TRƯỜNG ĐẠI HỌC BÁCH KHOA HÀ NỘI

CÔNG NGHỆ NANO

QUANG TỬ HỌC NANO

Giáo viên hướng dẫn:

Nguyễn Bích Huyền (Viện Điện tử-Viễn thông)

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

Nội dung bài giảng

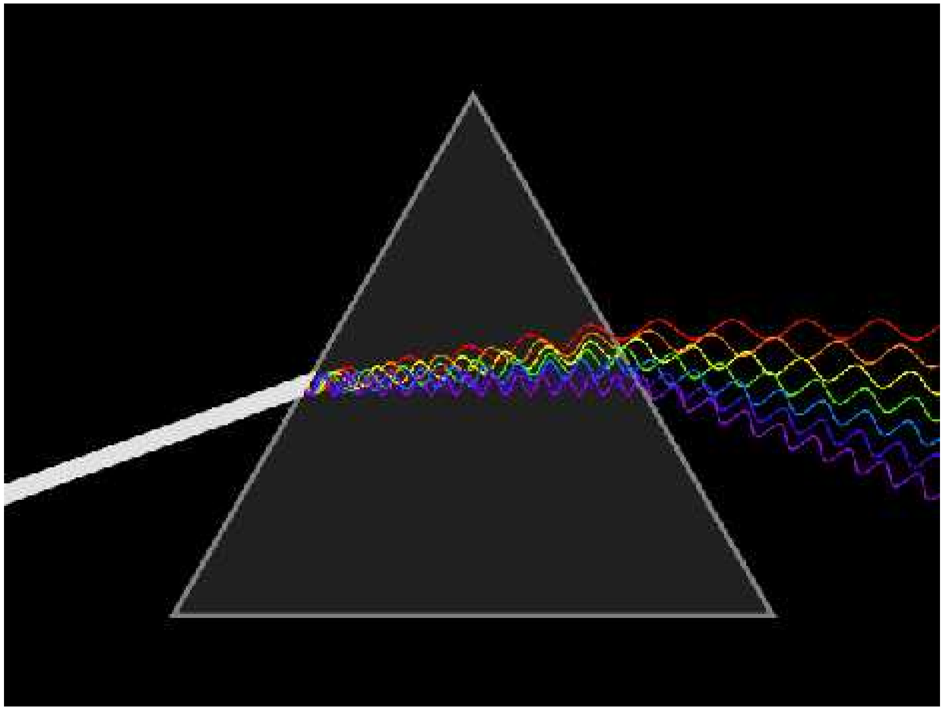
1. Mô hình Lorentz: Hiện tượng tán sắc ánh sáng.
2. Điện tử trong các vật liệu có cấu trúc tinh thể: Các vùng năng lượng.
3. Phương pháp tính toán bằng số: Phép tính đạo hàm và xử lý các ma trận.

Mô hình Lorentz

Hạn chế của lý thuyết Maxwell:
Không giải thích được tính chất quang học phức tạp của các chất.

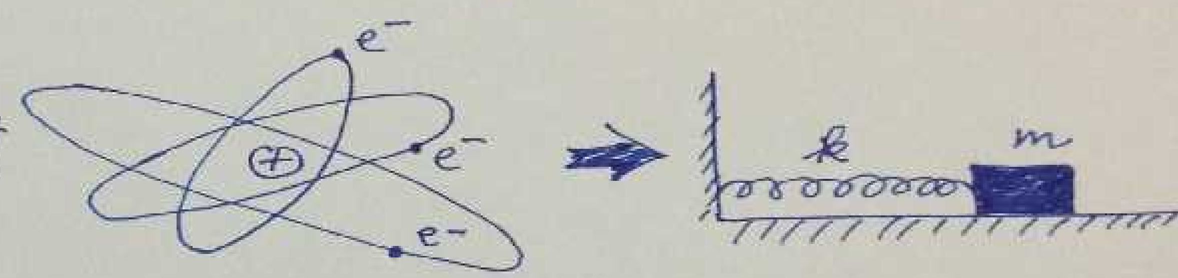
Ví dụ: Hiện tượng tán sắc.

Lorentz đã đưa ra mô hình đơn giản về cấu tạo của vật liệu, cho phép giải thích tốt hiện tượng này.



Nguyên tử bao gồm hạt nhân và các điện tử chuyển động xung quanh, tương tác với nhau bằng lực điện từ.

