

## ساختار نواری و تابش گرمایی بلور فوتونیک دوبعدی سیلیکونی

میثم دانشور و علی رستم نژادی

پژوهشکده الکتروسرام، دانشگاه صنعتی مالک اشتر، شاهین شهر، اصفهان

(دریافت مقاله: ۱۳۹۴/۱۲/۲۶؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۵/۱۱/۲۷)

### چکیده

در این تحقیق ساختار نواری، خواص اپتیکی و طیف تابش گرمایی بلور فوتونیک دوبعدی سیلیکونی حفره‌ای با ساختار شش گوشه محاسبه شده است. ساختار نواری، نقشه و اندازه گاف نواری به روش بسط امواج تخت بر حسب شعاع محاسبه شده است. برای این بلور فوتونیک با ثابت شبکه  $a$ ، بیشینه گاف قطبش‌های TE و TM و بیشینه گاف کامل به ترتیب  $0.51\%$ ،  $20\%$  و  $17\%$  و مربوط به شعاع‌های  $0.43a$  و  $0.50a$  و  $0.48a$  می‌باشد. با محاسبه طیف جذب به روش FDTD و با استفاده از قانون کیرشهف، طیف تابش گرمایی در ناحیه  $1 \mu m$  تا  $10 \mu m$  محاسبه شده است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که با تنظیم پارامترهای هندسی شبکه، می‌توان ساختار نواری بلور فوتونیک سیلیکونی را مهندسی نمود و طیف تابش گرمایی را به نحوی کنترل نمود که در سیستم‌های ترموفوتولتایی قابل استفاده باشد.

واژه‌های کلیدی: بلور فوتونیک سیلیکونی، ساختار نواری، گاف نواری، خواص اپتیکی، تابش گرمایی

### ۱. مقدمه

کنترل کرد [۹-۱۷]. مدهایی از امواج الکترومغناطیسی که بسامد آنها در ناحیه گاف نواری قرار می‌گیرد، قابلیت انتشار در درون بلور فوتونیک و یا تابش از آن را نخواهند داشت. این ویژگی منجر به حذف طیف تابشی در ناحیه گاف نواری و افزایش شدت آن در نواحی دیگر طیف و در جهت‌های فضایی خاصی می‌شود. از این دو ویژگی کنترل طیفی و جهتی در بلورهای فوتونیک برای افزایش بازده سیستم‌های ترموفوتولتایی در تبدیل انرژی گرمایی به انرژی الکتریکی استفاده می‌شود [۱۲، ۱۵، ۱۸-۲۰]. در این سامانه‌ها، تابش گرمایی ساطع شده از یک جسم تابشگر به یک دیود نوری

اخیراً بلورهای فوتونیک فلزی و دی‌الکتریک برای کنترل انتشار امواج الکترومغناطیسی مورد توجه قرار گرفته‌اند [۱-۵]. انتشار امواج الکترومغناطیسی در بلورهای فوتونیک همانند رفتار الکترون‌ها در جامدات بلوری با پتانسیل دوره‌ای است که در آنها نواحی ممنوعه بسامدی برای انتشار امواج وجود دارد. وجود گاف در ساختار نواری بلورهای فوتونیک این امکان را به وجود می‌آورد که بتوان انتشار امواج الکترومغناطیسی را هم به صورت طیفی و هم جهتی کنترل نمود [۱-۸]. همچنین می‌توان تابش القایی و گرمایی را توسط بلورهای فوتونیک

## ۲. تئوری و روش محاسبات

با تعیین ساختار نواری بلورهای فوتونیک می‌توان اطلاعات زیادی در مورد رفتار اپتیکی و تابش گرمایی آنها پیش‌بینی کرد. یکی از رایج‌ترین روش‌های محاسبه ساختار نواری، روش بسط موج تخت<sup>۱</sup> می‌باشد که روشی سریع و با حجم محاسبات کم می‌باشد [۸، ۳۷، ۳۸]. این روش برای حالتی که پاشندگی و جذب نداشته باشیم مناسب می‌باشد. در این روش میدان‌های الکترومغناطیسی و ثابت دی‌الکتریک ماده به صورت امواج تخت و بر حسب بردارهای شبکه وارون بسط داده می‌شوند. در حالت کلی می‌توان از هر کدام از میدان‌های الکتریکی و یا مغناطیسی استفاده کرد. اما به دلیل اینکه واگرایی میدان مغناطیسی صفر است، در عمل از این میدان برای محاسبه ویژه مقادیر استفاده می‌شود که حدود یک مرتبه حجم محاسبات را کمتر می‌کند [۸]. برای امواج الکترومغناطیسی با وابستگی زمانی هارمونیک، معادله موج به این صورت است [۸، ۱]:

$$\nabla \times \left[ \frac{1}{\epsilon(r)} \nabla \times \vec{H}(\vec{r}) \right] = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{H}(\vec{r}). \quad (1)$$

میدان مغناطیسی یک مد الکترومغناطیسی با بردار موج  $k$  با توجه به قضیه بلاخ به صورت زیر بر حسب بردارهای شبکه وارون بسط داده می‌شود.

$$\vec{H}_{kn}(\vec{r}) = \sum_G \vec{H}_{kn}(\vec{G}) \exp[i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r}], \quad (2)$$

با توجه به اینکه ثابت دی‌الکتریک دوره‌ای می‌باشد، معکوس آن نیز که در معادله موج وارد می‌شود دوره‌ای است و می‌توان آن را بر حسب بردارهای شبکه وارون بسط داد.

$$\frac{1}{\epsilon(\vec{r})} = \sum_G \kappa(\vec{G}) \exp[i\vec{G} \cdot \vec{r}], \quad (3)$$

با قرار دادن این روابط در معادله موج، معادله ویژه مقداری زیر برای میدان مغناطیسی به دست می‌آید.

$$-\sum_{G'} \kappa(\vec{G} - \vec{G}') (\vec{k} + \vec{G}) \times [(\vec{k} + \vec{G}') \times \vec{H}_{kn}(\vec{G}')] = \frac{\omega_{kn}^2}{c^2} \vec{H}_{kn}(\vec{G}), \quad (4)$$

در این روابط  $G$  و  $G'$  بردارهای شبکه وارون،  $k$  بردار موج و  $n$  شماره نوار و  $\omega_{kn}$  بسامد مد  $k$  ام در نوار  $n$  ام می‌باشد. با حل

می‌رسد و این مبدل، درصدی از فوتون‌های فرودی را جذب و به الکتریسته تبدیل می‌کند. نکته اساسی برای داشتن سیستمی با بازدهی بالا در این نوع کاربردها، تطبیق بسامدی طیف تابش گرمایی تابشگر با جاذب می‌باشد. طیف تابش گرمایی یک جسم معمولی تمام طول موج‌ها را با شدت‌های مختلف شامل می‌شود اما در بلورهای فوتونیک به خاطر وجود گاف نواری، بخشی از طیف تابش گرمایی حذف و شدت آن در طیف‌های دیگر افزایش می‌یابد که برای جذب توسط دیود نوری مناسب می‌باشد [۲۱ - ۲۳].

