

Univerzita Karlova v Praze  
Matematicko-fyzikální fakulta

## DIPLOMOVÁ PRÁCE



Martin Rejman

### Modelování optického zisku v planárních vlnovodech s „prosakujícími“ mody

Katedra chemické fyziky a optiky

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Tomáš Ostatnický, Ph.D.

Studijní program: Fyzika, optika a optoelektronika

2007

Poděkování za podporu, konzultace, návrhy a připomínky patří všem, kteří mi pomáhali a radili.

Zejména děkuji svému vedoucímu práce za cenné rady, konzultace, připomínky a poskytnutí širšího nadhledu nad řešenými problémy. A to jak během vytváření počítačového programu pro simulace a vyhodnocování získaných dat, tak během psaní vlastní diplomové práce. Děkuji prof. RNDr. Ivanu Pelantovi DrSc. a jeho spolupracovníkům za možnost porovnat simulované výsledky s experimentálními hodnotami.

Rovněž děkuji tvůrcům programu Gnuplot ([www.gnuplot.info](http://www.gnuplot.info)), pomocí kterého jsem vytvářel grafy a bez kterého by bylo obtížné zpracovat objemná data, a také autorům editoru Vim ([www.vim.org](http://www.vim.org)), který mi rovněž ušetřil mnoho práce a času.

Děkuji také svým rodičům, bratrovi a všem dalším, kteří mě během tvorby práce všemožně podporovali.

Prohlašuji, že jsem svou diplomovou práci napsal samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce.

V Praze dne 18.dubna 2007

Martin Rejman

# Obsah

<b>1</b>	<b>Motivace a cíl práce</b>	<b>6</b>
<b>2</b>	<b>Modely vlnovodu</b>	<b>7</b>
2.1	Výchozí experiment . . . . .	7
2.2	Princip metody VSL a SES . . . . .	8
2.3	Druhy modů vlnovodu . . . . .	9
2.4	Stávající model, vysvětlení experimentu . . . . .	9
2.5	Nový vlnový model . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Vlnový model</b>	<b>14</b>
3.1	Souřadný systém . . . . .	14
3.2	Elektrické pole a intenzita světla . . . . .	14
3.3	Maxwellovy rovnice . . . . .	14
3.4	Planární struktura . . . . .	15
3.5	Přenosová matice . . . . .	17
3.6	Zrcadlové okrajové podmínky . . . . .	17
3.7	Rozklad pole do vlastních modů . . . . .	19
3.8	Profil pole a difrakce ze struktury . . . . .	20
3.9	Započtení absorpce a optického zisku . . . . .	20
3.10	Vzorce použité v programu . . . . .	21
3.10.1	Určení modu pro zadaný úhel šíření . . . . .	21
3.10.2	Hledání modů . . . . .	21
3.10.3	Rozklad pole do modů . . . . .	22
<b>4</b>	<b>Výsledky simulací</b>	<b>24</b>
4.1	Vliv šířky substrátu a pláště na výsledky . . . . .	24
4.2	Neabsorbující struktury . . . . .	25
4.2.1	Demonstrace vlivu šířky struktury . . . . .	25
4.2.2	Šíření světla v jádře vlnovodu . . . . .	26
4.2.3	Vyvazování světla z jádra do substrátu a pláště . . . . .	27
4.2.4	Šíření světla substrátem . . . . .	27

<i>OBSAH</i>	4
4.3 Absorbující a zisková struktura . . . . .	36
4.3.1 Parametry struktury . . . . .	36
4.3.2 Samotný nanokrystal . . . . .	37
4.3.3 Simulace VSL experimentu . . . . .	37
<b>5 Diskuse výsledků</b>	<b>41</b>
5.1 Původní model . . . . .	41
5.2 Podrobnější vlnový model . . . . .	41
5.2.1 Seznamovací výpočty . . . . .	41
5.2.2 Vyvazování světla do substrátu . . . . .	42
5.2.3 Absorpce a optický zisk . . . . .	43
5.3 Jevy na hraně vzorku . . . . .	46
<b>6 Závěr</b>	<b>48</b>
<b>Literatura</b>	<b>49</b>

Název práce: Modelování optického zisku v planárních vlnovodech s „prosa-  
kujícími“ mody

Autor: Martin Rejman

Katedra (ústav): Katedra chemické fyziky a optiky

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Tomáš Ostatnický, Ph.D.

E-mail vedoucího: osty@matfyz.cz

Abstrakt: V předložené práci studujeme šíření světla planární vlnovodnou strukturou objevenou ve vzorcích s křemíkovými nanokrystaly. Ty vykazují při vhodném osvětlení luminiscenci, snahou experimentátorů bylo zjistit, zda-li je přítomen i optický zisk, tj. jestli struktura zesiluje světlo. Ukázalo se však, že vlnovodná struktura má neobyčejné vlastnosti a způsobuje zúžení luminiscenčních spekter měřených ve vlnovodném uspořádání. Předkládáme model struktury a pomocí simulací ukážeme, že důvodem zúžení je vedení světla substrátovými mody vlnovodu. Dále, pomocí zahrnutí optického zisku a ztrát, ukážeme problém při užití metody VSL pro měření optického zisku ve vzorcích s vlnovodným chováním.

Klíčová slova: substrátové mody, planární vlnovodná struktura, optický zisk

Title: Calculation of optical gain on leaking modes in planar waveguides

Author: Martin Rejman

Department: Department of Chemical Physics and Optics

Supervisor: RNDr. Tomáš Ostatnický, Ph.D.

Supervisor's e-mail address: osty@matfyz.cz

Abstract: In the present work, we study propagation of light in planar waveguiding structures recognized in samples with silicon nanocrystals. Their luminescent behaviour led to a question, whether there is positive net optical gain present in the samples. But the structures reveal unusual behaviour. The luminescence spectra measured in the waveguiding geometry were narrow. We show a model of this structure and using simulation of the process we demonstrate the reason of the narrowing - the light propagates mainly due to substrate modes of the waveguide. We also discuss the usability of the VSL method for measurement of optical gain in such structures.

Keywords: substrate modes, planar waveguiding structure, optical gain

# Kapitola 1

## Motivace a cíl práce

Impulsem ke zkoumání modové struktury vlnovodů bylo pozorování fotoluminiscence křemíkových nanokrystalů implantovaných do skla, respektive snaha o měření jejich optického zisku. Implantací iontů křemíku a následným žháním vzorku vzniká vlnovodná struktura. Luminiscence nanokrystalů je excitována laserem ve směru kolmém na vlnovod, detekce signálu probíhá buď ve směru excitace (získáme široké spektrum), nebo ve směru vedení světla (výsledkem je značné zúžení výsledného spektra). V druhém případě byla očekávána detekce vedených modů, avšak měřená spektra tomu neodpovídala (J. Valenta, [2]). Experiment je ilustrován v kapitole 2.

Snaha o vysvětlení zúžení vedla k několika hypotézám o jeho vzniku. Naše skupina vypracovala teoretický model ([4]), který dokáže dobře reprodukovat výsledky měření: implantací se ve vzorku vytvoří nesymetrický profil indexu lomu, díky kterému se vzorek chová (vůči světlu šířícímu se kolmo na směr implantace) jako vlnovod. Jelikož nanokrystal, který tvoří jádro vlnovodu, absorbuje luminiscenci vytvářené světlo, jsou klasické vedené mody utlumeny a na významu nabývají substrátové mody, které unikají z jádra vlnovodu a šíří se mimo něj. Lze tedy spočítat spektrum záření vzorku pozorované ve směru vlnovodu.

Uvedený model však plně nerespektuje prostorovou symetrii problému, jelikož uvažuje úplnou translační symetrii vzorku ve směru vedení vln, ta je však ve skutečnosti narušena hranou vzorku, ze které se sbírá luminiscence.

Cílem práce je tedy jednak seznámení se se stávajícím modelem, jeho užití k simulaci dostupných vzorků a srovnání získaných výsledků s experimentem, jednak vypracování podrobnějšího modelu vzorku, který zahrne přítomnost hrany vzorku. Pomocí nového modelu prověříme teorii pro měření optického zisku metodou VSL (viz kap. 2.2).

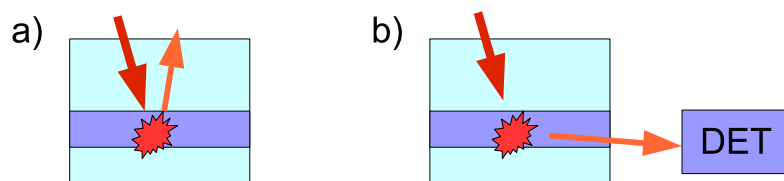
Kapitola 2 uvádí stav problematiky před vypracováním diplomové práce, formulace nového modelu a jeho aplikace je obsahem kapitol 3 a dále.

# Kapitola 2

## Modely vlnovodu

### 2.1 Výchozí experiment

Popišme podrobněji počáteční experiment. Pozorujeme fotoluminiscenci křemíkových nanokrystalů. Vzorek je připraven pomocí implantace iontů křemíku do skleněné destičky a následným žháním, které umožní migraci jednotlivých atomů křemíku a následné vytvoření nanokrystalů. Vzniká vlnovodná struktura nanokrystalů s nesymetrickým profilem indexu lomu ve směru implantace a současně (v ideálním případě) homogenní ve směru kolmém na směr implantace.

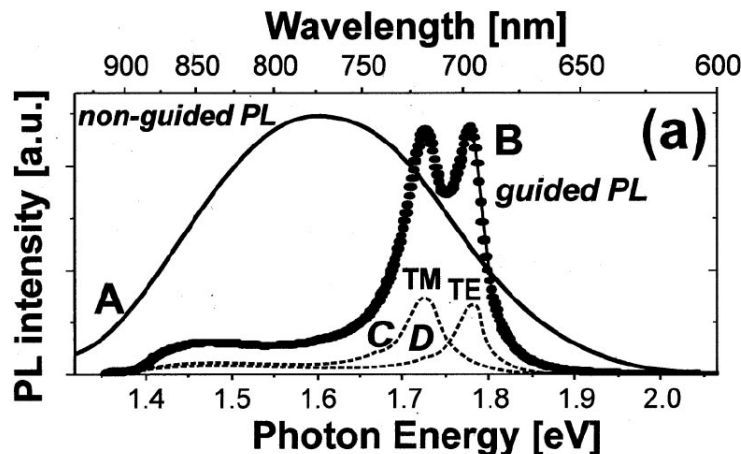


Obrázek 2.1: Schema měření luminiscence : klasické (a) a vlnovodné (b).

Účelem měření bylo zjistit, jestli nanokrystalové vzorky vykazují optický zisk. Pro měření optického zisku se u objemových vzorků užívá metoda VSL (viz kap. 2.2, případně [1]), avšak pro vlnovodné vzorky se ukázala jako nevhodná (J. Valenta, [2]). Dalším měřením bylo totiž zjištěno, že se měřené spektrum luminiscence značně liší podle použité geometrie detekce.

Vzorek je excitován laserem ve směru kolmém na vlnovod. Ve standardním uspořádání (obr. 2.1-a), kdy je luminiscence detekována také kolmo na vlnovod, měříme (zejména kvůli různé velikosti jednotlivých nanokrystalů) luminiscenční spektrum široké cca. 300nm. Oproti tomu při detekci ve směru

vlnovodu (tzv. vlnovodné uspořádání, obr. 2.1-b) pozorujeme značné zúžení spektra na šířku cca. 20nm. Měřená spektra znázorňuje obr. 2.2 převzatý z [2].



Obrázek 2.2: Luminiscenční spektrum měřené ve standardním (A) a vlnovodném (B,C,D) uspořádání. Spektra (C) a (D) jsou polarizačně rozlišena. Převzato z [2].

## 2.2 Princip metody VSL a SES

Měření optického zisku metodou *VSL* (z anglického Variable Stripe Length, proměnná délka proužku) je založeno na excitaci proměnného počtu nanokrystalů (luminiscenčních center). Pro pozorování využíváme vlnovodného uspořádání sběru luminiscence. Excitační svazek zaostříme (např. válcovou čočkou) tak, abychom získali pruh excitovaných nanokrystalů ve směru vlnovodu. Pomocí clony pak určujeme množství excitovaných nanokrystalů (měníme délku excitačního pruhu) a měříme závislost intenzity na délce excitované oblasti ve vzorku. Je-li přítomen zisk, pak budeme za normálních okolností pozorovat exponenciální nárůst měřeného signálu (2.1) ([2]), kde  $I_{\text{tot}}(\lambda, \ell)$  je měřená intenzita světla o vlnové délce  $\lambda$  při excitaci pruhu u délce  $\ell$ , zisku  $g(\lambda)$  ve vzorku a intenzitě spontánní emise  $I_{\text{sp}}(\lambda)$ .

$$I_{\text{tot}}(\lambda, \ell) = \frac{I_{\text{sp}}(\lambda)}{g(\lambda)} (e^{g(\lambda)\ell} - 1) \quad (2.1)$$



Další použitou metodou byla metoda *SES* (z anglického Shifting Excitation Spot, posouvající se bod excitace), která je obdobná jako VSL, pouze místo proužku excitujeme v rámci možností bodovou oblast vzorku. Opět měříme závislost intenzity světla ze vzorku, tentokrát však na vzdálenosti excitovaného bodu od hrany vzorku. Pro vzorek objemového materiálu bez zisku naměříme vlivem absorpce určitý útlum signálu s rostoucí vzdáleností excitačního bodu od hrany vzorku.

Podrobnější informace lze nalézt např. v [1] nebo [2].

## 2.3 Druhy modů vlnovodu

Při analýze šíření elektromagnetických vln ve vlnovodu vycházíme z Maxwellových rovnic pro elektromagnetické pole. Pro dané okrajové podmínky<sup>1</sup> z nich získáme systém řešení popisujících šíření elektromagnetického pole, do kterého lze pole ve vlnovodu rozložit. Každé jednotlivé řešení v tomto systému nazýváme *modem* vlnovodu.

Z praktických důvodů budeme mody demonstrovat na planární neabsorbující struktuře (kap. 3.4) se třemi vrstvami – pláštěm, jádrem a substrátem. Nechť index lomu pláště je nejmenší a index lomu jádra největší. Mody pak rozlišujeme na :

- a) radiální – nevykazují úplný odraz ani na rozhraní jádro-substrát, ani na rozhraní jádro-plášť, mají všude harmonický průběh
- b) substrátové – úplně se odrážejí na rozhraní jádra a pláště, v plášti jsou exponenciálně tlumené
- c) vedené – vykazují úplný odraz na rozhraní jádro-substrát i jádro-plášť, harmonický průběh mají pouze v jádře

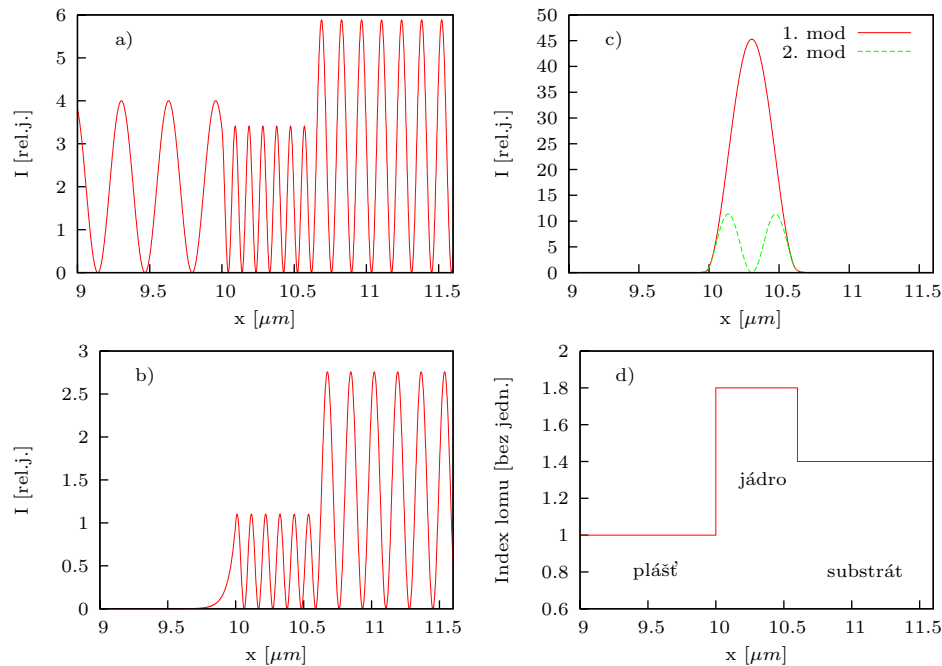
Obr. 2.3 znázorňuje příklady uvedených druhů modů. Graf 2.3-c znázorňuje první (tzv. fundamentální) a druhý vedený mod (charakterizuje je nejvyšší fázová rychlost ve směru vlnovodu ze všech modů).