- Điện tử chuyển động xung quanh hạt nhân, bị hạt nhân hút về tâm:



$$\vec{f}_1 = -k.\vec{r}$$

- Nguyên tử như thế giống như một lưỡng cực dao động. Trong quá trình đó, nguyên tử bức xạ và va chạm với các nguyên tử khác. Sự tổn hao do các yếu tố này tương đương với lực "ma sát" hãm: $\vec{f}_2 = -g.\dot{\vec{r}}$ $\left(\dot{\vec{r}} = \frac{d\vec{r}}{dt}\right)$

- Khi sóng điện từ đi vào nguyên tử, điện tử chịu thêm lực điện từ: $\vec{f}_3 = e.\{\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}\}$

Vì điện tử chuyển động với vận tốc: $v \ll c$ (c: vận tốc ánh sáng)

do đó: $\vec{f}_3 \approx e.\vec{E}$

Vậy phương trình chuyển động của điện tử là:

$$m.\ddot{\vec{r}} = -k.\vec{r} - g.\dot{\vec{r}} + e.\vec{E}$$

Đặt: $\begin{cases} \gamma = g/m \\ \omega_0^2 = k/m \end{cases}$, suy ra: $\boxed{\ddot{\vec{r}} + \gamma\dot{\vec{r}} + \omega_0^2\vec{r} = \frac{e}{m}\vec{E}}$

Sóng điện từ có dạng: $\vec{E} = \vec{E}_0 . e^{i\omega t}$

Từ đó có thể tìm được nghiệm của phương trình trên dưới dạng

$$\vec{r} = \vec{r}_0 . e^{i\omega t}$$

Suy ra:

$$\boxed{\vec{r}_0 = \frac{e/m}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\omega\gamma} . \vec{E}_0}$$

Nguyên tử tạo ra <u>mô men lưỡng cực</u>: $\vec{p} = e . \vec{r}$

Nếu mật độ nguyên tử trong môi trường vật liệu là N_0, ta có

$$\vec{P} = N_0 . e . \vec{r}$$

Sử dụng liên hệ: $\vec{D} = \varepsilon \vec{E} = \vec{E} + \vec{P}$

$$\Rightarrow \vec{P} = (\varepsilon - 1)\vec{E}$$

Suy ra:

$$\boxed{\varepsilon = 1 + \frac{\frac{N_0 e^2}{m}}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\gamma\omega}}$$

– Ta đặt: $n^* = n - i\chi$, với: $\begin{cases} n: \text{chiết suất môi trường} \\ \chi: \text{hệ số hấp thụ.} \end{cases}$

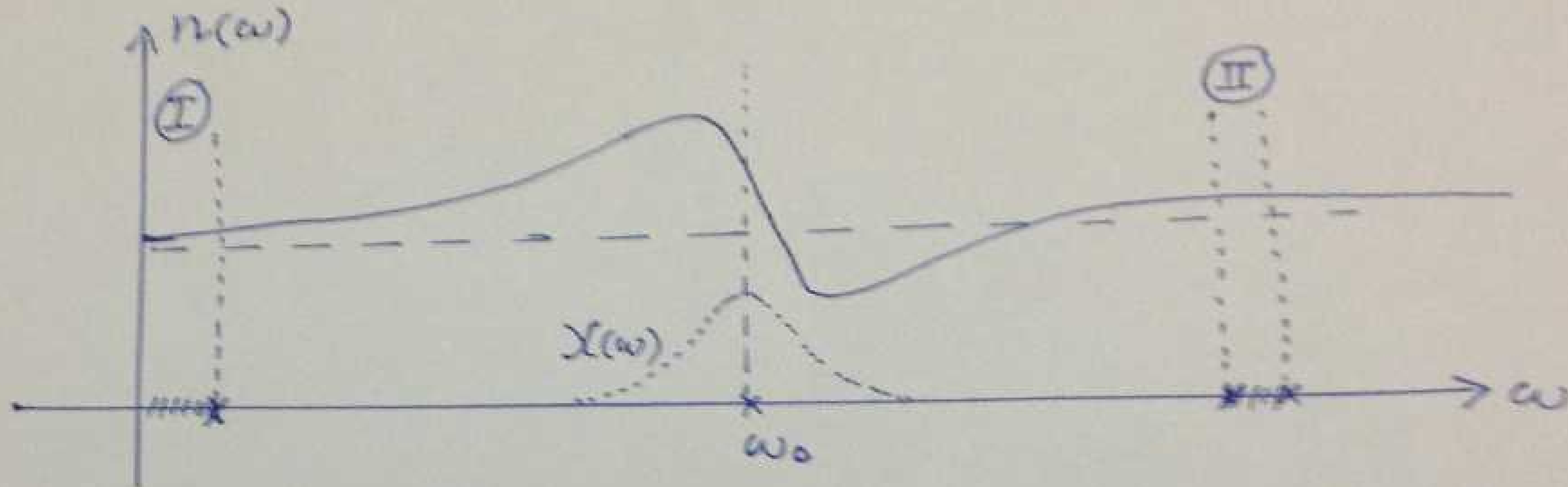
Kết quả nhận được sau khi biến đổi biểu thức: $n^* = \sqrt{\varepsilon}$:

$$\boxed{n^2 = 1 + \frac{N_0 e^2}{m} \cdot \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}}$$

và:

$$\chi \approx \frac{N_0 . e^2}{2m} \cdot \frac{\gamma . \omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\gamma^2}$$

