TRƯỜNG ĐẠI HỌC BÁCH KHOA HÀ NỘI

CÔNG NGHỆ NANO

QUANG TỬ HỌC NANO

Giáo viên hướng dẫn:

Nguyễn Việt Hưng (Viện Tiên tiến Khoa học và Công nghệ)

Nguyễn Bích Huyền (Viện Điện tử-Viễn thông)

Nội dung bài giảng

1. Bài tập về nhà.
2. Lan truyền của sóng ánh sáng trong các vật liệu điện môi có cấu trúc tuần hoàn: Lý thuyết tổng quát.
3. Các vùng cấm quang của tinh thể quang tử: Bài toán một chiều.

The 2nd Homework

1. Viết ra đầy đủ các phương trình Maxwell cho các thành phần của điện trường và từ trường. Khảo sát các điều kiện biên của trường.

2. Dẫn ra phương trình sóng của trường điện từ trong các vật liệu điện môi.

3. Ôn tập kiến thức Chương IV (Các vật liệu rắn) trong sách Vật lý điện tử (Vũ Linh).

4. Tiếp tục đọc các file dữ liệu trong thư mục Documentations của phần mềm OptiFDTD và bước đầu làm quen với giao diện của nó.

Lý thuyết Maxwell

Maxwell's equations:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_v$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

where

$\mathbf{E}$ is electric field intensity $[V/m]$
$\mathbf{B}$ is magnetic flux density $[T]$
$\mathbf{H}$ is magnetic field intensity $[A/m]$
$\mathbf{D}$ is electric flux density $[C/m^2]$
$\mathbf{J}$ is electric current density $[A/m^2]$
ρ_v is volume charge density $[C/m^3]$.
The operator ∇ in Cartesian coordinates is

$$\nabla = \left[\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right]$$

The above relations are supplemented with constitutive relations

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$$

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$$

where $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$ is the dielectric permittivity $[F/m]$, $\mu = \mu_0 \mu_r$ is permeability $[H/m]$, σ is electric conductivity, ε_r is the relative dielectric constant. For optical problems $\mu_r = 1$.

$$\begin{cases} D_x = \varepsilon E_x \\ D_y = \varepsilon E_y \\ D_z = \varepsilon E_z \end{cases} \qquad \begin{cases} B_x = \mu H_x \\ B_y = \mu H_y \\ B_z = \mu H_z \end{cases} \qquad \vec{B}, \vec{H} \quad \vec{D}, \vec{E}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial D_x}{\partial x} + \frac{\partial D_y}{\partial y} + \frac{\partial D_z}{\partial z} = 0 \\ \frac{\partial B_x}{\partial x} + \frac{\partial B_y}{\partial y} + \frac{\partial B_z}{\partial z} = 0. \end{cases}$$

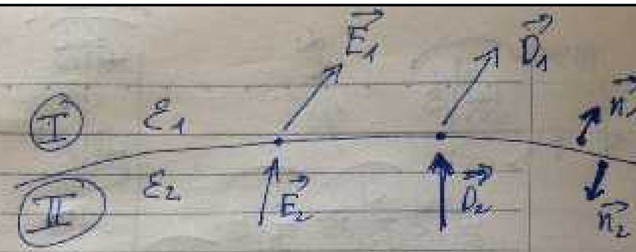
$$\nabla \times \vec{E} = \begin{vmatrix} i & j & k \\ \partial/\partial x & \partial/\partial y & \partial/\partial z \\ E_x & E_y & E_z \end{vmatrix} = i\left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z}\right) + j\left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z}\right) + k\left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y}\right)$$