## 2.4 Stávající model, vysvětlení experimentu

Jelikož podrobnosti modelu vytvořeného naší skupinou již byly publikovány v [4], uvedeme pouze stručný souhrn faktů podstatných pro porozumění mechanismu vzniku zúžení spektra. Klíčovým poznatkem je předpoklad, že hlavní

---

<sup>1</sup>např. viz kapitola 3.6

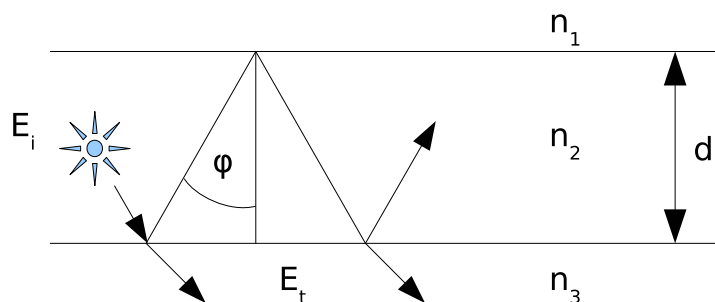


Obrázek 2.3: Profily intenzity elektrického pole různých druhů modů vlnovodné vrstevnaté struktury: radiační(a), substrátový(b) a vedené(c) mody. Profil indexu lomu struktury se znázorněnými mody (d).

roli v měřených spektrech mají substrátové mody – předpokládáme, že utlumení vedených modů je způsobeno nezanedbatelnou disipací energie v jádře, způsobenou defekty materiálu a nepravidelnostmi na rozhraní jádra a okolních vrstev.

Abychom mohli vysvětlit nezvyklé chování implantované struktury v experimentu, modelujeme ji pro jednoduchost, stejně jako u modů v předešlé podkapitole, pomocí třívrstvé planární struktury, tj. homogenní v rovinách kolmých na směr implantace. Doprostřed jádra umístíme jako zdroj záření svítící nanokrystal a hledáme spektrální závislost intenzity světla vyzářeného z hrany vzorku na směr vyzáření.

Uvažujeme tedy rovinnou vlnu o kruhové frekvenci  $\omega$  šířící se pod daným úhlem  $\varphi$  v jádře rychlostí  $\frac{c}{n_2}$ , kde  $c$  je rychlost světla ve vakuu. Dále známe indexy lomu  $n_1$ ,  $n_2$ ,  $n_3$  jednotlivých vrstev a tloušťku jádra  $d$ . Pomocí Fresnelových amplitudových koeficientů odrazu a průchodu na jednotlivých rozhraních ( $r_{23}$ ,  $r_{21}$  a  $t_{23}$ ) určíme vztah (2.3), tj. kolik z vyzářené intenzity pronikne do substrátu (také viz [7]). Konstanta  $2\beta = 2\frac{\omega}{c}n_2\cos\varphi$  je dráhový rozdíl mezi vlnou přímo prošlou a vlnou, která projde do substrátu až po dvou vnitřních



Obrázek 2.4: Schema planární struktury a šíření světla v ní.

odrazech (viz obr. 2.4).

$$E_t = E_i t_{23} e^{i\beta/2} + E_i e^{i\beta/2} r_{23} r_{21} t_{23} e^{2i\beta} + \dots \quad (2.2)$$

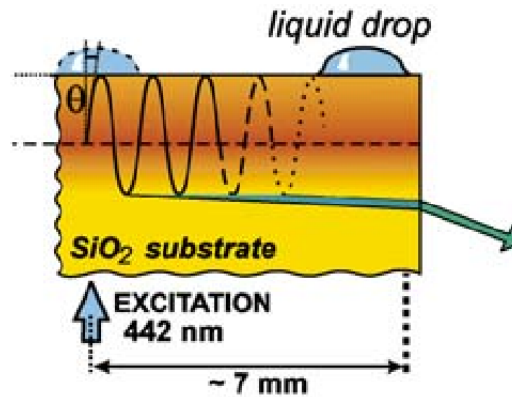
$$\frac{E_t}{E_i} = \frac{t_{23} e^{i\beta/2}}{1 - r_{23} r_{21} e^{2i\beta}} \quad (2.3)$$

Pro započtení vícenásobných odrazů použijeme součet geometrické řady. Získáme tak hledanou závislost vyzářené intenzity na úhlu šíření v jádře. Úhel, pod kterým se vyzáří světlo z hrany vzorku, spočteme z úhlu šíření v jádře pomocí Snellova zákona lomu.

Mechanismus zúžení spektra je podobný Fabry-Perotovu rezonátoru s jedním zrcadlem ne úplně odrazivým. Čím více se blíží odrazivost k jedničce, tím užší spektrum záření vychází z rezonátoru. Právě substrátové módy s frekvencí těsně pod *mezní frekvencí* (kterou myslíme takovou frekvencí, kde dochází ke změně charakteru modů ze substrátových na vedené módy) jsou příkladem záření, které se při pronikání z jádra do substrátu téměř úplně odráží zpět do jádra, k přechodu jejich energie do substrátu proto dochází velice pomalu.

Model samotný jsme formulovali pro obecné vrstevnaté prostředí, oproti třívrstvé struktuře se liší pouze tím, že koeficienty odrazu a průchodu je třeba spočítat pro celý komplex vrstev nad a pod jádrem vlnovodu (to lze podobně jako (2.2)). Pomocí odpovídající počítačové simulace byly porovnány výsledky modelu s dostupnými experimentálními daty, shoda je vynikající (viz. např. [3]).

Skupina L. Khriachtcheva uveřejnila v článku [6] odlišnou hypotézu vzniku spektrálního zúžení. Jejich hlavní myšlenkou je, že se ve spektru projeví vedené módy, které se nachází těsně nad mezní frekvencí (definice viz výše). Díky tomu jsou silně delokalizované, pouze malá část jejich energie se šíří disipativním jádrem a jsou tedy dominantní na výstupu.



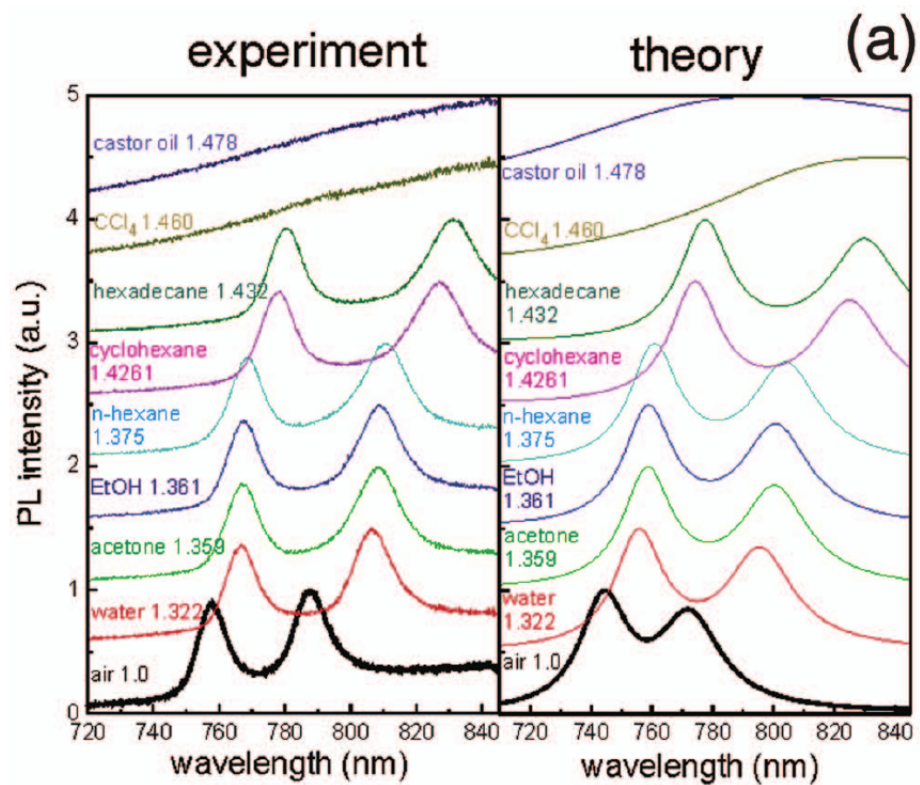
Obrázek 2.5: Uspořádání experimentu pro rozlišení dominance vedených a substrátových modů v měřeném spektru. Převzato z [3].

Ačkoliv je možné tuto hypotézu vyvrátit výpočtem, byl proveden přímý experimentální důkaz vyvracející tuto hypotézu. Bylo využito možnosti měnit kontrast indexu lomu na rozhraní mezi vzorkem a okolím pomocí kapalin (obr. 2.5) nanášených v malých kapkách na vzorek daleko od místa exci-tace. Podle výsledku měření spektra lze rozhodnout, jestli je světlo vedeno v substrátových nebo vedených modech. Pokud je světlo ve vedených modech, bude výsledek velice citlivý na změnu zmíněného kontrastu (tj. druh kapaliny), jelikož tento kontrast určuje fázovou podmínku pro vedení modu a také podmínku pro totální odraz na rozhraní vzorek-okolí. Bude-li však světlo vázáno v substrátových modech, unikne do substrátu, nemá tak již možnost přijít do kontaktu s místem se změněným indexem lomu, a proto zůstane měřené spektru nezměněno.

Experimentální výsledky byly již publikovány v [3] a potvrdily hypotézu vázání světla do substrátových modů. Porovnány byly i s výsledky simulace (viz [5]), shoda je opět vynikající (obr. 2.6).

## 2.5 Nový vlnový model

Ačkoliv bylo ukázáno, že stávající model dokáže dobře vystihnout pozorovaná spektra, nedokáže poskytnout podrobnější informace o šíření světla strukturou. Rovněž nezahrnuje přítomnost hrany vzorku a tím pomíjí narušení prostorové symetrie. Nový model je tedy zapotřebí pojmu podrobněji, a sice přímo řešit Maxwellovy rovnice pro danou strukturu.



Obrázek 2.6: Porovnání měřených a simulovaných spekter v experimentu s proměnným kontrastem indexu lomu. Znázorňuje posun spekter vlivem změny indexu lomu pláště kapalinou v místě excitace. Převzato z [5].

# Kapitola 3

## Vlnový model

### 3.1 Souřadný systém

Pro jasný popis struktury v ní zavedeme souřadný systém. Osa  $\hat{x}$  leží ve směru implantace, tj. kolmo na vlnovod, a její kladný směr jde od pláště směrem k substrátu. Směr osy  $\hat{z}$  je směr detekce a směrem k detektoru hodnoty  $z$  rostou. Osa  $\hat{y}$  je určena vektorovým součinem  $\hat{x}$  a  $\hat{z}$  a dohromady tvoří pravotočivý souřadný systém (viz obr. 3.1).

### 3.2 Elektrické pole a intenzita světla

Jelikož v dalším textu budeme hojně používat pojmy elektrické pole a intenzita, učiníme poznámku k jejich významu. *Elektrickým polem* myslíme pole vektorů  $\mathbf{E}$  intenzity elektrického pole. Intenzitou, není-li řečeno jinak, myslíme intenzitu světla  $I \propto |\mathbf{E}|^2$ .

### 3.3 Maxwellovy rovnice

Za odvozením vztahů potřebných pro popis modelu vyjdeme z Maxwellových rovnic (viz [7]) pro šířící se elektromagnetické pole (3.1) a (3.2). Nejdříve budeme hledat řešení v rámci jedné vrstvy, což je homogenní izotropní prostředí, prozatím neabsorbující.

$$\operatorname{rot}\mathbf{E} = -\mu\frac{\partial\mathbf{H}}{\partial t}, \quad \operatorname{div}\mathbf{E} = 0 \quad (3.1)$$

$$\operatorname{rot}\mathbf{H} = \varepsilon\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t}, \quad \operatorname{div}\mathbf{H} = 0 \quad (3.2)$$

Nyní vynulujeme všechny derivace podle prostorové proměnné  $y$ . Důvodem je, že bez újmy na obecnosti uvažujeme zdroj záření i detektor přímo v rovině  $x - z$ , takže v limitě Fraunhoferovy difrakce do detektoru dopadnou pouze rovinné vlny, jejichž směr šíření je také v rovině  $x - z$ . Rozepišme tedy upravené Maxwellovy rovnice do složek :

$$-\hat{\mathbf{x}} \frac{\partial E_y}{\partial z} + \hat{\mathbf{y}} \left( \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) + \hat{\mathbf{z}} \frac{\partial E_y}{\partial x} = -\mu \left( \hat{\mathbf{x}} \frac{\partial H_x}{\partial t} + \hat{\mathbf{y}} \frac{\partial H_y}{\partial t} + \hat{\mathbf{z}} \frac{\partial H_z}{\partial t} \right) \quad (3.3)$$

$$-\hat{\mathbf{x}} \frac{\partial H_y}{\partial z} + \hat{\mathbf{y}} \left( \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) + \hat{\mathbf{z}} \frac{\partial H_y}{\partial x} = \varepsilon \left( \hat{\mathbf{x}} \frac{\partial E_x}{\partial t} + \hat{\mathbf{y}} \frac{\partial E_y}{\partial t} + \hat{\mathbf{z}} \frac{\partial E_z}{\partial t} \right) \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial H_x}{\partial x} + \frac{\partial H_z}{\partial z} = 0 \quad (3.5)$$

Pozorným pohledem zjistíme, že se rovnice rozpadají na dvě sady rovnic, pro  $E_y, H_x, H_z$  resp.  $H_y, E_x, E_z$  – nazýváme je *TE* resp. *TM* mody. V dalším textu se budeme blíže zabývat pouze TE mody, jelikož veškerá odvození jsou pro TM mody naprosto analogická, navíc v numerickém výpočtu ušetříme práci se zdvojením pro oba druhy módů.

Pro TE mody získáme kombinací rovnic (3.3 – 3.5) vlnovou rovnici (3.6), kde  $\varepsilon$  a  $\mu$  jsou permitivita a permeabilita prostředí.

$$\varepsilon\mu \frac{\partial^2 E_y}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} \quad (3.6)$$

Řešení předpokládáme ve tvaru (3.7) podobném rovinné vlně,

$$E_y(x, z) = E_0 m(x) e^{i(\beta z - \omega t)} \quad (3.7)$$

kde  $E_0$  je amplituda pole včetně jednotek,  $\omega$  je úhlová frekvence záření,  $\beta$  vyjadřuje  $z$ -ovou komponentu vlnového vektoru  $\mathbf{k}$  ( $|\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} n_{\max}$ ,  $\lambda$  je vlnová délka záření ve vakuu),  $m(x)$  je funkce vyjadřující profil pole ve směru  $\hat{\mathbf{x}}$ . Prostým dosazením (3.7) do (3.6) získáme pro neznámou funkci  $m(x)$  diferenciální rovnici druhého řádu, jejíž řešením je (3.8),

$$m(x) = Ae^{\alpha(x-d)} + Be^{-\alpha(x-d)} \quad (3.8)$$

kde  $A$  a  $B$  jsou komplexní integrační konstanty,  $d$  určuje počátek odečítání souřadnice  $x$  ve vrstvě a  $\alpha = \sqrt{\beta^2 - k^2}$  souvisí s příčnou konstantou šíření pro dané záření ( $\beta = k_z$  je podélná konstanta šíření).

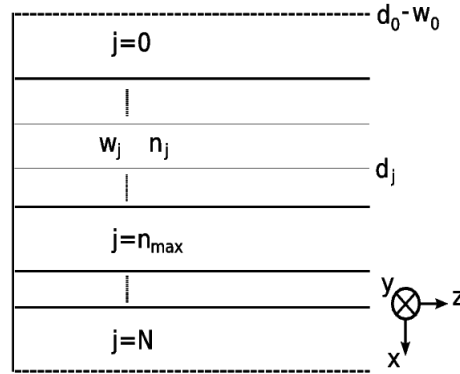
### 3.4 Planární struktura

Cílem modelu je popsat co nejlépe reálný vzorek se spojitými změnami optických vlastností ve směru osy  $\hat{\mathbf{x}}$  (např. index lomu). Proti takovému pořá-

pravdu stojí fakt, že pro model máme k dispozici pouze počítač s diskretními hodnotami proměnných.

Je tedy zapotřebí provést diskretizaci problému, převést ho na problém bez spojitých veličin. První možností je vypracovat “spojitou” teorii a diskretizaci provést až při výpočtu, např. integrálů. Transformaci ze spojitě struktury na diskretní se však nevyhne, odsuneme ji. Navíc se může stát, že výsledky výpočtů budou závislé na použitých metodách diskretizace, tj. např. numerické integrace.

Vydáme se tedy druhou cestou a provedeme potřebnou transformaci již na počátku řešení – uijeme *vrstevnatou strukturu materiálu*. Kromě jednodušší teorie modelu získáme možnost přesně určit jeho vstup, výsledky výpočtu pak budou určovat chování zadané struktury, kdybychom ji uměli vyrobit. Žádná další fyzikální aproximace, kromě diskretizace, do modelu nevstoupí. Otázkou zůstane, do jaké míry vystihuje zadaná struktura chování reálného vzorku.