طراحی تابشگرهای گرمایی گزینشی بر مبنای بلورهای فوتونیک از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. با طراحی بلور فوتونیک می‌توان ساختار نواری آن را مهندسی نمود. ساختار نواری و اندازه گاف نواری وابسته به نوع ماده و پارامترهای هندسی بلور فوتونیک می‌باشند. بسامد کاری بیشتر مبدل‌های ترموفوتوولتایی در ناحیه فرو قرمز میانی و نزدیک می‌باشد [۲۴ - ۲۶]. بیشترین طیف تابش گرمایی در این نواحی مربوط به اجسامی است که دمای آنها عمدتاً بیشتر از ۱۰۰۰ درجه سانتی‌گراد می‌باشد. در نتیجه استفاده از مواد با دمای ذوب بالا به این منظور ضروری می‌باشد. مواد مختلف از قبیل فلزات تنگستن، تانتالوم، آلیاژ تنگستن-تانتالوم، اکسید وانادیوم و ... با ساختارهای منظم اپتیکی مختلف از قبیل بلورهای فوتونیک یک، دو و سه بعدی، توری‌های سطحی، میکروکاوک‌ها و ... به این منظور مورد توجه واقع شده‌اند [۹-۱۱، ۲۷-۳۳].

سیلیکون یک نیم رسانای مشهور با گاف انرژی الکترونی ۱٫۱۲eV و دمای ذوب ۱۴۱۰°C است [۳۴]. طیف تابشی بلور فوتونیک این ماده برای کاربردهای تبدیل انرژی و همچنین کاربردهای مرتبط با لیزر بسیار مورد توجه می‌باشد [۳۵، ۳۶]. در این تحقیق ساختار نواری، ویژگی‌های اپتیکی و طیف تابش گرمایی درون صفحه‌ای بلور فوتونیک دوبعدی متشکل از حفره‌های منظم هوا با نظم شش گوشه در بستر سیلیکون با ثابت دی‌الکتریک  $\epsilon = 12$  در ناحیه فرو قرمز ( $\lambda = 1-10 \mu m$ ) بررسی شده است.

۱. Plane wave expansion

این معادلات ویژه مقدراری به ازای  $G$  و  $G'$  های مختلف، روابط پاشندگی و میدان‌های الکترومغناطیسی متناظر محاسبه می‌شوند. هر چه تعداد بردارهای شبکه وارون در جمع فوق بیشتر باشد، دقت محاسبات نیز بیشتر است. در این تحقیق از کد MPB<sup>۱</sup> که بر مبنای روش بسط امواج تخت است، برای محاسبه ساختار نواری استفاده شده است [۳۹]. برای کار با این کد لازم است که در فایل ورودی یاخته واحد ساختار مد نظر، بردارهای شبکه، مرزهای منطقه اول بریلون، تعداد نوارهای مد نظر، تعداد بردارهای  $k$  در هر راستا، نوع قطبش موج و دقت مش بندی فضایی تعیین گردد. برای محاسبه ساختار نواری، یک سلول واحد از ساختار دوره‌ای مد نظر و بردارهای شبکه برای نرم افزار تعیین می‌شود و دقت مش بندی سلول واحد با پارامتر تفکیک<sup>۲</sup> تعیین می‌شود که در اینجا مقدار ۳۲ برای آن لحاظ شده است. در این صورت سلول واحد به یک شبکه محاسباتی ۳۲ در ۳۲ تقسیم می‌شود. همچنین بین هر دو نقطه تقارنی، بسامد مربوط به ۵۰ نقطه شبکه وارون محاسبه شده است که هر چه تعداد این نقاط بیشتر باشد نوارها هموارتر می‌شوند.

علاوه بر ساختار نواری، از محاسبه طیف‌های عبور، بازتاب و جذب در بازه‌های طول موجی مختلف برای تعیین ویژگی‌های اپتیکی بلورهای فوتونیک استفاده می‌شود. در این جا برای محاسبه طیف‌های اپتیکی از روش تفاضل متناهی در حوزه زمان (FDTD<sup>۳</sup>) استفاده شده است. روش FDTD با حل معادلات ماکسول از طریق مش بندی فضایی و زمانی، توزیع میدان‌های الکترومغناطیسی را در هر نقطه از فضا مشخص می‌کند [۴۰-۴۲]. جواب‌های حاصله از این روش با ملاحظات زیر به دست می‌آیند:

- تابع توزیع گذردهی الکتریکی که شرایط انتشار تابش را تعیین می‌کند
- شرایط اولیه که مشخصه‌های تابش از جمله طول موج، دامنه و فاز اولیه را تعیین می‌کند
- شرایط مرزی که تعیین کننده رفتار تابش در مرز ناحیه

محاسباتی است

بعد از تعیین شرایط فوق، توزیع میدان‌ها با شروع از مکان منبع تابش، گام به گام محاسبه می‌شود. حل معادلات ماکسول به روش FDTD معادل است با پیدا کردن شدت میدان‌های الکترومغناطیس در هر گره مش. معادلات زیر نحوه تغییر مولفه  $Z$  میدان مغناطیسی بین دو گام زمانی را نشان می‌دهد

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\mu}{c} \frac{\partial H(\vec{r}, t)}{\partial t}, \quad (5)$$

وابستگی زمانی مولفه  $Z$  میدان مغناطیسی عبارت است از:

$$\frac{\partial}{\partial x} E_y - \frac{\partial}{\partial y} E_x = -\frac{\mu}{c} \frac{\partial H_z}{\partial t}, \quad (6)$$

در عمل از تقریب‌های زیر برای محاسبه مشتق‌های مکانی استفاده می‌شود

$$\frac{\partial}{\partial x} \approx \frac{\Delta}{\Delta x}, \quad \frac{\partial}{\partial y} \approx \frac{\Delta}{\Delta y}, \quad \frac{\partial}{\partial z} \approx \frac{\Delta}{\Delta z}, \quad (7)$$

در نتیجه میدان مغناطیسی در هر گام به صورت زیر به گام‌های مجاور مربوط می‌شود

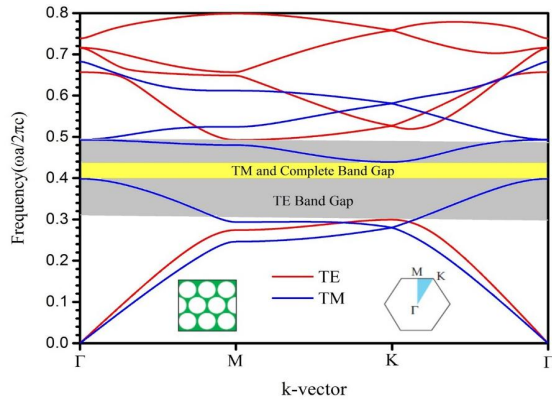
$$H_{z(i,j,k)}^{n+1/2} = H_{z(i,j,k)}^{n-1/2} + \frac{c\Delta t}{\mu\Delta y} (E_{x(i,j+1/2,k)}^n - E_{x(i,j-1/2,k)}^n) - \frac{c\Delta t}{\mu\Delta x} (E_{y(i+1/2,j,k)}^n - E_{y(i-1/2,j,k)}^n), \quad (8)$$

