



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

**ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ
ΕΛΙΣΑΒΕΤ ΜΠΑΣΟΥΚΑ**

**ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ
ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΕΝΟΥ ΦΩΤΟΑΝΙΧΝΕΥΤΗ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ
ΒΑΣΙΣΜΕΝΟΥ ΣΤΟ ΦΩΤΟΘΕΡΜΟΗΛΕΚΤΡΙΚΟ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ**

ΙΩΑΝΝΙΝΑ, 2021

Εσώφυλλο:

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

Οπτοηλεκτρονικά και Μαγνητικά Υλικά

που απονέμει το Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

Εγκρίθηκε τηναπό την εξεταστική επιτροπή:

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

Τριμελής Εξεταστική Επιτροπή :

- 1. Λοιδωρίκης Ελευθέριος**, Καθηγητής του ΤΜΕΥ της Πολυτεχνικής Σχολής του Παν/μίου Ιωαννίνων
- 2. Παναγιωτόπουλος Ιωάννης**, Καθηγητής του ΤΜΕΥ της Πολυτεχνικής Σχολής του Παν/μίου Ιωαννίνων
- 3. Παπαγεωργίου Δημήτριος**, Αναπληρωτής Καθηγητής του ΤΜΕΥ 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."

ΕΛΙΣΑΒΕΤ ΜΠΑΣΟΥΚΑ

Πρόλογος

Η παρούσα μεταπτυχιακή διατριβή εκπονήθηκε στο πλαίσιο περάτωσης του προγράμματος μεταπτυχιακών σπουδών «Προηγμένα Υλικά», του Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης Υλικών της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων. Σε αυτό το σημείο αισθάνομαι την ανάγκη να εκφράσω τις θερμές μου ευχαριστίες σε όλους τους ανθρώπους, η συμβολή και η συμπαράσταση των οποίων ήταν καθοριστική για την εκπόνηση της παρούσας μεταπτυχιακής διατριβής.

Αρχικά θέλω να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα της εργασίας κ. Ελευθέριο Λοιδωρική, Καθηγητή του Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης Υλικών, για την πολύτιμη καθοδήγηση, το αμείωτο ενδιαφέρον που έδειξε καθώς και για την ευκαιρία που μου έδωσε να ασχοληθώ με ένα ενδιαφέρον και πολλά υποσχόμενο ερευνητικό ζήτημα. Ιδιαίτερα θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Δρ. Δημήτρη Μπελλά για τη βοήθεια και τις συμβουλές που μου προσέφερε καθ' όλη την διάρκεια εκπόνησης της εργασίας, αλλά και για την αποδοτική συνεργασία μας. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω και τα υπόλοιπα μέλη του Εργαστηρίου Υπολογιστικής Επιστήμης Υλικών. Τέλος, οφείλω να ευχαριστήσω την οικογένεια μου για τη συνεχή υποστήριξη καθ' όλη την διάρκεια των σπουδών μου.

Περίληψη

Το γραφένιο αποτελεί ιδανικό υλικό για φωτοανίχνευση από το υπεριώδες έως το THz φάσμα ακτινοβολίας, καθώς απορροφά σε μεγάλο εύρος συχνοτήτων. Επιπλέον η ευκινησία των φορέων του είναι υψηλή, γεγονός που μειώνει το χρόνο απόκρισης των διατάξεων φωτοανιχνευτών γραφενίου. Ωστόσο η χαμηλή του απορρόφηση, που ανέρχεται στο 2.3% όταν βρίσκεται στον αέρα, μπορεί να καταστεί περιοριστικός παράγοντας για πρακτικές εφαρμογές.

Στο πλαίσιο της παρούσας μεταπτυχιακής διατριβής μελετήθηκε υπολογιστικά ένας φωτοανιχνευτής γραφενίου με στόχο την εφαρμογή του σε Ολοκληρωμένα Φωτονικά Κυκλώματα (Photonic Integrated Circuits). Ένα ολοκληρωμένο φωτονικό κύκλωμα είναι ένα chip που αποτελείται από φωτονικούς συντελεστές (π.χ. κυματοδηγούς, διαμορφωτές, φωτοανιχνευτές). Τα PICs χρησιμοποιούνται κατά κύριο λόγο σε κέντρα δεδομένων (data centers) για τη μετατροπή του οπτικού σήματος σε ηλεκτρικό και το αντίστροφο. Στα PICs γίνεται ευρεία χρήση κυματοδηγών Si για την καθοδήγηση του φωτός και για το λόγο αυτό ο υπό μελέτη φωτοανιχνευτής θα αποτελεί τμήμα του φωτονικού κυματοδηγού. Προσφέρουν πολλά πλεονεκτήματα όπως η υψηλότερη ταχύτητα, το μεγαλύτερο εύρος ζώνης και η μικρότερη απώλεια ενέργειας.

Στο πρώτο κεφάλαιο της παρούσας εργασίας γίνεται μια γενική εισαγωγή στο γραφένιο. Παρατίθενται τα χαρακτηριστικά και οι ιδιότητες του γραφενίου, όπως επίσης και οι τεχνολογικές εφαρμογές του σε φωτοβολταϊκά κύτταρα, φωτοανιχνευτές κτλ. Εξετάζεται επίσης η ατομική και κρυσταλλική δομή του.

Στο δεύτερο κεφάλαιο γίνεται αναφορά στους κυματοδηγούς και τα γενικά χαρακτηριστικά τους. Αναλύεται η διάδοση των επίπεδων κυμάτων μέσα στις διατάξεις κυματοδηγών και λύνονται αναλυτικά οι σχέσεις από τις οποίες εξάγονται οι καταστάσεις (modes) της εισερχόμενης ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας. Στο ίδιο κεφάλαιο θα λυθούν αναλυτικά και οι σχέσεις για την TE (Transverse Electric) πόλωση της ακτινοβολίας.

Στο τρίτο κεφάλαιο αναλύονται οι βασικές αρχές της μεθόδου πεπερασμένων χρονικών διαφορών (FDTD), η οποία αποτέλεσε το βασικό υπολογιστικό εργαλείο για τη συγκεκριμένη εργασία.

Στο τέταρτο κεφάλαιο γίνεται αναφορά στους φωτοανιχνευτές γραφενίου και το φωτοθερμοηλεκτρικό φαινόμενο και παρουσιάζονται αναλυτικά τα βήματα και τα

αποτελέσματα της υπολογιστικής διαδικασίας. Σκοπός της μελέτης είναι η βελτιστοποίηση της απόδοσης του φωτοανιχνευτή μέσω της ενίσχυσης της απορρόφησης του γραφενίου. Ως προς αυτή την κατεύθυνση, σχεδιάσαμε ένα φωτονικό κρύσταλλο (περιοδική διάταξη γεωμετρικών εγκοπών) ενσωματωμένο σε κυματοδηγό Si για την παγίδευση του φωτός σε συγκεκριμένο χώρο και προκαθορισμένο μήκος κύματος. Πραγματοποιήθηκε εκτενής μελέτη διαφόρων γεωμετρικών σχημάτων, διαστάσεων και περιόδων για τη δημιουργία προκαθορισμένου φωτονικού χάσματος στο φασματικό εύρος των οπτικών συστημάτων τηλεπικοινωνιών. Στη συνέχεια σχεδιάστηκε κατάλληλα μια κοιλότητα (ατέλεια) στην περιοδική διάταξη που επιτρέπει την παγίδευση του φωτός συγκεκριμένου μήκους κύματος (1550 nm) και τη σημαντική ενίσχυση της έντασης του πεδίου. Τοποθετώντας γραφένιο πάνω από τη σχεδιαζόμενη ατέλεια μετρήσαμε την απορρόφηση στο γραφένιο. Τα αποτελέσματα έδειξαν εξαιρετική ενίσχυση της απορρόφησης του γραφενίου όπου το 96.5% της εισερχόμενης ακτινοβολίας απορροφάται από ένα μόνο φύλλο γραφενίου, καθιστώντας την υπό μελέτη διάταξη ιδανική για τη λειτουργία της ως φωτοανιχνευτή.

Abstract

Graphene is an ideal material for photodetection from the ultraviolet (UV) to THz range, as it absorbs a wide range of frequencies. In addition, as a result of high graphene's carrier mobility, the response time of graphene-based photodetectors is significantly limited. However, its low absolute absorption of 2.3% when it is suspended in air, may be a restrictive factor for practical applications.

In the present dissertation, a graphene photodetector was computationally studied with the aim of its application in Photonic Integrated Circuits. A photonic integrated circuit is a chip that consists of photonic components (e.g., waveguides, modulators, photodetectors). PICs are mainly used in data centers to convert optical signal into electrical signal and vice versa. PICs make extensive use of Si waveguides to guide light and for this reason the photodetector under study will be part of the photonic waveguide. They offer numerous advantages such as higher speed, greater bandwidth and less energy loss. For this reason, the photodetector under study will be part of the photonic waveguide.

The first chapter of this paper provides a general introduction to graphene. The characteristics and properties of graphene are listed, as well as its technological applications in photovoltaic cells, photodetectors, etc. Its atomic and crystalline structure is also examined.

The second chapter refers to waveguides and their general characteristics. The propagation of the plane waves within the waveguide devices is analyzed and the relations from which the modes of the incoming electromagnetic radiation are carried out are solved in detail. In the same chapter, the relations for the TE (Transverse Electric) radiation polarization will be solved in detail.

The third chapter examines the basic principles of the finite time difference method (FDTD), which was the basic computing tool for this task.

The fourth chapter refers to graphene photodetectors and photothermoelectric (PTE) effect and presents in detail the steps and results of the computational process. The purpose of the study is to optimize the performance of the photodetector by enhancing the absorption of graphene. In this direction, we designed a photonic crystal (periodic arrangement of geometric notches) integrated in a Si waveguide to trap light in a specific space and a predetermined wavelength. An extensive study of various

geometric shapes, dimensions and periods was carried out to create a predetermined photon gap in the spectral range of optical telecommunication systems. A cavity (defect) in the periodic arrangement was then suitably designed to allow light of a certain wavelength (1550 nm) to be trapped and the field strength to be significantly enhanced. By placing graphene on top of the designed defect we measured the absorption in graphene. The results showed excellent enhancement of graphene absorption where 96.5% of the incoming radiation is absorbed by a single layer of graphene, making the device under study ideal for its operation as a photodetector.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

Κεφάλαιο 1: Γραφένιο και εφαρμογές.....	1
1.1 Ο άνθρακας και οι αλλοτροπικές μορφές του.....	1
1.2 Εισαγωγή στο γραφένιο.....	2
1.3 Ιδιότητες γραφενίου.....	6
1.3.1 Ηλεκτρικές ιδιότητες.....	7
1.3.2 Θερμικές ιδιότητες.....	8
1.3.3 Χημικές ιδιότητες.....	8
1.3.4 Μηχανικές ιδιότητες.....	8
1.3.5 Οπτικές ιδιότητες.....	9
1.4 Αγωγιμότητα γραφενίου.....	13
1.5 Τεχνολογικές εφαρμογές.....	15
Κεφάλαιο 2: Επίπεδοι κυματοδηγοί.....	16
2.1 Επίπεδος διηλεκτρικός κυματοδηγός.....	16
2.2 Ολική εσωτερική ανάκλαση.....	17
2.3 Χαρακτηριστική εξίσωση επίπεδου κυματοδηγού.....	19
2.4 Συνθήκη αποκοπής.....	23
2.5 Ταχύτητα φάσης, ενεργός δείκτης διάθλασης και διάγραμμα διασποράς.....	25
Κεφάλαιο 3: Μέθοδος FDTD.....	26
Κεφάλαιο 4: Σχεδιασμός ολοκληρωμένου φωτοανιχνευτή με βάση το γραφένιο.....	32
4.1 Φωτοανιχνευτές γραφενίου και φωτοθερμοηλεκτρικό φαινόμενο.....	32
4.2 Σχεδιασμός διάταξης φωτοανιχνευτή.....	35
4.2.1 Υπολογισμοί ιδιοτιμών στο πεδίο των συχνοτήτων (FDE).....	36
4.2.1.1 Υπολογισμοί 1D.....	37
4.2.1.2 Υπολογισμοί 2D.....	39
4.2.2 Υπολογισμοί με τη μέθοδο πεπερασμένων διαφορών στο πεδίο του χρόνου (FDTD).....	41
4.2.2.1 Simulation set-up.....	42
4.2.2.2 Βελτιστοποίηση σχήματος εγκοπής-διαστάσεων.....	44
4.2.2.3 Βελτιστοποίηση καθρέφτη Bragg.....	50
4.2.2.4 Εισαγωγή ατέλειας.....	52
4.2.2.5 Εισαγωγή γραφενίου.....	54

4.2.2.6 Critical coupling.....	61
Συμπεράσματα.....	71
Βιβλιογραφία.....	73

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΣΧΗΜΑΤΩΝ

Σχήμα 1.1: Κρυσταλλικές αλλοτροπικές μορφές άνθρακα (Zhou et al., 2012).....	2
Σχήμα 1.2: Η τεχνική Scotch tape (Novoselov & Castro Neto, 2012).....	3
Σχήμα 1.3: Απεικόνιση του sp^2 υβριδισμού στο γραφένιο (Ado Jorio al., 2011).....	4
Σχήμα 1.4: Αριστερά: Η εξαγωνική διάταξη των ατόμων άνθρακα στο γραφένιο, αποτελούμενη από δύο αλληλεπικαλυπτόμενα τριγωνικά υποπλέγματα. Δεξιά: Η αντίστοιχη ζώνη Brillouin (Castro Neto et al., 2009).....	4
Σχήμα 1.5: (a) Η δομή των ενεργειακών ζωνών του γραφενίου (b) Μεγέθυνση των ενεργειακών ζωνών στο σημείο K (Güttinger et al., 2012).....	6
Σχήμα 1.6: Το γραφένιο ως βάση κατασκευής των 0D φουλερενίων, των 1D νανοσωλήνων άνθρακα και του 3D γραφίτη. (Geim & Novoselov, 2007).....	7
Σχήμα 1.7: Το επίπεδο γραφενίου, όταν προσπίπτει επάνω του φως. Μετάβαση ενός ηλεκτρονίου από τη ζώνη σθένους στη ζώνη αγωγιμότητας όταν διεγείρεται από φωτόνιο ενέργειας $\hbar\omega$	9
Σχήμα 1.8: Αριστερά: Η οπτική διέλευση T του γραφενίου για τρεις περιπτώσεις: (i) χωρίς γραφένιο, (ii) με μονοστρωματικό γραφένιο ($A=2.3\%$) και (iii) με διστρωματικό γραφένιο. Δεξιά: Οπτική διέλευση του μονοστρωματικού γραφενίου συναρτήσει του μήκους κύματος, για τα οπτικά μήκη. Ένθετο: Μείωση της διέλευσης με την προσθήκη φύλλων γραφενίου (Nair et al., 2008).....	13
Σχήμα 1.9: Το φάσμα αγωγιμότητας του γραφενίου: (i) Van Hove μέγιστο στο υπεριώδες φάσμα, (ii) Σταθερή αγωγιμότητα στο ορατό φάσμα, (iii) Pauli blocking λόγω του εμπλουτισμού στο κοντινό υπέρυθρο, (iv) Αγωγιμότητα λόγω ελεύθερων Drude ηλεκτρονίων στο υπέρυθρο (Kravets et al., 2010; Li et al., 2008).....	15
Σχήμα 1.10: Οι βασικές ιδιότητες του γραφενίου και η δυνατή εκμετάλλευσή τους σε τεχνολογικές εφαρμογές.....	16
Σχήμα 2.1: Επίπεδος κυματοδηγός διηλεκτρικών πλακών.....	17
Σχήμα 2.2: Σχηματική απεικόνιση του νόμου Snell.....	18
Σχήμα 2.3: Το κυματόνυσμα \vec{k}_1 και οι συνιστώσες του.....	19
Σχήμα 2.4: Διάγραμμα διασποράς συμμετρικού κυματοδηγού διηλεκτρικής πλάκας.....	26
Σχήμα 3.1: Διακριτοποίηση των πεδίων στο χώρο σε ένα μονοδιάστατο πλέγμα Yee.....	27

Σχήμα 3.2: Διακριτοποίηση των πεδίων στο χρόνο σε ένα μονοδιάστατο πλέγμα Yee.....	28
Σχήμα 3.3: Απεικόνιση ενός τρισδιάστατου κελιού Yee με την κατανομή των συνιστωσών του ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου (Akinsunmade, Karczewski, Mazurkiewicz, & Tomecka-Suchoń, 2019).....	29
Σχήμα 4.1: Σχηματική απεικόνιση (a) συμμετρικών επαφών και (b) μη συμμετρικών επαφών με τις αντίστοιχες γραφικές παραστάσεις για τη θερμοκρασία T , το συντελεστή Seebeck S και το γινόμενο του συντελεστή Seebeck με τη θερμοκρασιακή βάρθρωση (gradient)	34
Σχήμα 4.2: Κάτοψη φωτοανιχνευτή γραφενίου.....	36
Σχήμα 4.3: Επίπεδος κυματοδηγός πυριτίου (a) μέσα σε αέρα (b) πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.....	37
Σχήμα 4.4: Σύγκριση αναλυτικής και αριθμητικής μεθόδου. Απεικόνιση των τριών πρώτων TE modes επίπεδου κυματοδηγού μέσα σε αέρα.....	38
Σχήμα 4.5: Σύγκριση αναλυτικής και αριθμητικής μεθόδου. Απεικόνιση των τριών πρώτων TE modes επίπεδου κυματοδηγού πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.....	38
Σχήμα 4.6: Δισδιάστατος κυματοδηγός πυριτίου: μέσα σε αέρα (a) και πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου (b).....	39
Σχήμα 4.7: Διάγραμμα διασποράς κυματοδηγού μέσα σε αέρα για το θεμελιώδες mode.....	40
Σχήμα 4.8: Διάγραμμα διασποράς κυματοδηγού πυριτίου μέσα σε αέρα για το θεμελιώδες mode.....	40
Σχήμα 4.9: Ο ενεργός δείκτης διάθλασης συναρτήσεται του πλάτους W για κυματοδηγό μέσα σε αέρα και πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου για το θεμελιώδες TE mode.....	41
Σχήμα 4.10: Φωτονικός κυματοδηγός που αποτελείται από πυρήνα πυριτίου πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου. Απεικονίζονται επίσης τα monitor που χρησιμοποιήθηκαν.....	42
Σχήμα 4.11: x-y cross section κυματοδηγού πυριτίου (a) μέσα σε αέρα και (b) πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου με εγκοπή αέρα σε σχήμα κύκλου.....	45
Σχήμα 4.12: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με την ακτίνα της εγκοπής ($r=10-250\text{nm}$), για κυματοδηγό με πλάτος	

W=450nm μέσα σε αέρα και πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.....	45
Σχήμα 4.13: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με την ακτίνα της εγκοπής ($r=10-550\text{nm}$), για κυματοδηγό με πλάτος $W=1000\text{nm}$ μέσα σε αέρα και πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.....	46
Σχήμα 4.14: x-y cross section κυματοδηγού πυριτίου (a) μέσα σε αέρα και (b) πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου με εγκοπή αέρα σε σχήμα τετραγώνου με ακμή a.....	46
Σχήμα 4.15: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με την ακμή της εγκοπής ($a=10-460\text{nm}$), για κυματοδηγό με πλάτος $W=450\text{nm}$ μέσα σε αέρα και πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.....	47
Σχήμα 4.16: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με την ακμή της οπής ($a=10-1100\text{nm}$), για κυματοδηγό με πλάτος $W=1000\text{nm}$ μέσα σε αέρα και πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.....	47
Σχήμα 4.17: x-y cross section κυματοδηγού πυριτίου (a) μέσα σε αέρα και (b) πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου με εγκοπή αέρα σε σχήμα ορθογώνιου παραλληλόγραμμου με πλευρές a και d.....	48
Σχήμα 4.18: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με την ακμή της οπής ($d=10-460\text{nm}$), για πλευρά $a=100\text{nm}$ και για κυματοδηγό με πλάτος $W=450\text{nm}$ μέσα σε αέρα και πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.....	48
Σχήμα 4.19: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος της πλευράς $d=20-300\text{nm}$ του ορθογώνιου παραλληλόγραμμου για συγκεκριμένες τιμές της πλευράς $a=50-200\text{nm}$ και για κυματοδηγό με πλάτος $W=450\text{nm}$ πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.....	49
Σχήμα 4.20: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος της πλευράς $d=10-1100\text{nm}$ του ορθογώνιου παραλληλόγραμμου για $a=100\text{nm}$ και για κυματοδηγό με πλάτος $W=450\text{nm}$ πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.....	49
Σχήμα 4.21: x-y cross section κυματοδηγού πυριτίου με κυκλικές οπές αέρα σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.....	50

Σχήμα 4.22: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με την περίοδο ($p=250-550\text{nm}$) για συγκεκριμένες τιμές της ακτίνας ($r=40-100\text{nm}$).....	51
Σχήμα 4.23: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με τον αριθμό των κυκλικών εγκοπών (6-12) για συγκεκριμένες τιμές της ακτίνας ($r=40-90\text{nm}$).....	52
Σχήμα 4.24: x-y cross section κυματοδηγού πυριτίου πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου, όπου απεικονίζεται ο καθρέφτης Bragg και η σχεδιαζόμενη ατέλεια μήκους d.....	52
Σχήμα 4.25: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος της ατέλειας του καθρέφτη Bragg για διάφορους συνδυασμούς ακτίνας-αριθμού εγκοπών.....	53
Σχήμα 4.26: x-y cross section κυματοδηγού πυριτίου σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου με φύλλο γραφενίου τοποθετημένο πάνω από την ατέλεια.....	54
Σχήμα 4.27: Γραφική αναπαράσταση (a) της απορρόφησης A (b) της ανάκλασης R και (c) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1520-1580\text{nm}$) για συγκεκριμένο συνολικό αριθμό εγκοπών (6-22), για την περίπτωση με ακτίνα $r=50$ και μήκος ατέλειας $d=510\text{nm}$	55
Σχήμα 4.28: Γραφική αναπαράσταση (a) της απορρόφησης A (b) της ανάκλασης R και (c) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1520\text{nm}-1580\text{nm}$) για συγκεκριμένο συνολικό αριθμό εγκοπών (6-16), για την περίπτωση με ακτίνα $r=70\text{nm}$ και μήκος ατέλειας $d=580\text{nm}$	56
Σχήμα 4.29: Γραφική αναπαράσταση (a) της απορρόφησης A (b) της ανάκλασης R και (c) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1520-1580\text{nm}$) για συγκεκριμένο συνολικό αριθμό εγκοπών (6-14), για την περίπτωση με ακτίνα $r=90\text{nm}$ και μήκος ατέλειας $d=628\text{nm}$	57
Σχήμα 4.30: 1-D γεωμετρίες για την ενίσχυση της απορρόφησης σε φύλλο γραφενίου μονοατομικού πάχους (a) Συμμετρική διάταξη (b) Κατάργηση συμμετρίας με την προσθήκη ανακλαστικής επιφάνειας.....	58
Σχήμα 4.31: x-y cross section κυματοδηγού πυριτίου πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου με πρόσθετες εγκοπές δεξιά της ατέλειας.....	59
Σχήμα 4.32: Γραφική αναπαράσταση (a) της απορρόφησης A (b) της ανάκλασης R και (c) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1520-1580\text{nm}$) για	

συγκεκριμένο αριθμό εγκοπών δεξιά από την κοιλότητα (24-32), για την περίπτωση με ακτίνα $r=50\text{nm}$ και αριθμό εγκοπών αριστερά από την κοιλότητα:10.....	59
Σχήμα 4.33: Γραφική αναπαράσταση (a) της απορρόφησης A (b) της ανάκλασης R και (c) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1520\text{-}1580\text{nm}$) για συγκεκριμένο αριθμό εγκοπών δεξιά από την κοιλότητα (16-26), για την περίπτωση με ακτίνα $r=70\text{nm}$ και αριθμό εγκοπών αριστερά από την κοιλότητα:6.....	60
Σχήμα 4.34: Γραφική αναπαράσταση (a) της απορρόφησης A (b) της ανάκλασης R και (c) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1520\text{-}1580\text{nm}$) για συγκεκριμένο αριθμό εγκοπών δεξιά από την κοιλότητα (16-26), για την περίπτωση με ακτίνα $r=90\text{nm}$ και αριθμό εγκοπών αριστερά από την κοιλότητα:6.....	61
Σχήμα 4.35: Γραφική αναπαράσταση (a) της απορρόφησης A (b) της ανάκλασης R και (c) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1540\text{-}1560\text{nm}$) για συγκεκριμένες τιμές αριθμού εγκοπών μπροστά από την κοιλότητα (9-13) και μήκος φύλλου γραφενίου $d\text{SLG}=250\text{nm}$	62
Σχήμα 4.36: Γραφική αναπαράσταση (a) της απορρόφησης A (b) της ανάκλασης R και (c) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1540\text{-}1560\text{nm}$) για συγκεκριμένες τιμές αριθμού εγκοπών μπροστά από την κοιλότητα (9-13) και μήκος φύλλου γραφενίου $d\text{SLG}=500\text{nm}$	63
Σχήμα 4.37: Γραφική αναπαράσταση (a) της απορρόφησης A (b) της ανάκλασης R και (c) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1540\text{-}1560\text{nm}$) για συγκεκριμένες τιμές αριθμού εγκοπών μπροστά από την κοιλότητα (8-13) και μήκος φύλλου γραφενίου $d\text{SLG}=1000\text{nm}$	64
Σχήμα 4.38: Γραφική αναπαράσταση (a) της απορρόφησης A (b) της ανάκλασης R και (c) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1540\text{-}1560\text{nm}$) για συγκεκριμένες τιμές αριθμού εγκοπών μπροστά από την κοιλότητα (6-9) και μήκος φύλλου γραφενίου $d\text{SLG}=2000\text{nm}$	65
Σχήμα 4.39: Επιφανειακή απορρόφηση στο γραφένιο για την περίπτωση με μήκος φύλλου γραφενίου $d\text{SLG}=250\text{nm}$	66
Σχήμα 4.40: Επιφανειακή απορρόφηση στο γραφένιο για την περίπτωση με μήκος φύλλου γραφενίου $d\text{SLG}=500\text{nm}$	66
Σχήμα 4.41: Επιφανειακή απορρόφηση στο γραφένιο για την περίπτωση με μήκος φύλλου γραφενίου $d\text{SLG}=1000\text{nm}$	67

Σχήμα 4.42: Επιφανειακή απορρόφηση στο γραφένιο για την περίπτωση με μήκος φύλλου γραφενίου dSLG=2000nm	67
Σχήμα 4.43: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1540-1560\text{nm}$) για μήκη γραφενίου (dSLG=800-1700nm), για την περίπτωση με αριθμό εγκοπών μπροστά από την κοιλότητα:8.....	68
Σχήμα 4.44: Γραφική αναπαράσταση της απορρόφησης A σε συνάρτηση (a) με το μήκος κύματος ($\lambda=1540-1560\text{nm}$) για μήκη γραφενίου (dSLG=800-1700nm) (b) με τα μήκη γραφενίου που αντιστοιχούν στις μέγιστες τιμές της απορρόφησης του Σχ.4.44(a), για την περίπτωση με αριθμό εγκοπών μπροστά από την κοιλότητα:8.....	68
Σχήμα 4.45: Επιφανειακή απορρόφηση στο γραφένιο για την περίπτωση με μήκος φύλλου γραφενίου dSLG=1600nm.....	69
Σχήμα 4.46: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1547-1553\text{nm}$) για μήκη γραφενίου (dSLG=100-500nm), για την περίπτωση με αριθμό εγκοπών μπροστά από την κοιλότητα:11.....	69
Σχήμα 4.47: Γραφική αναπαράσταση της απορρόφησης A σε συνάρτηση (a) με το μήκος κύματος ($\lambda=1547-1553\text{nm}$) για μήκη γραφενίου (dSLG=100-500nm) (b) με τα μήκη γραφενίου που αντιστοιχούν στις μέγιστες τιμές της απορρόφησης του Σχ.4.46(a), για την περίπτωση με αριθμό εγκοπών μπροστά από την κοιλότητα:11.....	70
Σχήμα 4.48: Επιφανειακή απορρόφηση στο γραφένιο για την περίπτωση με μήκος φύλλου γραφενίου dSLG=400nm.....	70
Σχήμα 4.49: Εικόνα SEM κυματοδηγού Si που δείχνει την περιοδική διάταξη των γεωμετρικών εγκοπών και την ατέλεια της φωτονικής κοιλότητας.....	72

1. ΓΡΑΦΕΝΙΟ ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

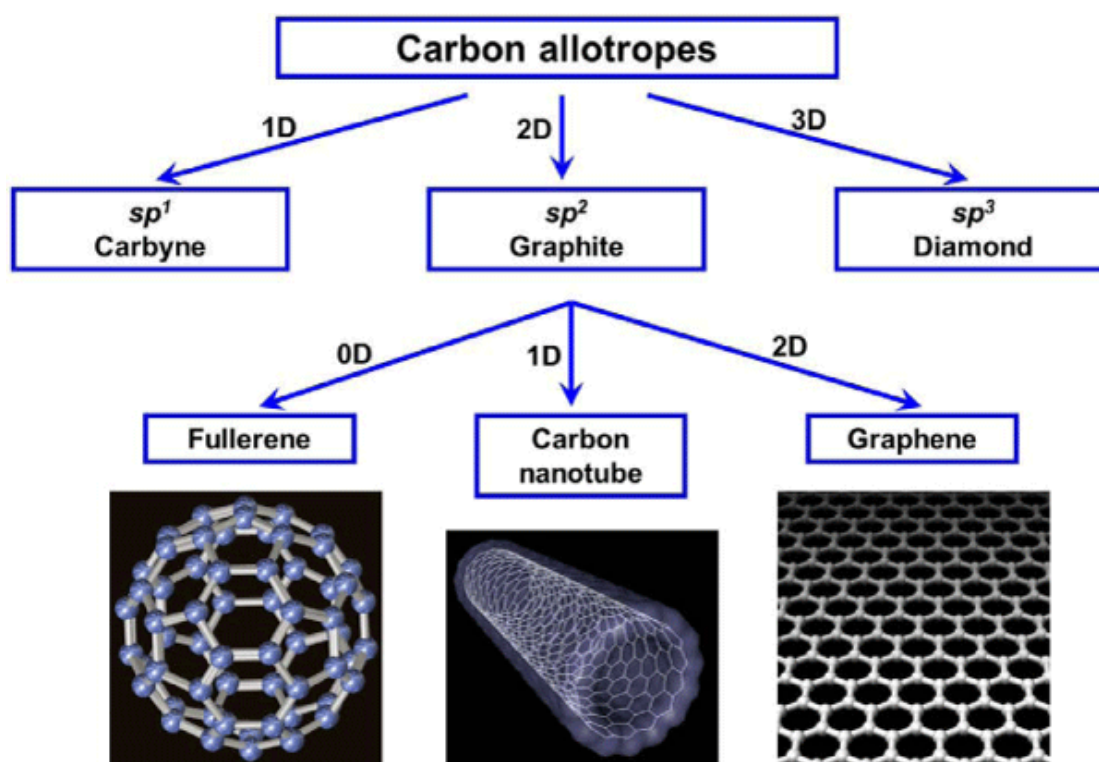
1.1 Ο ΑΝΘΡΑΚΑΣ ΚΑΙ ΟΙ ΑΛΛΟΤΡΟΠΙΚΕΣ ΜΟΡΦΕΣ ΤΟΥ

Ο άνθρακας είναι ένα αμέταλλο χημικό στοιχείο με σύμβολο C (Carbon) και ατομικό αριθμό $Z=6$. Η ηλεκτρονιακή δομή του στη βασική κατάσταση είναι η εξής: $1s^2 2s^2 2p^2$. Το $1s^2$ τροχιακό περιλαμβάνει δύο ηλεκτρόνια που συνδέονται ισχυρά στον πυρήνα. Τα υπόλοιπα τέσσερα ηλεκτρόνια κατανέμονται στα $2s^2$ και $2p^2$ τροχιακά και είναι ασθενέστερα συνδεδεμένα (Wolf, 2014).

Κατά το σχηματισμό δεσμών με άλλα άτομα, τα τέσσερα ηλεκτρόνια σθένους κατανέμονται στα $2s$, $2p_x$, $2p_y$ και $2p_z$ τροχιακά. Αυτό συμβαίνει γιατί είναι προτιμότερο ενεργειακά να προωθηθεί κάποιο ηλεκτρόνιο από το $2s$ στο $2p$ τροχιακό, έτσι ώστε να προκύψει η δυνατότητα “ανάμιξης” των τεσσάρων ημικατατελημένων τροχιακών. Αυτή η “ανάμιξη” (γραμμικός συνδυασμός των κυματοσυναρτήσεων) των τροχιακών ονομάζεται υβριδισμός και ισχυροποιεί τους χημικούς δεσμούς του ατόμου (Saito, Dresselhaus, & Dresselhaus, 1998). Ο υβριδισμός τύπου sp^n , προκύπτει από το συνδυασμό ενός $2s$ ηλεκτρονίου με ($n=1,2,3$) $2p$ ηλεκτρόνια. Συγκεκριμένα, στον sp υβριδισμό σχηματίζονται δομές αλυσίδας, στον sp^2 υβριδισμό σχηματίζονται επίπεδες δομές και στον sp^3 υβριδισμό σχηματίζονται τετραεδρικές δομές (Τραχανάς, 2015).

Μία από τις σημαντικές ιδιότητες του άνθρακα είναι η δυνατότητα σχηματισμού δεσμών (απλών ή πολλαπλών) με άλλα ανθρακικά άτομα. Με τον τρόπο αυτό σχηματίζονται οι αλλοτροπικές μορφές άνθρακα που είναι διαφορετικές δομές με διαφορετικές φυσικές ιδιότητες (Σχ. 1.1). Οι αλλοτροπικές μορφές άνθρακα μπορούν να εμφανίσουν είτε μη κρυσταλλική μορφή (όπως ο άμορφος άνθρακας που προκύπτει από ενώσεις με sp^2 και sp^3 υβριδισμούς) είτε κρυσταλλική δομή (όπως το διαμάντι που παρουσιάζει sp^3 υβριδισμό) (Λιοδάκης, 2005).

Τις τελευταίες δεκαετίες έχουν απομονωθεί και μελετηθεί και άλλες κρυσταλλικές μορφές όπως τα φουλλερένια (foullerenes), οι νανοσωλήνες άνθρακα (carbon nanotubes) (Κορδάτος, 2006) και το γραφένιο (graphene) το οποίο θα μελετηθεί εκτενώς στο πλαίσιο αυτής της εργασίας.



Σχήμα 1.2: Κρυσταλλικές αλλοτροπικές μορφές άνθρακα (Zhou et al., 2012).