Obrázek 3.1: Nákres vrstevnaté struktury

Na obr. 3.1 je schematický nákres použité vrstevnaté struktury včetně orientace souřadného systému. Obsahuje celkem  $N + 1$  očíslovaných vrstev, každá má určitou tloušťku  $w_j$ , index lomu  $n_j$ , vrstva s nejvyšším indexem lomu má  $j = n_{\max}$ . Hranice jednotlivých vrstev mají souřadnici  $x = d_j$ . Vrstvy jsou obecně různé, v rovnici (3.8) tedy přidáme index vrstvy a dostaneme tvar (3.10), se kterým budeme pracovat dále.

$$E_j(x, z) = \hat{\mathbf{y}} E_0 m_j(x) e^{i(\beta z - \omega t)} \quad (3.9)$$

$$m_j(x) = A_j e^{\alpha_j(x-d_j)} + B_j e^{-\alpha_j(x-d_j)} \quad (3.10)$$

Tím známe tvar řešení v každé vrstvě, úplně ho však určí až znalost integračních konstant  $A_j$  a  $B_j$ , tj.  $2(N + 1)$  komplexních neznámých.



### 3.5 Přenosová matice

Integrační konstanty vypočteme pomocí podmínek spojitosti polí (3.11) na hranici mezi vrstvami  $j - 1$  a  $j$ .

$$\hat{\mathbf{x}} \times (\mathbf{E}_j - \mathbf{E}_{j-1}) = 0 \quad (3.11)$$

$$\hat{\mathbf{x}} \times (\mathbf{H}_j - \mathbf{H}_{j-1}) = 0 \quad (3.12)$$

Z Maxwellových rovnic (3.3 – 3.5) určíme potřebné komponenty polí (3.13) a (3.14),

$$\mathbf{E}_y(x, z) = \hat{\mathbf{y}}E_0 \left[ A_j e^{\alpha_j(x-d_j)} + B_j e^{-\alpha_j(x-d_j)} \right] e^{i(\beta z - \omega t)} \quad (3.13)$$

$$\mathbf{H}_z(x, z) = \hat{\mathbf{z}} \frac{iE_0}{\mu_j \omega} \left[ -A_j \alpha_j e^{\alpha_j(x-d_j)} + B_j \alpha_j e^{-\alpha_j(x-d_j)} \right] e^{i(\beta z - \omega t)} \quad (3.14)$$

dosazením do (3.11) a upravením na maticový tvar tak, abychom vyjádřili integrační konstanty jedné vrstvy pomocí konstant druhé vrstvy, získáme *přenosovou matici*  $M_j$  (3.15) mezi vrstvami  $j - 1$  a  $j$  (viz též [8]).

$$M_j = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{\alpha_{j-1}}{\alpha_j}\right) e^{\alpha_j w_j} & \left(1 - \frac{\alpha_{j-1}}{\alpha_j}\right) e^{\alpha_j w_j} \\ \left(1 - \frac{\alpha_{j-1}}{\alpha_j}\right) e^{-\alpha_j w_j} & \left(1 + \frac{\alpha_{j-1}}{\alpha_j}\right) e^{-\alpha_j w_j} \end{bmatrix} \quad (3.15)$$

Vazby mezi vrstvami můžeme vyjádřit v maticové podobě (3.16). Celková matice přenosu  $T$  umožňuje svázat první a poslední vrstvu,

$$\begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = M_j \begin{pmatrix} A_{j-1} \\ B_{j-1} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} A_N \\ B_N \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

takže neznámými zůstávají pouze integrační konstanty v první a poslední vrstvě. Jejich určením získáme řešení Maxwellových rovnic v celé vrstevnaté struktuře. Potřebujeme tedy ještě ...

### 3.6 Zrcadlové okrajové podmínky

K úplnému určení řešení jakékoliv diferenciální rovnice jsou zapotřebí okrajové (příp. hraniční) podmínky. Jsou to právě ony, kdo určuje “výslednou fyziku” (viz např. kvantování, které vzniká jako důsledek aplikace okrajových podmínek).

Co od řešení na hranicích ( $x = d_0 - w_0$  a  $x = d_N$ ) požadujeme? Budeme požadovat, aby se vnější hranice chovaly jako ideálně odrazivá zrcadla.

Důvodem pro takovou volbu je jednak zachování energie v soustavě a jednak to, že získáme diskrétní spektrum vlastních modů struktury, jelikož de-facto všechny mody budou vedené. Kdybychom použili „přirozené“ okrajové podmínky, tzn. posunuli bychom hraniční zrcadla do nekonečna, byl by problém numericky obtížně řešitelný, jelikož bychom dostali spojité spektrum substrátových a radiačních modů. Volíme proto konečnou vzdálenost zrcadel od vzorku, což způsobí zmíněnou diskretizaci spektra modů.

Podmínkou nechť je nulový tok energie skrz hranice, tj. nechť je časová střední hodnota složky Poyntingova vektoru (3.17) kolmé k hranici nulová, tj. nechť platí rovnosti (3.18)

$$\langle \mathbf{S} \rangle_T = \frac{1}{2} \text{Re}(\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*) \quad (3.17)$$

$$\langle \mathbf{S}(x = d_0 - w_0) \rangle \cdot \hat{\mathbf{x}} = 0 \quad \langle \mathbf{S}(x = d_N) \rangle \cdot \hat{\mathbf{x}} = 0 \quad (3.18)$$

Dosadíme a výpočtem dostaneme okrajové podmínky (3.19) a (3.20),

$$\left[ \text{Im}(\alpha_0) (|A_0|^2 - |B_0|^2) - 2\text{Re}(\alpha_0) \text{Im}(A_0^* B_0) \right] = 0 \quad (3.19)$$

$$\left[ \text{Im}(\alpha_N) (|A_N|^2 - |B_N|^2) - 2\text{Re}(\alpha_N) \text{Im}(A_N^* B_N) \right] = 0 \quad (3.20)$$

kde volíme pro zjednodušení  $w_0 = 0$  (před první a za poslední vrstvu vložíme vrstvu s nulovou tloušťkou a ostatními parametry stejnými jako v původně první a poslední vrstvě), čímž získají podmínky až na indexy shodný tvar. Podmínky lze splnit identicky volbou  $A_0 = \pm B_0$  a  $A_N = \pm B_N$ . Jelikož podmínky určují řešení až na počátek fáze a jednotkovou amplitudu, je třeba obojí zvolit např. pomocí  $A_0 = 1 + 0i$ . Pro další účely uvažujeme podmínky (3.21), čímž se identicky vynuluje elektrické pole (3.13) na hranicích.

$$A_0 = -B_0, A_N = -B_N \quad (3.21)$$

Získali jsme tedy podmínky na integrační konstanty řešení. Ty jsou však stále vázány celkovou maticí přenosu  $T$  (3.16), dosazením okrajových podmínek (3.21) získáme implicitní rovnici (3.22) závislou pouze na  $\beta$  (vyjádřenou pomocí prvků celkové matice přenosu – první index je řádek, druhý sloupec).

$$T_{11} - T_{12} + T_{21} - T_{22} = 0 \quad (3.22)$$

Podélné konstanty šíření  $\beta$  vyhovující této implicitní rovnici určují řešení, které je řešením Maxwellových rovnic ve zvoleném vrstevnatém prostředí a se zrcadly na hranicích.

### 3.7 Rozklad pole do vlastních modů

Aplikací zrcadlových okrajových podmínek získáme množinu řešení charakterizovaných podélnými konstantami šíření  $\beta_k$ . Nazýváme je *vlastní mody* struktury. Z obecného tvaru modů (3.7) vyplývá, že profil elektrického pole každého modu je neměnný ve směru  $\hat{z}$ , ve kterém je závislost pole komplexně exponenciální.

Cílem pozorování je však svítící nanokrystal ve struktuře, jím vyzařované pole tedy rozložíme do *vlastních modů* struktury ([8]). Rozkládáme pouze  $\hat{x}$ -ové složky pole, jelikož ve směru  $\hat{z}$  využijeme princip superpozice.

Definujme skalární součin (3.23) dvou spojitých funkcí  $\chi(x)$  a  $\psi(x)$  proměnné  $x$  určených v každé vrstvě předpisem  $\chi_i(x)$  a  $\psi_i(x)$  jako (3.23).

$$[\chi, \psi] = \sum_{vrstva=0}^N \int_{d_{vrstva}-w_{vrstva}}^{d_{vrstva}} \chi_{vrstva}^*(x) \psi_{vrstva}(x) dx \quad (3.23)$$

Skalární součin nám umožní normovat nalezené vlastní mody. Konkrétně tak učiníme pro  $k$ -tý mod určený podélnou konstantou šíření  $\beta_k$  a profilem elektrického pole  $m^{\beta_k}(x)$ , a sice pomocí normy (3.24) určené skalárním součinem (normované profily modů označíme velkými písmeny):

$$M^{\beta_k}(x) = \frac{m^{\beta_k}(x)}{\sqrt{[m^{\beta_k}, m^{\beta_k}]}} \quad (3.24)$$

Výhodným důsledkem tvaru řešení (3.7) je vzájemná ortogonalita (určená skalárním součinem) jednotlivých řešení – šíří-li se tedy energie jedním modem, trvale v něm zůstává a další mody zůstávají neovlivněny.

Rozkládané (zdrojové) elektrické pole ve struktuře nechť se nachází v místě  $z = 0$  a nechť má profil  $s(x, z = 0)$ . Pomocí skalárního součinu spočteme projekci zdrojového pole na jednotlivé nalezené vlastní mody<sup>1</sup>, čímž získáme rozklad (3.25) pole  $s(x, z = 0)$  do vlastních modů šířících se strukturou, kde se sčítá přes všechny vlastní mody.

$$s(x, z = 0) = \sum_k [M^{\beta_k}, s(z = 0)] M^{\beta_k}(x) = \sum_k \frac{[m^{\beta_k}, s(z = 0)]}{[m^{\beta_k}, m^{\beta_k}]} m^{\beta_k}(x) \quad (3.25)$$

Díky již zmíněné jednoduché exponenciální závislosti pole modu ve struktuře na souřadnici  $z$  můžeme vyjádřit šíření původního pole  $s(x, z = 0)$  podél struktury vztahem (3.26).

$$s(x, z) = \sum_k \frac{[m^{\beta_k}, s(z = 0)]}{[m^{\beta_k}, m^{\beta_k}]} m^{\beta_k}(x) e^{i\beta_k z} \quad (3.26)$$

<sup>1</sup>Matematicky se jedná o rozklad vektoru do prostoru určeného bázovými vektory, v našem případě to jsou vlastní mody struktury.

### 3.8 Profil pole a difrakce ze struktury

Pomocí rozkladu (3.26) získáme elektrické pole po šíření strukturou délky  $z$ . Chceme-li např. vynést závislost intenzity elektrického pole na souřadnicích, vyneseme závislost (3.27).

$$I(x, z) \approx s^*(x, z)s(x, z) \quad (3.27)$$

Další zajímavou závislostí je Fraunhoferova difrakce ze struktury (4.12) na její hraně. Spočteme ji jednoduše (3.29) výpočtem překryvu vlastních modů s rovinnou vlnou (3.28) šířící se pod požadovaným difrakčním úhlem  $\theta$ ,

$$r(\theta, x) = \frac{e^{ikx\sin\theta}}{\sqrt{d_N - (d_0 - w_0)}} \quad (3.28)$$

$$s(\theta, z) = [r(\theta), s(z)] \quad (3.29)$$

kde  $k$  je vlnový vektor záření v prostředí, do kterého probíhá difrakce (např. vzduch). Intenzitu šířící se do daného směru určíme obdobně jako v případě pole pomocí (3.30).

$$I(\theta, z) \approx s^*(\theta, z)s(\theta, z) \quad (3.30)$$

### 3.9 Započtení absorpce a optického zisku

Započtení optického zisku či ztrát provedeme zavedením komplexní hodnoty indexu lomu v jednotlivých vrstvách. Odvození provedeme pouze stručné, podrobněji viz [7], str. 128. Pro obecnou absorbující strukturu nelze předkládaný rozklad do modů použít, a proto by bylo nutno užít složitější matematický přístup pomocí Greenových funkcí (viz [9], [8]). Avšak vzhledem k tomu, že lze zavést komplexní index lomu, a s přihlédnutím k tvrzení v [8], že pro malé hodnoty absorpce je možno rozklad do modů použít, rozklad do modů pro započtení absorpce a zisku použijeme.

Předpokládejme rovinnou vlnu šířící se právě ve směru  $z$ , a zavedme komplexní index lomu  $n_C = n_R + in_I$ . Elektrické pole vlny má potom velikost (3.31), což je opět rovinná vlna, ale s proměnnou amplitudou. Intenzita světla potom bude (3.32), z čehož můžeme určit *absorpční koeficient*  $\kappa$  resp. ziskový koeficient  $g = -\kappa$  jako míru útlumu resp. zesilování světla.

$$E(z, t) = E_0 e^{ikz - i\omega t} = E_0 e^{i\frac{2\pi}{\lambda_0} n_C z - i\omega t} = E_0 e^{i\frac{2\pi}{\lambda_0} n_R z - i\omega t} e^{-\frac{2\pi}{\lambda_0} n_I z} \quad (3.31)$$

$$I(z, t) \approx |E(z, t)|^2 = E_0^2 e^{-\frac{4\pi}{\lambda_0} n_I z} = I_0 e^{-\kappa z} \quad \Rightarrow \quad \kappa = \frac{4\pi}{\lambda_0} n_I \quad (3.32)$$

Výhodou je, že model můžeme otestovat pomocí neabsorbující struktury (položíme  $n_I = 0$ ), kde máme k dispozici experimentální výsledky. Máme tedy jistou záruku, že simulace budou pro absorbující případně ziskové struktury smysluplné.

## 3.10 Vzorce použité v programu

### 3.10.1 Určení modu pro zadaný úhel šíření

Jednotlivé mody záření o vlnové délce ve vakuu  $\lambda_0$  charakterizujeme pomocí komplexního úhlu šíření  $\varphi_{\max}$  ve vrstvě s nejvyšším indexem lomu  $n_{\max}$ , respektive pomocí podélné konstanty šíření  $\beta_k$  (3.33).

$$\beta_k = \frac{2\pi}{\lambda_0} n_{\max} \sin(\varphi_{\max}) \quad (3.33)$$

Je třeba určit integrační konstanty v rovnici (3.10), uijeme proto okrajových podmínek (3.19) a (3.20). Dostáváme (3.34), které mají praktickou výhodu ve fixaci velikosti profilu pole na jedničku na hranici o souřadnici  $x = d_0$ . Při volbě  $A_0 = 1$  totiž pro velké šířky okrajových vrstev velice (exponenciálně s šířkou vrstvy) roste velikost funkcí  $m(x)$ , což teorii nevadí, v praxi jsou ale potíže s datovými typy v počítači.

$$A_1 = 1, B_1 = -A_1 e^{-2\alpha_1 w_1}, A_0 = A_1 e^{-\alpha_1 w_1}, B_0 = -A_0 \quad (3.34)$$

Další konstanty ( $A_2 \dots A_N, B_2 \dots B_N$ ) získáme postupnou aplikací přenosové matice pomocí vztahu (3.16).

### 3.10.2 Hledání modů

Vlastní mody vlnovodu hledáme tak, že se snažíme najít úhel  $\varphi_{\max}$  takový, aby platila okrajová podmínka (3.35),

$$A_N = -B_N \quad (3.35)$$

tj. aby byl nulový rozdíl  $A_N - B_N$ .

Přesného vynulování však na počítači nelze dosáhnout, zejména kvůli zaokrouhlovacím chybám při práci s reálnými čísly. Dosažení nulovosti je proto spojeno s tím, že je třeba určit číslo, které je tak malé, že ho již považujeme za nulu.

Pokud však určená nula není „dostatečně malá“, tj. rozdíl nemá dostatečně malou hodnotu, dochází k deformaci profilu pole – viz obr. 3.2 (je v logaritmickém měřítku!). Je na něm znázorněn profil třetího vedeného modu, jelikož

se tyto obtíže projevují u vedených modů. Příliš velká chyba v určení úhlu šíření způsobila, že klesající exponenciála v (3.10) je přebita rostoucí exponenciálou a dochází tak k umělé divergenci pole.

Možným řešením je větší přesnost (více platných cifer) při hledání modů, což však zvyšuje výpočetní náročnost a jak se ukázalo, ani to nemusí být dostatečné pro široké struktury.

Druhou možností je po vyhledání modů se standardní přesností uměle vynulovat koeficient  $A_N$  modu (pokud v simulaci užíváme poslední vrstvu s nulovou šířkou pro zjednodušení okrajových podmínek, nulujeme koeficienty  $A_{N-1}$ ,  $A_N$  a  $B_N$ ) a tím odstranit možnou divergující složku profilu.