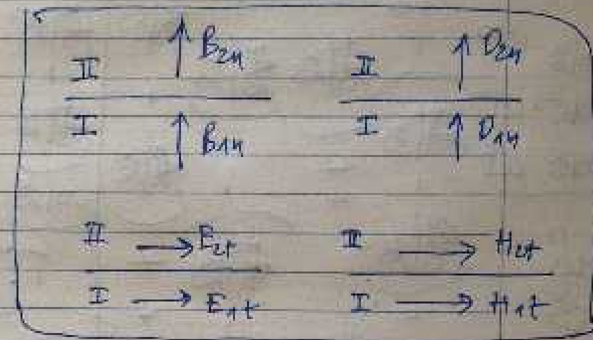
$$= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} = \frac{\partial B_x}{\partial t} \\ \frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} = \frac{\partial B_y}{\partial t} \\ \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} = \frac{\partial B_z}{\partial t}. \end{cases}$$

Similar derivation:

$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} = \frac{\partial D_x}{\partial t} \\ \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = \frac{\partial D_y}{\partial t} \\ \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = \frac{\partial D_z}{\partial t} \end{cases}$$





Field components	General form	Specific form
Tangential E	$\vec{n}_2 \times (\vec{E}_1 - \vec{E}_2) = 0$	$E_{1t} = E_{2t}$
Normal D	$\vec{n}_2 \cdot (\vec{D}_1 - \vec{D}_2) = \rho_s$	$D_{1t} - D_{2t} = \rho_s$
Tangential H	$\vec{n}_2 \times (\vec{H}_1 - \vec{H}_2) = \vec{J}_s$	$H_{2t} = H_{1t} + \vec{J}_s$
Normal B	$\vec{n}_2 \cdot (\vec{B}_1 - \vec{B}_2) = 0$	$B_{1n} = B_{2n}$

Boundary conditions.

M.S.Wartak, **Computational Photonics**, Cambridge University Press, 2014.

Các phương trình sóng

Biến đổi các phương trình Maxwell ta được:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial}{\partial t}(\nabla \times \mathbf{B}) = -\mu \frac{\partial}{\partial t}(\nabla \times \mathbf{H}) = -\mu \frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = -\mu\varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}$$

Chứng minh: $\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E}$

$$\begin{cases} \nabla \times \vec{E} = -\dfrac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \vec{H} = \dfrac{\partial \vec{D}}{\partial t} \\ \nabla \cdot \vec{D} = 0 \\ \nabla \cdot \vec{B} = 0 \end{cases}$$

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E}$$
$$\vec{B} = \mu \vec{H}$$

$$\nabla = i\frac{\partial}{\partial x} + j\frac{\partial}{\partial y} + k\frac{\partial}{\partial z}$$

$$\nabla \times \vec{E} = \begin{vmatrix} i & j & k \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_x & E_y & E_z \end{vmatrix} = i\underbrace{\left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z}\right)}_{A_x} - j\underbrace{\left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z}\right)}_{A_y} + k\underbrace{\left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y}\right)}_{A_z}$$

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = \begin{vmatrix} i & j & k \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ A_x & A_y & A_z \end{vmatrix} = i\left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}\right) - j\left(\frac{\partial A_z}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial z}\right) + k\left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right)$$

$$= i\left(\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y}\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x}\right)\right) - j\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y}\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z}\right)\right)$$
$$+ k\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z}\right)\right)$$

$$= i\left[\frac{\partial^2 E_y}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial x \partial z}\right] - j\left[\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 E_x}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 E_z}{\partial y \partial z} + \frac{\partial E_y}{\partial z^2}\right]$$
$$+ k\left(\partial^2 E_x / \partial x \partial z - \partial E_z / \partial x^2 - \partial E_z / \partial y^2 + \partial^2 E_y / \partial y \partial z\right)$$

$$\nabla(\nabla.\vec{E}) = \nabla\left(\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z}\right) = i\left(\frac{\partial^2 E_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_y}{\partial x\partial y} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial x\partial z}\right)$$

$$+ j\left(\frac{\partial^2 E_x}{\partial x\partial y} + \frac{\partial^2 E_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial z\partial y}\right) + k\left(\frac{\partial^2 E_x}{\partial x\partial z} + \frac{\partial^2 E_y}{\partial y\partial z} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial z^2}\right)$$

$$-\Delta\vec{E} = -\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)(E_x i + E_y j + E_z k)$$