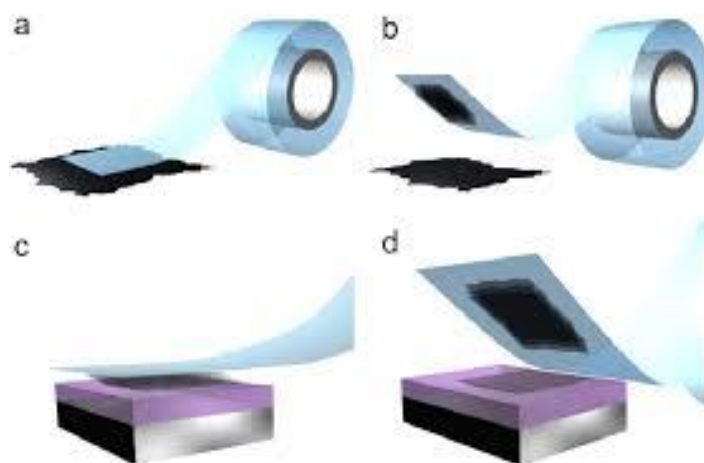
1.2 ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΟ ΓΡΑΦΕΝΙΟ

Το γραφένιο αποτελεί ουσιαστικά ένα μονοατομικού πάχους φύλλο γραφίτη. Η πρώτη θεωρητική μελέτη του γραφενίου έγινε από τον P.R Wallace το 1947, ως σημείο εκκίνησης για την κατανόηση των ηλεκτρονικών ιδιοτήτων του τρισδιάστατου γραφίτη (Wallace, 1947).

Οι Landau και Peierls υποστήριζαν πως ήταν αδύνατο να υπάρξουν ασητηρώς δισδιάστατοι κρύσταλλοι σε ελεύθερη κατάσταση λόγω θερμοδυναμικής αστάθειας. Αυτό υποστηρίχθηκε από το γεγονός ότι σε κρυσταλλικά πλέγματα μικρών διαστάσεων, οι θερμικές διακυμάνσεις μπορούν να οδηγήσουν σε τέτοιες μετατοπίσεις των ατόμων του πλέγματος, οι οποίες είναι συγκρίσιμες με τις ενδοατομικές

αποστάσεις σε πεπερασμένες θερμοκρασίες (Peierls, 1935; Landau, 1937). Παράλληλα οι προσπάθειες για την απομόνωση του μονοατομικού πάχους γραφενίου δεν επέφεραν κάποιο αποτέλεσμα.

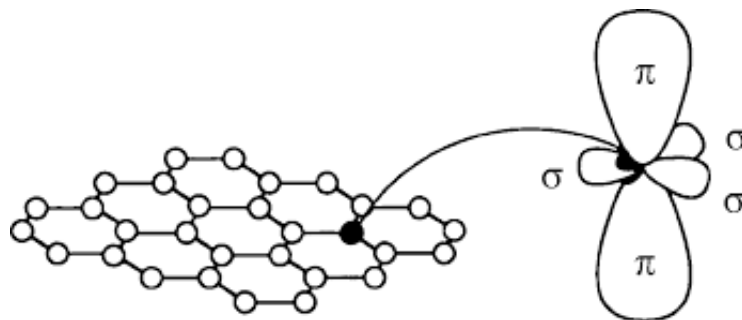
Ένα σημαντικό βήμα έγινε το 2004, καθώς οι Andre Geim και Kostya Novoselov από το πανεπιστήμιο του Manchester σε συνεργασία με το Ινστιτούτο Μικροηλεκτρονικής Τεχνολογίας στην Chernogolovka της Ρωσίας, κατάφεραν να απομονώσουν μονοατομικού πάχους κρυσταλλίτες (γραφένιο). Στο δισδιάστατο αυτό κρύσταλλο, οι ισχυροί ενδοατομικοί δεσμοί δεν επιτρέπουν στις θερμικές διακυμάνσεις να οδηγήσουν σε σχετικά μεγάλες μετατοπίσεις των ατόμων του πλέγματος, ακόμα και σε υψηλές θερμοκρασίες (Novoselov, 2004). Η μέθοδος που χρησιμοποιήθηκε για την απομόνωση του γραφενίου ήταν η μηχανική αποφλοίωση με χρήση κολλητικής ταινίας, γνωστή και ως τεχνική Scotch tape (Σχ. 1.2). Το 2010 οι Ρώσοι ερευνητές βραβεύτηκαν με νόμπελ Φυσικής για την απομόνωση και τη μελέτη των ιδιοτήτων του γραφενίου.



Σχήμα 1.2: Η τεχνική Scotch tape (Novoselov & Castro Neto, 2012).

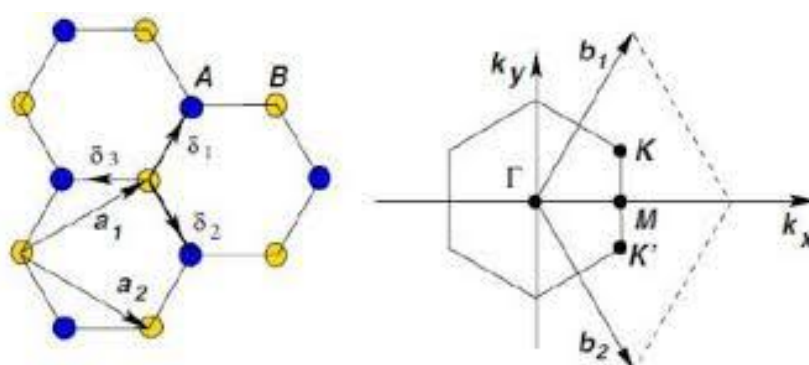
Ο δισδιάστατος κρύσταλλος του γραφενίου αποτελείται από άτομα άνθρακα ισχυρώς συνδεδεμένα μεταξύ τους, τα οποία είναι διατεταγμένα σε εξαγωνικό πλέγμα, δημιουργώντας κυψελοειδή δομή. Το εξαγωνικό πλέγμα δεν αποτελεί πλέγμα Bravais επειδή δύο γειτονικά σημεία του πλέγματος είναι μη ισοδύναμα. Έτσι, το εξαγωνικό πλέγμα καλείται και ως τριγωνικό πλέγμα με βάση δύο ατόμων, καθώς τα τριγωνικά υποπλέγματα αποτελούν πλέγματα Bravais. Στη δομή αυτή η απόσταση μεταξύ των ατόμων είναι $1,42\text{\AA}$ (Abergel et al., 2010).

Στο γραφένιο, λαμβάνει χώρα επίπεδος sp^2 υβριδισμός των ατόμων του άνθρακα. Τα s , p_x και p_y τροχιακά του κάθε ατόμου συνδυάζονται έτσι ώστε να σχηματίσουν τρία sp^2 υβριδικά τροχιακά. Η αλληλεπίδραση των sp^2 υβριδικών τροχιακών μεταξύ δύο γειτονικών ατόμων άνθρακα, έχει ως αποτέλεσμα τη δημιουργία τριών σ δεσμών που εντοπίζονται κατά μήκος του επιπέδου του πλέγματος. Πρόκειται για ισχυρούς ομοιοπολικούς δεσμούς, υπεύθυνους για την ισχυρή δέσμευση μεταξύ των ατόμων άνθρακα στο γραφένιο και την εξαιρετική μηχανική αντοχή του. Το p_z τροχιακό έχει κατεύθυνση κάθετη στο επίπεδο του πλέγματος και αλληλεπιδρά μόνο με τα p_z τροχιακά των γειτονικών ατόμων σχηματίζοντας π δεσμό (Σχ. 1.3). Αυτός ο δεσμός είναι υπεύθυνος για τις οπτοηλεκτρονικές ιδιότητες του γραφενίου.



Σχήμα 1.3: Απεικόνιση του sp^2 υβριδισμού στο γραφένιο (Ado Jorio et al., 2011).

Η κρυσταλλική δομή του γραφενίου, που απεικονίζεται στο Σχ. 1.4, αποτελείται από δύο τριγωνικά και ισοδύναμα (λόγω συμμετρίας) ανθρακικά υποπλέγματα.



Σχήμα 1.4: Αριστερά: Η εξαγωνική διάταξη των ατόμων άνθρακα στο γραφένιο, αποτελούμενη από δύο αλληλεπικαλυπτόμενα τριγωνικά υποπλέγματα. Δεξιά: Η αντίστοιχη ζώνη Brillouin (Castro Neto et al., 2009).

Τα διανύσματα \vec{a}_1 και \vec{a}_2 του Σχ. 1.4 (αριστερά) είναι τα θεμελιώδη διανύσματα του κρυσταλλικού πλέγματος, ενώ τα $\vec{\delta}_i$ ($i=1,2,3$) είναι τα διανύσματα που ενώνουν ένα άτομο με τους κοντινότερους γείτονες του. Επειδή η εσωτερική γωνία ενός κανονικού εξαγώνου είναι 120° , προκύπτουν τα εξής:

$$\vec{a}_1 = \frac{\alpha}{2}(3, \sqrt{3}) \quad \text{και} \quad \vec{a}_2 = \frac{\alpha}{2}(3, -\sqrt{3}) \quad (1.1)$$

όπου $\alpha = 1.42 \text{ \AA}$ η απόσταση μεταξύ γειτονικών ανθρακικών ατόμων

Αντίστοιχα για τα $\vec{\delta}_i$ προκύπτει ότι:

$$\vec{\delta}_1 = \frac{\alpha}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{\delta}_2 = \frac{\alpha}{2}(1, -\sqrt{3}) \quad \text{και} \quad \vec{\delta}_3 = -\alpha(1, 0) \quad (1.2)$$

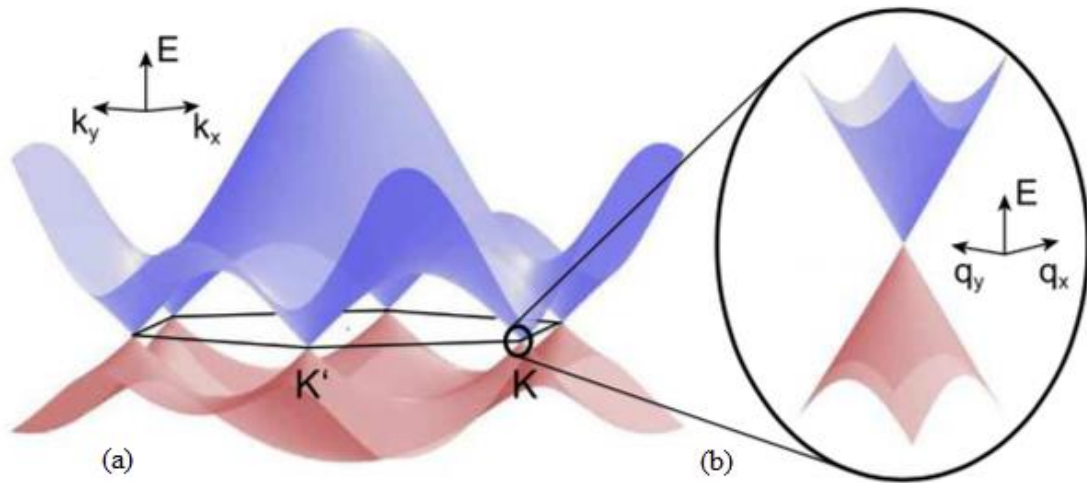
Τα διανύσματα \vec{b}_1 και \vec{b}_2 του αντίστροφου χώρου, δίνονται από τις σχέσεις:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \hat{z}}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \hat{z})} \quad \text{και} \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\hat{z} \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \hat{z})}$$

Έτσι, τελικά προκύπτει ότι:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3\alpha}(1, \sqrt{3}) \quad \text{και} \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3\alpha}(1, -\sqrt{3}) \quad (1.3)$$

Η ζώνη Brillouin του γραφενίου φαίνεται στο Σχ. 1.4 (δεξιά). Η ζώνη αγωγιμότητας και η ζώνη σθένους του γραφενίου τέμνονται στα σημεία K και K' της ζώνης Brillouin (Σχήμα 1.5a), γι' αυτό και είναι ημιαγωγός με μηδενικό ενεργειακό χάσμα. Στα σημεία αυτά η πυκνότητα ενεργειακών καταστάσεων μηδενίζεται (Geim & Novoselov, 2007).



Σχήμα 1.5: (a) Η δομή των ενεργειακών ζωνών του γραφενίου (b) Μεγέθυνση των ενεργειακών ζωνών στο σημείο K (Güttinger et al., 2012).

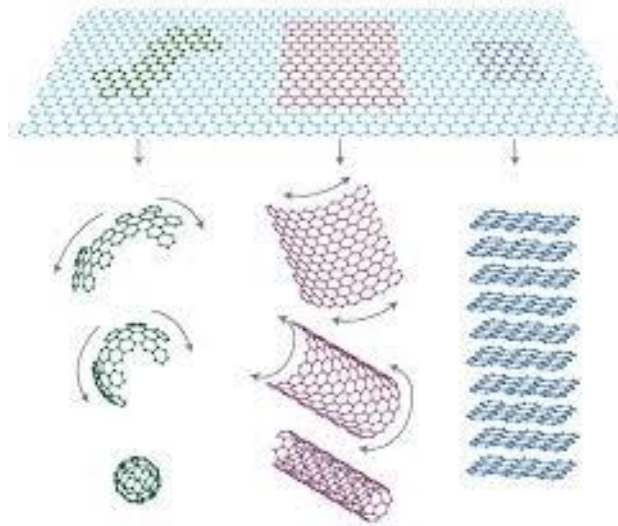
Σε έναν κρύσταλλο γραφενίου υπάρχουν έξι τέτοια σημεία. Τα σημεία K και K' είναι μη ισοδύναμα μεταξύ τους (τα δύο τριγωνικά υποπλέγματα επικαλύπτονται). Οι συντεταγμένες τους είναι:

$$K = \frac{2\pi}{3a} \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \quad \text{και} \quad K' = \frac{2\pi}{3a} \left(-1, \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \quad (1.4)$$

Η ενεργειακή διασπορά για χαμηλές ενέργειες είναι γραμμική γύρω από τα σημεία K και K' . Η συμπεριφορά αυτή είναι χαρακτηριστική για το γραφένιο και εξηγείται βάσει συμμετρίας (Wolf, 2014; Divincenzo & Mele, 1984).

1.3 ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ

Το γραφένιο παρουσιάζει διαφορετική συμπεριφορά από τα περισσότερα συμβατικά τρισδιάστατα υλικά, λόγω της φύσης του. Μελετάται ευρέως τα τελευταία χρόνια λόγω των μοναδικών ηλεκτρικών, θερμικών, μηχανικών, χημικών και οπτικών ιδιοτήτων του. Το υλικό αυτό αποτελεί βασικό συστατικό για την οικοδόμηση γραφενικών υλικών όλων των διαστάσεων (Σχ. 1.6).



Σχήμα 1.6: Το γραφένιο ως βάση κατασκευής των 0D φουλερενίων, των 1D νανοσωλήνων άνθρακα και του 3D γραφίτη. (Geim & Novoselov, 2007).

1.3.1 Ηλεκτρικές ιδιότητες

Οι εξαιρετικές ιδιότητες του γραφενίου, οφείλονται στη μοναδική φύση των φορέων του. Για χαμηλές ενέργειες, η γραμμική σχέση ορμής - ενέργειας οδηγεί σε μηδενική ενεργό μάζα για τους φορείς του γραφενίου κοντά στα σημεία υψηλής συμμετρίας. Εξαιτίας αυτής της γραμμικότητας οι φορείς στο γραφένιο δε μπορούν να περιγραφούν μέσω μιας απλής εξίσωσης Schrödinger. Η αλληλεπίδρασή τους με το περιοδικό δυναμικό του κρυστάλλου, οδηγεί στη δημιουργία ψευδοσωματιδίων τα οποία συμπεριφέρονται ως σχετικιστικά και περιγράφονται από την εξίσωση Dirac για άμαζα σωματίδια με spin $\frac{1}{2}$. Ως εκ τούτου, τα ηλεκτρόνια και οι οπές ονομάζονται φερμιόνια Dirac, και τα σημεία K και K' του Σχ. 1.5(a) ονομάζονται σημεία Dirac. Τα φερμιόνια Dirac δεν κινούνται με την ταχύτητα του φωτός αλλά με την ταχύτητα Fermi u_F που είναι περίπου 10^6 m/s, δηλαδή 300 φορές μικρότερη της ταχύτητας του φωτός στο κενό (Geim & Novoselov, 2007).

Μία ακόμα σημαντική δυνατότητα που προσφέρει το γραφένιο είναι ο έλεγχος της πυκνότητας και του τύπου των φορέων αγωγιμότητας, είτε με χημικό εμπλουτισμό (Liu, Liu, & Zhu, 2011) είτε απλά με την εφαρμογή ενός D.C. ηλεκτρικού πεδίου (Efetov & Kim, 2010; Chen et al., 2011).

Τέλος, το γραφένιο παρουσιάζει πολύ υψηλή συγκέντρωση και ευκινησία φορέων. Η συγκέντρωση φτάνει τα $n=10^{13}\text{cm}^{-2}$ με κινητικότητες που ξεπερνούν τα $15000\text{cm}^2 \text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$. Η παρατηρούμενη ευκινησία είναι ουσιαστικά ανεξάρτητη της

θερμοκρασίας ακόμα και πάνω από τους 300 K, πράγμα το οποίο υποδεικνύει ότι μπορεί να περιορίζεται από σκέδαση σε ατέλειες και μπορεί να αυξηθεί ακόμα περισσότερο (Geim & Novoselov, 2007).

1.3.2 Θερμικές Ιδιότητες

Το γραφένιο επίσης έχει πολύ ελκυστικές θερμικές ιδιότητες. Η θερμική του αγωγιμότητα είναι μεγαλύτερη από αυτή του διαμαντιού και των νανοσωλήνων άνθρακα, με τιμές που υπερβαίνουν τα $5000\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$. Η βαλλιστική θερμική αγωγιμότητα του γραφενίου είναι ιστροπική ενώ σημαντικό ρόλο παίζει και η ισοτοπική σύνθεση, αφού το γραφένιο που σχηματίζεται αποκλειστικά από ^{12}C εμφανίζει μεγαλύτερη θερμική αγωγιμότητα ακόμα και σε σχέση με γραφένιο όπου οι αναλογίες ισοτόπων ^{12}C και ^{13}C είναι 99 προς 1. Η αυξημένη θερμική αγωγιμότητα μπορεί να αποτελέσει σημαντικό πλεονέκτημα στις βασισμένες στο γραφένιο ηλεκτρικές εφαρμογές (Balandin et al., 2008; Chen et al., 2012).

1.3.3 Χημικές Ιδιότητες

Το γραφένιο είναι ικανό να προσροφήσει και να εκροφήσει διάφορα άτομα ή μόρια, γεγονός που το καθιστά ιδανικό για εφαρμογές αισθητήρων. Οι συνημμένες ουσίες μπορούν να λειτουργήσουν ως δότες ή ως αποδέκτες φορέων αγωγιμότητας επιφέροντας αλλαγές στον εμπλουτισμό του γραφενίου. Τα άκρα του γραφενικού φύλλου είναι ιδιαίτερα δραστικά, πράγμα που συνιστά ένα ακόμα πλεονέκτημα καθώς έχει το μεγαλύτερο λόγο ακριανών ατόμων σε σχέση με τις υπόλοιπες αλλοτροπικές μορφές του άνθρακα (Novoselov et al., 2012).

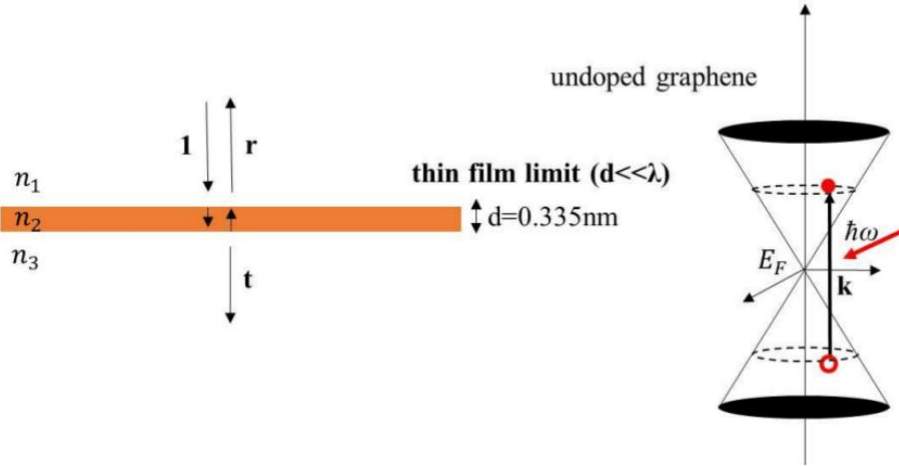
1.3.4 Μηχανικές ιδιότητες

Το γραφένιο είναι το πιο ισχυρό υλικό που έχει μετρηθεί ως σήμερα. Οι πειραματικές μετρήσεις έδειξαν ότι έχει αντοχή εφελκυσμού 100 φορές μεγαλύτερη από το ατσάλι. Το μέτρο ελαστικότητας Young μπορεί να φτάσει και το 1 TPa. Παράλληλα είναι εξαιρετικά ελαφρύ, ζυγίζοντας μόλις 0.77mg/m^2 (Lee et al., 2008). Οι μηχανικές αυτές ιδιότητες οφείλονται στους δεσμούς μεταξύ των ατόμων άνθρακα και το καθιστούν ιδανικό για την παραγωγή νέων σύνθετων υλικών.

1.3.5 Οπτικές ιδιότητες

Το γραφένιο έχει πολύ ξεχωριστές οπτικές ιδιότητες. Η οπτική απορρόφηση του μη-εμπλουτισμένου γραφενίου είναι ανεξάρτητη από τη συχνότητα για ένα μεγάλο εύρος ενεργειών, από το ορατό έως το μακρινό υπέρυθρο. Σαν άμεση συνέπεια αυτού, η οπτική διέλευση του υλικού, με πλάτος λιγότερο από 0.335nm, είναι επίσης ανεξάρτητη της συχνότητας ω και υπολογίζεται ότι είναι $T=1-\pi\alpha$ (Bao & Loh, 2012). Η περιγραφή των οπτικών ιδιοτήτων του γραφενίου (διέλευση T , ανακλαστικότητα R και απορρόφηση A) γίνεται μέσω των εξισώσεων Fresnel για λεπτά υμένα με δεδομένη οπτική του αγωγιμότητα $\sigma(\omega) = \frac{e^2}{4\hbar}$.

Το πρόβλημα προσδιορίζεται ως πρόβλημα τριών επιπέδων διαφορετικού δείκτη διάθλασης, όπως φαίνεται στο Σχ. 1.7:



Σχήμα 1.7: Το επίπεδο γραφενίου, όταν προσπίπτει επάνω του φως. Μετάβαση ενός ηλεκτρονίου από τη ζώνη σθένους στη ζώνη αγωγιμότητας όταν διεγείρεται από φωτόνιο ενέργειας $\hbar\omega$.

Με τη χρήση των πινάκων διάδοσης (propagation matrix) και διεπιφάνειας (interface matrix) προκύπτει:

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{n_2}{n_3} & 1 - \frac{n_2}{n_3} \\ 1 - \frac{n_2}{n_3} & 1 + \frac{n_2}{n_3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\theta} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 + \frac{n_1}{n_2} & 1 - \frac{n_1}{n_2} \\ 1 - \frac{n_1}{n_2} & 1 + \frac{n_1}{n_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

όπου $\theta = n_2 k d$, d το πλάτος του γραφενίου, t το πλάτος διέλευσης, r το πλάτος ανάκλασης και M ο τελικός πίνακας μεταφοράς.

Πολλαπλασιάζοντας τους πίνακες καταλήγουμε στα τέσσερα στοιχεία του πίνακα M :

$$M_{11} = \frac{1}{2} \cos \theta \left(1 + \frac{n_1}{n_3} \right) + \frac{i}{2} \sin \theta \left(\frac{n_1}{n_2} + \frac{n_2}{n_3} \right) \quad (1.6)$$

$$M_{12} = \frac{1}{2} \cos \theta \left(1 - \frac{n_1}{n_3} \right) + \frac{i}{2} \sin \theta \left(\frac{n_2}{n_3} - \frac{n_1}{n_2} \right) \quad (1.7)$$

$$M_{22} = M_{11}^* \quad (1.8)$$

$$M_{21} = M_{12}^* \quad (1.9)$$

Μπορούμε τώρα να προσδιορίσουμε το πλάτος διέλευσης t και το πλάτος ανάκλασης r μέσω της Εξ. (1.5):

$$\left. \begin{aligned} t = M_{11} + M_{12}r \\ 0 = M_{21} + M_{22}r \end{aligned} \right\} r = -\frac{M_{21}}{M_{22}} \quad \text{και} \quad t = \frac{M_{22}M_{11} - M_{12}M_{21}}{M_{22}} \quad (1.10)$$

Μπορούμε επίσης να προσδιορίσουμε τις σταθερές ανάκλασης, διέλευσης και απορρόφησης.

$$R = |r|^2 = \left| \frac{M_{21}}{M_{22}} \right|^2 \quad (1.11)$$

$$T = \frac{n_3}{n_1} |t|^2 = \frac{n_3}{n_1} \frac{1}{|M_{22}|^2} \quad (1.12)$$

$$A = 1 - R - T \quad (1.13)$$

Ο περιορισμός του λεπτού υμενίου στις Εξ. (1.6)-Εξ. (1.9) τις απλοποιεί καθώς ισχύουν τα παρακάτω:

$$d \ll \lambda \Rightarrow kd \ll 1 \Rightarrow \begin{cases} \cos \theta \approx 1 \\ \sin \theta \approx n_2 kd \end{cases} \quad (1.14)$$

Οπότε θα ισχύει:

$$M_{22} = \frac{1}{2n_3} \left[(n_3 + n_1) - ikd (\varepsilon + n_1 n_3) \right] \quad (1.15)$$

$$M_{21} = \frac{1}{2n_3} \left[(n_3 - n_1) - ikd (\varepsilon - n_1 n_3) \right] \quad (1.16)$$

όπου $\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$, η μιγαδική διηλεκτρική σταθερά

Για τον υπολογισμό της σταθεράς απορρόφησης T , η Εξ. (1.12) γίνεται:

$$|M_{22}|^2 = \frac{1}{(2n_3)^2} \left| (n_3 + n_1) - ikd(\varepsilon + n_1 n_3) \right|^2 \Rightarrow$$

$$|M_{22}|^2 = \frac{1}{(2n_3)^2} \left[(n_3 + n_1 + kd\varepsilon_2)^2 - k^2 d^2 (\varepsilon_1 + n_1 n_3)^2 \right] \quad (1.17)$$

Κρατώντας μόνο τον όρο kd έχουμε:

$$T = \frac{n_1}{n_3} \frac{1}{|M_{22}|^2} = \frac{4n_1 n_3}{(n_1 + n_3)^2} \left(1 - \frac{2kd\varepsilon_2}{n_1 + n_3} \right) \quad (1.18)$$

Το φανταστικό μέρος της μιγαδικής διηλεκτρικής σταθεράς του γραφενίου είναι:

$$\varepsilon_2 = \frac{4\pi\sigma(\omega)}{\omega d} = \frac{4\pi e^2}{4\hbar\omega d} = \frac{\pi e^2}{\hbar k c d} = \frac{a\lambda}{\hbar d}, \text{ όπου } a = \frac{e^2}{\hbar c} \text{ η σταθερά λεπτής υφής.}$$

Η σταθερά διέλευσης για το γραφένιο ανάμεσα σε δύο διαφορετικά μέσα και στο ίδιο μέσο αντίστοιχα:

$$T = \frac{4n_1 n_3}{(n_1 + n_3)^2} \left(1 - \frac{2\pi a}{n_1 + n_3} \right) \quad (1.19)$$

$$T = 1 - \frac{\pi a}{n} \quad (1.20)$$

ενώ για τον αέρα θα έχουμε:

$$T = 1 - \pi a \approx 0.977 \quad (1.21)$$

Ακολουθώντας την ίδια διαδικασία υπολογίζεται και η σταθερά της ανάκλασης R :

$$R = \frac{(n_3 - n_1 + kd\varepsilon_2)^2 + k^2 d^2 (\varepsilon_1 - n_1 n_3)^2}{(n_3 + n_1 + kd\varepsilon_2)^2 + k^2 d^2 (\varepsilon_1 + n_1 n_3)^2} \Rightarrow$$

$$R = \frac{(n_3 - n_1)^2}{(n_3 + n_1)^2} \left(1 + \frac{4kd\varepsilon_2 n_1}{(n_3 + n_1)(n_3 - n_1)} + \frac{k^2 d^2 |\varepsilon - n_1 n_3|^2}{(n_3 - n_1)^2} \right) \quad (1.22)$$

Εάν το υλικό βρίσκεται ανάμεσα σε δύο διαφορετικά μέσα, δηλαδή $n_1 \neq n_3$, υπερισχύει ο όρος kd . Εάν το υλικό βρίσκεται ανάμεσα στο ίδιο μέσα, δηλαδή $n_1 = n_3$, υπερισχύει ο όρος $k^2 d^2$.

Έτσι, για την περίπτωση γραφενίου σε αέρα $n_1 = n_3 = 1$ θα ισχύει:

$$R = \frac{k^2 d^2}{4} \left(\frac{a\lambda}{2d} - 1 \right)^2 \approx 1.3 * 10^{-4} \approx 0 \quad (1.23)$$

Τέλος, η σταθερά απορρόφησης A υπολογίζεται από την Εξ. (1.13):

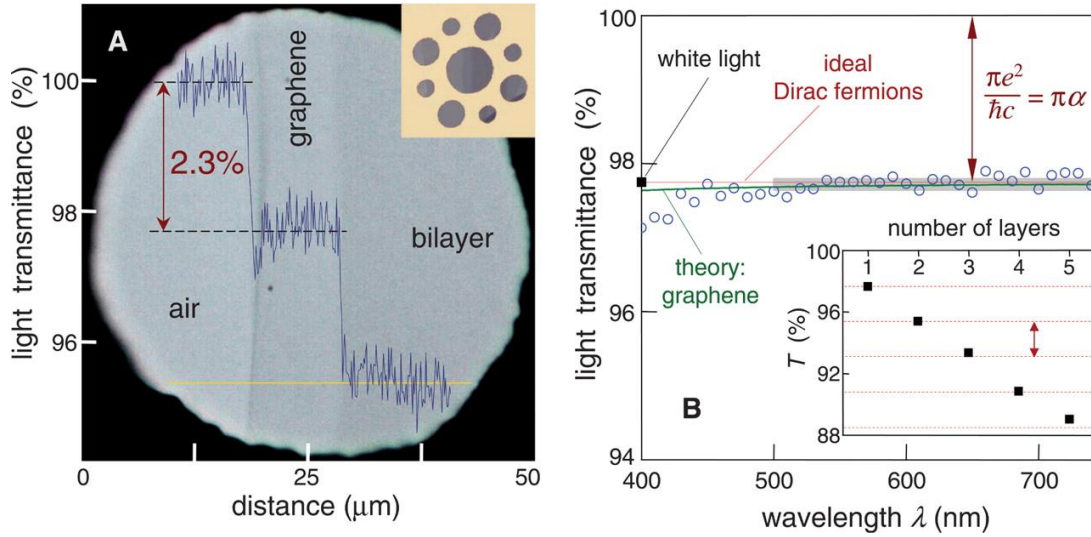
$$A = 1 - \frac{(n_3 - n_1)^2}{(n_3 + n_1)^2} \left(1 + \frac{4kd\varepsilon_2 n_1}{(n_3 + n_1)(n_3 - n_1)} \right) - \frac{4n_1 n_3}{(n_1 + n_3)^2} \left(1 - \frac{2kd\varepsilon_2}{n_1 + n_3} \right) \Rightarrow$$

$$A = \frac{4kd\varepsilon_2 n_1}{(n_3 + n_1)^2} \quad (1.24)$$

Συνδυάζοντας τα παραπάνω και μέσω της Εξ. (1.13), το ποσοστό απορρόφησης για το γραφένιο σε αέρα υπολογίζεται:

$A = 1 - R - T = 1 - (1 - \pi a) = \pi a = 2.3\%$, το οποίο είναι πολύ μεγάλο αν αναλογιστούμε το μονοατομικό του πλάτος.

Σε περίπτωση πολλαπλών επιπέδων γραφενίου η διέλευση φωτός μπορεί να υπολογιστεί μέσω της σχέσης $T = 1 - N\pi a$ όπου N ($N < 10$) ο αριθμός των επιπέδων. Υποστηρίζεται πως η χρήση λίγων επιπέδων γραφενίου καταλλήλως εμπλουτισμένων μπορεί να αντικαταστήσει το ΙΤΟ, κυρίως σε εφαρμογές ηλιακών κυττάρων και οθονών αφής νέας τεχνολογίας (Bao & Loh, 2012; Bonaccorso, Sun, Hasan, & Ferrari, 2010).



Σχήμα 1.8: Αριστερά: Η οπτική διέλευση T του γραφενίου για τρεις περιπτώσεις: (i) χωρίς γραφένιο, (ii) με μονοστρωματικό γραφένιο ($A=2.3\%$) και (iii) με διστρωματικό γραφένιο. Δεξιά: Οπτική διέλευση του μονοστρωματικού γραφενίου συναρτήσει του μήκους κύματος, για τα οπτικά μήκη. Ένθετο: Μείωση της διέλευσης με την προσθήκη φύλλων γραφενίου (Nair et al., 2008).