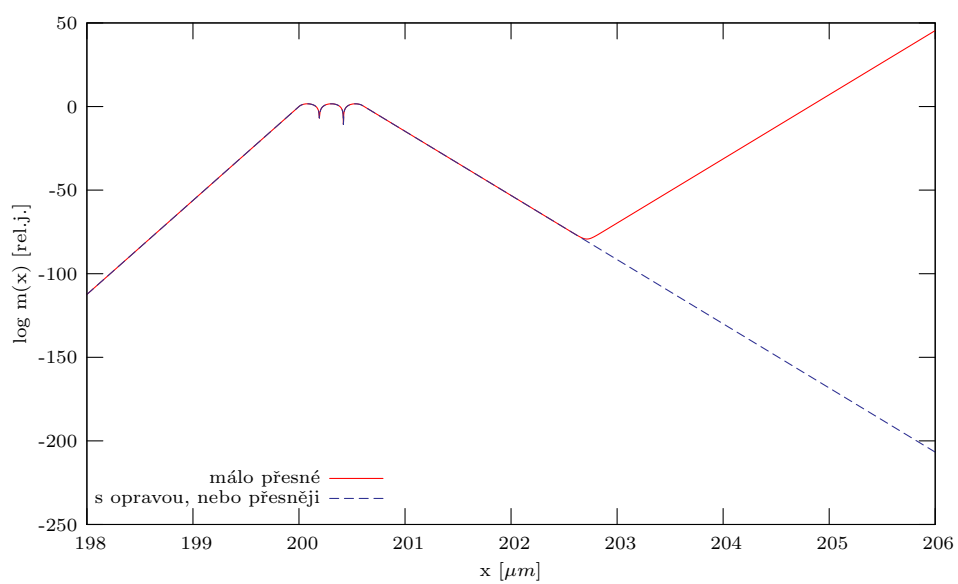
Pro simulace bylo využito metody vynulování s tím, že se nulování provádí pouze u vedených modů. U ostatních modů potíže pozorovány nebyly. Nulováním se pro používané struktury nedopouštíme chyby, jelikož vedené mody nejsou zrcadly na hranicích na tak dlouhou vzdálenost ovlivněny

Za účelem hledání modů neabsorbující resp. absorbující struktury byla implementovány numerické metody pro hledání minima funkce jedné reálné resp. komplexní proměnné. Problém hledání hodnot, pro které je splněna implicitní rovnice (3.36), jsme převedli na hledání minima absolutní hodnoty  $f(\beta)$ , což je z praktického hlediska lépe proveditelné.

$$f(\beta) = T_{11} - T_{12} + T_{21} - T_{22} = 0 \quad (3.36)$$

### 3.10.3 Rozklad pole do modů

Pro aplikaci vztahu (3.29) je třeba spočítat projekci modů na rovinnou vlnu (3.28) a také normu modu. Vzorce pro normu modu a překryv s rovinnou vlnou uvádět nebudeme. Jednak se jedná o analytické integrály, které není obtížné vypočítat, jednak by bylo obtížné je v případě potřeby bez chyby přepsat do počítače. Pro jejich výpočet a následný převod do programu jsme proto užili programu Mathematica.



Obrázek 3.2: Vliv přesnosti hledání modů na tvar profilu pole modu ve struktuře (logaritmické měřítko). Zde pro příklad znázorněn třetí vedený mod.

# Kapitola 4

## Výsledky simulací

Prezentovaný vlnový model nám tedy poskytuje možnost zkoumat šíření elektromagnetického pole ve zvolené struktuře a Fraunhoferovu difrakci záření na její hraně.

### 4.1 Vliv šířky substrátu a pláště na výsledky

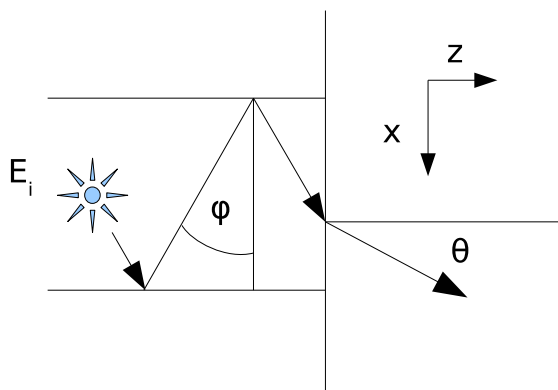
Zajímá-li nás šíření elektromagnetického pole strukturou, můžeme její parametry volit téměř libovolně. Limitem nám bude především výpočetní síla počítače, velikost operační paměti, případně prostor pro data. Získané výsledky budou přesné pro zadanou strukturu, tj. strukturu se zadaným skokovým profilem indexu lomu a ideálně odražejícími zrcadly na okraji. Praktická realizace takovýchto vzorků je fakticky problematická obzvláště pro malé tloušťky vrstev, pro reálné užití je tedy třeba brát v potaz, jak dalece se zadaná struktura liší od té, kterou máme k dispozici pro měření.

Při výpočtu difrakce z hrany vzorku však musíme uvažovat ještě jeden faktor navíc, a sice *úhlové rozlišení* určené velikostí difrakční štěrbin, v našem případě šířkou struktury. Bude-li totiž struktura relativně úzká, difraktované záření bude mít spíše podobu kulových vln, které však na rozdíl od vln rovinných nemají definován směr šíření a tudíž nemá smysl hovořit o preferenčním úhlu, kam se světlo šíří. Je tedy třeba určit, jak široká má být struktura, abychom získali určité úhlové rozlišení, dobře definovaný směr šíření.

V literatuře ([7], str. 452) nalezneme, že při kolmém dopadu rovinné vlny na dlouhou štěrbinu šířky  $W$  platí pro intenzitu Fraunhoferovy difrakce do směru  $\theta$  (viz obr. 4.1) vztah (4.1),

$$I(\theta) \approx \frac{\sin^2 \gamma}{\gamma^2} \quad (4.1)$$





Obrázek 4.1: Schema planární struktury a znázornění difrakčního úhlu.

kde  $\gamma = \frac{kW}{2}\sin(\theta)$  a  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  je velikost vlnového vektoru dopadající rovinné vlny. Požadujeme tedy, aby obálková funkce určená jmenovatelem klesala tak rychle, aby pro úhel difrakce změněný o  $\Delta\theta$  byla již řádově menší než v maximu. Výsledná podmínka má tedy tvar (4.2).

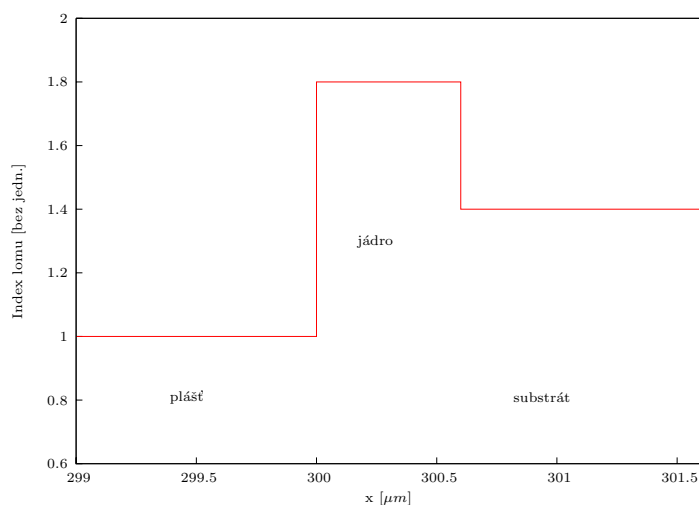
$$\gamma^2 \gg 1 \quad W \gg \frac{\lambda}{\pi\Delta\theta} \quad (4.2)$$

## 4.2 Neabsorbující struktury

Nejdříve provedeme výpočty pro neabsorbující struktury. Profil struktury volíme, inspirováni dostupnými vzorky, jako na obr. 4.2. Index lomu jádra je 1,8, šířka jádra 600 nanometrů, index lomu substrátu 1,4 a index lomu pláště je 1,0. Šířku pláště a substrátu volíme dle kriteria (4.2) 300 mikrometrů, v rozsahu pro nás zajímavého spektra  $\lambda = 300 - 1000\text{nm}$  je dostačující. Není-li uvedeno jinak, vycházejí simulace z popsaného profilu struktury.

### 4.2.1 Demonstrace vlivu šířky struktury

Volba šířky pláště a substrátu určuje, jak mnoho vlastních modů struktura má. Čím větší šířka, tím více modů a tím přesnější rozklad pole nanokrystalu. Tento fenomén demonstrují obr. 4.3, 4.4, 4.5 a 4.6. Na všech z nich je vykreslena intenzita světla v závislosti na poloze ve struktuře. Pro grafy 4.3 a 4.5 byla užita struktura s pláštěm a substrátem šířky 30 mikrometrů, pro grafy 4.4 a 4.6 je tato šířka 300 mikrometrů. Kvůli zvýraznění detailů jsou grafy vyhotoveny i v logaritmickém měřítku. Z porovnání obrázků je naprosto zřejmé,



Obrázek 4.2: Profil indexu lomu v jednotlivých vrstvách použitý k simulaci neabsorbujících struktur.

že větší šířka poskytuje lepší výsledky. Ačkoliv v normálním měřítku nejsou odlišnosti příliš patrné, logaritmické měřítko odhalí, že pro menší šířku struktury z výpočtu vycházejí oscilace intenzity, které však v praxi nepozorujeme. Důvodem oscilací je jednak malý počet módů, se kterými se výpočet provádí, jednak ale i nezanedbatelný vliv zrcadel na hranici.

Pro další výpočty tedy z uvedených důvodů volíme šířku pláště i substrátu 300 mikrometrů. Splňuje podmínku (4.2) a během výpočtů s modelem jsme nenarazili na nedostatečnost takovéto šířky. Nevýhoda větších šířek je především zpomalení výpočtu vlivem většího počtu módů, kvalitativní změny ve výsledcích simulace však nebyly pozorovány.

#### 4.2.2 Šíření světla v jádře vlnovodu

Ukažme šíření světla v jádře vlnovodu prostřednictvím vedených módů. Počet vedených módů je určen poměrem vlnové délky světla a šířky jádra. Čím více vlnových délek se vejde do šířky jádra, tím více je vedených módů.,

Obr. 4.7 resp. obr. 4.8 ukazují profil intenzity elektrického pole pro vlnovou délku 300nm resp. 825nm, jádro vykazuje 5 resp. 2 vedené mody. Ve dvoumódovém případě se energie šíří v jádře téměř přímočaře, pozvolna se přelévá mezi rozhraními. Oproti tomu ve vícemódovém případě dochází k interferenci vedených módů a intenzita světla šířícího se v jádře osciluje. Pozorujeme i určitou formu záznějí, kdy se po určité délce šíření v jádře světlo silně

zaostří vytvářejíce tak obraz modelového nanokrystalu, který světlo vyzářil.

### 4.2.3 Vyvazování světla z jádra do substrátu a pláště

Hlavním cílem práce je zkoumání substrátových modů. Jejich prostřednictvím uniká energie z jádra vlnovodu do substrátu, což je patrné převážně na počátku šíření strukturou. Demonstrují to grafy na obr. 4.7 a 4.8, kde se kvůli malé šířce jádra slévá pole šířící se do různých směrů do jednoho oblaku – směry nelze rozlišit.

Pro zamezení slití jednotlivých směrů šíření do jednoho oblaku jsme simulovali další strukturu – zvětšili jsme  $10\times$  jádro, tedy na 6 mikrometrů. Důsledkem je prostorová separace světla po vyzáření do substrátu, jelikož rozdíly v délce dráhy uražené v jádře jsou k tomu dostatečné. Výsledky vidíme na obr. 4.9 a 4.10, které se liší pouze použitou vlnovou délkou světla, a sice 472nm a 650nm. Pozoruhodné je i to, že s měnící se vlnovou délkou se mění i směr, do kterého se šíří energie. S klesající vlnovou délkou světla přibývá směrů, do kterých se šíří světlo.

### 4.2.4 Šíření světla substrátem

Studovat světlo v substrátu můžeme pomocí grafů závislosti intenzity světla na prostorových souřadnicích, cenné informace však získáme i ze závislosti intenzity světla na směru šíření po difrakci na hraně vzorku, která je vzdálena  $z$  od zářícího nanokrystalu (vypočteme pomocí (3.30)).

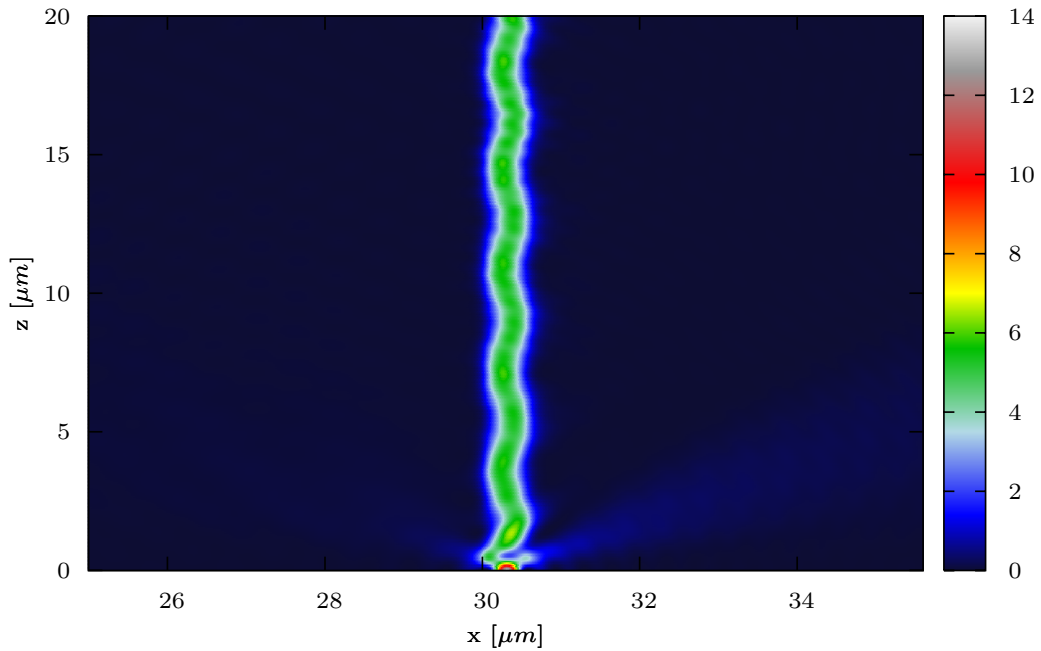
Z experimentálního hlediska je znalost rozložení pole na hraně málo užitečná (obtížné měření), naopak informace o směru šíření signálu je důležitá, jelikož detektor záření je od vzorku daleko a snímá signál z určitého prostorového úhlu.

V difrakčních závislostech vyobrazujeme pouze substrátové mody. Předpokládáme totiž, že světlo ve vedených modech bude utlumené, což zohledňujeme tím, že vedené mody vynecháváme. Porovnáním grafů na obr. 4.16 a 4.18 příp. 4.20 zjistíme, že jestliže se vedené mody šíří se ztrátami, mají substrátové mody větší intenzitu.

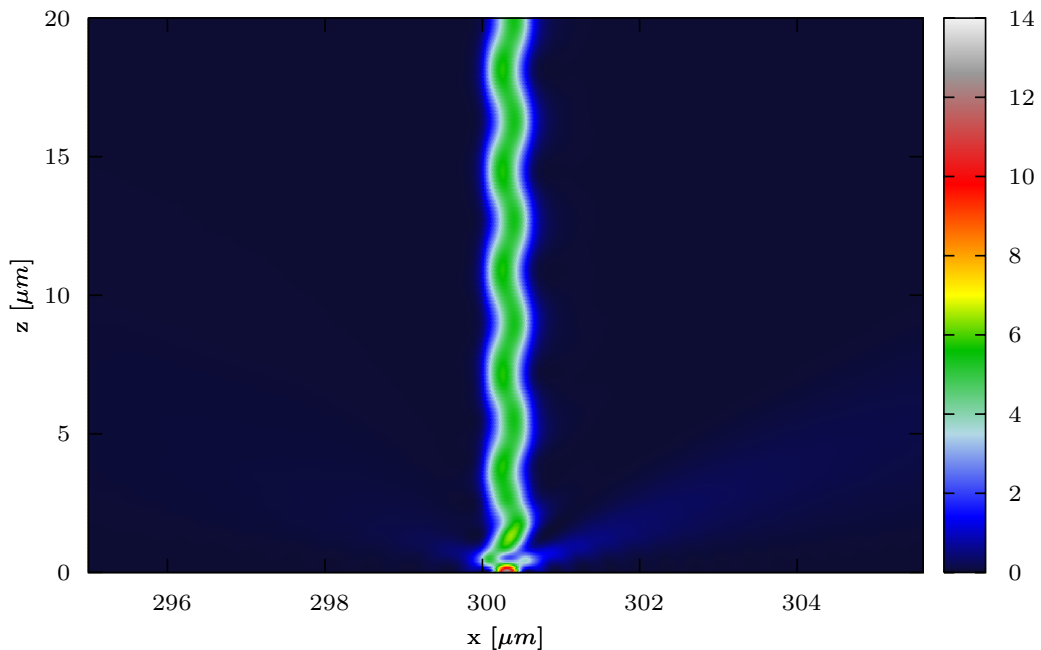
První variantou simulace je vyobrazit difrakci na hraně pro fixní vlnovou délku, což umožňuje sledovat, které jsou nejvýraznější úhly šíření záření a kdy dochází k jeho odrazu na hraničních zrcadlech. Pro simulaci volíme strukturu s jádrem 6 mikrometrů, jelikož je tam k dispozici více difrakčních směrů. Vidíme je na výsledném obr. 4.12, kde je vidět také odraz záření na zrcadle na hranici (a sice ve formě mizení intenzity v kladném úhlu a jejím objevování v záporném). Obr. 4.11 znázorňuje intenzitu světla pro tuto strukturu v závislosti na souřadnicích  $x$  a  $z$ . Kromě dalších modů je patrné pole šířící se

právě pod malým úhlem. Pro přehlednost uvádíme na obr. 4.13 řezy grafem difrakce, jak podélné, tak příčné, na kterých je vidět jak pomalé zesilování intenzity ve směru téměř rovnoběžném s vlnovodem, tak formování spektra v průběhu šíření strukturou.