$$= -i\left(\frac{\partial^2 E_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2}\right) - j\left(\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2}\right)$$

$$- k\left(\frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial z^2}\right)$$

$$i\left[\cancel{\frac{\partial^2 E_x}{\partial x^2}} + \frac{\partial^2 E_y}{\partial x\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z\partial x} - \cancel{\frac{\partial^2 E_x}{\partial x^2}} - \frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2}\right]$$

$$+ j\left[\frac{\partial^2 E_x}{\partial x\partial y} + \cancel{\frac{\partial^2 E_y}{\partial y^2}} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial y\partial z} - \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} - \cancel{\frac{\partial^2 E_y}{\partial y^2}} - \frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2}\right] \Rightarrow \boxed{RHS = LHS}$$

$$+ k\left[\frac{\partial^2 E_x}{\partial x\partial z} + \frac{\partial^2 E_y}{\partial y\partial z} + \cancel{\frac{\partial^2 E_z}{\partial z^2}} - \frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} - \cancel{\frac{\partial^2 E_z}{\partial z^2}}\right]$$

proved!

Do đó ta có: $\nabla^2 \vec{E} - \nabla(\nabla.\vec{E}) - \mu\varepsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0$.

$(\nabla^2 = \Delta)$

$(\mu \approx \mu_0)$ $\Rightarrow$ $\Delta \vec{E} - \mu_0\varepsilon \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} - \nabla(\nabla.\vec{E}) = 0$.

Nếu môi trường là <u>đồng nhất</u>: ε không phụ thuộc vào các tọa độ không gian. Từ phương trình:

$$\nabla.\vec{D} = 0 \Rightarrow \nabla.\vec{E} = 0.$$

Do đó: $\Delta \vec{E} - \varepsilon.\mu_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0$.

Hay là: $\boxed{\Delta \vec{E} - \frac{n^2}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0}$ <u>phương trình sóng</u>.

phương trình tương tự cho $\vec{H}$: $\boxed{\Delta \vec{H} - \frac{n^2}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{H}}{\partial t^2} = 0.}$

Lan truyền của sóng ánh sáng trong các vật liệu điện môi có cấu trúc tuần hoàn: Lý thuyết tổng quát.

J.D. Joannopoulos, S. Johnson, **Photonic Crystals-Molding the flow of light**,
2nd Edition, Princeton University Press (2008).

Từ phương trình Maxwell ta đã rút ra:

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = -\mu . \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}$$

Hay:

$$\boxed{\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = -\frac{n^2}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}}$$

phương trình cho $\vec{H}$:

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

$$\Rightarrow \nabla \times \left(\frac{1}{\varepsilon} (\nabla \times \vec{H}) \right) = \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \vec{E})$$

$$\Rightarrow \nabla \times \left(\frac{1}{n^2} (\nabla \times \vec{H}) \right) = -\varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{H}}{\partial t^2}$$

$$\boxed{\nabla \times \left(\frac{1}{n^2} (\nabla \times \vec{H}) \right) = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{H}}{\partial t^2}}$$

Các phương trình này có các <u>nghiệm riêng</u> dạng:

$$\begin{cases} \vec{H}(\vec{r},t) = \vec{H}(r).\, e^{-i\omega t} \\ \vec{E}(\vec{r},t) = \vec{E}(r).\, e^{-i\omega t} \end{cases}$$

Với ω là <u>tần số riêng</u>.

Suy ra:

$$\begin{cases} \boxed{\nabla \times \left(\frac{1}{n^2_{(\vec{r})}} \left(\nabla \times \vec{H}(\vec{r}) \right) \right) = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{H}(\vec{r})} \rightarrow \underline{\text{FDTD}} \\ \nabla \times \left(\nabla \times \vec{E}(\vec{r}) \right) = \frac{n^2_{(\vec{r})} \omega^2}{c^2} \vec{E}(\vec{r}) \end{cases}$$

Và liên hệ:

$$\begin{cases} \boxed{\vec{E}(\vec{r}) = \frac{i}{\omega n^2_{(\vec{r})}} . \nabla \times \vec{H}(\vec{r})} \\ \vec{H}(\vec{r}) = -\frac{i}{\omega \mu_0} \nabla \times \vec{E}(\vec{r}) \end{cases}$$

Nghiệm tổng quát: Tổ hợp của các nghiệm riêng.

