



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ

Ηλεκτρομαγνητική αλληλεπίδραση
νανοσωματιδίου τοπολογικού μονωτή και
κβαντικού εκπομπού

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΤΟΥ

ΚΟΥΝΤΟΥΡΗ ΓΕΩΡΓΙΟΥ

Επιβλέπων: Γιαννόπαπας Βασίλειος
Αν. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Μάρτιος 2019



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών
Τομέας Φυσικής

Ηλεκτρομαγνητική αλληλεπίδραση
νανοσωματιδίου τοπολογικού μονωτή και
κβαντικού εκπομπού

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

του

ΚΟΥΝΤΟΥΡΗ ΓΕΩΡΓΙΟΥ

Επιβλέπων: Γιαννόπαπας Βασίλειος
Αν. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή την 28η Μαρτίου 2019.

(Υπογραφή)

(Υπογραφή)

(Υπογραφή)

.....

Γιαννόπαπας Βασίλειος
Αν. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....

Λεωνίδα Τσέτσερης
Αν. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....

Τσιγαρίδας Γεώργιος
Επ. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Μάρτιος 2019

(Υπογραφή)

.....

ΚΟΥΝΤΟΥΡΗΣ ΓΕΩΡΓΙΟΣ

© 2019 – All rights reserved



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών
Τομέας Φυσικής

Copyright ©–All rights reserved Κουντούρης Γεώργιος, 2019.

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς τον συγγραφέα.

Ευχαριστίες

Κατ' αρχάς, θέλω να ευχαριστήσω τον επιβλέπων καθηγητή μου κ. Βασίλειο Γιαννόπαπα για την ανάθεση αυτής της διπλωματικής και για την πολύτιμη καθοδήγηση και βοήθεια που μου παρείχε καθ'όλη τη διάρκεια αυτής της εργασίας.

Ευχαριστώ, ακόμα, όλους τους καθηγητές μου στο Πολυτεχνείο που όλα αυτά τα χρόνια βοήθησαν να γίνω καλύτερος φυσικός και να κτίσω το απαραίτητο υπόβαθρο για να είμαι σε θέση να αντιμετωπίσω αυτό το πολυσύνθετο και συναρπαστικό θέμα.

Ευχαριστώ επίσης θερμά τους γονείς μου, που μέσα από τη συνεχή στήριξη και συμπαράστασή τους όλα αυτά τα χρόνια με οδήγησαν εδώ που είμαι σήμερα.

Ευχαριστώ, ακόμα, τους φίλους μου για όσες ώρες στάθηκαν δίπλα μου, όχι μόνο κατά τη διάρκεια αυτής της διπλωματικής, αλλά και σε κάθε άλλη φάση της ζωής μου.

Σας ευχαριστώ που σταθήκατε κοντά μου και ποτέ δεν πάψατε να πιστεύετε σε μένα.

Περίληψη

Σε αυτή την εργασία, μελετούμε την ηλεκτρομαγνητική αλληλεπίδραση νανοσωματιδίου τοπολογικού μονωτή (*TINP*) από Bi_2Se_3 και ενός απλού χβαντικού εκπομπού (χβαντικό σύστημα δύο επιπέδων), και διερευνούμε τη δυνατότητα επίτευξης ισχυρής σύζευξης στο σύστημα.

Μελετώντας το φάσμα απορρόφησης μεταβάλλοντας τη σύζευξη με κατάλληλες παραμέτρους, διαπιστώνουμε ότι μπορεί να εμφανίζεται διαχωρισμός των κορυφών, κάτι που υποδεικνύει ότι είναι τελικά δυνατόν να επιτευχθεί ισχυρή σύζευξη ανάμεσα σε κάποιους συντονισμούς του *TINP* και την εξιτονική διέγερση του χβαντικού εκπομπού, δημιουργώντας έτσι σύμφωνες συζευγμένες καταστάσεις.

Το πιο ενδιαφέρον, ωστόσο, είναι ότι παρατηρούμε μια νέα σύμφωνη κατάσταση «τοπολογικού πλεξιτονίου» που προκύπτει από ισχυρή σύζευξη μεταξύ του συντονισμού επιφανειακών τοπολογικών πλασμονίων στο *TINP* (*SToP* mode [9]) και της εξιτονικής διέγερσης του χβαντικού εκπομπού. Πέραν τούτου, παρατηρείται και ένα σύνολο άλλων φαινομένων, όπως ισχυρή σύζευξη μεταξύ επιφανειακών φωνονικών πολαριτονίων και εξιτονίων, συντονισμοί Fano, βυθίσματα απορρόφησης, και μετατοπίσεις κορυφών προς το ερυθρό. Η νέα αυτή σύμφωνη κατάσταση, όπως και τα άλλα φαινόμενα που παρατηρήθηκαν μπορεί να είναι χρήσιμα, μεταξύ άλλων, σε μελλοντική έρευνα και εφαρμογές στους τομείς της χβαντικής τεχνολογίας, της σπιντρονικής και της χβαντικής πληροφορικής.

Λέξεις Κλειδιά

νανοσωματίδια, τοπολογικός μονωτής, χβαντικός εκπομπός, Bi_2Se_3 , χβαντική τελεία ημιαγωγού, διαχωρισμός Rabi, ισχυρή σύζευξη, πλεξιτόνια, τοπολογικά πλεξιτόνια, μέσο υπέρυθρο, βαθύ υπέρυθρο

Abstract

In this paper, we study the electromagnetic interaction between a Bi_2Se_3 topological insulator nanoparticle (*TINP*) and a simple quantum emitter (a two-level quantum system), and we are investigating the possibility of achieving strong coupling in this system.

By investigating the absorption spectrum by modifying the coupling with appropriate parameters, we find that splitting can arise, which suggests that it is actually possible to achieve strong coupling between some of the resonances of the TINP and the excitonic mode of the quantum emitter, thus creating coherent coupled states.

More interestingly, we observe a new coherent state (a "topological plexciton") which results from strong coupling between the surface topological plasmon resonance of the TINP (SToP mode [9]) and the exciton of the quantum emitter. Furthermore, a number of other phenomena is observed, such as strong coupling between surface phonon polaritons and excitons, Fano resonances, quenching dips, and red-shifts. This new coherent state, as well as the other phenomena we observed, may be useful, among others, in future research and applications in the fields of quantum technology, spintronics and quantum computation.

Keywords

nanoparticles, topological insulator, quantum emitter, Bi_2Se_3 , semiconductor quantum dot, Rabi splitting, strong coupling, plexcitons, topological plexcitons, mid infrared, far infrared

Περιεχόμενα

Ευχαριστίες	1
Περίληψη	3
Abstract	5
Περιεχόμενα	8
Κατάλογος Σχημάτων	15
1 Εισαγωγή	17
1.1 Δομή της Διπλωματικής	18
2 Τοπολογικοί μονωτές	19
2.1 Εισαγωγή	19
2.2 Τοπολογική θεωρία ζωνών	22
2.2.1 Θεωρία ζωνών και (συνήθεις) μονωτές	22
2.2.2 Κβαντική κατάσταση Hall	24
2.2.3 Το μοντέλο του Haldane	26
2.2.4 Συνοριακές καταστάσεις και αντιστοιχία εσωτερικού-συνόρου	27
2.2.5 Τοπολογικός μονωτής Z_2	28
2.3 Τοπολογικός μονωτής 2Δ	29
2.4 Τοπολογικοί μονωτές σε 3Δ	30
2.4.1 Σεληνιούχο βισμούθιο (III) – Bi_2Se_3	31
2.4.2 Νανოსωματίδιο τοπολογικού μονωτή	31
3 Πλασμονική	33
3.1 Εισαγωγή	33
3.2 Βασικές πλασμονικές διεγέρσεις	34
3.2.1 Επιφανειακά πλασμόνια πολαριτόνια (SPP)	34
3.2.2 Εντοπισμένα επιφανειακά πλασμόνια πολαριτόνια (LSPP)	36
3.2.3 Μια σημείωση για πλασμόνια σε μη μεταλλικά υλικά	37
3.3 Πλεξιτόνια	38

3.3.1	Εισαγωγή: Ισχυρή σύζευξη και πλεξιτόνια	38
3.3.2	Θεωρητική μελέτη: Κλασική περιγραφή	40
3.3.3	Θεωρητική μελέτη: Ημικλασική περιγραφή	42
3.3.4	Σημασία του αποτελέσματος	46
3.3.5	Εισαγωγή απωλειών στο μοντέλο	47
3.3.6	Προβλέψεις από τη θεωρία	48
4	Εξισώσεις	49
4.1	Εισαγωγή	49
4.2	Αλληλεπιδρόν σύστημα SQD-TINP	49
4.3	Απομονωμένο σύστημα SQD	56
4.4	Απομονωμένο σύστημα TINP	56
5	Αριθμητικοί υπολογισμοί	57
5.1	Απομονωμένο σύστημα SQD	57
5.2	Απομονωμένο σύστημα TINP	60
5.2.1	Διηλεκτρική συνάρτηση και απορρόφηση	60
5.2.2	Αγνοώντας τις επιφανειακές καταστάσεις	61
5.2.3	Περιλαμβάνοντας τις επιφανειακές καταστάσεις	63
5.3	Αλληλεπιδρών σύστημα SQD-TINP	69
5.3.1	Παράμετροι του συστήματος	69
5.3.2	Τρόπος μελέτης	70
5.3.3	Κορυφή LSPP και β φωνονίου	71
5.3.4	Κορυφή τοπολογικού πλασμονίου	75
5.3.5	Κορυφή LSPhP	90
5.3.6	Σύνοψη αποτελεσμάτων και συμπεράσματα	94
5.3.7	Άλλα φαινόμενα και περαιτέρω μελέτη	98
5.3.8	Πιθανές εφαρμογές	101
5.4	Παράρτημα A: Κώδικας	105
5.4.1	Κώδικας Fortran	105

Κατάλογος Σχημάτων

2.1	Άνω σειρά: τοπολογικά τετριμμένη κατάσταση, κοινός μονωτής. Κάτω σειρά: κβαντική κατάσταση Hall. Στην τρίτη στήλη φαίνεται το μαθηματικό ανάλογο της τοπολογικής αναλλοίωτης για την κάθε περίπτωση (γένος). [πηγή: [5]] . . .	24
2.2	(α) Απεντοπισμένες τροχιές στη διεπιφάνεια τοπολογικά τετριμμένου ($n = 0$) και μη τετριμμένου υλικού ($n = 1$). (β) Η σχέση διασπορά των επιφανειακών καταστάσεων στο κβαντικό φαινόμενο Hall [πηγή: [5]]	27
2.3	Αριστερά: Το επίπεδο Fermi τέμνει τις επιφανειακές καταστάσεις ένα άρτιο πλήθος φορών, οπότε δεν έχουμε τοπολογική προστασία (τετριμμένη κατάσταση). Δεξιά: Το επίπεδο Fermi τέμνει τις επιφανειακές καταστάσεις ένα περιττό πλήθος φορών, οπότε εδώ έχουμε τοπολογική προστασία (τοπολογικός μονωτής). [πηγή: [5]]	28
2.4	Αριστερά: Οι χειραλικές, επιφανειακές καταστάσεις στη διεπιφάνεια τοπολογικά τετριμμένου και μη τετριμμένου υλικού. Δεξιά: Η σχέση διασποράς των επιφανειακών χειραλικών καταστάσεων. Ας σημειωθεί ότι το επίπεδο Fermi τέμνει τις επιφανειακές καταστάσεις σε περιττό πλήθος φορών για κάθε σπιν. [πηγή: [5]]	29
2.5	(α) Ασθενής τοπολογικός μονωτής. Η επιφάνεια Fermi εγκλείει άρτιο πλήθος σημείων Dirac. (β) Ισχυρός τοπολογικός μονωτής. Η επιφάνεια Fermi εγκλείει περιττό πλήθος σημείων Dirac. (γ) Η επιφάνεια διασποράς για τον ισχυρό τοπολογικό μονωτή του (β) [πηγή: [5]]	30
2.6	Διακριτές επιφανειακές καταστάσεις σε νανοσωματίδιο τοπολογικού μονωτή από Bi_2Se_3 . [[9]]	31
3.1	Σχέση διασποράς επιφανειακού πλασμονίου πολαριτονίου (SPP). Οι ανεξάρτητες διεγέρσεις είναι από τη μία το επιφανειακό πλασμόνιο ($\omega = \omega_{sp} = \omega_p/\sqrt{2}$, ω_p : συχνότητα πλάσματος) και από την άλλη το φωτόνιο ($\omega = kc/n$). [πηγή: [11]]	36
3.2	Ισχυρή σύζευξη ανάμεσα στον ταλαντωτή Lorentz και το κλασικό πεδίο. Η οριζόντια διακεκομμένη γραμμή αναπαριστά το συντονισμό του ταλαντωτή ($\omega = \omega_0$), ενώ η διαγώνια διακεκομμένη γραμμή τη σχέση διασποράς του SPP. Οι μύαυρες, συνεχείς καμπύλες είναι οι δύο κανονικοί τρόποι του ισχυρά συζευγμένου συστήματος. [πηγή: [11]]	41

- 5.1 Χρονική εξέλιξη των παραμέτρων $A(t), B(t)$ και $\Delta(t)$, από τις αρχικές συνθήκες $(0,0,0)$ έως τη στάσιμη κατάσταση του συστήματος. (α') $\omega_0 = 1eV$. (β') $\omega_0 = 10meV$ 58
- 5.2 Συμπεριφορά της απορρόφησης του απομονωμένου SQD . (α') Συμπεριφορά για τρεις διαφορετικές τιμές της συχνότητας μετάβασης: $\omega_0 = 1eV, 100meV$ και $10meV$, με σταθερή διπολική ροπή μετάβασης $\mu = 0.65e * nm$. Η απορρόφηση για $10meV$ και $100meV$ είναι μεγεθυμένη για σύγκριση. (β') Συμπεριφορά για τέσσερεις διαφορετικές τιμές της διπολικής ροπής μετάβασης $\mu = 0.1, 0.65, 3.0$ και $6.0e * nm$, για σταθερό $\omega_0 = 50meV$. Οι καμπύλες απορρόφησης κανονικοποιήθηκαν με βάση την καμπύλη μεγαλύτερης απορρόφησης (πολλαπλασιασμός της απορρόφησης επί κάποιο παράγοντα). Έτσι, βλέπουμε ότι με τη διαφορά ενός παράγοντα οι καμπύλες είναι πανομοιότυπες (στο σχήμα όλες πρακτικά ταυτίζονται). 59
- 5.3 Διηλεκτρική συνάρτηση (πραγματικό και φανταστικό μέρος) του $TINP$ αγνοώντας τις επιφανειακές καταστάσεις. Από αριστερά προς τα δεξιά, είναι ορατή η επίδραση των ελεύθερων φορέων, του α φωνονίου και του β φωνονίου στη διηλεκτρική συνάρτηση. 62
- 5.4 (α') Απορρόφηση του $TINP$, αγνοώντας τις επιφανειακές καταστάσεις (λογαριθμική κλίμακα). Από αριστερά προς τα δεξιά, εμφανίζονται τρεις κορυφές με αυξανόμενο ύψος: στα $4.21meV$, στα $15.315meV$ και $66.19meV$. (β') Απορρόφηση του $TINP$ για μεταβλητή ακτίνα του νανοσωματιδίου, a , αγνοώντας τις επιφανειακές καταστάσεις. Οι διεγέρσεις που εμφανίζονται είναι οι ίδιες με το (α'). 62
- 5.5 (α') Απορρόφηση απομονωμένου νανοσωματιδίου τοπολογικού μονωτή, ακτίνας $50nm$, αγνοώντας (με κόκκινο χρώμα) και λαμβάνοντας υπόψιν (με πράσινο χρώμα) τις επιφανειακές καταστάσεις. Στην περίπτωση όπου συμπεριλήφθηκε η επίδραση των επιφανειακών καταστάσεων, θεωρήθηκε ότι το επίπεδο Fermi βρίσκεται κάτω από τον κώνο Dirac. Στο (β') παρουσιάζεται (σε λογαριθμική κλίμακα) το φάσμα απορρόφησης για μεγαλύτερο εύρος ενεργειών, συμπεριλαμβάνοντας έτσι και τη διεγέρση LSPHP. 64
- 5.6 (α') Απορρόφηση απομονωμένου νανοσωματιδίου τοπολογικού μονωτή, ακτίνας $50nm$, αγνοώντας (με κόκκινο χρώμα) και λαμβάνοντας υπόψιν (με μπλε χρώμα) τις επιφανειακές καταστάσεις. Στην περίπτωση όπου συμπεριλήφθηκε η επίδραση των επιφανειακών καταστάσεων, θεωρήθηκε ότι το επίπεδο Fermi βρίσκεται πάνω από τον κώνο Dirac. Στο (β') παρουσιάζεται (σε λογαριθμική κλίμακα) το φάσμα απορρόφησης για μεγαλύτερο εύρος ενεργειών, συμπεριλαμβάνοντας έτσι και τη διεγέρση LSPHP. 65
- 5.7 Απορρόφηση απομονωμένου νανοσωματιδίου τοπολογικού μονωτή, ακτίνας $10nm$, αγνοώντας (με κόκκινο χρώμα) και λαμβάνοντας υπόψιν (με μπλε/πράσινο χρώμα) τις επιφανειακές καταστάσεις (α') για επίπεδο Fermi πάνω από τον κώνο Dirac και (β') για επίπεδο Fermi πάνω από τον κώνο Dirac. 66

- 5.8 Διεγέρσεις του συστήματος όταν «ανάβουμε» τις επιφανειακές καταστάσεις, θεωρώντας επίπεδο Fermi ακριβώς κάτω από το σημείο Dirac. Η επίδραση των επιφανειακών καταστάσεων στις διεγέρσεις είναι ιδιαίτερα εμφανής (βλέπε και Σχήμα 5.4 (β') για σύγκριση). (α') Στο διάστημα $\alpha \in (1, 200)nm$ και $\omega \in (0, 90)meV$ μπορούμε να δούμε πώς οι επιφανειακές καταστάσεις αλληλεπιδρούν με όλες τις άλλες διεγέρσεις (*LSPP*, β φωνόνιο και *LSPhP*). (β') Εδώ φαίνεται πιο καθαρά η αλληλεπίδραση με το *beta*-φωνόνιο (άνω) και με το *LSPP* (κάτω) ($\alpha \in (10, 200)nm, \omega \in (0, 20)meV$). (γ') Εδώ φαίνεται πιο καθαρά η αλληλεπίδραση με το *LSPhP* ($\alpha \in (1, 40)nm, \omega \in (0, 140)meV$). 67
- 5.9 Διεγέρσεις του συστήματος όταν «ανάβουμε» τις επιφανειακές καταστάσεις, θεωρώντας επίπεδο Fermi ακριβώς πάνω από το σημείο Dirac. Το splitting εδώ φαίνεται να είναι κάπως εντονότερο. (α') Στο διάστημα $\alpha \in (1, 200)nm$ και $\omega \in (0, 90)meV$ μπορούμε να δούμε πώς οι επιφανειακές καταστάσεις αλληλεπιδρούν με όλες τις άλλες διεγέρσεις (*LSPP*, β φωνόνιο και *LSPhP*). (β') Εδώ φαίνεται πιο καθαρά η αλληλεπίδραση με το *beta*-φωνόνιο (άνω) και με το *LSPP* (κάτω) ($\alpha \in (10, 200)nm, \omega \in (0, 20)meV$). (γ') Εδώ φαίνεται πιο καθαρά η αλληλεπίδραση με το *LSPhP* ($\alpha \in (1, 40)nm, \omega \in (0, 140)meV$). 68
- 5.10 Κορυφή *LSPP* για ακτίνα νανοσωματιδίου $50nm$. (α') Επίδραση της απόστασης R μεταξύ των σωματιδίων στην απορρόφηση. Επιλέγηκε διπολική ροπή για το *SQD*: $\mu = 0.65e * nm$. (β') Επίδραση της διπολικής ροπής μ του *SQD* στην απορρόφηση. Η απόσταση μεταξύ των σωματιδίων επιλέγηκε να είναι $R = 55nm$. 72
- 5.11 Κορυφή *LSPP* για ακτίνα νανοσωματιδίου $10nm$. (α') Επίδραση της απόστασης R μεταξύ των σωματιδίων στην απορρόφηση. Επιλέγηκε διπολική ροπή για το *SQD*: $\mu = 0.65e * nm$. (β') Επίδραση της διπολικής ροπής μ του *SQD* στην απορρόφηση. Η απόσταση μεταξύ των σωματιδίων επιλέγηκε να είναι $R = 20nm$. 72
- 5.12 Κορυφή *LSPP* για ακτίνα νανοσωματιδίου $10nm$ και $R = 20nm$ – Συνιστώσες απορρόφησης για δύο διαφορετικές τιμές της διπολικής ροπής μετάβασης μ : (α') Για $\mu = 0.65e * nm$ και (β') Για $\mu = 6.0e * nm$. Η απορρόφηση του *TINP* είναι μεγεθυμένη επί 10 για σύγκριση. 73
- 5.13 Απορρόφηση κοντά στο συντονισμό *beta* φωνονίου. Στην πρώτη σειρά για ακτίνα $\alpha = 50nm$, ενώ στη δεύτερη για $\alpha = 10nm$. (α') Επίδραση της απόστασης R μεταξύ των σωματιδίων στην απορρόφηση, $\mu = 0.65e * nm$. (β') Επίδραση της διπολικής ροπής μ του *SQD* στην απορρόφηση, $R = 55nm$. (γ') Επίδραση της απόστασης R , $\mu = 0.65e * nm$. (δ') Επίδραση της διπολικής ροπής μ , $R = 20nm$ 74
- 5.14 Απορρόφηση κοντά στο συντονισμό *SToP* του *TINP*, $\alpha = 50nm, E_F = -A/\alpha$. Στην πρώτη στήλη φαίνεται η επίδραση του μ για δύο διαφορετικές τιμές του R : (α') $R = 80nm$, (γ') $R = 55nm$. Στη δεύτερη στήλη φαίνεται η επίδραση του R για δύο διαφορετικά μ : (β') $\mu = 0.65e * nm$, (δ') $\mu = 6.0e * nm$. 75

