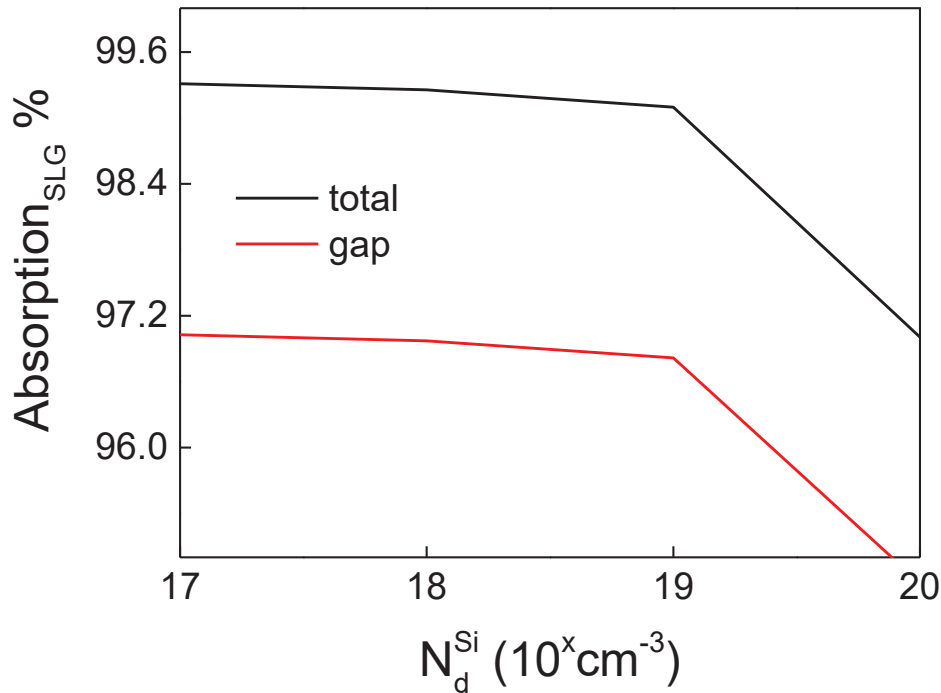
Στην περίπτωση για duty cycle 35%, η συνολική απορρόφηση του συστήματος συναρτήσει του μήκους κύματος δίνεται στο Σχήμα 53.



Σχήμα 53 Διάγραμμα συνολικής απορρόφησης συναρτήσει του μήκους κύματος για $E_F^{sides} = 0.6 \text{ eV}$, $E_F^{center} = 0 \text{ eV}$ και duty cycle=35%.

Η οριακή οπτική συχνότητα λειτουργίας της διάταξης $f_{opt} = \frac{c}{2n_{SiO_2}LQ} \sim 695 \text{ GHz}$, όπου $\frac{c}{n_{SiO_2}}$ η ταχύτητα του φωτός στο διηλεκτρικό, $2L = 1060 \text{ nm}$ το μήκος της διαδρομής στην κοιλότητα, $Q = \frac{\omega_0}{\Delta\omega} \sim 279$ ο συντελεστής ποιότητας, όπου ω_0 η συχνότητα συντονισμού στην κοιλότητα και $\Delta\omega$ το εύρος συχνοτήτων, δηλαδή το FWHM=0.00287.

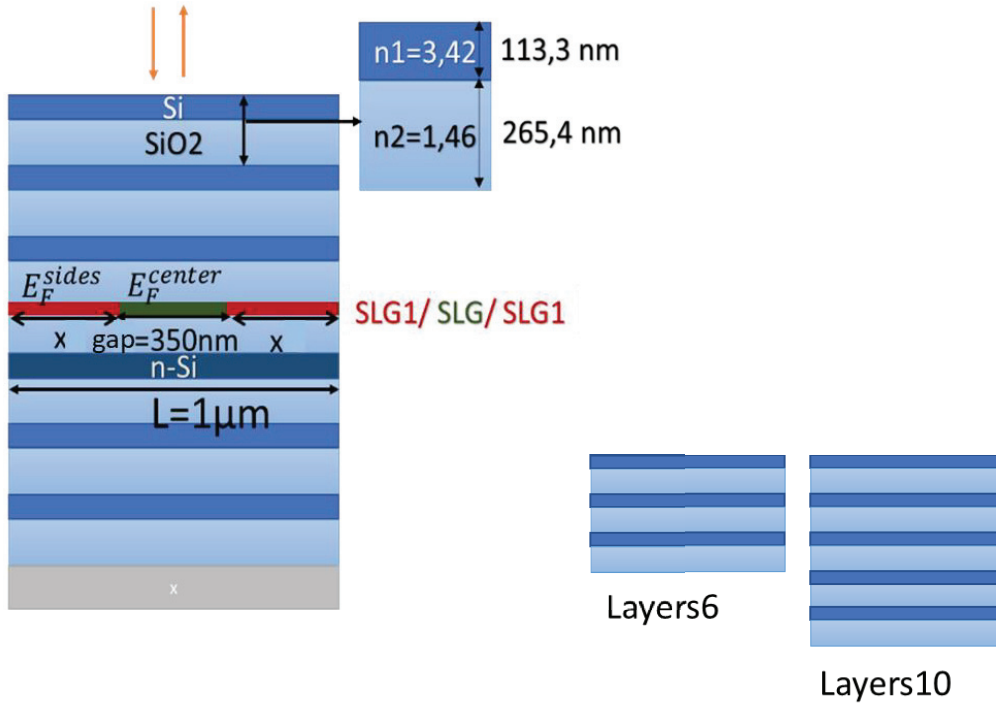
Παράλληλα, μελετήθηκε και η μεταβολή της απορρόφησης με αλλαγή της νόθευσης του πυριτίου. Ορίστηκαν σταθερά τα μεγέθη $L = 2000 \text{ nm}$, $E_F^{sides} = 0.6 \text{ eV}$, $E_F^{center} = 0 \text{ eV}$ και gap = 500 nm. Τα αποτελέσματα φαίνονται στο Σχήμα 54.



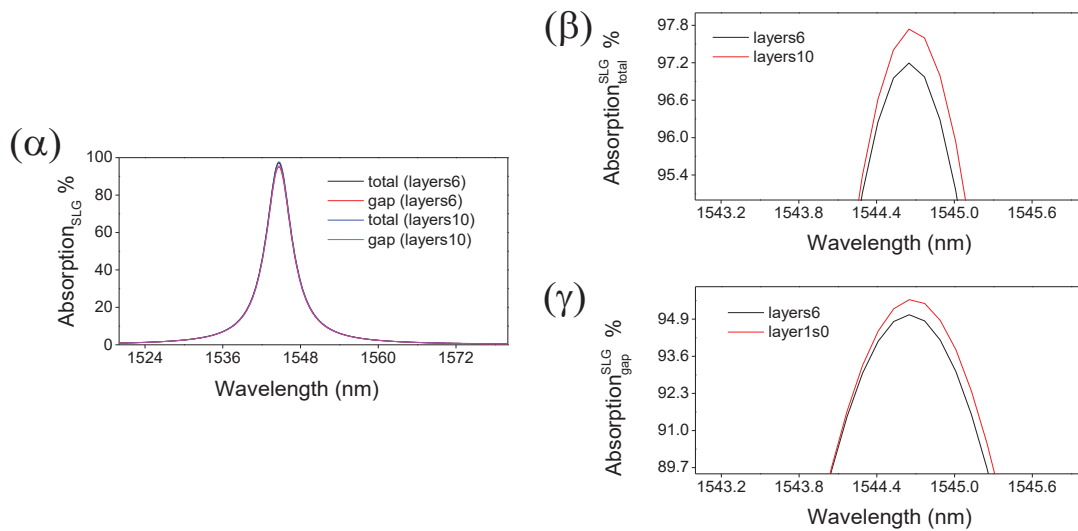
Σχήμα 54 Μεταβολή της μέγιστης απορρόφησης τόσο συνολικά των τμημάτων του γραφενίου, όσο και του κεντρικού γραφενίου συναρτήσει της νόθευσης του πυριτίου για μήκος κεντρικού γραφενίου $gap = 500 \text{ nm}$.

Όπως φαίνεται από τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στο Σχήμα 54, όσο μικρότερη είναι η νόθευση του πυριτίου, αυξάνεται κατά ένα μικρό ποσοστό της απορρόφησης.

Στην πορεία, ερευνήθηκε εάν μεταβάλλεται το ποσοστό της απορρόφησης του γραφενίου στο χάσμα, αυξάνοντας την περίοδο των Bragg στο κάτω μέρος της διάταξης. Στην παρούσα μελέτη διερευνήθηκαν δύο περιπτώσεις, στην πρώτη προστίθενται έξι layers (3N περίοδοι Bragg) και στην άλλη δέκα layers (5N περίοδοι Bragg) στο Σχήμα 55.