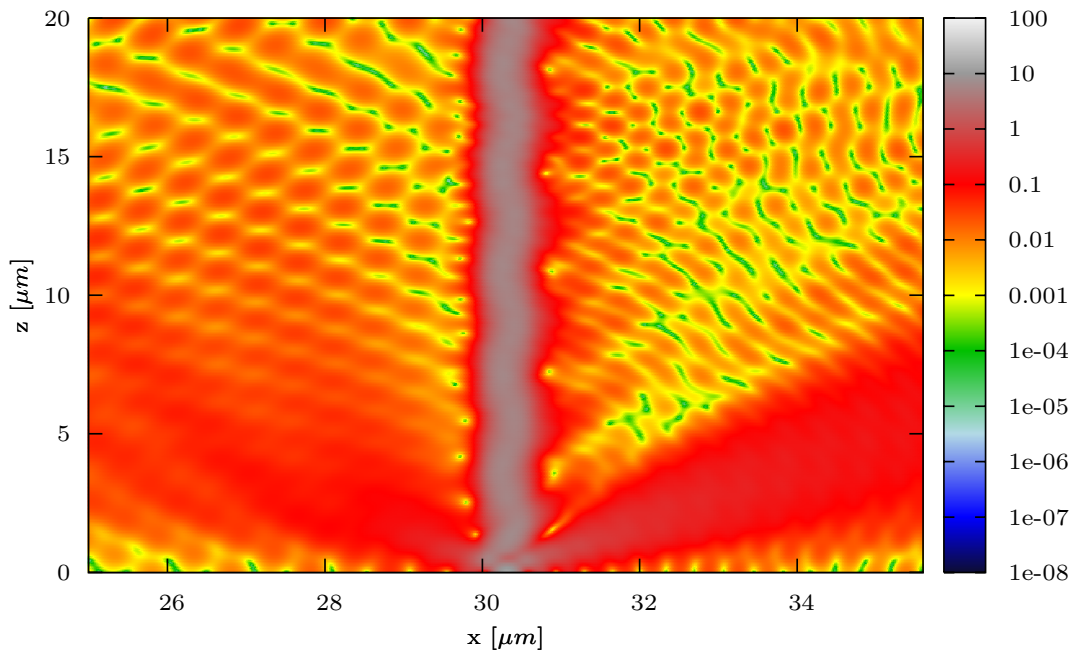
Druhou variantou je zobrazit difrakci na hraně pro fixní úhel difrakce a proměnnou vlnovou délku. Takováto závislost poskytuje informaci o vývoji spektra při šíření strukturou, resp. jaké spektrum je emitováno nanokrystalem v určité vzdálenosti od hrany vzorku do daného směru. Pro simulaci tentokrát využijeme strukturu s jádrem 0,6 mikrometru, jelikož v širším jádru se vyskytuje pouze více spektrálních čar, kvalitativní změnu však nepřináší. Výsledkem je graf na obr. 4.14, kde je dobře vidět zužování spektra během šíření strukturou. Pro jednodušší demonstraci přikládáme i řezy 4.15.



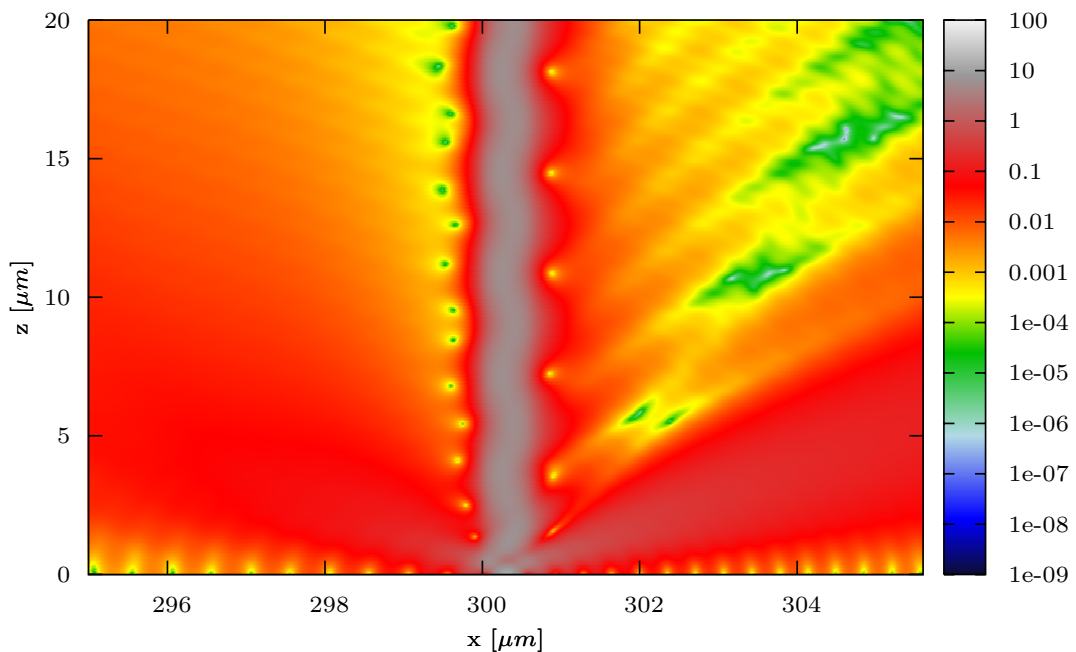
Obrázek 4.3: Profil intenzity elektrického pole v neabsorbující struktuře s profilem indexu lomu na obr. 4.2, ale šířkou substrátu i pláště 30 mikrometrů. Parametry simulace: vlnová délka 1000nm, započteny radiační(85), substrátové(60) i vedené mody(2) – v závorce uveden počet modů.



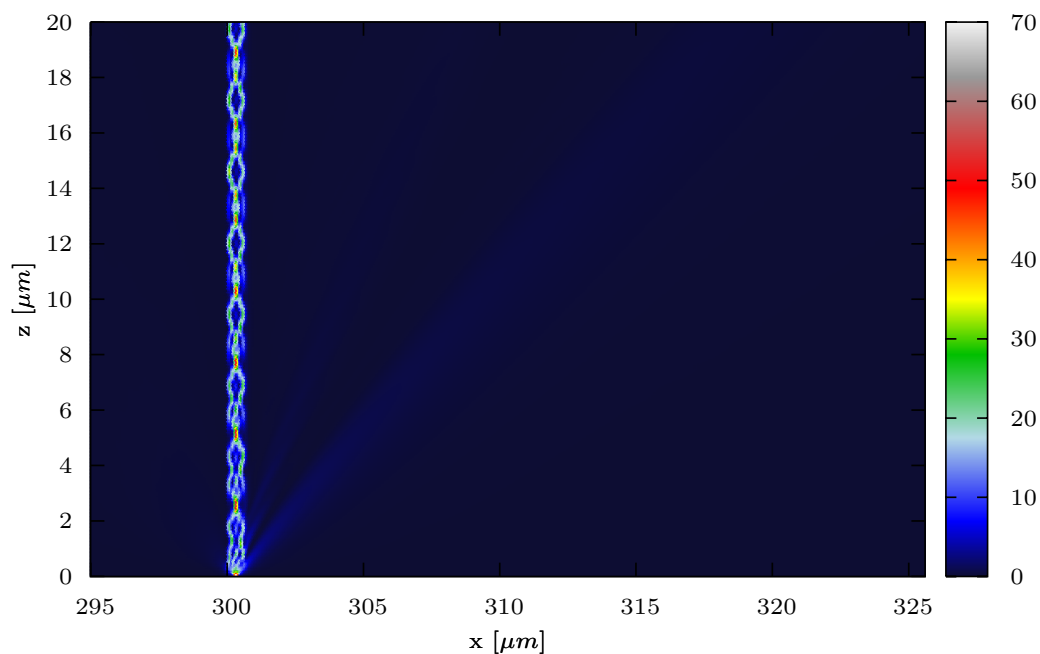
Obrázek 4.4: Profil intenzity elektrického pole v neabsorbující struktuře s profilem indexu lomu na obr. 4.2, šířka substrátu i pláště 300 mikrometrů. Parametry simulace: vlnová délka 1000nm, započteny radiační(853), substrátové(588) i vedené mody(2) – v závorce uveden počet modů.



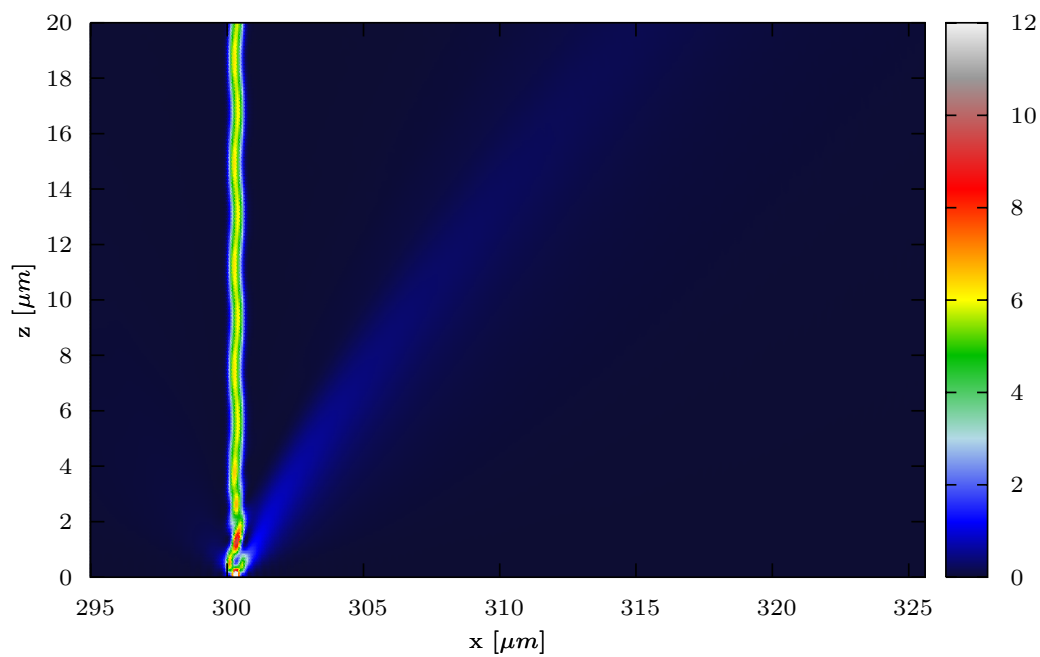
Obrázek 4.5: Profil intenzity elektrického pole v neabsorbující struktuře s profilem indexu lomu na obr. 4.2, ale šířkou substrátu i pláště 30 mikrometrů. Parametry simulace: vlnová délka 1000nm, započteny radiační(85), substrátové(60) i vedené mody(2) – v závorce je uveden počet modů. Logaritmické měřítko.



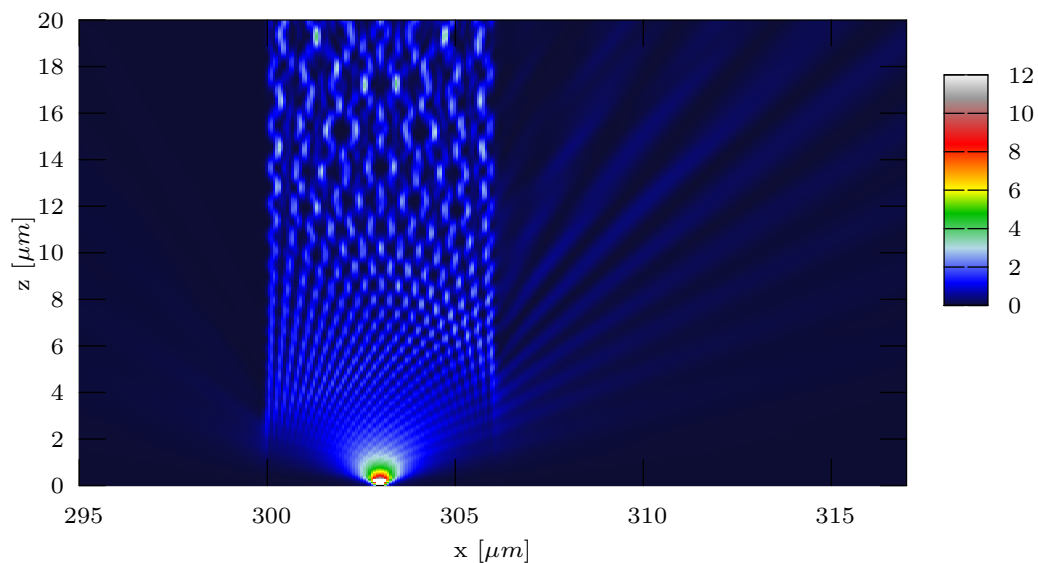
Obrázek 4.6: Profil intenzity elektrického pole v neabsorbující struktuře s profilem indexu lomu na obr. 4.2, šířka substrátu i pláště 300 mikrometrů. Parametry simulace: vlnová délka 1000nm, započteny radiační(853), substrátové(588) i vedené mody(2) – v závorce uveden počet modů. Logaritmické měřítko.



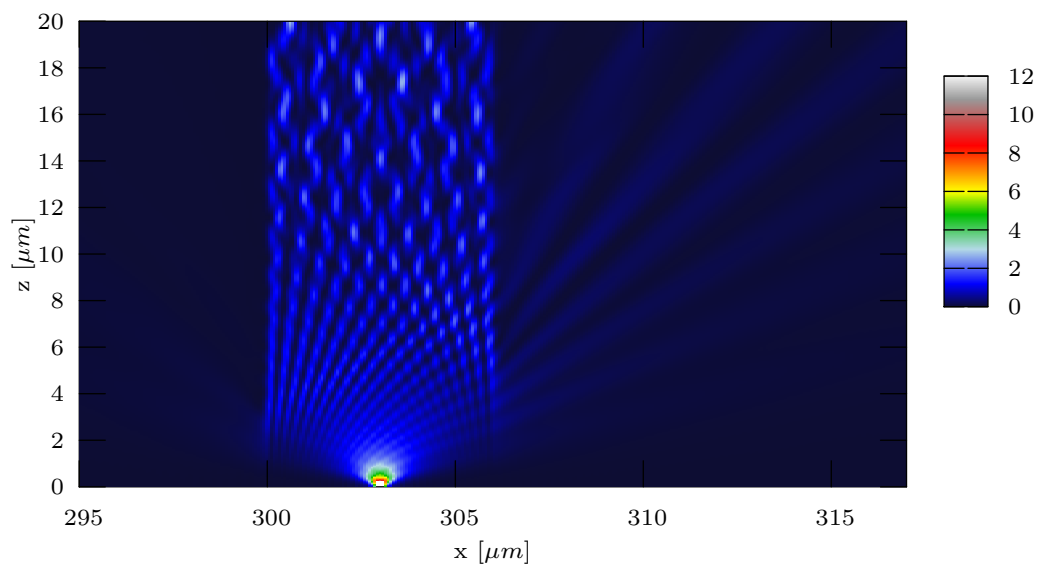
Obrázek 4.7: Profil intenzity světla pro vlnovou délku 300nm a šířku jádra 0.6 mikrometru. Zajímavé je především šíření světla v jádře, které má pro použitou vlnovou délku 5 vedených módů. Započteny jsou všechny módy.



Obrázek 4.8: Profil intenzity světla pro vlnovou délku 825nm a šířku jádra 0.6 mikrometru. Zajímavé je především šíření světla v jádře, které má pro použitou vlnovou délku pouze 2 vedené módy. Započteny jsou všechny módy.