Sự tương tự giữa bài toán lan truyền sóng điện từ và Cơ học lượng tử

	Quantum Mechanics	*Electrodynamics*
Field	$\Psi(\mathbf{r},t) = \Psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$	$\mathbf{H}(\mathbf{r},t) = \mathbf{H}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$
Eigenvalue problem	$\hat{H}\Psi = E\Psi$	$\hat{\Theta}\mathbf{H} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2\mathbf{H}$
Hermitian operator	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})$	$\hat{\Theta} = \nabla \times \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})}\nabla \times$

Lưu ý: Những nghiệm riêng nào của trường điện từ ứng với năng lượng trường lớn hơn thì các vectơ trường sẽ tập trung định xứ ở các vùng có chiết suất bé hơn.

Đối với trường hợp các vật liệu điện môi có cấu trúc tuần hoàn:

$$\boxed{\varepsilon(\vec{r}) = \varepsilon(\vec{r} + m.\vec{a})}$$

→ Các tinh thể quang tử.

m: số nguyên, $\vec{a}$: chu kỳ (ô cơ sở)

Tương tự với bài toán chuyển động của điện tử trong tinh thể;

các nghiệm riêng $\vec{H}(\vec{r})$ và $\vec{E}(\vec{r})$ là các hàm Bloch:

$$\begin{cases} \vec{H}_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}.\vec{r}}\, \vec{u}_{\vec{k}}(\vec{r}) \\ \vec{E}_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} . \vec{v}_{\vec{k}}(\vec{r}) \end{cases}$$

($\vec{k}$: vectơ sóng.)

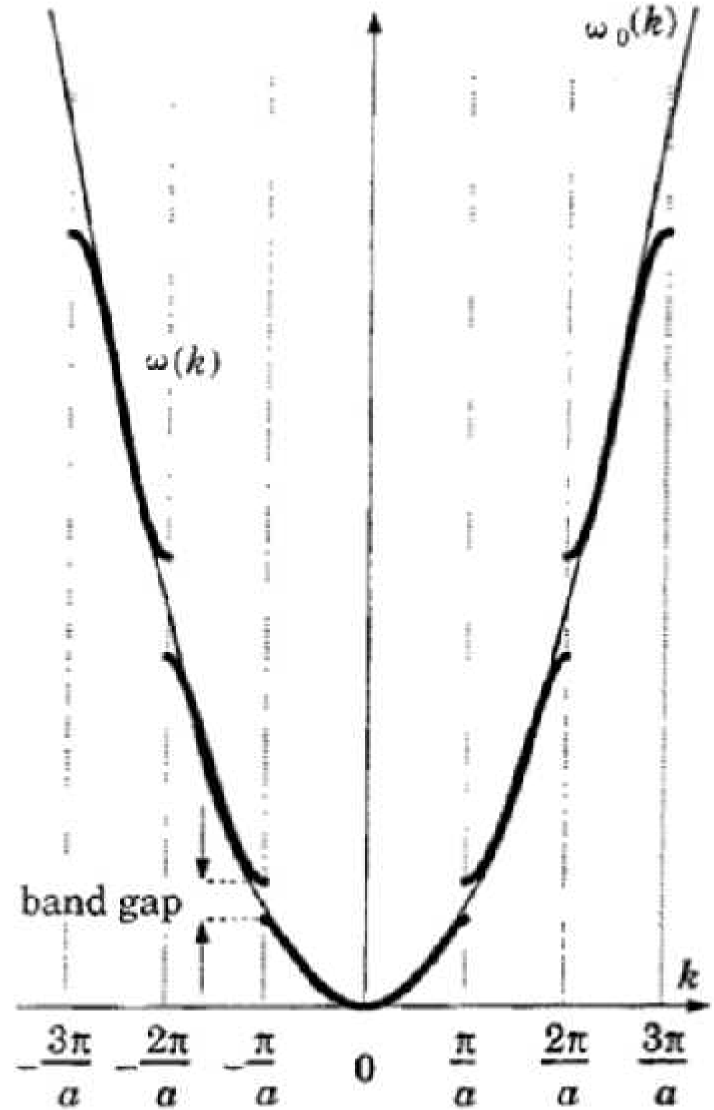
Với: $\boxed{\vec{u}_K(\vec{r}) = \vec{u}(\vec{r} + m.\vec{a})}$