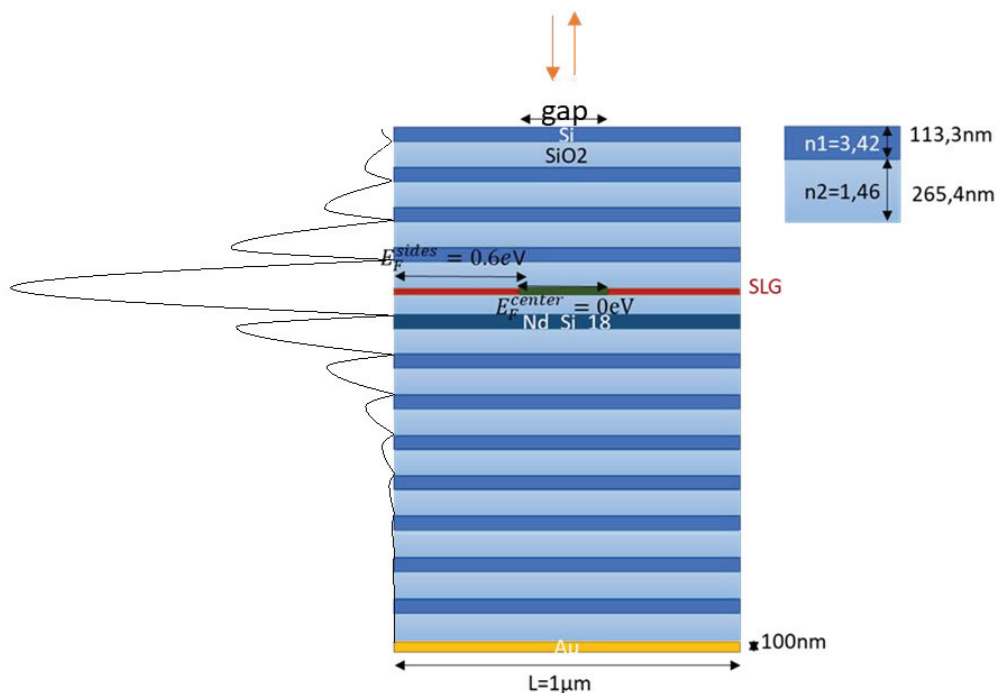
Σχήμα 55 Μεταβολή των layers της διάταξης με προσθήκη (α) 3N Bragg (6Layers) και (β) 5N Bragg (10Layers).



Σχήμα 56 (α) Μεταβολή της απορρόφησης τόσο συνολικά των τμημάτων του γραφενίου, όσο και του κεντρικού φύλλου γραφενίου συναρτήσει του μήκους κύματος για δύο περιπτώσεις για προσθήκη (I) layers 6 και (II) layers 10. Μεγέθυνση της μεταβολής της μέγιστης απορρόφησης (β) συνολικά των γραφενίων και (γ) του κεντρικού φύλλου γραφενίου, αντίστοιχα συναρτήσει του μήκους κύματος για τις δύο περιπτώσεις.

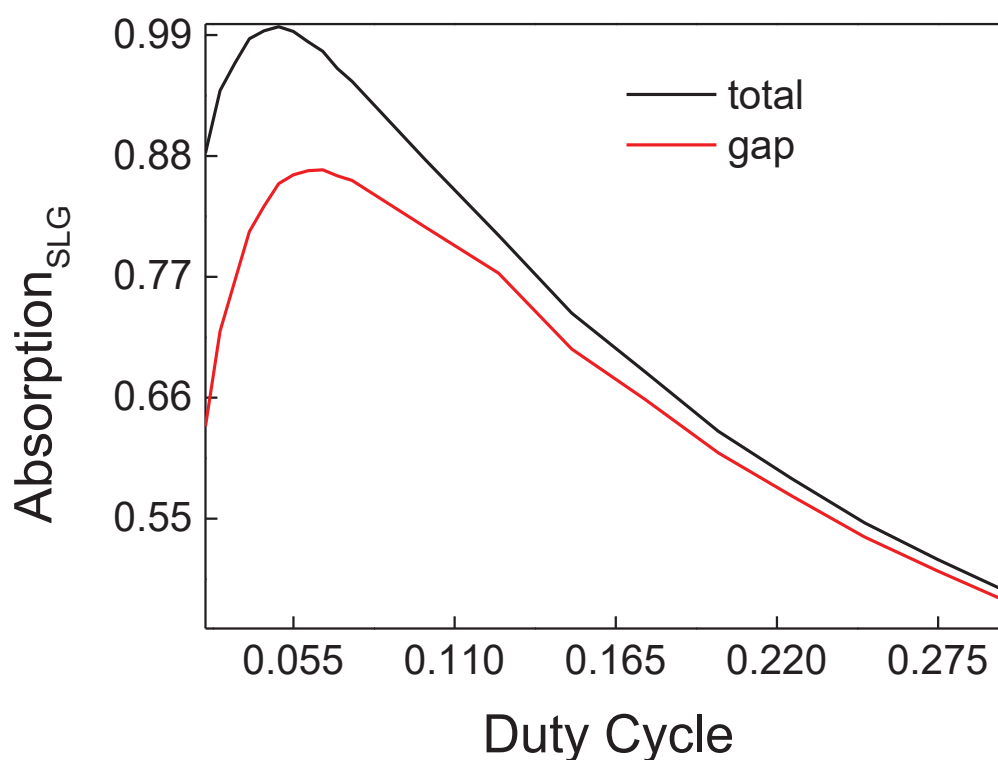
Παρατηρείται στο Σχήμα 56 ότι με την προσθήκη περισσότερων περιόδων Bragg στο σύστημα, έχουμε καλύτερη οπτική απόκριση του συστήματος, καθώς μειώνεται ο συντελεστής διέλευσης και αυξάνεται το ποσοστό της απορρόφησης στο γραφένιο. Επίσης, το φασματικό εύρος της συχνότητας συντονισμού γίνεται πιο στενό και συνεπώς ο συντελεστής ποιότητας αυξάνεται. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα να αυξάνεται ο χρόνος διαφυγής της δέσμης φωτός από την κοιλότητα, επομένως ο ρυθμός διαφυγής από την κοιλότητα να μειώνεται. Αναμένεται να μειωθεί και το duty cycle που σημαίνει μείωση του μήκους (gap) του κεντρικού γραφενίου.

Αφού μελετήθηκε η μεταβολή του ποσοστού απορρόφησης με διαφορετική νόθευση του πυριτίου και συναρτήσκει με την προσθήκη περισσότερων στρωμάτων στο κάτω μέρος του ανακλαστήρα Bragg της διάταξης, επόμενο βήμα της μελέτης ήταν η μείωση του duty cycle. Έτσι, η μελέτη συνεχίστηκε αλλάζοντας τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της διάταξης. Προστέθηκαν πέντε περίοδοι Bragg στο κάτω μέρος της διάταξης και ακόμη μία περίοδος Bragg στο πάνω μέρος. Η ενέργεια Fermi των τμημάτων γραφενίου στις άκρες ορίστηκε $E_F^{sides} = 0.6 eV$, ενώ του κεντρικού $E_F^{center} = 0 eV$. Η τελική μορφή της διάταξης φαίνεται στο παρακάτω Σχήμα 57.



Σχήμα 57 Απεικόνιση ηλεκτρικού πεδίου (αριστερά) και απεικόνιση της διαδιάστατης διάταξης (δεξιά).

Στο παρακάτω διάγραμμα, Σχήμα 58, απεικονίζεται η μεταβολή της μέγιστης απορρόφησης συνολικά όλων των τμημάτων του γραφενίου αλλά και του κεντρικού φύλλου γραφενίου συναρτήσει του duty cycle της διάταξης. Παρατηρείται ότι με την προσθήκη περισσότερων layers, το duty cycle μειώθηκε στο 5%, που σημαίνει ότι περιορίστηκε η χωρική περιοχή του κεντρικού γραφενίου και έτσι μπορεί να ενισχυθεί η απορρόφηση του γραφενίου σε μια πολύ μικρή περιοχή. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι με αυτή την διάταξη το μικρό κομμάτι στο κέντρο απορροφάει όλο το φως που εισέρχεται σε όλη την διάταξη. Αυτό σημαίνει ότι η ένταση ακτινοβολίας που απορροφάται στο κέντρο είναι 20 φορές (για duty cycle 5%) μεγαλύτερη από την εισερχόμενη ένταση. Ουσιαστικά, η διάταξη αυτή λειτουργεί σαν ένας τέλειος φακός που εστιάζει όλο το φως στο μικροσκοπικό κεντρικό κομμάτι όπου και απορροφάται.

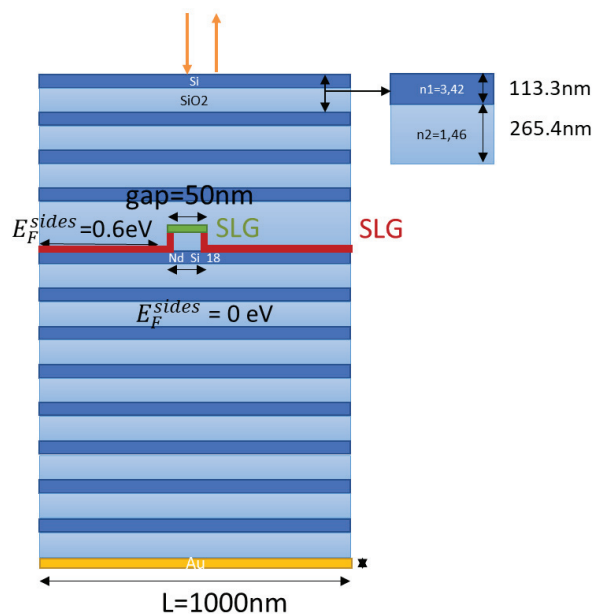


Σχήμα 58 Μεταβολή της μέγιστης απορρόφησης συνολικά των τμημάτων του γραφενίου, όσο και του κεντρικού φύλλου γραφενίου συναρτήσει του duty cycle της διάταξης.