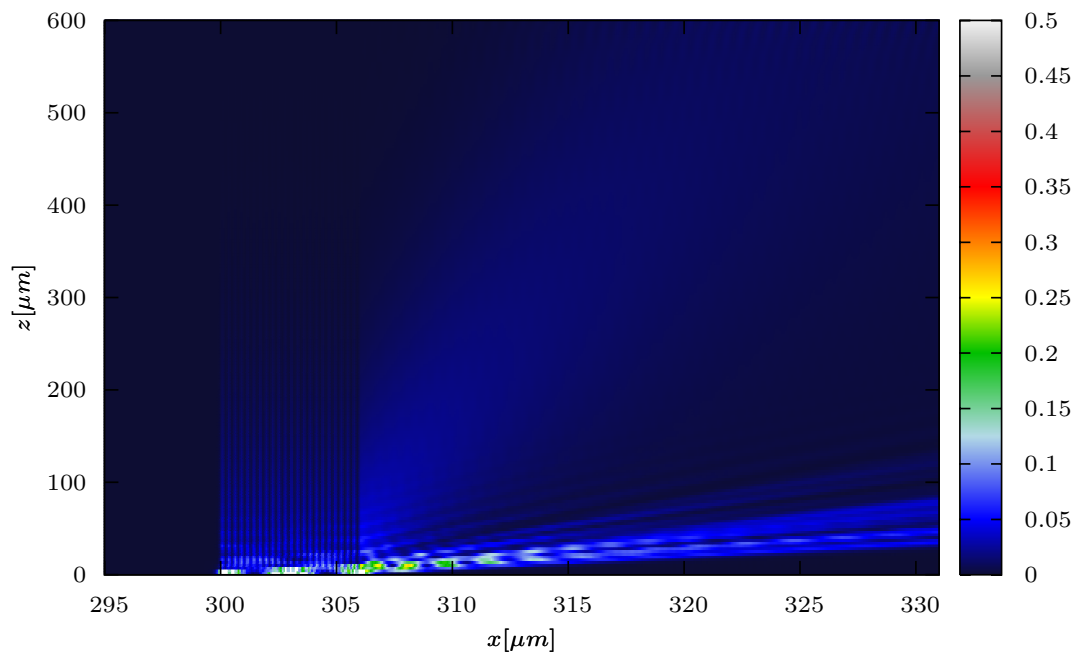


Obrázek 4.9: Demonstrace vyvazování světla do substrátových modů. Použitá vlnová délka je 472nm. Oproti následujícímu grafu je vidět změna počtu směrů šíření světla v substrátu. Vykresleny jsou všechny mody.

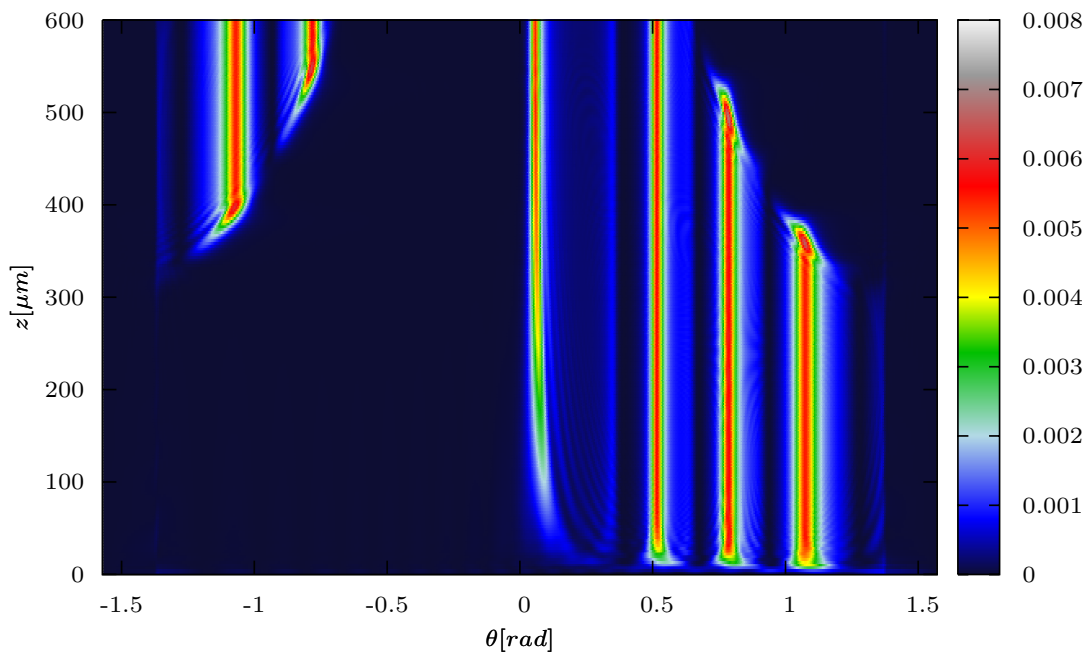


Obrázek 4.10: Demonstrace vyvazování světla do substrátových modů. Použitá vlnová délka je 650nm. Oproti předchozímu grafu je vidět změna směru šíření světla substrátem. Vykresleny jsou všechny mody.

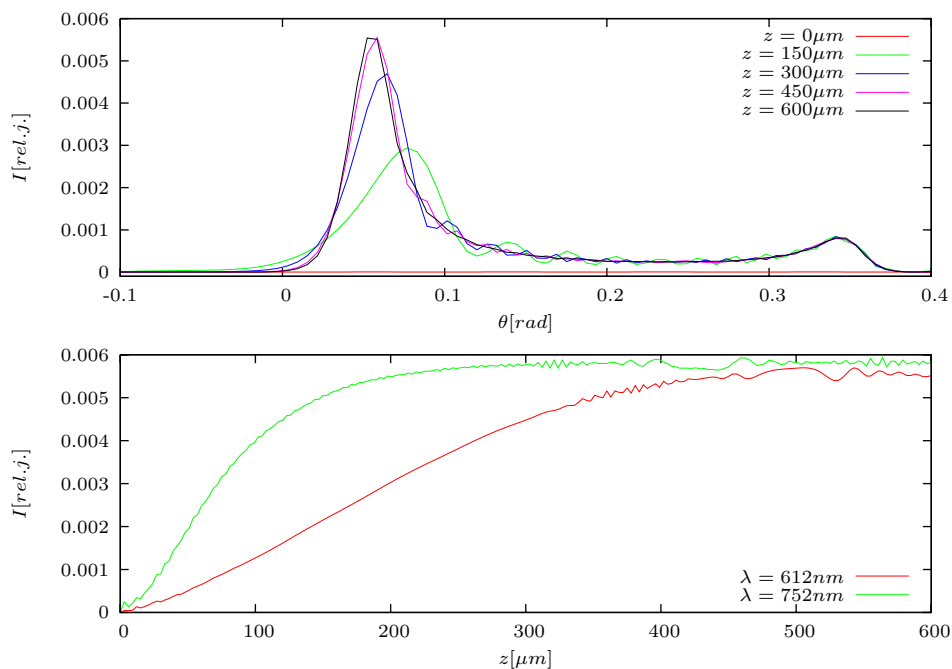




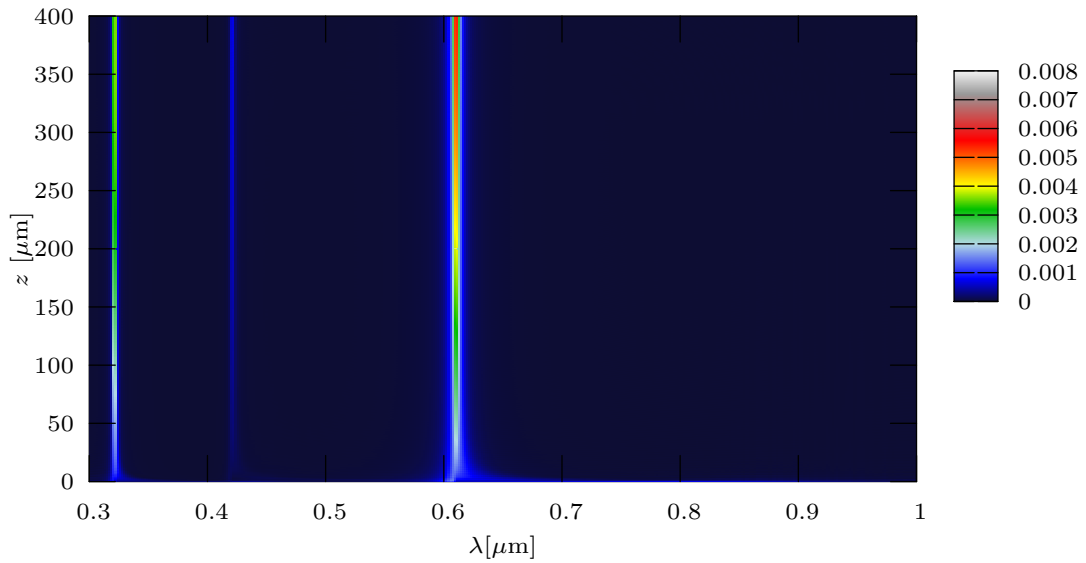
Obrázek 4.11: Profil intenzity světla pro strukturu s profilem indexu lomu na obr. 4.2, šířka jádra 6 mikrometrů, substrátu i pláště 300 mikrometrů. Dobře patrné jsou jak paprsky, které se vyvazují pod velkým úhlem, tak také paprsek, které se z jádra vyvazuje velice pomalu. Vykresleny jsou pouze substrátové mody. Vlnová délka  $\lambda = 612\text{nm}$ .



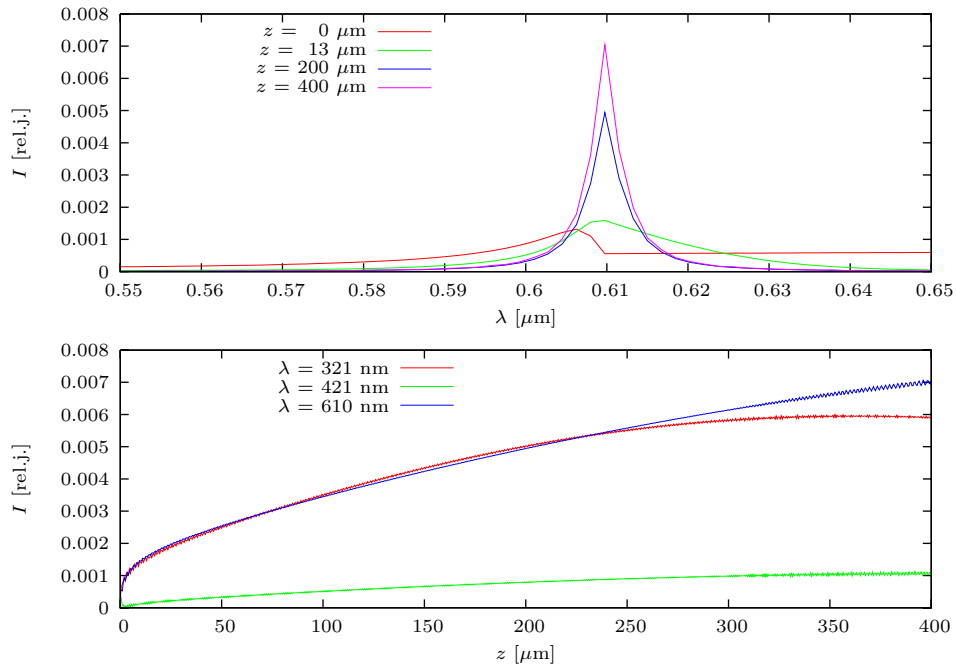
Obrázek 4.12: Profil intenzity difrakce z hrany vzorku do různých směrů pro strukturu s profilem indexu lomu na obr. 4.2, šířka jádra 6 mikrometrů, substrátu i pláště 300 mikrometrů. Vlnová délka  $\lambda = 612\text{nm}$ .



Obrázek 4.13: Řezy obrázkem 4.12 zachycující světlo ( $\lambda = 612\text{nm}$ ) šířící se pod úhlem 0,05 rad do substrátu. Pro srovnání je na spodním obrázku ještě řez pro vlnovou délku  $\lambda = 752\text{nm}$  a úhel šíření 0,14 rad do substrátu.



Obrázek 4.14: Intenzita spektrálních složek světla šířících se pod úhlem 0,034 rad do substrátu. Šířka jádra je 0,6 mikrometru, šířka substrátu i pláště 300 mikrometrů.



Obrázek 4.15: Podélné a příčné řezy obrázkem 4.14 zachycující jak formování spektrální čáry, tak průběh nárůstu intenzity nejsilnějších vlnových délek.

### 4.3 Absorbující a zisková struktura

Využijeme také možnosti simulovat strukturu vykazující optický zisk, a to zejména ke studiu použitelnosti metody VSL ([1], [2]) pro měření optického zisku ve struktuře, kde se světlo nešíří ve formě vedených modů, ale prostřednictvím substrátových modů. Simulace provádíme za přítomnosti zisku, ztrát a pro srovnání i s minimálními ztrátami.

#### 4.3.1 Parametry struktury

Strukturu použijeme podobnou jako v neabsorbujícím případě, kromě toho však přidáme fakticky imaginární část k indexu lomu, fenomenologicky tedy optické ztráty či zisk (viz str. 20). Jádru nechť vykazuje zisk či ztráty, substrát a plášť pak nechť mají řádově menší ztráty. Důvodem jsou jednak reálné vzorky, kde je jádro silněji absorbující, než ostatní prostředí, jednak se zajímáme o vliv zisku jádra na substrátové módy a absorpce v substrátu je z tohoto hlediska nezajímavá

Ideálně bychom chtěli mít ziskové jádro a bezztrátový substrát a plášť. Jsme však nuceni zadat alespoň malé ztráty, jelikož je-li imaginární část indexu lomu nulová, dochází v simulaci k naprosto odlišnému chování, než za přítomnosti libovolně malých, ale nenulových ztrát.

Profil komplexního indexu lomu  $n_C$  pro strukturu se ziskem je uveden v tabulce 4.1. Pro všechny simulace s absorpcí či ziskem použijeme vlnovou délku  $\lambda_0 = 615\text{nm}$  ve vakuu. Pro srovnání budeme simulace provádět s různými velikostmi absorpce resp. zisku, které jsou taktéž uvedeny v tabulce.

$i$	$\text{Re}(n_C)$	$\text{Im}(n_C)$	$\kappa[\text{cm}^{-1}]$
plášť	1.00	$2 \times 10^{-15}$	$2.04 \times 10^{-10}$
jádro	1.80	$5 \times 10^{-4}$	102.17
	1.80	$1 \times 10^{-4}$	20.43
	1.80	$5 \times 10^{-5}$	10.22
	1.80	$1 \times 10^{-5}$	2.04
substrát	1.40	$2 \times 10^{-15}$	$2.04 \times 10^{-10}$

Tabulka 4.1: Použitý profil indexu lomu pro strukturu s komplexním indexem lomu. Pro jádro jsou uvedeny různé možnosti absorpčního koeficientu, ziskové koeficienty získáme změnou znaménka u  $\text{Im}(n_C)$  a  $\kappa$ . Vlnová délka použitého světla je  $\lambda_0 = 615\text{nm}$  ve vakuu.

Argumenty pro volbu šířky struktury jsou stejné, jako u neabsorbující struktury, použijeme opět šířku 300 mikrometrů pro substrát i plášť.

### 4.3.2 Samotný nanokrystal

Nejdříve zkoumejme šíření světla ve struktuře v případě excitace jednoho nanokrystalu. Zaměříme se jak na vedené, tak na substrátové mody.

Intenzita světla pro vedené mody je znázorněna na obr. 4.16 – konkrétně je vynesena intenzita pro šíření světla přímo ve směru  $z$ . Je patrné že dochází k exponenciálnímu růstu, případně útlumu.

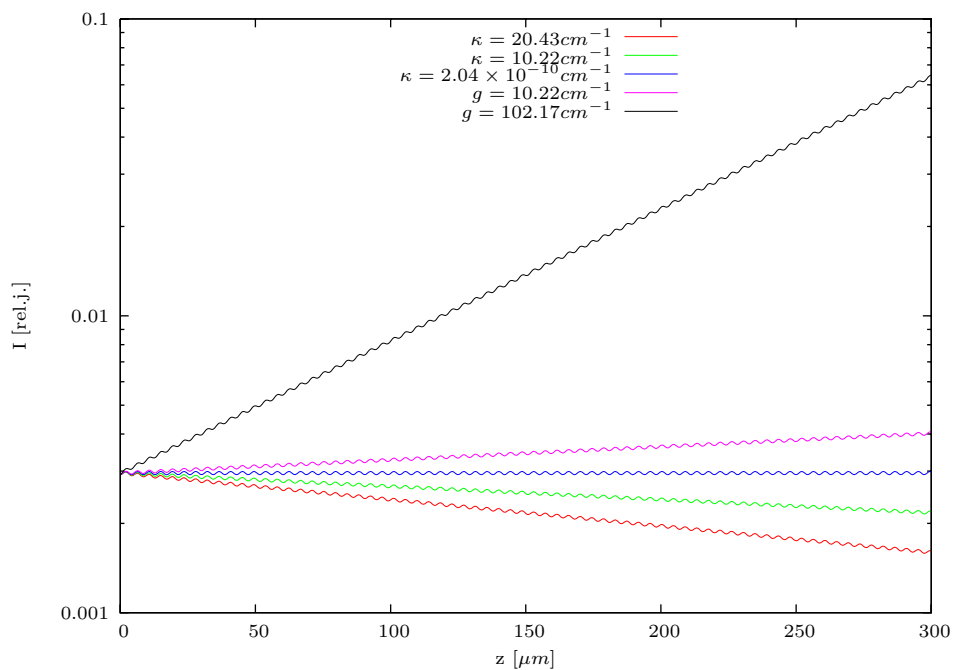
Úplně odlišné chování vykazují substrátové mody, které jsou sice zesilovány během šíření v jádře, ale to není dostatečné na výraznou změnu profilu intenzity světla ve struktuře, pozorujeme proto intenzitní profil na obr. 4.18 příp. 4.20.