- 5.15 Εξάρτηση της απορρόφησης από την ω_0 , για τιμές γύρω από τη διέγερση SToP ($\sim 11.8meV$) και θεωρώντας $\alpha = 50nm$, $R = 50nm$ και $\mu = 0.65e*nm$. Στον οριζόντιο άξονα φαίνεται η ω_0 , ενώ στον κατακόρυφο άξονα η συχνότητα του διεγείροντος φωτός, ω . Παρατηρούμε ότι δεν εμφανίζεται splitting ούτε στη συνολική απορρόφηση, ούτε και στις συνιστώσες της. (α') Συνολική απορρόφηση του συστήματος. (β') Συνιστώσα απορρόφησης του SQD (ευθεία $\omega \approx \omega_0$). (γ') Συνιστώσα απορρόφησης του TINP. 76
- 5.16 Εξάρτηση της απορρόφησης από το μ , στο διάστημα $(0, 6)e*nm$ και θεωρώντας $\omega_0 = 11.8meV$, $\alpha = 50nm$ και $R = 50nm$. Στον οριζόντιο άξονα φαίνεται το μ , ενώ στον κατακόρυφο άξονα η συχνότητα του διεγείροντος φωτός, ω . Παρατηρούμε ότι δεν εμφανίζεται splitting ούτε στη συνολική απορρόφηση, ούτε και στις συνιστώσες της. (α') Συνολική απορρόφηση του συστήματος. (β') Συνιστώσα απορρόφησης του SQD. (γ') Συνιστώσα απορρόφησης του TINP. 77
- 5.17 Απορρόφηση κοντά στο συντονισμό SToP του TINP, $\alpha = 10nm$, $E_F = -A/\alpha$. Στην πρώτη στήλη φαίνεται η επίδραση του μ για δύο διαφορετικές τιμές του R : (α') $R = 80nm$, (γ') $R = 20nm$. Στη δεύτερη στήλη φαίνεται η επίδραση του R για δύο διαφορετικά μ : (β') $\mu = 0.65e * nm$, (δ') $\mu = 1.5e * nm$. 78
- 5.18 Από ασθενή σε ισχυρή σύζευξη: μειώνοντας το R , για σταθερό $\mu = 0.65e*nm$. Από πάνω προς τα κάτω φαίνονται τα R : $60nm$, $30nm$, $20nm$, $15nm$ και $10nm$. Στο κάθε γράφημα η άνω καμπύλη αντιστοιχεί στην Q_{total} , η λεπτή καμπύλη στην Q_{SQD} και η «σπαστή» καμπύλη στην Q_{TINP} 79
- 5.19 Εξάρτηση της απορρόφησης από την ω_0 , για τιμές γύρω από τη διέγερση SToP ($\sim 35.94meV$) και θεωρώντας $\alpha = 10nm$, $\mu = 0.65e*nm$ και R : $20nm$ (πρώτη στήλη), $10nm$ (δεύτερη στήλη). Στον οριζόντιο άξονα φαίνεται η ω_0 , ενώ στον κατακόρυφο άξονα η συχνότητα του διεγείροντος φωτός, ω . **Πρώτη στήλη:** Στην περίπτωση $R = 20nm$ ακόμη δεν έχει εμφανιστεί το splitting, παρά μόνο οριακά στην Q_{total} (β') και στην Q_{TINP} (δ') και λιγότερο στην Q_{SQD} , (ε'). **Δεύτερη στήλη:** Στην περίπτωση $R = 10nm$ παρατηρούμε ότι εμφανίζεται αρκετά έντονο splitting, ορατό τόσο στη συνολική απορρόφηση (α') Q_{total} , όσο και στις συνιστώσες της (γ') Q_{SQD} και (ε') Q_{TINP} 81

- 5.20 Εξάρτηση της απορρόφησης από το R , για $\mu = 0.65$ (πρώτη στήλη) και το μ , για $R = 10nm$ (δεύτερη στήλη), για ω γύρω από τη διέγερση $SToP$ ($\sim 35.94meV$) και για ακτίνα του $TINP$ $\alpha = 10nm$. Στον οριζόντιο άξονα φαίνεται το R/μ , ενώ στον κατακόρυφο άξονα η συχνότητα του διεγείροντος φωτός, ω . **Πρώτη στήλη:** Συμπεριφορά με τη μεταβολή του R όταν $\mu = 0.65e * nm$. Διαπιστώνουμε ότι εμφανίζεται splitting, το οποίο αυξάνεται με τη μείωση του R , και το οποίο είναι ορατό τόσο στη συνολική απορρόφηση, όσο και στις δύο συνιστώσες απορρόφησης, κάτι το οποίο υποδεικνύει αρκετά ισχυρή σύζευξη. (α') Συνολική απορρόφηση του συστήματος. (γ') Συνιστώσα απορρόφησης του SQD. (ε') Συνιστώσα απορρόφησης του TINP. **Δεύτερη στήλη:** Συμπεριφορά με τη μεταβολή του μ στην οριακή κατάσταση $R = \alpha = 10nm$. Παρατηρούμε αυξανόμενο splitting με την αύξηση του μ , ορατό στη συνολική απορρόφηση, όπως και στις συνιστώσες της. Όπως βλέπουμε, έχουμε αρκετά ισχυρό splitting για ιδιαίτερα μικρές τιμές της διπολικής ροπής. (β') Συνολική απορρόφηση του συστήματος. (δ') Συνιστώσα απορρόφησης του SQD. (ζ') Συνιστώσα απορρόφησης του TINP. 82
- 5.21 Διεγέρσεις του αλληλεπιδρώντος συστήματος $SQD - TINP$: αλληλεπίδραση του εξιτονίου με τη διέγερση $SToP$ του $TINP$. Εδώ θεωρήσαμε συχνότητα μετάβασης $\omega_0 = 35.94meV$ (κοντά στη διέγερση $SToP$) και διπολική ροπή του SQD $\mu = 0.65e * nm$. Στην πρώτη στήλη φαίνεται η απορρόφηση για $R = 200nm$ (ασθενής σύζευξη), ενώ στη δεύτερη για $R = 15nm$, όπου έχει επιτευχθεί ισχυρή σύζευξη, ορατή ως ένα splitting στις κορυφές απορρόφησης. **Πρώτη στήλη:** ($R = 200nm$) Παρατηρούμε ότι εδώ οι δύο διεγέρσεις δρουν ανεξάρτητα, οπότε βρισκόμαστε σε κατάσταση ασθενούς σύζευξης. Μάλιστα η σύζευξη είναι τόσο ασθενής, που η απορρόφηση του SQD στο (γ') και του $TINP$ στο (ε') σχεδόν ταυτίζονται με αυτήν των αντίστοιχων απομονωμένων συστημάτων. **Δεύτερη στήλη:** ($R = 15nm$) Σε αυτήν την περίπτωση έχουμε εμφάνιση splitting τόσο στη συνολική απορρόφηση (β'), όσο και στις συνιστώσες απορρόφησης (δ') και (ζ'), κάτι το οποίο πάλι υποδεικνύει ότι βρισκόμαστε σε κατάσταση ισχυρής σύζευξης. 83
- 5.22 Απορρόφηση κοντά στο συντονισμό $SToP$ του $TINP$, $\alpha = 50nm$, $E_F = -A/\alpha$. Στην πρώτη στήλη φαίνεται η επίδραση του μ για δύο διαφορετικές τιμές του R : (α') $R = 200nm$, (γ') $R = 55nm$. Στη δεύτερη στήλη φαίνεται η επίδραση του R για δύο διαφορετικά μ : (β') $\mu = 0.65e * nm$, (δ') $\mu = 6.0e * nm$. 84
- 5.23 Συμπεριφορά της απορρόφησης στην κορυφή $SToP$, για $\alpha = 50nm$, $R = 50nm$ με επίπεδο Fermi πάνω από το σημείο Dirac. **Πρώτη στήλη:** Εξάρτηση από τη διπολική ροπή μετάβασης μ . (α') Συνολική απορρόφηση. (γ') Συνιστώσα απορρόφησης του SQD. (ε') Συνιστώσα απορρόφησης του TINP. **Δεύτερη στήλη:** Συμπεριφορά μεταβάλλοντας το ω_0 στην περιοχή της διέγερσης $SToP$, όταν $\mu = 6.0e * nm$. (β') Συνολική απορρόφηση Q_{total} . (δ') Συνιστώσα Q_{SQD} . (ζ') Συνιστώσα Q_{TINP} 85

- 5.24 Απορρόφηση κοντά στο συντονισμό $SToP$ του $TINP$, $\alpha = 10nm$, $E_F = +A/\alpha$. Στην πρώτη στήλη φαίνεται η επίδραση του μ για δύο διαφορετικές τιμές του R : (α') $R = 80nm$, (γ') $R = 15nm$. Στη δεύτερη στήλη φαίνεται η επίδραση του R για δύο διαφορετικά μ : (β') $\mu = 0.65e * nm$, (δ') $\mu = 6.0e * nm$. 86
- 5.25 Επίδραση του ω_0 στην απορρόφηση γύρω από την κορυφή $SToP$, με επίπεδο Fermi πάνω από το σημείο Dirac, για $\alpha = 10nm$ και για $\mu = 0.65e * nm$, για δύο διαφορετικές τιμές του R ($R = 40nm, 10nm$). **Πρώτη στήλη:** Συμπεριφορά μεταβάλλοντας το ω_0 στην περιοχή της διέγερσης $SToP$, όταν $R = 15nm$. (α') Συνολική απορρόφηση Q_{total} . (γ') Συνιστώσα Q_{SQD} . (ε') Συνιστώσα Q_{TINP} . **Δεύτερη στήλη:** Συμπεριφορά μεταβάλλοντας το ω_0 στην περιοχή της διέγερσης $SToP$, όταν $R = 10nm$. (α') Συνολική απορρόφηση Q_{total} . (γ') Συνιστώσα Q_{SQD} . (ε') Συνιστώσα Q_{TINP} 87
- 5.26 Επίδραση του ω_0 στην απορρόφηση γύρω από την κορυφή $SToP$, για $\alpha = 10nm$, στην οριακή διάταξη $R = 10nm$, με επίπεδο Fermi πάνω από το σημείο Dirac. **Πρώτη στήλη:** Συμπεριφορά μεταβάλλοντας το ω_0 στην περιοχή της διέγερσης $SToP$, όταν $\mu = 0.1e * nm$. (α') Συνολική απορρόφηση Q_{total} . (γ') Συνιστώσα Q_{SQD} . (ε') Συνιστώσα Q_{TINP} . **Δεύτερη στήλη:** Συμπεριφορά μεταβάλλοντας το ω_0 στην περιοχή της διέγερσης $SToP$, όταν $\mu = 1.5e * nm$. (β') Συνολική απορρόφηση Q_{total} . (δ') Συνιστώσα Q_{SQD} . (ς') Συνιστώσα Q_{TINP} 89
- 5.27 Απορρόφηση κοντά στο συντονισμό $LSPPhP$ του $TINP$, $\alpha = 50nm$, $E_F = -A/\alpha$. Στην πρώτη στήλη φαίνεται η επίδραση του μ για δύο διαφορετικές τιμές του R : (α') $R = 80nm$, (γ') $R = 55nm$. Στη δεύτερη στήλη φαίνεται η επίδραση του R για δύο διαφορετικά μ : (β') $\mu = 0.65e * nm$, (δ') $\mu = 3.0e * nm$. 90
- 5.28 Εξάρτηση από τη συχνότητα μετάβασης του SQD , ω_0 , για $R = \alpha = 50nm$ και για δύο διαφορετικές τιμές του μ : $0.65e * nm$ (πρώτη στήλη) και $3.0e * nm$ (δεύτερη στήλη), γύρω από τη διέγερση $LSPPhP$ του $TINP$. Στον οριζόντιο άξονα φαίνεται η συχνότητα διέγερσης του SQD , ω_0 , ενώ στον κατακόρυφο άξονα η συχνότητα του διεγείροντος φωτός, ω . **Πρώτη στήλη:** Συμπεριφορά για ω_0 γύρω από τη διέγερση $LSPPhP$, για $R = \alpha = 50nm$ και $\mu = 0.65e * nm$. (α') Q_{total} . (γ') Q_{SQD} . (ε') Q_{TINP} . **Δεύτερη στήλη:** Συμπεριφορά για ω_0 γύρω από τη διέγερση $LSPPhP$, για $R = \alpha = 50nm$ και $\mu = 3.0e * nm$. (β') Q_{total} . (δ') Q_{SQD} . (ς') Q_{TINP} 91
- 5.29 Εξάρτηση της απορρόφησης από τη διπολική ροπή του SQD , μ , όταν $R = \alpha = 50nm$. Στον οριζόντιο άξονα φαίνεται το μ , ενώ στον κατακόρυφο άξονα η συχνότητα του διεγείροντος φωτός, ω . Επιλέγηκε η οριακή περίπτωση $R = \alpha = 50nm$ για να δούμε τη συμπεριφορά του συστήματος στην ισχυρότερη δυνατή σύζευξη. (α') Q_{total} . (β') Q_{SQD} . (γ') Q_{TINP} 92
- 5.30 Απορρόφηση κοντά στο συντονισμό $LSPPhP$ του $TINP$, $\alpha = 10nm$, $E_F = -A/\alpha$. (α') Επίδραση του μ , για σταθερό $R = 40nm$. (β') Επίδραση του R , για σταθερό $\mu = 0.65e * nm$ 93

- 5.31 Συμπεριφορά του splitting μεταβάλλοντας το ω_0 (πρώτη στήλη) και το μ (δεύτερη στήλη) στην οριακή διάταξη $R = \alpha = 10nm$. **Πρώτη στήλη:** Συμπεριφορά μεταβάλλοντας το ω_0 γύρω από τη διέγερση LSP_{hP} , για $R = \alpha = 10nm$ και $\mu = 0.1e * nm$. (α') Q_{total} . (γ') Q_{SQD} . (ε') Q_{TINP} . **Δεύτερη στήλη:** Συμπεριφορά του splitting μεταβάλλοντας το μ γύρω από τη διέγερση LSP_{hP} , για $R = \alpha = 10nm$. (β') Q_{total} . (δ') Q_{SQD} . (ζ') Q_{TINP} 93
- 5.32 Στοιχεία για το εύρος των κορυφών στα απομονωμένα συστήματα $TINP$ και SQD 96
- 5.33 (α') Φαινόμενο τύπου Fano κοντά στη διέγερση $SToP$, για $\alpha = 50nm$, $E_F = -A/\alpha$, όπου η κορυφή είναι ιδιαίτερα στενή σε σχέση με αυτήν του εξιτονίου. Η μορφή Fano είναι ορατή στη συνιστώσα του SQD , αλλά και στη συνολική απορρόφηση. Η κόκκινη καμπύλη είναι το $Q_{SQD} \approx Q_{total}$ απουσία επιφανειακών καταστάσεων, δηλαδή απουσία της κορυφής του $TINP$, για σύγκριση. Εδώ $R = 55nm$ και $\mu = 0.65e * nm$. (β') Φαινόμενο τύπου Fano στη συνιστώσα απορρόφησης του $TINP$ μακριά από συντονισμό του $TINP$. Το φαινόμενο είναι πολύ ασθενές και δεν είναι ορατό στη συνολική απορρόφηση (το Q_{total} οφείλεται κυρίως στο Q_{SQD}). Η κόκκινη καμπύλη είναι το Q_{TINP} για το απομονωμένο $TINP$, για σύγκριση. Εδώ $R = 55nm$ και $\mu = 6.0e * nm$. 99
- 5.34 Βύθισμα απορρόφησης στην κορυφή LSP_{hP} , $\alpha = 50nm$, για $R = 55nm$, $\mu = 0.65e * nm$. Το βύθισμα απορρόφησης είναι ορατό στη συνιστώσα του SQD , αλλά και στη συνολική απορρόφηση. 100
- 5.35 Η κορυφή $SToP$, $\alpha = 10nm$, $E_F = -A/\alpha$, για διαφορετικές τιμές της «διατομικής» απόστασης R , θεωρώντας μεγαλύτερο χρόνο χαλάρωσης των καταστάσεων του $SQD - \tau_0 = 0.8ns$ και $T_{20} = 0.3ns$, αντί για $\tau_0 = 0.8ns * \frac{(35.94*10^{-3})eV}{2.5eV} \approx 11.5ps$ και $T_{20} = 0.3ns * \frac{(35.94*10^{-3})eV}{2.5eV} \approx 4.3ps$ 100
- 5.36 Απορρόφηση κοντά στο συντονισμό $SToP$ του $TINP$, μεταβάλλοντας το R με σταθερό $\mu = 0.65e * nm$, και με $\alpha = 10nm$. (α') Επίπεδο Fermi $E_F = +A/\alpha$. (β') Επίπεδο Fermi $E_F = -A/\alpha$ 101

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Με την ανάπτυξη της νανοτεχνολογίας και της χβαντικής πληροφορικής, αυξάνεται διαρκώς η ανάγκη για συστήματα στη νανοκλίμακα που να επιδεικνύουν ιδιαίτερη και χρήσιμη συμπεριφορά. Δύο θέματα που έχουν έντονο ενδιαφέρον για εφαρμογές είναι η ισχυρή σύζευξη και οι τοπολογικοί μονωτές, καθώς αμφότερα παρουσιάζουν ένα σύνολο από μοναδικές ιδιότητες.

Σε αυτή την εργασία, συνδυάζουμε δύο διαφορετικούς τομείς με σχετικά σύντομη ιστορία, αλλά με πολύ θετικές προοπτικές. Από την μία, έχουμε τους τοπολογικούς μονωτές και το νέο τοπολογικό πρότυπο κατηγοριοποίησης των φάσεων της ύλης. Οι τοπολογικοί μονωτές είναι μια κατηγορία υλικών που, ενώ στο εσωτερικό τους συμπεριφέρονται σαν κοινοί μονωτές, στην επιφάνεια τους συναντούμε αγώγιμες συνοριακές καταστάσεις, οι οποίες είναι χειραλικές και μπορούν να προστατεύονται από τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου. Αυτά τα μοναδικά χαρακτηριστικά τους καθιστούν πολύ ενδιαφέροντες για την έρευνα και για μελλοντικές εφαρμογές. [5] [4]

Από την άλλη, έχουμε τον τομέα της πλασμονικής, με τις ιδιαίτερες διεγέρσεις της που διακρίνονται, μεταξύ άλλων, για την ενίσχυση και χωρικό εντοπισμό πεδίου που μπορούν να παρέχουν. Καθώς μας παρέχουν σχετικά ισχυρή σύζευξη με την ύλη, τα πλασμονικά συστήματα μπορούν να μας επιτρέψουν να πετύχουμε ισχυρή σύζευξη ανάμεσα σε πλασμονικές και άλλες διεγέρσεις, όπως είναι τα εξιτόνια. Αυτή η σύζευξη δημιουργεί νέες, σύμφωνες υβριδικές καταστάσεις με ξεχωριστές ιδιότητες και ιδιαίτερο ενδιαφέρον για πολλές εφαρμογές. Σήμερα, στον τομέα της χβαντικής πλασμονικής, μπορούμε να εκμεταλλευτούμε αυτή τη συμπεριφορά και τα σχετικά φαινόμενα για πληθώρα συναρπαστικών εφαρμογών στη νανοτεχνολογία και στην χβαντική πληροφορική. [10]

Σε αυτή την εργασία, μελετούμε τη σύζευξη μεταξύ των διεγέρσεων ενός νανოსωματιδίου τοπολογικού μονωτή (*TINP*) και των εξιτονίων ενός χβαντικού εκπομπού. Στο νανოსωματίδιο εμφανίζονται και πλασμονικές διεγέρσεις, μία εκ των οποίων οφείλεται στην επίδραση των επιφανειακών καταστάσεων, και την οποία καλούμε επιφανειακό τοπολογικό πλασμόνιο, *SToP* [9]. Διαπιστώνουμε ότι η διέγερση αυτή μπορεί να συζεύγνυται ισχυρά με την εξιτονική διέγερση, δημιουργώντας μια νέα σύμφωνη υβριδική κατάσταση, την οποία καλούμε τοπολογικό πλεξιτόνιο. Πέραν τούτου, θα δούμε ότι εμφανίζονται και διάφορα άλλα φαινόμενα στο

σύστημα, τα οποία επίσης μπορεί να έχουν σημασία για μελλοντική έρευνα και εφαρμογές.

Δομή της Διπλωματικής

Σε αυτό το σημείο είναι καλό να περιγραφεί συνοπτικά η δομή αυτής της εργασίας, ώστε να γίνει κάπως πιο σαφής η πορεία που θα ακολουθήσουμε στα επόμενα κεφάλαια.

Στο δεύτερο κεφάλαιο, «Τοπολογικοί μονωτές», γίνεται μια σύντομη παρουσίαση σχετικά με την τοπολογική ύλη, με έμφαση στους τοπολογικούς μονωτές. Μετά από μια γενική εισαγωγή, ακολουθούμε μια πιο ιστορική πορεία μελέτης, ώστε να καταλάβουμε καλύτερα τον σύγχρονο και συναρπαστικό αυτό τομέα. Εδώ θα συναντήσουμε ορισμένες πολύ θεμελιώδεις έννοιες που θα μας βοηθήσουν να κατανοήσουμε βαθύτερα τα φαινόμενα που παρατηρούνται στο σύστημά μας.

Στο τρίτο κεφάλαιο, «Πλασμονική» ασχολούμαστε με τον τομέα της πλασμονικής, μελετώντας τις βασικές πλασμονικές διεγέρσεις και κάνοντας μια βασική ανάλυση του φαινομένου της ισχυρής σύζευξης και της πλεξιτονικής διέγερσης. Στο τέλος του κεφαλαίου πραγματοποιείται συζήτηση για τους παράγοντες που επηρεάζουν την ισχύ της σύζευξης και το μέγεθος του διαχωρισμού (splitting) σε ισχυρή σύζευξη. Όσα θα παρουσιαστούν εδώ θα μας φανούν εξαιρετικά χρήσιμα για την ανάλυση που θα ακολουθήσει.

Στην επόμενο κεφάλαιο, «Εξισώσεις», ασχολούμαστε με την εξαγωγή εξισώσεων για την απορρόφηση του συστήματος χβαντικού εκπομπού και νανοσωματιδίου τοπολογικού μονωτή. Η ανάλυση που πραγματοποιείται έχει πολύ μεγάλη σημασία, καθώς είναι απαραίτητο να καταλάβουμε τις προσεγγίσεις που γίνονται, και έτσι να γνωρίζουμε τις πιθανές αδυναμίες του μοντέλου. Με άλλα λόγια, είναι πολύ βασικό να κατανοήσουμε την ανάλυση ώστε να μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε το μοντέλο με σύνεση και να αξιολογήσουμε τα αποτελέσματα που λαμβάνουμε.

Οι εξισώσεις που εξάγονται χρησιμοποιούνται στο επόμενο κεφάλαιο, «Αριθμητικοί υπολογισμοί», για τη μελέτη της απορρόφησης του συστήματος. Αρχικά, γίνεται μια ξεχωριστή μελέτη για τον χβαντικό εκπομπό, και ακολούθως για τον τοπολογικό μονωτή, όπου παρατηρούμε τις βασικές διεγέρσεις του συστήματος και εξάγουμε ορισμένα πρώτα σημαντικά συμπεράσματα. Στη συνέχεια, μελετούμε την απορρόφηση στο αλληλεπιδρών σύστημα νανοσωματιδίου τοπολογικού μονωτή και χβαντικού εκπομπού, μεταβάλλοντας κάποιες παραμέτρους των σωματιδίων. Ειδικότερα, παρατηρούμε πώς επηρεάζει τη συμπεριφορά του συστήματος (και την ισχύ της σύζευξης) η απόσταση ανάμεσα στα νανοσωματίδια, όπως και η διπολική ροπή του χβαντικού εκπομπού για δύο διαφορετικές περιπτώσεις ακτίνας του *TiNP*. Στο τέλος, γίνεται μια συνοπτικότερη παρουσίαση των αποτελεσμάτων από τη μελέτη και πραγματοποιείται συζήτηση για την πιθανή σημασία τους.

Παρατίθεται και παράρτημα με τον βασικό κώδικα που χρησιμοποιήθηκε για τη μελέτη του συστήματος.

Κεφάλαιο 2

Τοπολογικοί μονωτές

Στις ακόλουθες σελίδες γίνεται μία παρουσίαση ορισμένων θεμελιωδών θεμάτων σχετικά με την τοπολογική ύλη, με έμφαση στους τοπολογικούς μονωτές. Για την καλύτερη κατανόηση του σύγχρονου και συναρπαστικού αυτού τομέα, τα διάφορα σημεία αυτού του κεφαλαίου θα παρουσιαστούν ακολουθώντας αδρά την ιστορική εξέλιξη του τομέα και την πρόοδο των τελευταίων δεκαετιών.

Οι βασικές έννοιες και τα φαινόμενα που θα παρουσιαστούν σε αυτό το κεφάλαιο θα μας βοηθήσουν, κατάρχάς, να αποκτήσουμε μια βαθύτερη εκτίμηση αλλά και διαίσθηση για τον πλούσιο, νέο κόσμο της τοπολογικής ύλης και των τοπολογικών μονωτών. Παράλληλα, αρκετά από όσα θα συναντήσουμε εδώ θα μας φανούν ιδιαίτερα χρήσιμα και στο κεφάλαιο «Αριθμητικοί υπολογισμοί» που αφορά το αλληλεπιδρών σύστημα νανοσωματιδίου τοπολογικού μονωτή και κβαντικού εκπομπού.