Tần số riêng phụ thuộc vectơ sóng: $\omega(\vec{k})$

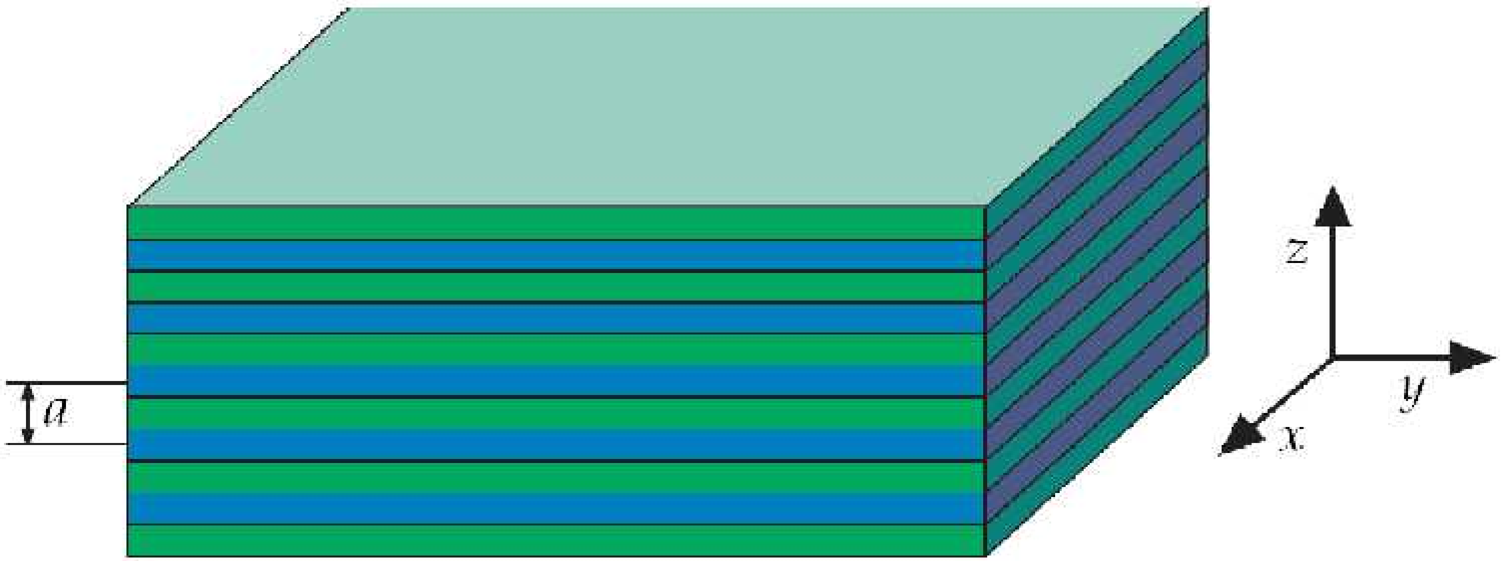
Sự tương tự với chuyển động của điện tử trong mạng tinh thể

	Quantum Mechanics	*Electrodynamics*
Discrete translational symmetry	$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{m.a})$	$\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{r} + \mathbf{m.a})$
Bloch's theorem	$\Psi_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$	$\mathrm{H}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$