### 4.3.3 Simulace VSL experimentu

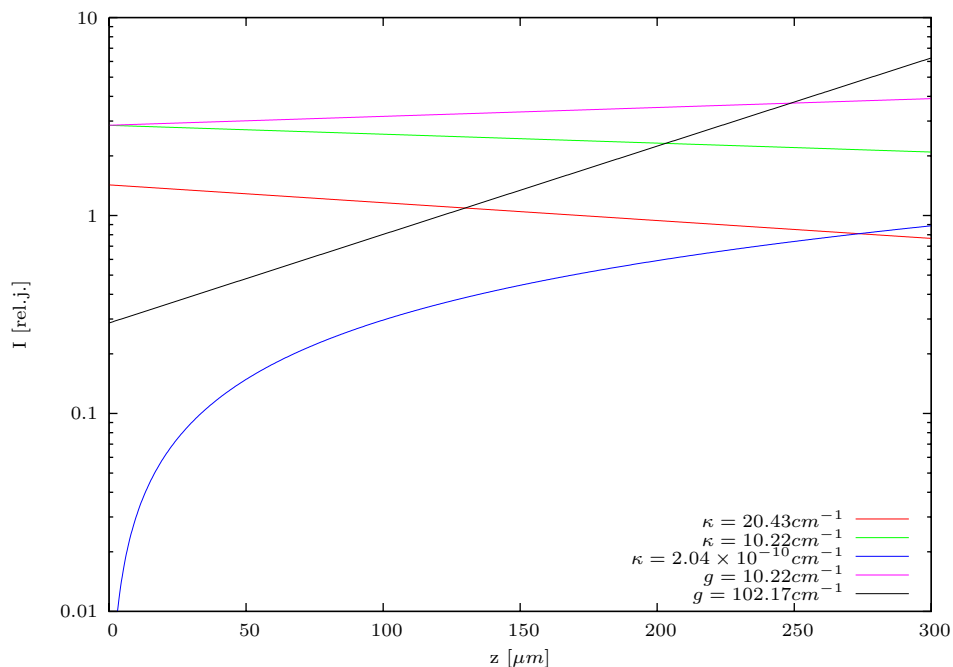
Simulaci provedeme tak, že nejdříve spočteme difrakci stejně jako v grafu na obr. 4.12 pro jeden nanokrystal a poté provedeme kumulativní součet intenzity. Kdyby byl excitován pouze nanokrystal na kraji vzorku ( $z = 0$ ), tak je difrakce shodná s difrakcí pro jeden nanokrystal. Budeme-li excitovat současně i nanokrystal v určité vzdálenosti  $z = z_1$  od hrany, bude výsledná intenzita difrakce součtem difrakce jednoho krystalu v odpovídajících vzdálenostech. Prakticky to tedy provedeme tak, že procházíme graf na obr. 4.12 a sčítáme intenzitu postupně ve směru  $z$ .

Hodnoty ze simulace měření VSL pro vedené mody byly zpracovány pomocí vzorce (2.1), abychom získali exponenciální závislost. Získáme grafy na obr. 4.17, pozorovaný nárůst intenzity je exponenciální, takže v logaritmickém měřítku získáme přímkou, jejíž směrnici je právě koeficient zisku  $g$ .

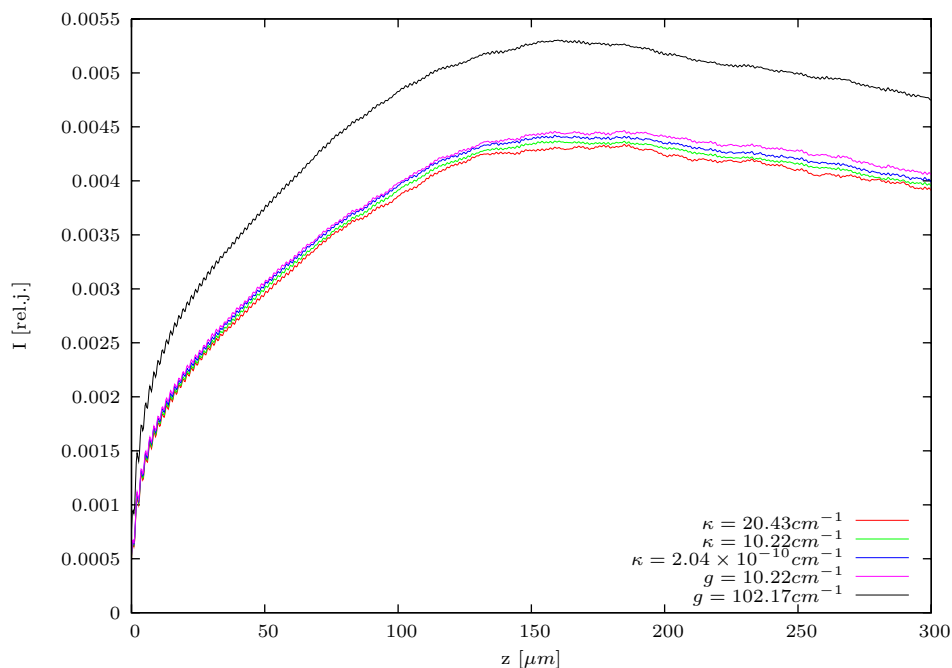
Oproti tomu simulace VSL s vedením světla v substrátových modech exponenciální nárůst nevykazuje, viz obr. 4.19 a 4.21. Na počátku závislostí vidíme sice růst podobný exponenciále, ale dále již pokračuje růst přibližně lineárně. To je v rozporu s teorií měření metodou VSL a tudíž tuto metodu nelze využít pro vyhodnocení takového VSL experimentu.



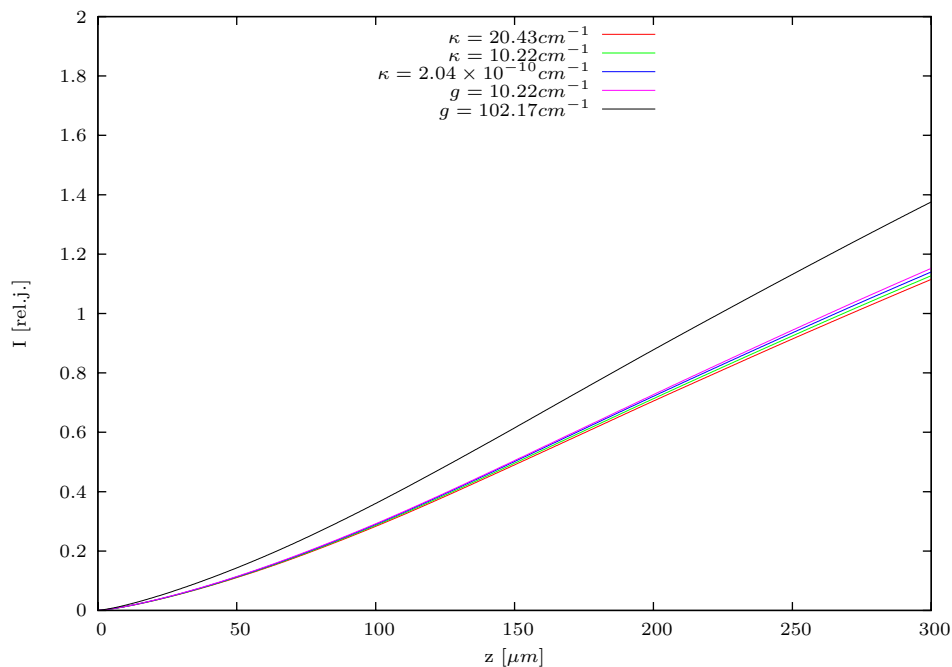
Obrázek 4.16: Intenzita světla z jednoho nanokrystalu šířící se prostřednictvím vedených modů po difrakci na hraně vzorku přímo ve směru  $z$  (logaritmické měřítko).



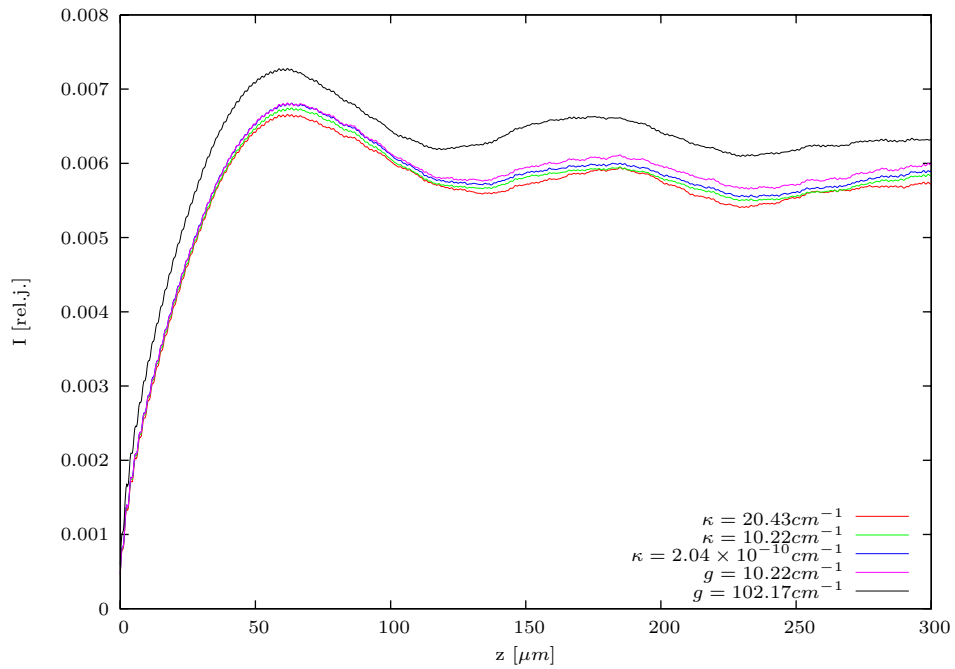
Obrázek 4.17: Exponenciální závislost extrahovaná z intenzity světla VSL experimentu pomocí vztahu (2.1) pro závislost signálu VSL na délce excitovaného pruhu.



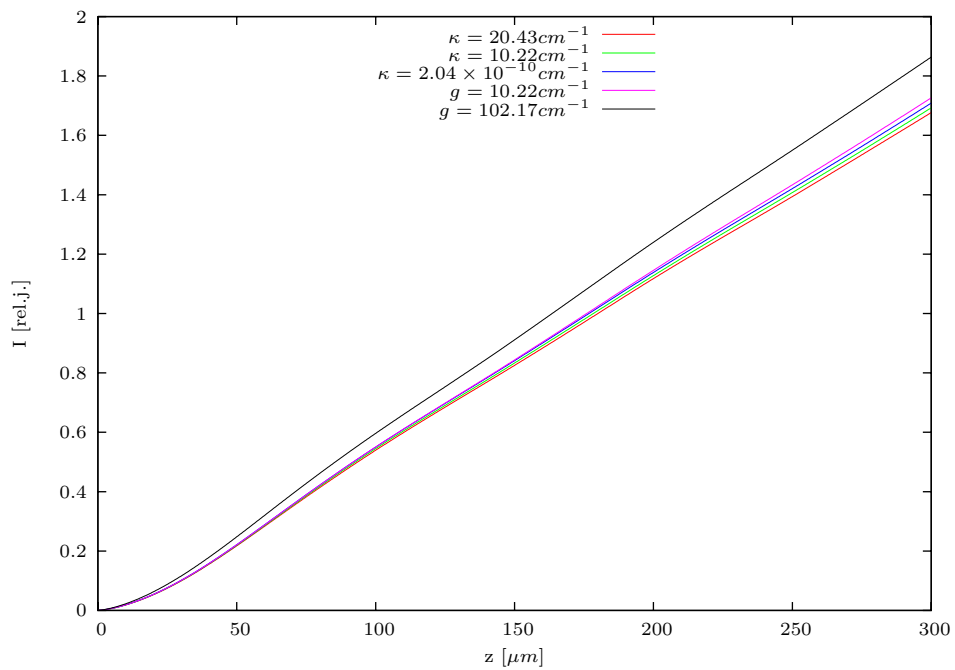
Obrázek 4.18: Intenzita světla z jednoho nanokrystalu šířící se prostřednictvím substrátových módů po difrakci na hraně vzorku pod úhlem 0,07 rad do substrátu.



Obrázek 4.19: Intenzita světla z VSL experimentu šířící se prostřednictvím substrátových módů po difrakci na hraně vzorku pod úhlem 0,07 rad do substrátu (logaritmické měřítko).



Obrázek 4.20: Intenzita světla z jednoho nanokrystalu šířící se prostřednictvím substrátových módů po difrakci na hraně vzorku pod úhlem 0,12 rad do substrátu.



Obrázek 4.21: Intenzita světla z VSL experimentu šířící se prostřednictvím substrátových módů po difrakci na hraně vzorku pod úhlem 0,12 rad do substrátu (logaritmické měřítko).



# Kapitola 5

## Diskuse výsledků

Cílem kapitoly je shrnout výsledky dosažené během simulací a porovnat je s publikovanými údaji.

### 5.1 Původní model

Prvním úkolem v rámci diplomové práce bylo seznámit se s jednodušším modelem vlnovodné struktury uvedeným v kapitole 2.4 a s programem vytvořeným podle modelu.

Nejvýznamnějším výstupem z této části diplomové práce byl příspěvek k článku [5], ve kterém je studována vlnovodná struktura s lokálně pozměněným okolním prostředím vzorku. Podrobnější popis uvádí kapitola 2.4, kde je také uvedeno převzaté srovnání experimentu se simulacemi. Shoda experimentu s výpočtem potvrdila hypotézu, podle které se světlo ve sledovaném vzorku šíří převážně prostřednictvím substrátových modů a světlo vázané do vedených modů má pouze okrajový význam.

### 5.2 Podrobnější vlnový model

Dalším požadavkem zadání diplomové práce bylo vypracování nového vlnového modelu (po vzoru článku [8], blíže viz kapitola 3) s následným zpracováním počítačového programu umožňujícího simulovat zadané struktury pohledem podrobnějšího modelu.

#### 5.2.1 Seznamovací výpočty

V rámci seznamování se s chováním nového modelu jsme provedli několikero výpočtů pro neabsorbující struktury (jelikož je to jednodušší problém, např.

kvůli hledání modů struktury). Nejprve to byl výpočet intenzity světla ve struktuře pro různé šířky vrstev vzorku (obr. 4.3 až 4.6), který ukázal, že relativní blízkost okrajů a tím i odrazivých zrcadel způsobuje oscilace intenzity světla ve struktuře. Užitím dostatečně široké struktury (splňující podmínku (4.2)) a také díky většímu počtu vlastních modů široké struktury však tento vliv potlačíme.

Následující výpočty nám umožnily nahlédnout do šíření světla prostřednictvím vedených modů v jádře vlnovodné struktury. Demonstrují fakt, že menším počtem vedených modů v jádře docílíme jednoduššího průběhu šíření (obr. 4.7). Naopak větší počet modů způsobuje vznik „záznějí“ – střídavého zhušťování a opětného zředování intenzity světla v jádře (obr. 4.8).

## 5.2.2 Vyvazování světla do substrátu

Používající stále neabsorbující strukturu provádíme další simulace. Na grafech na obr. 4.3 až 4.11 pozorujeme vyvazování světla do substrátu (pravá část grafů), což je jeden z hlavních objektů studia v diplomové práci. Způsob vyvázání světla závisí na použité šířce jádra. Při menší šířce jádra (obr. 4.7) dochází ke slití paprsků vycházejících pod různými úhly. Zvětšením šířky jádra (obr. 4.9 a 4.10) dosáhneme prostorové separace paprsků. Dále pak vyvázání světla závisí na použité vlnové délce, která ovlivňuje směr i počet vyvazujících se paprsků (opět viz obr. 4.9 a 4.10).

V zatím zmíněných případech docházelo k vyvázání světla po relativně krátké dráze (cca.  $20\mu m$ ) šíření strukturou. Pro některé vlnové délky však dochází k vysvěcování světla z jádra do substrátu na mnohem delším úseku. Např. na obr. 4.11 je tento úsek pro jeden paprsek dlouhý přibližně  $150\mu m$ . Tím vzniká paprsek se speciálními vlastnostmi. Difrakční obrazec na obr. 4.12 ukazuje, že paprsek s malým úhlem difrakce se vyznačuje do malého intervalu úhlů. Šíří se přitom již v substrátu, avšak téměř rovnoběžně s jádrem, lze ho tedy nesprávně zaměnit s vedeným modem.

Jak ukazují obr. 4.12 a pro lepší orientaci také řezy 4.13, během šíření strukturou dochází k postupnému úhlovému zužování paprsků odpovídajících různým úhlům a také je vidět, že rychlost zužování je vyšší pro paprsky vycházející ze vzorku pod větším úhlem. Na řezu je rovněž patrný pozvolný nárůst intenzity pro mod s nejnižším difrakčním úhlem. Rychlost růstu se zvyšuje pro paprsky s větším difrakčním úhlem. Obr. 4.14 a 4.15 pak demonstrují obdobné zužování paprsků šířících se pod malým úhlem ve spektrální oblasti.