Προτού, όμως, περάσουμε σε μια πιο «ιστορική» προσέγγιση, καλό είναι να γίνει μια γενικότερη εισαγωγή στον τομέα. Το υλικό αυτού του κεφαλαίου έχει συγκεντρωθεί κυρίως από τις [5], [4] και [8].

Εισαγωγή

Ένα νέο «παράδειγμα» (*paradigm*)

Στη φυσική στερεάς κατάστασης, συχνά διακρίνουμε και κατηγοριοποιούμε τις διάφορες φάσεις της ύλης ως προς τις συμμετρίες που «σπάνε» αυθόρμητα κατά την αλλαγή φάσης. Κατά τον τρόπο μπορούμε να κατανοήσουμε για παράδειγμα τη σιδηρομαγνητική μετάβαση, κατά την οποία σπάει η περιστροφική συμμετρία, καθώς εμφανίζονται μαγνητικές περιοχές (*magnetic domains*) στις οποίες το σπιν είναι προσανατολισμένο κατά μία προτιμητέα κατεύθυνση. Κατά ανάλογο τρόπο, μπορούμε να κατανοήσουμε την υπεραγωγίμη κατάσταση μέσα από το αυθόρμητο σπάσιμο της συμμετρίας βαθμίδας $U(1)$. [4]

Υπάρχει, ωστόσο, τουλάχιστον μία κλάση υλικών και καταστάσεων της ύλης που αρνούνται να «συμμορφωθούν» με αυτόν τον τρόπο περιγραφής. Για τα υλικά αυτά, καλούμαστε να χρησιμοποιήσουμε ένα διαφορετικό τρόπο προσέγγισης: αντί να τα δούμε με όρους σπασμένων συμμετριών, ίσως μπορούμε να τα διακρίνουμε βλέποντας ποιες συμμετρίες ή χαρακτηριστικά

πρέπει να διατηρούνται ώστε να έχουμε ευσταθή κατάσταση. Με άλλα λόγια, ίσως μπορούμε να βρούμε κάποια κατάλληλη ποσότητα, η οποία να προσδιορίζει ή να χαρακτηρίζει την ίδια την κατάσταση.

Πράγματι, μία σημαντική κλάση υλικών και φάσεων, την οποία καλούμε «τοπολογική ύλη», μπορεί να προσδιοριστεί χρησιμοποιώντας κατάλληλες **τοπολογικές αναλλοιώτες** – ποσότητες αναλλοιώτες υπό ομαλούς μετασχηματισμούς. Η έννοια αυτή έρχεται φυσικά από τον μαθηματικό τομέα της τοπολογίας, ο οποίος μπορεί να μας προσφέρει μερικές χρήσιμες και διαισθητικές αναλογίες. Ένα απλό μαθηματικό παράδειγμα μιας τοπολογικής αναλλοιώτης είναι το γένος, το πλήθος των «οπών» που έχει μια επιφάνεια. Η ποσότητα αυτή παραμένει αναλλοιώτη όταν περιοριζόμαστε σε ομαλούς μετασχηματισμούς (παραμορφώσεις) της επιφάνειας. Για παράδειγμα, μπορούμε μέσω ομαλών παραμορφώσεων να μετατρέψουμε ένα τόρο σε ένα φλυτζάνι, ή μια σφαίρα σε μια μπανάνα (ή αντίστροφα), χωρίς να αλλάζει το πλήθος των οπών στην κάθε επιφάνεια.

Στη φυσική, έχουμε αντίστοιχους ομαλούς μετασχηματισμούς και ποσότητες που παραμένουν αναλλοιώτες κάτω από αυτούς. Αυτές οι ποσότητες λαμβάνουν συνήθως τιμές στους ακεραίους ή στους ρητούς και ανάλογα με την τιμή τους χαρακτηρίζουν διαφορετικές καταστάσεις της ύλης. Γενικά, γίνεται λόγος για υλικά ή φάσεις με «τετριμμένη» ή «μη τετριμμένη» τοπολογία, ανάλογα με τις τιμές αυτών των αναλλοιώτων. Οι τοπολογικοί μονωτές, οι οποίοι ανήκουν σε αυτή την ιδιόμορφη, τοπολογικά μη τετριμμένη κατηγορία υλικών, επίσης μπορούν να χαρακτηριστούν από τέτοιες αναλλοιώτες και παρουσιάζουν ορισμένες αρκετά συναρπαστικές ιδιότητες.

Βασικές ιδιότητες και χαρακτηριστικά

Οι τοπολογικοί μονωτές είναι υλικά τα οποία, όπως και οι συνήθεις μονωτές, διαθέτουν ένα ενεργειακό χάσμα, αλλά αντίθετα από αυτούς χαρακτηρίζονται από μη τετριμμένη τοπολογία. Όπως θα δούμε και στη συνέχεια, μια σημαντική διαφορά από τους κοινούς μονωτές είναι ότι διαθέτουν «τοπολογικά προστατευμένες» αγωγίμες καταστάσεις στην επιφάνεια (ή στο σύνορό) τους. Αυτό σημαίνει ότι οι τοπολογικοί μονωτές συμπεριφέρονται σαν κοινοί μονωτές στο εσωτερικό τους, αλλά σαν αγωγοί στην επιφάνειά τους.

Πρέπει, ωστόσο, να προσέξουμε ότι αυτές οι καταστάσεις έχουν μερικές πολύ ουσιαστικές διαφορές από τις καταστάσεις ενός κοινού αγωγού. Η πιο σημαντική διαφορά έγκειται ακριβώς στην «**τοπολογική προστασία**» αυτών των συνοριακών αγωγίμων καταστάσεων. Μάλιστα η ίδια «προστασία» είναι που διαχωρίζει την αγωγήμη επιφανειακή κατάσταση ενός τοπολογικού μονωτή από άλλες αγωγίμες επιφανειακές καταστάσεις που μπορεί να συναντώνται σε κοινούς μονωτές (ή ημιαγωγούς). Όπως θα δούμε, αυτές οι μοναδικές αγωγίμες καταστάσεις προκύπτουν λόγω ενός συνδυασμού αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιακού και συμμετρίας αντιστροφής του χρόνου στο υλικό.

Η έννοια, όμως, της «τοπολογικής προστασίας» είναι μάλλον κάπως στρυφνή και καλό είναι σε αυτό το σημείο να γίνουν ορισμένες διευκρινίσεις. Πολύ απλά, η τοπολογική προστασία αναφέρεται στο γεγονός ότι συνεχείς, ομαλές «παραμορφώσεις» κάποιων παραμέτρων του συστήματος δεν επηρεάζουν τις καταστάσεις αυτές – εξ ου και ο όρος «προστασία». Όπως

θα δούμε, ωστόσο, αυτή η προστασία δεν εκτείνεται σε κάθε τύπο παραμόρφωσης ή διαταραχής. Απεναντίας, οι συνοριακές καταστάσεις σε ένα τοπολογικό μονωτή διαθέτουν προστασία μόνο από τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου (TR symmetry) και από τη συμμετρία $U(1)$ (διατήρηση φορτίου).

Μια βασική συνέπεια αυτής της περιορισμένης προστασίας είναι ότι ορισμένες διαταραχές ή «παραμορφώσεις» είναι δυνατόν να καταστρέψουν τις επιφανειακές καταστάσεις του τοπολογικού μονωτή. Ειδικότερα, διαταραχές οι οποίες σπάνε τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου (όπως για παράδειγμα η εισαγωγή μαγνητικών προσμίξεων ή ατελειών στο υλικό) ή τη συμμετρία $U(1)$ μπορεί να καταστρέψουν τις συνοριακές καταστάσεις (ή γενικότερα να «αλλοιώσουν» τη συμπεριφορά τους). Από την άλλη, η προστασία αυτή έχει ήδη ορισμένες πολύ σημαντικές συνέπειες: διαταραχές οι οποίες υπακούουν τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου και τη συμμετρία $U(1)$ αναμένεται να αφήνουν την κατάσταση αναλλοίωτη. Έτσι, θα αναμέναμε, για παράδειγμα, ότι οι καταστάσεις είναι σχετικά «αναίσθητες» σε διαταραχές όπως μη μαγνητικές προσμίξεις, ανωμαλίες στο πλέγμα και στην επιφάνεια, και ενδεχομένως από την αλληλεπίδραση με ορισμένα άλλα συστήματα.

Ένα άλλο σημαντικό χαρακτηριστικό των τοπολογικών μονωτών είναι ότι αυτές οι ηλεκτρονικές επιφανειακές καταστάσεις είναι **χειραλικές (chiral)** – δηλαδή τα ηλεκτρόνια στις καταστάσεις αυτές χαρακτηρίζονται από χειραλικότητα. Με απλά λόγια, τα ηλεκτρόνια στις καταστάσεις αυτές ακολουθούν πολύ συγκεκριμένες τροχιές στο σύνορο ανάλογα με το σπιν τους. Στον απλό τοπολογικό μονωτή 2D, για παράδειγμα, θα δούμε ότι τα ηλεκτρόνια με σπιν «πάνω» ακολουθούν αντίθετη τροχιά από αυτή των ηλεκτρονίων με σπιν «κάτω» στο σύνορο του υλικού. Γενικότερα, για τοπολογικούς μονωτές 3D μπορούμε να πούμε ότι έχουμε «κλείδωμα» σπιν και ορμής spin-momentum locking – συγκεκριμένες καταστάσεις σπιν συνδέονται άρρηκτα με συγκεκριμένες τροχιές στο σύνορο του υλικού (και με συγκεκριμένες ορμές στον ανάστροφο χώρο).

Όπως και η τοπολογική προστασία, και η χειραλικότητα των καταστάσεων έχει σημαντικές συνέπειες για το σύστημα. Ειδικότερα, μπορούμε να αναμένουμε ότι οι καταστάσεις αυτές δεν μπορούν να επιτρέπουν (ελαστικές) οπισθοσκεδάσεις, αφού αντιστρέφοντας την ορμή των ηλεκτρονίων ενός συγκεκριμένου σπιν, δε θα υπάρχουν κατάλληλες διαθέσιμες καταστάσεις για να πραγματοποιηθεί αυτή τη μετάβαση. Και αυτή είναι μια πολύ ενδιαφέρουσα παρατήρηση: αυτό υποδεικνύει ότι οι καταστάσεις αυτές αναμένεται να παρουσιάζουν αρκετά ψηλή αγωγιμότητα. Μάλιστα, σε θερμοκρασία $T = 0K$ περιμένουμε οι καταστάσεις να είναι τέλεια αγωγίμες, καθώς αγνοούμε την επίδραση ανελαστικών σχεδάσεων με το πλέγμα. Σε θερμοκρασίες $T > 0K$, ωστόσο, στο σύστημα υφίστανται και ανελαστικές διαδικασίες, οι οποίες θα μειώνουν την αγωγιμότητα των καταστάσεων και ως εκ τούτου είναι κάτι που οφείλουμε να έχουμε υπόψιν μας.

Είναι καλό να παρατηρήσουμε ότι η χειραλικότητα των επιφανειακών ηλεκτρονικών καταστάσεων αποτελεί και μια έκφραση της συμμετρίας αντιστροφής του χρόνου στο σύστημα. Το γεγονός αυτό είναι αρκετά εμφανές στον 2D τοπολογικό μονωτή, αφού εύκολα μπορούμε να δούμε ότι «αντιστρέφοντας» το χρόνο, και άρα αντιστρέφοντας τις ταχύτητες και τα σπιν του συστήματος, το σύστημα που παίρνουμε είναι ταυτόσημο με το αρχικό. Κάτι ανάλογο

συμβαίνει και στην περίπτωση του 3D τοπολογικού μονωτή: το «κλείδωμα» σπιν και ορμής είναι τέτοιο ώστε αν αντιστρέψουμε το χρόνο το σύστημα παραμένει αναλλοίωτο.

Σημασία και πιθανές εφαρμογές.

Έχοντας συζητήσει για αυτά τα λίγα, πολύ βασικά σημεία, θα έχει ήδη καταστεί σαφές ότι η τοπολογική ύλη και οι τοπολογικοί μονωτές συνθέτουν ένα καινούργιο και συναρπαστικό τοπίο για την έρευνα, με πολλές πιθανές μελλοντικές κατευθύνσεις και θετικές προοπτικές για νέες εφαρμογές.

Για τους τοπολογικούς μονωτές μπορούμε, για παράδειγμα, να περιμένουμε ότι η τοπολογική προστασία που επιδεικνύουν αυτές οι καταστάσεις θα είναι χρήσιμη για εφαρμογές στην κβαντική πληροφορική όπου είναι σημαντική η μετάδοση πληροφορίας χωρίς απώλειες. Το ίδιο μπορεί να λεχθεί και για εφαρμογές όπου έχει σημασία το σύστημα να παρουσιάζει όσο το δυνατόν λιγότερες απώλειες πληροφορίας ή/και να είναι αναισθητο σε εξωτερικές διαταραχές. Από την άλλη, η χειραλικότητα των καταστάσεων μπορεί να έχει ενδιαφέρουσες συνέπειες στον τομέα της σπιντρονικής (spintronics, από το "spin transport electronics").

Εκτενέστερα, η έρευνα στον τομέα έχει ήδη φέρει στο φως ακόμη περισσότερες νέες φάσεις της ύλης και διαφορετικά φαινόμενα, όπως είναι οι τοπολογικοί υπεραγωγοί και η δυνατότητα δημιουργίας φερμιονίων Majorana, που επίσης υπόσχονται νέες εφαρμογές και ανοίγουν το δρόμο για ακόμα περισσότερη έρευνα. Ακόμη γενικότερα, το νέο τοπολογικό πρότυπο μας έχει προσφέρει ένα εντελώς καινούργιο κόσμο για τη μελέτη της ύλης, με ενδεχομένως πολλές συναρπαστικές εξελίξεις και ανακαλύψεις τόσο στη θεωρία, όσο και στις εφαρμογές να μας περιμένουν στο μέλλον.

Έχοντας κάνει αυτή τη μικρή εισαγωγή, θα περάσουμε σε μια πιο «ιστορική» (και ενδελεχέστερη) παρουσίαση του τομέα, ώστε να αποκτήσουμε μια βαθύτερη κατανόηση για το αντικείμενο.

Τοπολογική θεωρία ζωνών

Θεωρία ζωνών και (συνήθεις) μονωτές

Προτού μιλήσουμε για τους τοπολογικούς μονωτές, πρέπει πρώτα να γίνουν ορισμένες υπενθυμίσεις σχετικά με τη θεωρία ζωνών και το πώς αυτή χρησιμοποιείται για να περιγράψει τη συνήθη μονωτική κατάσταση.

Σε ένα συνήθη μονωτή, τα ηλεκτρόνια είναι δέσμια στα άτομα του υλικού και, ως εκ τούτου, οι τροχιές τους είναι ιδιαίτερα εντοπισμένες. Το χαρακτηριστικό τους αυτό έχει ως αποτέλεσμα, μεταξύ άλλων, οι μονωτές να μην είναι καλοί αγωγοί του ηλεκτρισμού. Αυτή η περιγραφή, αν και σχετικά κομψή, δεν είναι παρά μία απλή διαισθητική περιγραφή για την κατανόηση της συμπεριφοράς ενός μονωτή. Μια βαθύτερη κατανόηση μπορεί να επιτευχθεί χρησιμοποιώντας τη θεωρία ζωνών, η οποία αποτελεί και μία από τις μεγαλύτερες επιτυχίες στη φυσική στερεάς κατάστασης του περασμένου αιώνα.

Σύμφωνα με τη θεωρία ζωνών, για ένα απλό κρύσταλλο που παρουσιάζει (άπειρη) χωρική περιοδικότητα, βρίσκουμε ως λύσεις της εξίσωσης Schrödinger καταστάσεις Bloch, $|u_n(\mathbf{k})\rangle$, οι οποίες αποτελούν ιδιοκαταστάσεις της χαμιλτονιανής του κρυστάλλου $H(\mathbf{k})$. Για κάθε \mathbf{k} , έχουμε ένα σύνολο από ιδιοτιμές ενέργειας $E_n(\mathbf{k})$, οι οποίες, τελικά, αποτελούν συνεχείς συναρτήσεις του \mathbf{k} . Αυτές οι συναρτήσεις διασποράς ορίζουν μια σειρά από ενεργειακές «ζώνες», οι οποίες, με τη σειρά τους, ορίζουν συλλογικά την ενεργειακή δομή του υλικού.

Έτσι, λοιπόν, στον όγκο του υλικού τα ηλεκτρόνια διατάσσονται σε ενεργειακές δομές που θυμίζουν ζώνες. Κάποιες από αυτές τις ζώνες είναι κατειλημμένες, ορίζοντας τη «ζώνη σθένους», ενώ οι ανώτερες ζώνες, οι οποίες είναι άδειες, ορίζουν μια «ζώνη αγωγιμότητας». Ανάμεσα στις δύο αυτές ζώνες διακρίνουμε ένα ενεργειακό χάσμα, E_g , όπου δεν υπάρχουν ενεργειακές καταστάσεις.

Σε αυτό το σημείο αξίζει να εισάγουμε σύντομα την έννοια της κλάσης ισοδυναμίας. Γενικά, δύο διαφορετικά στοιχεία a, b ενός συνόλου ανήκουν στην ίδια κλάση ισοδυναμίας ή είναι ισοδύναμα εάν υπάρχει κάποια «σχέση ισοδυναμίας» \sim μεταξύ τους. Μία σχέση ισοδυναμίας πρέπει να είναι ανακλαστική ($a \sim a$), συμμετρική ($a \sim b \Leftrightarrow b \sim a$) και μεταβατική ($a \sim b, b \sim c \Rightarrow a \sim c$), για τυχαία στοιχεία του συνόλου a, b, c .

Στην τοπολογία, κατηγοριοποιούμε συχνά τα διάφορα σχήματα με βάση ομαλούς μετασχηματισμούς. Ειδικότερα, εάν ένα σχήμα μπορεί να παραμορφωθεί ομαλά (δηλαδή χωρίς να δημιουργήσουμε τρύπες) σε κάποιο άλλο, τότε λέμε ότι τα δύο σχήματα είναι τοπολογικά ισοδύναμα. Αντίστοιχα, όλα τα σχήματα τα οποία μπορούν να παραχθούν με τέτοιους ομαλούς μετασχηματισμούς θα ορίζουν μία (τοπολογική) κλάση ισοδυναμίας, με όλα τα σχήματα που ανήκουν σε αυτή να είναι (τοπολογικά) ισοδύναμα. Η μαθηματική αυτή ιδέα μπορεί να γενικευτεί και στον κόσμο της φυσικής, για να κατηγοριοποιήσουμε τα υλικά σε διαφορετικές «κλάσεις ισοδυναμίας» ή, καλύτερα, φάσεις.

Μία τέτοια κλάση ισοδυναμίας μπορούμε να διακρίνουμε στην περίπτωση των διαφορετικών μονωτών και ημιαγωγών. Ειδικότερα, παρατηρούμε ότι τόσο οι συνήθεις μονωτές όσο και οι ημιαγωγοί παρουσιάζουν όμοια ενεργειακή δομή, με μόνη βασική διαφορά το μέγεθος του ενεργειακού χάσματος ανάμεσα στις ζώνες σθένους και αγωγιμότητας. Έτσι, μπορούμε να φανταστούμε να παραμορφώνουμε κατάλληλα τη μία δομή (με ομαλούς μετασχηματισμούς της χαμιλτονιανής), χωρίς να κλείνουμε το χάσμα, για να καταλήξουμε σε κάποια άλλη. Με βάση όλα τα προηγούμενα, θα μπορούσαμε, λοιπόν, να πούμε ότι τα υλικά αυτά ορίζουν μία κλάση ισοδυναμίας – δηλαδή ανήκουν στην πραγματικότητα στην ίδια «φάση».

Και πράγματι, όπως θα δούμε στη συνέχεια, σύμφωνα με ένα τοπολογικό πρότυπο διάκρισης, οι συνήθεις μονωτές και ημιαγωγοί όλοι εντάσσονται στην ίδια τοπολογική κλάση ισοδυναμίας – πρόκειται δηλαδή για την ίδια «φάση» – κάτι το οποίο αντικατοπτρίζεται και από την τοπολογική αναλλοίωτη που χαρακτηρίζει τις καταστάσεις αυτές. Ειδικότερα, μπορούμε να πούμε ότι τέτοιες καταστάσεις είναι ισοδύναμες με την κατάσταση «κενού» στη σχετικιστική κβαντική θεωρία Dirac, η οποία σύμφωνα με μια ερμηνεία (θάλασσα Dirac) παρουσιάζει ένα ενεργειακό χάσμα ανάμεσα σε μια «ζώνη σθένους» και σε μια «ζώνη αγωγιμότητας», δομή ανάλογη με αυτή ενός μονωτή/ημιαγωγού.

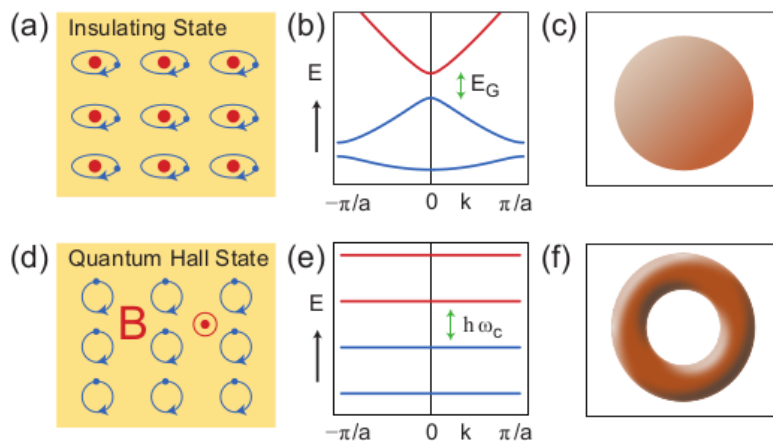
Διαισθητικά θα αναμέναμε, ίσως, ότι όλες οι ενεργειακές δομές με ενεργειακό χάσμα θα

έπρεπε να είναι ισοδύναμες με το κενό. Κι όμως, όπως συμβαίνει συχνά στη φυσική, αυτή είναι άλλη μια περίπτωση όπου η διαίσθησή μας μπορεί να μας εξαπατήσει.

Κβαντική κατάσταση Hall

Ένα ιδιαίτερο φαινόμενο. Η κβαντική κατάσταση Hall είναι ίσως το απλούστερο παράδειγμα μιας κατάστασης με ενεργειακό χάσμα, η οποία όμως δεν είναι ισοδύναμη με το κενό. Το γεγονός αυτό είναι αρκετά εντυπωσιακό, καθώς, όπως θα δούμε, η ενεργειακή δομή της κατάστασης αυτής είναι ουσιαστικά η ίδια με αυτή ενός μονωτή.

Προτού μιλήσουμε για το κβαντικό φαινόμενο Hall, καλό είναι να γίνει μια υπενθύμιση του κλασικού φαινομένου Hall, όπως συναντάται σε ηλεκτρικά αγωγίμα μέσα. Στο κλασικό φαινόμενο Hall, εφαρμογή μαγνητικού πεδίου κάθετου στη διεύθυνση ροής ρεύματος σε ένα αγωγό έχει ως αποτέλεσμα τη δημιουργία μίας διαφοράς δυναμικού «εγκάρσια» στη ροή του ρεύματος, δηλαδή κάθετα στη ροή ρεύματος και κάθετα στο εφαρμοζόμενο πεδίο. Το φαινόμενο αυτό οφείλεται στη μετατόπιση των ηλεκτρικών φορέων παρουσία του μαγνητικού πεδίου – οι φορείς δέχονται μία δύναμη Lorentz που «σπρώχνει» τους φορείς στη μία πλευρά του αγωγού.