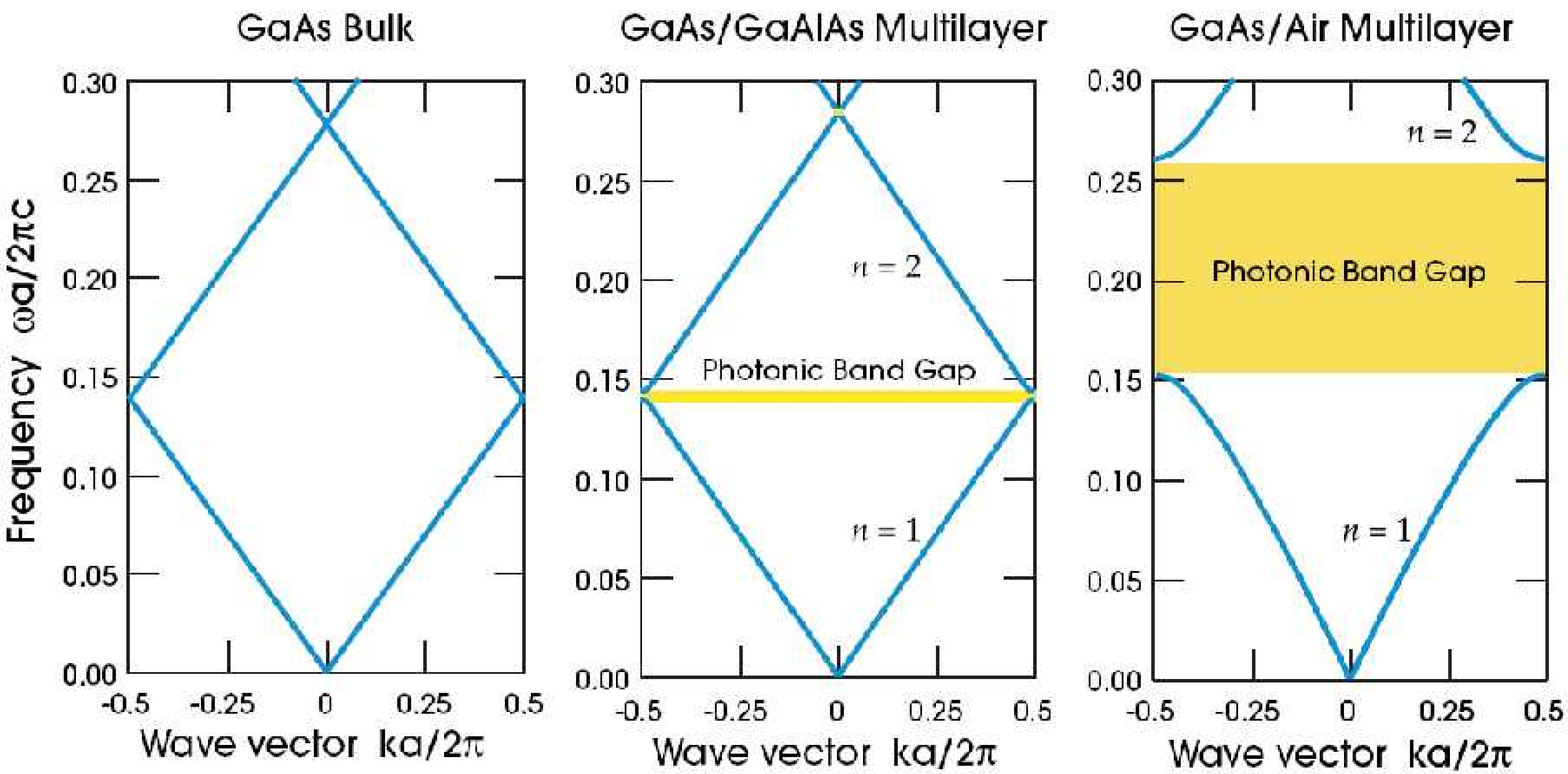
Xuất hiện các vùng cấm quang
(Photonic Band Gaps)