1.4 ΑΓΩΓΙΜΟΤΗΤΑ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ

Η οπτική απόκριση του γραφενίου μπορεί να αντληθεί από την ολοκληρωτική μορφή της Kubo φόρμουλα, δηλαδή την Εξ. (1.25), παίρνοντας υπόψη τις ενδοζωνικές (intra-) και τις διαζωνικές (inter-) μεταβάσεις των ηλεκτρονίων (Hanson, 2008). Έτσι,

$$\sigma(\omega, \mu, \Gamma, T) = \frac{je^2(\omega - j2\Gamma)}{\pi\hbar^2} \left[\frac{1}{(\omega - j2\Gamma)^2} \int_0^\infty \varepsilon \left(\frac{\partial f_d(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} - \frac{\partial f_d(-\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon - \int_0^\infty \frac{f_d(-\varepsilon) - f_d(\varepsilon)}{(\omega - j2\Gamma)^2 - 4(e/\hbar)^2} d\varepsilon \right] \quad (1.25)$$

όπου $-e$ το φορτίο του ηλεκτρονίου, μ το χημικό δυναμικό, Γ ο ρυθμός σκέδασης (scattering rate) και $f_d(\varepsilon)$ η κατανομή Fermi-Dirac που γράφεται:

$$f_d = \frac{1}{1 + e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}}} \quad (1.26)$$

όπου k_B η σταθερά του Boltzmann και T η θερμοκρασία

Ο πρώτος όρος της Εξ. (1.25) περιγράφει τις ενδοζωνικές μεταβάσεις, ενώ ο δεύτερος τις διαζωνικές μεταβάσεις στο γραφένιο (Hanson, 2008b). Θα μελετηθεί μόνο

η περίπτωση των ενδοζωνικών μεταβάσεων, διότι το ολοκλήρωμα για τις διαζωνικές μεταβάσεις λύνεται μόνο υπολογιστικά εκτός από την περίπτωση όπου ισχύει $\mu \gg kd$. Υπολογίζουμε το πρώτο ολοκλήρωμα της Εξ. (1.25):

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty \varepsilon \left(\frac{\partial f_d(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} - \frac{\partial f_d(-\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon &= \left[\int_0^\infty \varepsilon \left\{ \frac{1}{k_B T} \frac{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1 \right)^2} - \frac{1}{k_B T} \frac{e^{\frac{-\varepsilon-\mu}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{-\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1 \right)^2} \right\} d\varepsilon \right] = \\
&= \int_0^\infty \varepsilon \left[\frac{1}{k_B T} \frac{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1 \right)^2} \right] d\varepsilon - \int_0^\infty \varepsilon \left[\frac{1}{k_B T} \frac{e^{\frac{-\varepsilon-\mu}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{-\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1 \right)^2} \right] d\varepsilon = \\
&= -k_B T \ln \left(1 + e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right) - k_B T \left[-\ln \left(e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right) + \ln \left(e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right) \right] = \\
&= -k_B T \left[-\ln \left(e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right) + 2 \ln \left(e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right) \right] = -k_B T \left[\frac{\mu}{k_B T} + 2 \ln \left(e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right) \right]
\end{aligned}$$

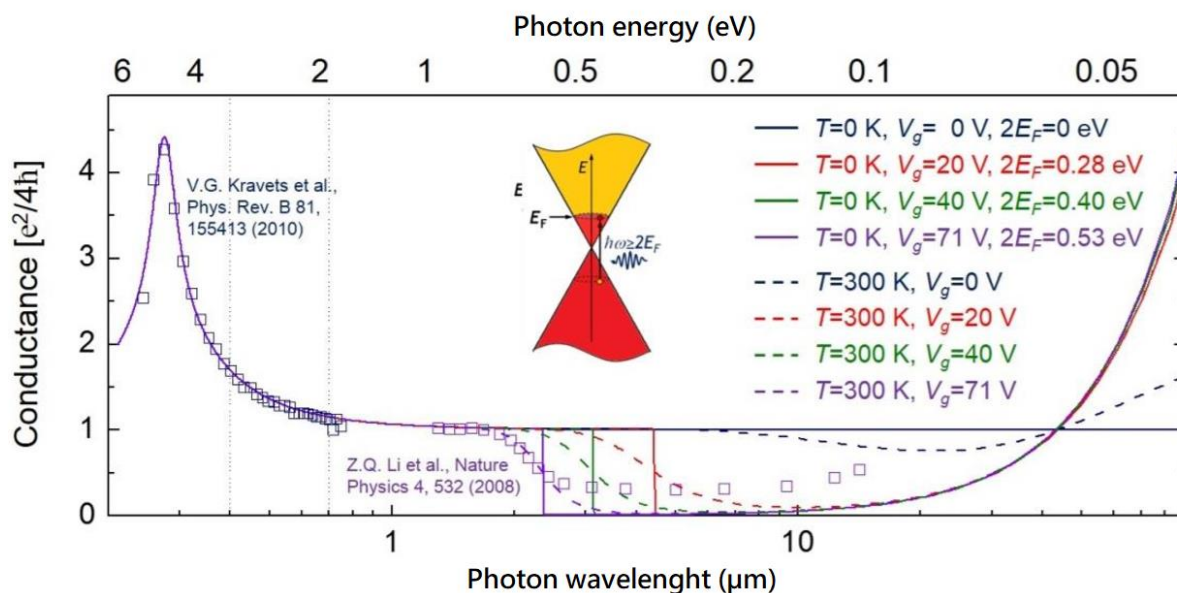
Συνολικά για τις ενδοζωνικές μεταβάσεις προκύπτει ότι:

$$\sigma_{\text{intra}}(\omega, \mu, \Gamma, T) = \frac{-je^2 k_B T}{\pi \hbar^2 (\omega - j2\Gamma)} \left(\frac{\mu}{k_B T} + 2 \ln \left(e^{\frac{\mu}{k_B T}} + 1 \right) \right) \quad (1.27)$$

Σύμφωνα με τις παραπάνω σχέσεις, οι ενδοζωνικές και οι διαζωνικές αγωγιμότητες σχετίζονται στενά με το χημικό δυναμικό του γραφενίου και τη συχνότητα του εξερχόμενου φωτός. Το χημικό δυναμικό του εμπλουτισμένου γραφενίου προσδιορίζεται από τη συγκέντρωση των φορέων του n_s , όπου:

$$n_s = \frac{2}{\pi \hbar^2 u_F^2} \int_0^\infty \varepsilon [f_d(\varepsilon) - f_d(\varepsilon + 2\mu)] d\varepsilon \quad (1.28)$$

Στην παρούσα εργασία θα ασχοληθούμε με μη εμπλουτισμένο γραφένιο (undoped graphene) όπου το χημικό δυναμικό είναι $\mu = 0$. Στο μη εμπλουτισμένο γραφένιο, λόγω της δομής των ενεργειακών ζωνών, είναι δυνατές μόνο οι διαζωνικές μεταβάσεις.

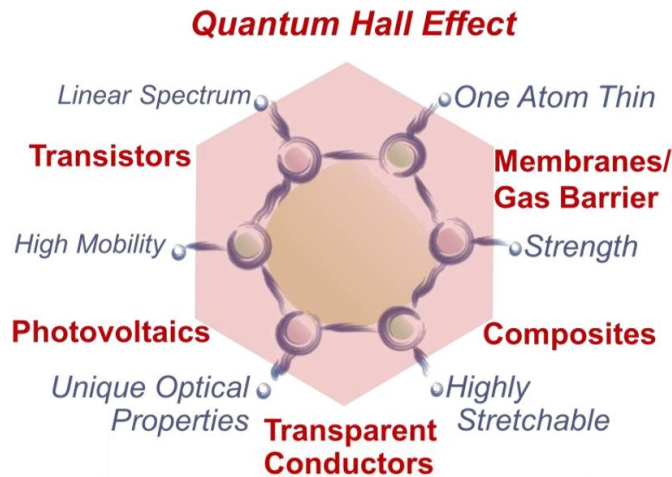


Σχήμα 1.9: Το φάσμα αγωγιμότητας του γραφενίου: (i) Van Hove μέγιστο στο υπεριώδες φάσμα, (ii) Σταθερή αγωγιμότητα στο ορατό φάσμα, (iii) Pauli blocking λόγω του εμπλουτισμού στο κοντινό υπέρυθρο, (iv) Αγωγιμότητα λόγω ελεύθερων Drude ηλεκτρονίων στο υπέρυθρο (Kravets et al., 2010; Li et al., 2008)

1.5 ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

Το πλήθος των πιθανών εφαρμογών του γραφενίου είναι μεγάλο. Αναφέροντας επιγραμματικά μερικές χαρακτηριστικές εφαρμογές του, το γραφένιο μπορεί να χρησιμοποιηθεί:

1. Για κατασκευή εύκαμπτων ηλεκτρονικών διατάξεων (βελτιωμένα τρανζίστορ)
2. Για διαχείριση σημάτων στην περιοχή συχνοτήτων των THz
3. Για την κατασκευή αγωγίμων ηλεκτροδίων και υμενίων για φωτοβολταϊκά και διατάξεις υγρών κρυστάλλων, πυκνωτών μεγάλης χωρητικότητας και μπαταριών
4. Για βελτίωση της απόδοσης των ηλιακών συλλεκτών και των φωτοβολταϊκών
5. Για την κατασκευή διάφανων αγωγίμων ηλεκτροδίων (διάφανες οθόνες αφής, οθόνες υγρών κρυστάλλων κτλ.)
6. Για ανάπτυξη σύνθετων υλικών υψηλής αντοχής
7. Για την ανίχνευση μορίων αερίων, βακτηριδίων ή και DNA
8. Για κατασκευή ανθεκτικότερων και ελαφρύτερων εξαρτημάτων στην αεροδιαστημική



Σχήμα 1.10: Οι βασικές ιδιότητες του γραφενίου και η δυνατή εκμετάλλευσή τους σε τεχνολογικές εφαρμογές

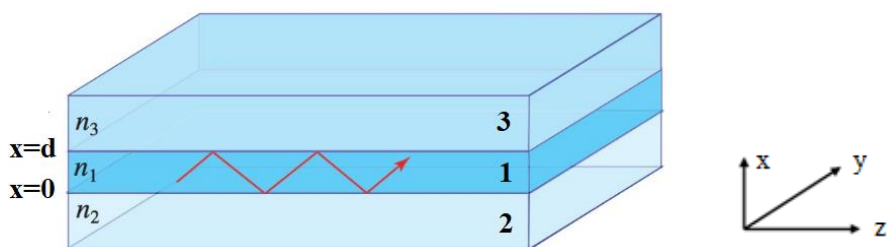
2. ΕΠΙΠΕΔΟΙ ΚΥΜΑΤΟΔΗΓΟΙ

Οι κυματοδηγοί είναι διατάξεις που χρησιμοποιούνται συνήθως για τη διάδοση ηλεκτρομαγνητικών ή ηχητικών κυμάτων. Στη συγκεκριμένη εργασία θα ασχοληθούμε με τη διάδοση ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων σε κυματοδηγούς πυριτίου (Si). Στα ολοκληρωμένα φωτονικά κυκλώματα (Photonic Integrated Circuits, PICs) γίνεται ευρεία χρήση κυματοδηγών πυριτίου για την κυματοδότηση του φωτός.

2.1 ΕΠΙΠΕΔΟΣ ΔΙΗΛΕΚΤΡΙΚΟΣ ΚΥΜΑΤΟΔΗΓΟΣ

Η διάταξη που θα μελετήσουμε ονομάζεται επίπεδος κυματοδηγός διηλεκτρικών πλακών (dielectric slab waveguide). Μέσω της διάταξης αυτής μπορούμε να προσεγγίσουμε ικανοποιητικά σε θεωρητικό επίπεδο τους επίπεδους οπτικούς κυματοδηγούς που χρησιμοποιούνται στα οπτοηλεκτρονικά συστήματα (著者 : Oleg Kononchuk & Bich-Yen Nguyen, 2014).

Η γεωμετρία της αποτελείται από τρεις περιοχές (πλάκες) διαφορετικού δείκτη διάθλασης: η περιοχή 1 με δείκτη διάθλασης n_1 και πλάτος d αποτελεί το στρώμα οδήγησης, η περιοχή 2 με δείκτη διάθλασης n_2 αποτελεί το υπόστρωμα, ενώ η περιοχή 3 με δείκτη διάθλασης n_3 αποτελεί το επίστρωμα (Σχήμα 2.1). Η διάταξη αυτή ονομάζεται ασύμμετρος κυματοδηγός πλάκας. Για λόγους που θα γίνουν προφανείς παρακάτω, για τους δείκτες διάθλασης των τριών στρωμάτων ισχύει ότι $n_1 > n_2 > n_3$. Επίσης για τη διευκόλυνση της μαθηματικής ανάλυσης που θα ακολουθήσει, θεωρούμε πως οι πλάκες εκτείνονται στο άπειρο στον άξονα y (Dietrich Marcuse & American Telephone And Telegraph Company, 1991).



Σχήμα 2.1: Επίπεδος κυματοδηγός διηλεκτρικών πλακών.

2.2 ΟΛΙΚΗ ΕΣΩΤΕΡΙΚΗ ΑΝΑΚΛΑΣΗ

Στη διάταξη αυτή, το ηλεκτρομαγνητικό κύμα μπορεί να περιοριστεί στο μεσαίο στρώμα αρκεί να πληρούνται οι προϋποθέσεις για ολική εσωτερική ανάκλαση. Έτσι, σε αρχικό στάδιο θα εξετάσουμε την κυματοδότηση του φωτός με βάση τη γεωμετρική οπτική. Στο Σχ. 2.2 απεικονίζεται η διεπιφάνεια μεταξύ δύο υλικών με δείκτες διάθλασης n_i και n_t . Σύμφωνα με το νόμο του Snell ισχύει:

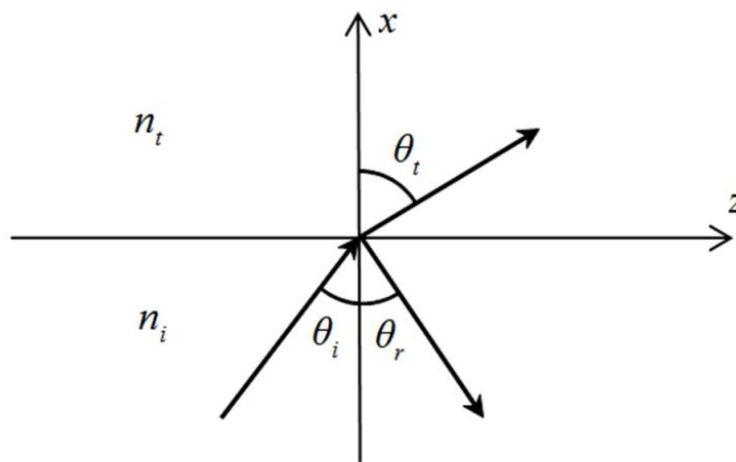
$$n_i \sin \theta_i = n_t \sin \theta_t \quad (2.1)$$

όπου θ_i η γωνία πρόσπτωσης και θ_t η γωνία ανάκλασης

Όταν η γωνία πρόσπτωσης της δέσμης φωτός αποκτήσει μια οριακή τιμή, η διαθλώμενη ακτίνα διαδίδεται παράλληλα στη διεπιφάνεια. Η γωνία αυτή ονομάζεται κρίσιμη γωνία θ_c . Ο νόμος του Snell στην περίπτωση αυτή γίνεται:

$$n_i \sin \theta_c = n_t \sin 90^\circ \Rightarrow \theta_c = \sin^{-1}(n_t / n_i) \quad (2.2)$$

Γίνεται φανερό ότι ο λόγος n_t / n_i πρέπει να είναι μικρότερος της μονάδας, δηλαδή να ισχύει $n_t < n_i$. Για το λόγο αυτό ο δείκτης διάθλασης του στρώματος κυματοδότησης του Σχ. 2.1 είναι μεγαλύτερος από τους δείκτες των επικείμενων στρωμάτων, έτσι ώστε να επιτυγχάνεται ολική εσωτερική ανάκλαση. Όταν η γωνία πρόσπτωσης θ_i γίνει μεγαλύτερη από την κρίσιμη γωνία θ_c παρατηρείται ολική ανάκλαση, δηλαδή η δέσμη ανακλάται ολικά από τη διεπιφάνεια.



Σχήμα 2.2: Σχηματική απεικόνιση του νόμου Snell.

Γενικά, ένας κυματοδηγός μπορεί να επιτρέψει τη διάδοση ορισμένων μορφών ηλεκτρομαγνητικών πεδίων. Οι μορφές αυτές ονομάζονται ρυθμοί κυματοδότησης (modes) και εξαρτώνται από τα χαρακτηριστικά του κυματοδηγού, από τη συχνότητα, τη θέση και το είδος της πηγής διέγερσης. Η κυματοδότηση με βάση τη θεωρία των modes περιλαμβάνει ένα επίπεδο κύμα, που παγιδεύεται στο στρώμα οδήγησης εξαιτίας των διαδοχικών ανακλάσεων που υφίσταται από τις διεπιφάνειες του κυματοδηγού, όπως φαίνεται και στο Σχ. 2.1. Ένα κύμα μπορεί να κυματοδηγηθεί οργανωμένα μόνο για διακριτές τιμές της γωνίας πρόσπτωσης θ_i οι οποίες παραμένουν σε φάση έτσι ώστε το ανακλώμενο επίπεδο κύμα να μη συμβάλει καταστροφικά με τον εαυτό του (Chang, 2009). Θα ορίσουμε τις τιμές αυτές με τη βοήθεια του κυματανύσματος που περιγράφει τη διάδοση του φωτός:

Το κυματόνυσμα \vec{k}_1 του Σχ. 2.3 αναλύεται σε δύο συνιστώσες που ορίζονται με βάση τη γεωμετρία ως εξής:

Η κάθετη (στη διεύθυνση διάδοσης z) συνιστώσα είναι :

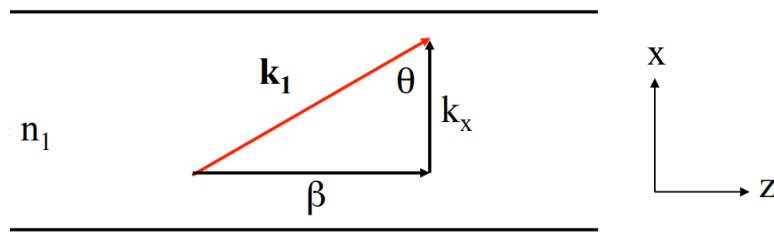
$$k_x = k_o n_1 \cos \theta_i = \frac{n_1 \omega}{c} \cos \theta_i \quad (2.3)$$

με k_o τον κυματάριθμο στον κενό χώρο

Αντίστοιχα η παράλληλη (στη διεύθυνση διάδοσης z) είναι:

$$\beta = k_o n_1 \sin \theta_i = \frac{n_1 \omega}{c} \sin \theta_i \quad (2.4)$$

όπου β η σταθερά διάδοσης



Σχήμα 2.3: Το κυματόνυσμα \vec{k}_1 και οι συνιστώσες του.

Εφόσον για τη γωνία θ_i ισχύει $\theta_c < \theta_i < 90^\circ$, η σταθερά διάδοσης β θα παίρνει αντίστοιχα τιμές $k_o n_1 \sin \theta_c < \beta < k_o n_1$. Έτσι, μέσω της Εξ. (2.4) καταλήγουμε στη συνθήκη κυματοδήγησης:

$$k_o n_2 < \beta < k_o n_1 \quad (2.5)$$

2.3 ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΗ ΕΞΙΣΩΣΗ ΕΠΙΠΕΔΟΥ ΚΥΜΑΤΟΔΗΓΟΥ

Θεωρούμε άξονα διάδοσης τον άξονα z (Σχήμα 2.1). Εφόσον ο κυματοδηγός εκτείνεται στο άπειρο στον άξονα y, όλες οι πεδιακές συνιστώσες που περιγράφουν την κυματοδήγηση θα είναι ανεξάρτητες από τη μεταβλητή y, επομένως θα ισχύει ότι $\partial/\partial y \equiv 0$.

Συνεχίζουμε να εξετάζουμε την κυματοδήγηση αλλά τώρα υπό το πρίσμα της ηλεκτρομαγνητικής θεωρίας. Έτσι, ξεκινάμε από την κυματική εξίσωση η οποία μπορεί να γραφεί:

$$\vec{\nabla}^2 \vec{E} - \mu_o \epsilon_o \epsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (2.6)$$

Θεωρούμε ότι το ηλεκτρικό πεδίο είναι βαθμωτό και είναι της μορφής $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r})e^{j\omega t}$. Η υπόθεση του βαθμωτού πεδίου μας δίνει τη δυνατότητα να απλοποιήσουμε την κυματική εξίσωση Εξ. (2.6) ως εξής :

$$\nabla^2 \vec{E} + k_o^2 n^2 \vec{E} = 0 \quad (2.7)$$

Η Εξ. (2.7) είναι η εξίσωση Helmholtz για μονοχρωματικά κύματα. Με τη βοήθεια αυτής της εξίσωσης μπορούμε να μελετήσουμε την κυματοδότηση σε διάφορες γεωμετρίες (Γερολυμάτος, 2012). Η αντίστοιχη εξίσωση για το μαγνητικό πεδίο είναι:

$$\nabla^2 \vec{H} + k_o^2 n^2 \vec{H} = 0 \quad (2.8)$$

Η λύση για τις Εξ. (2.7) και Εξ. (2.8) είναι ένα στάσιμο κύμα κατά μήκος του άξονα x, διαδιδόμενο κατά τη διεύθυνση του άξονα z. Συνεπώς για το ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο θα ισχύει αντίστοιχα:

$$\vec{E}(x, z) = \vec{E}(x)e^{j(\omega t - \beta z)} \quad (2.9)$$

$$\vec{H}(x, z) = \vec{H}(x)e^{j(\omega t - \beta z)} \quad (2.10)$$

όπου $\vec{E}(x)$, $\vec{H}(x)$ η κατανομή του ηλεκτρικού και του μαγνητικού πεδίου αντίστοιχα κατά μήκος του άξονα x.

Για να προσδιορίσουμε πλήρως το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο θα αντικαταστήσουμε τις Εξ. (2.9) και Εξ. (2.10) στις εξισώσεις στροβιλισμού του Maxwell:

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\mu_o \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad (2.11)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \epsilon_o \epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (2.12)$$

Στους υπολογισμούς μας θα λάβουμε υπόψη ότι $\frac{\partial \vec{E}}{\partial y} = 0$ και $\frac{\partial \vec{H}}{\partial y} = 0$. Μετά από πράξεις και απαλείφοντας τους κοινούς εκθετικούς όρους που προκύπτουν, καταλήγουμε στις εξής σχέσεις:

$$H_x = -\frac{\beta}{\omega \mu_o} E_y \quad (2.13)$$

$$H_z = -\frac{j}{\omega \mu_o} \frac{\partial E_y}{\partial x} \quad (2.14)$$

$$j\beta H_x - \frac{\partial H_z}{\partial x} = -j\omega \epsilon_o n^2 E_y \quad (2.15)$$

$$E_x = \frac{\beta}{\omega \epsilon_o n^2} H_y \quad (2.16)$$

$$E_z = \frac{j}{\omega \epsilon n^2} \frac{\partial H_y}{\partial x} \quad (2.17)$$

$$j\beta E_x - \frac{\partial E_z}{\partial x} = j\omega \mu_o H_y \quad (2.18)$$

Είναι εύκολο να διαπιστωθεί πως το παραπάνω σύνολο γραμμικά ανεξάρτητων εξισώσεων Εξ. (2.13)- Εξ. (2.18) αποτελείται από δύο υποσύνολα εξισώσεων που ορίζουν δύο διαφορετικούς ρυθμούς (modes). Το πρώτο σύστημα Εξ. (2.13)- Εξ. (2.15) ορίζει τα TE (Transverse Electric) modes όπου οι μη μηδενικές συνιστώσες είναι οι E_y , H_x και H_z . Αντίστοιχα το δεύτερο σύστημα Εξ. (2.16)- Εξ. (2.18) ορίζει τα TM (Transverse Magnetic) modes όπου οι μη μηδενικές συνιστώσες είναι οι H_y , E_x και E_z . Στην TE πόλωση το ηλεκτρικό πεδίο είναι κάθετο στον άξονα διάδοσης και δεν έχει συνιστώσα κατά τη διεύθυνση διάδοσης, ενώ αντίστοιχα στην TM πόλωση το μαγνητικό πεδίο είναι κάθετο στη διεύθυνση διάδοσης και δεν έχει συνιστώσα κατά τη διεύθυνση διάδοσης.

Αντικαθιστώντας τις Εξ. (2.13) και Εξ. (2.14) στην Εξ. (2.15), προκύπτει η εξής διαφορική εξίσωση για τα TE modes:

$$\frac{\partial^2 \vec{E}(x)}{\partial x^2} + (k_o^2 n^2 - \beta^2) \vec{E}(x) = 0 \quad (2.19)$$

Ομοίως, αντικαθιστώντας τις Εξ. (2.16) και Εξ. (2.17) στην Εξ. (2.18) για τα TM modes προκύπτει:

$$\frac{\partial^2 \vec{H}(x)}{\partial x^2} + (k_o^2 n^2 - \beta^2) \vec{H}(x) = 0 \quad (2.20)$$

Στην παρούσα εργασία θα ασχοληθούμε με τα TE modes. Οι λύσεις της Εξ. (2.19) είναι εκθετικές εάν ισχύει $k_o^2 n^2 - \beta^2 < 0$ και περιοδικές εάν ισχύει $k_o^2 n^2 - \beta^2 > 0$. Στο σημείο αυτό πρέπει να σημειωθεί πως η σταθερά διάδοσης β είναι κοινή και για τις τρεις περιοχές.

Στην περιοχή 1 αναμένονται αρμονικές λύσεις, καθώς είναι η περιοχή της κυματοδότησης. Έτσι, η εξίσωση γράφεται (Γερολυμάτος, 2012):

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + \kappa^2 E_y = 0 \quad 0 \geq x \geq d \quad \text{με} \quad \kappa^2 = k_o^2 n_1^2 - \beta^2 \quad (2.21)$$

Στις περιοχές 2 και 3 αναμένονται εκθετικά μειούμενες λύσεις. Έτσι η εξίσωση γράφεται αντίστοιχα:

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + \gamma^2 E_y = 0 \quad x \leq 0 \quad \text{με } \gamma^2 = \beta^2 - k_o^2 n_2^2 \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + \delta^2 E_y = 0 \quad x \geq d \quad \text{με } \delta^2 = \beta^2 - k_o^2 n_3^2 \quad (2.23)$$

Ισχύει ότι $\kappa, \gamma, \delta > 0$

Υποθέτουμε τις εξής δοκιμαστικές λύσεις:

$$E_y = \begin{cases} A \cos(\kappa x - \varphi) & 0 \geq x \geq d \\ B e^{\gamma x} & x \leq 0 \\ C e^{[-\delta(x-d)]} & x \geq d \end{cases} \quad (2.24)$$

$$(2.25)$$

$$(2.26)$$

Για να προσδιοριστούν οι σταθερές A, B, C και φ θα εφαρμόσουμε τις οριακές συνθήκες στις διεπιφάνειες, δηλαδή στα $x=0$ και $x=d$. Συγκεκριμένα, θα πρέπει να ισχύει η συνέχεια των εφαπτομενικών συνιστωσών του ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου που είναι αντίστοιχα οι E_y και H_z . Γίνεται εύκολα αντιληπτό το ότι λόγω της

Εξ. (2.14) ισχύει $H_z \propto \frac{\partial E_y}{\partial x}$. Συνεπώς, αρκεί η εφαρμογή της συνθήκης συνέχειας για

τα E_y και $\frac{dE_y}{dx}$. Από τη συνέχεια στο $x=0$ προκύπτει:

$$B = A \cos(\varphi) \quad (2.27)$$

$$\gamma B = \kappa A \sin(\varphi) \quad (2.28)$$

Διαιρώντας τις Εξ. (2.27) και Εξ. (2.28) κατά μέλη προκύπτει ότι:

$$\tan(\varphi) = \frac{\gamma}{\kappa} \quad (2.29)$$

Αντίστοιχα για τη συνέχεια των E_y και $\frac{dE_y}{dx}$ στο $x=d$ προκύπτει:

$$C = A \cos(\kappa d - \varphi) \quad (2.30)$$

$$-\delta C = -\kappa A \sin(\kappa d - \varphi) \quad (2.31)$$

Διαιρώντας τις Εξ. (2.30) και Εξ. (2.31) κατά μέλη προκύπτει ότι:

$$\tan(\kappa d - \varphi) = \frac{\delta}{\kappa} \quad (2.32)$$

Κάνοντας χρήση της τριγωνομετρικής ταυτότητας $\tan(a - b) = \frac{\tan a - \tan b}{1 - \tan a \cdot \tan b}$ και μέσω

της Εξ. (2.29), η Εξ.(2.32) διαμορφώνεται ως εξής:

$$\tan(\kappa d) = \frac{\kappa(\gamma + \delta)}{\kappa^2 - \gamma\delta} \quad (2.33)$$

Η Εξ. (2.33) λύνεται γραφικά και αποτελεί την εξίσωση ιδιοτιμών του κυματοδηγού ή αλλιώς τη χαρακτηριστική του εξίσωση. Οι λύσεις που επιδέχεται είναι διακριτές τιμές του β καθώς οι παράμετροι κ, γ και δ ορίζονται συναρτήσει της σταθεράς διάδοσης β . Σε κάθε mode αντιστοιχεί μία σταθερά διάδοσης β .

Για την περαιτέρω απλοποίηση της ανάλυσής μας, θα εξετάσουμε την περίπτωση των συμμετρικών κυματοδηγών για τους οποίους ισχύει ότι $n_2 = n_3$. Οι συγκεκριμένοι κυματοδηγοί μπορούν να υποστηρίξουν μόνο συμμετρικούς και αντισυμμετρικούς ρυθμούς. Εφόσον ισχύει πλέον ότι $\gamma = \delta$ η Εξ. (2.33) απλοποιείται:

$$\tan(\kappa d) = \frac{2\gamma / \kappa}{1 - (\gamma / \kappa)^2} \quad (2.34)$$

Διακρίνουμε δύο περιπτώσεις:

$$\tan\left(\frac{\kappa d}{2}\right) = \frac{\gamma}{\kappa} \quad \text{σνημιτονοειδείς λύσεις-συμμετρικά TE modes} \quad (2.35)$$

$$\tan\left(\frac{\kappa d}{2}\right) = -\frac{\kappa}{\gamma} \quad \text{ημιτονοειδείς λύσεις-αντισυμμετρικά TM modes} \quad (2.36)$$

2.4 ΣΥΝΘΗΚΗ ΑΠΟΚΟΠΗΣ

Οι τιμές της σταθεράς διάδοσης β που προκύπτουν επιλύοντας τις Εξ. (2.35) και Εξ. (2.36) θα πρέπει να ικανοποιούν τη συνθήκη κυματοδήγησης της Εξ. (2.5). Στην οριακή περιπτώσή της όπου $\beta \rightarrow n_2 k$ και κατά συνέπεια $\gamma \rightarrow 0$ θεωρούμε ότι το mode δεν είναι εντοπισμένο στον κυματοδηγό (Ginés Lifante, 2003). Η συνθήκη αυτή ονομάζεται συνθήκη αποκοπής (cut-off condition) και αποτελεί το κατώτατο όριο που μπορεί να εμφανιστεί ένα mode.

Για τους συμμετρικούς ρυθμούς και μέσω της Εξ. (2.35) προκύπτει:

$$\tan(\kappa d / 2)_{cut-off} \rightarrow 0 \Rightarrow (\kappa d / 2)_{cut-off} \rightarrow m\pi, \quad m = 0, 1, 2.. \quad (2.37)$$

Αντίστοιχα για τους αντισυμμετρικούς ρυθμούς και μέσω της Εξ. (2.36) προκύπτει:

$$\tan(\kappa d / 2)_{cut-off} \rightarrow \infty \Rightarrow (\kappa d / 2)_{cut-off} \rightarrow (m + 1/2)\pi, \quad m = 0, 1, 2.. \quad (2.38)$$

Οι δύο αυτές σχέσεις μπορούν να συμπυκνωθούν στην εξής σχέση η οποία περιγράφει τη συνθήκη αποκοπής για όλα τα modes ενός συμμετρικού κυματοδηγού:

$$(\kappa d / 2)_{cut-off} \rightarrow m\pi / 2, \quad m = 0, 1, 2.. \quad (2.39)$$

Στις παραπάνω σχέσεις με m συμβολίζεται η τάξη του mode.

Γνωρίζουμε ότι ισχύει $\kappa = \sqrt{k_o^2 n_1^2 - \beta^2}$ λόγω της Εξ. (2.21). Επίσης η συνθήκη αποκοπής ορίζει ότι $\beta = k_o n_2$. Συνδυάζοντας τα παραπάνω προκύπτει μια χρήσιμη μορφή της (2.39):

$$\kappa_{cut-off} = k_o \sqrt{n_1^2 - n_2^2} \quad (2.40)$$

Με συνδυασμό των Εξ. (2.39) και Εξ. (2.40) λαμβάνουμε τη σχέση:

$$V \equiv \frac{1}{2} k_o d \sqrt{n_1^2 - n_2^2} = m\pi / 2 \quad (2.41)$$

Έτσι προέκυψε η κανονικοποιημένη συχνότητα V , που είναι αδιάστατο μέγεθος. Η συχνότητα αυτή περιγράφει τον αριθμό των modes που μπορεί να υποστηρίξει ο κυματοδηγός. Θέτοντας στην Εξ. (2.41) $m = 0$, γίνεται φανερό πως το mode με τη χαμηλότερη τάξη, δηλαδή το TE_o mode, υποστηρίζεται σε οποιαδήποτε συχνότητα καθώς για έχουμε:

$$\frac{1}{2} k_o d \sqrt{n_1^2 - n_2^2} = 0 \quad (2.42)$$

Από τη οποία συνεπάγεται ότι $k_o \rightarrow 0$ καθώς για τους δείκτες διάθλασης ισχύει ότι $n_1 \neq n_2$ και για το πλάτος d είναι πεπερασμένο. Έτσι για το θεμελιώδες (fundamental) TE mode σε συμμετρικό κυματοδηγό η συχνότητα αποκοπής τείνει στο μηδέν.

2.5 ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΦΑΣΗΣ, ΕΝΕΡΓΟΣ ΔΕΙΚΤΗΣ ΔΙΑΘΛΑΣΗΣ ΚΑΙ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ ΔΙΑΣΠΟΡΑΣ

Η διάδοση των ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων περιγράφεται από δύο ταχύτητες: την ταχύτητα φάσης u_{ph} (phase velocity) και την ταχύτητα ομάδας u_G (group velocity). Η ταχύτητα φάσης αποτελεί την ταχύτητα με την οποία διαδίδεται ένα μέτωπο του κύματος σταθερής φάσης. Στην περίπτωση ενός mode που κυματοδηγείται ορίζεται ως:

$$u_{ph,m} = \frac{\omega}{\beta_m} \quad (2.43)$$

Όπου β_m η σταθερά διάδοσης ενός ρυθμού τάξης m

Η ταχύτητα ομάδας u_G , αποτελεί την ταχύτητα με την οποία μεταφέρεται η ηλεκτρομαγνητική ενέργεια και ορίζεται ως:

$$u_{G,m} = \frac{d\omega}{d\beta_m} \quad (2.44)$$

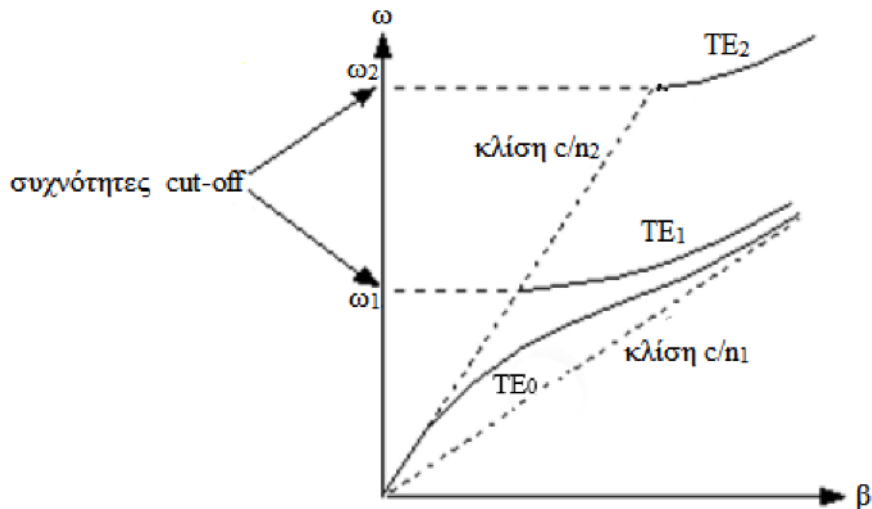
Εφόσον η ταχύτητα φάσης εξαρτάται από τη συχνότητα αλλά και την τάξη του εκάστοτε ρυθμού, ο κυματοδηγός παρουσιάζει διασπορά. Θα ορίσουμε τώρα τον ενεργό δείκτη διάθλασης (effective refractive index):

$$n_{eff,m} = \frac{c}{u_{ph,m}} \quad (2.45)$$

Ο ενεργός δείκτης διάθλασης αποτελεί το δείκτη διάθλασης που “βλέπει” ένα mode λόγω γεωμετρίας κυματοδηγού. Μια χρήσιμη σχέση που προκύπτει εάν συνδυάσουμε τις σχέσεις είναι η εξής:

$$\beta_m = \frac{\omega}{c} n_{eff,m} = k n_{eff,m} = \frac{2\pi}{\lambda_o} n_{eff,m} \quad (2.46)$$

Η σχέση μεταξύ σταθεράς διάδοσης β και κυκλικής συχνότητας ω αποτυπώνεται γραφικά μέσω του διαγράμματος διασποράς (dispersion diagram), όπως φαίνεται και στο Σχ. 2.4.