Osvětluje to tedy okolnosti, za kterých vzniká paprsek s malou spektrální šířkou a malým úhlem difrakce na hraně vzorku, jimiž vysvětlujeme spektra měřená ve výchozím experimentu. Zároveň je to důkaz toho, že takovéto

spektrální zúžení může vznikat navázáním světla do substrátových modů vlnovodu.

### 5.2.3 Absorpce a optický zisk

Dosud jsme neporovnali výstup z nového modelu s měřenými hodnotami. Napravíme to prostřednictvím simulací absorbující resp. ziskové struktury. Hlavním cílem diplomové práce po započítání optického zisku do modelu byla simulace měření optického zisku pomocí metody VSL, jestliže při šíření světla uvažujeme pouze substrátové mody vlnovodu.

Pro srovnání máme k dispozici experimentální měření v [2] a v [6]. Nejprve využijeme obr. 3a z [6], kde je znázorněn vývoj spektra luminiscence nanokrystalu v závislosti na vzdálenosti excitované oblasti vzorku od jeho hrany. Intenzita luminiscence na zmíněném grafu se vzdáleností klesá a šířka spektrální čáry se zmenšuje. Odpovídající simulovaná závislost na grafu na obr. 4.15 nahoře ukazuje rostoucí intenzitu, šířka čáry se také zmenšuje. Neklesání intenzity je způsobeno tím, že uvažujeme šíření rovinných vln, avšak ve skutečnosti je to vlna s cylindrickou symetrií, která dopadá do detektoru. Její intenzita ale klesá nepřímou úměrou vzdálenosti od zdrojového nanokrystalu. Po započtení této opravy získáme také klesající závislost.

Porovnejme simulované výsledky rovněž s obr. 5.1 převzatým z [2]. Obrázek ukazuje, pro měření na vlnovodném vzorku, jednak přímé měření metodou VSL (a), měření metodou SES (b) a integrovanou intenzitu SES (c). Podrobnosti k uvedeným metodám jsou uvedeny v kapitole 2.2. Pro porovnání máme k dispozici grafy na obr. 4.18 až 4.21. Je na nich simulována jak metoda měření SES (obr. 4.18 a 4.20), tak metoda VSL, resp. její simulace integrováním intenzity z SES simulace (obr. 4.19 a 4.21). Pro porovnání jsou simulace provedeny pro více hodnot absorpce a zisku, a také pro téměř nulovou absorpci.

Porovnáním uvedeného zjistíme shodu mezi simulacemi a experimentem. Usuzujeme tedy, že předkládaná teorie vysvětlující experiment je správná. Využijeme toho ke studiu chování metody VSL při simulaci měření na absorbujících a ziskových strukturách.

Díky tomu, že model umožňuje odděleně studovat šíření světla prostřednictvím vedených a substrátových modů, jsme schopni analyzovat rozdíly mezi oběma druhy modů tak, jak se projevují při měření VSL.

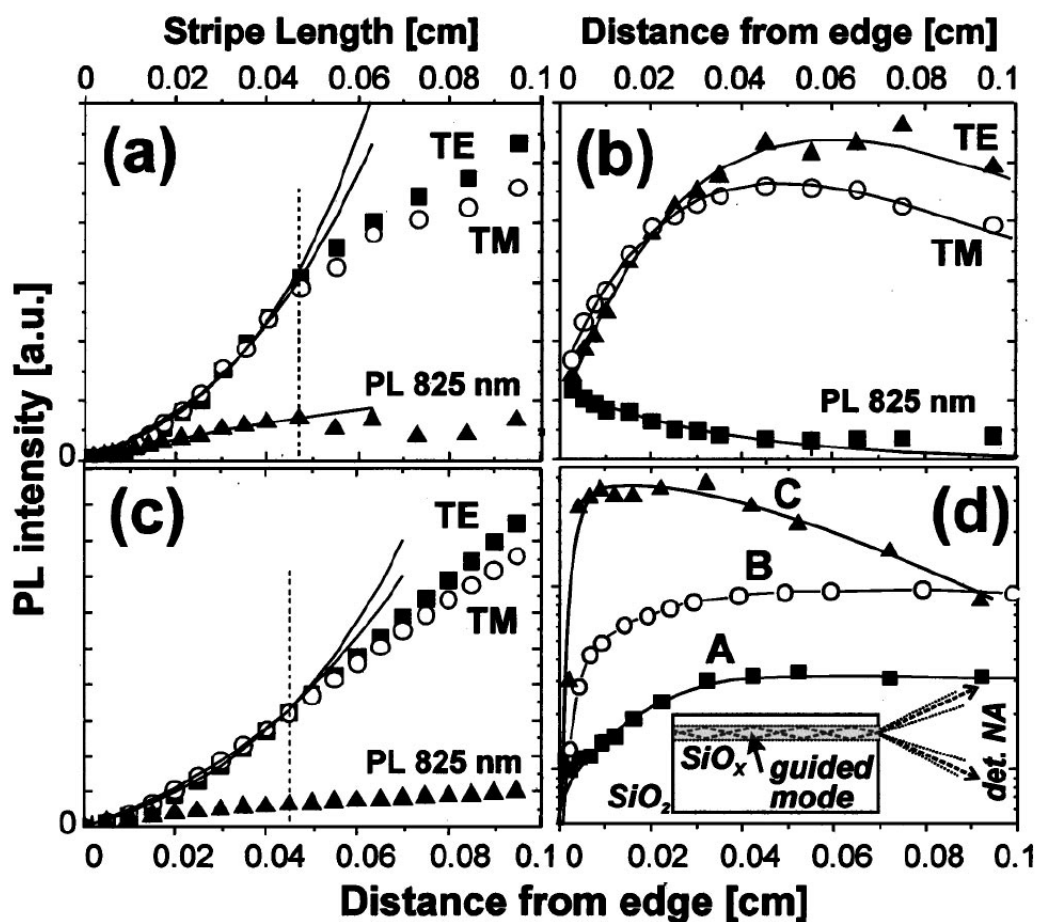
Vedené mody jsou simulovány na obr. 4.16, odpovídající měření VSL pak na obr. 4.17. Vynesena je intenzita světla difraktovaného přímo do směru šíření v závislosti na vzdálenosti nanokrystalu od hrany vzorku, v případě VSL na délce excitovaného proužku (který začíná na hraně vzorku). Obdobně máme pro substrátové mody obr. 4.18 až 4.21 s tím, že vybraný úhel difrakce je 0,07 rad a 0,012 rad směrem do substrátu. Výběr úhlů byl proveden tak, aby

bylo možno demonstrovat potřebné jevy. Závislosti jsou simulovány pro dvě hodnoty optického zisku, dvě hodnoty ztrát a pro nulové ztráty (ve smyslu, že jejich hodnota je řádově menší než v jádře, blíže viz kapitola 4.3.1).

Nyní k vlastnímu porovnání. Pro vedené mody získáváme exponenciální závislosti – rostoucí v případě zisku v jádře a klesající v případě ztrát v jádře. Nulové ztráty zachovávají energii v soustavě, intenzita je proto pro takový případ konstantní. Simulací VSL získáme opět exponenciální závislosti, až na případ nulových ztrát, kde je nárůst lineární.

Pro substrátové mody získáváme odlišné závislosti. Hlavním rozdílem je, že jejich charakter a tvar je oproti vedeným modům pro různé hodnoty zisku a ztrát téměř shodný. Na počátku VSL závislosti pozorujeme také růst podobný exponenciálnímu, dále se pak ale zpomaluje a je lineární. Rozdíly mezi přítomností absorpce a zisku v jádře struktury nejsou pro substrátové mody zdaleka tak výrazné, jako u vedených modů. Z toho usuzujeme, stejně jako v článku [2], že nárůst intenzity VSL signálu je u substrátových modů způsoben samotným faktem, že se jedná o substrátové mody, a nikoliv přítomností optického zisku.

Interpretace počátečního nárůstu podobného exponenciále jako přítomnosti optického zisku pomocí teorie VSL je tedy u struktur, kde mají největší podíl na šíření světla substrátové mody, chybou.



Obrázek 5.1: (a) Měření VSL na vzorku pro vlnové délky odpovídající maximumu spektra TE a TM módů. Pro srovnání uvedena luminiscence na 825 nm měřená v normálním uspořádání. (b) Měření metodou SES. (c) Integrovaná intenzita z panelu (b). (d) SES měření pro různě široký úhel sběru luminiscence – A nejmenší, C největší. Schematicky znázorněno na vloženém obrázku. Převzato z [2].

### 5.3 Jevy na hraně vzorku

Dalším jevem, který se uplatní hlavně při experimentálním měření, je částečný či úplný odraz na samotné hraně vzorku, na které jsme prozatím uvažovali pouze difrakci. V literatuře (např. [7]) je uvedeno, že na rozhraní dvou optických prostředí se rovinná elektromagnetická vlna odráží, případně prochází rozhraním do dalšího prostředí. Míru odrazu a průchodu energie určují koeficienty reflektance a transmitance (konkrétní vztahy uvádí opět pramen [7]).

Jelikož jsme pole ve struktuře rozložili do rovinných vln, využijeme uvedených koeficientů k analýze toho, jakou měrou se pole vyzařuje do jednotlivých směrů. V našem případě se tedy zajímáme o to, jaký je koeficient transmitance záření z jádra a ze substrátu do prostředí (zde vzduch s indexem lomu 1) za vzorkem.

Na obr. 5.2 jsou znázorněny koeficienty transmitance signálu z jádra a ze substrátu pro různé hodnoty indexu lomu substrátu v závislosti na úhlu šíření v jádře  $\varphi$ . Svislými čarami jsou znázorněny momenty přechodu jak mezi radiačními a substrátovými mody, tak mezi substrátovými a vedenými mody. Úhly odpovídající vedeným modům se tedy nacházejí vpravo.

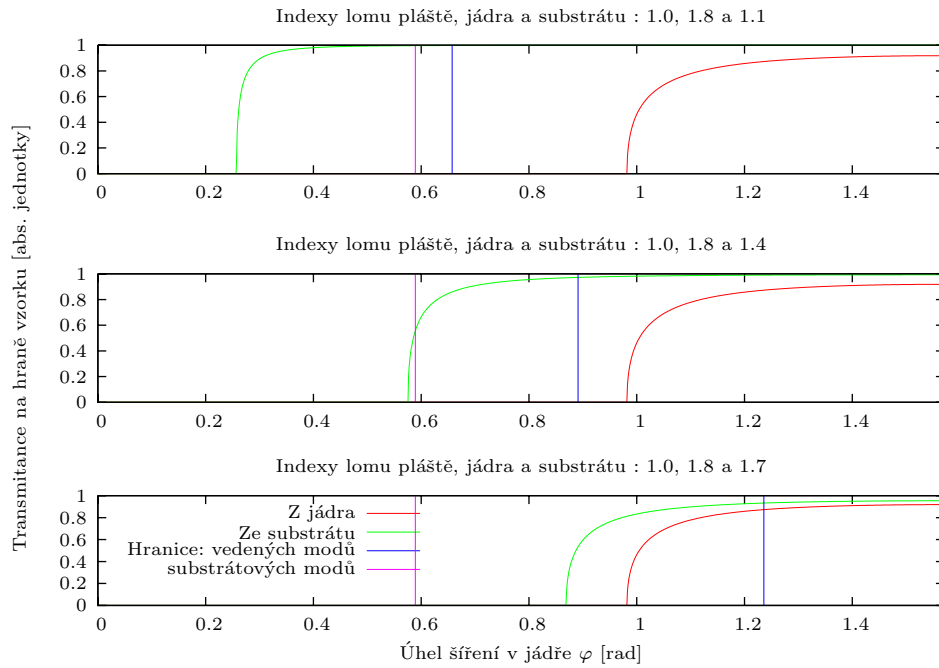
Grafy na obr. 5.2 probereme odshora dolů. Na prvním grafu je index lomu substrátu nejbližší indexu lomu prostředí za vzorkem. Důsledkem toho je hrana transmitance (tzn. oblast přechodu do nuly) ze substrátu posunuta značně doleva, takže v difrakci uvidíme všechny substrátové mody. Oproti tomu některé vedené mody se v difrakci v dalekém poli neprojeví, protože oblast nenulové transmitance nepokrývá celou oblast výskytu vedených modů. Některé vedené mody se tedy odrazí na hraně úplně, jiné budou utlumeny, avšak fundamentální mod nebude díky vysokému úhlu šíření v jádře výrazně tlumen.

Pro druhý graf, zachycující stav ve struktuře užívané v předchozích výpočtech, je situace obdobná, pouze se k sobě některé křivky přiblížily.

Třetí graf zachycuje obrácenou situaci, kdy skrz hranu projdou všechny vedené mody, ale nemalá část substrátových modů se na hraně úplně odrazí zpět do struktury.

Radiační mody se v uváděných strukturách vyvazují bez problému, jelikož mezi pláštěm a prostředím za vzorkem fakticky není optické rozhraní.

Uvedená fakta se z uvedených simulací projeví pouze na obr. 4.12, kde dojde k modulaci amplitudy profilu ve směru souřadnice  $x$ . Jelikož je však průběh transmitance relativně skokový, změna v uvedeném grafu je obtížně pozorovatelná, proto ho znovu včetně transmitance neuvádíme.



Obrázek 5.2: Porovnání průběhu koeficientu transmittance z jádra a substrátu na hraně vzorku do vzduchu (index lomu 1). Svislými čarami jsou znázorněny momenty změny charakteru modů z radiačních na substrátové a ze substrátových na vedené. Demonstrujeme zde to, že ne všechny substrátové a příp. vedené mody se musí vyvázat ze vzorku na jeho hraně a podílet se na difrakci v dalekém poli.

# Kapitola 6

## Závěr

V této práci jsem na základě modelu zkoumal vlastnosti optického záření majícího původ v luminiscenci křemíkových nanokrystalů zabudovaných ve vlnovodné struktuře. Nejdříve jsme s pomocí předchozího jednoduššího modelu provedli simulace chování vlnovodné struktury při změně okolního optického prostředí. Simulace se s experimentem shodují velice dobře, výsledky jsou publikovány v článku [5]. Potvrdila se tedy hypotéza, že se světlo v pozorované vlnovodné struktuře šíří prostřednictvím substrátových modů a že vedené mody, tradičně považované za nejvýraznější, zde největší význam nemají.

Po zformulování nového vlnového modelu, přímo řešícího Maxwellovy rovnice, se podařilo ukázat původ zúžení luminiscenčního spektra nanokrystalů, které byly pozorovány v úvodním experimentu [2]. Pro určité vlnové délky totiž ve struktuře dochází ke vzniku paprsku, který se velice pomalu vyvazuje z jádra vlnovodné struktury a substrátem se šíří pod velice malým úhlem. Podobně jako ve Fabry-Perotově rezonátoru dochází k násobným odrazům v jádře, důsledkem čehož je právě zmiňované zúžení spektra.

V dalším kroku, po započtení malé absorpce a zisku ve struktuře, jsme simulovali měření optického zisku na vlnovodné struktuře pomocí metody VSL. Zatímco pro šíření světla prostřednictvím vedených modů jsme získali výsledky předpovídané teorií VSL, pro šíření světla vázaného do substrátových modů jsme získali závislost, která na přítomnosti absorpce či zisku závisí pouze málo. Avšak na počátku vykazuje, podobně jako vedené mody, nárůst podobný exponenciálnímu. To může vést k pokusu interpretovat takové měření, stejně jako u vedených modů, pomocí teorie VSL, kvůli zjištěnému chování bychom tak ale naměřili zisk i u struktury, která vykazuje optické ztráty.

Cílem diplomové práce bylo kvalitativní zkoumání vlnovodné struktury, ne přesná simulace skutečných vzorků. Jalikož je však model formulován pro obecné vrstevnaté prostředí, cílem další práce může být simulace reálných vzorků pomocí mnohvrstevnaté struktury.



# Literatura

- [1] K. L. Shaklee, R. F. Leheny, and R. E. Nahory, Phys. Rev. Lett. **26**, 888 (1971).
- [2] J. Valenta, I. Pelant and J. Linnros, Appl. Phys. Lett. **81**, 1396 (2002)
- [3] I. Pelant, T. Ostatnický, J. Valenta, K. Luterová, E. Skopalová, T. Mates, R.G. Elliman, Appl. Phys. B **83**, 87–91 (2006)
- [4] T. Ostatnický, J. Valenta, I. Pelant, K. Luterová, R.G. Elliman, S. Cheylan a B. Hönerlage, Optical Materials, **27**, 781–786 (2005)
- [5] K. Luterová, E. Skopalová, I. Pelant, M. Rejman, T. Ostatnický, J. Valenta, J. Appl. Phys. **100**, 074307 (2006)
- [6] L. Khriachtchev, M. Rasanen, S. Novikov, Appl. Phys. Lett. **83** (2003) 3018.
- [7] Hecht, E.: Optics, 4th edition. Addison Wesley, 2002, USA.
- [8] R.E. Smith, S.N. Houde-Walter, J. Opt. Soc. Am. A , Vol. 12, No. 4 (1995)
- [9] T. Sondergaard, B. Tromborg, Phys. Rev. A **64**, 033812