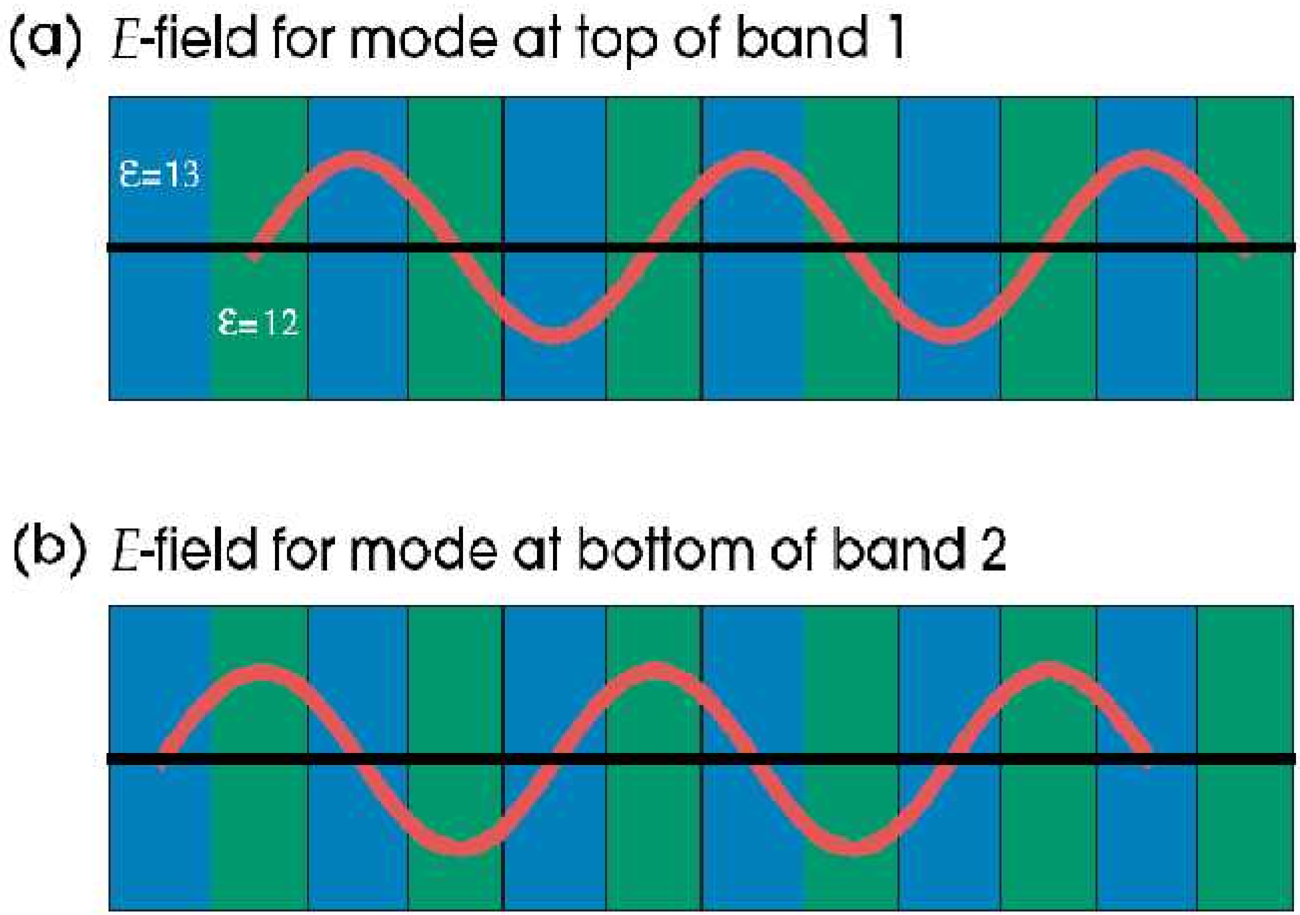
Các vùng cấm quang
của tinh thể quang tử một chiều