در این معادلات  $n$  شماره گام‌های زمانی و  $i, j$  و  $k$  به ترتیب اندیس‌های گام‌های مکانی مؤلفه‌های  $x, y$  و  $z$  هستند. برای حل معادلات فوق لازم است که مقادیر  $\epsilon$  و  $\mu$  در هر گره از سلول محاسباتی مشخص باشد. محاسبه طیف‌های اپتیکی به کمک بسته نرم افزاری MEEP که در دانشگاه MIT تولید و توسعه یافته است، صورت گرفته است [۴۳]. کد MEEP که برای سیستم‌های لینوکسی طراحی شده است از روش FDTD برای شبیه سازی انتشار امواج الکترومغناطیسی استفاده می‌کند و قابلیت اجرا به شکل موازی با چند پردازشگر را دارد [۴۰، ۴۴]. برای طراحی فایل ورودی باید درون یک سلول محاسباتی، ساختار مد نظر، محل و نوع چشمه نور فرودی، صفحات شاری (مکان‌هایی که پارامترهای اپتیکی در آن محاسبه می‌شوند)، دقت مش بندی، نسبت گام‌های زمانی به گام‌های مکانی و شرایط مرزی مناسب تعریف شوند. نوع ماده نیز با تعریف ثابت‌های اپتیکی  $\epsilon$  و  $\mu$  تعیین می‌شود که این پارامترها برای

۱. MIT Photonic Bands

۲. Resolution

۳. Finite Difference Time Domain



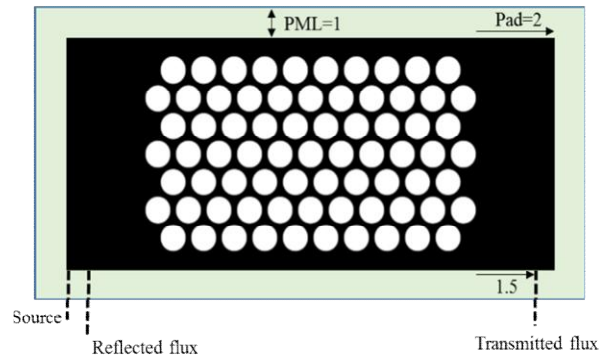
شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) ساختار نواری بلور فوتونیکی مثلثی حفره‌ای سیلیکونی در شعاع  $(r/a = 0.43)$ . نوارهای قرمز مدهای TE و نوارهای آبی مدهای TM را مشخص می‌کنند. ناحیه خاکستری محل گاف مد TE و ناحیه زرد محل گاف مد TM و گاف کامل را نشان می‌دهد. شکل ضمیمه سمت راست یاخته واحد و راستاهای تقارنی را معرفی می‌کند.

### ۳. بحث و نتایج

#### ۱.۳. ساختار نواری و تاثیر شعاع حفره‌ها بر پهنای گاف نواری

از ساختار نواری می‌توان رفتار پاشندگی و محل و پهنای گاف نواری را برای مدها و راستاهای مختلف مشاهده کرد. ساختار نواری بلور فوتونیک حفره‌ای سیلیکونی با ساختار شش‌گوشی بر حسب شعاع حفره‌ها برای هر دو قطبش TE و TM به روش بسط موج تخت محاسبه شده است. به عنوان نمونه شکل ۲ ساختار نواری در شعاع  $r/a = 0.43$  را نشان می‌دهد.

به خاطر ویژگی مقیاس ناپذیری<sup>۳</sup> معادلات ماکسول، فرم معادلات حاکم بر میدان‌ها با تغییر ابعاد مسئله بدون تغییر می‌ماند (یعنی با تغییر ابعاد تنها ویژه مقادیر  $\omega_n(\vec{k})$  در یک مقدار ثابت ضرب می‌شوند) و لذا کمیت‌های اصلی مسئله یعنی بردار موج و بسامد بر حسب پارامتر ثابت شبکه  $a$  و به صورت  $ka/2\pi$  و  $\omega a/2\pi c$  نوشته می‌شوند [۱]. با تعیین مقدار  $a$  می‌توان طول موج و بسامد را در نواحی اپتیکی مد نظر منطبق کرد. در محاسبه ساختار نواری بلورهای فوتونیک دویبعدی با ضخامت نامحدود با فرض این که بردار موج در راستای عمود بر صفحه دوره‌ای مؤلفه ندارد ( $k_z = 0$ ) مجموعه گسسته‌ای از



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمایی از سلول محاسباتی برای شبیه‌سازی طیف‌های اپتیکی بلور فوتونیک سیلیکونی شامل ساختار دوره‌ای، محل چشمه موج، محل محاسبه شارهای عبوری و بازتابی و ضخامت لایه PML.

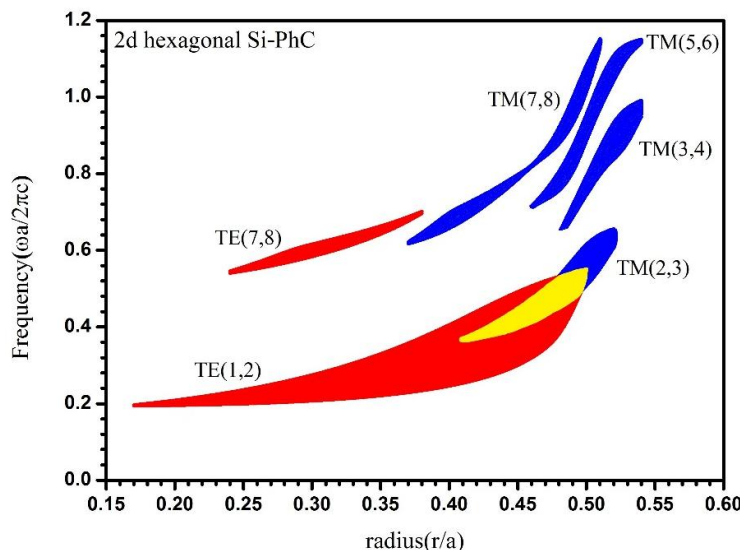
محیط‌های غیر پاشنده با یک عدد ثابت و برای محیط‌های پاشنده از طریق مدل درود-لورنتز مشخص می‌شوند. این کد که به طور گسترده مورد استفاده قرار می‌گیرد قابلیت بالایی برای شبیه‌سازی انتشار و پراکندگی امواج الکترومغناطیسی در انواع محیط‌های خطی و غیرخطی، همسانگرد و یا ناهمسانگرد و همچنین محیط‌های اتلافی با هندسه‌های دلخواه و انواع شرایط مرزی که در برگیرنده تقارن‌های مسئله باشند دارد [۴۰]. در بازه طول موجی یک تا ده میکرومتر، ثابت دی‌الکتریک سیلیکون تقریباً مستقل از طول موج و برابر با ۱۲ می‌باشد [۴۵].

در شکل ۱ ساختار دوره‌ای مد نظر، محل قرار گرفتن چشمه موج، محل محاسبه شارهای عبوری و بازتابی و همچنین ضخامت لایه<sup>۱</sup> PML در سلول محاسباتی مربوط به شبیه‌سازی طیف‌های اپتیکی راستای  $\Gamma-K$  بلور فوتونیک دویبعدی مثلثی حفره‌ای توسط نرم‌افزار MEEP نشان داده شده است. رنگ تیره سیلیکون و رنگ سفید هوا را مشخص می‌کند. در این محاسبات، پارامتر تفکیک که دقت مش‌بندی فضایی را مشخص می‌کند مقدار  $res=10$  و پارامتر کورانت<sup>۲</sup> که مشخص‌کننده نسبت گام‌های زمانی به گام‌های مکانی در روش FDTD است همان مقدار پیش فرض یعنی ۰٫۵ لحاظ شده است.