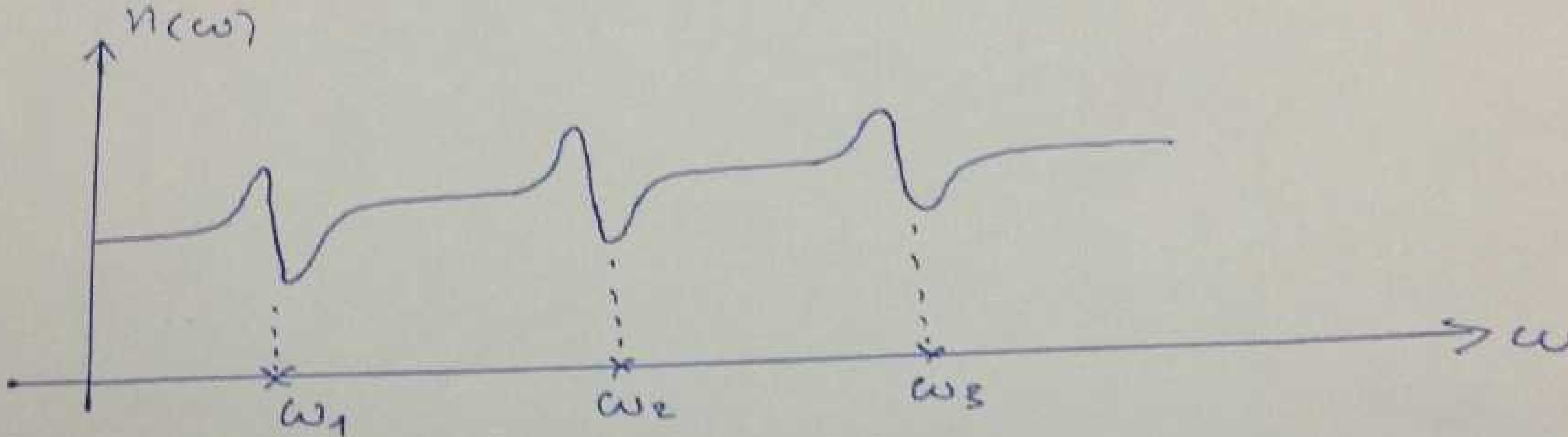
Đường cong tán sắc của vật liệu:



Ở các miền xa cộng hưởng, vật liệu là trong suốt.

Với các tần số thấp (ω bé) thì lý thuyết Maxwell có thể áp dụng được.

Đường cong thực nghiệm:



Biểu thức chiết suất:

$$\boxed{n^2 = 1 + \frac{N_0 e^2}{m} \sum_i \frac{\omega_i^2 - \omega^2}{(\omega_i^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2}}$$

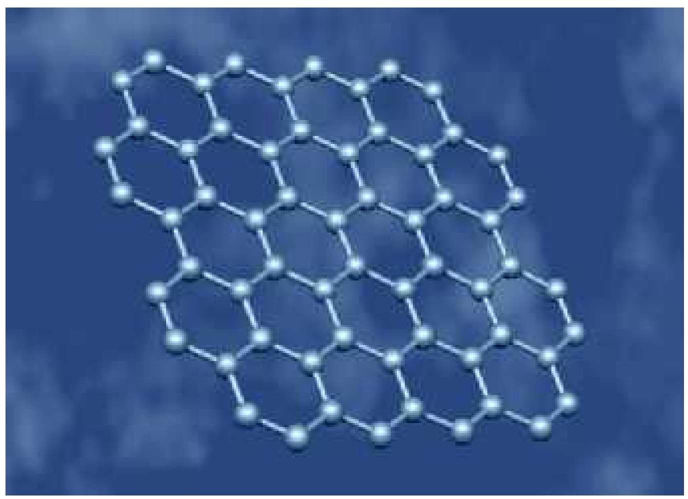
Công thức Sellmeier: $n(\omega) \rightarrow n(\lambda)$

$$\boxed{n^2 = A + \frac{D_1}{\lambda^2 - \lambda_1^2} + \frac{D_2}{\lambda^2 - \lambda_2^2} + \cdots}$$