Σχήμα 2.1: Άνω σειρά: τοπολογικά τετριμμένη κατάσταση, κοινός μονωτής. Κάτω σειρά: κβαντική κατάσταση Hall. Στην τρίτη στήλη φαίνεται το μαθηματικό ανάλογο της τοπολογικής αναλλοίωτης για την κάθε περίπτωση (γένος). [πηγή: [5]]

Το κβαντικό φαινόμενο Hall είναι το κβαντομηχανικό ανάλογο του κλασικού φαινομένου Hall. Το φαινόμενο παρατηρείται σε διδιάστατα ηλεκτρονικά συστήματα τα οποία βρίσκονται σε αρκετά ισχυρό μαγνητικό πεδίο και σε επαρκώς χαμηλή θερμοκρασία. Όπως θα περιμέναμε και διαισθητικά, το εφαρμοζόμενο μαγνητικό πεδίο εξαναγκάζει τα ηλεκτρόνια να κινούνται σε καθορισμένες κυκλικές τροχιές. Προκύπτει, έτσι, ότι τα ηλεκτρόνια στο σύστημα αυτό μπορούν να καταλαμβάνουν μόνο κβαντισμένες καταστάσεις ενέργειας, τις οποίες καλούμε «επίπεδα Landau»: $E_m = \hbar\omega_c(m + 1/2)$, $m \in \mathbb{N}^0$.

Το ενδιαφέρον εδώ είναι πως και η εγκάρσια αγωγιμότητα Hall (δηλαδή στο επίπεδο xy)

του συστήματος καθίσταται κβαντισμένη, παίρνοντας τιμές:

$$\sigma_{xy} = n \frac{e^2}{h}, \quad n \in \mathbb{N}$$

Μάλιστα, η κβάντιση της αγωγιμότητας έχει επιβεβαιωθεί και πειραματικά με ιδιαίτερα υψηλή ακρίβεια.

Όπως μπορούμε εύκολα να διαπιστώσουμε, η ενεργειακή δομή που προκύπτει από την εφαρμογή του μαγνητικού πεδίου είναι ισοδύναμη με αυτή ενός κοινού μονωτή: αποτελούμενη από ένα σύνολο κατειλημμένων επιπέδων Landau (τη ζώνη σθένους), που διαχωρίζεται από ανώτερες, μη κατειλημμένες ζώνες (τη ζώνη αγωγιμότητας) με ένα ενεργειακό διάκενο $\hbar\omega_c$. Πώς, τότε, από αυτήν τη φαινομενικά τετριμμένη δομή ενός κοινού μονωτή αναδύεται μια τόσο ιδιόμορφη συμπεριφορά;

Η τοπολογική αναλλοίωτη TKNN. Όπως περιέγραψαν οι Thouless, Kohmoto, Nightingale και den Nijs (TKNN) στη δημοσίευσή τους το 1982, μπορούμε να κατανοήσουμε αυτή την ιδιαίτερη, αιγιματική κατάσταση χρησιμοποιώντας τοπολογία.

Ειδικότερα, μπορούμε να ακολουθήσουμε μία κατηγοριοποίηση των ενεργειακών δομών των υλικών χρησιμοποιώντας κατάλληλες τοπολογικές αναλλοιώτες (ποσότητες αναλλοιώτες υπό ομαλούς μετασχηματισμούς). Μπορούμε να δούμε ότι το διάγραμμα ζωνών του διδιάστατου συστήματος είναι ουσιαστικά μία απεικόνιση από την κρυσταλλική ορμή \vec{k} στη χαμιλτονιανή Bloch $H(\vec{k})$ του πλέγματος.

Μπορούμε, τελικά, να θεωρήσουμε την κλάση ισοδυναμίας όλων των ενεργειακών δομών ($H(k)$) οι οποίες, μέσω ομαλών μετασχηματισμών (σχέση ισοδυναμίας), να διατηρούν το ενεργειακό χάσμα τους. Έτσι, οι διάφορες κλάσεις ισοδυναμίας χαρακτηρίζονται από μια τοπολογική αναλλοίωτη που παίρνει τιμές στους ακεραίους και καλείται αναλλοίωτη (ή αριθμός) Chern, n . Η φυσική σημασία της σταθεράς αυτή μπορεί να κατανοηθεί μέσω της φάσης Berry που σχετίζεται με τις κυματοσυναρτήσεις Bloch $|u_m(\vec{k})\rangle$ – η οποία, πολύ γενικά, είναι μια φάση που αποκτά η κατάσταση του συστήματος όταν υπόκειται σε μια κυκλική, αδιαβατική διαδικασία.

Ειδικότερα, όταν το \vec{k} διατρέχει ένα κλειστό βρόχο, τότε η κατάσταση Bloch αποκτά μια φάση Berry, ϕ_B , η οποία δίνεται από το επικαμπύλιο ολοκλήρωμα: $\phi_B = \oint_C A_m dk$, όπου $A_m \equiv i \langle u_m | \nabla_{\vec{k}} | u_m \rangle$. Μέσω του θεωρήματος Stokes, μπορούμε να γράψουμε ισοδύναμα το ολοκλήρωμα αυτό ως ένα επιφανειακό ολοκλήρωμα σε μια κλειστή επιφάνεια με σύνορο την (κλειστή) καμπύλη διαδρομής του \vec{k} , δηλαδή $\phi_B = \int_S F_m d^2k$, όπου $F_m = \nabla \times A_m$ η καμπυλότητα Berry (Berry flux).

Το αναλλοίωτο Chern είναι, τελικά, η συνολική ροή της καμπυλότητας Berry στην πρώτη ζώνη Brillouin, αθροιζόμενη σε όλες τις κατειλημμένες ζώνες (m):

$$n = \sum_{m=1}^N n_m = \sum_{m=1}^N \frac{1}{2\pi} \int_{B.Z.} F_m d^2k,$$

όπου η ποσότητα n_m για την κάθε ζώνη επίσης παίρνει ακέραιες τιμές. Η συμπεριφορά αυτή δεν είναι παρά μια ακόμα έκφραση του τοπολογικού χαρακτήρα της κατάστασης Hall.

Πέραν τούτου, ένα ενδιαφέρον αποτέλεσμα που προκύπτει είναι ότι η σταθερά N στην προηγούμενη έκφραση για την αγωγιμότητα Hall ταυτίζεται τελικά με την αναλλοίωτη Chern, n . Ως εκ τούτου, μπορούμε να δούμε ότι η κβαντική κατάσταση Hall χαρακτηρίζεται, έτσι, από ένα αριθμό Chern $n = 1$, ενώ η τετριμμένη κατάσταση ενός συνήθους μονωτή από την τιμή $n = 0$. Το γεγονός αυτό επιδεικνύει με πολύ όμορφο τρόπο το πώς αφηρημένες μαθηματικές έννοιες, όπως οι τοπολογικές αναλλοιώτες, μπορούν να περιγράφουν με κομψό τρόπο τη συμπεριφορά ενός πραγματικού φυσικού συστήματος.

Το μοντέλο του Haldane

Για την καλύτερη κατανόησή όσων θα ακολουθήσουν, βοηθάει να κάνουμε μια σύντομη αναφορά και στο μοντέλο του Haldane, το οποίο περιγράφει τη συμπεριφορά του γραφενίου σε ένα περιοδικό μαγνητικό πεδίο. Το ενδιαφέρον είναι ότι και στο γραφένιο μπορεί να εμφανίζεται ένα κβαντικό φαινόμενο Hall με την εφαρμογή μαγνητικού πεδίου.

Η ηλεκτρονική δομή του γραφενίου παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον, με τη ζώνη σθένους και τη ζώνη αγωγιμότητας να «αγγίζουν» σε δύο διαφορετικά σημεία (\vec{K} και $-\vec{K}$) στην πρώτη ζώνη Brillouin, τα καλούμενα σημεία Dirac. Κοντά στα σημεία Dirac, η σχέση διασποράς των ηλεκτρονίων είναι όμοια με τη γραμμική σχέση διασποράς άμαζων σχετικιστικών σωματιδίων από την εξίσωση Dirac. Ως εκ τούτου, σχετικά με τα σημεία αυτά, γίνεται λόγος για «άμαζα φερμιόνια Dirac».

Ο εκφυλισμός στο σημείο Dirac προστατεύεται από τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου \mathcal{T} , αλλά και από τη συμμετρία αναστροφής του χώρου \mathcal{P} (ομοτιμία/parity). Όταν σπάμε κάποια από αυτές τις συμμετρίες, αναμένουμε ότι θα αίρεται ο εκφυλισμός, «ανοίγοντας» ένα ενεργειακό χάσμα στη δομή του γραφενίου.

Και πράγματι, όταν σπάμε τη συμμετρία \mathcal{P} , για παράδειγμα αν έχουμε ανόμοια άτομα στη μοναδιαία κυψελίδα, εμφανίζεται ένα χάσμα στη δομή του γραφενίου. Σε αυτή την περίπτωση, η κατάσταση που προκύπτει εξακολουθεί να υπακούει τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου και είναι, τελικά, ισοδύναμη με την κατάσταση ενός απλού μονωτή.

Από την άλλη, κάτι πραγματικά συναρπαστικό συμβαίνει όταν επιλέγουμε να σπάσουμε τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου, για παράδειγμα εφαρμόζοντας ένα περιοδικό μαγνητικό πεδίο. Αν και η κατάσταση που παίρνουμε έχει μεν επίσης ένα διάκενο, η κατάσταση αυτή είναι αγωγήμη, με μια χαρακτηριστική αγωγιμότητα Hall $\sigma_{xy} = e^2/h$.

Ποια είναι, λοιπόν, η διαφορά από την πρώτη περίπτωση; Στην πρώτη περίπτωση, όταν αίρεται ο εκφυλισμός τα δύο σημεία Dirac αποκτούν ίσες μάζες m , ενώ στη δεύτερη πρέπει να έχουν αντίθετες τιμές λόγω της \mathcal{P} (δηλαδή $m, -m$ για το κάθε σημείο Dirac). Η βασική συνέπεια των διαφορετικών μαζών, είναι ότι τώρα επιτρέπονται αγωγήμες καταστάσεις στο σύστημα – αν και αυτό δεν είναι μια καθόλου τετριμμένη διαπίστωση. Το γεγονός αυτό καθίσταται εμφανές αν βρούμε την τιμή της τοπολογικής αναλλοίωτης n για το συγκεκριμένο σύστημα. Ειδικότερα, όταν οι δύο μάζες είναι ίσες, τότε οι συνεισφορές τους στην αγωγιμότητα αλληλοαναιρούνται. Απεναντίας, όταν οι δύο μάζες είναι αντίθετες, παίρνουμε δύο ίσες συνεισφορές στην αγωγιμότητα, δίνοντάς μας μια μη μηδενική αγωγιμότητα. Έτσι, και

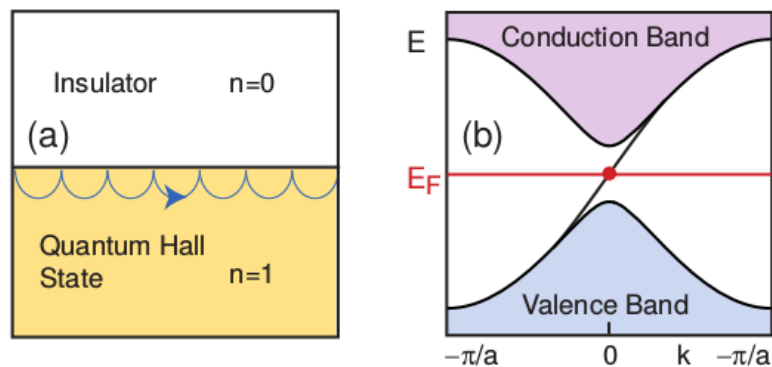
σε αυτό το σύστημα μπορούμε να δούμε ότι η ιδιόμορφη αυτή συμπεριφορά πάλι εξηγείται μέσω της τοπολογίας.

Συνοριακές καταστάσεις και αντιστοιχία εσωτερικού-συνόρου

Βάσει της τοπολογικής διάκρισης των διαφόρων δομών με διάκενο, μπορούμε να κάνουμε μια πολύ σημαντική παρατήρηση για συστήματα όπου έχουμε διεπιφάνειες μεταξύ υλικών (φάσεων) διαφορετικής τοπολογικής αναλλοίωτης. Ειδικότερα, μπορούμε να κάνουμε τη συναρπαστική πρόβλεψη πως σε τέτοιες διεπιφάνειες θα πρέπει να υπάρχουν συνοριακές (επιφανειακές) αγώγιμες καταστάσεις.

Για παράδειγμα, έστω πως έχουμε μια απλή επίπεδη διεπιφάνεια ανάμεσα σε μια κατάσταση Hall ($n = 1$) και ένα απλό μονωτή ($n = 0$). Είναι, τώρα, γνωστό πως η αγωγιμότητα Hall δεν μπορεί να αλλάξει, εκτός αν το ενεργειακό χάσμα με κάποιο τρόπο κλείσει και ξανανοίξει. Έπεται, λοιπόν, πως κάπου στην περιοχή του συνόρου θα πρέπει το ενεργειακό χάσμα να εξαφανίζεται, αλλιώς θα ήταν αδύνατο να μεταβληθεί η τοπολογική σταθερά από τη μία φάση στην άλλη. Αν και αυτό είναι ένα σχετικά απλό επιχείρημα, υπάρχουν και αυστηρότερες διατυπώσεις του ίδιου συμπεράσματος.[4][5]

Μια επιπλέον πρόβλεψη για τις συνοριακές καταστάσεις της κατάστασης Hall είναι ότι θα πρέπει να είναι χειραλικές. Το ίδιο ιδιαίτερο χαρακτηριστικό θα συναντήσουμε και αργότερα, όταν ασχοληθούμε με πιο σύνθετες περιπτώσεις. Όπως έχει σημειωθεί και στην εισαγωγή, η χειραλικότητα των καταστάσεων έχει μερικές πολύ ενδιαφέρουσες συνέπειες για τη συμπεριφορά του συστήματος.



Σχήμα 2.2: (α) Απεντοπισμένες τροχιές στη διεπιφάνεια τοπολογικά τετριμμένου ($n = 0$) και μη τετριμμένου υλικού ($n = 1$). (β) Η σχέση διασπορά των επιφανειακών καταστάσεων στο κβαντικό φαινόμενο Hall [πηγή: [5]]

Τώρα, ας δούμε λίγο καλύτερα τις συνοριακές καταστάσεις για την απλή περίπτωση του κβαντικού φαινομένου Hall. Σε αυτή την περίπτωση, μπορούμε να φανταστούμε τα ηλεκτρόνια (παρουσία μαγνητικού πεδίου) να «πηδάνε» από τη μια κυκλοτρονική τροχιά στην άλλη στο σύνορο, σχηματίζοντας έτσι μια απεντοπισμένη, επιφανειακή (συνοριακή) κατάσταση. Αν δούμε και τη σχέση διασποράς όπως μπορεί να εξαχθεί από το μοντέλο του Haldane (το (α)

στο σχήμα 2.2), διαπιστώνουμε ότι πράγματι εμφανίζονται κάποιες καταστάσεις οι οποίες χαρακτηρίζονται από μια σταθερή ταχύτητα ομάδας $dE/dq_x = +\hbar v_F$. Αυτό ορίζει μια χειραλική κατάσταση των ηλεκτρονίων, όπου αυτά κινούνται δεξιόστροφα στο σύνορο.

Στην προηγούμενη περίπτωση είχαμε μόνο μία χειραλική κατάσταση, αν και γενικότερα μπορεί να παρουσιάζονται περισσότερες από μία σε ένα σύστημα. Ειδικότερα, το πλήθος των δεξιόστροφων (N_R) και αριστερόστροφων (N_L) καταστάσεων σχετίζεται άμεσα με τις τοπολογικές αναλλοίωτες των δύο φάσεων, όπως εκφράζεται και στην περίφημη σχέση αντιστοιχίας εσωτερικού-συνόρου:

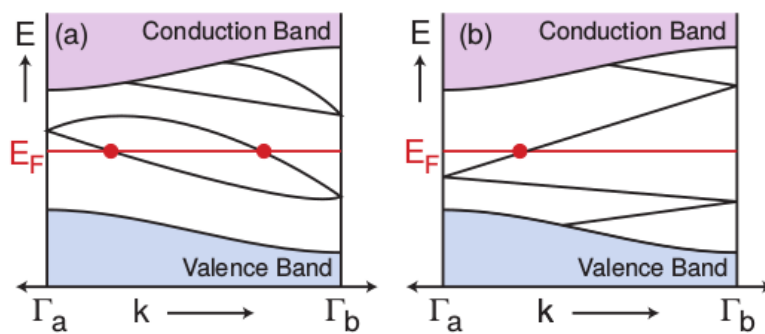
$$N_R - N_L = \Delta n,$$

όπου Δn η διαφορά ανάμεσα στις αναλλοίωτες των δύο υλικών. Το πλήθος των δεξιόστροφων και αριστερόστροφων καταστάσεων μπορεί να μεταβάλλεται, αλλά πάντα με τρόπο τέτοιο ώστε τα πλήθη τους να υπακούουν τη σχέση αυτή.

Τοπολογικός μονωτής Z_2

Οι προηγούμενες καταστάσεις που αναφέρθηκαν (χβαντική κατάσταση Hall, μελέτες στο γραφένιο) απαιτούσαν το σπάσιμο της συμμετρίας \mathcal{T} . Κι όμως, είναι δυνατόν να έχουμε μια μη τετριμμένη τοπολογική φάση διατηρώντας τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου. Η βασική ιδέα έγκειται στο ότι το ρόλο του μαγνητικού πεδίου ίσως να μπορούν να παίξουν οι αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιακού στο υλικό. Το μοντέλο του Z_2 τοπολογικού μονωτή (ή τοπολογικής τάξης Z_2) περιγράφει ακριβώς την περίπτωση όπου αυτό συμβαίνει, και είναι αρκετά χρήσιμο να δούμε σύντομα ορισμένα βασικά συμπεράσματα.

Πάλι, μπορούμε να ορίσουμε τις κλάσεις ισοδυναμίας των χαμιλτονιανών μέσω της σχέσης ισοδυναμίας ομαλών παραμορφώσεων που διατηρούν το ενεργειακό χάσμα. Εδώ, όμως, πέραν της αναλλοίωτης $TKNN$, n , προκύπτει μια επιπλέον αναλλοίωτη ν , την οποία καλούμε αναλλοίωτη Z_2 .



Σχήμα 2.3: Αριστερά: Το επίπεδο Fermi τέμνει τις επιφανειακές καταστάσεις ένα άρτιο πλήθος φορών, οπότε δεν έχουμε τοπολογική προστασία (τετριμμένη κατάσταση). Δεξιά: Το επίπεδο Fermi τέμνει τις επιφανειακές καταστάσεις ένα περιττό πλήθος φορών, οπότε εδώ έχουμε τοπολογική προστασία (τοπολογικός μονωτής). [πηγή: [5]]

Όπως είδαμε, η αναλλοίωτη $TKNN$ περιέχει πληροφορία σχετικά με το πλήθος των

χειραλικών καταστάσεων στο σύστημα. Από την άλλη, η αναλλοίωτη Z_2 μπορεί να μας δώσει μια επίσης πολύ χρήσιμη πληροφορία για το σύστημα, και σχετίζεται με το πόσες φορές η ενέργεια Fermi «τέμνει» τις επιφανειακές καταστάσεις. Όταν αυτό το πλήθος είναι άρτιο, τότε η κατάσταση που προκύπτει είναι ισοδύναμη με ένα κοινό μονωτή. Απεναντίας, όταν το πλήθος είναι περιττό, η κατάσταση είναι μη τετριμμένη και οι καταστάσεις έχουν τοπολογική προστασία. Ισχύει, μάλιστα:

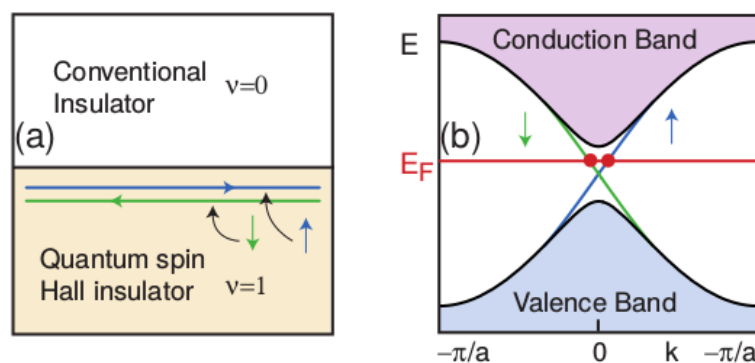
$$N_K = \Delta\nu \text{ mod } 2$$

όπου N_K το πλήθος των τομών με το επίπεδο Fermi και $\Delta\nu$ η διαφορά της τοπολογικής αναλλοίωτης Z_2 ανάμεσα στις φάσεις της διεπιφάνειας. Ως εκ τούτου, ένας απλός μονωτής θα έχει $\nu = 0$, ενώ ένας τοπολογικός μονωτής θα έχει αναλλοίωτη $\nu = 1$.

Τοπολογικός μονωτής 2Δ

Η βασική ιδέα στους τοπολογικούς μονωτές είναι ότι το ρόλο του μαγνητικού πεδίου (όπως στο χβαντικό φαινόμενο Hall) τον παίζει τώρα η αλληλεπίδραση σπιν-τροχιακού στο υλικό. Σε πρώτο, στάδιο, φαίνεται φυσικό να θεωρήσουμε τις συνέπειες αυτής της αλληλεπίδρασης σε δύο διαστάσεις, δηλαδή να δούμε ένα τοπολογικό μονωτή δύο διαστάσεων (επίσης γνωστός και σαν «σπιν-χβαντικός μονωτής Hall» (Quantum Spin Hall Insulator) στη βιβλιογραφία).

Το πρώτο πράγμα που πρέπει να προσέξουμε είναι ότι ο φορέας αγωγιμότητας, το ηλεκτρόνιο, είναι ένα σωματίδιο με σπιν $1/2$ – και άρα προβολή σπιν σε κάποιο άξονα (z) $\pm 1/2$ – οπότε διαισθητικά θα αναμέναμε να έχουμε τώρα δύο διαφορετικές φορές ρεύματος, μία για κάθε τύπο σπιν. Γίνεται, λοιπόν, λόγος για «κλείδωμα» σπιν και ορμής, αφού το κάθε ρεύμα χαρακτηρίζεται από διαφορετική φορά. Θα μπορούσαμε να δούμε αυτό το ιδιαίτερο χαρακτηριστικό σαν μία έκφραση της συμμετρίας αντιστροφής του χρόνου στο σύστημά μας (αντιστροφή των ταχυτήτων και σπιν αφήνει το σύστημα αναλλοίωτο).



Σχήμα 2.4: Αριστερά: Οι χειραλικές, επιφανειακές καταστάσεις στη διεπιφάνεια τοπολογικά τετριμμένου και μη τετριμμένου υλικού. Δεξιά: Η σχέση διασποράς των επιφανειακών χειραλικών καταστάσεων. Ας σημειωθεί ότι το επίπεδο Fermi τέμνει τις επιφανειακές καταστάσεις σε περιττό πλήθος φορών για κάθε σπιν. [πηγή: [5]]

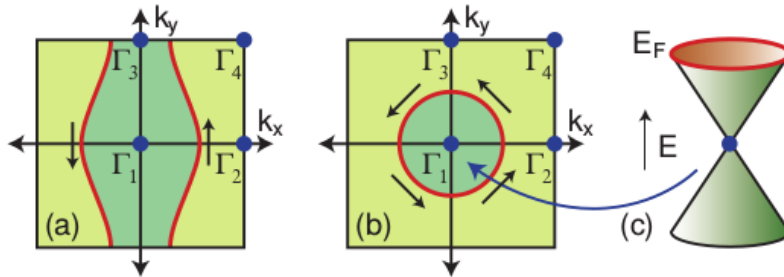
Αξίζει να παρατηρήσουμε ότι αυτό σημαίνει πως η αγωγιμότητα Hall στο υλικό θα είναι μηδενική, καθώς τα δύο ρεύματα αλληλοαναιρούνται. Από την άλλη, έχουμε μια μη μηδενική αγωγιμότητα spin Hall, που δέχεται ανθροιστικά τη συνεισφορά των δύο αντίθετα κινούμενων ρευμάτων.