Επόμενο βήμα είναι να απομακρυνθούν τα ακριανά τμήματα του γραφενίου από το κέντρο, όπου είναι ενισχυμένο το πεδίο και απορροφούν παρά την πολύ μικρή τους

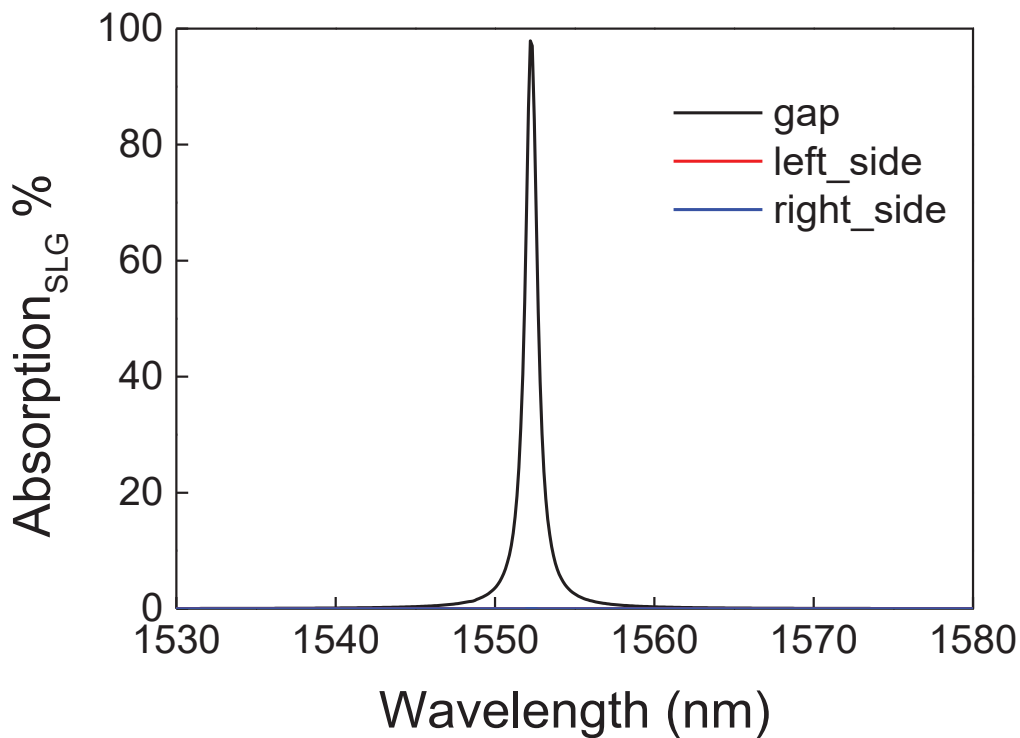
απορροφητικότητα. Έτσι, χωρίστηκε το γραφένιο σε πέντε τμήματα, δημιουργώντας ένα σκαλοπάτι.

Έχοντας επιτύχει τη μείωση του duty_cycle στο 5%, ορίζονται gap = 50 nm και L = 1 μm. Έπειτα, τοποθετήθηκαν τα ακριανά τμήματα 10 nm πάνω από το νοθευμένο πυρίτιο, ώστε να ρυθμίζεται ο εμπλουτισμός τους μέσω της ηλεκτροστατικής πύλης. Η ενέργεια Fermi των τμημάτων γραφενίου της πύλης ορίστηκε $E_F^{sides} = 0.6 eV$, ενώ του κεντρικού $E_F^{center} = 0 eV$. Η διάταξη φαίνεται στο παρακάτω Σχήμα 59.



Σχήμα 59 Απεικόνιση της δισδιάστατης βελτιστοποιημένης διάταξης.

Στο Σχήμα 60 απεικονίζεται το ποσοστό απορρόφησης στα τρία παράλληλα τμήματα του γραφενίου.

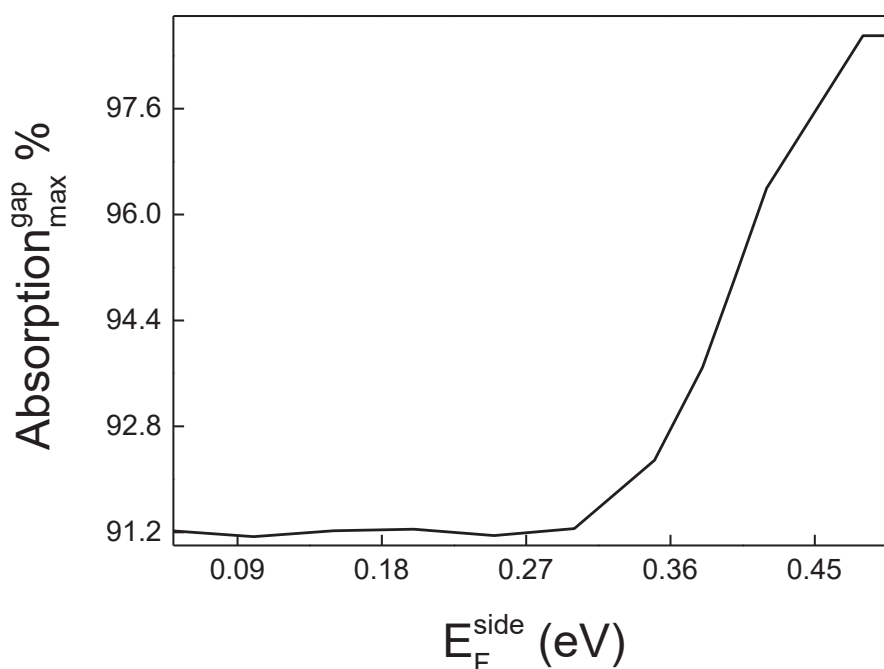


Σχήμα 60 Μεταβολή της απορρόφησης στα τρία παράλληλα τμήματα του γραφενίου, το αριστερό (κόκκινο), το κεντρικό στην κορυφή (μαύρο) και το δεξιό (μπλε) συναρτήσει του μήκους κύματος.

Η απορρόφηση στο κεντρικό τμήμα γραφενίου είναι 98%, ενώ το ποσοστό του καθένα από τα ακριανά τμήματα γραφενίου είναι 0,002%. Γίνεται αντιληπτό στο Σχήμα 60 ότι επιτυγχάνεται σχεδόν 100% απορρόφηση στο κεντρικό μόνο τμήμα του γραφενίου, γεγονός που αποδεικνύει ότι έχουμε πετύχει τον έναν στόχο μας, την ενίσχυση της απορρόφησης σε μία πολύ μικρή περιοχή του γραφενίου, η οποία θα αποτελεί την διεπαφή της pn επαφής, ενώ τα δύο ακριανά αποτελούν τα γραφένια της πύλης που θα εμπλουτίζονται με το νοθευμένο πυρίτιο. Επίσης, συμπεραίνουμε ότι το φως στα 1550 nm αντιλαμβάνεται το εμπλουτισμένο γραφένιο σε υψηλές ενέργειες σαν διάφανο υλικό, ενώ στην αντίθετη περίπτωση σαν ημιδιαπερατό.

Η οριακή οπτική συχνότητα λειτουργίας της διάταξης δίνεται από τον τύπο

$$f_{opt} = \frac{c}{2n_{SiO_2}LQ} \sim 111 \text{ GHz}$$

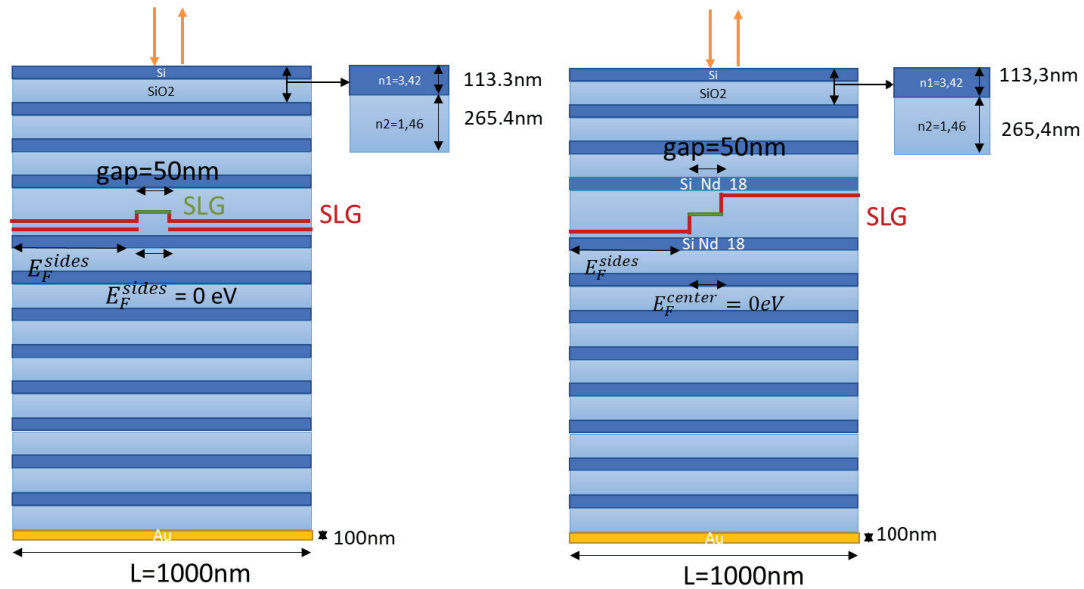


Σχήμα 62 Μεταβολή της μέγιστης απορρόφησης στο κεντρικό τμήμα του γραφενίου συναρτήσει του ενέργειας Fermi στα υπόλοιπα τμήματα του γραφενίου.

Όπως φαίνεται από τα αποτελέσματα στο Σχήμα 62 για μη εμπλουτισμένο κεντρικό γραφένιο και για ενέργεια Fermi $E_F = 0.45 \text{ eV}$ των υπόλοιπων γραφενίων, επιτυγχάνεται μέγιστη απορρόφηση στο κεντρικό γραφένιο σχεδόν 99%. Ωστόσο, από τις θεωρητικές τιμές του θερμοηλεκτρικού συντελεστή Seebeck είναι γνωστό ότι μεγιστοποιείται για ενέργεια Fermi του γραφενίου κοντά στο 0.07 eV. Συνεπώς, παρατηρούμε πως και σε πολύ μικρές ενέργειες, από 0.05 eV και πάνω, επιτεύχθει το επιθυμητό αποτέλεσμα, διότι η απορρόφηση στο κέντρο της διεπαφής του γραφενίου παραμένει υψηλή σε ποσοστό 91%.

Καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι η αρχιτεκτονική της διάταξης πραγματοποιεί εξαιρετική βελτίωση κατά την οπτική διαδικασία της φωτοανίχνευσης, καθώς κατορθώθηκε να ενισχυθεί σε 50 nm στο γραφένιο, απορρόφηση (91%), με περίοδο συστήματος είναι 1000nm. Η τοπική αυτή ενίσχυση της απορρόφησης στο γραφένιο καθιστά την διάταξη ιδανική για μελλοντικές εφαρμογές φωτοανιχνευτών, καθώς αναμένεται να οδηγήσει σε σημαντική αύξηση του φωτορεύματος.