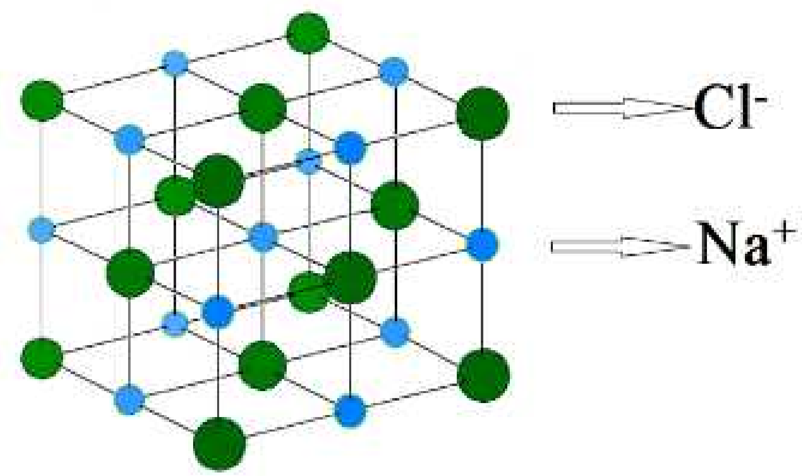
Điện tử trong các vật liệu có cấu trúc dạng tinh thể

- **Các dạng tinh thể:**

(a) Một chiều

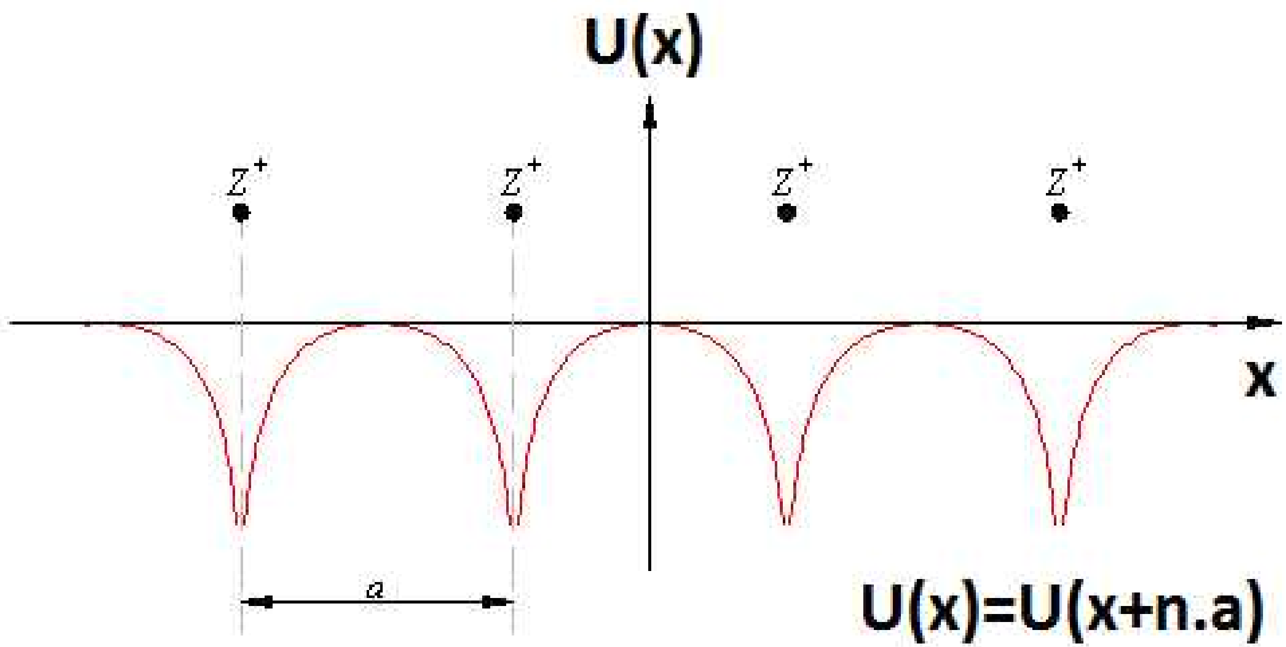


(b) Hai chiều



(c) Ba chiều

- Các tinh thể tạo nên một trường lực (điện từ) có thế năng biến đổi tuần hoàn trong không gian:



Điện tử chuyển động trong trường thế này theo các định luật của Cơ học lượng tử

Chuyển động của điện tử tuân theo phương trình Schrodinger:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(x)\Psi}$$

$\begin{cases} \hbar: \text{hằng số Plank} \\ m: \text{khối lượng điện tử} \\ \Psi(x,t): \text{Hàm sóng.} \end{cases}$

Ở các trạng thái dừng:

$$\Psi(x,t) = \Psi(x).\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Với: E là năng lượng của điện tử.