۵. Perfect mathed layer

۲. Courant factor

۳. Scale invariant

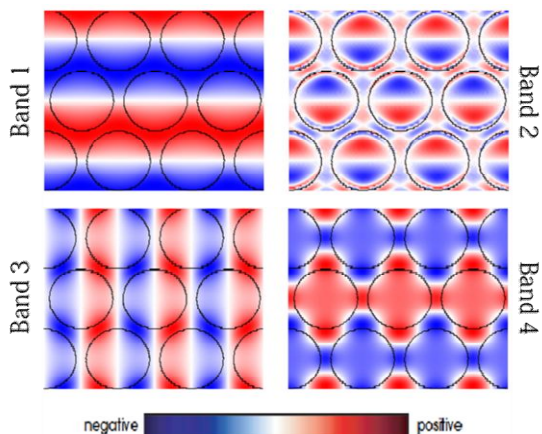


شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نقشه گاف نواری بلور فوتونیک حفره‌ای سیلیکونی با ساختار شش گوشه‌ای. رنگ قرمز گاف‌های مد TE، رنگ آبی گاف‌های مد TM و رنگ زرد محل گاف کامل را نشان می‌دهد.

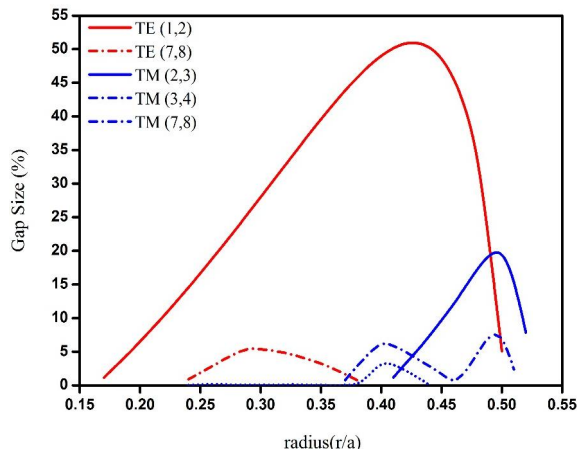
فوتونیک، بررسی‌های خواص آن از روی ساختار نواری به منطقه اول بریلون محدود می‌شود. در مرز منطقه شرط براگ برای مؤلفه‌های پراکنده شده موج ارضا می‌شود و گاف نواری به وجود می‌آید. در لبه منطقه سهم موج‌های پیش رونده و باز تابیده در برهنه‌ی موج یکسان است و در نتیجه به جای یک موج رونده، در این نقطه موج ایستاده تشکیل می‌شود و سرعت گروه موج صفر می‌شود. به همین خاطر شیب نمودار پاشندگی که معرف سرعت گروه موج است در مرز تمامی مناطق بریلون صفر می‌شود [۱، ۴].

در شکل ۳ نقشه گاف نواری برای هر دو قطبش، که از محاسبات ساختار نواری به دست آمده است، نشان داده شده است. اعداد داخل پرانتز شماره نوارها، نواحی آبی رنگ گاف مدهای TM، نواحی قرمز گاف مدهای TE و ناحیه زرد محل هم‌پوشانی گاف‌های دو مد یعنی گاف کامل را مشخص می‌کند. به ازای بسامدهای این ناحیه خاص، امواج الکترومغناطیسی در هیچ راستا و قطبشی اجازه انتشار درون بلور را ندارند. از این نمودار مشخص می‌شود که ساختار دوره‌ای فوق به ازای هر شعاع مشخص دقیقاً در چه محدوده طول موجی دارای گاف نواری می‌باشد. به عنوان مثال اگر ثابت شبکه دوره‌ای را  $1 \mu m$

جواب‌های  $\omega_n(\vec{k})$  به دست می‌آید و لذا محور افقی در نمایش ساختار نواری بردار موازی با صفحه دوره‌ای  $(k_{||})$  را نشان می‌دهد. ساختار دوره‌ای فوق منطقه بریلون شش گوشه‌ای دارد که در گوشه سمت راست شکل ۲ نشان داده شده است. سه نقطه ویژه این ساختار یعنی  $\Gamma$ ، M و K به ترتیب معادل با بردار موج‌های  $\vec{k}_{||}^{\Gamma} = 0$ ،  $\vec{k}_{||}^M = \frac{\sqrt{3}\pi}{a} \hat{y}$  و  $\vec{k}_{||}^K = \frac{\pi}{a} \hat{x} + \frac{\sqrt{3}\pi}{a} \hat{y}$  می‌باشند. بر حسب جهت‌گیری میدان‌های الکتریکی نسبت به صفحه دوره‌ای، دو نوع قطبش TE و TM تعریف می‌شود که در قطبش TE میدان H و در قطبش TM میدان E عمود بر صفحه دوره‌ای می‌باشد. همانطور که از شکل ۲ پیداست، در این بلور فوتونیک هر دو قطبش دارای گاف نواری می‌باشند که گاف مربوط به قطبش TE پهن‌تر می‌باشد [۴۶]. علاوه بر این برای بعضی نواحی خاص گاف‌های مدهای TE و TM هم‌پوشانی دارند که به چنین بازه‌هایی گاف کامل گفته می‌شود [۱]. همانند حرکت الکترون‌ها در یک بلور با پتانسیل دوره‌ای که منجر به ایجاد نواحی ممنوعه در نوارهای انرژی می‌شود حرکت فوتونها در بلور فوتونیک و تحت خاصیت دی‌الکتریک دوره‌ای باعث می‌شود که چگالی حالت‌های مجاز برای بعضی نواحی بسامدی صفر شود. با توجه به خاصیت دوره‌ای بلور



شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) توزیع مولفه z میدان الکتریکی مدهای TM مربوط به نقطه تقارنی M به ازای  $r/a = 0.4$ .



شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) تغییرات اندازه گاف نواری بلور فوتونیک مثلثی حفره‌ای سیلیکونی بر حسب شعاع. منحنی‌های قرمز اندازه گاف مدهای TE و منحنی‌های آبی اندازه گاف مدهای TM را نشان می‌دهند.

انتشار امواج و تابش گرمایی بهره برد. بیشینه گاف مد TM مربوط به نوارهای ۲ و ۳ و در شعاع  $r/a = 0.50$  و به اندازه ۲۰٪ می‌باشد. اندازه گاف کامل در شعاع  $0.48a$  و به مقدار ۱۷٪ می‌باشد.

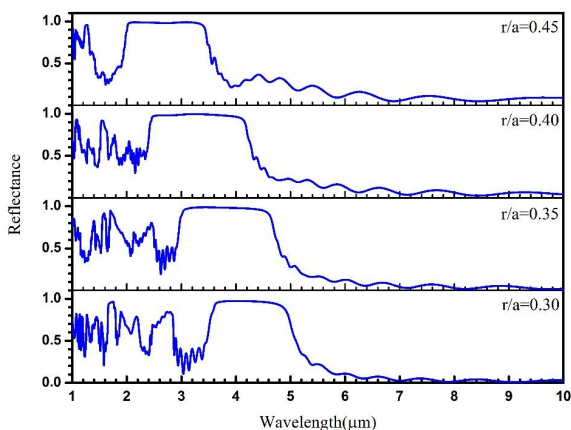
نحوه توزیع میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی درون بلور فوتونیک برای مدهای مختلف متفاوت می‌باشد. مدهای مربوط به مرز ناحیه اول بریلوئن تشکیل امواج ایستاده می‌دهند و توزیع میدان آنها شکل ویژه‌ای به خود می‌گیرد. شکل ۵ طرح توزیع میدان الکتریکی چهار نوار اول مدهای TM در نقطه تقارنی M را نشان می‌دهد.