Παρακάτω απεικονίζονται κάποιες προτάσεις διατάξεων για το πως μπορεί να σχεδιαστεί η pn επαφή στο γραφένιο αλλά και οι πύλες για την ρύθμιση του εμπλουτισμού του μέσω εξωτερικής διαφοράς δυναμικού (doping by gating).



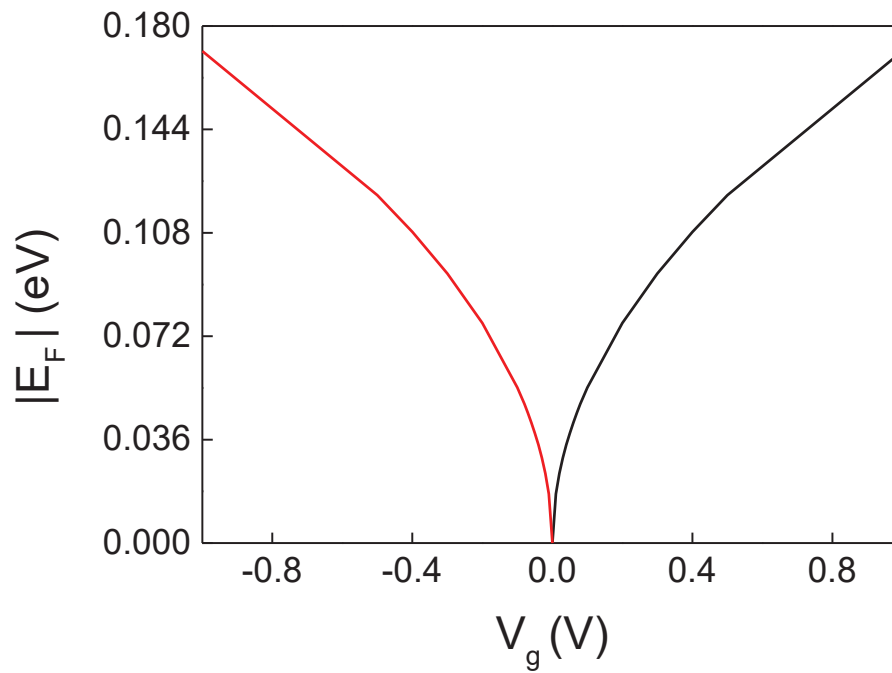
Σχήμα 63 Προτάσεις διατάξεων για την ρύθμιση του εμπλουτισμένου γραφενίου.

Στην πρώτη περίπτωση, η διάταξη αποτελείται από δύο διαχωρισμένες πύλες γραφενίου, οι οποίες διαχωρίζονται με το γραφένιο με διοξείδιο του πυριτίου. Οι πύλες τοποθετούνται πάνω από το πυρίτιο, 10 nm διοξείδιο του πυριτίου με μορφή σκαλοπατιού και στη συνέχεια τοποθετείται το γραφένιο πάνω. Στη δεύτερη περίπτωση, το γραφένιο τοποθετείται 10 nm πάνω και κάτω από το νοθευμένο πυρίτιο. Προφανώς, και στις δύο περιπτώσεις για να σχεδιαστεί pn επαφή, στη μία πλευρά θα έχω θετική και στην άλλη αρνητική τάση. Στο κεντρικό τμήμα, η τελική ενέργεια Fermi θα είναι η διαφορά των δύο τμημάτων.

Το επίπεδο Fermi του γραφενίου μεταβάλλεται με την εφαρμογή της τάσης της πύλης και θεωρητικά μπορεί να υπολογιστεί σύμφωνα με την σχέση,

$$E_F = \hbar v_f \sqrt{\pi \frac{\epsilon_r \epsilon_0 V_g}{d} \frac{V_g}{e}}$$

Παρακάτω, παρουσιάζεται το διάγραμμα για τις παραπάνω περιπτώσεις Σχήμα 64.



Σχήμα 64 Μεταβολή του επιπέδου Fermi μεταβάλλοντας τη διαφορά δυναμικού, όπου $d = 10$ nm.

Ωστόσο, πρέπει να επισημανθεί ότι αυτές οι διατάξεις αποτελούν θεωρητικές υποθέσεις και χρήζουν περαιτέρω έρευνα και ανάλυση για την υλοποίησή τους.

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Οι φωτοανιχνευτές γραφηνίου μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε πολλών ειδών οπτικές εφαρμογές. Η ευελιξία των φωτοανιχνευτών αυτών παρέχει τη δυνατότητα εφαρμογής σε περιοχές υπερταχείας φωτοανίχνευσης, λόγω της υψηλής ευκινησίας των φορέων γραφηνίου και υπερευαίσθητης φωτοανίχνευσης. Ωστόσο, λόγω της χαμηλής οπτικής απορρόφησης του μονοστρωματικού πάχους γραφηνίου, η χαμηλή απόκριση των φωτοανιχνευτών γραφηνίου εμποδίζει την ανάπτυξη πρακτικών διατάξεων. Έτσι, στα πλαίσια της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας σχεδιάστηκε μια φωτοανιχνευτική διάταξη γραφηνίου που βασίζεται στο φωτοθερμοηλεκτρικό φαινόμενο στο εγγύς υπέρυθρο φάσμα ακτινοβολίας στα 1550 nm, η οποία ενισχύει αποτελεσματικά την οπτική απορρόφηση του γραφηνίου στο μέγιστο δυνατό.

Στη μελέτη αυτή επιτεύχθηκε εστίαση του φωτός και ενίσχυση της οπτικής απορρόφησης για την πρόκληση τοπικής θέρμανσης στο κέντρο p-n επαφής γραφηνίου, μέσω του μηχανισμού της κρίσιμης σύζευξης (critical coupling), τοποθετώντας το γραφένιο σε μια οπτική κοιλότητα που δημιουργείται από καθρέφτες Bragg. Επίσης, ερευνήθηκε ο θερμοηλεκτρικός συντελεστής Seebeck στην τιμή που αναμένεται με βάση τη θεωρία, ώστε οι βελτιώσεις των δύο αυτών παραμέτρων να οδηγήσει σε ενισχυτική συνεισφορά και σημαντική αύξηση του φωτοθερμοηλεκτρικού ρεύματος.

Η μοντελοποίηση της διάταξης και η λήψη μετρήσεων έγινε με την βοήθεια της μεθόδου χρονικής εξέλιξης με πεπερασμένες διαφορές (FDTD). Τα στάδια που ακολουθήθηκαν κατά τη μορφοποίηση της διάταξης περιγράφονται σύντομα παρακάτω. Η πρώτη προσέγγιση στη μελέτη ήταν η δημιουργία σκαλοπατιών νοθευμένου πυριτίου στο κάτω μέρος της κοιλότητας όπου παρατηρήθηκαν μη επιθυμητά φαινόμενα περίθλασης και απορρίφθηκε. Στην επόμενη προσέγγιση, χωρίστηκε το φύλλο του γραφηνίου σε τρία τμήματα και μελετηθήκε το ποσοστό απορρόφησης του μεταβάλλοντας την ενέργεια Fermi τους. Παρατηρήθηκε πως για να επιτευχθεί κρίσιμη σύζευξη, χρειάζεται η διάταξη να έχει συνολικά μια συγκεκριμένη απορροφητικότητα. Εάν του κεντρικού γραφηνίου είναι μικρή, θα πρέπει και οι άκρες του γραφηνίου να γίνουν λιγότερο απορροφητικές. Εάν του κεντρικού είναι τέλεια, τότε οι άκρες θα πρέπει να είναι διάφανες. Έπειτα, με την προσθήκη περισσότερων περιόδων Bragg στο σύστημα, αυξήθηκε ο συντελεστής ποιότητας και επομένως και ο ρυθμός διαφυγής από την κοιλότητα αυξήθηκε. Αυτό είχε ως αποτέλεσμα να μειωθεί

το duty cycle και να επιτευχθεί μέγιστη απορρόφηση, σχεδόν 100% σε μια πολύ στενή περιοχή του γραφενίου. Στη συνέχεια, τροποποιήθηκε το γραφένιο σε πέντε τμήματα δημιουργώντας μορφή σκαλοπατιού ώστε να είναι εφικτό να δημιουργηθεί pn επαφή, εμπλουτίζοντας τα τμήματα του γραφενίου στις άκρες, χρησιμοποιώντας τοπικές πύλες. Τέλος, ερευνήθηκε και το επίπεδο Fermi των γραφενίων της πύλης ώστε να διατηρείται τόσο η υψηλή τιμή του θερμοηλεκτρικού συντελεστή Seebeck που θα βελτιώσει σημαντικά και την ηλεκτρική διαδικασία, όσο και το υψηλό ποσοστό απορρόφησης στο κέντρο της pn επαφής που φτάνει περίπου στο 91%.