Suy ra:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(x) + U(x)\Psi(x) = E\,\Psi(x)}$$

phương trình trị riêng này cho phép ta xác định phổ năng lượng của điện tử trong tinh thể: $\begin{cases} E \sim \{E_n\} \\ \Psi(x) \sim \{\Psi_n(x)\} \end{cases}$

Điện tử tự do: $U(x) = 0$

Hàm sóng: $\Psi(x) = C.\, e^{\pm i k.x}$

với C là hằng số. → Sóng phẳng

Năng lượng:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

→ phổ năng lượng là liên tục.

Điện tử trong tinh thể: $U(x) = U(x + n.a)$

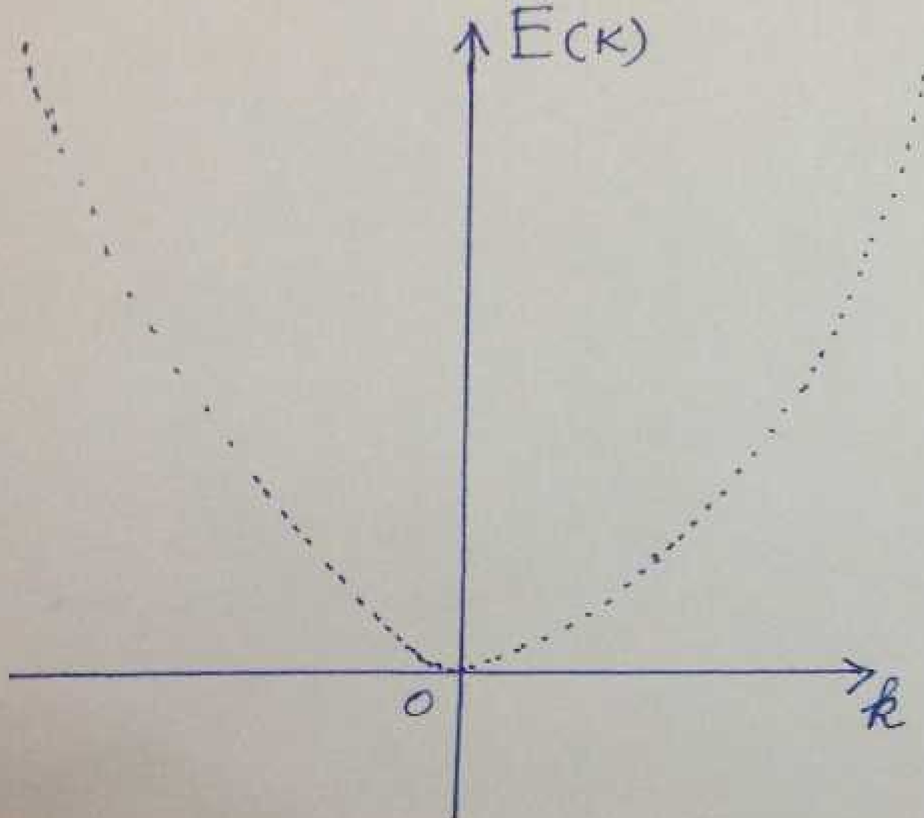
Hàm sóng: $\Psi(x) = F(x).\, e^{\pm i k.x}$