نحوه توزیع میدان از دو اصل مهم فیزیکی تبعیت می‌کند. نخست اینکه بر اساس قضیه وردش، پایین‌ترین ویژه مقدار و ویژه مد، معادل است با توزیع میدانی که تابعی<sup>۱</sup>  $u_f \triangleq \frac{(\vec{H}, \hat{\Theta} \vec{H})}{(\vec{H}, \vec{H})}$  را کمینه کند که  $\hat{\Theta}$  عملگر اثر کننده بر میدان  $\vec{H}$  در معادله (۱) می‌باشد. اگر این رابطه به کمک معادلات ماکسول بر حسب میدان  $\vec{E}$  بازنویسی شود آنگاه

$$u_f = \frac{(\nabla \times \vec{E}, \nabla \times \vec{E})}{(\vec{E}, \epsilon(\vec{r}) \vec{E})} = \frac{\int d^3r |\nabla \times \vec{E}(\vec{r})|^2}{\int d^3r \epsilon(\vec{r}) |\vec{E}(\vec{r})|^2}, \quad (9)$$

در نظر بگیریم، مد TE بلور فوتونیک با شعاع  $0.3 \mu m$  بین نوارهای اول و دوم دارای گافی در محدوده طول موجی  $4.1 \mu m$  تا  $5 \mu m$  می‌باشد. نکته دیگری که از این نمودار مشخص است این است که به طور کلی با افزایش شعاع، مکان گاف به سمت طول موج‌های کوچک‌تر جابه‌جا می‌شود. برای تعیین شعاع متناظر با بیشینه گاف، نمودار تغییرات اندازه گاف بر حسب شعاع در شکل ۴ نشان داده شده است. گاف نوار فوتونیک را می‌توان بر حسب پهنای بسامدی  $\Delta\omega$  بیان کرد اما این کمیت وابسته به ابعاد می‌باشد زیرا با توجه به ویژگی مقیاس ناپذیری معادلات ماکسول که در بخش قبل به آن اشاره شد، اگر ابعاد بلور فوتونیک با یک ضریب s گسترده شود پهنای گاف به  $\Delta\omega/s$  تغییر می‌کند. به همین خاطر معمولاً اندازه گاف نواری را با کمیتی مستقل از ابعاد و به صورت  $\Delta\omega/\omega_m$  یعنی نسبت پهنای بسامدی به بسامد مرکزی گاف و به صورت درصد بیان می‌کنند [۱]. همانطور که از شکل ۴ دیده می‌شود اندازه گاف بین نوارهای اول و دوم مد TE به طور قابل ملاحظه‌ای از گاف‌های دیگر بزرگ‌تر می‌باشد و بیشینه گاف در شعاع  $r/a = 0.43$  و به مقدار ۵۱٪ می‌باشد. در نتیجه این گاف مناسب‌ترین ناحیه‌ای است که می‌توان از آن برای کنترل

۱. Functional

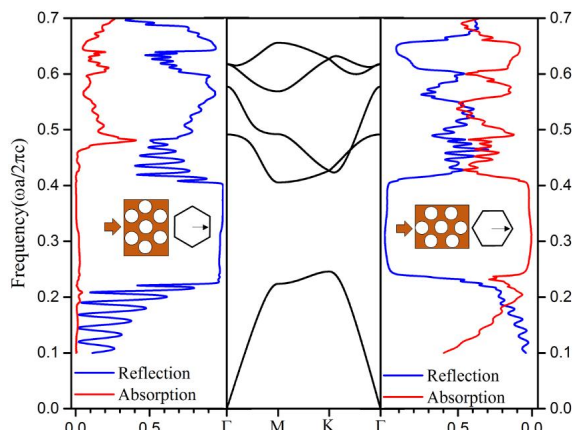


شکل ۷. (رنگی در نسخه الکترونیکی) طیف بازتاب بلور فوتونیک سیلیکونی در راستای  $\Gamma-K$  مربوط به مدهای TE در شعاع‌های مختلف.

قطبش TE را همراه با ساختار نواری بلور فوتونیک سیلیکونی به ازای شعاع  $r/a=0.4$  نشان می‌دهد.

از شکل ۶ دیده می‌شود که مدهایی از امواج الکترومغناطیسی که بسامد آنها در ناحیه گاف نواری بلور فوتونیک قرار دارد، کاملاً بازتاب می‌شوند و اجازه انتشار درون بلور را ندارند و در نتیجه میزان جذب و گسیل آنها صفر می‌باشد. بر همین اساس می‌توان با محاسبه طیف بازتاب، مکان و پهنای گاف نواری را تعیین نمود.

در شکل ۷ طیف بازتاب در راستای  $\Gamma-K$  مربوط به مدهای TE از بلور فوتونیک سیلیکونی به ازای چند شعاع مختلف از حفره‌ها نشان داده است. از این شکل دیده می‌شود که با افزایش شعاع حفره‌های هوا، پهنای گاف تغییر می‌کند و مکان آن به سمت طول موج‌های کوچک‌تر جابه‌جا می‌شود که بر اساس قضیه وردش قابل توضیح است. با تغییر ثابت دی‌الکتریک شرایط کمینه شدن تابعی  $u_f$  و در نتیجه محل مدهای مجاز تغییر می‌کند و به طور کلی می‌توان گفت که هر تغییری در ساختار دوره‌ای که موجب افزایش میانگین ثابت دی‌الکتریک بلور فوتونیک شود (مثلاً کاهش شعاع حفره‌های هوا) باعث جابه‌جایی نوارها و محل گاف به سمت بسامدهای



شکل ۸. (رنگی در نسخه الکترونیکی) طیف‌های اپتیکی بلور فوتونیک دوبعدی سیلیکونی. نمودار سمت چپ و راست به ترتیب طیف‌های عبور و بازتاب راستاهای  $\Gamma-M$  و  $\Gamma-K$  و نمودار وسط ساختار نواری مدهای TE را نشان می‌دهد. دقیقاً در محل گاف میزان عبور صفر و میزان بازتاب ۱ تقریباً می‌باشد.

از این رابطه می‌توان دید که کمینه شدن تابعی فوق معادل است با اینکه توزیع میدان الکتریکی در نواحی با ثابت دی‌الکتریک بزرگ‌تر صورت گیرد [۱]. بنابراین پایین‌ترین مد، بیشترین توزیع میدان الکتریکی در ناحیه خارج از حفره‌های هوا را دارد. نحوه توزیع میدان در مدهای بالاتر از یک اصل فیزیکی مهم دیگر نیز پیروی می‌کند و آن اینکه ویژه مدهای غیر تبهگن یک عملگر هرمیتی بر هم عمود هستند. بر همین اساس است که برای مدهای نشان داده شده در شکل ۵، نحوه توزیع میدان و جهت‌گیری صفحات گره‌ای یعنی مجموعه نقاطی که دامنه میدان الکتریکی در آنجا صفر است از هر نوار به نوار دیگر به طور قابل ملاحظه‌ای تغییر می‌کند.