Η προτεινόμενη αρχιτεκτονική της διάταξης πραγματοποιεί εξαιρετική βελτίωση κατά την οπτική διαδικασία της φωτοανίχνευσης. Τα πλεονεκτήματα αυτά καθιστούν την διάταξη ιδανική για μελλοντικές εφαρμογές φωτοανιχνευτών, καθώς αναμένεται να οδηγήσει σε σημαντική αύξηση του φωτορεύματος. Πρόκληση για περαιτέρω έρευνα αποτελεί η εξαγωγή των ηλεκτρικών χαρακτηριστικών του συγκεκριμένου φωτοανιχνευτή.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Ferrari A. et al. Science and Technology Roadmap for Graphene, Related Two-Dimensional Crystals, and Hybrid Systems. *Nanoscale* **7**, no. 11, 4598–4810 (2015).
- [2] Μήτσου Γ. Σημειώσεις για το Εργαστήριο Οπτοηλεκτρονικής & Laser «ΦΩΤΟΗΛΕΚΤΡΙΚΟ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ – ΦΩΤΟΑΝΙΧΝΕΥΤΕΣ» της ΣΕΥΠ, Αθήνα (2021).
- [3] Novoselov K.S. et al. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science* **306** (2004).
- [4] Novoselov K.S. Nobel lecture: Graphene: Materials in the Flatland. *Reviews of Modern Physics*, Vol.83, No.3, 0034-6861 (2011)
- [5] Wolf E.L. Graphene: A New Paradigm in Condensed Matter and Device Physics. *Oxford University Press* (2014).
- [6] Saito R., Dresselhaus G. and Dresselhaus M. S. Physical properties of carbon nanotubes. *Imperial College Press* (1998).
- [7] Wallace P.R. The band theory of graphite. *Phys. Rev.* **71** (1947).
- [8] Semenoff G. W. Condensed – Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly. *PRL* **53** (1984).
- [9] Li Z.Q. et al. Dirac charge dynamics in graphene by infrared spectroscopy. *Nature Physics* **4**, 532 (2008).
- [10] Torres F., Roche S. and Charlier J.C. Introduction to Graphene-Based Nanomaterials: From Electronic Structure to Quantum Transport. *Cambridge University Press* (2014).
- [11] Castro Neto A. H., Guinea F., Peres N. M. R., Novoselov K. S. and Geim A. K. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109–162 (2009).
- [12] Muench J. E. “Photodetectors for graphene-based integrated photonics”. University of Cambridge (2020).
- [13] Saito K., Nakamura J. and Natori A. Ballistic thermal conductance of a graphene sheet. *Phys. Rev. B* **76**, 115409 (2007)
- [14] Efetov D. K. and Kim P. Controlling electron-phonon interactions in graphene at ultrahigh carrier densities. *Phys. Rev. Lett.* (2010).

- [15] Ashcroft N.W. and Mermin N.D. *Solid State Physics*, Saunders, Philadelphia, 1976.
- [16] Low T. et al. Graphene Plasmonics for Terahertz to Mid-Infrared Applications, *ACS Nano* **8**, 2014
- [17] Gusynin V. P. et al. Magneto-optical properties of graphene, *J. Phys.: Condens. Matter* **19** (2007).
- [18] Hanson G. W. Dyadic Green's function and guided surface waves for a conductivity model of graphene. *Journal of Applied Physics* **103**, (2008).
- [19] Falskovsky L. A. et al. Space-time dispersion of graphene conductivity, *Eur. Phys. J. B* **56**, (2007).
- [20] Hanson G. W. Quasi-transverse electromagnetic modes supported by a graphene parallel-plate waveguide. *Journal of Applied Physics* **104**, (2008).
- [21] Luo X. et al. *Plasmons in graphene: Recent progress and applications*, Materials Science and engineering. (2013).
- [22] Boggild, P. et al. *Mapping the electrical properties of large-area graphene*. *2D Mater.* **4**, 042003 (2017).
- [23] Sensale-Rodriguez B., Yan R., Liu L., Jena D. and Xing H. G. Graphene for Reconfigurable Terahertz Optoelectronics. *Proc. IEEE* **101**, 1705–1716 (2013).
- [24] Koppens F. H. L., Mueller T, Avouris Ph., Ferrari A. C., Vitiello M. S. and Polini M. Photodetectors based on graphene, other two-dimensional materials and hybrid systems, *Nat. Nanotechnol.* **9**, 780-793 (2014)
- [25] Furchi M., Urich A., Pospichil A., Lilley G., Unterrainer K., Detz H., Klanq P., Andrews A.M., Schrenk W., Strasser G. and Mueller T., Microcavity-integrated graphene photodetector, *Nano Lett.*, **12(6)**, 2773-7 (2012).
- [26] Bonaccorso F., Sun Z., Hasan T. and Ferrari A. C. Graphene photonics and optoelectronics. *Nature Photonics*, **4**, 611 (2010)
- [27] Song, J. C.W., Rudner M. S., Marcus C. M. and Levitov L. S. Hot carrier transport and photocurrent response in graphene. *Nano Lett.* **11**, 4688–4692 (2011).
- [28] Castilla S., Vangelidis I. et al. Plasmonic antenna coupling to hyperbolic phonon-polaritons for sensitive and fast mid-infrared photodetection with graphene. *Nat Commun*, vol. 11, no. 1, p. 4872 (2020).
- [29] Johnson M. *Photodetection and measurement: maximizing performance in optical systems*. Mc Graw Hill, United States of America 2003

- [30] Moshonas N. “Application of the transmission line method for the study of highly nonlinear multilayer optical structures” *Opt. Engineering* **53**, (2014).
- [31] Ε. Λοιδωρίκης, *Σημειώσεις για το μάθημα Φωτονικά Υλικά*, 2011.
- [32] Piper J. R. and Fan S. Total Absorption in a Graphene Monolayer in the Optical Regime by Critical Coupling with a Photonic Crystal Guided Resonance. *ACS Photonics* **1**, 347 (2014).
- [33] Piper J. R., Liu V. and Fan S. Total absorption by degenerate critical coupling. *Appl. Phys. Lett.* **104**, 251110 (2014).
- [34] Doukas S., Chatzilari A., Dagkli A., Papagiannopoulos A. and Lidorikis E. Deep and Fast Free-Space Electro-Absorption Modulation in a Mobility-Independent Graphene-Loaded Bragg Resonator. *Ap. Phys. Letters* **113**, no. 1, 011102 (2018).
- [35] Taflove A. and Haggnes S. *Computational Electrodynamics The Finite-Difference Time-Domain Method*. (2000).
- [36] Gedney S. *Introduction to the Finite-difference Time-domain (FDTD) Method for Electromagnetics*. Synthesis Lectures on Computational Electromagnetics. (2011).
- [37] Bérenger J. P. A. Perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *Journal of Computational Physics*, **114** (1994).
- [38] CHUNG D. D. L. Review Graphite. *Journal of Materials Science*, **37**, 1475 – 1489. (2002).
- [39] Geim K., Novoselov K.S. The rise of graphene. *Nat. Mat.* **6**, 183 (2007).
- [40] Jorio A., Dresselhaus M., Saito R. and Dresselhaus G., *Raman Spectroscopy in Graphene and Related Systems*, WILEY-VCH.
- [41] Finite Difference Time Domain (FDTD) solver introduction. Ανακτήθηκε από <https://support.lumerical.com/hc/en-us/articles/360034914633-Finite-Difference-Time-Domain-FDTD-solver-introduction>. (2021).
- [42] Ando T. et al. Presence of Perfectly Conducting Channel in Metallic Carbon Nanotubes. *J. Phys.Soc. Jpn* **71** (2002).
- [43] Gusynin V. P. et al. Unusual Microwave Response of Dirac Quasiparticles in Graphene *Phys. Rev. Lett.* **96** (2006).
- [44] Falkovsky L. A. and Pershoguba S. Optical far-infrared properties of a graphene monolayer and multilayer. *Phys. Rev. B* **76** (2007).
- [45] Kuzmenko A. B. et al. Universal dynamical conductance in graphite. *Phys. Rev. Lett.* (2008) (see arXiv: 0712.0835).

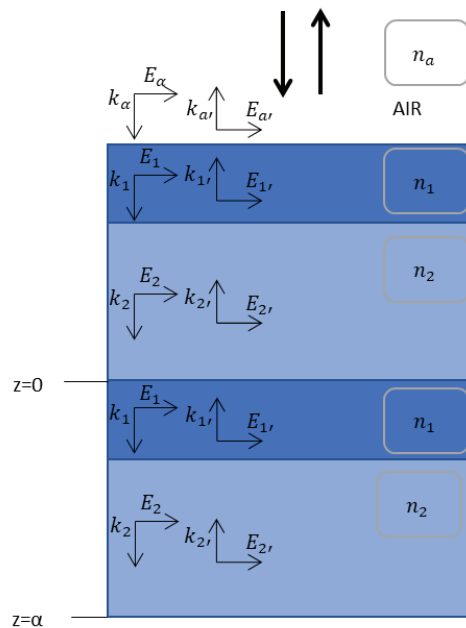
- [46] Kravets V.G. et al. Spectroscopic ellipsometry of graphene and an exciton-shifted van Hove peak in absorption. *Phys.Rev. B* **81**, 155413 (2010).
- [47] Wikipedia, ελεύθερη εγκυκλοπαίδεια. *Photodetector*. Ανακτήθηκε από: <https://en.wikipedia.org/wiki/Photodetector>. Τελευταία ενημέρωση 24 Φεβρουαρίου 2021. [Πρόσβαση στις 20/3/2021].
- [48] APTECHNOLOGIES. Ανακτήθηκε από: <https://www.aptechnologies.co.uk/support/SiPDs/operation>. [Πρόσβαση στις 20/3/2021].
- [49] Urich A., Unterrainer K. and T. Mueller. *Nano Lett.* **11**, 2804–2808. (2011).
- [50] Wang, Di et al. Enhancing the graphene photocurrent using surface plasmons and a p-n junction. *Light: Science & Applications* **9(1)** (December 2020): 126.
- [51] Basko, D. A Photothermoelectric Effect in Graphene. *Science*, vol. 334, no. 6056, 610–611. (2011).
- [52] Xu X., Gabor N. M, Alden J. S., Zande A. M. and McEuen P. L. Photo-Thermoelectric Effect at a Graphene Interface Junction. *Nano Lett.*, **10(2)**, 562–566. (2010).
- [53] Cai X. et al. Sensitive room-temperature terahertz detection via the photothermoelectric effect in graphene. *Nature Nanotech*, **9(10)**, 814–819. (2014).

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

I. ΜΕΘΟΔΟΣ ΠΙΝΑΚΩΝ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ (Transfer Matrix Method)

Όταν ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία εισέλθει σε μία πολυστρωματική διάταξη θα υποστεί πολλαπλές ανακλάσεις και διαθλάσεις από τις διάφορες διεπιφάνειες των υλικών. Η μέθοδος Πινάκων Μεταφοράς (Transfer Matrix Method) [37] είναι μία τεχνική μέσω της οποίας υπολογίζονται αναλυτικά οι συντελεστές ανάκλασης R και διέλευσης T εφαρμόζοντας τις συνθήκες συνέχειας σε κάθε διαχωριστική επιφάνεια. Παρακάτω παρατίθεται ο τρόπος εφαρμογής και επίλυσης της μεθόδου στη συγκεκριμένη διπλωματική εργασία.