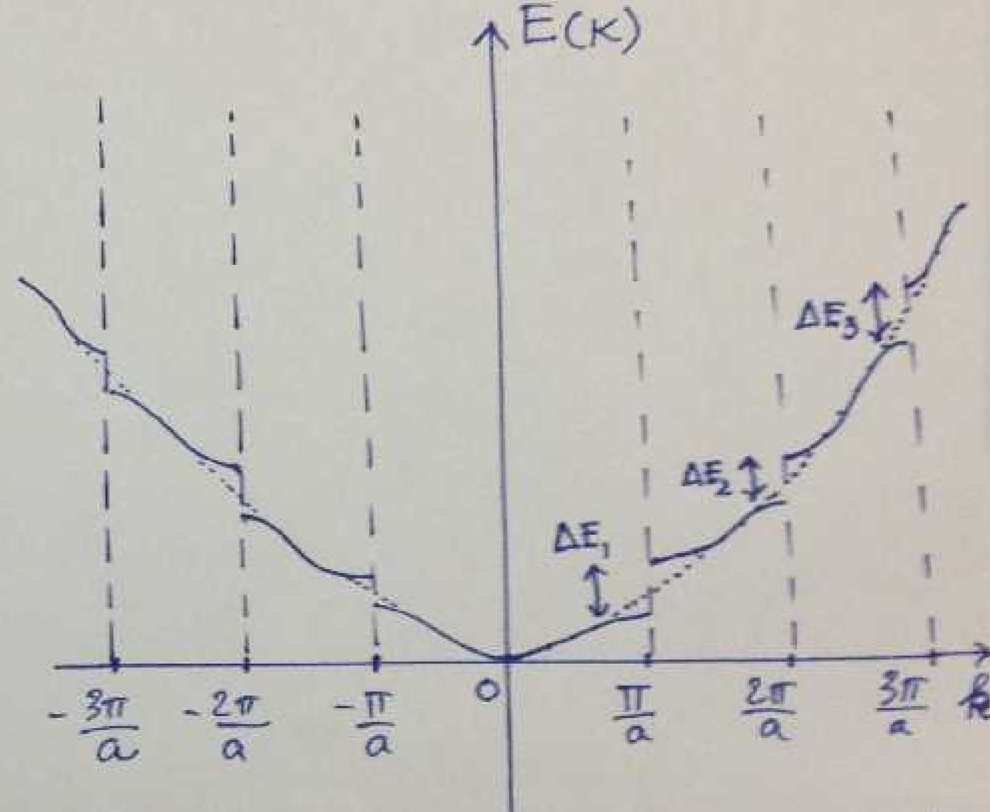
với $F(x) = F(x + n.a)$ gọi là hàm Bloch

→ Sóng phẳng bị biến điệu biên độ với chu kỳ: a.

Năng lượng: $E(k)$ bị gián đoạn tại các giá trị: $k_n = n.\frac{\pi}{a}$.

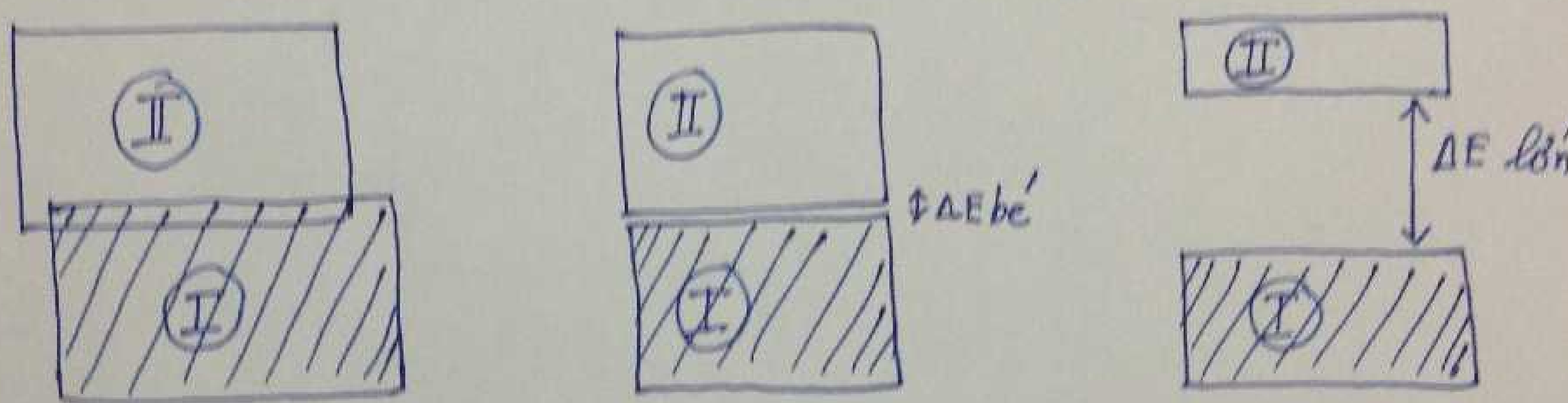
→ Phổ năng lượng là các dải liên tục, cách nhau bởi các vùng trống. Điện tử có năng lượng nằm trong vùng này không thể chuyển động trong tinh thể.





Các vùng $\Delta E_1, \Delta E_2, \Delta E_3, \ldots$ còn được gọi là các <u>vùng cấm</u>. (Band gap)

Lý thuyết về các vùng năng lượng như trên cho phép ta giải thích được nhiều tính chất quan trọng của các vật liệu, đặc biệt là tính dẫn điện.



a) Kim loại b) Bán dẫn c) Điện môi.