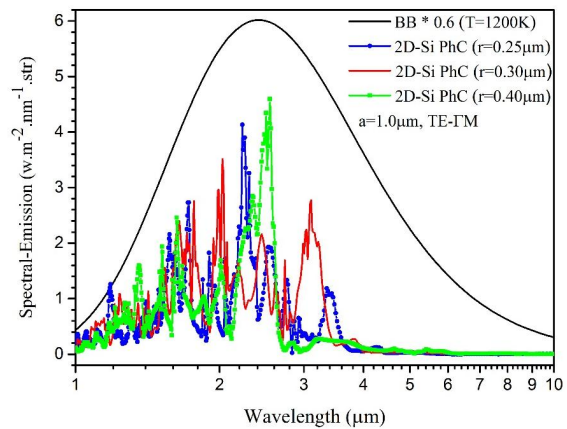
### ۲.۳. طیف‌های اپتیکی

با محاسبه طیف‌های اپتیکی عبور و بازتاب، می‌توان طیف جذب و گسیل گرمایی و همچنین محل و پهنای گاف نواری بلور فوتونیک را در بازه‌های طول موجی مختلف تعیین کرد. طبق قضیه کیرشرف در حالت تعادل طیف گسیل گرمایی اجسام با طیف جذب آنها در هر بسامد و راستایی برابر می‌باشد [۱۶، ۲۰، ۲۷]. شکل ۶ طیف‌های بازتاب و گسیل گرمایی برای

به جسم سیاه این است که بلور فوتونیک به خاطر وجود گاف نواری قادر است تابش‌های نامطلوب را حذف کند. در ادامه نتایج مربوط به شبیه‌سازی طیف تابش گرمایی بلور فوتونیک سیلیکونی ارائه می‌شود. در محاسبه این طیف‌ها فرض بر این است که وابستگی دمایی تابندگی ناچیز است. در شکل ۸ طیف تابش گرمایی در دمای ۱۰۰۰K مربوط به قطبش TE و راستای  $\Gamma - M$  در چند شعاع نشان داده شده است. به خاطر وجود گاف در نواحی طول موجی خاص و در نتیجه رخ دادن بازتاب، دیده می‌شود که تابش گرمایی در این نواحی ناچیز است، در حالی که بلور فوتونیک طول موج‌های کوچک‌تر از طول موج‌های گاف را با شدت بیشتر تابش می‌کند. به طول موج مشخص کننده مرز بین تابش و عدم تابش که همان حد پایین ناحیه گاف می‌باشد طول موج قطع گفته می‌شود. چون محل و پهنای گاف به شعاع حفره‌ها وابسته است طول موج قطع بلور فوتونیک نیز وابسته به شعاع می‌باشد و با افزایش شعاع کوچک‌تر می‌شود. با فرض اینکه ثابت شبکه دوره‌ای  $1 \mu m$  در نظر گرفته شود، حد پایین گاف که مشخص کننده طول موج قطع تابش برای این راستا و قطبش خاص است از مقدار  $4.35 \mu m$  در شعاع  $0.25 \mu m$  به مقدار  $3.64 \mu m$  در شعاع  $0.3 \mu m$  و مقدار  $2.48 \mu m$  در شعاع  $0.4 \mu m$  تغییر می‌کند.

در شکل ۹ طیف‌های تابشی دمای ۱۰۰۰K مربوط به قطبش TM و در راستای  $\Gamma - M$  به ازای شعاع‌های مختلف نشان داده شده است. رفتار گزینشی طیف تابش به خاطر وجود گاف نواری در اینجا نیز به وضوح دیده می‌شود. با فرض اینکه ثابت شبکه دوره‌ای  $1 \mu m$  در نظر گرفته شود، طول موج قطع از مقدار  $5.2 \mu m$  در شعاع  $0.25 \mu m$ ، به مقدار  $4.84 \mu m$  در شعاع  $0.3 \mu m$  و به مقدار  $4.04 \mu m$  در شعاع  $0.4 \mu m$  تغییر می‌کند.

در شکل ۱۰ طیف‌های تابشی در دمای ۱۰۰۰K مربوط به قطبش TE و راستای  $\Gamma - K$  بلور فوتونیک سیلیکونی به ازای شعاع‌های مختلف نشان داده شده است. از این شکل دیده می‌شود که در ناحیه گاف نواری، شدت طیف تابشی بلور فوتونیک ناچیز است. اما به دلیل بالا بودن میزان جذب در



شکل ۸. (رنگی در نسخه الکترونیکی) تابش گرمایی بلور فوتونیک سیلیکونی در شعاع‌های مختلف (راستای  $\Gamma - M$ ، قطبش TE).

کوچک‌تر (طول موج‌های بزرگ‌تر) می‌شود و در این حالت می‌توان گفت که پایداری مدهای فوتونیک افزایش می‌یابد.

### ۳.۳. طیف تابش گرمایی

طیف تابش گرمایی بلورهای فوتونیک بسامدهای ناحیه گاف را شامل نمی‌شود. برای نشان دادن این مطلب طیف تابش بلور فوتونیک سیلیکونی به ازای شعاع‌های مختلف و در دمای ۱۰۰۰K محاسبه شده است. با محاسبه طیف بازتاب و عبور و تعیین طیف جذب از رابطه  $A=1-T-R$ ، گسیل گرمایی  $\mathcal{E}$  طبق قانون کیرشهف به دست می‌آید.

$$\mathcal{E}(\lambda) = A(\lambda), \quad (10)$$

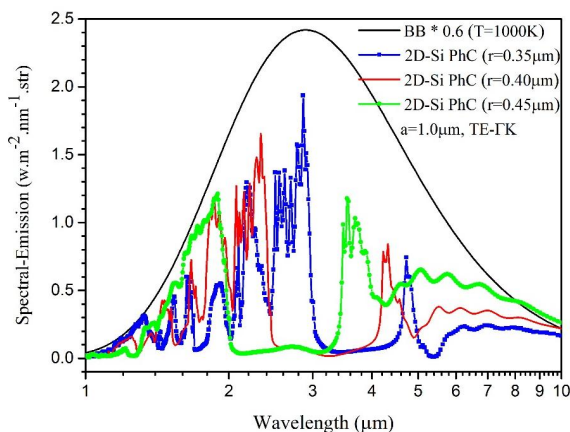
با محاسبه تابندگی  $\mathcal{E}$  از رابطه فوق، تابش طیفی بلور فوتونیک  $I_{PhC}$  در هر دما طبق رابطه پلانک به دست می‌آید [۲۸]:

$$I_{PhC}(\lambda, T) = \frac{\nu hc^2 \mathcal{E}(\lambda, T)}{\lambda^5 \left( \exp \left[ \frac{hc}{\lambda k_B T} \right] - 1 \right)} \quad (11)$$