Σχήμα 2.4: Διάγραμμα διασποράς συμμετρικού κυματοδηγού διηλεκτρικής πλάκας.

Στο διάγραμμα αυτό απεικονίζονται οι ρυθμοί των τριών πρώτων τάξεων ($m=0,1,2$) οι οποίοι βρίσκονται ανάμεσα από δύο ευθείες με κλίση c/n_1 και c/n_2 . Ο θεμελιώδης TE ρυθμός υποστηρίζεται ακόμα και σε μηδενική συχνότητα. Οι δύο επόμενοι εμφανίζονται σε συχνότητες ω_1 και ω_2 αντίστοιχα. Με το διάγραμμα διασποράς θα ασχοληθούμε και σε επόμενο κεφάλαιο.

3. ΜΕΘΟΔΟΣ FDTD

Η μέθοδος FDTD (Finite Difference Time Domain Method) αποτελεί ένα από τα ισχυρότερα εργαλεία της υπολογιστικής ηλεκτροδυναμικής, καθώς δίνει τη δυνατότητα της αριθμητικής επίλυσης των εξισώσεων Maxwell στο πεδίο του χρόνου. Έχει τη δυνατότητα να εξετάσει μία διάταξη για ένα μεγάλο εύρος συχνοτήτων με μία μόνο προσομοίωση. Επίσης μπορεί να προσομοιώσει με επιτυχία οποιαδήποτε γεωμετρία τριών διαστάσεων και να μοντελοποιήσει οποιαδήποτε υλικά εμπεριέχονται σε αυτή χρησιμοποιώντας τη διηλεκτρική τους συνάρτηση.

Για την υλοποίηση της μεθόδου FDTD χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος leap frog, που έχει ως βασική αρχή το χωρισμό του χώρου και του χρόνου σε διακριτά, πεπερασμένου αριθμού τμήματα (Taflove & Hagness, 2005; Stephen Douglas Gedney, 2011). Συγκεκριμένα, η συνιστώσα του ηλεκτρικού πεδίου υπολογίζεται σε ακέραια

πολλαπλάσια του χρονικού και χωρικού βήματος, ενώ η συνιστώσα του μαγνητικού πεδίου υπολογίζεται χρονικά και χωρικά ενδιάμεσα στις συνιστώσες του ηλεκτρικού πεδίου.

Το 1966 ο Kane Yee πρότεινε έναν αλγόριθμο ο οποίος επιλύει τις συζευγμένες εξισώσεις στροβιλισμού των πεδίων του Maxwell χρησιμοποιώντας τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών (Kane Yee, 1966). Οι εξισώσεις αυτές μπορούν να γραφούν:

$$\nabla \times \vec{E} = -\mu \partial_t \vec{H} \quad (3.1)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \varepsilon_o \varepsilon_\infty \partial_t \vec{E} + \partial_t \vec{P}_o + \sum_{j_N=1}^N \partial_t \vec{P}_{j_N} \quad (3.2)$$

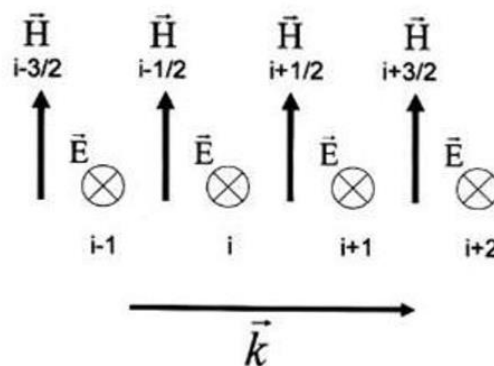
όπου η πόλωση του κάθε υλικού λαμβάνεται υπόψη μέσω της πόλωσης των ελεύθερων ηλεκτρονίων \vec{P}_o , σύμφωνα με το μοντέλο του Drude και μέσω του αθροίσματος των N πολώσεων \vec{P}_{j_N} των δέσμιων ηλεκτρονίων, σύμφωνα με το μοντέλο του Lorentz. Κάθε μία από αυτές τις δύο συνεισφορές περιγράφεται με μία διαφορική εξίσωση αντίστοιχα:

$$\partial_t^2 \vec{P}_o + \gamma \partial_t \vec{P}_o = \omega_p^2 \varepsilon_o \vec{E} \quad (3.3)$$

$$\partial_t^2 \vec{P}_{j_N} + \Gamma_{j_N} \partial_t \vec{P}_{j_N} + \Omega_{j_N}^2 \vec{P}_{j_N} = \Delta \varepsilon_{j_N} \Omega_{j_N}^2 \varepsilon_o \vec{E} \quad (3.4)$$

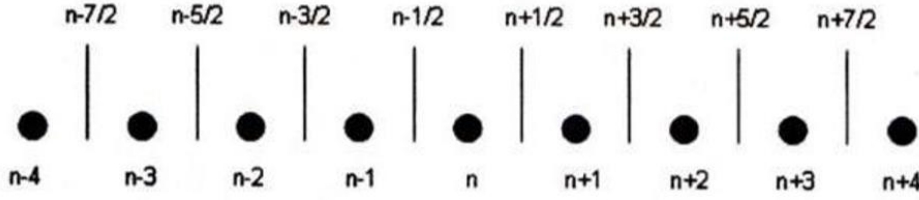
Οι Εξ. (3.3) και Εξ. (3.4) αποτελούν το μοντέλο Drude-Lorentz μέσω του οποίου μπορούμε να εισάγουμε στη μέθοδο την απόκριση ενός υλικού στην Η/Μ ακτινοβολία.

Για να κατανοήσουμε την μέθοδο FDTD θα εξετάσουμε πρώτα την απλή περίπτωση ενός μονοδιάστατου συστήματος. Στο Σχ. 3.1 φαίνονται οι συνιστώσες των πεδίων τοποθετημένες στον χώρο. Στα σημεία ..., $i-1, i+1, \dots$ τοποθετείται το ηλεκτρικό πεδίο και στα σημεία ..., $i-1/2, i+1/2, \dots$ τοποθετείται το μαγνητικό πεδίο.



Σχήμα 3.1: Διακριτοποίηση των πεδίων στο χώρο σε ένα μονοδιάστατο πλέγμα Yee.

Με τον ίδιο τρόπο γίνεται και η διακριτοποίηση του χρόνου όπως φαίνεται στο Σχ. 3.2.



Σχήμα 3.2: Διακριτοποίηση των πεδίων στο χρόνο σε ένα μονοδιάστατο πλέγμα Yee.

Υποθέτουμε ότι η πόλωση του ηλεκτρικού πεδίου κατά τη διεύθυνση z και του μαγνητικού πεδίου κατά τη διεύθυνση y. Λαμβάνοντας υπόψη τα παραπάνω οι Εξ. (3.1) και Εξ. (3.2) γίνονται :

$$\varepsilon_o \varepsilon_\infty \frac{\partial E_z}{\partial t} + \sum_{j_N=0}^N \frac{\partial P_{j_N}}{\partial t} = (\nabla \times H)_z \Rightarrow \varepsilon_o \varepsilon_\infty \frac{\partial E_z}{\partial t} + \sum_{j_N=0}^N \frac{\partial P_{j_N}}{\partial t} = \frac{\partial H_y}{\partial x} \quad (3.5)$$

$$-\mu \frac{\partial H_y}{\partial x} = (\nabla \times E)_y \Rightarrow -\mu \frac{\partial H_y}{\partial x} = \frac{\partial E_z}{\partial x} \quad (3.6)$$

Γνωρίζοντας το ηλεκτρικό πεδίο σε όλα τα σημεία στο χώρο (*i*) για μια δεδομένη χρονική στιγμή (*n*), το μαγνητικό πεδίο τη χρονική στιγμή *n*−1/2 και την πόλωση τις χρονικές στιγμές *n* και *n*−1, μέσω της Εξ. (3.3), υπολογίζουμε την πόλωση για τη χρονική στιγμή *n*+1 χρησιμοποιώντας τις κεντρικές διαφορές:

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

$$P_i^{n+1} = \frac{4P_i^n - 2P_i^{n-1} + \Delta t \gamma P_i^{n-1} + 2\Delta t^2 (\varepsilon_o \omega_p^2 E_i^n - \omega_o^2 P_i^n)}{2\gamma \Delta t} \quad (3.7)$$

Ακολουθούμε την ίδια ακριβώς διαδικασία για τις υπόλοιπες N πολώσεις του μοντέλου Lorentz. Στη συνέχεια βρίσκουμε το ηλεκτρικό πεδίο την χρονική στιγμή *n*+1 μέσω της Εξ. (3.6):

$$E_i^{n+1} = E_i^n - \frac{1}{\varepsilon_o \varepsilon_\infty} \sum_{j_N=0}^N (P_{ij_N}^{n+1} - P_{ij_N}^n) - \frac{\Delta t}{\Delta x} \varepsilon_o \varepsilon_\infty (H_{i+1/2}^{n+1/2} - H_{i-1/2}^{n+1/2}) \quad (3.8)$$

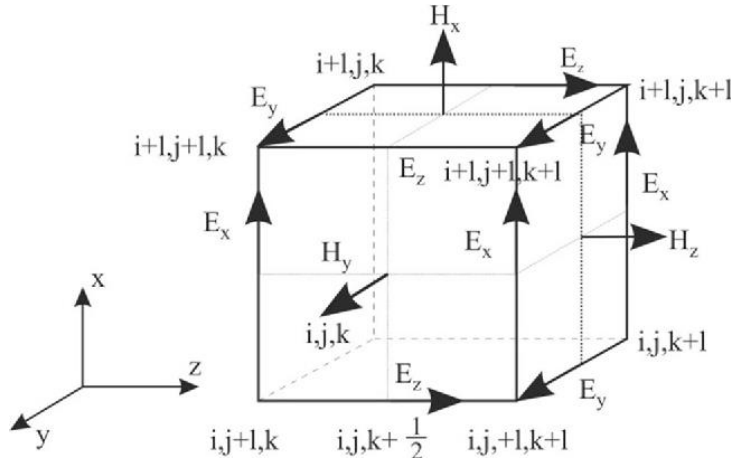
Με τον ίδιο τρόπο δίνεται το μαγνητικό πεδίο τη χρονική στιγμή *n*+3/2 μέσω της Εξ. (3.5):

$$H_{i+1/2}^{n+3/2} = H_{i+1/2}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{\mu \Delta x} (E_{i+1}^{n+1/2} - E_i^{n+1/2}) \quad (3.9)$$

Για να αποφευχθεί η αριθμητική αστάθεια του αλγορίθμου, θέτουμε ένα άνω όριο για το χρονικό βήμα Δt που καθορίζεται από τη λεγόμενη συνθήκη ευστάθειας Dourant :

$$\Delta t \leq \frac{1}{c \sqrt{\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} + \frac{1}{(\Delta z)^2}}} \quad (3.10)$$

Στην περίπτωση ενός τρισδιάστατου συστήματος οι συνιστώσες του ηλεκτρικού πεδίου εντοπίζονται στις ακμές του κελιού Yee, ενώ οι συνιστώσες του μαγνητικού πεδίου τοποθετούνται στις πλευρές του όπως φαίνεται και στο Σχ. 3.3. Οι συνιστώσες που προκύπτουν για τα πεδία αποτελούν ένα σύστημα έξι γραμμικών εξισώσεων (Bellas, 2015).



Σχήμα 3.3: Απεικόνιση ενός τρισδιάστατου κελιού Yee με την κατανομή των συνιστωσών του ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου (Akinsunmade, Karczewski, Mazurkiewicz, & Tomecka-Suchoń, 2019).

Η εξίσωση για την πόλωση θα είναι:

$$P_{x,y,z} \Big|_{i,j,k}^{n+1} = \frac{4P_{x,y,z} \Big|_{i,j,k}^n + 2P_{x,y,z} \Big|_{i,j,k}^{n-1} + \gamma \Delta t P_{x,y,z} \Big|_{i,j,k}^{n-1} + 2\Delta t^2 \left(\varepsilon_o \omega_p^2 P_{x,y,z} \Big|_{i,j,k}^n - \omega_o^2 P_{x,y,z} \Big|_{i,j,k}^n \right)}{2 + \gamma \Delta t} \quad (3.11)$$

Οι συνιστώσες του ηλεκτρικού πεδίου γράφονται:

$$\begin{aligned}
E_x|_{i,j,k}^n &= E_x|_{i,j,k}^n - \frac{1}{\varepsilon_\infty \varepsilon_{i,j,k}} \sum_{j_N=0}^N \left(P_{x j_N}|_{i,j,k}^{n+1} - P_{x j_N}|_{i,j,k}^{n-1} \right) - \frac{\Delta t}{\varepsilon_\infty \varepsilon_{i,j,k}} \left(\frac{H_z|_{i,j+1/2,k}^{n+1/2} - H_z|_{i,j-1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta y} - \frac{H_y|_{i,j,k+1/2}^{n+1/2} - H_y|_{i,j,k-1/2}^{n+1/2}}{\Delta z} \right) \\
E_y|_{i,j,k}^{n+1} &= E_y|_{i,j,k}^n - \frac{1}{\varepsilon_\infty \varepsilon_{i,j,k}} \sum_{j_N=0}^N \left(P_{y j_N}|_{i,j,k}^{n+1} - P_{y j_N}|_{i,j,k}^{n-1} \right) - \frac{\Delta t}{\varepsilon_\infty \varepsilon_{i,j,k}} \left(\frac{H_x|_{i,j,k+1/2}^{n+1/2} - H_x|_{i,j,k-1/2}^{n+1/2}}{\Delta z} - \frac{H_z|_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} - H_z|_{i-1/2,j,k}^{n+1/2}}{\Delta x} \right) \\
E_z|_{i,j,k}^{n+1} &= E_z|_{i,j,k}^n - \frac{1}{\varepsilon_\infty \varepsilon_{i,j,k}} \sum_{j_N=0}^N \left(P_{z j_N}|_{i,j,k}^{n+1} - P_{z j_N}|_{i,j,k}^{n-1} \right) - \frac{\Delta t}{\varepsilon_\infty \varepsilon_{i,j,k}} \left(\frac{H_y|_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} - H_y|_{i-1/2,j,k}^{n+1/2}}{\Delta x} - \frac{H_z|_{i,j+1/2,k}^{n+1/2} - H_z|_{i,j-1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta y} \right)
\end{aligned}
\tag{3.12}$$

Αντίστοιχα οι συνιστώσες για το μαγνητικό πεδίο:

$$\begin{aligned}
H_x|_{i,j,k}^{n+3/2} &= H_x|_{i,j,k}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{\mu_{i,j,k}} \left(\frac{E_y|_{i,j,k+1/2}^{n+1} - E_y|_{i,j,k-1/2}^{n+1}}{\Delta z} - \frac{E_z|_{i,j+1/2,k}^{n+1} - E_z|_{i,j-1/2,k}^{n+1}}{\Delta y} \right) \\
H_y|_{i,j,k}^{n+3/2} &= H_y|_{i,j,k}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{\mu_{i,j,k}} \left(\frac{E_z|_{i+1/2,j,k}^{n+1} - E_z|_{i-1/2,j,k}^{n+1}}{\Delta x} - \frac{E_x|_{i,j,k+1/2}^{n+1} - E_x|_{i,j,k-1/2}^{n+1}}{\Delta z} \right) \\
H_z|_{i,j,k}^{n+3/2} &= H_z|_{i,j,k}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{\mu_{i,j,k}} \left(\frac{E_x|_{i,j+1/2,k}^{n+1} - E_x|_{i,j-1/2,k}^{n+1}}{\Delta y} - \frac{E_y|_{i+1/2,j,k}^{n+1} - E_y|_{i-1/2,j,k}^{n+1}}{\Delta x} \right)
\end{aligned}
\tag{3.13}$$

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 :

$$\vec{E}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} \vec{E}(t) dt \tag{3.14}$$

$$\vec{H}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} \vec{H}(t) dt \tag{3.15}$$

$$\vec{P}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} \vec{P}(t) dt \tag{3.16}$$

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

$$F = \int \vec{S} dA = \int \frac{c}{8\pi} (\vec{E}(\omega) \times \vec{H}^*(\omega)) dA \quad (3.17)$$

Με τη βοήθεια της τελευταίας μπορούμε να υπολογίσουμε την ανακλαστικότητα R , τη διέλευση T και την απορρόφηση A μέσα από μία δοσμένη επιφάνεια της διάταξης μας για κάθε συχνότητα.

Ένα ουσιαστικό πρόβλημα που παρουσίαζε αρχικά η αριθμητική αυτή τεχνική ήταν ο τερματισμός του υπολογιστικού χώρου καθώς κάθε υπολογιστικό κελί είναι πεπερασμένο σε μέγεθος. Σε αυτό το σημείο οι Εξ. (3.7)- Εξ. (3.9) δε μπορούν να πάρουν κάποια τιμή για μια συνιστώσα πεδίου η οποία βρίσκεται εκτός του υπολογιστικού κελιού. Θα μπορούσαμε λοιπόν να θέσουμε όλες τις συνιστώσες των δύο πεδίων ίσες με μηδέν, όπως σε έναν τέλειο αγωγό. Αυτό ωστόσο θα οδηγούσε στην ανάκλαση των πεδίων, το οποίο δεν είναι επιθυμητό κατά την προσομοίωση μία περιοδικής διάταξης. Είναι επομένως απαραίτητο να δημιουργήσουμε ένα στρώμα το οποίο θα απορροφά όλη την προσπίπτουσα ακτινοβολία.

Έχουν γίνει πολλές προσπάθειες υλοποίησης ενός τέτοιου απορροφητικού στρώματος (Taflove & Hagness, 2005; Kane Yee, 1966; Inan & Marshall, 2011). Η δυσκολία έγκειται στην κατασκευή ενός στρώματος το οποίο θα απορροφά σε όλες τις συχνότητες και για όλες τις γωνίες πρόσπτωσης. Το 1994 ο Bérenger έδωσε λύση το πρόβλημα χωρίζοντας κάθε συνιστώσα των πεδίων στις εξισώσεις Maxwell σε δύο μέρη ορθογώνια μεταξύ τους. Στην συνέχεια, διαλέγοντας διαφορετική τιμή για την αγωγιμότητα σε κάθε κατεύθυνση, κατέληξε σε ένα σύστημα 12 συζευγμένων διαφορικών εξισώσεων. Έτσι, διαλέγοντας κατάλληλες τιμές για την αγωγιμότητα, δημιούργησε ένα απορροφητικό στρώμα το οποίο μείωσε καθοριστικά το σφάλμα λόγω ανάκλασης. Η μέθοδος αυτή (Perfectly Matched Layer – PML) χρησιμοποιείται ευρέως στην υλοποίηση ενός λογισμικού FDTD (Berenger, 1994).

4.ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΕΝΟΥ ΦΩΤΟΑΝΙΧΝΕΥΤΗ ΜΕ ΒΑΣΗ ΤΟ ΓΡΑΦΕΝΙΟ

4.1 ΦΩΤΟΑΝΙΧΝΕΥΤΕΣ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ ΚΑΙ ΦΩΤΟΘΕΡΜΟΗΛΕΚΤΡΙΚΟ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ

Οι φωτοανιχνευτές (photodetectors) είναι συσκευές που ανιχνεύουν και μετρούν την ένταση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας ενός συγκεκριμένου συχνοτικού φάσματος που προσπίπτει πάνω τους, μετατρέποντας τα οπτικά σήματα σε ηλεκτρικά σήματα (τα οποία μπορούν να υποστούν περαιτέρω επεξεργασία). Χρησιμοποιούνται ευρέως σε πλήθος εφαρμογών όπως η έρευνα και παρατήρηση του διαστήματος, η τεχνολογία τροφίμων, τα συστήματα ασφαλείας, η υγεία και οι τηλεπικοινωνίες. Για εφαρμογές στις τηλεπικοινωνίες, που αποτελούν και σημείο ενδιαφέροντος για τη συγκεκριμένη εργασία, χρειαζόμαστε φωτοανιχνευτές οι οποίοι να έχουν γρήγορη απόκριση, μεγάλη ευαισθησία στο φως, χαμηλό θόρυβο και μικρό κόστος παραγωγής.

Το πρόβλημα με την υπάρχουσα τεχνολογία εντοπίζεται κυρίως στην ταχύτητα των φορέων των ημιαγωγικών υλικών που χρησιμοποιούνται για φωτοανίχνευση. Ένα άλλο ζήτημα που προκύπτει με την τεχνολογία ημιαγωγών, όπως για παράδειγμα το SiGe και το InP, είναι πως οι συγκεκριμένοι ημιαγωγοί δεν είναι συμβατοί με την τεχνολογία των ολοκληρωμένων φωτονικών κυκλωμάτων. Οι ημιαγωγοί αυτοί δε μπορούν να αναπτυχθούν κρυσταλλικά με επιταξία, καθώς είναι δύσκολο να ταιριάξουν οι κρυσταλλικές σταθερές τους με αυτή του υποστρώματος πάνω στο οποίο θα εναποτεθούν.

Για τους παραπάνω λόγους το γραφένιο αποκτά ένα σημαντικό προβάδισμα, καθώς έχει φορείς με μεγάλη ευκινησία και γρήγορη χαλάρωση, επιτρέπει την υπερταχεία εξαγωγή φωτοπαραγόμενων φορέων και μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε ένα ευρύ φάσμα από το υπεριώδες έως το υπέρυθρο. Επίσης, ένα άλλο σημαντικό του πλεονέκτημα είναι πως δε χρειάζεται επιταξία (δεν είναι αναγκαίο να ακολουθεί την περιοδικότητα του υποστρώματος). Οι φωτοανιχνευτές γραφενίου (Ferrari et al., 2015; Furchi et al., 2012; Bonaccorso, Sun, Hasan, & Ferrari, 2010) μπορούν να

χρησιμοποιηθούν σε πλήθος οπτικών εφαρμογών και είναι οι πιο ενεργά υπό μελέτη φωτονικές διατάξεις.

Ωστόσο, μέχρι σήμερα, οι περισσότεροι από τους φωτοανιχνευτές γραφηνίου παρουσιάζουν είτε χαμηλή απόκριση (που σχετίζεται με την ταχύτητα που ανταποκρίνεται ο φωτοανιχνευτής κατά τη μεταβολή της έντασης του φωτός) είτε μεγάλα ρεύματα σκότους που αποτελούν πηγή θορύβου και δημιουργούνται όταν επιβάλλεται στα άκρα τους διαφορά δυναμικού και (Gosciniak, Rasras, & Khurgin, 2020). Έτσι, η εύρεση μιας καλύτερης διαμόρφωσης φωτοανιχνευτή που μπορεί να αναδείξει τα πλεονεκτήματα του γραφηνίου είναι ιδιαίτερα επιθυμητή.

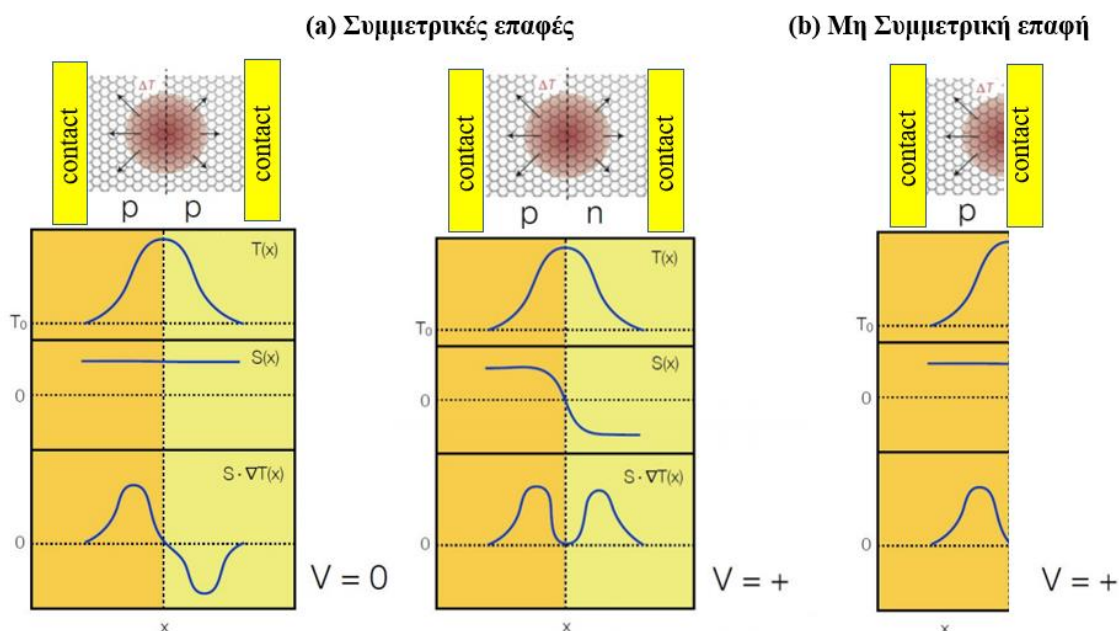
Για να βρούμε μια απάντηση στα ερωτήματα που τέθηκαν παραπάνω, πρέπει πρώτα να ταξινομήσουμε τους κύριους φυσικούς μηχανισμούς που μπορούν να συμβάλλουν στη δημιουργία φωτορεύματος σε συσκευές γραφηνίου που ενσωματώνονται σε κυματοδηγούς. Μπορεί κανείς να διακρίνει τα εξής φαινόμενα: το φωτοβολταϊκό, το φωτοθερμοηλεκτρικό, το βολομετρικό φαινόμενο και το φαινόμενο φωτοαγωγιμότητας (Ferrari et al., 2015).

Η επιλογή του μηχανισμού φωτοανίχνευσης εξαρτάται από τη διαμόρφωση της συσκευής, τις συνθήκες σχεδιασμού και λειτουργίας. Στην παρούσα μελέτη επιλέγουμε να προσανατολιστούμε σε φαινόμενα που σχετίζονται με τα ελάχιστα δυνατά επίπεδα θορύβου, δηλαδή στο φωτοβολταϊκό και το φωτοθερμοηλεκτρικό φαινόμενο κατά τα οποία δεν απαιτείται η επιβολή εξωτερικής τάσης. Πρόσφατες μελέτες έχουν δείξει ότι το φωτοθερμοηλεκτρικό φαινόμενο PTE υπερσχύει του φωτοβολταϊκού σε συσκευές γραφηνίου (Gosciniak, Rasras, & Khurgin, 2020).

Επομένως, στην παρούσα εργασία θα εστιάσουμε σε μια διάταξη φωτοανιχνευτή γραφηνίου που βασίζεται στο φωτοθερμοηλεκτρικό φαινόμενο (PTE effect). Κατά το φαινόμενο αυτό, η οπτικά επαγόμενη θέρμανση του γραφηνίου δημιουργεί περιοχές με διαφορετικές θερμοκρασίες. Στις θερμές περιοχές τα ηλεκτρόνια έχουν μεγαλύτερη ενέργεια και έτσι διαχέονται στις ψυχρές περιοχές γεγονός που προκαλεί διαφορά δυναμικού στις δύο περιοχές και κατ' επέκταση δημιουργία ηλεκτρικού ρεύματος.

Για να κατανοήσουμε λίγο καλύτερα το φωτοθερμοηλεκτρικό φαινόμενο και το πώς αυτό μπορεί να εφαρμοστεί σε μία διάταξη παραθέτουμε ορισμένες σχηματικές απεικονίσεις (Σχ.4.1). Στις δύο πρώτες συμμετρικές περιπτώσεις του Σχ.4.1 (α): p-p επαφή και p-n επαφή, απεικονίζεται ένα κανάλι γραφηνίου με δύο μεταλλικές επαφές στα άκρα του που συλλέγουν το φωτοθερμοηλεκτρικό ρεύμα. Στην περίπτωση του

Σχ.4.1 (b) απεικονίζεται μια μη συμμετρική επαφή, όπου έχουμε φέρει πιο κοντά στο κέντρο του γραφενίου τη μια μεταλλική επαφή.



Σχήμα 4.1: Σχηματική απεικόνιση (a) συμμετρικών επαφών και (b) μη συμμετρικών επαφών με τις αντίστοιχες γραφικές παραστάσεις για τη θερμοκρασία $T(x)$, το συντελεστή Seebeck $S(x)$ και το γινόμενο του συντελεστή Seebeck με τη θερμοκρασιακή βάρθρωση (gradient) $S \cdot \nabla T(x)$.

Σε όλες τις γραφικές παραστάσεις, οι οριζόντιοι άξονες δηλώνουν τη χωρική συντεταγμένη x . Στους κατακόρυφους άξονες έχουμε τη θερμοκρασία $T(x)$, το συντελεστή Seebeck $S(x)$ και το γινόμενο του συντελεστή Seebeck με τη θερμοκρασιακή βάρθρωση (gradient) $S \cdot \nabla T(x)$. Ο συντελεστής Seebeck που μετριέται συνήθως σε $\mu\text{V/K}$, εκφράζει την επαγόμενη θερμοηλεκτρική τάση που εμφανίζεται κατά μήκος ενός υλικού, λόγω της διαφοράς θερμοκρασίας που εμφανίζεται στα άκρα του και σχετίζεται με την αγωγιμότητα. Το ολοκλήρωμα του γινομένου $S \cdot \nabla T(x)$ είναι ανάλογο της παραγόμενης φωτοθερμοηλεκτρικής τάσης, δηλαδή ισχύει:

$$V_p = \int S(x) \nabla T_e(x) dx \quad (4.1)$$

Αντίστοιχα, το παραγόμενο φωτοθερμοηλεκτρικό ρεύμα δίνεται από την Εξ. 4.2:

$$I_p = \frac{1}{R} \int S(x) \nabla T_e(x) dx \quad (4.2)$$

Όπου R η συνολική αντίσταση της διάταξης

Για τις συμμετρικές επαφές, βλέπουμε πως στο κέντρο του γραφενίου όπου λαμβάνει χώρα η οπτικά επαγόμενη θέρμανση η θερμοκρασία T παρουσιάζει μέγιστο. Παρατηρούμε επίσης πως η κλίση της στην αριστερή πλευρά είναι θετική και στη δεξιά πλευρά αρνητική. Όσον αφορά στο συντελεστή Seebeck, βλέπουμε πως είναι θετικός στην περίπτωση της p-p επαφής, καθώς το επίπεδο Fermi είναι ίδιο και στις δύο πλευρές (να σημειώσουμε ότι ο συντελεστής Seebeck είναι θετικός όταν παρατηρείται πλεόνασμα θετικών φορέων δηλαδή οπών και κατ' επέκταση ημιαγωγός τύπου p). Έτσι, για δεδομένη θερμοκρασιακή κατανομή το γινόμενο και κατ' επέκταση η τάση είναι μηδέν εξαιτίας των αντίθετων συνεισφορών. Στην περίπτωση της p-n επαφής, έχουμε πάλι την ίδια θερμοκρασιακή κατανομή. Αυτό που αλλάζει είναι ο συντελεστής Seebeck που είναι αντισυμμετρικός και πιο συγκεκριμένα θετικός στην αριστερή πλευρά (ημιαγωγός τύπου p) και αρνητικός στη δεξιά πλευρά (ημιαγωγός τύπου n). Γίνεται εύκολα αντιληπτό πως η συνολική συνεισφορά στην τάση είναι θετική.

Τέλος, θα περάσουμε στη μη συμμετρική περίπτωση. Η θερμοκρασία παρουσιάζει μέγιστο κοντά στη μεταλλική επαφή που έχουμε μετακινήσει προς το κέντρο. Παρατηρούμε πως τόσο η θερμοκρασία όσο και ο συντελεστής Seebeck παρουσιάζουν θετική συνεισφορά στη συνολική τάση. Γίνεται κατανοητό πως για να μεγιστοποιήσουμε το θερμοηλεκτρικό ρεύμα πρέπει να φροντίσουμε να μεγιστοποιηθεί η θερμοκρασιακή διαφορά μεταξύ των ηλεκτρονίων. Ο συντελεστής Seebeck μπορεί να ρυθμιστεί κατάλληλα μέσω του επιπέδου Fermi. Η μεγιστοποίηση της θερμοκρασιακής διαφοράς, θα γίνει μέσω της αύξησης της απορρόφησης στο γραφένιο με τη βοήθεια της κοιλότητας που θα δημιουργήσουμε.

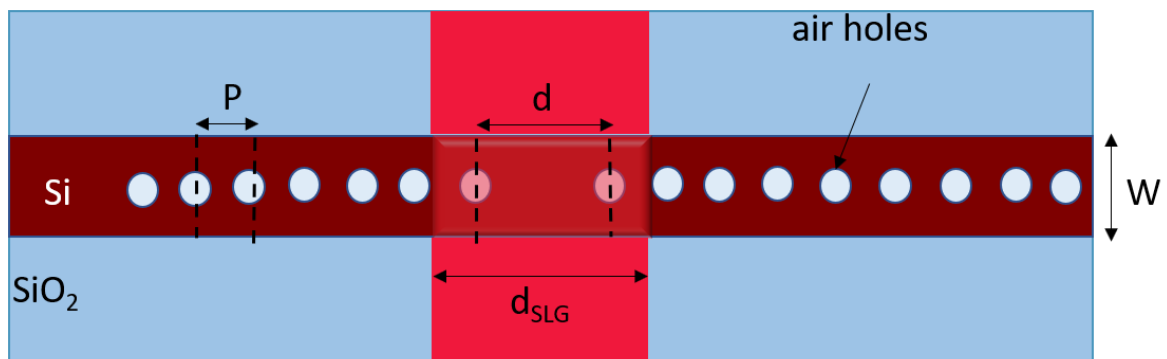
4.2 ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΔΙΑΤΑΞΗΣ ΦΩΤΟΑΝΙΧΝΕΥΤΗ

Στο πλαίσιο της εργασίας αυτής μελετήσαμε υπολογιστικά ένα φωτοανιχνευτή γραφενίου που θα έχει εφαρμογή σε ολοκληρωμένο κύκλωμα τηλεπικοινωνιών. Σκοπός μας ήταν η βελτιστοποίηση της απόδοσης του φωτοανιχνευτή μέσω της ενίσχυσης της απορρόφησης του γραφενίου.