Οι συνοριακές αγώγιμες καταστάσεις σχηματίζουν ένα ιδιόμορφο μονοδιάστατο αγωγό: αυτές οι καταστάσεις χαρακτηρίζονται από χειραλιότητα και από (τοπολογική) προστασία από τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου. Όπως περιγράφηκε και στην εισαγωγή, αυτά τα βασικά χαρακτηριστικά έχουν εξαιρετική σημασία για εφαρμογές.

Τοπολογικοί μονωτές σε 3Δ

Σε αυτό το σημείο θα γίνουν μερικά σύντομα σχόλια για τους 3Δ τοπολογικούς μονωτές, εστιάζοντας στα σημαντικότερα σημεία για το πρόβλημά μας.

Στις τρεις διαστάσεις, οι επιφανειακές αγώγιμες καταστάσεις είναι πια διδιάστατες, και η τοπολογική τάξη χαρακτηρίζεται τώρα με τέσσερις διαφορετικές αναλλοίωτες Z_2 , τις $(\nu_0; \nu_1, \nu_2, \nu_3)$. Ανάλογα με τις τιμές των αναλλοίωτων, μπορούμε να διακρίνουμε ανάμεσα σε διαφορετικές φάσεις. Θα εστιάσουμε στην πρώτη από αυτές τις αναλλοίωτες, τη ν_0 . Όταν $\nu_0 = 0$, τότε έχουμε μια κατάσταση που καλείται «ασθενής» τοπολογικός μονωτής. Εδώ μπορούμε να έχουμε επιφανειακές καταστάσεις, όμως αυτές δεν προστατεύονται, εν γένει, από τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου. Απεναντίας, η κατάσταση $\nu_0 = 1$ ορίζει ένα «ισχυρό» τοπολογικό μονωτή, με καταστάσεις που προστατεύονται από τη συμμετρία \mathcal{T} .



Σχήμα 2.5: (α) Ασθενής τοπολογικός μονωτής. Η επιφάνεια Fermi εγκλείει άρτιο πλήθος σημείων Dirac. (β) Ισχυρός τοπολογικός μονωτής. Η επιφάνεια Fermi εγκλείει περιττό πλήθος σημείων Dirac. (γ) Η επιφάνεια διασποράς για τον ισχυρό τοπολογικό μονωτή του (β) [πηγή: [5]]

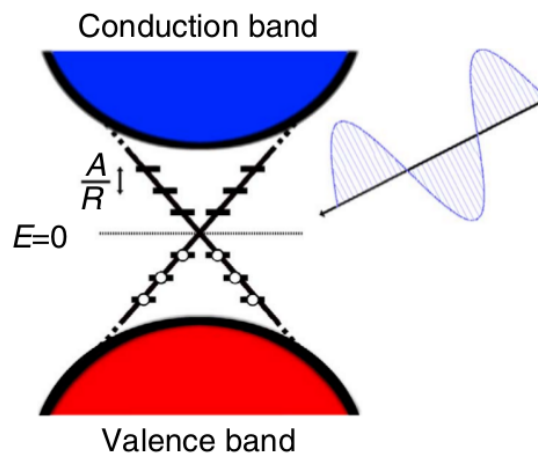
Οι φάσεις αυτές μπορούν να αναγνωριστούν και από τις σχέσεις διασποράς των επιφανειακών καταστάσεων. Στις τρεις διαστάσεις, για τις επιφανειακές καταστάσεις η απεικόνιση στον ανάστροφο χώρο θα δίνει τώρα επιφάνειες διασποράς (2Δ δομή ζωνών), όπως φαίνεται και στο σχήμα (γ), 2.5. Παίρνοντας την τομή της επιφάνειας διασποράς με το επίπεδο Fermi, λαμβάνουμε απλούστερα διαγράμματα στο επίπεδο, όπως φαίνεται στα σχήματα (α), (β). Σε ένα ισχυρό τοπολογικό μονωτή, οι καμπύλες που προκύπτουν εγκλείουν ένα περιττό πλήθος από σημεία Dirac, ενώ σε ένα ασθενή τοπολογικό μονωτή το πλήθος αυτό είναι άρτιο.

Βάσει της συμμετρίας \mathcal{T} , μπορούμε να συμπεράνουμε ότι σημεία στον ανάστροφο χώρο με αντίθετες ορμές θα πρέπει να έχουν και αντίθετα σπιν – αυτό δημιουργεί μια πιο σύνθετη κατάσταση κλειδώματος σπιν-τροφορμής. Έτσι, σε ένα ισχυρό τοπολογικό μονωτή περιμένουμε να έχουμε χειραλικές επιφανειακές αγωγίμες καταστάσεις, οι οποίες προστατεύονται από τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου – κάτι που, όπως έχει λεχθεί επανειλημμένα, μπορεί να είναι πολύ χρήσιμο.

Σεληνιούχο βισμούθιο (III) – Bi_2Se_3

Καλό είναι να γίνει και μία ειδικότερη αναφορά στον τοπολογικό μονωτή με τον οποίο ασχολούμαστε σε αυτήν την εργασία. Το σεληνιούχο βισμούθιο Bi_2Se_3 , γνωστός ημιαγωγός και θερμοηλεκτρικό υλικό, είναι επίσης ένας τοπολογικός μονωτής με ορισμένες πολύ ενδιαφέρουσες ιδιότητες.

Κατ'αρχάς, η ενεργειακή δομή του χαρακτηρίζεται από ένα σχετικά ευρύ χάσμα περί τα $0.3eV$, κάτι που είναι εξαιρετικά σημαντικό για εφαρμογές, καθώς αυτό υπόσχεται συμπεριφορά τοπολογικού μονωτή ακόμη και σε θερμοκρασία δωματίου. Πέραν τούτου, το διάγραμμα ζωνών του μοιάζει πολύ με την απλή δομή ενός κώνου Dirac γύρω από το κέντρο της πρώτης ζώνης Brillouin. Το χαρακτηριστικό αυτό το καθιστά ιδιαίτερα ενδιαφέρον υλικό για την έρευνα, καθώς η μοντελοποίησή του είναι αρκετά απλούστερη. Από πρακτικής-κατασκευαστικής πλευράς, το σεληνιούχο βισμούθιο είναι ένα καθαρό υλικό (χημική ένωση) και έτσι μπορεί θεωρητικά να παρασκευαστεί με υψηλότερη καθαρότητα από τα αντίστοιχα κράματα τοπολογικού μονωτή.



Σχήμα 2.6: Διακριτές επιφανειακές καταστάσεις σε νανοσωματίδιο τοπολογικού μονωτή από Bi_2Se_3 . [[9]]

Νανοσωματίδιο τοπολογικού μονωτή

Τέλος, πρέπει να γίνει και μια σύντομη σημείωση για την περίπτωση όπου δεν έχουμε πια ένα μακροσκοπικό τμήμα, αλλά ένα νανοσωματίδιο τοπολογικού μονωτή – όπως και σε αυτή την εργασία. Όταν μειώνουμε σημαντικά τις διαστάσεις του τοπολογικού μονωτή, σταδιακά

παύουμε να έχουμε συνεχείς καταστάσεις (όπως στο bulk υλικό), και αντί αυτού έχουμε πια διακριτές καταστάσεις [9], όπως για παράδειγμα στο σχήμα 2.6. Έτσι, οι τοπολογικά προστατευμένες επιφανειακές καταστάσεις του νανοσωματιδίου είναι διακριτές, και σε αντίθεση με τις διακριτές καταστάσεις πχ ενός χβαντικού εκπομπού είναι και απεντοπισμένες στην επιφάνειά του.

Στο δικό μας σύστημα, όπως θα δούμε αργότερα, υπό την επίδραση ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας παρουσιάζονται ορισμένα πολύ ενδιαφέροντα φαινόμενα στο νανοσωματίδιο. Η συμπεριφορά του συστήματος γίνεται ακόμα πιο ενδιαφέρουσα όταν συμπεριλάβουμε και την επίδραση ενός χβαντικού εκπομπού, οπότε και επιτρέπουμε τη σύζευξη μεταξύ των διαφόρων διεγέρσεων του νανοσωματιδίου και του χβαντικού εκπομπού. Όλα αυτά τα θέματα συζητούνται σε βάθος στο κεφάλαιο «Αριθμητικοί υπολογισμοί».

Κεφάλαιο 3

Πλασμονική

Για να γίνει καλύτερα κατανοητή η μελέτη που ακολουθεί στο κεφάλαιο «Αριθμητικοί υπολογισμοί», οφείλουμε να κάνουμε και μια συνοπτική εισαγωγή στον τομέα της πλασμονικής, με ιδιαίτερη έμφαση στο φαινόμενο των πλεξιτονίων και της ισχυρής σύζευξης – σημεία εξαιρετικά κεντρικά σε αυτή την εργασία.

Εισαγωγή

Η πλασμονική είναι ένας κλάδος ο οποίος, όπως και με την τοπολογική ύλη, χαρακτηρίζεται από μία σχετικά σύντομη ιστορία. Ωστόσο, τα ξεχωριστά χαρακτηριστικά της πλασμονικής και των διεγέρσεών της έχουν οδηγήσει ήδη σε πληθώρα ενδιαφερόντων φαινομένων και συστημάτων, και – ιδιαίτερα με τις εξελίξεις των τελευταίων χρόνων – έχουν ανοίξει το δρόμο για μια σειρά από συναρπαστικές μελλοντικές εφαρμογές.

Η πλασμονική, πολύ γενικά και απλοϊκά, ασχολείται με σύμφωνες συζευγμένες διεγέρσεις φωτός και συλλογικών ταλαντώσεων ηλεκτρονίων στην επιφάνεια μετάλλων (‘επιφανειακά πλασμόνια’). Οι βασικές διεγέρσεις της πλασμονικής είναι το επιφανειακό πλασμόνιο πολαριτόνιο (surface plasmon polariton, SPP) και το εντοπισμένο επιφανειακό πλασμόνιο πολαριτόνιο (localized surface plasmon polariton, LSPP), τις οποίες περιγράφω συντόμως στα επόμενα τμήματα.

Ένα πρώτο βασικό χαρακτηριστικό που έχουν τα πλασμονικά συστήματα είναι η ικανότητά τους να παρέχουν σημαντική ενίσχυση και εντοπισμό ηλεκτρομαγνητικών πεδίων. Ως εκ τούτου, αξιοποιώντας κατάλληλα συστήματα μετάλλων και διηλεκτρικών, μπορούμε αφενός να περιορίσουμε το φως σε διαστάσεις κάτω από το όριο περίθλασης, και αφετέρου να ενισχύσουμε σημαντικά το πεδίο και έτσι να ενισχύσουμε την αλληλεπίδραση φωτός και ύλης. [7]

Σύντομα κατέστη σαφές ότι αυτές οι ιδιαίτερες ιδιότητες υπόσχονται ένα ευρύ φάσμα από πιθανές εφαρμογές. Για παράδειγμα, ο χωρικός περιορισμός του φωτός ανοίγει το δρόμο για την ανάπτυξη φωτονικών συστημάτων στη νανοκλίμακα, κάτι το οποίο είναι, μεταξύ άλλων, υψίστης σημασίας για την ανάπτυξη μελλοντικών φωτονικών ολοκληρωμένων κυκλωμάτων. Από την άλλη, η ενίσχυση των αλληλεπιδράσεων φωτός και ύλης υπόσχεται πιο ευαίσθητους ανιχνευτές αλλά και ισχυρότερους και αποδοτικότερους εκπομπούς φωτός. Άλλοι ενδιαφέρο-

ντες τομείς εφαρμογής, που προτάθηκαν από σχετικά νωρίς, περιλαμβάνουν τη χρήση μεταλλικών νανοσωματιδίων για τη θεραπεία του καρκίνου και την ανάπτυξη οπτικών μεταλλικών με αρνητικό δείκτη διάθλασης [2].

Με την πάροδο των τελευταίων ετών, έχουν προταθεί ακόμη περισσότερες εφαρμογές και ενδιαφέροντα συστήματα, και με την πρόοδο της τεχνολογίας και την εξέλιξη των κατασκευαστικών τεχνικών, πολλές από αυτές τις αναδυόμενες ιδέες έχουν υλοποιηθεί. Σήμερα πραγματοποιείται ολοένα και περισσότερη έρευνα που προσβλέπει στην αξιοποίηση των ιδιαίτερων χαρακτηριστικών της πλασμονικής στη νανοκλίμακα, δηλαδή σε κβαντικά συστήματα. Μέσα από την έρευνα στον νέο αυτό τομέα της **κβαντικής πλασμονικής** έχουν αναδειχθεί πολλά νέα και συναρπαστικά φαινόμενα και πλήθος συστημάτων με ενδιαφέρουσα συμπεριφορά. [10]

Ένα από τα πολλά ενδιαφέροντα φαινόμενα που συναντούμε στον τομέα της κβαντικής πλασμονικής είναι αυτό των πλεξιτονίων, που είναι σύμφωνες, συζευγμένες διεγέρσεις εξιτονίων και πλασμονικών διεγέρσεων. Η εμφάνιση πλεξιτονίων σχετίζεται άμεσα και με την επίτευξη ισχυρής σύζευξης στο σύστημα, μια κατάσταση όπου οι δύο αρχικές διεγέρσεις αλληλεπιδρούν με σύμφωνο τρόπο και μπορούν να σχηματίσουν μια νέα ιδιόμορφη, υβριδική κατάσταση με ενδεχομένως διαφορετικές ιδιότητες και ενεργειακή δομή. Μεγάλο μέρος του κεφαλαίου αυτού αφιερώνεται σε συζήτηση για τη φύση και τα χαρακτηριστικά της ισχυρής σύζευξης, όπως και για τη μελέτη της πλεξιτονικής διέγερσης. [11]

Στην αρχή του κεφαλαίου, λοιπόν, θα γίνει μια σύντομη περιγραφή των θεμελιωδών πλασμονικών διεγέρσεων (SPPs και LSPPs). Στη συνέχεια, αφού γίνει μια σύντομη συζήτηση για το φαινόμενο της ισχυρής σύζευξης, πραγματοποιείται μια βασική παρουσίαση της πλεξιτονικής διέγερσης ακολουθώντας δύο διαφορετικές προσεγγίσεις, από τις οποίες μπορούν να εξαχθούν ορισμένα αρκετά ενδιαφέροντα αποτελέσματα. Το κεφάλαιο κλείνει με ένα σύνολο από βασικές προβλέψεις για τα πλεξιτόνια και την επίτευξη ισχυρής σύζευξης, βάσει και της ανάλυσης που προηγήθηκε.

Βασικές πλασμονικές διεγέρσεις

Επιφανειακά πλασμόνια πολαριτόνια (SPP)

Τα επιφανειακά πλασμόνια πολαριτόνια (surface plasmon polaritons, SPP) είναι διαδιδόμενες, εγχάρσιες συζευγμένες ηλεκτρομαγνητικές ταλαντώσεις μεταξύ φωτονίων (ή ταλαντούμενου η/μ πεδίου) και συλλογικών ταλαντώσεων ηλεκτρονίων στην επιφάνεια ενός μετάλλου (επιφανειακά πλασμόνια). Με άλλα λόγια, είναι διεγέρσεις που προκύπτουν από τη σύζευξη φωτονίων και επιφανειακών πλασμονίων στην επιφάνεια μετάλλων, και οι οποίες διαδίδονται κοντά στη διεπιφάνεια ενός μετάλλου και ενός διηλεκτρικού.

Γενικά, μια βασική προϋπόθεση για την ύπαρξη επιφανειακών πλασμονίων (και ως εκ τούτου και για την ενδεχόμενη σύζευξή τους με φωτόνια) είναι η παρουσία μιας διεπιφάνειας

ενός διηλεκτρικού και ενός μετάλλου.

Ας θεωρήσουμε τώρα, την ειδική περίπτωση όπου έχουμε μέταλλο, διηλεκτρικής συνάρτησης ϵ_2 στον ένα ημιχώρο και διηλεκτρικό, διηλεκτρικής συνάρτησης ϵ_1 στον άλλο. Τότε, όπως προκύπτει και από τις συνοριακές συνθήκες του συγκεκριμένου προβλήματος, εδώ η βασική απαίτηση για τη διεγερση SPP είναι να ισχύει $\epsilon_2 + \epsilon_1 = 0$, όπου εν γένει τα $\epsilon_{1,2}$ είναι μιγαδικές ποσότητες και συναρτήσεις της συχνότητας ω . Με άλλα λόγια, πρέπει να έχουμε μια αλλαγή προσήμου ανάμεσα στις διηλεκτρικές συναρτήσεις των μέσων εκατέρωθεν της διεπιφάνειας. Στην απλή περίπτωση όπου έχουμε $\epsilon_1 = 1$ για το ένα μέσο (κενό ή αέρας), τότε θα πρέπει να έχουμε $\epsilon_2(\omega) = -1$, για κάποια συχνότητα ω .

Επιλύοντας την ηλεκτρομαγνητική κυματική εξίσωση για τη συγκεκριμένη γεωμετρία, θεωρώντας διαδιδόμενες επιφανειακές λύσεις που φθίνουν εκθετικά από την επιφάνεια, προκύπτει, τελικά, ότι η σχέση διασποράς για τα επιφανειακά πλασμόνια είναι [7] [11]:

$$k_{SPP} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}} \quad (3.1)$$

Θυμόμαστε, ωστόσο, ότι τα $\epsilon_{1,2}$ εξαρτώνται εν γένει και από τη συχνότητα ω . Αν θεωρήσουμε το απλό μοντέλο Drude για την περιγραφή της συμπεριφοράς του μετάλλου, τότε η διηλεκτρική συνάρτηση του μετάλλου θα περιγράφεται από την έκφραση:

$$\epsilon_2 = 1 - \frac{\omega_P^2}{\omega^2 + i\gamma\omega} \quad (3.2)$$

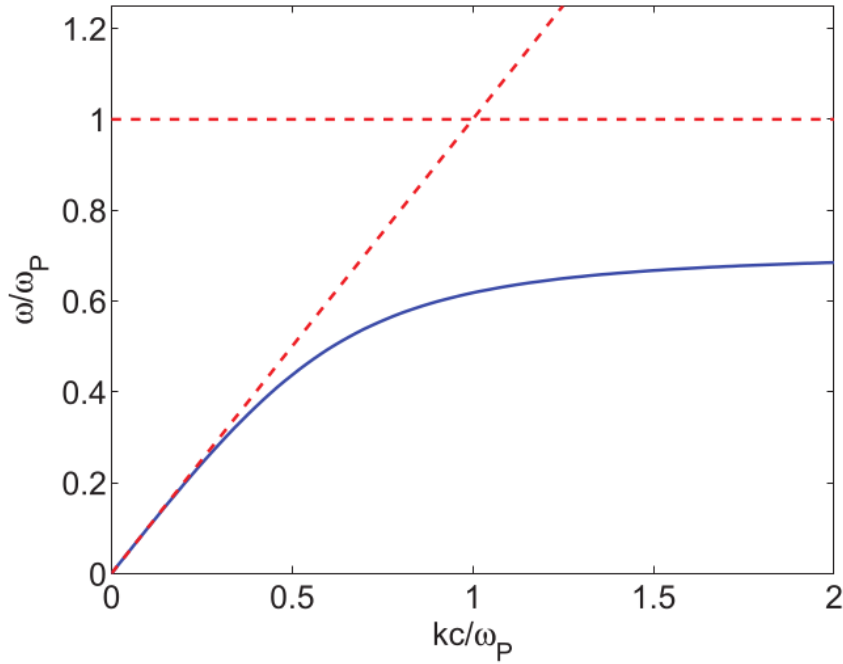
Αν αγνοήσουμε για λίγο τις απώλειες ($\gamma = 0$), αντικαθιστώντας στην αρχική έκφραση της σχέσης διασποράς των επιφανειακών πλασμονίων και θεωρώντας ότι το $\epsilon_1 = 1$, μπορούμε να λάβουμε την έκφραση:

$$\omega^2 = c^2 k^2 + \frac{\omega_P^2}{2} \pm \sqrt{c^4 k^4 + \frac{\omega_P^4}{4}} \quad (3.3)$$

Βλέπουμε, λοιπόν, ότι εμφανίζονται δύο κλάδοι στη λύση, που φαίνεται σαν να αποφεύγουν ο ένας τον άλλο. Πρέπει, ωστόσο να σημειωθεί ότι ο άνω κλάδος (+) δεν είναι φυσικός, καθώς, όπως εύκολα διαπιστώνουμε, χαρακτηρίζεται από ταχύτητα ομάδας μεγαλύτερη από την ταχύτητα του φωτός. Έτσι, κρατάμε μόνο τον κάτω κλάδο ως τη λύση με φυσικό νόημα.

Αξίζει να σημειωθεί ότι σε αυτή τη σχέση είναι ορατός και ο χωρικός περιορισμός των SPPs. Παρατηρώντας τη σχέση διασποράς για το SPP και συγκρίνοντας με τη γνωστή σχέση διασποράς φωτονίου στο μέσο ($\omega = kc/n$), είναι εύκολο να δούμε ότι αφού για να πραγματοποιηθεί σύζευξη πρέπει να ταυτίζονται οι κυματαριθμοί φωτονίου και SPP, το μήκος κύματος του SPP οφείλει να είναι μικρότερο από του αντίστοιχου φωτονίου. Αυτός ακριβώς ο χωρικός περιορισμός σημαίνει και ότι η νέα διεγερση θα χαρακτηρίζεται και από ενισχυμένο πεδίο, που όπως έχει ήδη αναφερθεί, αποτελεί και ένα από τα θεμελιώδη χαρακτηριστικά των πλασμονικών συστημάτων. [7]

Μια άλλη σημαντική παρατήρηση έχει να κάνει με τη φύση της διεγερσης αυτής. Εν γένει, το SPP έχει ένα υβριδικό «χαρακτήρα», καθώς προκύπτει από τη σύζευξη φωτονίου και επιφανειακού πλασμονίου. Και πράγματι, αυτός ο σύνθετος χαρακτήρας είναι ορατός και στη σχέση διασποράς του SPP. Ειδικότερα, στις οριακές περιπτώσεις όπου $k \rightarrow 0$ και



Σχήμα 3.1: Σχέση διασποράς επιφανειακού πλασμονίου πολαριτονίου (SPP). Οι ανεξάρτητες διεγέρσεις είναι από τη μία το επιφανειακό πλασμόνιο ($\omega = \omega_{sp} = \omega_p/\sqrt{2}$, ω_p : συχνότητα πλάσματος) και από την άλλη το φωτόνιο ($\omega = kc/n$). [πηγή: [11]]

$k \rightarrow \inf$, παρατηρούμε ότι η σχέση διασποράς τείνει σε αυτήν του φωτονίου ($\omega = kc/n$) και του επιφανειακού πλασμονίου ($\omega_{sp} = \omega_p/\sqrt{1 + \epsilon_1}$, όπου ω_p η συχνότητα πλάσματος) αντίστοιχα. Σε κάθε ενδιαμέση κατάσταση, η σχέση διασποράς αρνείται να «συμμορφωθεί» με κάποια από τις ανεξάρτητες σχέσεις διασποράς, δηλαδή δε συμπεριφέρεται ούτε ακριβώς σαν φωτόνιο, ούτε σαν επιφανειακό πλασμόνιο. Όπως θα δούμε και στο επόμενο τμήμα, αυτός ο «μικτός» χαρακτήρας είναι μόνο ένα από τα βασικά χαρακτηριστικά της ισχυρής σύζευξης σε ένα φυσικό σύστημα.