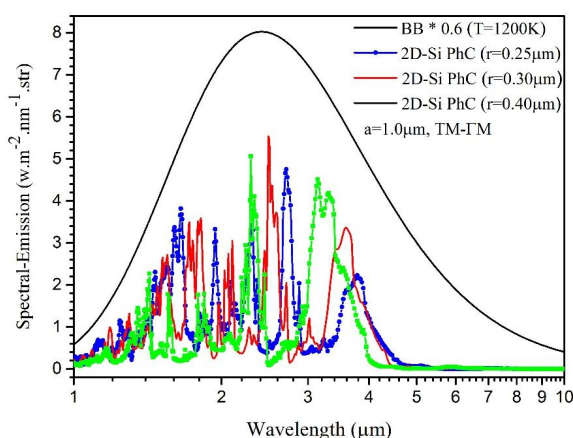
$$= I_{BB}(\lambda, T) \mathcal{E}(\lambda, T)$$

در این رابطه  $h$  ثابت پلانک،  $T$  دما بر حسب کلوین و  $I_{BB}$  تابش جسم سیاه می‌باشد. رابطه (۱۱) نشان می‌دهد که تابش بلور فوتونیک همواره از تابش جسم سیاه که یک جاذب کامل است کمتر می‌باشد. اما مزیت طیف تابش بلور فوتونیک نسبت



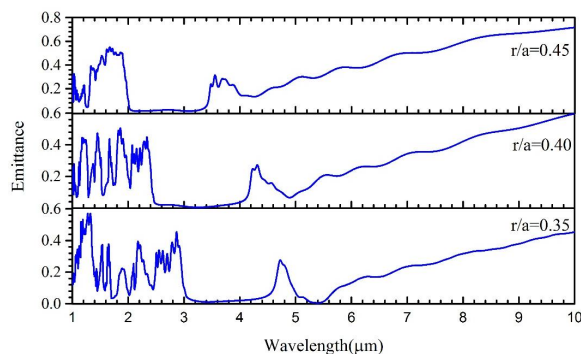


شکل ۱۰. (رنگی در نسخه الکترونیکی) تابش گرمایی بلور فوتونیک سیلیکونی در ۱۰۰۰ K و در شعاع‌های مختلف (راستای  $\Gamma - K$ ، قطبش TE)



شکل ۹. (رنگی در نسخه الکترونیکی) تابش گرمایی بلور فوتونیک سیلیکونی در شعاع‌های مختلف (راستای  $\Gamma - M$ ، قطبش TM).

الکترونی کمتر از یک الکترون ولت می‌باشند که طول موج مؤثر کاری آنها در ناحیه ۱-۴ میکرومتر است [۲۶]. طول موج تابشی بیشینه جسم سیاه و اغلب اجسام مادی با دمای بالاتر از ۱۰۰۰ کلین، در این ناحیه طول موجی قرار دارد. با استفاده از بلورهای فوتونیک می‌توان تابش مطلوب فوتودیودهای جاذب در سیستم‌های ترموفوتولتائیک را فراهم کرد و بدین ترتیب بازدهی سیستم را افزایش داد. همان طور که از شکل ۸ و شکل ۹ مشخص است، با استفاده از بلور فوتونیک سیلیکونی نیز می‌توان تابش مربوط به بازه‌های طول موجی مشخصی را حذف کرد. این محدوده طول موجی به محل گاف نواری وابسته است و در نتیجه امکان تنظیم طول موج قطع تابش گرمایی با تغییر پارامترهای هندسی ساختار بلور فوتونیک، ما را قادر می‌سازد تا خواص گرمایی آنها را به کاربردهای مورد نظر مرتبط سازیم. در جدول ۱ خلاصه نتایج مربوط به محدوده گاف نواری و طول موج قطع تابش گرمایی راستای  $\Gamma - M$  بلور فوتونیک سیلیکونی به ازای شعاع‌های مختلف آورده شده است. از این جدول دیده می‌شود که با تغییر شعاع، طول موج آستانه تابش گرمایی در بلور فوتونیک از ۱/۹۶ تا ۵/۲۰ میکرومتر تغییر می‌کند که در ناحیه طول موجی مورد استفاده برای دیودهای نوری سیستم‌های ترموفوتولتائیک می‌باشد. به عبارت دیگر با



شکل ۱۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) طیف تابندگی بلور فوتونیک سیلیکونی در شعاع‌های مختلف (راستای  $\Gamma - K$ ، قطبش TE).

طول موج‌های بزرگ‌تر از طول موج‌های ناحیه گاف، رفتار گزینشی برای طیف تابش دیده نمی‌شود. با محاسبه گسیلندگی در چند شعاع. این مطلب در شکل ۱۱ نشان داده شده است.

یکی از چالش‌های مهم در طراحی و توسعه سیستم‌های ترموفوتولتائیک، انطباق پاسخ طیفی ماده جاذب و تابش کننده گرمایی در آنهاست. سامانه‌های ترموفوتولتائیک دارای فوتودیودهایی اپتیکی از موادی مانند  $\text{InGaAs}$ ،  $\text{GaSb}$  و  $\text{InGaAsSb}$  هستند که انرژی تابش گرمایی را جذب کرده و به انرژی الکتریکی تبدیل می‌کنند. این مواد دارای گاف نواری

جدول ۱. خلاصه پارامترهای محاسبه شده گاف نواری و طول موج قطع تابش گرمایی درون صفحه‌ای برای بلور فوتونیک سیلیکونی با تغییر شعاع حفره‌ها.

طول موج قطع تابش گرمایی ( $\mu\text{m}$ )	اندازه گاف نواری (درصد)	بازه طول موجی گاف نواری $\lambda_1 - \lambda_2$ ( $\mu\text{m}$ )	شعاع $r$ ( $\mu\text{m}$ )	جهت - قطبش
۴,۳۵	۲۵	۴,۳۵ - ۵,۶۰	۰,۲۵	TE, $\Gamma - M$
۳,۶۴	۳۸	۳,۶۴ - ۵,۳۵	۰,۳۰	
۳,۰۴	۴۸,۲	۳,۰۴ - ۴,۹۷	۰,۳۵	
۲,۴۸	۵۷	۲,۴۸ - ۴,۴۶	۰,۴۰	
۱,۹۶	۵۵,۹	۱,۹۶ - ۳,۴۸	۰,۴۶	
۵,۲۰	۶,۸	۵,۲۰ - ۵,۵۷	۰,۲۵	TM, $\Gamma - M$
۴,۸۴	۱۲,۴	۴,۸۴ - ۵,۴۸	۰,۳۰	
۴,۴۵	۱۵,۷	۴,۴۵ - ۵,۲۱	۰,۳۵	
۴,۰۴	۱۶,۴	۴,۰۴ - ۴,۷۶	۰,۴۰	
۳,۳۰	۱۵,۹	۳,۳۰ - ۳,۸۷	۰,۴۶	

به دست آمده نشان می‌دهد که با تغییر شعاع حفره‌ها، محل و پهنای گاف نواری برای هر دو قطبش TE و TM تغییر می‌کند. محاسبه طیف تابش گرمایی نشان می‌دهد که در دماهای بالا، شدت طیف تابش گرمایی در راستای  $\Gamma - M$  برای هر دو قطبش در طول موج‌های قرمز میانی تقریباً ناچیز است. در نتیجه با طراحی بلور فوتونیک سیلیکونی، می‌توان بسامد قطع تابش گرمایی آن را به نحوی انتخاب کرد که در ناحیه کاری دیودهای نوری سیستم‌های ترموفوتولتایی قرار بگیرد و به عنوان تابشگر گرمایی گزینشی استفاده شود.