Ως προς αυτή την κατεύθυνση, σχεδιάσαμε ένα φωτονικό κρύσταλλο (περιοδική διάταξη γεωμετρικών εγχοπών) ενσωματωμένο σε κυματοδηγό πυριτίου (Si) για την παγίδευση του φωτός σε συγκεκριμένο χώρο και προκαθορισμένο μήκος

κύματος. Πραγματοποιήσαμε εκτενή μελέτη διαφόρων γεωμετρικών σχημάτων, διαστάσεων και περιόδων για τη δημιουργία προκαθορισμένου φωτονικού χάσματος στο φασματικό εύρος των οπτικών συστημάτων τηλεπικοινωνιών. Στη συνέχεια σχεδιάσαμε κατάλληλα μια κοιλότητα (ατέλεια) στην περιοδική διάταξη που επιτρέπει την παγίδευση του φωτός συγκεκριμένου μήκους κύματος (1550 nm) και τη σημαντική ενίσχυση της έντασης του πεδίου. Στο τελικό στάδιο, τοποθετήσαμε γραφένιο πάνω από τη σχεδιαζόμενη ατέλεια και μετρήσαμε την απορρόφησή του. Ο σχεδιασμός και η βελτιστοποίηση του φωτοανιχνευτή γραφενίου πραγματοποιήθηκε με την χρήση του εμπορικά διαθέσιμου υπολογιστικού πακέτου Lumerical Solutions.

Μια σχηματική απεικόνιση (κάτοψη) του υπό εξέταση φωτοανιχνευτή γραφενίου φαίνεται στο Σχ. 4.2, όπου βλέπουμε τον κυματοδηγό πυριτίου πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου. Στο σχήμα φαίνεται επίσης η περιοδική διάταξη εγκοπών αέρα, η ατέλεια που έχει σχεδιαστεί καθώς και το φύλλο γραφενίου που έχει τοποθετηθεί πάνω σε αυτή την ατέλεια.



Σχήμα 4.2: Κάτοψη φωτοανιχνευτή γραφενίου.

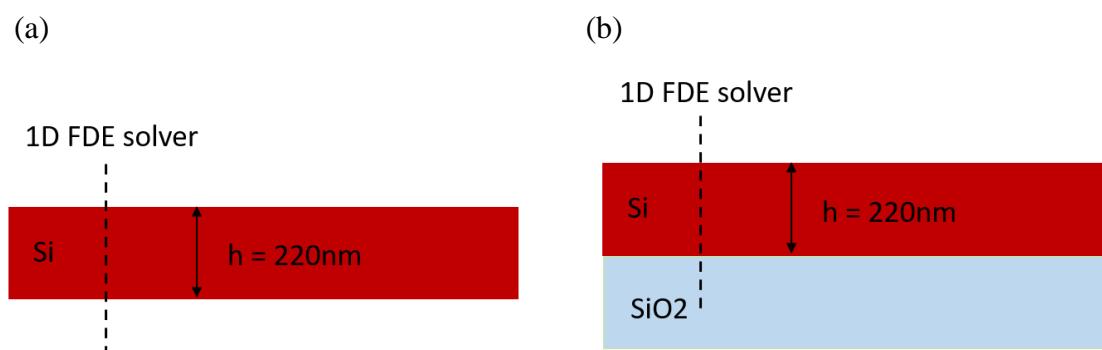
4.2.1 Υπολογισμοί ιδιοτιμών στο πεδίο των συχνοτήτων (FDE)

Η αριθμητική μέθοδος που χρησιμοποιούμε για υπολογισμό των ρυθμών κυματοδηγησης σε μία διατομή ενός κυματοδηγού είναι η μέθοδος FDE (Finite-Difference Eigen-Mode Solver). Είναι μία αριθμητική μέθοδος ιδιοτιμών που χρησιμοποιεί τη διακριτοποίηση του Yee (που χρησιμοποιείται στη μέθοδο FDTD) σε 2 διαστάσεις και χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό των οδηγούμενων ρυθμών TE και TM σε μια διάταξη κυματοδηγού. Αυτή η μέθοδος είναι μία μέθοδος

πεπερασμένων διαφορών στο πεδίο των συχνοτήτων με την οποία εξάγουμε τις σταθερά διάδοσης β και κατ' επέκταση τον ενεργό δείκτη διάθλασης (n_{eff}) και την κατανομή E και H πεδίων του κάθε ρυθμού κυματοδηγησης.

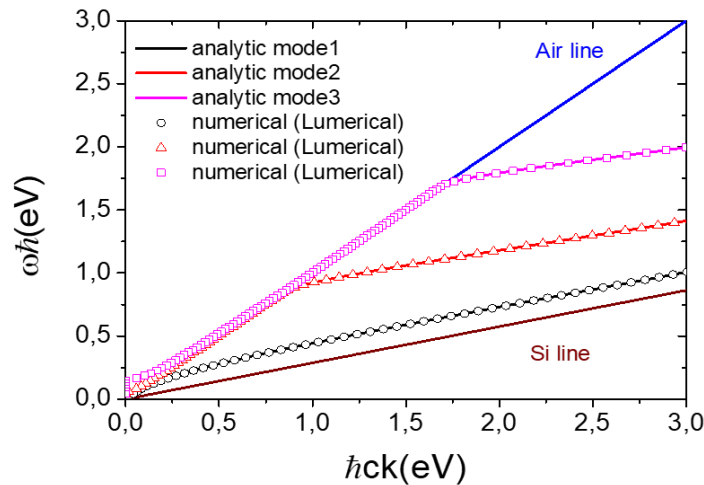
4.2.1.1 Υπολογισμοί 1-D

Αρχικά, ξεκινάμε από τις 1-D προσομοιώσεις και χρησιμοποιούμε τον FDE solver για να μελετήσουμε τα διαγράμματα διασποράς επίπεδου κυματοδηγού πυριτίου για τις εξής περιπτώσεις: μέσα σε αέρα και πάνω σε υπόστρωμα SiO_2 , όπως φαίνεται στο Σχ. 4.3(a) και Σχ. 4.3(b) αντίστοιχα. Το ύψος h του κυματοδηγού είναι προκαθορισμένο κατασκευαστικά στα 220 nm και είναι τυπικό για SOI (Silicon on Insulator) που χρησιμοποιούνται ευρέως στην τεχνολογία των τηλεπικοινωνιών. Ο δείκτης διάθλασης του πυριτίου είναι $n_{\text{Si}} = 3.4757$, του διοξειδίου του πυριτίου $n_{\text{SiO}_2} = 1.444$ και του αέρα $n_{\text{Air}} = 1$. Θα πρέπει να διευκρινιστεί ότι η ανάλυσή μας έγινε μόνο για τα TE modes.

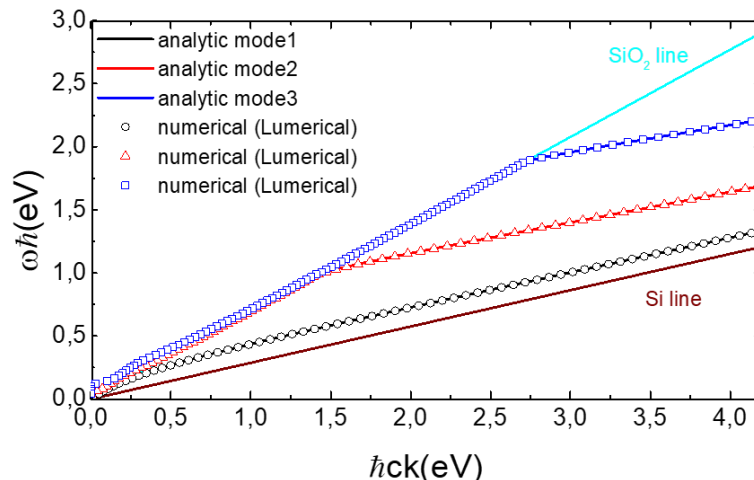


Σχήμα 4.3: Επίπεδος κυματοδηγός πυριτίου (α) μέσα σε αέρα (β) πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.

Υπολογίζουμε το διάγραμμα διασποράς κυματοδηγού μέσα σε αέρα (Σχ. 4.4) και πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου (Σχ. 4.5). Θα συγκρίνουμε τα αποτελέσματα με την αναλυτική λύση που υπολογίσαμε στο Κεφάλαιο 2.



Σχήμα 4.4: Σύγκριση αναλυτικής και αριθμητικής μεθόδου. Απεικόνιση των τριών πρώτων TE modes επίπεδου κυματοδηγού μέσα σε αέρα.



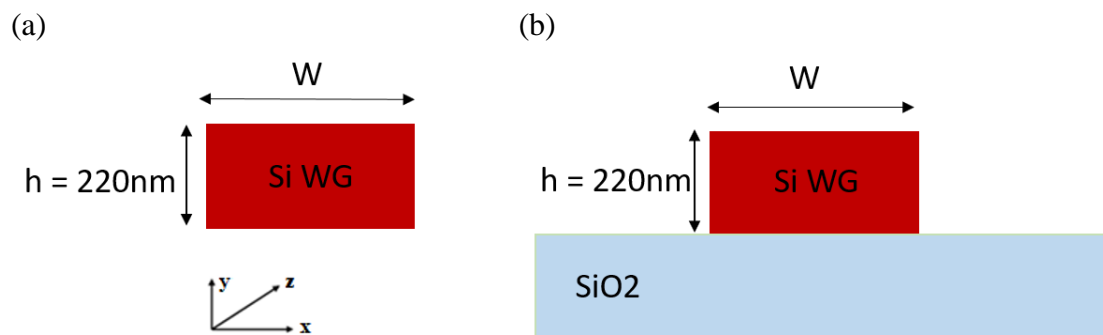
Σχήμα 4.5: Σύγκριση αναλυτικής και αριθμητικής μεθόδου. Απεικόνιση των τριών πρώτων TE modes επίπεδου κυματοδηγού πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.

Παρατηρώντας τα δύο αυτά διαγράμματα καταλήγουμε πως και για τις δύο περιπτώσεις η αριθμητική και η αναλυτική μέθοδος έχουν τέλεια συμφωνία. Πάνω από τη γραμμή του αέρα και του διοξειδίου του πυριτίου για τις δύο περιπτώσεις αντίστοιχα δεν υπάρχουν δέσμες λύσεις, μόνο ελεύθερες. Κάτω από τη γραμμή του πυριτίου δεν υπάρχουν καθόλου λύσεις. Οδηγούμενες λύσεις υπάρχουν μόνο ανάμεσα στις δύο γραμμές.

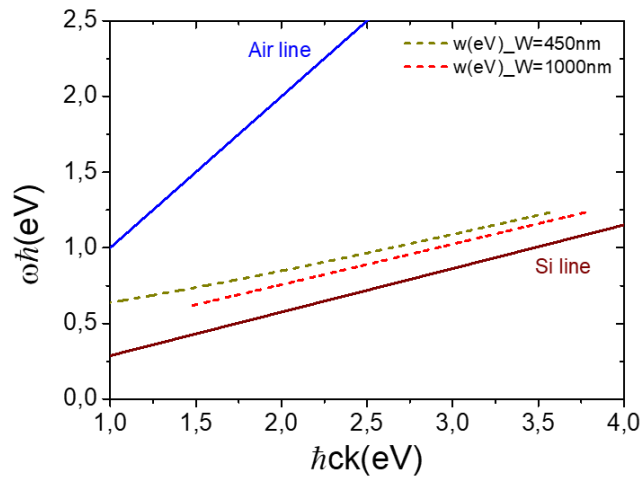
Για την πρώτη λύση για $m=0$, στις πολύ μικρές συχνότητες το κύμα έχει πολύ μεγάλες ουρές έξω από το υμένιο και άρα ο “μέσος” δείκτης που αισθάνεται είναι πιο κοντά στη γραμμή του αέρα και του διοξειδίου του πυριτίου αντίστοιχα. Γι’ αυτό και η γραμμή διασποράς είναι παράλληλη με την πρώτη γραμμή. Όσο μεγαλώνει ο κυματάριθμος k τόσο περιορίζονται οι ουρές και άρα τόσο περισσότερο ο “μέσος” δείκτης που αισθάνεται είναι πιο κοντά στο δείκτη του πυριτίου.

4.2.1.2 Υπολογισμοί 2-D

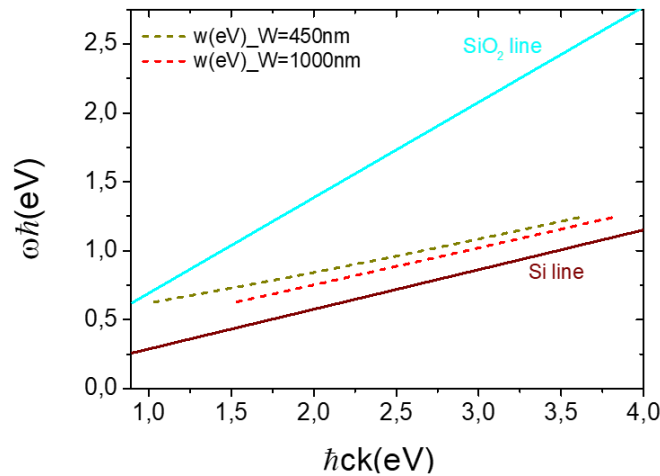
Στη συνέχεια περνάμε στους 2-D υπολογισμούς και συγκεκριμένα στα διαγράμματα διασποράς δισδιάστατου κυματοδηγού (όπως απεικονίζεται στο Σχ. 4.6) για το θεμελιώδες mode μέσα σε αέρα (Σχ. 4.7) και πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου (Σχ. 4.8) για μήκος κύματος $\lambda=1000\text{nm}-2000\text{nm}$ και πλάτη κυματοδηγού: $W=450\text{nm}$ και $W=1000\text{nm}$.



Σχήμα 4.6: Δισδιάστατος κυματοδηγός πυριτίου: μέσα σε αέρα (a) και πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου (b).



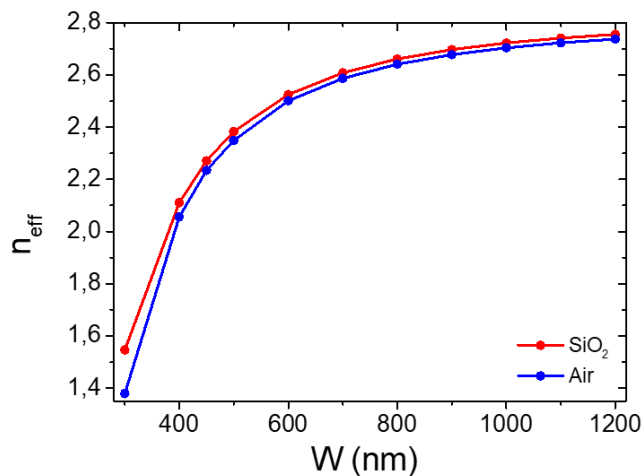
Σχήμα 4.7: Διάγραμμα διασποράς κυματοδηγού μέσα σε αέρα για το θεμελιώδες mode.



Σχήμα 4.8: Διάγραμμα διασποράς κυματοδηγού πυριτίου μέσα σε αέρα για το θεμελιώδες mode.

Όσο αυξάνονται οι τιμές του κυματάριθμου k και της συχνότητας ω , τα modes είναι πιο εντοπισμένα στον κυματοδηγό έτσι “βλέπουν” το πυρίτιο, δηλαδή έχουμε ισχυρή κυματοδότηση. Στην περίπτωση του κυματοδηγού με $W=1000\text{nm}$ το mode είναι περισσότερο εντοπισμένο από αυτό των $W=450\text{nm}$ και έτσι βλέπει περισσότερο το πυρίτιο.

Στη συνέχεια διερευνούμε την εξάρτηση του ενεργού δείκτη διάθλασης n_{eff} από τα γεωμετρικά του χαρακτηριστικά του κυματοδηγού και πιο συγκεκριμένα το πλάτος W (Σχ. 4.9).



Σχήμα 4.9: Ο ενεργός δείκτης διάθλασης συναρτήσει του πλάτους W για κυματοδηγό μέσα σε αέρα και πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου για το θεμελιώδες TE mode.

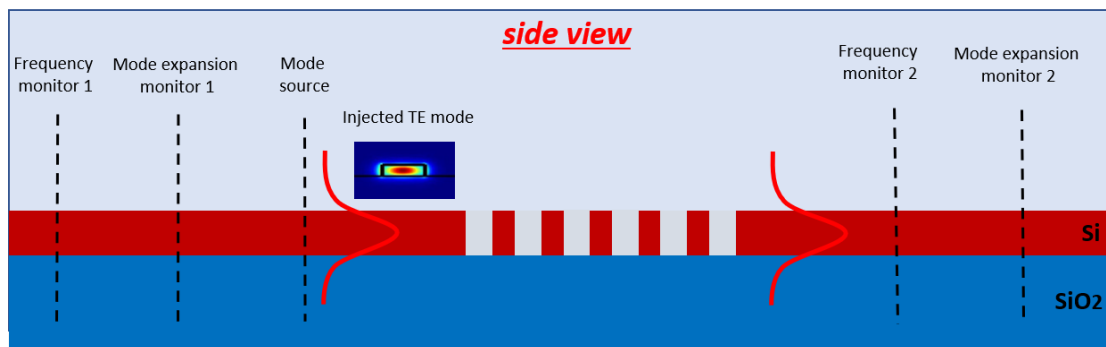
Παρατηρούμε πως όσο μειώνεται το πλάτος W , τόσο το mode εκτείνεται έξω από τον κυματοδηγό και ο δείκτης διάθλασης που βλέπει είναι αυτός του αέρα n_{Air} και n_{SiO_2} αντίστοιχα. Όσο αυξάνεται το πλάτος W , τόσο πιο εντοπισμένο είναι το mode μέσα στον κυματοδηγό και έτσι βλέπει το δείκτη διάθλασης του πυριτίου n_{Si} . Αξίζει σε αυτό το σημείο να αναφερθεί πως εκτός από τον TE ρυθμό που αποτελεί αντικείμενο μελέτης αυτής της εργασίας, ο συγκεκριμένος κυματοδηγός υποστηρίζει και TM-εγκάρσιους μαγνητικούς τρόπους κυματοδηγησης.

4.2.2 Υπολογισμοί με τη μέθοδο πεπερασμένων διαφορών στο πεδίο του χρόνου (FDTD)

Οι παραπάνω υπολογισμοί έγιναν για να αναγνωριστούν τα modes και η εξάρτησή τους από τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της διάταξης. Συνεχίζουμε τώρα με τους 3D-FDTD υπολογισμούς με τους οποίους πραγματοποιήθηκε η βελτιστοποίηση τόσο των γεωμετρικών σχημάτων όσο και της περιοδικότητας και της ατέλειας του φωτονικού κρυστάλλου.

4.2.2.1 Simulation set-up

Η υπό μελέτη διάταξη, όπως αναφέρθηκε, έχει σχεδιαστεί και προσομοιωθεί χρησιμοποιώντας 3D-FDTD υπολογισμούς. Ο φωτονικός κυματοδηγός αποτελείται από ένα πυρήνα πυριτίου 450×220 nm επάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.



Σχήμα 4.10: Φωτονικός κυματοδηγός που αποτελείται από πυρήνα πυριτίου πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου. Απεικονίζονται επίσης τα monitor που χρησιμοποιήθηκαν.

Στο περιβάλλον της προσομοίωσης έγινε εισαγωγή του θεμελιώδους φωτονικού ρυθμού κυματοδηγού Si με εγκάρσια ηλεκτρική πόλωση (TE) με τη χρήση mode source (Σχήμα 4.10). Η 2D γεωμετρία της συγκεκριμένης πηγής χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό των καθοδηγούμενων ρυθμών του φωτονικού κυματοδηγού. Συγκεκριμένα, ο 2D FDE mode solver της πηγής υπολογίζει τους υποστηριζόμενους ρυθμούς του φωτονικού κυματοδηγού εκ των οποίων επιλέγουμε και εισάγουμε ως πηγή τον θεμελιώδη ρυθμό στα 1550 nm.

Για να υπολογίσουμε την ανάκλαση και τη διέλευση χρησιμοποιήσαμε τα ενσωματωμένα στην FDTD μέθοδο frequency-domain profile and power monitors και τα mode expansion monitors. Τα frequency-domain profile and power monitors εξάγουν την κατανομή των πεδίων στο πεδίο των συχνοτήτων. Τα mode expansion monitors χρησιμοποιούν μια ανάλυση αλληλοεπικάλυψης (overlap analysis). Ως αποτέλεσμα εξάγουν, για δεδομένη κατανομή πεδίων από ένα επίπεδο, το ολοκλήρωμα αλληλεπικάλυψης του πεδίου αυτού με ένα επιλεγμένο υποστηριζόμενο ρυθμό του κυματοδηγού. Έτσι, υπολογίζουμε την ανάκλαση R και τη διέλευση T της διάταξης αποφεύγοντας τα σκεδαζόμενα πεδία και λαμβάνουμε υπόψιν μόνο την ενέργεια που ανήκει στο διαδιδόμενο και ανακλώμενο θεμελιώδη ρυθμό του φωτονικού

κυματοδηγού. Η ανάκλαση R υπολογίζεται μέσω του mode expansion monitor 1 και η διέλευση T υπολογίζεται μέσω του mode expansion monitor 2 (Σχ. 4.10).

Τα mode expansion monitors επιστρέφουν τα εξής αποτελέσματα:

$$a_m = 0.25 * \frac{\int d\vec{S} \cdot \vec{E}_{in} \times \vec{H}_m^*}{N_m} + \frac{\int d\vec{S} \cdot \vec{E}_m \times \vec{H}_{in}^*}{N_m^*} \quad (4.3)$$

$$b_m = 0.25 * \frac{\int d\vec{S} \cdot \vec{E}_{in} \times \vec{H}_m^*}{N_m} - \frac{\int d\vec{S} \cdot \vec{E}_m^* \times \vec{H}_{in}}{N_m^*} \quad (4.4)$$

$$N_m = 0.5 * \int d\vec{S} \cdot \vec{E}_m \times \vec{H}_m^* \quad (4.5)$$

$$P_{in} = 0.5 * \int d\vec{S} \cdot \vec{E}_{in} \times \vec{H}_{in}^* \quad (4.6)$$

Όπου

a_m ο μιγαδικός συντελεστής διέλευσης που περιγράφει τη σύζευξη (coupling) στους ρυθμούς διάδοσης (modes) που κινούνται κατά τη διεύθυνση διάδοσης (forward propagating modes)

b_m ο μιγαδικός συντελεστής διέλευσης που περιγράφει τη σύζευξη (coupling) στους ρυθμούς διάδοσης (modes) που κινούνται αντίθετα από τη διεύθυνση διάδοσης (backward propagating modes)

$\text{Re}(N_m)$ η ενέργεια του mode m μέσα στον κυματοδηγό

$\text{Re}(P_{in})$ η συνολική ισχύς εισόδου (σε Watt) που καταγράφεται από frequency-domain profile and power monitors

Συνολικά, για τη διέλευση T θα έχουμε:

$$T_{forward} = |a|^2 \frac{N}{sourcepower} \quad (4.7)$$

$$T_{backward} = |b|^2 \frac{N}{sourcepower} \quad (4.8)$$

Ο λόγος $N/\text{sourcepower}$ εισάγεται για κανονικοποίηση της ενέργειας στην περίπτωση που υπολογίζονται οι μιγαδικοί συντελεστές a και b για διαφορετικό mode από αυτό που εισάγεται ως πηγή. Στην περίπτωσή μας, επειδή το mode που εισάγουμε είναι ίδιο με αυτό που υπολογίζουμε την αλληλεπικάλυψη (fundamental mode του φωτονικού κυματοδηγού) ο λόγος αυτός είναι ισούται με τη μονάδα.

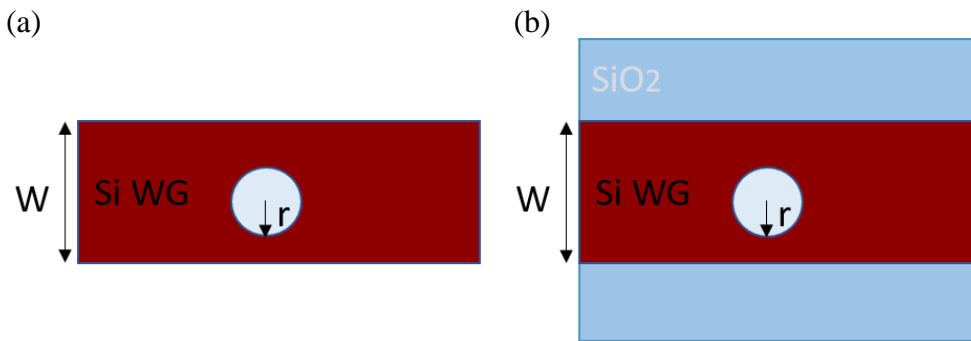
Στην ανάλυσή μας χρησιμοποιούμε τη διέλευση T_{net} που ορίζεται ως:

$$T_{net} = T_{forward} - T_{backward} \quad (4.9)$$

4.2.2.2 Βελτιστοποίηση σχήματος εγκοπής-διαστάσεων

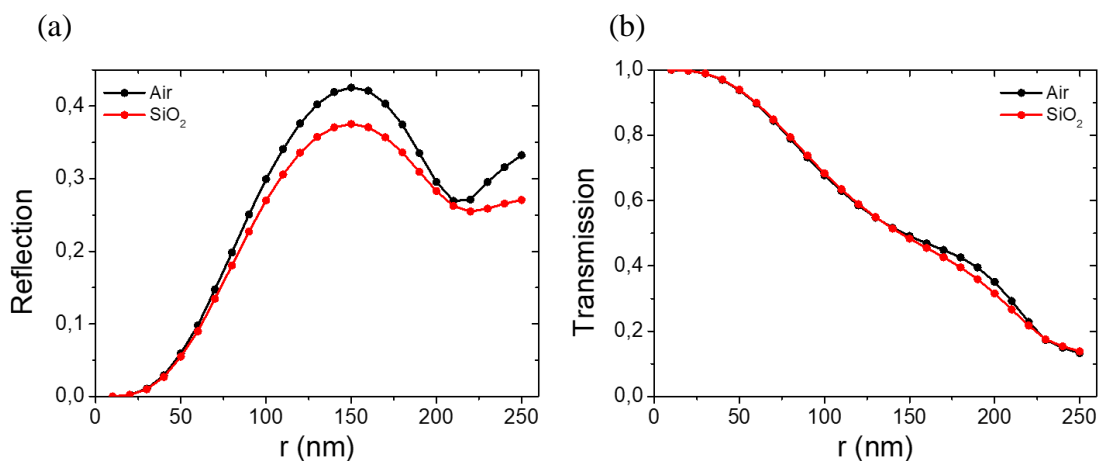
Σε αρχικό στάδιο σχεδιάζουμε ένα διηλεκτρικό καθρέπτη Bragg (Bragg mirror ή Distributed Bragg Reflector) με στόχο τη δημιουργία προκαθορισμένου φωτονικού χάσματος στο φασματικό εύρος των οπτικών συστημάτων τηλεπικοινωνιών. Ο καθρέπτης Bragg, που ονομάζεται αλλιώς και μονοδιάστατος φωτονικός κρύσταλλος, είναι μια περιοδική δομή που σχηματίζεται από πολλαπλά στρώματα υλικών διαφορετικού δείκτη διάθλασης που εναλλάσσονται μεταξύ τους. Μπορεί να σχεδιαστεί έτσι ώστε να μην επιτρέπεται η διάδοση συγκεκριμένων μηκών κύματος, λόγω ανάκλασης από τις διαχωριστικές επιφάνειες των υλικών.

Δημιουργούμε τον καθρέπτη Bragg χαράσσοντας εγκοπές διαφόρων σχημάτων όπως κύκλο, τετράγωνο και ορθογώνιο παραλληλόγραμμο. Η διερεύνηση γίνεται για πλάτη κυματοδηγού $W=450\text{nm}$ και $W=1000\text{nm}$ και για σταθερό μήκος κύματος στα 1550nm . Ξεκινάμε δημιουργώντας μια εγκοπή αέρα σε σχήμα κύκλου και διερευνούμε την περίπτωση του κυματοδηγού μέσα σε αέρα (Σχ. 4.11a) και πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου (Σχ. 4.11b).



Σχήμα 4.11: x-y cross section κυματοδηγού πυριτίου (a) μέσα σε αέρα και (b) πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου με εγκοπή αέρα σε σχήμα κύκλου.

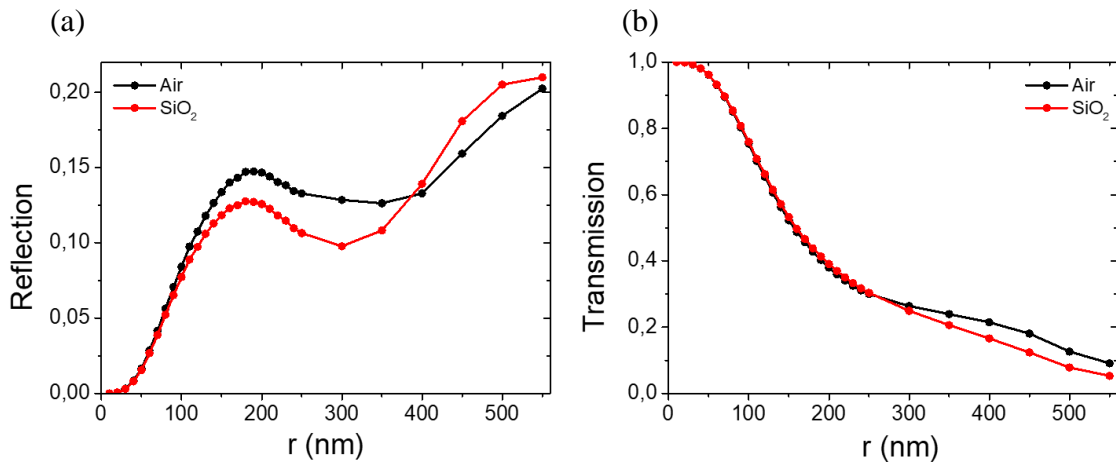
Για τις περιπτώσεις του κυματοδηγού με πλάτος $W=450\text{nm}$ και $W=1000\text{nm}$, μεταβάλλουμε την ακτίνα r της κυκλικής εγκοπής. Για την κατασκευή του καθρέπτη Bragg γενικά επιθυμούμε μεγάλα ποσοστά ανάκλασης και μικρά ποσοστά απωλειών (σκέδασης) και διέλευσης. Να σημειωθεί πως η σκέδαση υπολογίζεται μέσω της σχέσης: $S=1-R-T$. Υπολογίζουμε τα διαγράμματα ανάκλασης R και διέλευσης T , όπως φαίνονται στα Σχ. 4.12(a) και Σχ. 4.12(b) αντίστοιχα για $W=450\text{nm}$.



Σχήμα 4.12: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) τη διέλευσης T σε συνάρτηση με την ακτίνα της εγκοπής ($r=10-250\text{nm}$), για κυματοδηγό με πλάτος $W=450\text{nm}$ μέσα σε αέρα και πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.

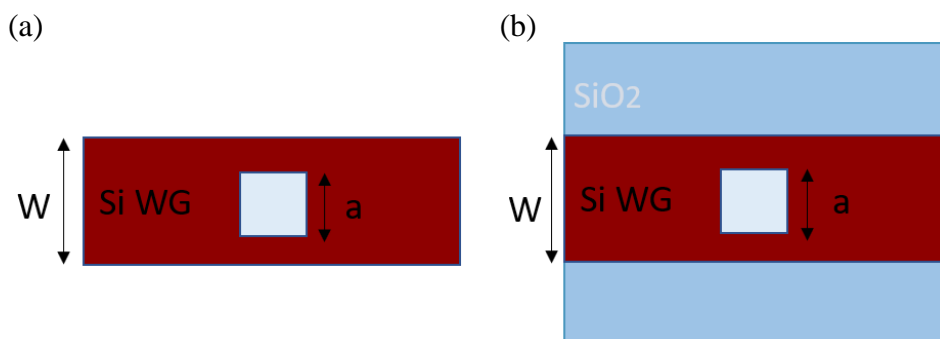
Το μέγιστο ποσοστό ανάκλασης επιτυγχάνεται για ακτίνα $r=150\text{nm}$ και είναι 42.5% για την περίπτωση του αέρα και 37.5% για την περίπτωση του διοξειδίου του πυριτίου. Η καμπύλη που αφορά τον κυματοδηγό σε αέρα (μαύρη), παρουσιάζει μεγαλύτερα ποσοστά ανάκλασης (Σχ. 4.12a) και διέλευσης (Σχ. 4.12b) από την αντίστοιχη του κυματοδηγού σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου (κόκκινη). Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι η διαφορά των δεικτών διάθλασης μεταξύ πυριτίου-αέρα

είναι μεγαλύτερη από την αντίστοιχη διαφορά μεταξύ πυριτίου-διοξειδίου του πυριτίου. Συνεπώς, το mode στην πρώτη περίπτωση παρουσιάζει ισχυρότερη κυματοδότηση. Όσο αυξάνεται η ακτίνα r παρατηρούμε πως η διέλευση T παρουσιάζει μείωση. Αυτό συμβαίνει γιατί τόσο η ανάκλαση όσο και η σκέδαση παρουσιάζουν αύξηση. Παραθέτουμε τα ανάλογα διαγράμματα για πλάτος κυματοδηγού $W=1000\text{nm}$, όπως φαίνονται στα Σχ. 4.13(a) και Σχ. 4.13(b).



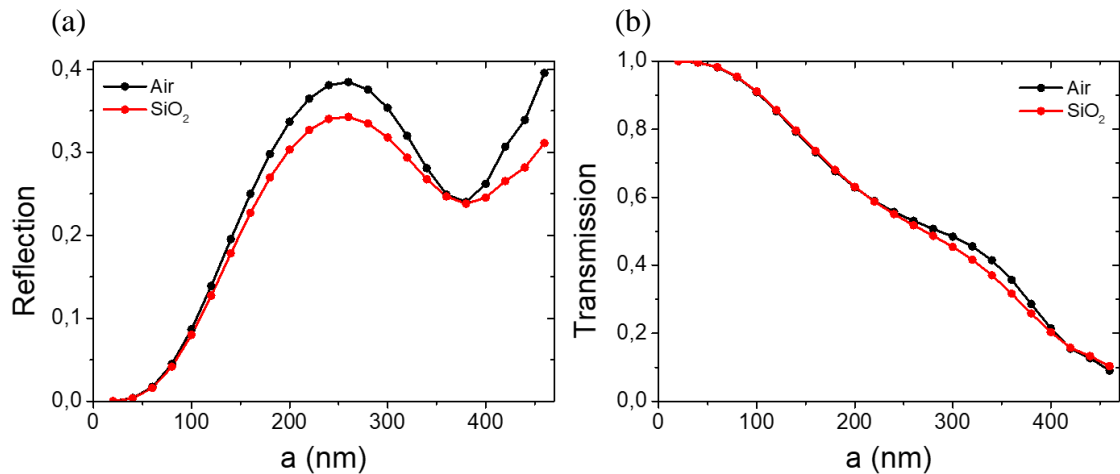
Σχήμα 4.13: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με την ακτίνα της εγκοπής ($r=10\text{-}550\text{nm}$), για κυματοδηγό με πλάτος $W=1000\text{nm}$ μέσα σε αέρα και πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.