Εντοπισμένα επιφανειακά πλασμόνια πολαριτόνια (LSPP)

Στο προηγούμενο τμήμα, συζητήθηκε η περίπτωση για την απλή γεωμετρία μιας άπειρης μεταλλικής επιφάνειας σε επαφή με διηλεκτρικό μέσο. Επιλύοντας το πρόβλημα αυτό βρήκαμε τη σχέση διασποράς για το επιφανειακό πλασμόνιο πολαριτόνιο, που αποτελεί και την πρώτη βασική διεγέρση της πλασμονικής.

Η δεύτερη βασική διεγέρση, που μας αφορά και περισσότερο σε αυτή την εργασία, είναι το εντοπισμένο επιφανειακό πλασμόνιο πολαριτόνιο (LSPP, localized surface plasmon polariton), που συναντάται σε μεταλλικά νανοσωματίδια. Αντίστοιχα και με το SPP, το LSPP προκύπτει από τη σύζευξη ταλαντούμενου ηλεκτρομαγνητικού πεδίου (πχ φωτός) με συλλογικές **στάσιμες** διεγέρσεις των ηλεκτρονίων της μεταλλικής νανοδομής, τα καλούμενα εντοπισμένα επιφανειακά πλασμόνια (LSP).

Πρώτα, ας δούμε πώς αυτές οι στάσιμες διεγέρσεις μπορούν να προκύψουν από τη μελέτη

της πολωσιμότητας α ενός σφαιρικού νανοσωματιδίου. Έστω, λοιπόν, σφαιρικό σωματίδιο ακτίνας a και διηλεκτρικής συνάρτησης $\epsilon_2(\omega)$, το οποίο περιβάλλεται από υλικό διηλεκτρικής σταθεράς $\epsilon_1 \in \mathbb{R}$, και το οποίο βρίσκεται σε ένα ομογενές, στατικό ηλεκτρικό πεδίο $\vec{E} = E_0 \hat{z}$. Αποδεικνύεται, τότε, ότι η πολωσιμότητα α (ορισμός: διπολική ροπή $\vec{p} = \epsilon_0 \epsilon_1 \alpha \vec{E}$) του σωματιδίου περιγράφεται από την έκφραση [7]:

$$\alpha = 4\pi a^3 \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_2 + 2\epsilon_1}$$

Το αποτέλεσμα παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον, καθώς υποδεικνύει την ύπαρξη συντονισμών για ορισμένες συχνότητες. Ειδικότερα, παρατηρούμε ότι η πολωσιμότητα εμφανίζει ένα μέγιστο όταν ο παρονομαστής $|\epsilon_2 + 2\epsilon_1|$ ελαχιστοποιείται. Σε περιοχές όπου το $Im[\epsilon_2] \approx 0$ ή όπου μεταβάλλεται ασθενώς με το ω στην περιοχή του συντονισμού (δηλαδή είναι περίπου σταθερά), λαμβάνουμε μια απλή συνθήκη για να έχουμε συντονισμό (συνθήκη Fröhlich):

$$Re[\epsilon_2(\omega)] = -2\epsilon_1$$

Αυτό είναι ένα αρκετά σημαντικό αποτέλεσμα και για το δικό μας σύστημα, καθώς όπως θα δούμε και στο κεφάλαιο «Αριθμητικοί υπολογισμοί», κάποιες από τις διεγέρσεις του νανοσωματιδίου τοπολογικού μονωτή αντιστοιχούν σε ακριβώς τέτοιους συντονισμούς Fröhlich. Ως εκ τούτου, η γνώση αυτή θα μας βοηθήσει να αναγνωρίσουμε τις διεγέρσεις του νανοσωματιδίου και να καταλάβουμε καλύτερα τη φύση τους.

Μια σημείωση για πλασμόνια σε μη μεταλλικά υλικά

Αν και η πλασμονική ασχολείται καταρχήν με μεταλλικά συστήματα (και κυρίως με ευγενή μέταλλα, που χαρακτηρίζονται από μικρότερες απώλειες), αυτό δε σημαίνει ότι όμοια ή αντίστοιχα φαινόμενα δεν μπορούν να εμφανιστούν και σε διαφορετικές κλάσεις υλικών (αν και αυτή δεν είναι και μια τόσο τετριμμένη παρατήρηση, γενικά).

Για παράδειγμα, SPPs έχουν παραχθεί μεταξύ άλλων σε φύλλα από νιτρίδιο του τιτανίου (πχ [ΤιτανιυμΝιτρίδεΠλασμονς]), το οποίο είναι ένα κεραμικό με σχετικά υψηλή ηλεκτρική αγωγιμότητα, αλλά και στο γραφένιο [ΓραφηνεΠλασμονς], ένα ημιμέταλλο με υψηλή αγωγιμότητα και ένα πλήθος από ιδιαίτερες ιδιότητες. Αυτά τα αποτελέσματα, όμως, ίσως να μη μας ξαφνιάζουν και τόσο, μιας και τα εν λόγω υλικά ακόμα παρουσιάζουν κάποια ηλεκτρική αγωγιμότητα. Για ένα πολύ πιο «εξωτικό» παράδειγμα, αντίστοιχα φαινόμενα ενίσχυσης και εντοπισμού πεδίου παρατηρούνται και σε διηλεκτρικά νανοσωματίδια, αξιοποιώντας εντελώς διαφορετικούς ηλεκτρομαγνητικούς συντονισμούς, τους καλούμενους συντονισμούς Mie [ΜιεΠλασμονς].

Έχει ενδιαφέρον ότι επιφανειακά πλασμόνια μπορούν θεωρητικά να προκύψουν και σε τοπολογικούς μονωτές, σε διεπιφάνειες μεταξύ τοπολογικά τετριμμένων και μη τετριμμένων υλικών. Όπως περιγράφεται στην [6] αναμένουμε θεωρητικά ότι τέτοιες διεγέρσεις μπορούν να προκύψουν σε διεπιφάνειες τοπολογικού μονωτή και μετάλλου, αλλά ενδεχομένως και σε διεπιφάνειες τοπολογικού μονωτή και διηλεκτρικού (ή κενού), με την πρόσθετη προϋπόθεση εδώ να υπάρχουν αρκετοί ελεύθεροι φορείς στο εσωτερικό του τοπολογικού μονωτή. Έτσι,

στην πρώτη περίπτωση έχουμε θετικό ϵ στον τοπολογικό μονωτή και αρνητικό στο μέταλλο, ενώ στη δεύτερη περίπτωση θετικό ϵ στο τοπολογικά τετριμμένο μέσο και αρνητικό στον τοπολογικό μονωτή.

Ας περάσουμε, όμως, στη δική μας περίπτωση, δηλαδή για ένα νανοσωματίδιο τοπολογικού μονωτή που περιβάλλεται από διηλεκτρικό (ή κενό). Όπως σημειώνεται και από τους Siroki, G. et al. στη δημοσίευσή τους [9], όταν το νανοσωματίδιο Bi_2Se_3 αλληλεπιδρά με το φως, προκύπτει ένα LSPP, όπως προβλέπεται και από την προηγούμενη δημοσίευση. Πέραν τούτου, όμως, όταν περιλαμβάνουμε στην ανάλυση και τις επιφανειακές καταστάσεις του νανοσωματιδίου, εμφανίζεται μια νέα διέγερση με χαρακτηριστικά όμοια με ένα επιφανειακό πλασμόνιο σε ένα μέταλλο. Σε σχέση και με την προηγούμενη δημοσίευση, αξίζει να σημειωθεί ότι στην περίπτωση αυτή η επίδραση των επιφανειακών καταστάσεων μπορεί να δώσει στο νανοσωματίδιο μια αρνητική effective διηλεκτρική σταθερά (όπως θα δούμε και στο κεφάλαιο «Αριθμητικοί υπολογισμοί», στη συνέχεια), που σε συνδυασμό με τη θετική σταθερά του υποβάθρου μπορεί να επιτρέψει την ύπαρξη μιας διέγερσης τύπου SPP.

Πλεξιτόνια

Εισαγωγή: Ισχυρή σύζευξη και πλεξιτόνια

Έχοντας συζητήσει για τις βασικές διεγέρσεις της πλασμονικής, μπορούμε να περάσουμε και στην έννοια του πλεξιτονίου, η οποία είναι πολύ κεντρική σε αυτή την εργασία. Τα πλεξιτόνια είναι σύμφωνες διεγέρσεις που προκύπτουν από τη σύζευξη εξιτονίων και πλασμονικών διεγέρσεων – για παράδειγμα από την αλληλεπίδραση εξιτονίων σε ένα κβαντικό εκπομπό ημιαγωγού και SPPs σε ένα μεταλλικό νανοσωματίδιο. Η εμφάνιση πλεξιτονίων σε ένα τέτοιο σύστημα μπορεί να είναι μια σημαντική ένδειξη για την επίτευξη **ισχυρής σύζευξης** μεταξύ των αλληλεπιδρώντων, ξεχωριστών διεγέρσεων. Για να καταλάβουμε καλύτερα, λοιπόν, το φαινόμενο των πλεξιτονίων, είναι απαραίτητο να γίνει πρώτα μια σύντομη αναφορά και στο φαινόμενο της ισχυρής σύζευξης.

Όταν έχουμε αλληλεπίδραση μεταξύ δύο διαφορετικών διεγέρσεων, όπως για παράδειγμα μεταξύ μιας πλασμονικής διέγερσης και ενός εξιτονίου, μπορούμε να διακρίνουμε ανάμεσα σε διαφορετικούς βαθμούς αλληλεπίδρασης. Ανάλογα με την περίπτωση, γίνεται λόγος για ασθενή ή ισχυρή σύζευξη, με την αλληλεπίδραση να γίνεται πιο **σύμφωνη** καθώς οδηγούμαστε σε ισχυρότερη σύζευξη. Σε κατάσταση ισχυρής σύζευξης, το σύστημα μπορεί να εμφανίσει νέες ενεργειακές δομές και να παρουσιάζει πολύ διαφορετική συμπεριφορά από αυτήν των επιμέρους τμημάτων του.

Σε αυτό το σημείο, ωστόσο, πρέπει να συζητηθεί συντόμως και η σημασία του όρου **συμφωνία**. Για να γίνει πιο κατανοητή αυτή η έννοια, βοηθά να κάνουμε μια σύγκριση μεταξύ της ασθενούς και της ισχυρής σύζευξης. Γενικά, σε κατάσταση ασθενούς σύζευξης οι αλληλεπιδρώσες διεγέρσεις δρουν σχετικά ανεξάρτητα, και το σύστημα δεν παρουσιάζει σημαντικές ποιοτικές μεταβολές στην ενεργειακή δομή και στη συμπεριφορά του. Καθώς, όμως, οδηγούμαστε σε ισχυρότερη σύζευξη, οι διεγέρσεις αρχίζουν να αλληλεπιδρούν με πιο σύμφωνο

τρόπο, ως μια καινούργια, διαφορετική οντότητα, έτσι ώστε σταδιακά να μην μπορούμε πια να διαχωρίσουμε τις αρχικές, ανεξάρτητες διεγέρσεις.

Ως εκ τούτου, σε κατάσταση ισχυρής σύζευξης, είναι πιο σωστό να μιλάμε πια για μια νέα, σύμφωνη, υβριδική κατάσταση παρά για τις ανεξάρτητες καταστάσεις του συστήματος – στην προκειμένη περίπτωση για «πλεξιτόνια», παρά για πλασμόνια και εξιτόνια. Αξίζει να σημειωθεί ότι αυτή η νέα, υβριδική κατάσταση μπορεί να συνδυάζει ιδιότητες από τις συνιστώσες διεγέρσεις και να επιδεικνύει πολύ ιδιαίτερη συμπεριφορά, κάτι το οποίο – πέραν της συμφωνίας της κατάστασης – μπορεί να είναι πολύ χρήσιμο για εφαρμογές.

Πώς, όμως, μπορούμε να διαπιστώσουμε αν βρισκόμαστε σε κατάσταση ισχυρής σύζευξης; Μια καλή στρατηγική είναι να παρατηρήσουμε τη σχέση διασποράς του συστήματος. Σε ασθενή σύζευξη, οι δύο διεγέρσεις θα τείνουν να δρουν ανεξάρτητα – στην περίπτωσή μας θα φαίνονται ξεχωριστά η καμπύλη του εξιτονίου (στην απλούστερη περίπτωση $E = \hbar\omega_0$) και η καμπύλη των SPPs. Όταν, ωστόσο, η σύζευξη γίνεται ολοένα και πιο ισχυρή, μπορούμε να δούμε σημαντικές μεταβολές στη σχέση διασποράς. Ειδικότερα, μπορεί να παρατηρηθεί η δημιουργία ενός χάσματος ή «απαγορευμένης ζώνης» (avoided crossing/ anti-crossing), με «κέντρο» όπου οι δύο καμπύλες τέμνονται. Με άλλα λόγια, οι δύο διεγέρσεις φαίνεται να «αποφεύγουν» η μία την άλλη, σχηματίζοντας τώρα δύο νέους «κανονικούς τρόπους» ταλάντωσης.

Αντίστοιχα, αν δούμε το φάσμα απορρόφησης του συστήματος κοντά σε συντονισμό (συχνότητα εξιτονίου $\omega_0 \approx$ συχνότητα πεδίου/ πλασμονικής διέγερσης ω), η επίτευξη ισχυρής σύζευξης θα είναι εύκολα ορατή μέσω της εμφάνισης δύο κορυφών, αντί για την αναμενόμενη μία – με άλλα λόγια παρατηρείται ένας **διαχωρισμός των κορυφών (splitting)**. Αυτή η συμπεριφορά αντιστοιχεί στη δημιουργία των δύο διαφορετικών «τρόπων» που είναι ορατοί και στη σχέση διασποράς του συστήματος. Αυτή η βασική ιδέα αξιοποιείται εκτεταμένα και στο κεφάλαιο των αριθμητικών υπολογισμών, στη συνέχεια.

Το φαινόμενο, αυτό, του διαχωρισμού μπορεί να γίνει πολύ πιο κατανοητό μέσω του μοντέλου των ταλαντώσεων Rabi και του σχετικού όρου Rabi splitting, που θα συζητηθούν και σε επόμενο τμήμα. Στο μοντέλο που θα περιγραφεί, ένα κβαντικό σύστημα δύο επιπέδων $|g\rangle - |e\rangle$ (ο κβαντικός εκπομπός) αλληλεπιδρά με ένα κλασικό πεδίο (το SPP). Όταν οι διεγέρσεις συζευγνυται ισχυρά, θα δούμε ότι στο σύστημα σχηματίζονται δύο καινούργιες ιδιοκαταστάσεις διαφορετικής ενέργειας, οι οποίες αποτελούν μια υπέρθεση των αρχικών ιδιοκαταστάσεων $|g\rangle$ και $|e\rangle$. Ο ενεργειακός διαχωρισμός ανάμεσα στις ιδιοκαταστάσεις αυτές καλείται Rabi splitting, $\hbar\Omega$, και το μέτρο του σχετίζεται άμεσα με την ισχύ της σύζευξης (coupling strength) στο σύστημα.

Αυτό όμως που είναι ακόμα πιο συναρπαστικό είναι η χρονική εξέλιξη της κατάστασης του συστήματος. Ειδικότερα, θα καταλήξουμε ότι το σύστημα εκτελεί ταλαντώσεις ανάμεσα στις ιδιοκαταστάσεις του (**ταλαντώσεις Rabi**), κάτι που όπως θα δούμε υποδεικνύει μια σύμφωνη ανταλλαγή ενέργειας $\hbar\Omega$ ανάμεσα στις διεγέρσεις του συστήματος, με κάποιο χαρακτηριστικό χρόνο που σχετίζεται με το αντίστροφο της συχνότητας Rabi, $1/\Omega$.

Σε συστήματα με απώλειες, για να επιτευχθεί ισχυρή σύζευξη θα πρέπει αυτή η ανταλλαγή ενέργειας να είναι πιο ισχυρή από τις απώλειες του συστήματος προς το περιβάλλον

($\sim \Omega \gg 1/\tau_{damping}$). Ένας επιπλέον, σαφής, περιορισμός για να λάβει χώρα αυτή η σύμφωνη ανταλλαγή ενέργειας είναι το σύστημα να έχει χρόνο συμφωνίας αρκετά μεγαλύτερο από το $1/\Omega$, δηλαδή το χαρακτηριστικό χρόνο ανταλλαγής.

Σε γραφήματα απορρόφησης ή στη σχέση διασποράς, μεγαλύτερες απώλειες θα έχουν ως αποτέλεσμα οι κορυφές απορρόφησης ή οι ενεργειακές «ζώνες» του συστήματος να παρουσιάζουν κάποιο εύρος (linewidth) που σχετίζεται με τις απώλειες και επομένως και το χρόνο χαλάρωσης των σχετικών διεγέρσεων. Αν οι απώλειες είναι πολύ μεγάλες στο σύστημα, τότε το splitting ενδεχομένως δε θα είναι ορατό, καθώς θα «κρύβεται» από τα μεγάλα εύρη των καμπυλών απορρόφησης (ή σχέσεων διασποράς). Για τις ανάγκες αυτής της εργασίας, θα ορίσουμε την ισχυρή σύζευξη ως την κατάσταση όπου το μέγεθος του splitting είναι αρκετά μεγάλο σε σχέση με τα εύρη των καμπυλών, ώστε να είναι εμφανής ο διαχωρισμός στο σύστημα.

Μετά από αυτή τη σύντομη συζήτηση, μπορούμε να περάσουμε σε μια βασική ανάλυση, η οποία θα μας βοηθήσει να κατανοήσουμε καλύτερα τη φύση του splitting, τους διάφορους παράγοντες που μπορεί να συμβάλλουν στην εμφάνισή του, και τις διαφορετικές παραμέτρους που φαίνεται να επηρεάζουν το μέγεθός του.

Θεωρητική μελέτη: Κλασική περιγραφή

Για την καλύτερη κατανόηση του φαινομένου, είναι καλό πρώτα να δούμε μια σύντομη κλασική περιγραφή του splitting. Ειδικότερα, θα θεωρήσουμε ότι τα ηλεκτρόνια του εκπομπού συμπεριφέρονται σαν ένα απλό ταλαντωτή Lorentz και αλληλεπιδρούν με κλασικό ηλεκτρικό πεδίο, την πλασματική διέγερση. Στην κλασική περιγραφή του φαινομένου μπορούμε να δούμε κάποια πρώτα ποιοτικά χαρακτηριστικά της ισχυρής σύζευξης, τα οποία παρουσιάζουν αρκετό ενδιαφέρον.

Ας θεωρήσουμε, λοιπόν, ότι τα ηλεκτρόνια του εκπομπού, μάζας m και φορτίου e , τα οποία υπόκεινται σε εξωτερικό πεδίο $E(r, t)$ μπορούν να περιγραφούν από το απλό μοντέλο ενός ταλαντωτή Lorentz, δηλαδή ότι ικανοποιούν την εξίσωση κίνησης:

$$m(\ddot{r} + \gamma\dot{r} + \omega_0^2 r) = -eE(r, t)$$

Στην άνω έκφραση, ως γνωστόν, ο όρος $(-m\gamma\dot{r})$ αντιστοιχεί στη δύναμη απόσβεσης που δέχεται ο ταλαντωτής, ο όρος $(-m\omega_0^2 r)$ στη δύναμη επαναφοράς που αισθάνεται ο ταλαντωτής και ο $-eE(r, t)$ στη δύναμη που ασκείται σε αυτόν λόγω του εξωτερικού πεδίου. Αν κάνουμε τη διπολική προσέγγιση, δηλαδή θεωρώντας ότι οι μετατοπίσεις των ηλεκτρονίων είναι πολύ μικρές σε σχέση με το μήκος κύματος, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι το ηλεκτρικό πεδίο στον εκπομπό εξαρτάται μόνο από το χρόνο, δηλαδή είναι $E(t)$. Θεωρώντας, τώρα, μορφή $E(t) = E_0 e^{-i\omega t}$ για το πεδίο, μπορούμε με τη συνήθη μεθοδολογία ($r \rightarrow p = -er \rightarrow P = N/V * p \rightarrow P = \epsilon_0(\epsilon_1 - 1)E$) να λάβουμε τη διηλεκτρική συνάρτηση:

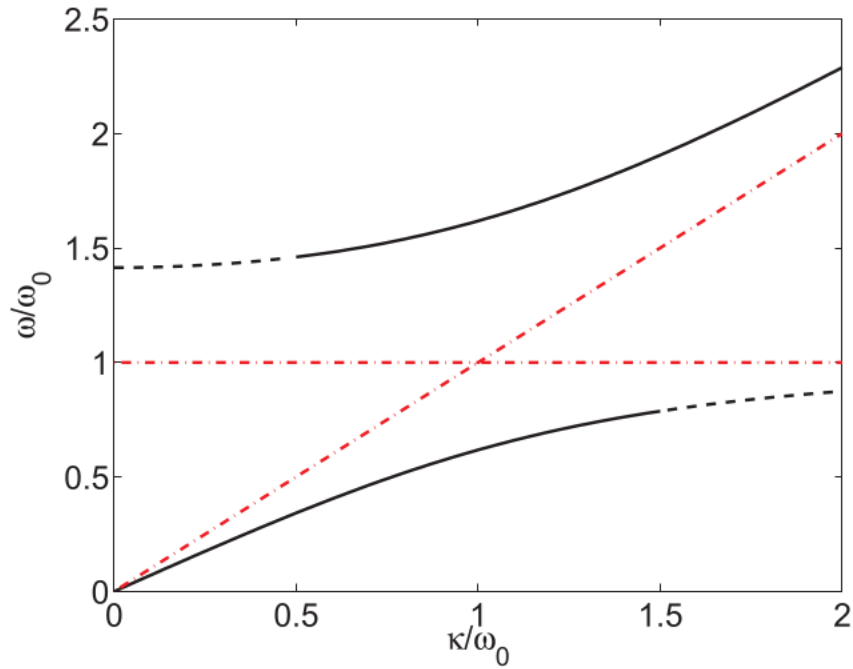
$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{Ne^2}{V\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \equiv 1 + \frac{A}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}$$

όπου N/V το πλήθος διπόλων ανά μονάδα όγκου στο υλικό και όπου θέσαμε $A \equiv \frac{Ne^2}{V\epsilon_0 m}$.

Μπορούμε, τώρα, να αντικαταστήσουμε την $\epsilon_1(\omega)$ στην έκφραση για τη σχέση διασποράς του επιφανειακού πλασμονίου, που παίζει το ρόλο του κλασικού πεδίου στο πρόβλημά μας. Σε πρώτη προσέγγιση, αν αγνοήσουμε τις απώλειες στον ταλαντωτή (δηλαδή $\gamma = 0$) όπως και στο επιφανειακό πλασμόνιο ($\gamma_{SPP} = 0$), μπορούμε να λάβουμε μια έκφραση που περιγράφει δύο διαφορετικούς κανονικούς «τρόπους» του συζευγμένου συστήματος ταλαντωτή-πλασμονίου:

$$\omega_{\pm} = \frac{\kappa}{2} + \frac{\omega_0}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{A + (\kappa - \omega_0)^2}$$

όπου έχουμε θέσει και $\kappa \equiv k^2 \frac{|\epsilon_1 + \epsilon_2| c^2}{|\epsilon_1|}$.