استفاده از بلور فوتونیک سیلیکونی در راستای  $\Gamma - M$  می‌توان تابش گرمایی را کنترل نمود و از آن به عنوان تابشگر گزینشی در این سیستم‌های مبدل انرژی گرمایی به انرژی الکتریکی استفاده نمود.

#### ۴. نتیجه گیری

در این تحقیق ساختار نواری، خواص اپتیکی و طیف تابش گرمایی بلور فوتونیک دوبعدی سیلیکونی حفره‌ای با ساختار شش گوشه در ناحیه  $1\mu\text{m}$  تا  $10\mu\text{m}$  بررسی شده است. نتایج

#### مراجع

1. J D Joannopoulos, S G Johnson, J N Winn, and R D Meade, "Photonic crystals: molding the flow of light", Princeton university press (2011).
2. C Sibiliala, T M Benson, M Marciniak, and T Szoplik, "Photonic crystals: physics and technology", Springer (2008).
3. Q Gong and X Hu, "Photonic Crystals: Principles and Applications", CRC Press, (2014).
4. I Čelanović, M Ghebrebrhan, Y X Yeng, J Kassakian, M Soljačić, and J Joannopoulos, "Photonic crystals: shaping the flow of thermal radiation," in MRS Proceedings, (2009) 1162.
5. M Alessandro, "Photonic Crystals-Introduction, Applications and Theory", ed: InTech, (2012).
6. S G Johnson and J D Joannopoulos, "Photonic crystals: the road from theory to practice", Springer, (2002).
7. S y Lin, J Fleming, D. Hetherington, B Smith, R Biswas, K Ho, et al., Nature, **394**, (1998) 251.
8. K Sakoda, "Optical properties of photonic crystals", 80: Springer Science & Business Media, (2004).
9. V Rinnerbauer, Y X Yeng, W R Chan, J J Senkevich, J D Joannopoulos, and M Soljačić, et al., Optics express, **21** (2013) 11482.
10. S E Han, "Thermal emission control with periodic microstructures", (2009).
11. C J Schuler, C Wolff, K Busch, and M Florescu, Applied Physics Letters, **95**, (2009) 241103.

- Joannopoulos, and C A Schuh, *Optics express*, **23** (2015) 9979.
30. M De Zoysa, T Asano, K Mochizuki, A Oskooi, T Inoue, and S Noda, *Nature Photonics*, **6** (2012) 535.
  31. S Enoch, J J Simon, L Escoubas, Z Elalmy, F Lemarquis, P Torchio, *et al.*, *Applied Physics Letters*, **86** (2005) 261101.
  32. H Sai, H Yugami, Y Akiyama, Y Kanamori, and K Hane, *JOSA A*, **18** (2001) 1471.
  33. J B Chou, Y X Yeng, A Lenert, V Rinnerbauer, I Celanovic, M Soljačić, *et al.*, *Optics express*, **22** (2014) A144.
  34. T Bauer, "Thermophotovoltaics: basic principles and critical aspects of system design", Springer Science & Business Media, (2011).
  35. M Makarova, J Vuckovic, H Sanda, and Y Nishi, *Applied physics letters*, **89** (2006) 221101.
  36. B J O'Regan, Y Wang, and T F Krauss, *Scientific reports*, **5** (2015).
  37. S Guo and S Albin, *Optics Express*, **11** (2003) 167.
  38. S Shi, C Chen, and D W Prather, *JOSA A*, **21** (2004) 1769.
  39. S G J a J D Joannopoulos, "The MIT Photonic-Bands package", home page <http://ab-initio.mit.edu/mpb/>.
  40. A Taflove, A Oskooi, and S G Johnson, "Photronics and Nanotechnology", Artech house (2013).
  41. A Taflove, *Electromagnetic Compatibility, IEEE Transactions on*, **22** (1980) 191.
  42. U S Inan and R A Marshall, "Numerical electromagnetics", the FDTD method: Cambridge University Press (2011).
  43. A F Oskooi, D Roundy, M Ibanescu, P Bermel, J D Joannopoulos, and S G Johnson, *Computer Physics Communications*, **181** (2010) 687.
  44. A F Oskooi, D Roundy, M Ibanescu, P Bermel, J Joannopoulos, and S G Johnson, *Computer Physics Communications*, **181** (2010) 687.
  45. E D Palik, "Handbook of optical constants of solids", **3**: Academic press, (1998).
  46. S G Johnson, S Fan, P R Villeneuve, J Joannopoulos, and L Kolodziejcki, *Physical Review B*, **60** (1999) 5751.
  47. V Stelmakh, V Rinnerbauer, R Geil, P Aimone, J Senkevich, J. Joannopoulos, *et al.*, *Applied Physics Letters*, **103** (2013) 123903.
  12. Y X Yeng, W R Chan, V Rinnerbauer, J D Joannopoulos, M Soljačić, and I Celanovic, *Optics express*, **21**, (2013) A1035.
  13. Y. X. Yeng, J. B. Chou, V. Rinnerbauer, Y. Shen, S.-G. Kim, J. D. Joannopoulos, *et al.*, *Optics express*, **22** (2014) 21711.
  14. V Rinnerbauer, J J Senkevich, J D Joannopoulos, M Soljačić, I Celanovic, and R R Harl, *et al.*, *Journal of Vacuum Science & Technology A*, **31** (2013) 011501.
  15. Y Nam, Y X Yeng, A Lenert, P Bermel, I Celanovic, and M Soljačić, *et al.*, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, **122** (2014) 287.
  16. V Rinnerbauer, S Ndao, Y X Yeng, J J Senkevich, K F Jensen, and J D Joannopoulos, *et al.*, *Journal of Vacuum Science & Technology B*, **31** (2013) 011802.
  17. M Ghebrebrhan, P Bermel, Y Yeng, I Celanovic, M Soljačić, and J Joannopoulos, *Physical Review A*, **83** (2011) 033810.
  18. I Celanovic, "Thermophotovoltaics: Shaping the flow of thermal radiation", **67**, ed, (2006).
  19. E Rephaeli and S Fan, *Optics express*, **17**, (2009) 15145.
  20. V Rinnerbauer, A Lenert, D M. Bierman, Y X Yeng, W R Chan, R D Geil, *et al.*, *Advanced Energy Materials*, **4** (2014).
  21. Y X Yeng, M Ghebrebrhan, P Bermel, W R Chan, J D Joannopoulos, M Soljačić, *et al.*, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **109**, (2012) 2280.
  22. V Rinnerbauer, S Ndao, Y X Yeng, W R Chan, J J Senkevich, J D Joannopoulos, *et al.*, *Energy & Environmental Science*, **5**, (2012) 8815.
  23. H Ye, H Wang, and Q Cai, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **158**, (2015) 119.
  24. M Pralle, N Moelders, M McNeal, I Puscasu, A Greenwald, J Daly, *et al.*, *Applied Physics Letters*, **81** (2002) 4685.
  25. A Narayanaswamy and G Chen, *Physical Review B*, **70** (2004) 125101.
  26. A Rogalski, "Infrared detectors", CRC press, (2010).
  27. D Hernández García, "Selective thermal emitters based on photonic crystals", (2014).
  28. D Peykov, "The effects of capillarity on photonic crystal selective emitters", Massachusetts Institute of Technology, (2014).
  29. D Peykov, Y X Yeng, I Celanovic, J D