Στον κυματοδηγό με πλάτος $W=1000\text{nm}$ το mode είναι πιο εντοπισμένο στον κυματοδηγό και για το λόγο αυτό σκεδάζεται πιο έντονα με αποτέλεσμα να έχουμε μικρότερη ανάκλαση στο mode του φωτονικού κυματοδηγού σε σχέση με την αντίστοιχη του πλάτους $W=450\text{nm}$. Συνεχίζουμε τη διερεύνηση για εγκοπή σε σχήμα τετραγώνου, μεταβάλλοντας την ακμή a της εγκοπής αρχικά για πλάτος $W=450\text{nm}$ (Σχ. 4.14).



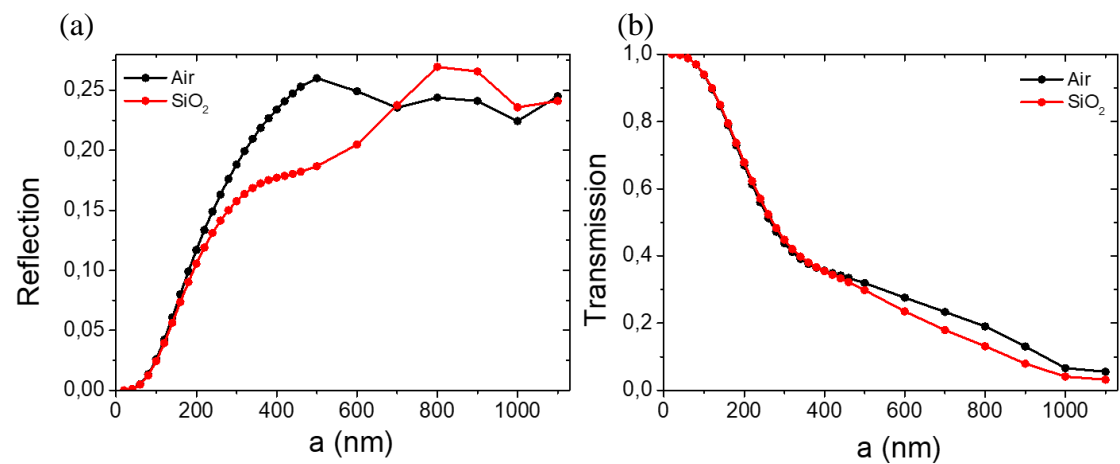
Σχήμα 4.14: x-y cross section κυματοδηγού πυριτίου μέσα σε αέρα (a) και πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου (b) με εγκοπή αέρα σε σχήμα τετραγώνου με ακμή a .

Υπολογίζουμε τα αντίστοιχα διαγράμματα ανάκλασης R και διέλευσης T, για κυματοδηγό με πλάτος $W=450\text{nm}$ και $W=1000\text{nm}$ και για τις περιπτώσεις μέσα σε αέρα και πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.



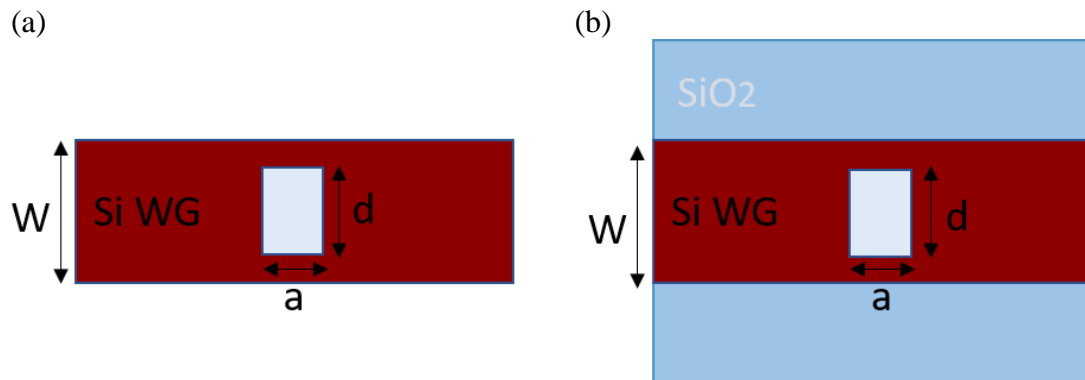
Σχήμα 4.15: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με την ακμή της εγκοπής ($a=10\text{-}460\text{nm}$), για κυματοδηγό με πλάτος $W=450\text{nm}$ μέσα σε αέρα και πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.

Παρατηρούμε πως η ακμή $a=260\text{nm}$ δίνει τη μέγιστη ανάκλαση 38.5% για κυματοδηγό μέσα σε αέρα (Σχ. 4.15a) και 34% για κυματοδηγό πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου (Σχ. 4.15b). Συνεχίζουμε την ίδια διαδικασία και για πλάτος κυματοδηγού $W=1000\text{nm}$.



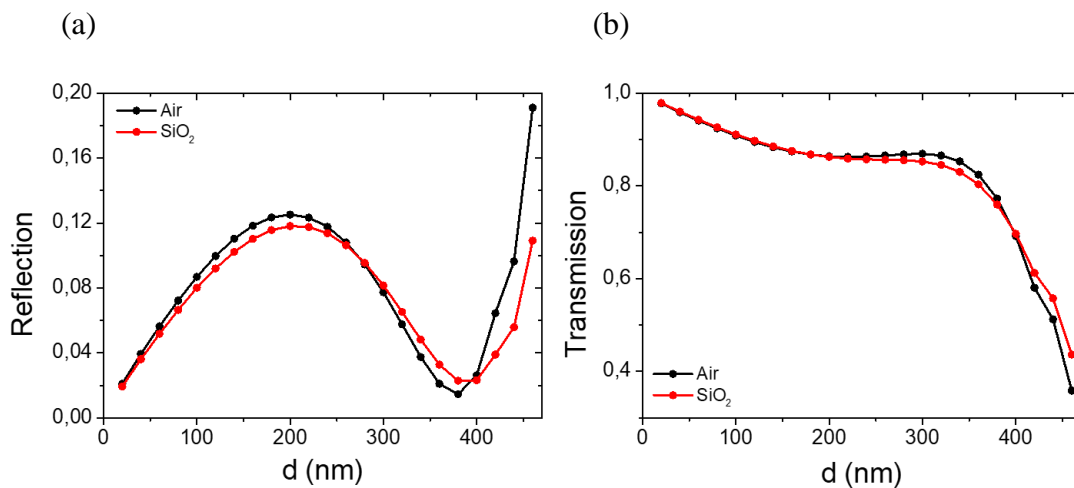
Σχήμα 4.16: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με την ακμή της οπής ($a=10\text{-}1100\text{nm}$), για κυματοδηγό με πλάτος $W=1000\text{nm}$ μέσα σε αέρα και πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.

Τέλος, θα διερευνήσουμε και εγκοπή σε σχήμα ορθογώνιου παραλληλόγραμμου. Στο Σχ. 4.17 με a και d απεικονίζονται οι δύο πλευρές του παραλληλόγραμμου.



Σχήμα 4.17: x-y cross section κυματοδηγού πυριτίου (a) μέσα σε αέρα και (b) πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου με εγκοπή αέρα σε σχήμα ορθογώνιου παραλληλόγραμμου με πλευρές a και d .

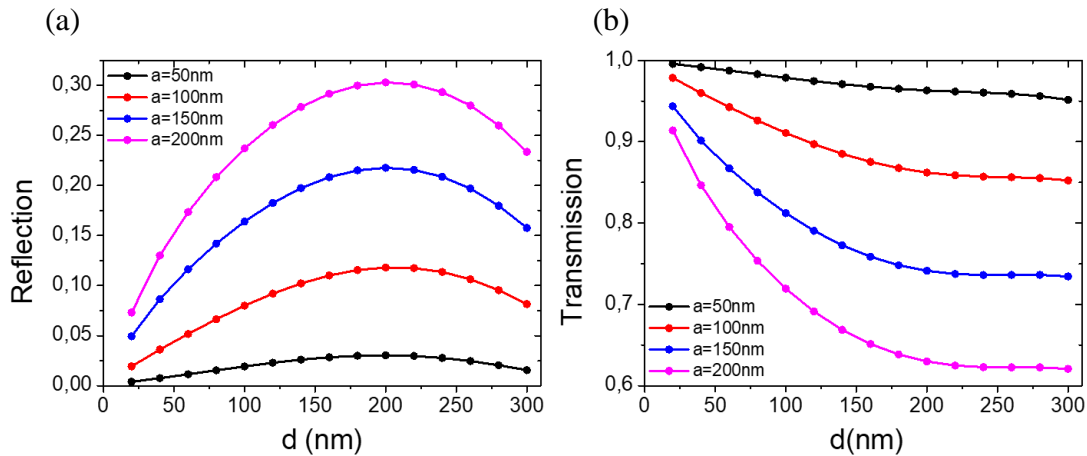
Σε πρώτο στάδιο επιλέγουμε ακμή εγκοπής $a=100\text{nm}$, μεταβάλλουμε την πλευρά d και παρουσιάζουμε τα αντίστοιχα διαγράμματα ανάκλασης R και διέλευσης T . Επιλέγουμε πλάτος κυματοδηγού $W=450\text{nm}$.



Σχήμα 4.18: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με την ακμή της οπής ($d=10-460\text{nm}$), για πλευρά $a=100\text{nm}$ και για κυματοδηγό με πλάτος $W=450\text{nm}$ μέσα σε αέρα και πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.

Η ανάκλαση R παρουσιάζει ένα πρώτο μέγιστο που φτάνει 12.5% για την περίπτωση κυματοδηγού σε αέρα (Σχ. 4.18a) και 11.5% για την περίπτωση κυματοδηγού σε υπόστρωμα (Σχ. 4.18b) για ακμή $d=200\text{nm}$.

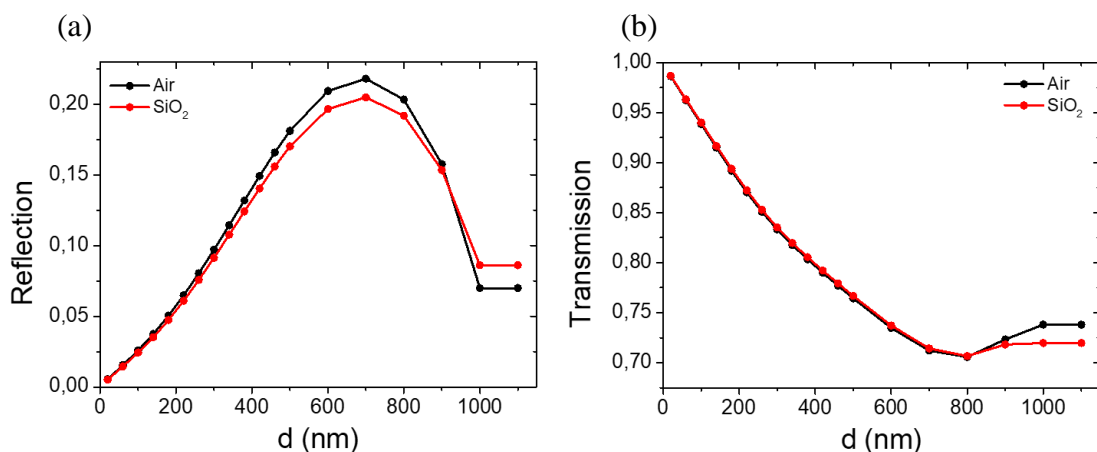
Στο σημείο αυτό δοκιμάζουμε συνδιασμούς για διάφορες τιμές των πλευρών a και d για κυματοδηγό πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου. Αρχικά για συγκεκριμένες τιμές του a , μεταβάλλουμε το μήκος της πλευράς d (Σχ. 4.19).



Σχήμα 4.19: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος της πλευράς $d=20-300$ nm του ορθογώνιου παραλληλόγραμμου για συγκεκριμένες τιμές της πλευράς $a=50-200$ nm και για κυματοδηγό με πλάτος $W=450$ nm πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.

Παρατηρούμε πως τα μεγαλύτερα ποσοστά ανάκλασης παρουσιάζει η καμπύλη που αφορά την τιμή $a=200$ nm και συγκεκριμένα φτάνει έως το 30.5% (Σχ. 4.19a).

Στη συνέχεια, ακολουθώντας την ίδια διαδικασία όπως και με τα άλλα σχήματα εγκοπών κάνουμε διερεύνηση για κυματοδηγό με πλάτος $W=1000$ nm. Συγκεκριμένα, μεταβάλλουμε το μήκος της πλευράς d για σταθερή τιμή της πλευράς $a=100$ nm.



Σχήμα 4.20: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος της πλευράς $d=10-1100$ nm του ορθογώνιου παραλληλόγραμμου για $a=100$ nm και για κυματοδηγό με πλάτος $W=450$ nm πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.

Η ανάκλαση, όπως βλέπουμε στο Σχ.4.20 (a), φτάνει στο 20.5% για κυματοδηγό μέσα σε αέρα και 22% για κυματοδηγό πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου για $d=140\text{nm}$.

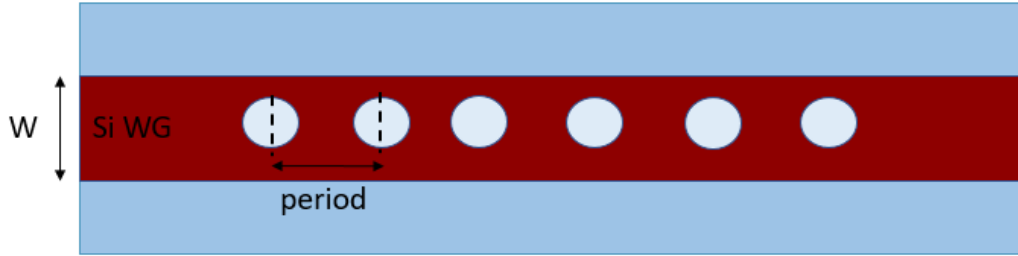
Στη διερεύνησή μας έως τώρα μελετήσαμε και συγκρίναμε την περίπτωση του κυματοδηγού πάνω σε αέρα με την περίπτωση του κυματοδηγού πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου. Στη συνέχεια η βελτιστοποίηση της περιοδικής διάταξης εγχοπών πραγματοποιείται πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου που είναι μια ρεαλιστική διάταξη που θα κατασκευαστεί πειραματικά.

Επίσης θα συνεχίσουμε την πορεία βελτιστοποίησης επιλέγοντας πλάτος κυματοδηγού $W=450\text{ nm}$, δεδομένου ότι η κατάσταση μονορυθμικής λειτουργίας (single mode) είναι πολύ σημαντική για την κατασκευή λειτουργικών και ενεργειακά μη κοστοβόρων ολοκληρωμένων φωτονικών κυκλωμάτων. Η διάσταση του κυματοδηγού θα πρέπει να καθοριστεί έτσι ώστε να κυματοδηγείται μόνο ο θεμελιώδης ρυθμός τόσο για την TE όσο και για την TM πόλωση. Στην περίπτωση του κυματοδηγού με πλάτος $W=1000\text{nm}$ υποστηρίζονται και modes άλλως τάξεων.

Λαμβάνοντας υπόψη τα παραπάνω και συγκρίνοντας τα διαγράμματα που αφορούν την ανάκλαση για την περίπτωση κυματοδηγού $W=450\text{nm}$ και πάνω σε υπόστρωμα καταλήγουμε πως οι κυκλικές εγχοπές λειτουργούν καλύτερα για τις συγκεκριμένες συνθήκες (Kuramochi et al., 2010).

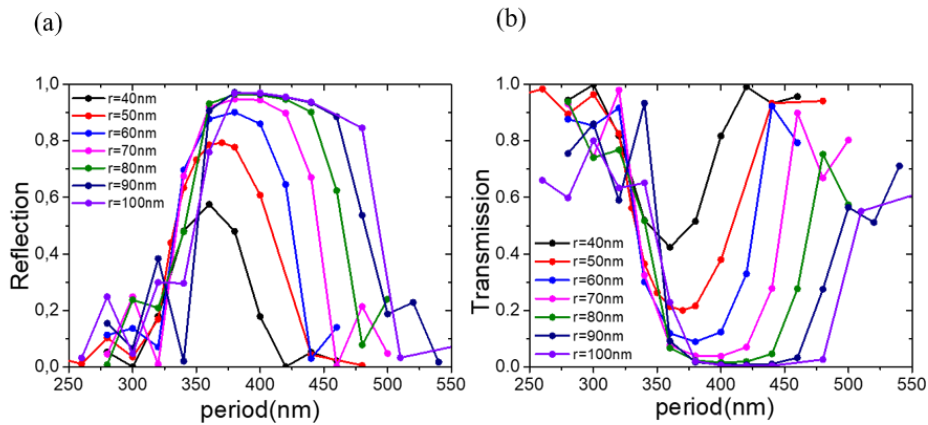
4.2.2.3 Βελτιστοποίηση καθρέφτη Bragg

Αφού έχουμε επιλέξει το σχήμα της εγχοπής που θα χρησιμοποιήσουμε συνεχίζουμε με τη σχεδίαση του καθρέφτη Bragg για μήκος κύματος 1550 nm . Ξεκινάμε από έξι επαναλήψεις (6 κυκλικές εγχοπές) μεταβάλλοντας την ακτίνα r . Μας ενδιαφέρει να προσδιορίσουμε την περίοδο του καθρέφτη Bragg. Ορίζουμε ως περίοδο την απόσταση των κέντρων δύο διαδοχικών εγχοπών, όπως φαίνεται και στο Σχ. 4.21.



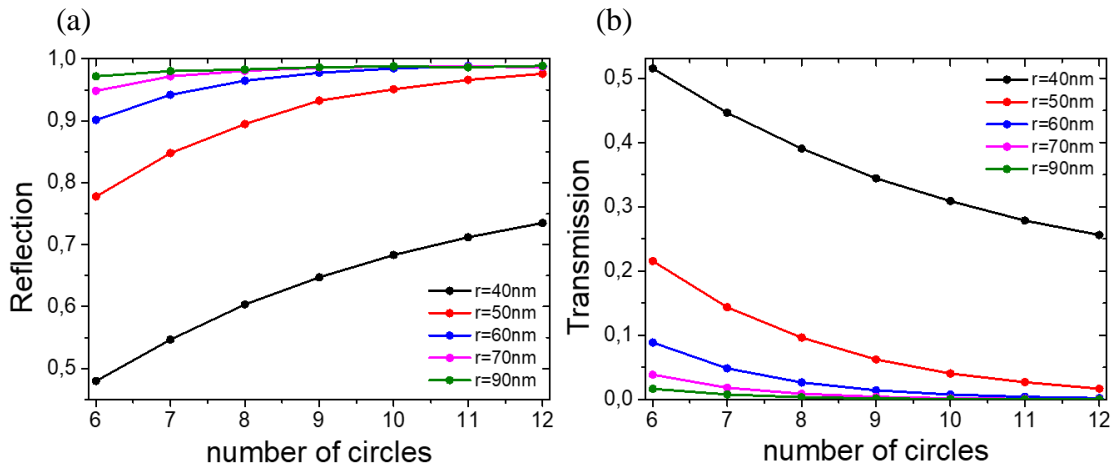
Σχήμα 4.21: x-y cross section κυματοδηγού πυριτίου με κυκλικές οπές αέρα σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου.

Για κυματοδηγό (χωρίς εγκοπές) πάχους $W=450\text{nm}$, ο ενεργός δείκτης διάθλασης $n_{eff} = 2.27$. Υπολογίζουμε θεωρητικά την περίοδο του κυματοδηγού με τη βοήθεια της συνθήκης της μέγιστης ανάκλασης: $n_{eff} \cdot d = \lambda / 2$, όπου d το πλάτος υμενίου. Από τη σχέση αυτή προκύπτει ότι η περίοδος $p \approx 340\text{nm}$. Η προσθήκη εγκοπών αέρα μειώνει το μέσο δείκτη διάθλασης και κατά συνέπεια αναμένουμε μεγαλύτερη περίοδο.



Σχήμα 4.22: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με την περίοδο ($p=250-550\text{nm}$) για συγκεκριμένες τιμές της ακτίνας ($r=40-100\text{nm}$).

Παρατηρούμε πως η μέγιστη ανάκλαση για τις περισσότερες περιπτώσεις συμβαίνει για περίοδο $p=380\text{ nm}$, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.22 (a). Χρησιμοποιώντας τη συγκεκριμένη περίοδο, αυξάνουμε σταδιακά τις επαναλήψεις. Επιλέγουμε τις ενδιάμεσες ακτίνες καθώς οι πολύ μικρές απαιτούν μεγάλο αριθμό επαναλήψεων για να αυξηθεί η ανάκλαση και θα αυξηθεί το footprint της διάταξης, ενώ σε μεγάλες ακτίνες παρατηρείται αύξηση στη σκέδαση.

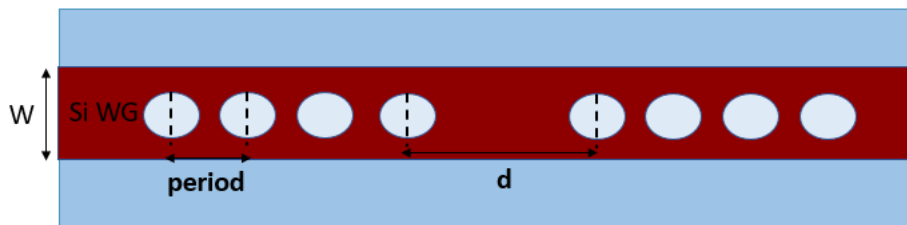


Σχήμα 4.23: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με τον αριθμό των κυκλικών εγκοπών (6-12) για συγκεκριμένες τιμές της ακτίνας ($r=40-90\text{nm}$).

Στο Σχ. 4.23 παρατηρούμε πως όσο αυξάνεται ο αριθμός των επαναλήψεων, αυξάνεται τόσο το ποσοστό της ανάκλασης (όσο και το ποσοστό της σκέδασης) και αντίστοιχα μειώνεται το ποσοστό διέλευσης. Για το λόγο αυτό επιλέγουμε να μην αυξήσουμε περαιτέρω τον αριθμό των επαναλήψεων.

4.2.2.4 Εισαγωγή ατέλειας

Σε αυτό το στάδιο, θα σχεδιάσουμε μια ατέλεια (κοιλότητα) στον καθρέφτη Bragg, διαταράσσοντας την περιοδικότητά του, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.24. Οι δύο μεσαίες εγκοπές απέχουν πλέον απόσταση d μεταξύ τους (η απόσταση αυτή ορίζεται με βάση τα κέντρα των εγκοπών).



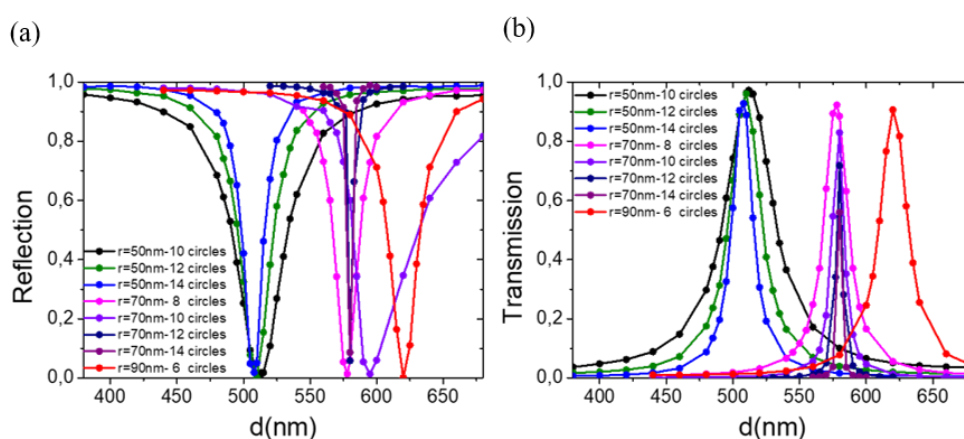
Σχήμα 4.24: x-y cross section κυματοδηγού πυριτίου πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου, όπου απεικονίζεται ο καθρέφτης Bragg και η σχεδιαζόμενη ατέλεια μήκους d .

Ένας εύκολος τρόπος να σπάσει η περιοδικότητα είναι ένα από τα στρώματα του καθρέφτη να αλλάξει διαστάσεις. Το νέο σύστημα αποτελείται από δύο επιμέρους κομμάτια-καθρέπτες. Το φως μπορεί να παγιδευτεί ανάμεσά τους, όπως ακριβώς και σε οποιαδήποτε κοιλότητα που σχηματίζεται από δύο καθρέπτες. Με τον τρόπο αυτό μπορούμε να επιτρέψουμε τη διάδοση του φωτός συγκεκριμένου μήκους κύματος (1550nm) καθώς και να ενισχύσουμε σημαντικά την ένταση του πεδίου στην εν λόγω ατέλεια μέσω της μερικής παγίδευσης του φωτός σε αυτή.

Συνεπώς, έχουμε δημιουργήσει μια κοιλότητα, με χαρακτηριστική συχνότητα μέσα στο χάσμα. Φως μπορεί να διέλθει μέσα από όλο το σύστημα μόνο εάν η συχνότητά του συμπίπτει επακριβώς με την συχνότητα της κοιλότητας.

Υπολογίζουμε το μέγεθος της ατέλειας d μέσω της συνθήκης ενός τετάρτου μήκους κύματος $n_{eff} \cdot d = \lambda / 4 \Rightarrow d = 170nm$. Άρα η απόσταση μεταξύ των δύο μεσαίων εγχοπών θα ισούται με: $340nm + 170nm = 510nm$ (Villeneuve et al., 1995).

Στο σημείο αυτό, θα πραγματοποιήσουμε μια διερεύνηση για διάφορους συνδυασμούς ακτίνας-αριθμούς εγχοπών. Επιλέγουμε να χρησιμοποιήσουμε τις εξής ακτίνες: 50nm, 70 nm και 90 nm. Θα αναζητήσουμε την τιμή d για το μήκος της ατέλειας κατά την οποία η διέλευση T μεγιστοποιείται και αντίστοιχα η ανάκλαση R ελαχιστοποιείται. Μέσα από τη διερεύνηση θα καταλήξουμε σε μία τιμή του μήκους για την κάθε ακτίνα.



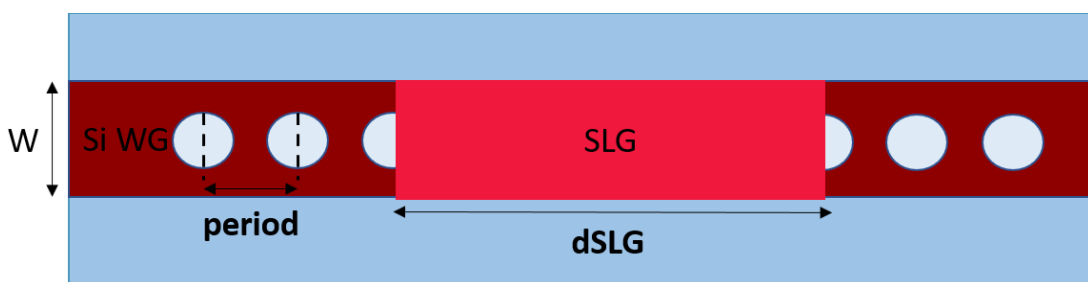
Σχήμα 4.25: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος της ατέλειας του καθρέφτη Bragg για διάφορους συνδυασμούς ακτίνας-αριθμού εγχοπών.

Στο Σχ. 4.25(b) παρατηρούμε πως για ακτίνα $r=50\text{nm}$, η διέλευση μεγιστοποιείται (και αντίστοιχα η ανάκλαση ελαχιστοποιείται) όταν το μήκος της ατέλειας d είναι 510nm . Για ακτίνα $r=70\text{nm}$ η μεγιστοποίηση της διέλευσης συμβαίνει όταν $d=580\text{nm}$ και για ακτίνα $r=90\text{nm}$ στο $d=628\text{nm}$.

4.2.2.5 Εισαγωγή γραφενίου

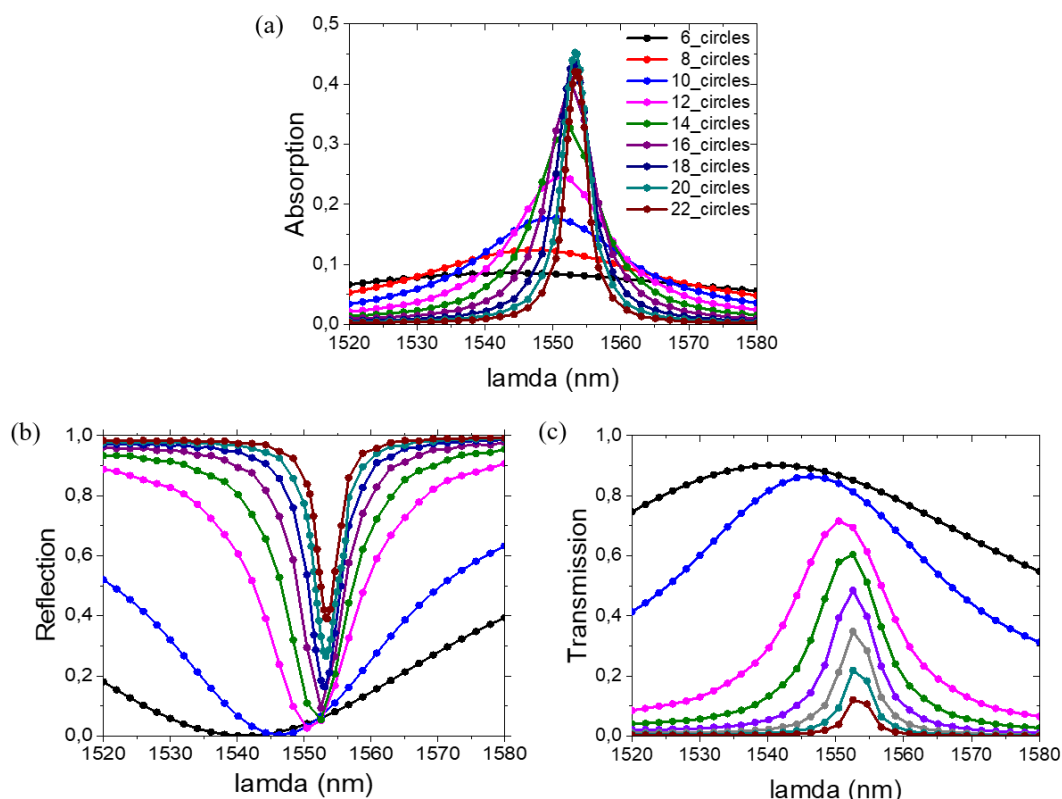
Στη συνέχεια, τοποθετούμε πάνω από την κοιλότητα που δημιουργήσαμε ένα φύλλο γραφενίου (SLG) μήκους 1000nm , όπως φαίνεται και στο Σχ. 4.26. Αρχικά αυξάνουμε σταδιακά τις εγκοπές δεξιά και αριστερά από την κοιλότητα για ακτίνες $r=50,70,90\text{nm}$. Υπολογίζουμε την απορρόφηση του γραφενίου, την ανάκλαση και τη διέλευση σε εύρος μηκών κύματος από 1520 nm έως 1580 nm . Να σημειωθεί πως στη συγκεκριμένη διάταξη το ποσοστό απορρόφησης του γραφενίου δε μπορεί να ξεπεράσει το 50% λόγω συμμετρίας. Η απορρόφηση του γραφενίου υπολογίζεται βάση της Εξ. (4.10): $A(\omega) = \text{Re}[\sigma^*(\omega)|E(\omega)|^2]$ (4.10)

όπου σ η αγωγιμότητα του γραφενίου βάση της θεωρίας Kubo (Hanson, 2008b) η οποία περιγράφει τις οπτικές σταθερές του γραφενίου (αγωγιμότητα και διηλεκτρική συνάρτηση) συμπεριλαμβάνοντας τις ενδοζωνικές και διαζωνικές μεταβάσεις



Σχήμα 4.26: x-y cross section κυματοδηγού πυριτίου σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου με φύλλο γραφενίου τοποθετημένο πάνω από την ατέλεια.

Για ακτίνα $r=50$ και μήκος ατέλειας $d=510\text{nm}$ έχουμε:

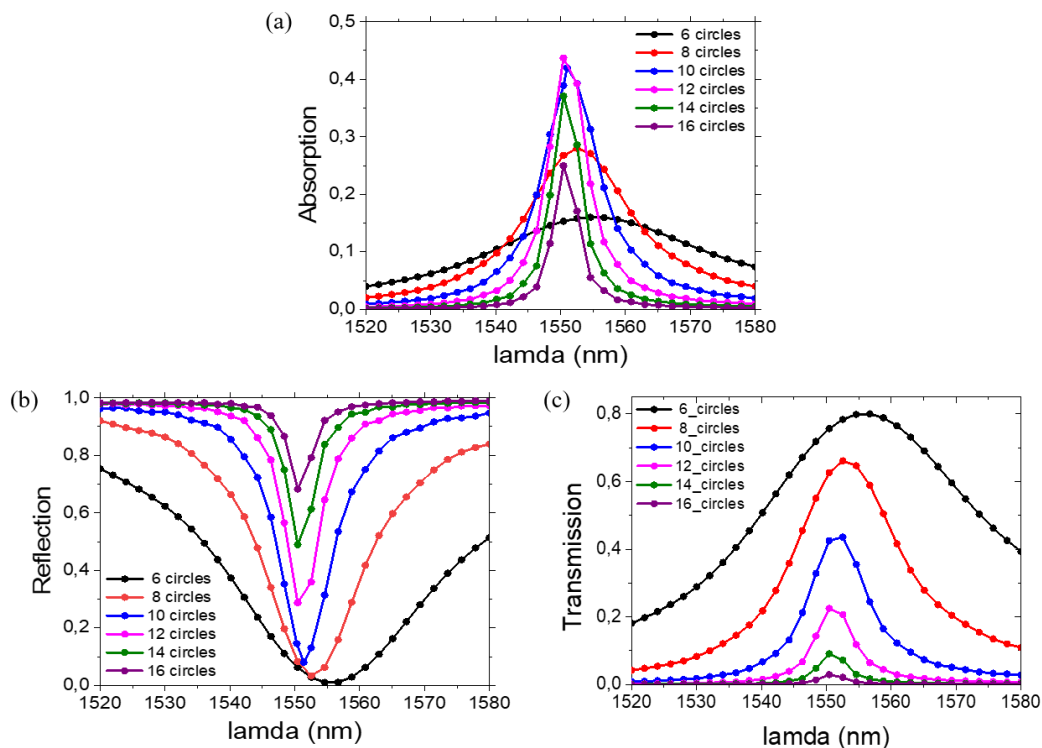


Σχήμα 4.27: Γραφική αναπαράσταση (a) της απορρόφησης A (b) της ανάκλασης R και (c) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1520-1580\text{nm}$) για συγκεκριμένο συνολικό αριθμό εγκοπών (6-22), για την περίπτωση με ακτίνα $r=50$ και μήκος ατέλειας $d=510\text{nm}$.