Σχήμα 3.2: Ισχυρή σύζευξη ανάμεσα στον ταλαντωτή Lorentz και το κλασικό πεδίο. Η οριζόντια διακεκομμένη γραμμή αναπαριστά το συντονισμό του ταλαντωτή ($\omega = \omega_0$), ενώ η διαγώνια διακεκομμένη γραμμή τη σχέση διασποράς του SPP. Οι μύρες, συνεχείς καμπύλες είναι οι δύο κανονικοί τρόποι του ισχυρά συζευγμένου συστήματος. [πηγή: [11]]

Αξιοποιώντας αυτή την ποσότητα, είναι δυνατόν να γράψουμε και μια έκφραση για το μέγεθος του ενεργειακού διαχωρισμού μεταξύ των επιπέδων (ή τρόπων) σε συντονισμό, δηλαδή όταν $\kappa = \omega_0$:

$$\Delta\omega = \omega_+(\kappa = \omega_0) - \omega_-(\kappa = \omega_0) = \sqrt{A} = \frac{N}{V} \frac{e}{\sqrt{\epsilon_0 m}}$$

Για να συμπεριλάβουμε τις απώλειες σε πλασμόνιο και ταλαντωτή, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την έκφραση:

$$\omega_{\pm} = \frac{\kappa}{2} + \frac{\omega_0}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{A - \left(\frac{\gamma}{2} - \frac{\gamma_{SPP}}{2}\right)^2} - i \left(\frac{\gamma}{4} + \frac{\gamma_{SPP}}{4}\right)$$

Έχει ενδιαφέρον ότι σε συντονισμό, το μέγεθος του διαχωρισμού $\Delta\omega$ προκύπτει το ίδιο με αυτό της περίπτωσης όπου αγνοήσαμε τις απώλειες στο σύστημα.

Η σημασία των αποτελεσμάτων αυτών θα συζητηθεί σε τμήμα που ακολουθεί. Πρώτα, όμως, είναι απαραίτητο να μελετήσουμε και την ημικλασική περιγραφή του φαινομένου, στην οποία φαίνονται ορισμένα πολύ βασικά χαρακτηριστικά της ισχυρής σύζευξης.

Θεωρητική μελέτη: Ημικλασική περιγραφή

Ας θεωρήσουμε, τώρα, ένα σύστημα ενός κβαντικού εκπομπού δύο επιπέδων, ο οποίος αλληλεπιδρά με ένα ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Για τις ανάγκες της εργασίας αυτής, αρκεί να θεωρήσουμε ότι το πεδίο είναι κλασικό, δηλαδή ότι δεν παρουσιάζει κβάντωση.

Θεωρούμε, λοιπόν, το κλασικό ηλεκτρομαγνητικό πεδίο $\vec{E}\cos(\omega t)e^{i\vec{k}\vec{r}}$, όπου ω, k η συχνότητα και το κυματόνισμα του επιφανειακού πλασμονίου.

Σε αυτό το σημείο, θα κάνουμε την διπολική προσέγγιση (dipole approximation), η οποία θα απλοποιήσει ιδιαίτερα την ανάλυση. Σε αυτήν την προσέγγιση, θεωρούμε ότι η μετατόπιση των ηλεκτρονίων στον εκπομπό λόγω του πεδίου είναι πολύ μικρότερη από το μήκος κύματος ($\approx 1/k$). Έτσι, στην περιοχή γύρω από τη θέση του εκπομπού \vec{R} θα είναι $\vec{k}\vec{R} \ll 1$, και ως εκ τούτου μπορούμε να πούμε κατά προσέγγιση ότι το ηλεκτρικό πεδίο που θα «νιώθει» ο κβαντικός εκπομπός θα είναι ανεξάρτητο από τις χωρικές συντεταγμένες, και άρα θα εξαρτάται μόνο από το χρόνο, δηλαδή $\vec{E}\cos(\omega t)$.

Οφείλουμε να κάνουμε, ωστόσο, μερικές παρατηρήσεις. Όπως έχουμε συζητήσει, το πεδίο που παράγεται από μια πλασμονική διέγερση παρουσιάζει εν γένει έντονη χωρική εξάρτηση (πχ φθίνει εκθετικά με την απόσταση). Από την άλλη, όμως, όπως περιγράφεται και στο κεφάλαιο «Αριθμητικοί υπολογισμοί», ασχολούμαστε με ένα κβαντικό εκπομπό μικρών διαστάσεων (περί τα nm) και με πεδίο μήκους κύματος στο βαθύ υπέρυθρο (αρκετά μm). Ως εκ τούτου, μπορούμε να υποθέσουμε ότι η προσέγγισή μας είναι σχετικά λογική και μπορεί να μας δώσει κάποια ικανοποιητικά ποιοτικά αποτελέσματα.

Ας θεωρήσουμε λοιπόν τον κβαντικό εκπομπό ως ένα κβαντικό σύστημα δύο επιπέδων, με τη θεμελιώδη στάθμη $|g\rangle$ και τη διεγερμένη $|e\rangle$, με αντίστοιχες ενέργειες E_g, E_e . Ας θεωρήσουμε, τώρα, βάση στην οποία οι δύο καταστάσεις γράφονται $|g\rangle = (0 \ 1)^T$ και $|e\rangle = (1 \ 0)^T$. Σε αυτή τη βάση, λοιπόν, μπορούμε να ορίσουμε τους τελεστές:

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_+ &= |e\rangle \langle g| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{\sigma}_- &= |g\rangle \langle e| = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}\tag{3.4}$$

Είναι προφανές ότι ο $\hat{\sigma}_+$ «ανεβάζει» την θεμελιώδη στη διεγερμένη κατάσταση, ενώ ο $\hat{\sigma}_-$ κάνει ακριβώς το αντίθετο, δηλαδή «κατεβάζει» τη διεγερμένη στη θεμελιώδη κατάσταση. Χρειαζόμαστε επιπλέον τους:

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_z &= |e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \\ I &= |e\rangle\langle e| + |g\rangle\langle g| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (3.5)$$

Η χαμιλτονιανή του συστήματος μπορεί να γραφτεί τότε στη μορφή:

$$H = \left[\frac{1}{2}E_e(I + \sigma_z) + \frac{1}{2}E_g(I - \sigma_z) \right] + \hbar\Omega_0(\sigma_+ + \sigma_-)\cos(\omega t) \quad (3.6)$$

Ο πρώτος όρος (στις αγκύλες) αναπαριστά την ενέργεια των δύο καταστάσεων, απουσία αλληλεπίδρασης. Ο δεύτερος όρος αναπαριστά την αλληλεπίδραση με το (κλασικό) ηλεκτρομαγνητικό πεδίο, όπου Ω_0 η ημικλασική συχνότητα Rabi, η οποία ορίζεται ως:

$$\Omega_0 = -\frac{\vec{d} \cdot \vec{E}}{\hbar} \quad (3.7)$$

Στην άνω έκφραση, \vec{d} είναι η διπολική ροπή της μετάβασης ($|g\rangle \rightarrow |e\rangle$), ενώ \vec{E} το διάνυσμα που εμπεριέχει το πλάτος και το διάνυσμα πόλωσης του ηλεκτρικού πεδίου. Επομένως ο δεύτερος όρος δεν είναι τίποτα άλλο παρά η χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης του ηλεκτρικού πεδίου με το δίπολο του κβαντικού εκπομπού.

Χάριν ευκολίας, εισάγουμε τη συχνότητα μετάβασης ω_0 του κβαντικού εκπομπού:

$$\omega_0 \equiv \frac{E_e - E_g}{\hbar} \quad (3.8)$$

Στη συνέχεια, θα εμφανίσουμε ταλαντούμενους όρους ($\omega \pm \omega_0$) στη χαμιλτονιανή, ώστε να εφαρμόσουμε την προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος. Για να το κάνουμε αυτό, θα κάνουμε κατάλληλους μοναδιακούς (unitary) μετασχηματισμούς της βάσης, τους οποίους περιγράψω παρακάτω. Πρώτα όμως, ας δούμε πώς μετασχηματίζεται η χαμιλτονιανή υπό τέτοιους μοναδιακούς μετασχηματισμούς της βάσης.

Έστω η χαμιλτονιανή H και η κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle$ σε κάποια (αρχική) βάση. Η εξίσωση Schrödinger που περιγράφει το σύστημα θα είναι, ως γνωστόν:

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = H |\psi\rangle \quad (3.9)$$

Έστω, τώρα, μοναδιακός μετασχηματισμός $U_T^{-1} = U_T^\dagger$ ο οποίος δίνει τα νέα διανύσματα βάσης $|\phi\rangle = U_T^\dagger |\psi\rangle$. Κάτω από αυτόν το μετασχηματισμό, μπορούμε να βρούμε πώς μετασχηματίζεται και η χαμιλτονιανή, καταλήγοντας σε μία μορφή:

$$i\hbar \frac{\partial (U_T |\psi\rangle)}{\partial t} = H (U_T |\psi\rangle) \quad (3.10)$$

Για να αρχίσουμε, πολλαπλασιάζουμε από αριστερά με τον U_T και εισάγουμε ελεύθερα τον μοναδιαίο τελεστή $U_T^\dagger U_T$:

$$i\hbar U_T \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = U_T H (U_T^\dagger U_T) |\psi\rangle \quad (3.11)$$

Και παρατηρώντας ότι είναι $\frac{\partial(U_T|\psi\rangle)}{\partial t} = \frac{\partial U_T}{\partial t} |\psi\rangle + U_T \frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t}$, μπορούμε να ξαναγράψουμε το αριστερό μέλος:

$$\begin{aligned} &\Rightarrow i\hbar \left(\frac{\partial(U_T|\psi\rangle)}{\partial t} - \frac{\partial U_T}{\partial t} |\psi\rangle \right) = U_T H U_T^\dagger U_T |\psi\rangle \\ &\Rightarrow i\hbar \frac{\partial(U_T|\psi\rangle)}{\partial t} = U_T H U_T^\dagger U_T |\psi\rangle + i\hbar \frac{\partial U_T}{\partial t} (U_T^\dagger U_T) |\psi\rangle \end{aligned} \quad (3.12)$$

Οπότε τελικά έχουμε:

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial(U_T|\psi\rangle)}{\partial t} = \left(U_T H U_T^\dagger + i\hbar \frac{\partial U_T}{\partial t} U_T^\dagger \right) U_T |\psi\rangle \quad (3.13)$$

Παρατηρούμε, λοιπόν, ότι η χαμιλτονιανή μετασχηματίζεται ως εξής:

$$H \longrightarrow U_T H U_T^\dagger + i\hbar \frac{\partial U_T}{\partial t} U_T^\dagger$$

Εάν ο μετασχηματισμός U_T που θα επιλέξουμε εξαρτάται από το χρόνο, τότε εν γένει ο δεύτερος όρος θα είναι μη μηδενικός. Στην περίπτωση μας, θα εφαρμόσουμε δύο διαδοχικούς μοναδιαίους μετασχηματισμούς U_1 και U_2 , δηλαδή συνολικά θα έχουμε: $U_T = U_2 U_1$. Έτσι, από την έκφραση αυτή μπορούμε να λάβουμε την τελική μετασχηματισμένη μορφή της χαμιλτονιανής.

Ας αρχίσουμε πραγματοποιώντας ένα μετασχηματισμό U_1 :

$$U_1 = \begin{pmatrix} e^{i\omega_0 t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_0 t/2} \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

Γράφοντας και το συνημίτονο ως $\cos(\omega t) = (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})/2$, η αρχική μας χαμιλτονιανή στην αναπαράσταση που επιλέξαμε γράφεται στη μορφή:

$$H = \begin{pmatrix} E_e & \frac{\hbar\Omega_0}{2}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \\ \frac{\hbar\Omega_0}{2}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) & E_g \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

Εφαρμόζοντας το μετασχηματισμό αυτό στη χαμιλτονιανή, παίρνουμε:

$$\begin{aligned} H' &= U_1 H U_1^{-1} = U_1 H U_1^\dagger \\ &= \begin{pmatrix} e^{i\omega_0 t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_0 t/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_e & \frac{\hbar\Omega_0}{2}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \\ \frac{\hbar\Omega_0}{2}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) & E_g \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\omega_0 t/2} & 0 \\ 0 & e^{i\omega_0 t/2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} E_e & \frac{\hbar\Omega_0}{2}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})e^{i\omega_0 t} \\ \frac{\hbar\Omega_0}{2}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})e^{-i\omega_0 t} & E_g \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} E_e & \frac{\hbar\Omega_0}{2}(e^{i(\omega+\omega_0)t} + e^{-i(\omega-\omega_0)t}) \\ \frac{\hbar\Omega_0}{2}(e^{i(\omega-\omega_0)t} + e^{-i(\omega+\omega_0)t}) & E_g \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.16)$$

Τώρα, θεωρώντας ότι βρισκόμαστε κοντά στη συχνότητα συντονισμού, δηλαδή $\omega \approx \omega_0$, μπορούμε να αγνοήσουμε τους γρήγορα ταλαντούμενους όρους στη χαμιλτονιανή, αφήνοντάς μας την απλουστευμένη χαμιλτονιανή:

$$H' = \begin{pmatrix} E_e & \frac{\hbar\Omega_0}{2} e^{-i(\omega-\omega_0)t} \\ \frac{\hbar\Omega_0}{2} e^{i(\omega-\omega_0)t} & E_g \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

Για να φτάσουμε σε μια ακόμη απλούστερη έκφραση για τη χαμιλτονιανή, εφαρμόζουμε μια πρόσθετη στροφή της βάσης μας, μέσω του μοναδιαίου πίνακα:

$$U_2 = \begin{pmatrix} e^{i\delta t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\delta t/2} \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

όπου το δ είναι το "detuning" από τη συχνότητα συντονισμού, δηλαδή: $\delta \equiv \omega - \omega_0$. Έτσι, παίρνουμε την εκ νέου μετασχηματισμένη χαμιλτονιανή:

$$\begin{aligned} H'' &= U_2 H' U_2^{-1} = U_2 H' U_2^\dagger \\ &= \begin{pmatrix} e^{i(\omega-\omega_0)t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i(\omega-\omega_0)t/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_e & \frac{\hbar\Omega_0}{2} e^{-i(\omega-\omega_0)t} \\ \frac{\hbar\Omega_0}{2} e^{i(\omega-\omega_0)t} & E_g \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i(\omega-\omega_0)t/2} & 0 \\ 0 & e^{i(\omega-\omega_0)t/2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} E_e & \frac{\hbar\Omega_0}{2} \\ \frac{\hbar\Omega_0}{2} & E_g \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.19)$$

Επομένως, ο συνολικός μετασχηματισμός μας ήταν:

$$\begin{aligned} U_T &= U_2 U_1 = \begin{pmatrix} e^{i(\omega-\omega_0)t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i(\omega-\omega_0)t/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\omega_0 t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_0 t/2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.20)$$

Κατά συνέπεια, η συνολική χαμιλτονιανή θα είναι:

$$\begin{aligned} H &= U_T H U_T^\dagger + i\hbar \frac{\partial U_T}{\partial t} U_T^\dagger \\ &= \begin{pmatrix} E_e & \frac{\hbar\Omega_0}{2} \\ \frac{\hbar\Omega_0}{2} & E_g \end{pmatrix} + i\hbar \begin{pmatrix} \frac{i\omega}{2} e^{i\omega t/2} & 0 \\ 0 & -\frac{i\omega}{2} e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{i\omega t/2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} E_e & \frac{\hbar\Omega_0}{2} \\ \frac{\hbar\Omega_0}{2} & E_g \end{pmatrix} - \frac{\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} E_e - \frac{\hbar\omega}{2} & \frac{\hbar\Omega_0}{2} \\ \frac{\hbar\Omega_0}{2} & E_g + \frac{\hbar\omega}{2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.21)$$

Εάν θεωρήσουμε (χβτγ) ότι $E_e = +\hbar\omega_0/2$, $E_g = -\hbar\omega_0/2$, τότε η μετασχηματισμένη χαμιλτονιανή γράφεται ισοδύναμα και ως:

$$H = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar\delta}{2} & \frac{\hbar\Omega_0}{2} \\ \frac{\hbar\Omega_0}{2} & \frac{\hbar\delta}{2} \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

Χρησιμοποιώντας τους τελεστές σ_{\pm} και σ_z που έχουμε ορίσει προηγουμένως, μπορούμε, λοιπόν, να γράψουμε τη μετασχηματισμένη χαμιλτονιανή και στη μορφή:

$$H = -\frac{\hbar\delta}{2}\sigma_z + \frac{\hbar\Omega_0}{2}(\sigma_+ + \sigma_-) \quad (3.23)$$

Διαγωνοποιώντας τη χαμιλτονιανή αυτή, μπορούμε να βρούμε τις ιδιοτιμές:

$$\begin{aligned} E_1 &= -\frac{1}{2}\hbar\sqrt{\delta^2 + \Omega_0^2} \\ E_2 &= +\frac{1}{2}\hbar\sqrt{\delta^2 + \Omega_0^2} \end{aligned} \quad (3.24)$$

όπου η ποσότητα $\Omega \equiv \sqrt{\delta^2 + \Omega_0^2}$ καλείται συχνά και γενικευμένη συχνότητα Rabi στη βιβλιογραφία. Μετά από πράξεις μπορούμε να προσδιορίσουμε και τις αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις, συναρτήσεις των καταστάσεων $|g\rangle, |e\rangle$:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= -\sin\theta |e\rangle + \cos\theta |g\rangle \\ |2\rangle &= \cos\theta |e\rangle + \sin\theta |g\rangle \end{aligned} \quad (3.25)$$

όπου έχουμε ορίσει τις ποσότητες:

$$\begin{aligned} \sin\theta &= \frac{\Omega_0}{\sqrt{(\Omega - \delta)^2 + \Omega_0^2}} \\ \cos\theta &= \frac{\Omega - \delta}{\sqrt{(\Omega - \delta)^2 + \Omega_0^2}} \end{aligned} \quad (3.26)$$

Είναι εύκολο να εκφράσουμε τις καταστάσεις $|g\rangle, |e\rangle$ συναρτήσεις των ιδιοκαταστάσεων $|1\rangle$ και $|2\rangle$, δίνοντάς μας:

$$\begin{aligned} |g\rangle &= \cos\theta |1\rangle + \sin\theta |2\rangle \\ |e\rangle &= -\sin\theta |1\rangle + \cos\theta |2\rangle \end{aligned} \quad (3.27)$$

Ας θεωρήσουμε ότι το σύστημα βρίσκεται αρχικά στην κατάσταση $|g\rangle$. Σε αυτήν την περίπτωση, η χρονική εξέλιξη της κυματοσυνάρτησης θα δίνεται από την έκφραση:

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \cos\theta e^{-iE_1t/\hbar} |1\rangle + \sin\theta e^{-iE_2t/\hbar} |2\rangle \\ &= (\sin^2\theta e^{-iE_2t/\hbar} + \cos^2\theta e^{-iE_1t/\hbar}) |g\rangle + (\sin\theta\cos\theta e^{-iE_2t/\hbar} - \sin\theta\cos\theta e^{-iE_1t/\hbar}) |e\rangle \end{aligned} \quad (3.28)$$

Σημασία του αποτελέσματος

Για να καταλάβουμε διαισθητικά το αποτέλεσμά μας, βοηθάει να δούμε τί συμβαίνει στην ειδική περίπτωση όπου έχουμε μηδενικό αποσυντονισμό (detuning) $\delta = 0$, δηλαδή η συχνότητα της προσπίπτουσας ακτινοβολίας ισούται με τη συχνότητα μετάβασης του χβαντικού εκπομπού. Στην ειδική αυτή περίπτωση παρατηρούμε ότι οι ιδιοκαταστάσεις του αλληλεπιδρώντος

συστήματος ($|1\rangle, |2\rangle$) είναι μία υπέρθεση (με ίσα πλάτη) της θεμελιώδους ($|g\rangle$) και διεγερμένης στάθμης ($|e\rangle$) του απομονωμένου κβαντικού εκπομπού:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|g\rangle - |e\rangle), & E_1 &= -\frac{\hbar\Omega_0}{2} \\ |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|g\rangle + |e\rangle), & E_2 &= \frac{\hbar\Omega_0}{2} \end{aligned} \quad (3.29)$$

Πέραν τούτου, η χρονική εξέλιξη του συστήματος θα δίνεται τώρα από την απλούστερη έκφραση:

$$|\Psi(t)\rangle = \cos(\Omega_0 t/2) |g\rangle - i \sin(\Omega_0 t/2) |e\rangle \quad (3.30)$$

Το αποτέλεσμα αυτό παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον: το σύστημα πραγματοποιεί ταλαντώσεις Rabi μεταξύ της διεγερμένης και της θεμελιώδους κατάστασης ($|e\rangle, |g\rangle$). Αν δούμε την πιθανότητα το σύστημα να βρίσκεται είτε στη θεμελιώδη είτε στη διεγερμένη, δηλαδή:

$$\begin{aligned} P_g &= |\langle g|\Psi(t)\rangle|^2 = \cos^2(\Omega_0 t/2) = \frac{1 + \cos(\Omega_0 t)}{2} \\ P_e &= |\langle e|\Psi(t)\rangle|^2 = \sin^2(\Omega_0 t/2) = \frac{1 - \cos(\Omega_0 t)}{2} \end{aligned} \quad (3.31)$$

μπορούμε να δούμε ότι το σύστημα «ταλαντώνεται» μεταξύ των δύο καταστάσεων με μία συχνότητα Ω_0 , τη συχνότητα Rabi. Στη γενικότερη περίπτωση όπου απέχουμε από το συντονισμό, $\delta \neq 0$, μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι οι ταλαντώσεις Rabi θα συμβαίνουν με τη γενικευμένη συχνότητα Rabi Ω , αλλά με μικρότερο πλάτος.

Συνοψίζοντας, θεωρήσαμε ένα κβαντικό εκπομπού δύο επιπέδων ο οποίος αλληλεπιδρά με ένα (κλασικό) ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Το πεδίο αυτό μπορεί να προέρχεται, για παράδειγμα, από μία επιφανειακή πλασματική διέγερση (SPP) ή από μία εντοπισμένη επιφανειακή πλασματική διέγερση (LSPP). Επιπλέον, είδαμε ότι από την αλληλεπίδραση του κβαντικού εκπομπού και του (κλασικού) πεδίου προκύπτουν δύο διακριτές ενεργειακές καταστάσεις, οι οποίες χαρακτηρίζονται από ένα ενεργειακό διαχωρισμό (Rabi splitting):

$$E_2 - E_1 = \hbar\sqrt{\delta^2 + \Omega_0^2}$$

Σε συντονισμό, δηλαδή όταν $\delta = 0$, βλέπουμε ότι ο ενεργειακός διαχωρισμός ισούται με τη συχνότητα Rabi Ω_0 , την οποία είχαμε ορίσει ως την ποσότητα:

$$\Omega_0 = \frac{-\vec{d} \cdot \vec{E}}{\hbar}$$

Εισαγωγή απωλειών στο μοντέλο

Παρουσία απωλειών, αναμένουμε το σύστημα να παρουσιάζει φθίνουσες ταλαντώσεις Rabi, και ως εκ τούτου περιορισμένη συμφωνία. Ως γνωστό, αυτό αντιστοιχεί σε μηδενισμό των μη διαγωνίων στοιχείων του τελεστή πυκνότητας, και ουσιαστικά «άρση» της υπέρθεσης στο σύστημα – το σύστημα γίνεται κλασικό.

Το σημαντικό εδώ είναι ότι αν υπάρχει κάποιος χαρακτηριστικός χρόνος τ σχετικός με την απόσβεση, τότε αυτό υποδεικνύει μία αβεβαιότητα στην ενέργεια των δύο καταστάσεων (τρόπων), δηλαδή εισάγεται ένα εύρος φασματικής γραμμής της τάξης των $\sim \hbar \frac{2\pi}{\tau}$.

Έπεται, λοιπόν, ότι αν ο χρόνος ζωής των ταλαντώσεων είναι πολύ μικρός (δηλαδή η απόσβεση είναι πολύ έντονη), με άλλα λόγια αν το φασματικό εύρος γίνει συγκρίσιμο (ή μεγαλύτερο) από την «ενέργεια» Rabi ($\hbar\Omega$), τότε ενδεχομένως δε θα μπορούμε να παρατηρήσουμε τον ενεργειακό διαχωρισμό. Πράγματι, στο ίδιο συμπέρασμα καταλήξαμε και από την κλασική ανάλυση του προβλήματος.