Tính toán độ rộng vùng cấm quang cho một số trường hợp

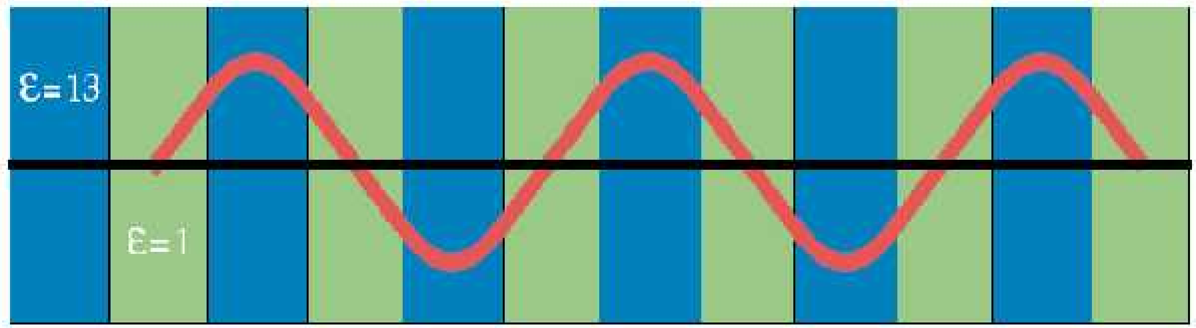


Định xứ của các cường độ trường (Hình giữa)

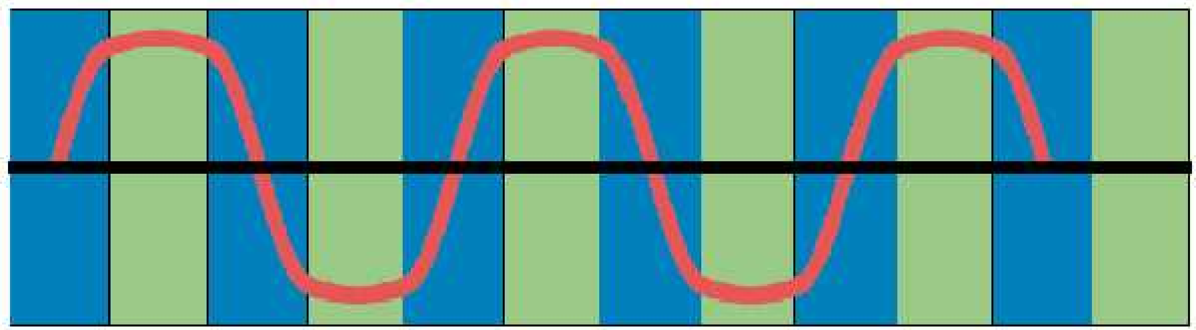


Định xứ của các cường độ trường (Hình bên phải)

(a) E-field for mode at top of band 1



(b) E-field for mode at bottom of band 2



Homework

1. Tìm hiểu các tài liệu đã được dẫn trong bài giảng.

2. Thực hành mô phỏng tính toán vùng cấm quang của tinh thể quang tử một chiều trên phần mềm OptiFDTD.

Tài liệu học tập

- Lâm Hồng Thạch, Hoàng Phương Chi, Nguyễn Khuyến, Vũ Văn Yêm, **Trường điện từ-Kiến thức căn bản và bài tập**. NXB ĐHBKHN.
- Vũ Linh, **Vật lý điện tử**. NXBĐHBKHN.
- GS.TSKH. Phan Anh, **Trường điện từ và truyền sóng**. NXBKH-KT.

- S.P. Gaponenko, **Introduction to Nanophotonics**, C.U.P. (Cambridge University Press)
- M.S.Wartak, **Computational Photonics**, C.U.P.
- J.D. Joannopoulos, S. Johnson, **Photonic Crystals-Molding the flow of light**, 2nd Edition, Princeton University Press.
- K.Y. Kim, **Plasmonics – Principles and Applications**, InTech.
- Software: **OptiFDTD** http://optiwave.com/category/products/component-design/optifdtd/
- Scientific articles: - **Optics Express** https://www.osapublishing.org/oe/home.cfm
  - **Arxiv** http://arxiv.org/
- Wikipedia, …