Στο Σχ. 4.27(a) παρατηρούμε πως η απορρόφηση φτάνει στο 45% για συνολικό αριθμό εγκοπών=20 και μήκος κύματος $\lambda=1553.2\text{nm}$. Εάν θέλουμε να αλλάξουμε το μήκος κύματος του resonance και να το φέρουμε πιο κοντά στα 1550nm μπορούμε απλά να μεταβάλλουμε το μήκος της ατέλειας (Foresi et al., 1997). Όσο αυξάνουμε τις επαναλήψεις εκατέρωθεν της κοιλότητας τόσο πιο στενό γίνεται το φασματικό εύρος της κατάστασης της κοιλότητας και κατά συνέπεια τόσο καλύτερος είναι ο καθρέφτης, κάτι που εκφράζεται και μέσω του συντελεστή ποιότητας που ορίζεται ως ο λόγος $\omega/\Delta\omega$, όπου ω είναι η συχνότητα της κατάστασης κοιλότητας και $\Delta\omega$ το εύρος της κατάστασης στο μισό ύψος της (full width at half maximum).

Ο συντελεστής ποιότητας της κοιλότητας εκφράζει τον αντίστροφο του ρυθμού με τον οποίο η παγιδευμένη ενέργεια διαφεύγει από την κοιλότητα. Όσο καλύτερος είναι ο καθρέφτης τόσο περισσότερο χρόνο παίρνει να διαφύγει το φως και άρα τόσο μεγαλύτερος είναι ο συντελεστής ποιότητας και πιο στενό γίνεται το φασματικό εύρος της κατάστασης της κοιλότητας (Λοιδωρίκης, 2011).

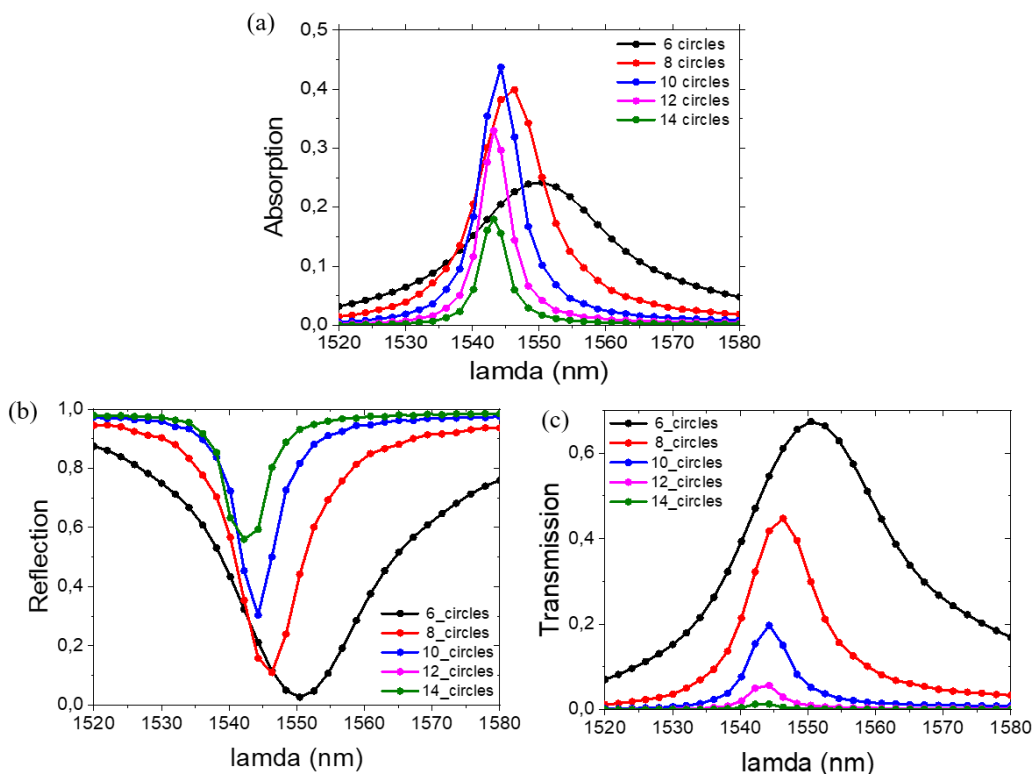
Για ακτίνα $r=70\text{nm}$ και μήκος ατέλειας $d=580\text{nm}$ έχουμε:



Σχήμα 4.28: Γραφική αναπαράσταση (a) της απορρόφησης A (b) της ανάκλασης R και (c) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1520\text{nm}-1580\text{nm}$) για συγκεκριμένο συνολικό αριθμό εγκοπών (6-16), για την περίπτωση με ακτίνα $r=70\text{nm}$ και μήκος ατέλειας $d=580\text{nm}$.

Στο Σχ. 4.28(a) παρατηρούμε πως η απορρόφηση φτάνει στο 43.5% για συνολικό αριθμό εγκοπών=12 και μήκος κύματος $\lambda=1550.5\text{nm}$.

Για ακτίνα $r=90\text{nm}$ και μήκος ατέλειας $d=628\text{nm}$ έχουμε:

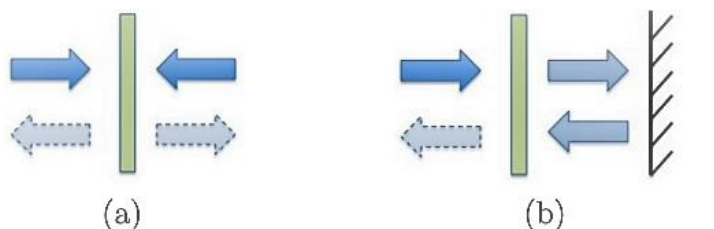


Σχήμα 4.29: Γραφική αναπαράσταση (a) της απορρόφησης A (b) της ανάκλασης R και (c) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1520\text{-}1580\text{nm}$) για συγκεκριμένο συνολικό αριθμό εγχοπών (6-14), για την περίπτωση με ακτίνα $r=90\text{nm}$ και μήκος ατέλειας $d=628\text{nm}$.

Στο Σχ. 4.29(a) παρατηρούμε πως η απορρόφηση φτάνει στο 44% για συνολικό αριθμό εγχοπών=10 και μήκος κύματος $\lambda=1544.5\text{nm}$.

Επιλέγουμε τις βέλτιστες περιπτώσεις και συγκεκριμένα τον αριθμό των εγχοπών για τον οποίο παρουσιάζεται η μέγιστη απορρόφηση για ακτίνες $r=50,70,90$ με βάση τα Σχ.4.27 (a) , Σχ.4.28 (a), Σχ.4.29 (a) αντίστοιχα. Συγκεκριμένα, για ακτίνα $r=50\text{nm}$ η απορρόφηση μεγιστοποιείται όταν ο συνολικός αριθμός εγχοπών είναι 20 (10 μπροστά και 10 πίσω από την κοιλότητα). Για $r=70\text{nm}$ και $r=90\text{nm}$ η μεγιστοποίηση συμβαίνει όταν ο συνολικός αριθμός εγχοπών είναι 12 και 10 αντίστοιχα.

Στη συνέχεια, για να οδηγήσουμε την απορρόφηση του γραφενίου σε ποσοστά μεγαλύτερα του 50% θα πρέπει να σπάσουμε τη συμμετρία της διάταξης. Θα εφαρμόσουμε στη διάταξή μας τη λογική που παρουσιάζει η παρακάτω διάταξη (Σχ. 4.30).



Σχήμα 4.30: 1-D γεωμετρίες για την ενίσχυση της απορρόφησης σε φύλλο γραφενίου μονοατομικού πάχους (a) Συμμετρική διάταξη (b) Κατάργηση συμμετρίας με την προσθήκη ανακλαστικής επιφάνειας (Piper & Fan, 2014).

Στο παραπάνω σχήμα Σχ. 4.30 (a) απεικονίζεται ένα μονοατομικού πάχους φύλλο γραφενίου. Κύματα μπορούν να εισέλθουν και να εξέλθουν και από τις δυο πλευρές της διάταξης και για το λόγο αυτό η συγκεκριμένη διάταξη που περιβάλλεται από αέρα αποτελεί ένα σύστημα δύο εισόδων. Στη διάταξη που φαίνεται στο σχήμα Σχ. 30(b) έχει γίνει προσθήκη μιας ανακλαστικής επιφάνειας (καθρέφτη) η οποία καταργεί τη συμμετρία. Το φως τώρα μπορεί να εισέλθει μόνο από τη μια πλευρά και συγκεκριμένα την αριστερή. Το συγκεκριμένο σύστημα θεωρείται σύστημα μονής εισόδου. Η απορρόφηση στα παραπάνω συστήματα υπολογίζεται από τη σχέση:

$$A = \frac{4\gamma_\alpha\gamma_d}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma_\alpha + \gamma_d)^2} \quad (4.11)$$

όπου

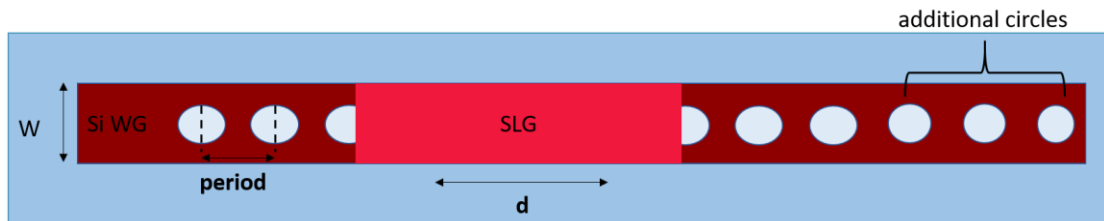
γ_α : ο συνολικός ρυθμός απορρόφησης του συστήματος

γ_δ : ο συνολικός ρυθμός διαφυγής της ενέργειας από την κοιλότητα

ω_0 : η συχνότητα συντονισμού

Στη συμμετρική περίπτωση και σε κατάσταση συντονισμού ($\omega = \omega_0$), δηλαδή όταν ο ρυθμός απορρόφησης στο γραφένιο ταιριάζει απόλυτα με τον ρυθμό διαφυγής της ενέργειας ($\gamma_\alpha = \gamma_\delta$), τότε ο συντελεστής απορρόφησης είναι γνωστό πως δε μπορεί να ξεπεράσει το 50%. Αντιθέτως, όταν στη διάταξη υπάρχει μεγάλου πάχους καθρέφτης (μη συμμετρική διάταξη) παρατηρείται μηδενική διέλευση T καθώς τα κύματα που εισέρχονται στη διάταξή και καταφέρνουν να διέλθουν από το υμένιο

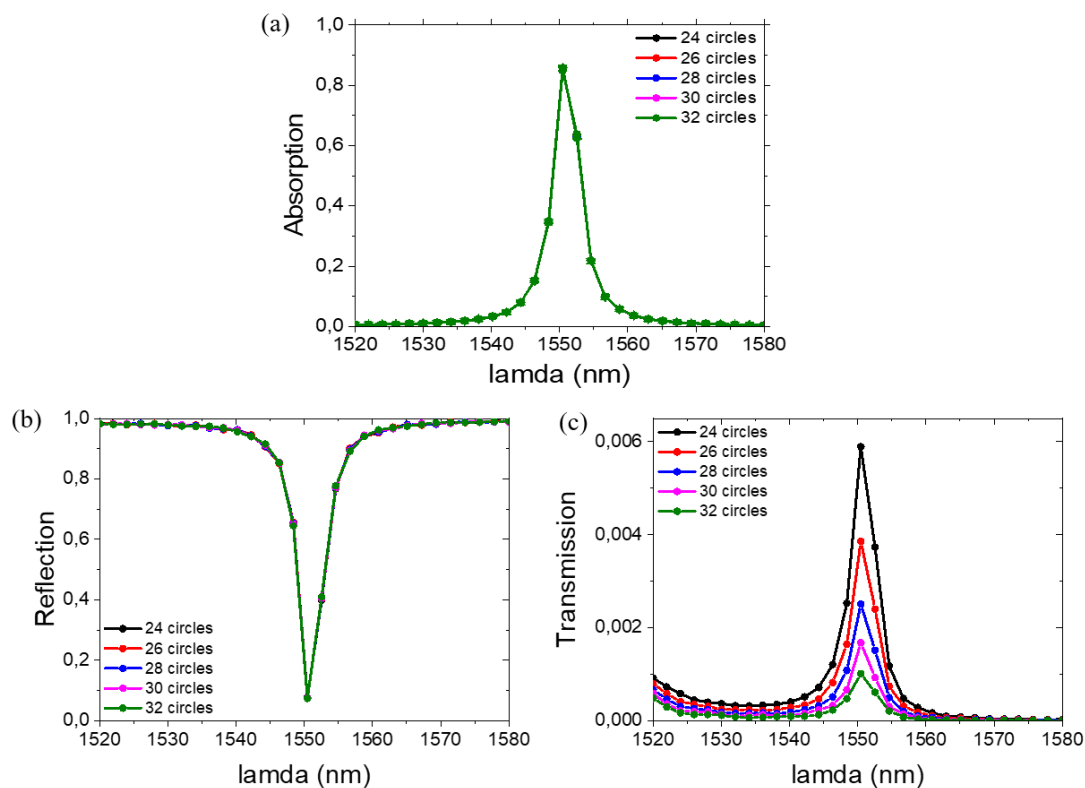
ανακλώνται πίσω σε αυτό από τον καθρέφτη. Τα ανακλώμενα από τον καθρέφτη κύματα προστίθενται στα εισερχόμενα κύματα, ενισχύοντας το ποσοστό της απορρόφησης. Το ποσοστό της απορρόφησης σε αυτή την περίπτωση μπορεί ιδανικά να φτάσει στο 100%. Στη δική μας διάταξη αυτό θα το πετύχουμε με αύξηση των εγκοπών δεξιά της εγκοπής, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.31.



Σχήμα 4.31: x-y cross section κυματοδηγού πυριτίου πάνω σε υπόστρωμα διοξειδίου του πυριτίου με πρόσθετες εγκοπές δεξιά της ατέλειας.

Παρακάτω παρουσιάζονται τα διαγράμματα απορρόφησης A , ανάκλασης R και διέλευσης T .

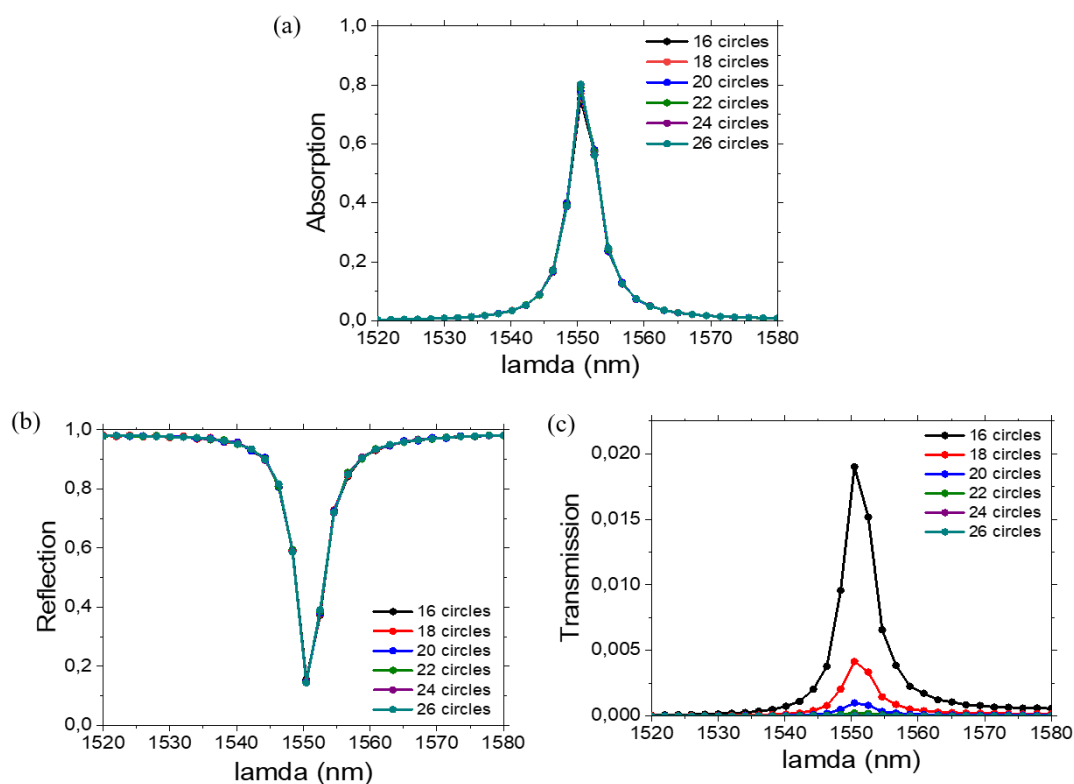
Για $r=50\text{nm}$ και αριθμό εγκοπών αριστερά από την κοιλότητα:10



Σχήμα 4.32: Γραφική αναπαράσταση (a) της απορρόφησης A (b) της ανάκλασης R και (c) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1520-1580\text{nm}$) για συγκεκριμένο αριθμό εγκοπών δεξιά από την κοιλότητα (24-32), για την περίπτωση με ακτίνα $r=50\text{nm}$ και αριθμό εγκοπών αριστερά από την κοιλότητα:10.

Στο Σχ. 4.32(a) παρατηρούμε πως η απορρόφηση φτάνει στο 89% για συνολικό αριθμό εγκοπών=32 και μήκος κύματος $\lambda=1550.5\text{nm}$. Γενικά, όσο αυξάνουμε τις εγκοπές δεξιά τις κοιλότητας μειώνονται τα ποσοστά τόσο της ανάκλασης όσο της διέλευσης, πράγμα που σημαίνει πως η ακτινοβολία εγκλωβίζεται αποτελεσματικότερα στην κοιλότητα. Ωστόσο, η περαιτέρω προσθήκη εγκοπών δε διαφοροποιεί σημαντικά τα ποσοστά της διέλευσης για το λόγο αυτό δεν υπάρχει λόγος περαιτέρω αύξησής τους. Να σημειωθεί πως το μήκος κύματος της ατέλειας στη συγκεκριμένη περίπτωση επιλέξαμε να είναι $d=505\text{nm}$ για να μετατοπίσουμε το μήκος κύματος του resonance.

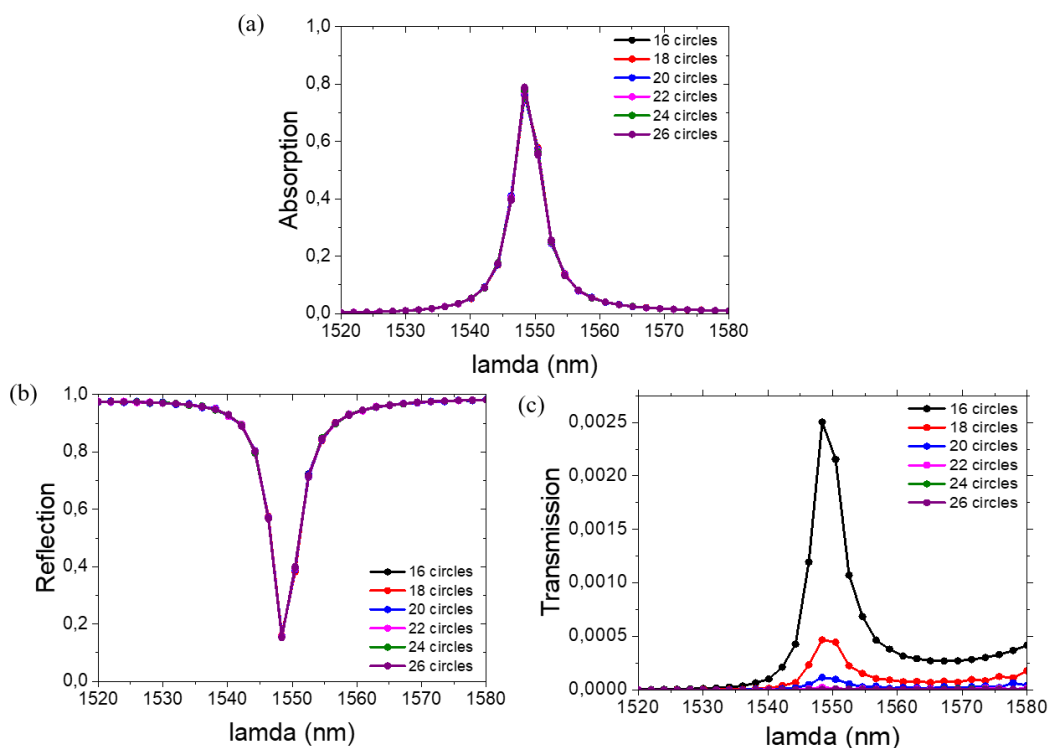
Για $r=70\text{nm}$ και αριθμό εγκοπών αριστερά από την κοιλότητα:6



Σχήμα 4.33: Γραφική αναπαράσταση (a) της απορρόφησης A (b) της ανάκλασης R και (c) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1520-1580\text{nm}$) για συγκεκριμένο αριθμό εγκοπών δεξιά από την κοιλότητα (16-26), για την περίπτωση με ακτίνα $r=70\text{nm}$ και αριθμό εγκοπών αριστερά από την κοιλότητα:6

Στο Σχ. 4.33(a) παρατηρούμε πως η απορρόφηση φτάνει στο 80% για συνολικό αριθμό εγκοπών=26 και μήκος κύματος $\lambda=1550.5\text{nm}$.

Για $r=90\text{nm}$ και αριθμό εγκοπών αριστερά από την κοιλότητα:6



Σχήμα 4.34: Γραφική αναπαράσταση (a) της απορρόφησης A (b) της ανάκλασης R και (c) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1520-1580\text{nm}$) για συγκεκριμένο αριθμό εγκοπών δεξιά από την κοιλότητα (16-26), για την περίπτωση με ακτίνα $r=90\text{nm}$ και αριθμό εγκοπών αριστερά από την κοιλότητα:6

Στο Σχ. 4.34(a) παρατηρούμε πως η απορρόφηση φτάνει στο 80% για αριθμό εγκοπών δεξιά της κοιλότητας=26 και μήκος κύματος $\lambda=1548.5\text{nm}$. Για τις περιπτώσεις όπου η ακτίνα $r=50\text{nm}$ ο αριθμός των εγκοπών δεξιά της κοιλότητας θα είναι 32, ενώ για τις περιπτώσεις όπου η ακτίνα $r=70\text{nm}$ και $r=90\text{nm}$ θα είναι 26.

4.2.2.6 Critical coupling

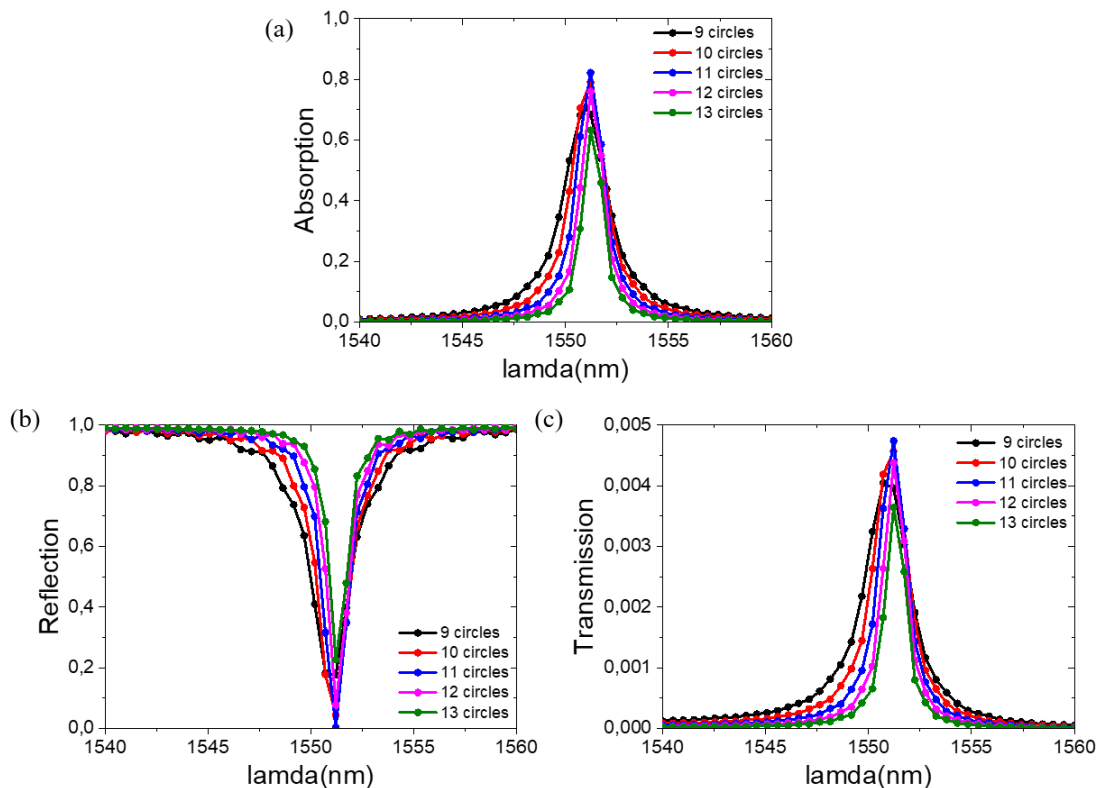
Για να μεγιστοποιήσουμε την απορρόφηση στο γραφένιο θα πρέπει να πετύχουμε critical coupling, δηλαδή να ταιριάξουμε το ρυθμό με τον οποίο απορροφά το γραφένιο την ακτινοβολία με το ρυθμό που με το ρυθμό που αυτή διαφεύγει από την κοιλότητα.

Το critical coupling στη δική μας διάταξη μπορεί να γίνει με δυο τρόπους. Ο πρώτος τρόπος είναι να μεταβάλλουμε τον αριθμό των εγκοπών αριστερά από την

κοιλότητα διατηρώντας σταθερό το μήκος του φύλλου γραφενίου. Στο δεύτερο τρόπο ακολουθούμε την αντίστροφη διαδικασία, δηλαδή διατηρούμε σταθερό τον αριθμό των εγχοπών αριστερά από την κοιλότητα και μεταβάλλουμε σταδιακά το μήκος του γραφενίου. Όσο μικρότερο είναι το μήκος του φύλλου γραφενίου dSLG, τόσο μικρότερος είναι και ο ρυθμός απορρόφησης. Αντίστοιχα όσο μεγαλύτερο το μήκος dSLG τόσο μεγαλύτερος και ο ρυθμός απορρόφησης. Όσον αφορά τις εγχοπές, μεγαλύτερος ρυθμός διαφυγής από την κοιλότητα συνδέεται με μικρό αριθμό εγχοπών μπροστά από αυτή.

Σε πρώτο στάδιο θα χρησιμοποιήσουμε τον πρώτο τρόπο που περιγράψαμε για να πετύχουμε το critical coupling. Επιλέγουμε συγκεκριμένες τιμές του μήκους dSLG=250nm, 500nm, 1000nm και 2000nm και μεταβάλλουμε τον αριθμό των εγχοπών μπροστά από την κοιλότητα.

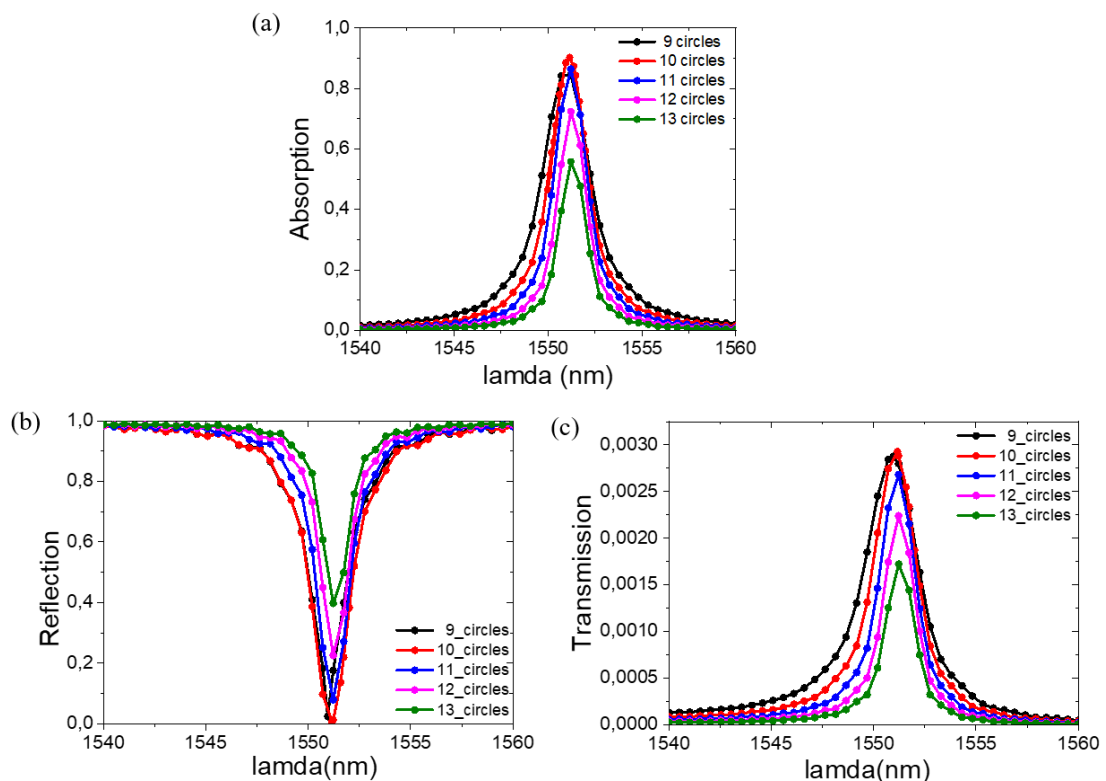
Για dSLG=250nm:



Σχήμα 4.35: Γραφική αναπαράσταση (a) της απορρόφησης A (b) της ανάκλασης R και (c) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1540-1560\text{nm}$) για συγκεκριμένες τιμές αριθμού εγχοπών μπροστά από την κοιλότητα (9-13) και μήκος φύλλου γραφενίου dSLG=250nm.

Στο Σχ. 4.35(a) φαίνεται πως η απορρόφηση φτάνει στο 82% για αριθμό εγκοπών μπροστά από την ατέλεια=11 και μήκος κύματος $\lambda=1551.2\text{nm}$. Γενικά όσο αυξάνουμε το μήκος του φύλλου γραφενίου, αναμένουμε ότι το critical coupling θα συμβαίνει όταν μειώνονται οι εγκοπές μπροστά από την κοιλότητα.

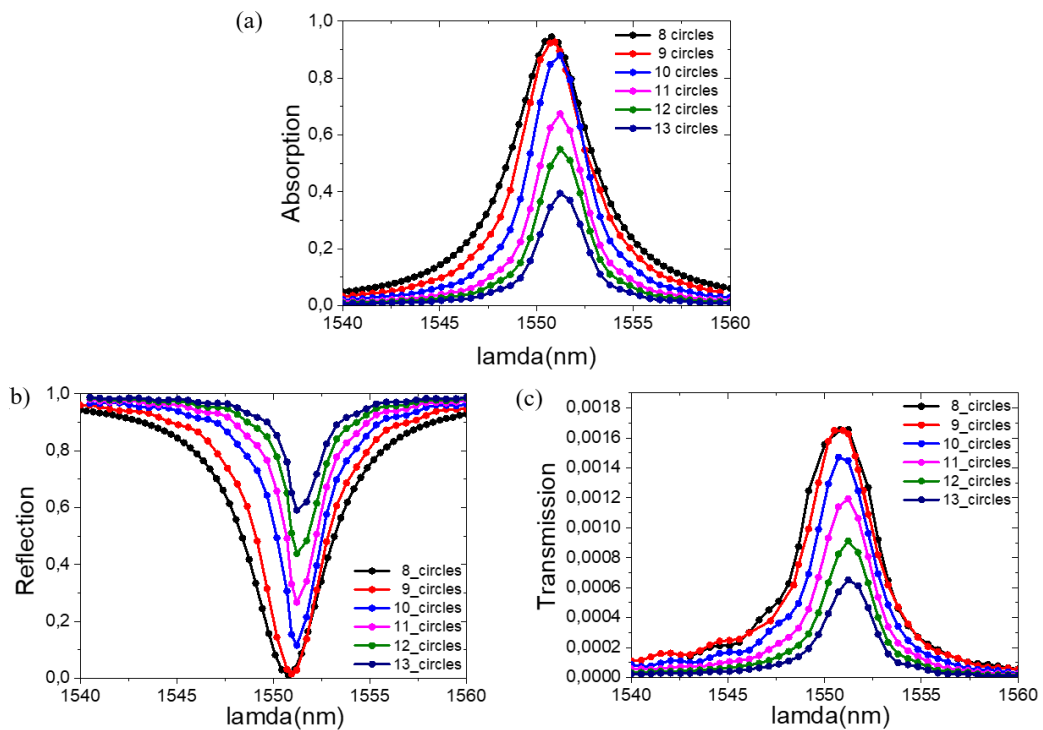
Για $d\text{SLG}=500\text{nm}$:



Σχήμα 4.36: Γραφική αναπαράσταση (a) της απορρόφησης A (b) της ανάκλασης R και (c) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1540\text{-}1560\text{nm}$) για συγκεκριμένες τιμές αριθμού εγκοπών μπροστά από την κοιλότητα (9-13) και μήκος φύλλου γραφενίου $d\text{SLG}=500\text{nm}$.

Στο Σχ. 4.36(a) παρατηρούμε πως η απορρόφηση φτάνει στο 90% για αριθμό εγκοπών μπροστά από την ατέλεια=10 και μήκος κύματος $\lambda=1551.2\text{nm}$.