Phương pháp tính toán bằng số

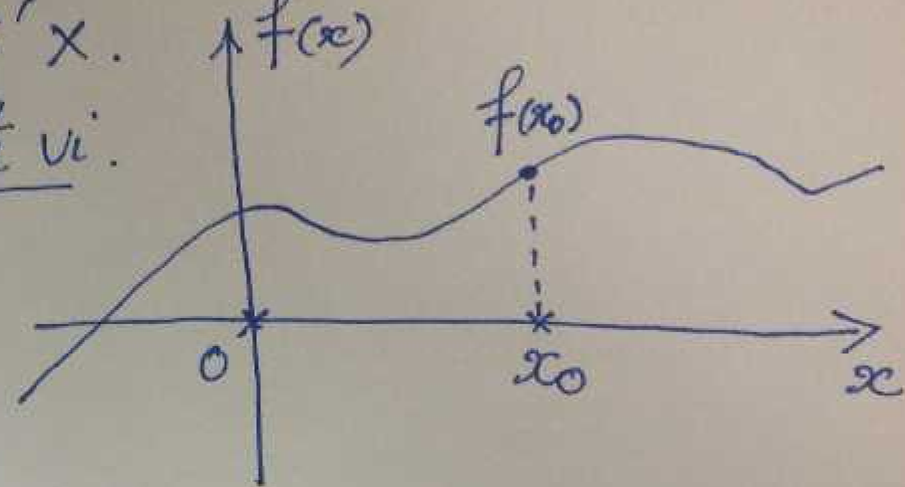
- Phép tính đạo hàm: Tính gần đúng các đạo hàm cấp một và cấp hai của hàm số.
- Tính toán với các ma trận: Liên hệ với bài toán trị riêng và hàm riêng của phương trình vi phân.

Tính đạo hàm của hàm số

Xét hàm số: $f(x)$ với biến số x.

Giả sử $f(x)$ là hoàn toàn khả vi.

Ta có Khai triển Taylor của $f(x)$ tại các vị trí x xung quanh x_0 như sau:



$$f(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}(x-x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}(x-x_0)^3 + \dots$$

$$\Rightarrow \boxed{f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n}$$

Khi x rất gần x_0, ta đặt: $\begin{cases} dx = x - x_0 \\ df = f(x) - f(x_0) \end{cases}$

Từ đó suy ra biểu thức của đạo hàm bậc nhất của $f(x)$ tại x_0:

$$f'(x)\Big|_{x_0} \approx \frac{df}{dx} = \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} + O(x - x_0)$$

Với $O(x - x_0)$ là gần đúng bậc $(x - x_0)$.

Tính đạo hàm bậc hai của $f(x)$ tại x_0:

Xét khai triển Taylor của hàm $f(x)$ tại $\begin{cases} x_1 = x_0 + \Delta x \\ x_2 = x_0 - \Delta x \end{cases}$

với Δx rất bé.

$$\begin{cases} f(x_1) = f(x_0) + \dfrac{f'(x_0)}{1!}\Delta x + \dfrac{f''(x_0)}{2!}(\Delta x)^2 + \cdots \\ f(x_2) = f(x_0) - \dfrac{f'(x_0)}{1!}\Delta x + \dfrac{f''(x_0)}{2!}(\Delta x)^2 + \cdots \end{cases}$$

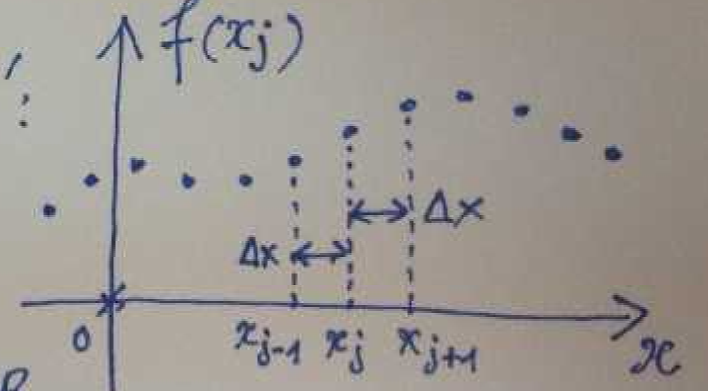
Suy ra:

$$f''(x)\Big|_{x_0} = \frac{f(x_1) - 2f(x_0) + f(x_2)}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x)$$

Khi thực hiện tính toán số trên máy tính, ta khai báo biến x là một mảng: $x \sim (x_1, x_2, x_3, \ldots\ldots, x_n)$ và nhập giá trị của hàm $f(x)$ tại các giá trị x_i tương ứng

$$f(x) \sim (f(x_1), f(x_2), \ldots f(x_n))$$

Biểu diễn của $f(x)$ khi đã rời rạc hóa:



Có thể tính được gần đúng $f'(x)$ và $f''(x)$ của hàm $f(x)$ rất dễ dàng với <u>MATLAB</u>.