Θα εξεταστεί η περίπτωση, κάθετης πρόσπτωσης στην επιφάνεια μιας περιοδικής διάταξης πάχους d_2 και δείκτη διάθλασης n_2 τοποθετημένο σε διηλεκτρικό υλικό πάχους d_1 με δείκτη n_1 . Η περίοδος του συστήματος είναι $a = d_1 + d_2$ (Σχήμα 66).



Σχήμα 65 Απεικόνιση της κάθετης διάδοσης επίπεδων κυμάτων σε περιοδική διάταξη με εναλλαγή δύο διηλεκτρικών στρωμάτων με περίοδο $a = d_1 + d_2$.

Η οπτική διέγερση της διάταξης γίνεται με κάθετη πρόσπτωση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας, εισερχόμενη από τον αέρα στο διηλεκτρικό. Δε λαμβάνονται υπόψη ακτίνες που προσπίπτουν ή σκεδάζονται σε άλλες γωνίες πέρα από την κάθετη. Η θεώρηση αυτή είναι μια πολύ καλή προσέγγιση για να λυθεί το πρόβλημα στη μία διάσταση, στην οποία ισχύουν οι νόμοι του Fresnel καθώς η πρόσπτωση και η ανάκλαση γίνονται στην κατακόρυφη διεύθυνση. Για την εύκολη επίλυσή τους ορίζουμε

- τον πίνακα διεπιφάνειας (Interface Matrix), I_{n_2, n_1} , που συνδέει τα οδεύοντα κύματα από την εξέρχουσα πλευρά της διεπιφάνειας (n_2) με τα οδεύοντα κύματα στην εισερχόμενη πλευρά της διεπιφάνειας (n_1)
- τον πίνακα διάδοσης (Propagation Matrix), $P_{n, d}$, που περιγράφει την μεταβολή των πλατών των οδεύοντων κυμάτων κατά την μεταφορά του κατά μήκος d μέσα σε υλικό με δείκτη διάθλασης n .

Οι παραπάνω πίνακες βρίσκονται εφαρμόζοντας τις εξισώσεις συνέχειας στο συνολικό πεδίο της κάθε πλευράς και υποθέτοντας διάδοση σε ομοιογενή και ισότροπα μέσα. Οι πίνακες διεπιφάνειας στην κάθετη πρόσπτωση στις δύο διεπιφάνειες του Σχήμα 66 ορίζονται ως εξής

$$I_{n_2, n_1} = \frac{1}{2n_2} \begin{pmatrix} n_2 + n_1 & n_2 - n_1 \\ n_2 - n_1 & n_2 + n_1 \end{pmatrix} \quad (31)$$

$$I_{n_1, n_2} = \frac{1}{2n_1} \begin{pmatrix} n_1 + n_2 & n_1 - n_2 \\ n_2 - n_1 & n_1 + n_2 \end{pmatrix} \quad (32)$$

όπου οι δείκτες διάθλασης των υλικών είναι γνωστοί.

Οι πίνακες διάδοσης ορίζονται ως

$$P_{n_1, d_1} = \begin{pmatrix} e^{ik_1 d_1} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 d_1} \end{pmatrix} \quad (33)$$

$$P_{n_2, d_2} = \begin{pmatrix} e^{ik_2 d_2} & 0 \\ 0 & e^{-ik_2 d_2} \end{pmatrix} \quad (34)$$

όπου $k_1 = \frac{n_1\omega}{c}$ και $k_2 = \frac{n_2\omega}{c}$.

Ο Πίνακας Μετάβασης (Transfer Matrix), M , αποτελεί απλώς τον αλγεβρικό πολλαπλασιασμό των πινάκων διεπιφάνειας και διάδοσης για τη δεδομένη διάταξη. Έτσι, κατά μήκος μιας περιόδου για τη μεταβολή των πεδίων ισχύει

$$E^{\alpha+} = P_{n_1,d_1} I_{n_2,n_1} P_{n_2,d_2} I_{n_1,n_2} E^{0-} = M E^{0-} \quad (35)$$

όπου E^{0-} και $E^{\alpha+}$, τα αρχικά και τελικά πεδία αντιστοίχως. Ο $E^{\alpha+}$ είναι ο πίνακας των πεδίων αμέσως μετά την επιφάνεια στο $z=a$ και E^{0-} ο πίνακας των πεδίων αμέσως πριν την επιφάνεια στο $z=0$.

Ο πίνακας μετάβασης M υπολογίζεται από το γινόμενο των πινάκων

$$M = \frac{1}{2n_2} \begin{pmatrix} n_2 + n_1 & n_2 - n_1 \\ n_2 - n_1 & n_2 + n_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_1 d_1} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 d_1} \end{pmatrix} \frac{1}{2n_1} \begin{pmatrix} n_1 + n_2 & n_1 - n_2 \\ n_2 - n_1 & n_1 + n_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_2 d_2} & 0 \\ 0 & e^{-ik_2 d_2} \end{pmatrix} \Rightarrow$$

ή

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \quad (36)$$

όπου το στοιχείο M_{11} , είναι το συζυγές του M_{22}^* , δηλαδή ισχύει $M_{11} = M_{22}^*$. Ομοίως, και με τα στοιχεία $M_{21} = M_{12}^*$.

Τα αποτελέσματα των στοιχείων του πίνακα M μετά από αλγεβρικές πράξεις προκύπτουν ότι είναι

$$M_{11} = e^{ik_2 d_2} (\cos k_1 d_1 + \frac{i}{2} \left(\frac{n_1}{n_2} + \frac{n_2}{n_1} \right) \sin k_1 d_1)$$

$$M_{22} = M_{11}^* = e^{-ik_2 d_2} (\cos k_1 d_1 - \frac{i}{2} \left(\frac{n_1}{n_2} + \frac{n_2}{n_1} \right) \sin k_1 d_1)$$

$$M_{21} = e^{-ik_2 d_2} \frac{i}{2} \left(\frac{n_1}{n_2} - \frac{n_2}{n_1} \right) \sin k_1 d_1$$

$$M_{21} = M_{12}^* = e^{ik_2 d_2} \left(-\frac{i}{2} \right) \left(\frac{n_1}{n_2} - \frac{n_2}{n_1} \right) \sin k_1 d_1$$

Οι λύσεις της εξ. (35) εξάγονται από το θεώρημα Bloch-Floquet [36] ως εξής

$$E_q(z) = e^{iqz} \varepsilon(z) \quad (37)$$

όπου η συνάρτηση $\varepsilon(z)$ είναι περιοδική και q το κυματοδιάνυσμα που περιγράφει τις χωρικές ιδιότητες της λύσης. Αν μετατοπίσουμε το σύστημα κατά μια περίοδο α , έχουμε μία επιπλέον φάση στη λύση

$$E_q(z + \alpha) = e^{iq\alpha} E_q(z) \quad (38)$$

Έτσι, μπορούμε να γράψουμε ότι

$$E^{0-} \mathbf{M} = e^{iq\alpha} E^{\alpha+} \quad (39)$$

Από τη διαγωνοποίηση του πίνακα, παίρνουμε

$$\det|M - \beta I| = 0 \Rightarrow \beta_{\pm} = \frac{M_{11} + M_{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{(M_{11} + M_{22})^2}{4} - 1} \quad (40)$$

όπου $\beta_{\pm} = e^{\pm iq\alpha}$ οι ιδιοτιμές.

Προσθέτοντας τις δύο ιδιοτιμές, παίρνουμε την καταστατική εξίσωση που περιγράφει την φωτονική δομή ζώνης του περιοδικού μας συστήματος

$$\begin{aligned} \beta_+ + \beta_- &= e^{iq\alpha} + e^{-iq\alpha} = 2 \cos(qa) = M_{11} + M_{22} \Rightarrow \cos(qa) = \frac{(M_{11} + M_{22})}{2} \Rightarrow \\ \cos(qa) &= \cos(k_1 d_1) \cos(k_2 d_2) - \frac{1}{2} \left(\frac{n_1}{n_2} + \frac{n_2}{n_1} \right) \sin(k_1 d_1) \sin(k_2 d_2) \end{aligned} \quad (41)$$

όπου k και q κυματοδιανύσματα με μονάδες αντίστροφου μήκους και με την διαφορά ότι το k περιγράφει την μεταβολή φάσης ενός επίπεδου κύματος σε κάθε σημείο του

χώρου, ενώ το q περιγράφει την μεταβολή της φάσης μιας κυματομορφής σε μια περίοδο.

Στην συγκεκριμένη εργασία ισχύει $n_1 > n_2 < n_1$ με τις οπτικές τους πυκνότητες να είναι ίσες

$$k_1 d_1 = k_2 d_2$$

και ίσες με $\lambda/4$ που ικανοποιεί την συνθήκη μέγιστης ανάκλασης, η (41) γράφεται

$$\cos(qa) = \cos^2(k_1 d_1) - \frac{1}{2} \left(\frac{n_1}{n_2} + \frac{n_2}{n_1} \right) \sin^2(k_1 d_1) \quad (42)$$

Μια τέτοια διάταξη ονομάζεται διάταξη ενός τετάρτου κύματος (quarter wave).

Στις περιπτώσεις όπου το q είναι μιγαδικός, δεν υπάρχει διάδοση κυμάτων και η λύση είναι κύματα που αποσβένουν εκθετικά στον χώρο. Σ' αυτήν την περίπτωση υπάρχει ένα χάσμα στην σχέση μεταξύ q και ω , το οποίο αποτελεί το φωτονικό χάσμα ζώνης.