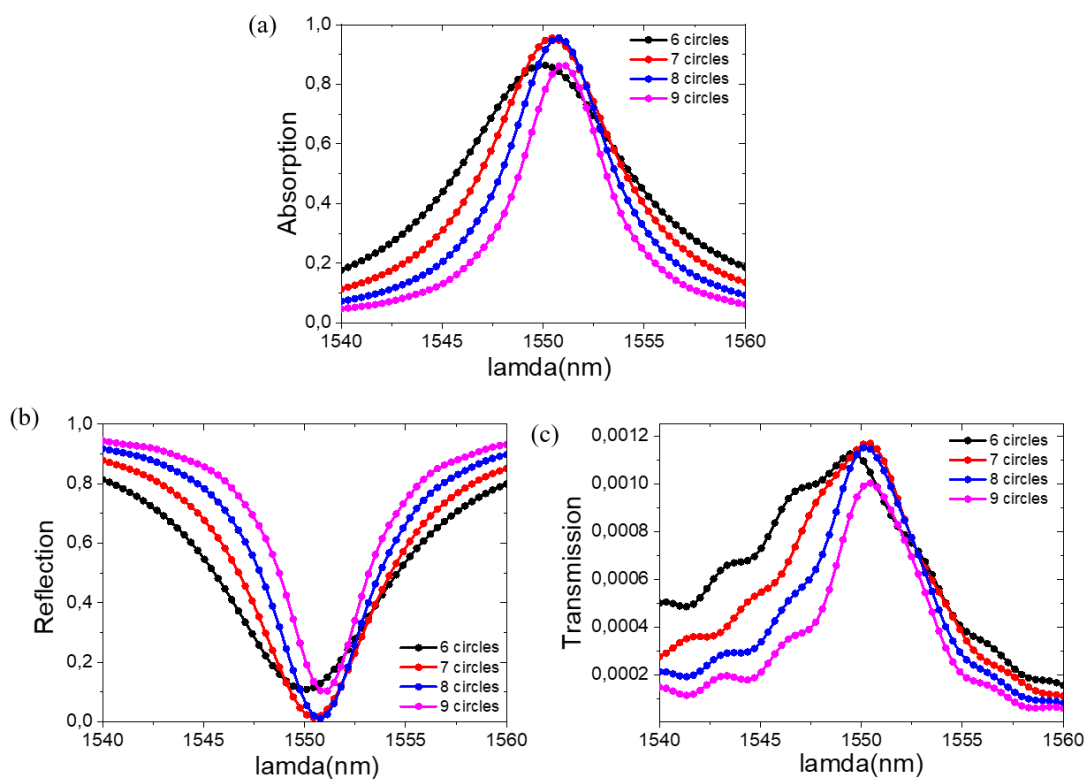
Για dSLG=1000nm:



Σχήμα 4.37: Γραφική αναπαράσταση (a) της απορρόφησης A (b) της ανάκλασης R και (c) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1540-1560$ nm) για συγκεκριμένες τιμές αριθμού εγκοπών μπροστά από την κοιλότητα (8-13) και μήκος φύλλου γραφενίου dSLG=1000nm.

Στο Σχ. 4.37(a) παρατηρούμε πως η απορρόφηση φτάνει στο 94% για αριθμό εγκοπών μπροστά από την ατέλεια=9 και μήκος κύματος $\lambda=1551$ nm.

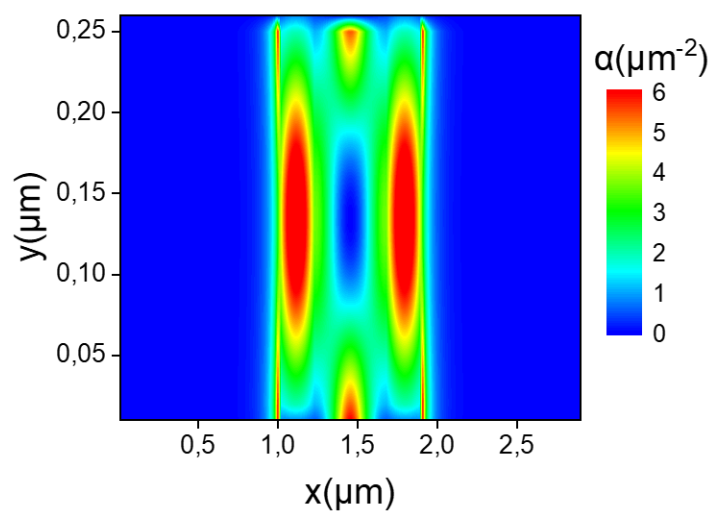
Για dSLG=2000nm:



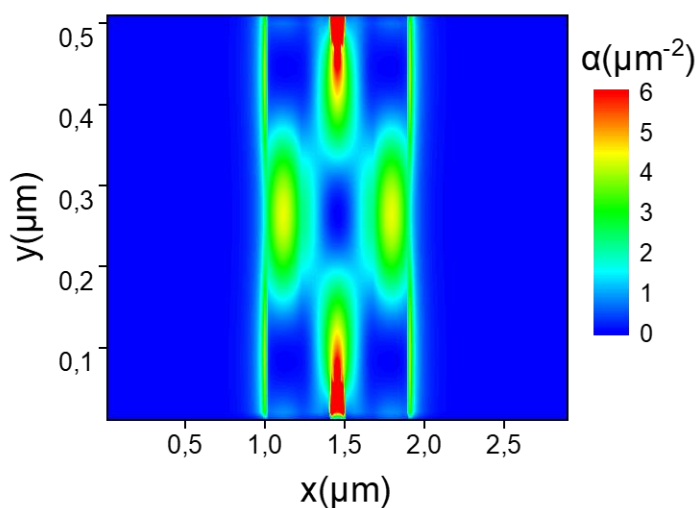
Σχήμα 4.38: Γραφική αναπαράσταση (a) της απορρόφησης A (b) της ανάκλασης R και (c) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1540-1560\text{nm}$) για συγκεκριμένες τιμές αριθμού εγχοπών μπροστά από την κοιλότητα (6-9) και μήκος φύλλου γραφενίου dSLG=2000nm.

Στο Σχ. 4.38(a) παρατηρούμε πως η απορρόφηση φτάνει στο 95.5% για αριθμό εγχοπών μπροστά από την ατέλεια=7 και μήκος κύματος $\lambda=1550.4\text{nm}$. Επειδή το μήκος του φύλλου γραφενίου είναι σχετικά μεγάλο, το critical coupling συμβαίνει για μικρό αριθμό εγχοπών.

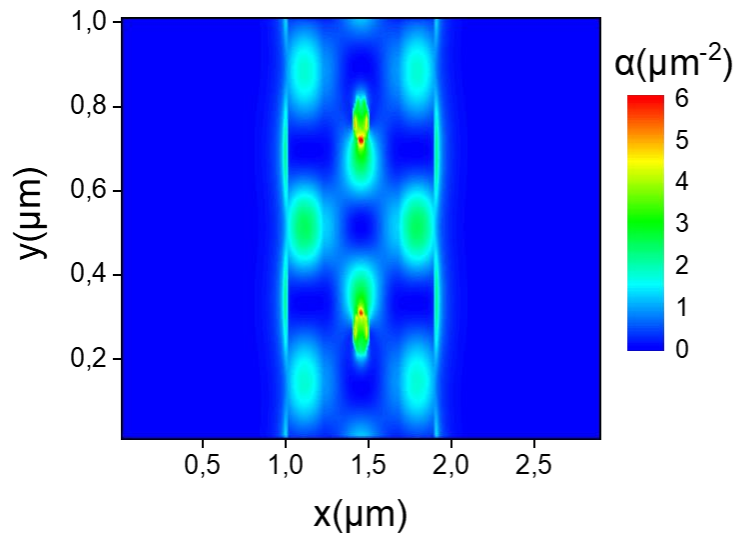
Στο σημείο αυτό παρουσιάζουμε τους χάρτες απορρόφησης του γραφενίου για τις παραπάνω βέλτιστες περιπτώσεις.



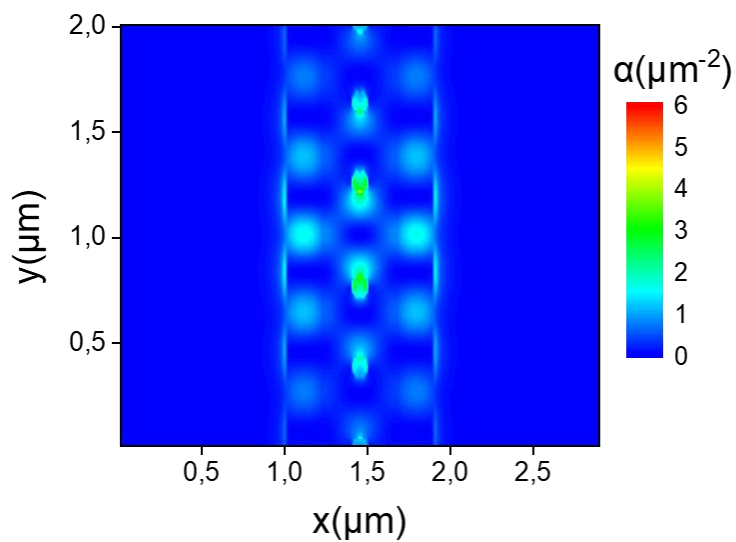
Σχήμα 4.39: Επιφανειακή απορρόφηση στο γραφένιο για την περίπτωση με μήκος φύλλου γραφενίου dSLG=250nm.



Σχήμα 4.40: Επιφανειακή απορρόφηση στο γραφένιο για την περίπτωση με μήκος φύλλου γραφενίου dSLG=500nm.



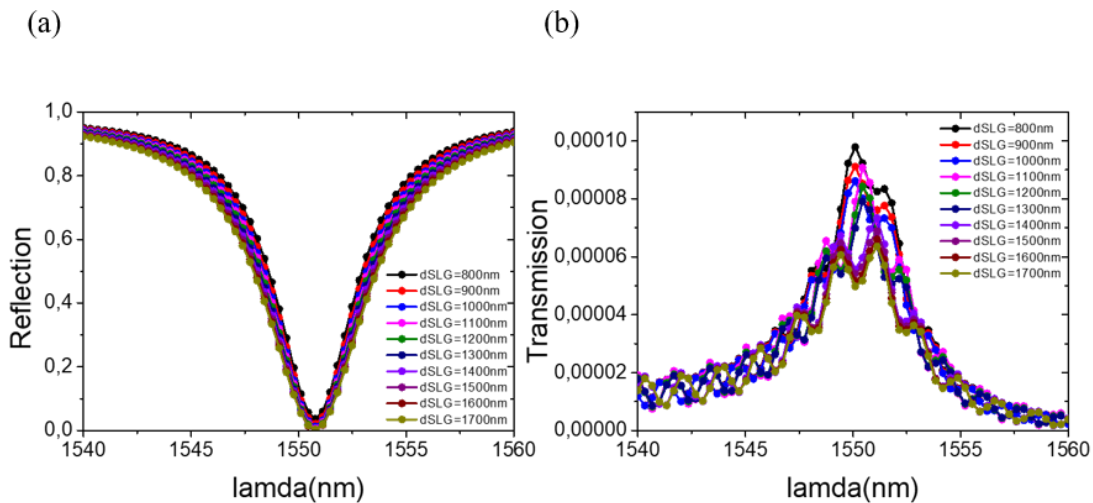
Σχήμα 4.41: Επιφανειακή απορρόφηση στο γραφένιο για την περίπτωση με μήκος φύλλου γραφενίου dSLG=1000nm.



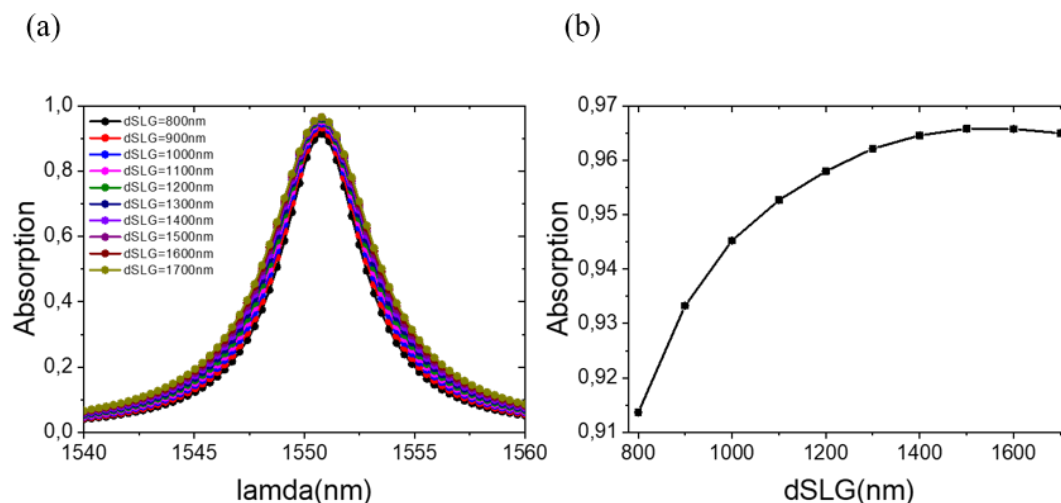
Σχήμα 4.42: Επιφανειακή απορρόφηση στο γραφένιο για την περίπτωση με μήκος φύλλου γραφενίου dSLG=2000nm.

Στη συνέχεια προσεγγίζουμε το critical coupling και με το δεύτερο τρόπο. Επιλέγουμε συγκεκριμένο αριθμό εγκοπών μπροστά από την κοιλότητα και μεταβάλλουμε σταδιακά το μήκος του γραφενίου. Μελετούμε δύο περιπτώσεις: (a) μήκος γραφενίου dSLG=800-1700nm και αριθμό εγκοπών:8 (b) μήκος γραφενίου dSLG=100-500nm και αριθμό εγκοπών:11.

Για μήκος γραφενίου dSLG=800-1700nm:

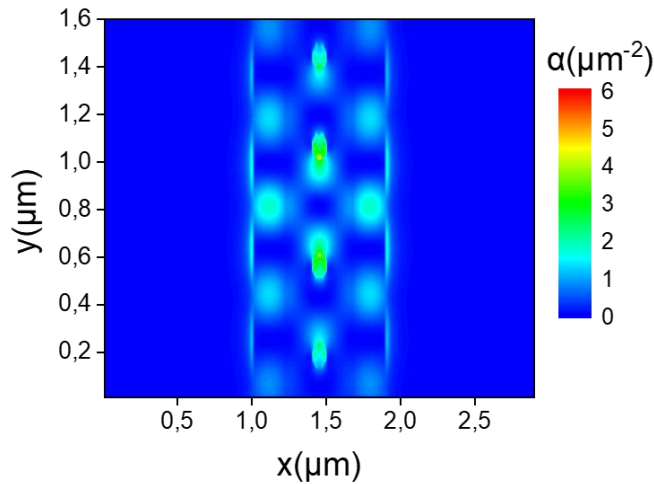


Σχήμα 4.43: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1540-1560\text{nm}$) για μήκη γραφενίου (dSLG=800-1700nm), για την περίπτωση με αριθμό εγκοπών μπροστά από την κοιλότητα:8.



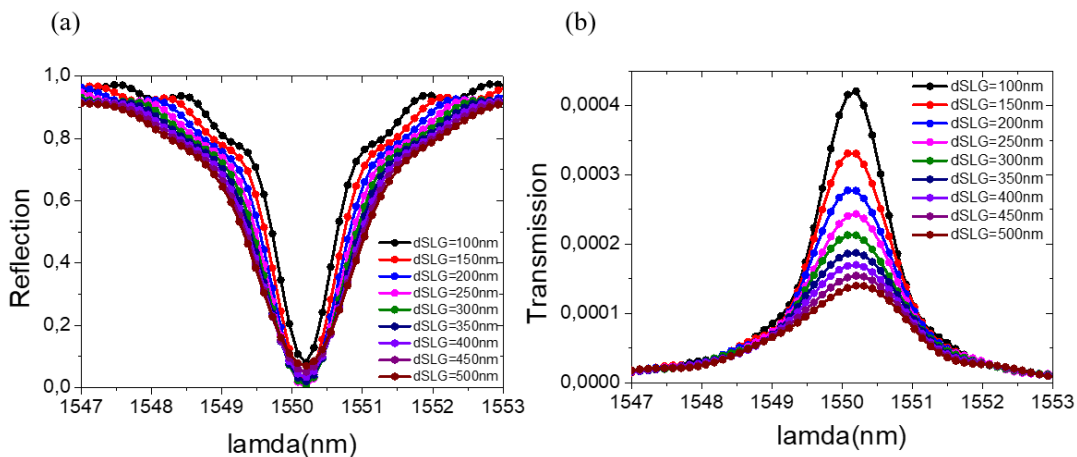
Σχήμα 4.44: Γραφική αναπαράσταση της απορρόφησης A σε συνάρτηση (a) με το μήκος κύματος ($\lambda=1540-1560\text{nm}$) για μήκη γραφενίου (dSLG=800-1700nm) (b) με τα μήκη γραφενίου που αντιστοιχούν στις μέγιστες τιμές της απορρόφησης του Σχ.4.44(a), για την περίπτωση με αριθμό εγκοπών μπροστά από την κοιλότητα:8.

Παρατηρούμε πως η μέγιστη απορρόφηση ανέρχεται στο 96.5% για μήκος γραφενίου dSLG=1600nm. Το μήκος κύματος που συμβαίνει αυτό είναι τα 1550.8nm. Ο αντίστοιχος χάρτης απορρόφησης του γραφενίου απεικονίζεται στο Σχ.4.45.

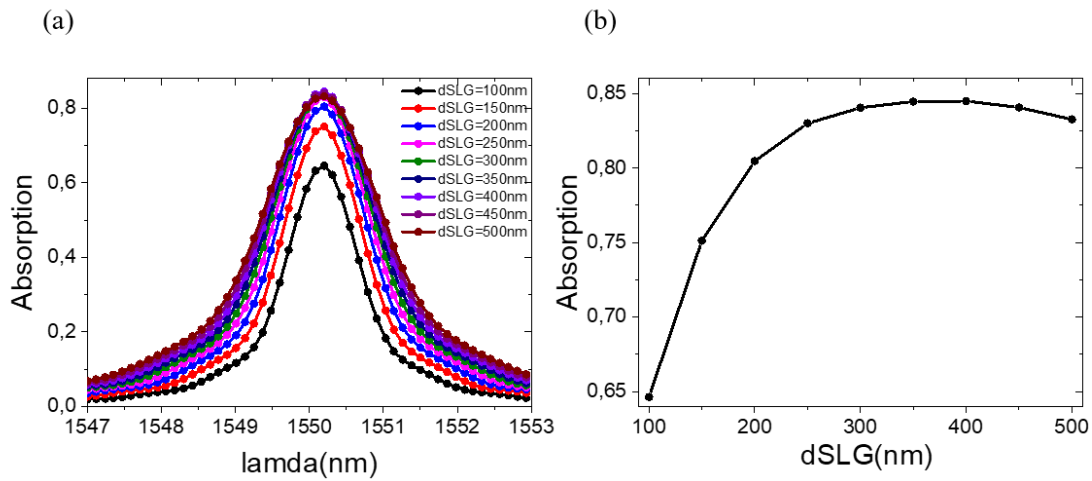


Σχήμα 4.45: Επιφανειακή απορρόφηση στο γραφένιο για την περίπτωση με μήκος φύλλου γραφενίου dSLG=1600nm.

Για μήκος γραφενίου dSLG=100-500nm:

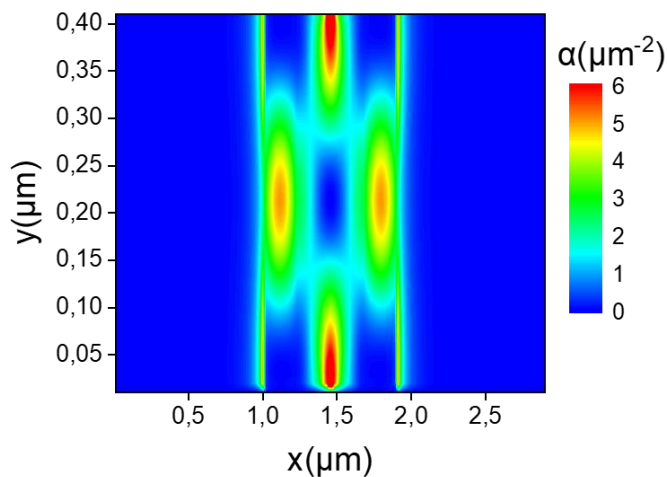


Σχήμα 4.46: Γραφική αναπαράσταση (a) της ανάκλασης R και (b) της διέλευσης T σε συνάρτηση με το μήκος κύματος ($\lambda=1547-1553\text{nm}$) για συγκεκριμένες τιμές του μήκους γραφενίου (dSLG=100-500nm), για την περίπτωση με αριθμό εγκοπών μπροστά από την κοιλότητα:11.



Σχήμα 4.47: Γραφική αναπαράσταση της απορρόφησης A σε συνάρτηση (a) με το μήκος κύματος ($\lambda=1547-1553\text{nm}$) για μήκη γραφενίου ($d\text{SLG}=100-500\text{nm}$) (b) με τα μήκη γραφενίου που αντιστοιχούν στις μέγιστες τιμές της απορρόφησης του Σχ.4.47(a), για την περίπτωση με αριθμό εγκοπών μπροστά από την κοιλότητα:11

Παρατηρούμε πως η μέγιστη απορρόφηση ανέρχεται στο 84.5% για πλάτος γραφενίου $d\text{SLG}=400\text{nm}$. Το μήκος κύματος που συμβαίνει αυτό είναι τα 1550.2nm. Ο αντίστοιχος χάρτης απορρόφησης του γραφενίου απεικονίζεται στο Σχ. 4.48.



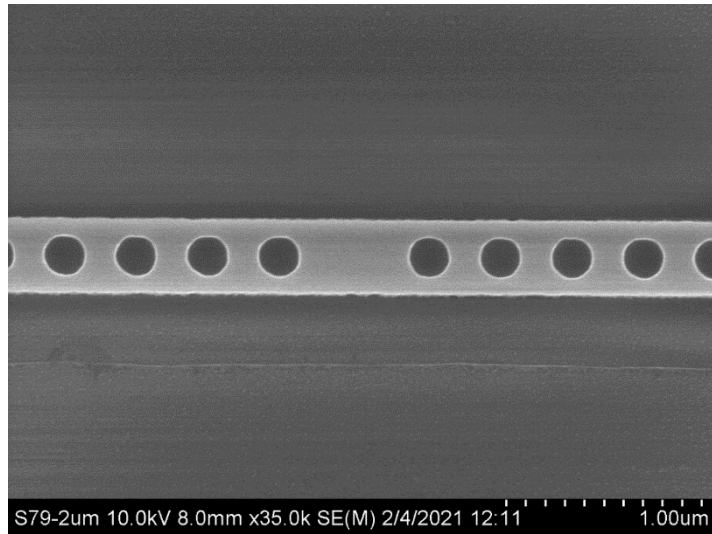
Σχήμα 4.48: Επιφανειακή απορρόφηση στο γραφένιο για την περίπτωση με μήκος φύλλου γραφενίου πλάτους γραφενίου $d\text{SLG}=400\text{nm}$.

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στο πλαίσιο της παρούσας μεταπτυχιακής διατριβής μελετήθηκε υπολογιστικά ένας φωτοανιχνευτής γραφενίου με στόχο την εφαρμογή του σε ολοκληρωμένο κύκλωμα τηλεπικοινωνιών. Σκοπός της μελέτης είναι η βελτιστοποίηση της απόδοσης του φωτοανιχνευτή μέσω της ενίσχυση της απορρόφησης του γραφενίου.

Συγκεκριμένα, σχεδιάστηκε ένας φωτονικός κρύσταλλος στον κυματοδηγό Si ο οποίος αποτελείται από μια περιοδική διάταξη γεωμετρικών εγκοπών (κύκλοι, τετράγωνα κ.α.), με στόχο τη δημιουργία προκαθορισμένου φωτονικού χάσματος στο φασματικό εύρος των οπτικών συστημάτων τηλεπικοινωνιών. Αφού επιλέξαμε το σχήμα εγκοπής, την ακτίνα και την περίοδο, σχεδιάσαμε μια ατέλεια στην περιοδική δομή του φωτονικού κρυστάλλου, επιτρέποντας τη διάδοση του φωτός συγκεκριμένου μήκους κύματος π.χ. 1550 nm καθώς και τη σημαντική ενίσχυση της έντασης του πεδίου του μέσω της μερικής παγίδευσης του φωτός στην εν λόγω κοιλότητα. Τοποθετήσαμε γραφένιο πάνω από τη σχεδιαζόμενη ατέλεια και με μεταβολές του μήκους του φύλλου γραφενίου και του αριθμού των εγκοπών πετύχαμε το critical coupling. Στη βέλτιστη περίπτωση, όπου το μήκος του φύλλου γραφενίου ήταν $dSLG=1600\text{nm}$ και ο αριθμός των εγκοπών μπροστά από την κοιλότητα ήταν 8 η απορρόφηση από ένα μόνο φύλλο γραφενίου ανήλθε στο 96.5% πράγμα που σημαίνει πως η απορρόφηση στο γραφένιο ενισχύθηκε εξαιρετικά.

Το γεγονός αυτό καθιστά την υπό μελέτη διάταξη ιδανική για την λειτουργία της ως φωτοανιχνευτή και μπορεί να αποτελέσει βάση για περαιτέρω έρευνα και εξαγωγή των ηλεκτρικών χαρακτηριστικών του φωτοανιχνευτή. Αξίζει να σημειωθεί πως η διάταξη που βελτιστοποιήσαμε ξεκίνησε να κατασκευάζεται πειραματικά σε συνεργασία με το Technion - Ινστιτούτο Τεχνολογίας του Ισραήλ και το Πανεπιστήμιο του Cambridge. Παρακάτω, παραθέτουμε την εικόνα SEM που δείχνει τη φωτονική κοιλότητα της διάταξης.



Σχήμα 4.49: Εικόνα SEM κυματοδηγού Si που δείχνει την περιοδική διάταξη των γεωμετρικών εγκοπών και την ατέλεια της φωτονικής κοιλότητας.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- Γερολυμάτος, Π. (2012). *Μελέτη φαινομένων διάδοσης σε διηλεκτρικούς φωτονικούς κυματοδηγούς* (Διδακτορική Διατριβή). Εθνικό Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών.
- Κορδάτος, Κ. (2006). *Αλλοτροπικές Μορφές Άνθρακα, Φουλερένια - Νανοσωλήνες Άνθρακα*. Αθήνα: ΕΜΠ.
- Λιοδάκης, Σ. (2005). *Εφαρμοσμένη Ανόργανη Χημεία*. Αθήνα: Εκδόσεις Παρισιάνος.
- Λοιδωρίκης, Ε. (2011). *Σημειώσεις για το μάθημα Φωτονικά Υλικά*.
- Τραχανάς, Σ. (2015). *Κβαντομηχανική Ι*. Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης.
- A. H. Castro Neto, Guinea, F., N. M. R. Peres, Novoselov, K. S., & Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, *81*(1), 109–162.
- Abergel, D. S. L., Apalkov, V., Berashevich, J., Ziegler, K., & Chakraborty, T. (2010). Properties of graphene: a theoretical perspective. *Advances in Physics*, *59*(4), 261–482.
- Ado Jorio, Riichiro Saito, Dresselhaus, G., & Dresselhaus, M. S. (2011). *Raman Spectroscopy in Graphene Related Systems JORIO: RAMAN O-BK*. Weinheim, Germany Wiley-Vch Verlag Gmbh & Co. Kga.
- Akinsunmade, A., Karczewski, J., Mazurkiewicz, E., & Tomecka-Suchoń, S. (2019). Finite-difference time domain (FDTD) modeling of ground penetrating radar pulse energy for locating burial sites. *Acta Geophysica*, *67*(6), 1945–1953.
- Balandin, A. A., Ghosh, S., Bao, W., Calizo, I., Teweldebrhan, D., Miao, F., & Lau, C. N. (2008). Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene. *Nano Letters*, *8*(3), 902–907.
- Bao, Q., & Loh, K. P. (2012). Graphene Photonics, Plasmonics, and Broadband Optoelectronic Devices. *ACS Nano*, *6*(5), 3677–3694.
- Bellas, Dimitris. V. (2015). *Computational study, design and applications of nano-composite metallo-dielectric photonic materials* (Phd). University of Ioannina.
- Berenger, J.-P. (1994). A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *Journal of Computational Physics*, *114*(2), 185–200.
- Bonaccorso, F., Sun, Z., Hasan, T., & Ferrari, A. C. (2010). Graphene photonics and

- optoelectronics. *Nature Photonics*, 4(9), 611–622.
- Chang, W. S. C. (2009). *Fundamentals of Guided-Wave Optoelectronic Devices*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Chen, C.-F., Park, C.-H., Boudouris, B. W., Horng, J., Geng, B., Girit, C., ... Wang, F. (2011). Controlling inelastic light scattering quantum pathways in graphene. *Nature*, 471(7340), 617–620.
- Chen, S., Wu, Q., Mishra, C., Kang, J., Zhang, H., Cho, K., ... Ruoff, R. S. (2012). Thermal conductivity of isotopically modified graphene. *Nature Materials*, 11(3), 203–207.
- Dietrich Marcuse, & American Telephone and Telegraph Company. (1991). *Theory of dielectric optical waveguides*. Boston: Academic Press.
- Divincenzo, D. P., & Mele, E. J. (1984). Self-consistent effective-mass theory for intralayer screening in graphite intercalation compounds. *Physical Review B*, 29(4), 1685–1694.
- Efetov, D. K., & Kim, P. (2010). Controlling Electron-Phonon Interactions in Graphene at Ultrahigh Carrier Densities. *Physical Review Letters*, 105(25).
- Ferrari, A. C., Bonaccorso, F., Fal'ko, V., Novoselov, K. S., Roche, S., Bøggild, P., ... Morpurgo, A. (2015). Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems. *Nanoscale*, 7(11), 4598–4810.
- Foresi, J. S., Villeneuve, P. R., Ferrera, J., Thoen, E. R., Steinmeyer, G., Fan, S., ... Ippen, E. P. (1997). Photonic-bandgap microcavities in optical waveguides. *Nature*, 390(6656), 143–145.
- Furchi, M., Urich, A., Pospischil, A., Lilley, G., Unterrainer, K., Detz, H., ... Mueller, T. (2012). Microcavity-Integrated Graphene Photodetector. *Nano Letters*, 12(6), 2773–2777.
- Geim, A. K., & Novoselov, K. S. (2007). The rise of graphene. *Nature Materials*, 6(3), 183–191.
- Ginés Lifante. (2003). *Integrated photonics: fundamentals*. Hoboken, Nj: J. Wiley.
- Gosciniak, J., Rasras, M., & Khurgin, J. B. (2020). Ultrafast Plasmonic Graphene Photodetector Based on the Channel Photothermoelectric Effect. *ACS Photonics*, 7(2), 488–498.
- Güttinger, J., Molitor, F., Stampfer, C., Schnez, S., Jacobsen, A., Dröscher, S., ... Ensslin, K. (2012). Transport through graphene quantum dots. *Reports on Progress in Physics*, 75(12), 126502.

- Hanson, G. W. (2008a). Dyadic Green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene. *Journal of Applied Physics*, *103*(6), 064302.
- Hanson, G. W. (2008b). Quasi-transverse electromagnetic modes supported by a graphene parallel-plate waveguide. *Journal of Applied Physics*, *104*(8), 084314.
- Inan, U. S., & Marshall, R. A. (2011). *Numerical electromagnetics: the FDTD method*. Cambridge; New York: Cambridge University Press.
- Kane Yee. (1966). Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, *14*(3), 302–307.
- Kravets, V. G., Grigorenko, A. N., Nair, R. R., Blake, P., Anissimova, S., Novoselov, K. S., & Geim, A. K. (2010). Spectroscopic ellipsometry of graphene and an exciton-shifted van Hove peak in absorption. *Physical Review B*, *81*(15).
- Kuramochi, E., Taniyama, H., Tanabe, T., Kawasaki, K., Roh, Y.-G., & Notomi, M. (2010). Ultrahigh-Q one-dimensional photonic crystal nanocavities with modulated mode-gap barriers on SiO₂ claddings and on-air claddings. *Optics Express*, *18*(15), 15859.
- Landau, L. D. (1937). Zur Theorie der phasenumwandlungen II. *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion*, *11*, 26–35.
- Lee, C., Wei, X., Kysar, J. W., & Hone, J. (2008). Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene. *Science*, *321*(5887), 385–388.
- Li, Z. Q., Henriksen, E. A., Jiang, Z., Hao, Z., Martin, M. C., Kim, P., ... Basov, D. N. (2008). Dirac charge dynamics in graphene by infrared spectroscopy. *Nature Physics*, *4*(7), 532–535.
- Liu, H., Liu, Y., & Zhu, D. (2011). Chemical doping of graphene. *J. Mater. Chem.*, *21*(10), 3335–3345.
- Massicotte, M., Schmidt, P., Vialla, F., Watanabe, K., Taniguchi, T., Tielrooij, K. J., & Koppens, F. H. L. (2016). Photo-thermionic effect in vertical graphene heterostructures. *Nature Communications*, *7*(1).
- Nair, R. R., Blake, P., Grigorenko, A. N., Novoselov, K. S., Booth, T. J., Stauber, T., ... Geim, A. K. (2008). Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene. *Science*, *320*(5881), 1308–1308.
- Novoselov, K. S. (2004). Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films.

- Science*, 306(5696), 666–669.
- Novoselov, K. S., & Castro Neto, A. H. (2012). Two-dimensional crystals-based heterostructures: materials with tailored properties. *Physica Scripta*, T146, 014006.
- Novoselov, K. S., Fal'ko, V. I., Colombo, L., Gellert, P. R., Schwab, M. G., & Kim, K. (2012). A roadmap for graphene. *Nature*, 490(7419), 192–200.
- Peierls, R. E. (1935). Quelques proprietes typiques des corps solides. *Annales de l'Institut Henri Poincaré*, 5(3), 177–222.
- Piper, J. R., & Fan, S. (2014). Total Absorption in a Graphene Monolayer in the Optical Regime by Critical Coupling with a Photonic Crystal Guided Resonance. *ACS Photonics*, 1(4), 347–353.
- Riichiro Saito, Dresselhaus, G., & Dresselhaus, M. (1998). *Physical properties of carbon nanotubes*. London: Imperial College Press, (Imp.
- Stephen Douglas Gedney. (2011). *Introduction to the finite-difference time-domain (FDTD) method for electromagnetics*. San Rafael, Calif.: Morgan & Claypool Publishers.
- Syms, R., & Cozens, J. (1992). *Optical guided waves and devices*. London: Mcgraw-Hill Book Company.
- Taflove, A., & Hagness, S. C. (2005). *Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method*. Boston: Artech House.
- Villeneuve, P. R., Fan, S., Joannopoulos, J. D., Lim, K., Petrich, G. S., Kolodziejski, L. A., & Reif, R. (1995). Air-bridge microcavities. *Applied Physics Letters*, 67(2), 167–169.
- Wallace, P. R. (1947). The Band Theory of Graphite. *Physical Review*, 71(9), 622–634.
- Wolf, E. L. (2014). *Graphene: A new paradigm in condensed matter and device physics*. Oxford, United Kingdom: Oxford University Press.
- Wooten, F. (2013). *Optical Properties of Solids*. Burlington Elsevier Science.
- 著者 : Oleg Kononchuk, & Bich-Yen Nguyen. (2014). *Silicon-on-insulator (SOI) technology manufacture and applications*. 出版商 : Amsterdam Wp, Woodhead Publ./Elsevier.
- Zhou, Y. S., Xiong, W., Park, J., Qian, M., Mahjouri-Samani, M., Gao, Y., ... Lu, Y. (2012). Laser-assisted nanofabrication of carbon nanostructures. *Journal of Laser Applications*, 24(4), 042007.