Vậy sau khi đã thực hiện rời rạc hoá các biến số và hàm số, ta có công thức tính các đạo hàm như sau:

$$\begin{cases} f'(x_j) = \dfrac{f(x_{j+1}) - f(x_j)}{\Delta x} \\ f''(x_j) = \dfrac{f(x_{j+1}) - 2f(x_j) + f(x_{j-1})}{(\Delta x)^2} \end{cases}$$

Phương pháp tính toán như vậy được gọi là phương pháp <u>Sai phân hữu hạn</u> (Finite-Difference)

Đây là phương pháp tính toán được sử dụng trong <u>phần mềm</u> <u>OptiFDTD</u> (<u>F</u>inite <u>D</u>ifference <u>T</u>ime <u>D</u>omain)

Tính toán với các ma trận

Xét phương trình Schrodinger cho hàm sóng $\psi(x)$ của điện tử trong trường thế $U(x)$. Bài toán tìm phổ năng lượng của điện tử là bài toán trị riêng:

$$\boxed{-\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}U(x)\psi = \frac{2m}{\hbar^2}E\psi}$$

Trong tính toán số:
$$\begin{cases} \psi \sim (\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_N) \\ U \sim (U_1, U_2, \ldots, U_N) \\ (x \sim (x_1, x_2, \ldots, x_N)) \end{cases}$$

Theo trên ta có:

$$\psi''(x_j) = \left.\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}\right|_{x_j} = \frac{\psi(x_{j+1}) - 2\psi(x_j) + \psi(x_{j-1})}{(\Delta x)^2}$$

Suy ra :

$$\begin{cases} \psi''(x_1) = \dfrac{1}{\Delta x^2}\left(-2\psi(x_1) + \psi(x_2) + 0.\psi(x_3) + \dots + 0.\psi(x_N)\right) \\ \psi''(x_2) = \dfrac{1}{\Delta x^2}\left(\psi(x_1) - 2\psi(x_2) + \psi(x_3) + 0.\psi(x_4) + \dots + 0.\psi(x_N)\right) \\ \vdots \qquad \dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ \psi''(x_N) = \dfrac{1}{\Delta x^2}\left(0.\psi(x_1) + 0.\psi(x_2) + \dots \dots + \psi(x_{N-1}) - 2\psi(x_N)\right) \end{cases}$$

Dưới dạng ma trận ta có:

$$\begin{bmatrix} \Psi''(x_1) \\ \Psi''(x_2) \\ \vdots \\ \vdots \\ \Psi''(x_N) \end{bmatrix} = \frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdots & \cdots & 0 \\ & & & \ddots & & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \ddots & \cdots & \\ & & & & & \ddots & 1 \\ 0 & 0 & & & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi(x_1) \\ \Psi(x_2) \\ \vdots \\ \vdots \\ \Psi(x_N) \end{bmatrix}$$

(Đặt là: M_1.)

Suy ra: $\boxed{\Psi''(x) = M_1 \Psi(x)}$

Đối với số hạng $\frac{2m}{\hbar^2}U_{(x)}\Psi$:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \frac{2m}{\hbar^2}U(x_1) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{2m}{\hbar^2}U(x_2) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2m}{\hbar^2}U(x_3) & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \frac{2m}{\hbar^2}U(x_N) \end{bmatrix}}_{\text{Đặt là } M_2} \begin{bmatrix} \Psi(x_1) \\ \Psi(x_2) \\ \Psi(x_3) \\ \vdots \\ \Psi(x_N) \end{bmatrix}$$

Suy ra:

$$\boxed{\frac{2m}{\hbar^2}U_{(x)}\Psi = M_2\Psi}$$

Tương tự: số hạng $\frac{2m}{\hbar^2}E\Psi$ được biểu diễn:

Đặt là M_3

$$\begin{bmatrix} E & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & E & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & E & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi(x_1) \\ \Psi(x_2) \\ \Psi(x_3) \\ \vdots \\ \vdots \\ \Psi(x_N) \end{bmatrix}$$

Vậy: $$\boxed{\frac{2m}{\hbar^2}E\Psi = M_3\Psi}$$

Ta có: $$\boxed{(-M_1 + M_2 - M_3)\Psi = 0}$$

$\left\{ \begin{matrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \end{matrix} \right\}$ là các ma trận vuông: $N \times N$.

Đây là <u>biểu diễn dưới dạng ma trận</u> của phương trình Schrodinger mô tả chuyển động của điện tử trong các vật liệu, <u>theo thuật toán sai phân hữu hạn</u>.

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.