Τέλος, μπορούμε τώρα εύκολα να υπολογίσουμε τους συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης του Σχήματος 63. Εφόσον οι συντελεστές αυτοί μετράνε το ποσοστό της ανάκλασης και διέλευσης της ενέργειας πρέπει να πάρουμε το ανάλογο πηλίκο των μέτρων των διανυσμάτων Poynting, το οποίο είναι ανάλογο του $n|E|^2$. Γίνεται η υπόθεση ότι το κύμα εισέρχεται μόνο από τον αέρα, άρα $E_{2'} = 0$. Έτσι από την εξίσωση (35) προκύπτει

$$E_2 = M_{11}E_a + M_{12}E_{a'} \quad (43)$$

$$0 = M_{21}E_a + M_{22}E_{a'} \quad (44)$$

και οι συντελεστές ανάκλασης R (reflection) και διέλευσης T (transmission) ορίζονται ως

$$R = \left| \frac{M_{21}}{M_{22}} \right|^2 \quad (45)$$

$$T = \left(\frac{n_{\alpha\rho\chi\iota\kappa\acute{o}}}{n_{\tau\epsilon\lambda\iota\kappa\acute{o}}} \right) \left| \frac{1}{M_{22}} \right|^2$$

Στη συγκεκριμένη περίπτωση, λόγω της περιοδικής διάταξης, ο αρχικός δείκτης διάθλασης του συστήματος είναι ίδιος με τον τελικό δείκτη διάθλασης κι έτσι ο συντελεστής ανάκλασης και η διέλευσης γράφονται

$$R = \left| \frac{M_{21}}{M_{22}} \right|^2 \quad (46)$$

$$T = \frac{1}{|M_{22}|^2} \quad (47)$$

Για κάθετη πρόσπτωση και για μη απορροφητικά υλικά ισχύει $R + T = 1$ που εκφράζει την αρχή διατήρησης της ενέργειας. Είναι εμφανές ότι παρά του ότι η παραπάνω μαθηματική διεργασία περιγράφηκε για το απλό σύστημα του Σχήματος 63, μπορεί να εφαρμοστεί με ανάλογο τρόπο και για αυθαίρετη πολυστρωματική διάταξη αποτελούμενη από αυθαίρετα διαφορετικά υλικά. Συνεπώς, η μεθοδολογία είναι γενική και εφαρμόσιμη για οποιαδήποτε πολυστρωματική αρχιτεκτονική υμενίων.

II. ΜΕΘΟΔΟΣ ΧΡΟΝΙΚΗΣ ΕΞΕΛΙΞΗΣ ΜΕ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΕΣ ΔΙΑΦΟΡΕΣ – FDTD

Η FDTD μέθοδος είναι ένα από τα ισχυρότερα εργαλεία της υπολογιστικής ηλεκτροδυναμικής. Ως μία μέθοδος χρονικής εξέλιξης, έχει τη δυνατότητα να εξετάσει για μεγάλο εύρος συχνοτήτων μία διάταξη μόνο με μία προσομοίωση. Επιπρόσθετα, μπορεί να μοντελοποιήσει όλα τα υλικά χρησιμοποιώντας την διηλεκτρική τους συνάρτηση και σε οποιαδήποτε γεωμετρία σχημάτων τριών διαστάσεων.

Το 1966, ο Kane Yee πρότεινε έναν αλγόριθμο, ο οποίος επιλύει τις συζευγμένες εξισώσεις του Maxwell με τη χρήση των πεπερασμένων διαφορών [38]. Η επιτυχή επίλυση των διαφορικών εξισώσεων μέσω της παραπάνω μεθόδου, καθώς και η σταθερότητα της μεθόδου, οφείλονται στον έξυπνο τρόπο που πρότεινε ο Yee για την διακριτοποίηση του χώρου και του χρόνου [39, 40].

Κάθε σημείο του χώρου αναπαρίσταται ως ένα grid στο οποίο οι συνιστώσες του ηλεκτρικού, E , και του μαγνητικού πεδίου, H , τοποθετούνται όπως φαίνεται στο Σχήμα 67. Λόγω της τοποθέτησης των συνιστωσών των πεδίων κατά αυτόν τον τρόπο έχει τα εξής πλεονεκτήματα

1. Οι νόμοι Gauss για τα πεδία E και H ικανοποιούνται αυτόματα καθώς

$$\frac{\partial}{\partial t} \oiint_{YeeCell} \vec{D} \cdot d\hat{S} = 0 \quad (48)$$

και

$$\frac{\partial}{\partial t} \oiint_{YeeCell} \vec{B} \cdot d\hat{S} = 0 \quad (49)$$

2. Επίσης, λόγω της τοποθεσίας των συνιστωσών ικανοποιούνται αυτόματα οι συζευγμένες εξισώσεις Maxwell (απουσία εξωτερικών ρευμάτων και φορτίων)

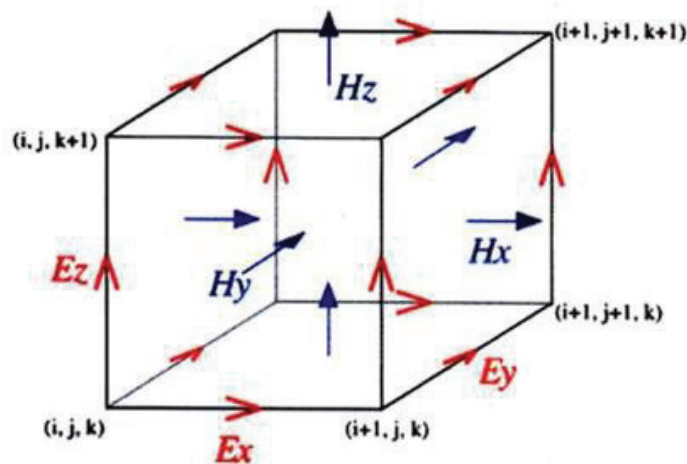
$$\oint_C d\vec{r} \cdot \vec{E} = -\frac{d}{dt} \int d\vec{S} \cdot \vec{B} \quad (50)$$

(51)

$$\oint_C d\vec{r} \cdot \vec{H} = \int d\vec{S} \cdot \vec{J}_{ext} + \frac{d}{dt} \int d\vec{S} \cdot \vec{E}$$

Αυτές οι διαφορικές εξισώσεις μπορούν πλέον να επιλυθούν χρησιμοποιώντας πεπερασμένες κεντρικές διαφορές.

3. Η ικανοποίηση των εξισώσεων Maxwell στην ολοκληρωτική τους μορφή δίνει τη δυνατότητα στην μέθοδο FDTD να εξομοιώνει ενδογενώς τις συνοριακές συνθήκες στη διεπιφάνεια δύο υλικών.



Σχήμα 66 Απεικόνιση ενός 3D κελιού Yee με την κατανομή των συνιστωσών του ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου.

Οι συζευγμένες εξισώσεις Maxwell μπορούν να γραφούν στην διαφορική τους μορφή ως

$$\nabla \times \vec{E} = -\mu \partial_t \vec{H} \quad (52)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \epsilon_0 \epsilon_\infty \partial_t \vec{E} + \partial_t \vec{P}_0 + \sum_{j_N=1}^N \partial_t \vec{P}_{j_N} \quad (53)$$

όπου η πόλωση του κάθε υλικού λαμβάνεται υπόψη μέσω της πόλωσης των ελεύθερων ηλεκτρονίων P_0 , σύμφωνα με το μοντέλο του Drude και μέσω του αθροίσματος των N πολώσεων \vec{P}_{jN} των δέσμιων ηλεκτρονίων, σύμφωνα με το μοντέλο του Lorentz.

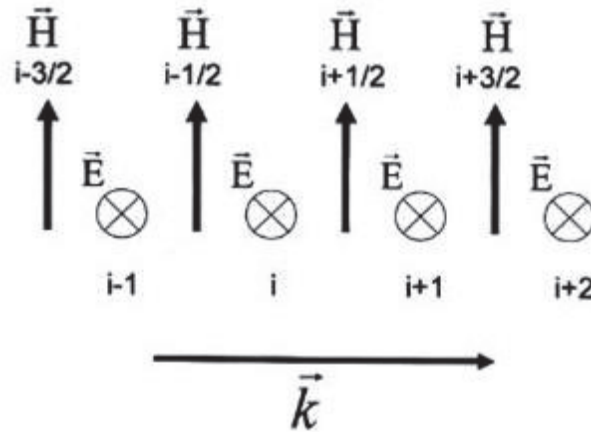
Κάθε μία από αυτές τις δύο συνεισφορές περιγράφεται με μία διαφορική εξίσωση αντίστοιχα

$$\partial_t^2 \vec{P}_0 + \gamma \partial_t \vec{P}_0 = \omega_p^2 \epsilon_0 \vec{E} \quad (54)$$

$$\partial_t^2 \vec{P}_{jN} + \Gamma_{jN} \partial_t \vec{P}_{jN} = \Delta \epsilon_{jN} \Omega_{jN}^2 \epsilon_0 \vec{E} \quad (55)$$

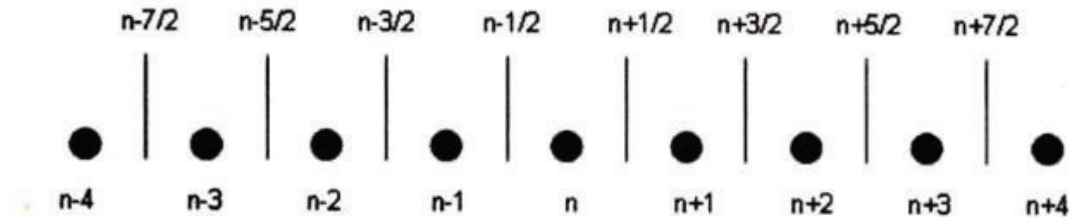
Οι (54) και (55) αποτελούν μοντέλο Drude-Lorentz μέσω του οποίου μπορούμε να εισάγουμε στην μέθοδο την απόκριση ενός υλικού στην Η/Μ ακτινοβολία.

Για να κατανοήσουμε την μέθοδο FDTD θα εξετάσουμε πρώτα την απλή περίπτωση ενός μονοδιάστατου συστήματος. Στο Σχήμα 68 φαίνονται οι συνιστώσες των πεδίων τοποθετημένες στον χώρο.



Σχήμα 67 Διακριτοποίηση των πεδίων στον χώρο σε ένα μονοδιάστατο πλέγμα Yee. Στα σημεία $\dots, i-1, i, i+1, \dots$ τοποθετείται το ηλεκτρικό πεδίο και στα σημεία $\dots, i-1/2, i+1/2, \dots$ τοποθετείται το μαγνητικό πεδίο.

Με τον ίδιο τρόπο γίνεται και η διακριτοποίηση του χρόνου όπως φαίνεται στο Σχήμα 69.



Σχήμα 68 Διακριτοποίηση των πεδίων στον χρόνο σε ένα μονοδιάστατο πλέγμα Υεε.

Υποθέτουμε ότι η πόλωση του ηλεκτρικού πεδίου κατά την διεύθυνση z και του μαγνητικού πεδίου κατά την διεύθυνση y, έτσι ώστε η κύμανση να προς την διεύθυνση x. Λαμβάνοντας τα παραπάνω υπόψιν οι (54) και (55) γίνονται

$$(\nabla \times E)_y = -\mu \frac{\partial H_y}{\partial t} \Rightarrow \frac{\partial E_z}{\partial x} = -\mu \frac{\partial H_y}{\partial t} \quad (56)$$

και

$$(\nabla \times H)_z = \varepsilon_0 \varepsilon_\infty \frac{\partial E_z}{\partial t} + \sum_{j_N}^N \frac{\partial P_{j_N}}{\partial t} + \frac{\partial P_0}{\partial t} \Rightarrow$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} = \varepsilon_0 \varepsilon_\infty \frac{\partial E_z}{\partial t} + \sum_{j_N}^N \frac{\partial P_{j_N}}{\partial t} + \frac{\partial P_0}{\partial t} \quad (57)$$

Γνωρίζοντας το ηλεκτρικό και το μαγνητικό πεδίο σε κάθε σημείο του χώρου και του χρόνου, συγχρόνως γνωρίζουμε και την πόλωση μέσω της (54). Υπολογίζουμε την πόλωση την χρονική στιγμή n+1 χρησιμοποιώντας κεντρικές διαφορές

$$\frac{P_i^{n+1} - 2P_i^n + P_i^{n-1}}{\Delta t^2} + \gamma \frac{P_i^{n+1} - P_i^{n-1}}{\Delta t} + \omega_p^2 P_i^n = \omega_p^2 \varepsilon_0 E_i^n \Rightarrow$$

$$P_i^{n+1} = \frac{4P_i^n - 2P_i^{n-1} + \Delta t \gamma P_i^{n-1} + 2\Delta t^2 (\varepsilon_0 \omega_p^2 E_i^n - \omega_0^2 P_i^n)}{2 + \gamma \Delta t} \quad (58)$$

Ακολουθούμε την ίδια ακριβώς διαδικασία για τις υπόλοιπες N πολώσεις της (42) του μοντέλου Lorentz. Στην συνέχεια βρίσκουμε το ηλεκτρικό πεδίο την χρονική στιγμή $n+1$ μέσω της (57)

$$E_i^{n+1} = E_i^n - \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_\infty} \sum_{jN=0}^N (P_{ijN}^{n+1} - P_{ijN}^n) - \frac{\Delta t}{\Delta x} \varepsilon_0 \varepsilon_\infty (H_{i+1/2}^{n+1/2} - H_{i-1/2}^{n+1/2}) \quad (59)$$

και με τον ίδιο τρόπο το μαγνητικό πεδίο την χρονική στιγμή $n+3/2$ μέσω της (58)

$$H_{i+1/2}^{n+3/2} = H_{i+1/2}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{\mu \Delta x} (E_{i+1}^{n+1/2} - E_i^{n+1/2}) \quad (60)$$

Ο αλγόριθμος προχωράει με αυτόν τρόπο στον χρόνο, βρίσκοντας το ηλεκτρικό πεδίο από το μαγνητικό και το μαγνητικό από το ηλεκτρικό (leap-frog). Για τον λόγο αυτό οι (58-60) ονομάζονται και εξισώσεις ανανέωσης.

Στην περίπτωση ενός τρισδιάστατου συστήματος οι εξισώσεις γίνονται

$$P_{x,y,z}|_{i,j,k}^{n+1} = \frac{4P_{x,y,z}|_{i,j,k}^n + 2P_{x,y,z}|_{i,j,k}^{n-1} + \Delta t \gamma P_{x,y,z}|_{i,j,k}^{n-1} + 2\Delta t^2 (\varepsilon_0 \omega \beta^2 E_{x,y,z}|_i^n - \omega_0^2 P_{x,y,z}|_{i,j,k}^n)}{2 + \gamma \Delta t} \quad (61)$$

για την πόλωση, ενώ οι συνιστώσες του ηλεκτρικού πεδίου γράφονται

$$\begin{aligned} \vec{E}_x|_{i,j,k}^{n+1} = & \vec{E}_x|_{i,j,k}^n - \frac{1}{\varepsilon_\infty \varepsilon_{i,j,k}} \sum_{j=0}^N (\vec{P}_{jx}|_{i,j,k}^{n+1} - \vec{P}_{jx}|_{i,j,k}^{n-1}) \\ & - \frac{\Delta t}{\varepsilon_\infty \varepsilon_{i,j,k}} \left(\frac{\vec{H}_z|_{i,j+1/2,k}^{n+1/2} - \vec{H}_z|_{i,j-1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta y} - \frac{\vec{H}_y|_{i,j,k+1/2}^{n+1/2} - \vec{H}_y|_{i,j,k-1/2}^{n+1/2}}{\Delta z} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \vec{E}_y|_{i,j,k}^{n+1} = & \vec{E}_y|_{i,j,k}^n - \frac{1}{\varepsilon_\infty \varepsilon_{i,j,k}} \sum_{j=0}^N (\vec{P}_{jy}|_{i,j,k}^{n+1} - \vec{P}_{jy}|_{i,j,k}^{n-1}) \\ & - \frac{\Delta t}{\varepsilon_\infty \varepsilon_{i,j,k}} \left(\frac{\vec{H}_x|_{i,j,k+1/2}^{n+1/2} - \vec{H}_x|_{i,j,k-1/2}^{n+1/2}}{\Delta z} - \frac{\vec{H}_z|_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} - \vec{H}_z|_{i-1/2,j,k}^{n+1/2}}{\Delta x} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \vec{E}_z|_{i,j,k}^{n+1} &= \vec{E}_z|_{i,j,k}^n - \frac{1}{\varepsilon_\infty \varepsilon_{i,j,k}} \sum_{j=0}^N (\vec{P}_{jz}|_{i,j,k}^{n+1} - \vec{P}_{jz}|_{i,j,k}^{n-1}) - \\ &\frac{\Delta t}{\varepsilon_\infty \varepsilon_{i,j,k}} \left(\frac{\vec{H}_y|_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} - \vec{H}_y|_{i-1/2,j,k}^{n+1/2}}{\Delta x} - \frac{\vec{H}_x|_{i,j+1/2,k}^{n+1/2} - \vec{H}_x|_{i,j-1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta y} \right) \end{aligned} \quad (62)$$

Αντίστοιχα για το μαγνητικό πεδίο

$$\begin{aligned} \vec{H}_x|_{i,j,k}^{n+3/2} &= \vec{H}_x|_{i,j,k}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{\mu_{i,j,k}} \left(\frac{\vec{E}_y|_{i,j,k+1/2}^{n+1} - \vec{E}_y|_{i,j,k-1/2}^{n+1}}{\Delta z} - \frac{\vec{E}_z|_{i,j+1/2,k}^{n+1} - \vec{E}_z|_{i,j-1/2,k}^{n+1}}{\Delta y} \right) \\ \vec{H}_y|_{i,j,k}^{n+3/2} &= \vec{H}_y|_{i,j,k}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{\mu_{i,j,k}} \left(\frac{\vec{E}_z|_{i+1/2,j,k}^{n+1} - \vec{E}_z|_{i-1/2,j,k}^{n+1}}{\Delta x} - \frac{\vec{E}_x|_{i,j,k+1/2}^{n+1} - \vec{E}_x|_{i,j,k-1/2}^{n+1}}{\Delta z} \right) \\ \vec{H}_z|_{i,j,k}^{n+3/2} &= \vec{H}_z|_{i,j,k}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{\mu_{i,j,k}} \left(\frac{\vec{E}_x|_{i,j+1/2,k}^{n+1} - \vec{E}_x|_{i,j-1/2,k}^{n+1}}{\Delta y} - \frac{\vec{E}_y|_{i+1/2,j,k}^{n+1} - \vec{E}_y|_{i-1/2,j,k}^{n+1}}{\Delta x} \right) \end{aligned} \quad (63)$$

Αφού υπολογίσαμε τα παραπάνω στο πεδίο του χρόνου μέχρι το σύστημα μας να φτάσει σε μια σταθερή κατάσταση, εφαρμόζουμε μετασχηματισμούς Fourier για κάθε σημείο του υπολογιστικού κελιού μας, καταλήγοντας με τα πεδία και την πόλωση σαν συνάρτηση της συχνότητας

$$\vec{E}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \vec{E}(t) dt \quad (64)$$

$$\vec{H}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \vec{H}(t) dt \quad (65)$$

$$\vec{P}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \vec{P}(t) dt \quad (66)$$

Η ροή της ηλεκτρομαγνητικής ενέργειας βρίσκεται ολοκληρώνοντας το διάνυσμα Poynting μέσα από μια ορισμένη επιφάνεια A

$$F = \int \vec{S} d\vec{A} = \int \frac{c}{8\pi} (\vec{E}(\omega) \times \vec{H}(\omega)) d\vec{A} \quad (67)$$

Έτσι, για μία δοσμένη επιφάνεια της διάταξης μας και για κάθε συχνότητα μπορούμε να υπολογίσουμε την ανακλαστικότητα R, τη διέλευση T και την απορρόφηση A.