Για την εισαγωγή των απωλειών στην ανάλυση, χρησιμοποιούνται συνήθως προσεγγίσεις με (quantum) master equations, όπως για παράδειγμα με τη Lindbladian master equation την οποία χρησιμοποιώ και στο κεφάλαιο «Εξισώσεις» για την περιγραφή του συστήματός μας.

Προβλέψεις από τη θεωρία

Αξιοποιώντας τη θεωρητική ανάλυση που προηγήθηκε, μπορούμε να κάνουμε ορισμένες σημαντικές προβλέψεις για την εμφάνιση Rabi splitting.

Ήδη από την κλασική προσέγγιση, μπορούμε να δούμε το ρόλο που έχει το πλήθος των ταλαντωτών, N/V , αλλά και οι απώλειες του συστήματος, γ , στην επίτευξη ισχυρής σύζευξης. Σε μια αυστηρότερη ανάλυση, φαίνεται και ο ρόλος της ισχύος του ταλαντωτή (oscillator strength) [11], μια παράμετρος που σχετίζεται και με τη διπολική ροπή μετάβασης της διέγερσης.

Πολύ πιο ενδιαφέροντα συμπεράσματα, ωστόσο, μπορούμε να εξάγουμε από την ημικλασική προσέγγιση. Εδώ, η εμφάνιση του ενεργειακού διαχωρισμού (και των σχετικών ταλαντώσεων Rabi) υποδεικνύει ότι η προκύπτουσα κατάσταση χαρακτηρίζεται από υψηλή συμφωνία, ενώ ταυτόχρονα υποδεικνύει τη σύμφωνη ανταλλαγή (κβάντων) ενέργειας ανάμεσα στον κβαντικό εκπομπό και την ηλεκτρομαγνητική διέγερση (πεδίο). Στην ημικλασική ανάλυση καθίσταται επίσης σαφές και ότι αύξηση της διπολικής ροπής του εκπομπού, d , ή ενίσχυση του πεδίου E με οποιοδήποτε τρόπο, αναμένεται να οδηγούν σε ισχυρότερη σύζευξη και μεγαλύτερο διαχωρισμό.

Αυτή η συμπεριφορά μπορεί να είναι ορατή σε καμπύλες (φάσματα) απορρόφησης του συστήματος ως ένας διαχωρισμός της κορυφής (της μετάβασης $|g\rangle \rightarrow |e\rangle$ για τη συγκεκριμένη ανάλυση). Πειραματικά, το ίδιο μπορούμε να διαπιστώσουμε καταγράφοντας και την ανακλαστικότητα του συστήματος, όπου μπορούμε να δούμε δύο βυθίσματα αντί για ένα στο φάσμα. Από την άλλη, αν χαράξουμε το γράφημα της απορρόφησης (ή ανακλαστικότητας) ως συνάρτηση της ενέργειας του φωτός ($\hbar\omega$) και του κυματανύσματος k (δηλαδή χαράζουμε μία συνάρτηση $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$), αναμένουμε να δούμε τη χαρακτηριστική μορφή των δύο κανονικών «τρόπων» που αποφεύγουν ο ένας τον άλλο. Μπορούμε να δούμε ενδείξεις του διαχωρισμού και από άλλα γραφήματα ανάλογα με το σύστημα που μελετούμε. Κάποια πρόσθετα γραφήματα παρατίθενται και σχολιάζονται για το δικό μας σύστημα και στο κεφάλαιο «Αριθμητικοί υπολογισμοί».

Κεφάλαιο 4

Εξισώσεις

Εισαγωγή

Για την πιο σωστή μελέτη του συστήματος, είναι κρίσιμο να έχουμε μια αρκετά καλή κατανόηση των εξισώσεων που χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό της απορρόφησης. Ειδικότερα, πρέπει να έχουμε υπόψιν μας τις διάφορες προσεγγίσεις που γίνονται και, ως εκ τούτου τις πιθανές αδυναμίες ή περιορισμούς του συγκεκριμένου μοντέλου, ώστε να εξάγουμε όσο το δυνατόν πιο αξιόπιστα συμπεράσματα.

Ας σημειωθεί ότι εδώ παραλείπεται η προσέγγιση που ακολουθούμε για τον υπολογισμό της effective διηλεκτρικής συνάρτησης του $TINP$. Το συγκεκριμένο θέμα παρατίθεται στην αρχή του τμήματος «Απομονωμένο σύστημα $TINP$ », στο κεφάλαιο «Αριθμητικοί υπολογισμοί».

Αλληλεπιδρόν σύστημα SQD-TINP

Σε αυτήν την εργασία ακολουθούμε την προσέγγιση από τους Zhang et al. [12] και την διορθωμένη προσέγγιση από τους Artuso και Bryant, [1]. Αν και στις εν λόγω δημοσιεύσεις η ανάλυση που πραγματοποιείται αφορά την αλληλεπίδραση SQD και μεταλλικού νανοσωματιδίου, μπορούμε εύκολα να προσαρμόσουμε την ανάλυση για την περίπτωση SQD και TINP.

Θεωρούμε, λοιπόν, ένα σφαιρικό κβαντικό εκπομπό (SQD) ακτίνας r ο οποίος αλληλεπιδρά ηλεκτρομαγνητικά με νανοσωματίδιο τοπολογικού μονωτή ακτίνας a . Τα δύο νανοσωματίδια απέχουν κατά μία απόσταση R και υπόκεινται σε εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο μορφής $E = E_0 \cos(\omega t)$.

Θεωρούμε ότι ο κβαντικός εκπομπός περιγράφεται σαν ένα απλό σύστημα δύο επιπέδων (μία απλή εξιτονική διέγερση) με ενέργεια διέγερσης $\hbar\omega_0$, διπολική ροπή μ και διηλεκτρική σταθερά ϵ_S . Για τον κβαντικό εκπομπό εργαζόμαστε κβαντομηχανικά, χρησιμοποιώντας τον τελεστή πυκνότητας των καταστάσεων, ρ , ενώ για το νανοσωματίδιο ακολουθούμε μια κλασική προσέγγιση, χρησιμοποιώντας τη διηλεκτρική συνάρτησή του ϵ_M . Για την περιγραφή του συστήματος ακολουθούμε τη διπολική προσέγγιση.

Χρησιμοποιούμε την παρακάτω Lindbladian master equation για τη δυναμική εξέλιξη του συστήματος, η οποία (πολύ γενικά) περιγράφει την εξέλιξη συστήματος που αλληλεπιδρά με

το περιβάλλον ("reservoirs").

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\rho, H_{SQD}] - \Gamma_{ij}(\rho - \bar{\rho}) \quad (4.1)$$

Η χαμιλτονιανή του συστήματος δύο επιπέδων στη διπολική προσέγγιση είναι:

$$H_{SQD} = \hbar\omega_0\hat{a}^\dagger\hat{a} - \mu E_{SQD}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \quad (4.2)$$

Θεωρούμε ένα σύστημα δύο επιπέδων με θεμελιώδη στάθμη $|g\rangle$ και διεγερμένη στάθμη την $|e\rangle$. Θεωρούμε αναπαράσταση όπου η θεμελιώδης στάθμη γράφεται $|g\rangle = (1 \ 0)^T$ ενώ η διεγερμένη στάθμη $|e\rangle = (0 \ 1)^T$. Με αυτή την επιλογή βάσης, οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής για το σύστημα δύο επιπέδων γράφονται ως εξής:

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger &= |e\rangle \langle g| = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{a} &= |g\rangle \langle e| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.3)$$

Είναι εύκολο να διαπιστώσουμε ότι πράγματι ο πρώτος είναι ο τελεστής δημιουργίας ενώ ο δεύτερος ο τελεστής καταστροφής από τη δράση τους στις καταστάσεις $|g\rangle$ και $|e\rangle$.

Το συνολικό πεδίο που νιώθει το SQD δίνεται ως το άθροισμα του εξωτερικού πεδίου E και του επαγόμενου ηλεκτρικού πεδίου που παράγεται από την πόλωση του TINP. Θα είναι, λοιπόν:

$$E_{SQD} = \frac{1}{\epsilon_{effS}} \left(E + \frac{1}{4\pi\epsilon_B} \frac{s_\alpha P_{TINP}}{R^3} \right) \quad (4.4)$$

όπου το $\epsilon_{effS} = \frac{2\epsilon_B + \epsilon_S}{3\epsilon_B}$ είναι η "effective" διηλεκτρική σταθερά του SQD και $s_\alpha = 2$ όταν το εφαρμοζόμενο πεδίο είναι παράλληλο στον κύριο άξονα του συστήματος (παράλληλα στη γραμμή που ενώνει τα κέντρα των δύο νανοσωματιδίων).

Η πόλωση του TINP προσδιορίζεται από την (ερμιτιανή) σχέση:

$$P_{TINP} = 4\pi\epsilon_B \alpha^3 \left[\gamma \tilde{E}_{TINP}^{(+)} e^{-i\omega t} + \gamma^* \tilde{E}_{TINP}^{(-)} e^{i\omega t} \right] \quad (4.5)$$

Τώρα, το πεδίο που νιώθει το TINP – όπως και πριν στο πεδίο που νιώθει το SQD – θα εξαρτάται όχι μόνο από το εξωτερικό πεδίο E , αλλά και από το πεδίο που επάγεται από την πόλωση του SQD. Θα έχουμε, λοιπόν:

$$E_{TINP} = \left(E + \frac{1}{4\pi\epsilon_B} \frac{s_\alpha P_{SQD}}{\epsilon_{effS} R^3} \right) \quad (4.6)$$

όπου το $\gamma = \frac{\epsilon_T(\omega)}{2\epsilon_B + \epsilon_T(\omega)}$ χρησιμοποιείται για την "effective" πόλωση TINP που περιβάλλεται από διηλεκτρικό.

Η πόλωση του SQD μπορεί να προσδιοριστεί από τα μη διαγώνια στοιχεία του τελεστή πυκνότητας (;;; πηγή;;;) από τη σχέση:

$$P_{SQD} = \mu(\rho_{12} + \rho_{21}) \quad (4.7)$$

Θεωρούμε ότι οι μη διαγώνιοι όροι του τελεστή πυκνότητας εξελίσσονται ως εξής:

$$\begin{aligned}\rho_{12} &= \tilde{\rho}_{12}e^{i\omega t} \\ \rho_{21} &= \tilde{\rho}_{21}e^{-i\omega t}\end{aligned}\quad (4.8)$$

Αντικαθιστούμε, τώρα στην έκφραση για το E_{TINP} :

$$E_{TINP} = \left(\frac{E_0}{2} + \frac{1}{4\pi\epsilon_B} \frac{s_\alpha\mu}{\epsilon_{effS}R^3} \tilde{\rho}_{21} \right) e^{-i\omega t} + \left(\frac{E_0}{2} + \frac{1}{4\pi\epsilon_B} \frac{s_\alpha\mu}{\epsilon_{effS}R^3} \tilde{\rho}_{12} \right) e^{i\omega t} \quad (4.9)$$

Συνεχίζοντας, αντικαθιστώντας τώρα το E_{TINP} πίσω στο P_{TINP} :

$$P_{TINP} = 4\pi\epsilon_B\alpha^3 \left[\gamma \left(\frac{E_0}{2} + \frac{1}{4\pi\epsilon_B} \frac{s_\alpha\mu}{\epsilon_{effS}R^3} \tilde{\rho}_{21} \right) e^{-i\omega t} + \gamma^* \left(\frac{E_0}{2} + \frac{1}{4\pi\epsilon_B} \frac{s_\alpha\mu}{\epsilon_{effS}R^3} \tilde{\rho}_{12} \right) e^{i\omega t} \right] \quad (4.10)$$

Έτσι, επιστρέφοντας στην αρχική έκφραση για το E_{SQD} , μπορούμε τελικά να βρούμε μία έκφραση για το πεδίο που νιώθει το SQD συναρτήσει των $\tilde{\rho}_{12}$ και $\tilde{\rho}_{21}$.

Ορίζοντας και τις ποσότητες:

$$\begin{aligned}G &= \frac{s_\alpha^2\gamma\alpha^3\mu^2}{4\pi\epsilon_B\hbar\epsilon_{effS}^2R^6} \\ \Omega &= \frac{E_0\mu}{2\hbar\epsilon_{effS}} \left(1 + \frac{\gamma\alpha^3s_\alpha}{R^3} \right)\end{aligned}\quad (4.11)$$

Παίρνουμε, λοιπόν, μετά από πράξεις την έκφραση για το ηλεκτρικό πεδίο στο SQD:

$$E_{SQD} = \frac{\hbar}{\mu} \{ (\Omega + G\tilde{\rho}_{21})e^{-i\omega t} + (\Omega^* + G^*\tilde{\rho}_{12})e^{i\omega t} \} \quad (4.12)$$

Εικόνα αλληλεπίδρασης

Για να απλοποιήσουμε την έκφραση περαιτέρω, αξιοποιούμε την προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος (Rotating Wave Approximation). Σε αυτήν την προσέγγιση, κρατάμε μόνο τους πιο αργά ταλαντούμενους όρους της χαμιλτονιανής, αγνοώντας τους γρήγορα ταλαντούμενους όρους. Για να αξιοποιήσουμε την προσέγγιση αυτή, θα μεταβούμε πρώτα στην εικόνα αλληλεπίδρασης, μετασχηματίζοντας κατάλληλα τη master equation που χρησιμοποιούμε.

Για να μεταβούμε στην εικόνα αλληλεπίδρασης, γράφουμε τη χαμιλτονιανή στην εικόνα Schrodinger στην ακόλουθη μορφή:

$$H_{SQD} = H_{0,S} + H_{1,S} \quad (4.13)$$

Ο πρώτος όρος αναπαριστά την αδιατάρακτη χαμιλτονιανή του συστήματος δύο επιπέδων, ενώ ο δεύτερος όρος αναπαριστά τη διαταραχή υπό τη μορφή του εξωτερικού πεδίου σ συνδυασμό με το επαγόμενο πεδίο από το TINP. Η χαμιλτονιανή H_I στην εικόνα αλληλεπίδρασης δίνεται από το μετασχηματισμό:

$$H_I = e^{iH_{0,S}t/\hbar} H_{SQD} e^{-iH_{0,S}t/\hbar} \quad (4.14)$$

Έτσι, πολλαπλασιάζοντας την εξίσωση από αριστερά με $e^{iH_0, st/\hbar}$ και από δεξιά με το συζυγή του $e^{-iH_0, st/\hbar}$, παίρνουμε:

$$e^{iH_0, st/\hbar} \frac{d\rho}{dt} e^{-iH_0, st/\hbar} = e^{iH_0, st/\hbar} \frac{i}{\hbar} [\rho, H_{SQD}] e^{-iH_0, st/\hbar} - e^{iH_0, st/\hbar} \Gamma_{ij}(\rho - \bar{\rho}) e^{-iH_0, st/\hbar} \quad (4.15)$$

Ο δεύτερος όρος μπορεί να γραφεί και σε πιο απλή μορφή:

$$\begin{aligned} e^{iH_0, st/\hbar} \frac{i}{\hbar} [\rho, H_{SQD}] e^{-iH_0, st/\hbar} &= \frac{i}{\hbar} \left[e^{iH_0, st/\hbar} \rho e^{-iH_0, st/\hbar} e^{iH_0, st/\hbar} H_{SQD} e^{-iH_0, st/\hbar} \right. \\ &\quad \left. - e^{iH_0, st/\hbar} H_{SQD} e^{-iH_0, st/\hbar} e^{iH_0, st/\hbar} \rho e^{-iH_0, st/\hbar} \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} [\rho_I, H_I] \end{aligned} \quad (4.16)$$

Στην άνω έκφραση, έχουμε θέσει $\rho_I \equiv e^{iH_0, st/\hbar} \rho e^{-iH_0, st/\hbar}$ και $H_I \equiv e^{iH_0, st/\hbar} H_{SQD} e^{-iH_0, st/\hbar}$. Επιπρόσθετα, αν παρατηρήσουμε ότι το $\bar{\rho}$ είναι διαγώνιο και ότι τα $e^{\pm iH_0, st/\hbar}$ δρουν μόνο στα μη διαγώνια στοιχεία, ο τρίτος όρος μπορεί επίσης να απλοποιηθεί:

$$-e^{iH_0, st/\hbar} \Gamma_{ij}(\rho - \bar{\rho}) e^{-iH_0, st/\hbar} = -\Gamma_{ij}(\rho_I - \bar{\rho}) \quad (4.17)$$

Παίρνουμε, έτσι, την απλοποιημένη master equation:

$$e^{iH_0, st/\hbar} \frac{d\rho}{dt} e^{-iH_0, st/\hbar} = \frac{i}{\hbar} [\rho_I, H_I] - \Gamma_{ij}(\rho_I - \bar{\rho}) \quad (4.18)$$

Η ποσότητα $H_{0,S}$ αναπαριστά την αδιατάρακτη χαμιλτονιανή στην εικόνα Schrodinger, δηλαδή $H_{0,S} = \hbar\omega_0 \hat{a}^\dagger \hat{a}$. Κατά συνέπεια, στην αναπαράσταση που έχουμε επιλέξει, το εκθετικό αυτό έχει τη μορφή:

$$e^{\pm iH_{0,S} t/\hbar} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{\pm i\omega_0 t} \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

Κατά συνέπεια, μπορούμε να βρούμε τις ποσότητες:

$$\begin{aligned} e^{iH_{0,S} t/\hbar} \frac{d\rho}{dt} e^{-iH_{0,S} t/\hbar} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\omega_0 t} \end{pmatrix} \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \rho_{11} & \tilde{\rho}_{12} e^{i\omega t} \\ \tilde{\rho}_{21} e^{-i\omega t} & \rho_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_0 t} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\omega_0 t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\rho}_{11} & \dot{\tilde{\rho}}_{12} e^{i\omega t} + i\omega \tilde{\rho}_{12} e^{i\omega t} \\ \dot{\tilde{\rho}}_{21} e^{-i\omega t} - i\omega \tilde{\rho}_{21} e^{-i\omega t} & \dot{\rho}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_0 t} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \dot{\rho}_{11} & (\dot{\tilde{\rho}}_{12} + i\omega \tilde{\rho}_{12}) e^{i(\omega - \omega_0)t} \\ (\dot{\tilde{\rho}}_{21} - i\omega \tilde{\rho}_{21}) e^{-i(\omega - \omega_0)t} & \dot{\rho}_{22} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.20)$$

Η ποσότητα ρ_I θα είναι:

$$\begin{aligned} \rho_I &= e^{iH_{0,S} t/\hbar} \rho e^{-iH_{0,S} t/\hbar} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\omega_0 t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{11} & \tilde{\rho}_{12} e^{i\omega t} \\ \tilde{\rho}_{21} e^{-i\omega t} & \rho_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_0 t} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \rho_{11} & \tilde{\rho}_{12} e^{i(\omega - \omega_0)t} \\ \tilde{\rho}_{21} e^{-i(\omega - \omega_0)t} & \rho_{22} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.21)$$

Ο τελευταίος όρος στη master equation θα είναι, λοιπόν:

$$\begin{aligned} \Gamma_{ij}(\rho_I - \bar{\rho}) &= \Gamma_{ij} \left[\begin{pmatrix} \rho_{11} & \tilde{\rho}_{12}e^{i(\omega-\omega_0)t} \\ \tilde{\rho}_{21}e^{-i(\omega-\omega_0)t} & \rho_{22} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\rho_{11}-1}{T_{20}} & \frac{\tilde{\rho}_{12}e^{i(\omega-\omega_0)t}}{T_{20}} \\ \frac{\tilde{\rho}_{21}e^{-i(\omega-\omega_0)t}}{T_{20}} & \frac{\rho_{22}}{\tau_0} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.22)$$

Στο επόμενο τμήμα βρίσκουμε τη χαμιλτονιανή H_{SQD} στην εικόνα αλληλεπίδρασης και εφαρμόζοντας την προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος, και στη συνέχεια αντικαθιστούμε στη (μετασχηματισμένη) master equation για να πάρουμε τις τελικές εξισώσεις.

Προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος

Για τη χαμιλτονιανή στην εικόνα αλληλεπίδρασης, θα έχουμε:

$$\begin{aligned} H_I &= e^{iH_0, st/\hbar} H_{SQD} e^{-iH_0, st/\hbar} \\ &= e^{iH_0, st/\hbar} (H_{0,S} + H_{1,S}) e^{-iH_0, st/\hbar} = H_{0,I} + H_{1,I} \end{aligned} \quad (4.23)$$

Μπορούμε να δούμε ότι το «αδιατάρακτο» μέρος της χαμιλτονιανής παραμένει αναλλοίωτο κατά το μετασχηματισμό:

$$\begin{aligned} H_{0,I} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\omega_0 t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \hbar\omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_0 t} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \hbar\omega_0 \end{pmatrix} = H_{0,S} \end{aligned} \quad (4.24)$$

Απεναντίας, η διαταραχή παίρνει τη μορφή:

$$\begin{aligned} H_{1,I} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\omega_0 t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -\mu E_{SQD} \\ -\mu E_{SQD} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_0 t} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -\mu E_{SQD} e^{-i\omega_0 t} \\ -\mu E_{SQD} e^{i\omega_0 t} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.25)$$

Συνολικά, λοιπόν:

$$H_I = \begin{pmatrix} 0 & -\mu E_{SQD} e^{-i\omega_0 t} \\ -\mu E_{SQD} e^{i\omega_0 t} & \hbar\omega_0 \end{pmatrix} \quad (4.26)$$

Αντικαθιστώντας, τώρα, για την έκφραση του E_{SQD} που βρήκαμε προηγουμένως και εφαρμόζοντας την προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος, δηλαδή αγνοώντας τους όρους με $e^{\pm i(\omega+\omega_0)t}$ και κρατώντας όρους με $e^{\pm i(\omega-\omega_0)t}$, παίρνουμε τελικά τη χαμιλτονιανή:

$$H_I^{\text{RWA}} = \begin{pmatrix} 0 & -\hbar(\Omega^* + G^* \tilde{\rho}_{12})e^{i(\omega-\omega_0)t} \\ -\hbar(\Omega + G \tilde{\rho}_{21})e^{-i(\omega-\omega_0)t} & \hbar\omega_0 \end{pmatrix} \quad (4.27)$$

Εξαγωγή των τελικών σχέσεων

Τώρα, μπορούμε να αντικαταστήσουμε στη master equation για την εξαγωγή των τελικών σχέσεων:

$$e^{iH_0, st/\hbar} \frac{d\rho}{dt} e^{-iH_0, st/\hbar} = \frac{i}{\hbar} [\rho_I, H_I] - \Gamma_{ij}(\rho_I - \bar{\rho}) \quad (4.28)$$

Μετά από πράξεις, παίρνουμε τελικά τις τέσσερις εξισώσεις:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{11} &= -i\tilde{\rho}_{12}(\Omega + G\tilde{\rho}_{21}) + i\tilde{\rho}_{21}(\Omega^* + G^*\tilde{\rho}_{12}) - \left(\frac{\rho_{11} - 1}{\tau_0} \right) \\ \dot{\tilde{\rho}}_{12} &= -i\rho_{11}(\Omega^* + G^*\tilde{\rho}_{12}) + i\rho_{22}(\Omega^* + G^*\tilde{\rho}_{12}) - i\tilde{\rho}_{12}(\omega - \omega_0) - \frac{\tilde{\rho}_{12}}{T_{20}} \\ \dot{\tilde{\rho}}_{21} &= -i\rho_{22}(\Omega + G\tilde{\rho}_{21}) + i\rho_{11}(\Omega + G\tilde{\rho}_{21}) + i\tilde{\rho}_{21}(\omega - \omega_0) - \frac{\tilde{\rho}_{21}}{T_{20}} \\ \dot{\rho}_{22} &= -i\tilde{\rho}_{21}(\Omega^* + G^*\tilde{\rho}_{12}) + i\tilde{\rho}_{12}(\Omega + G\tilde{\rho}_{21}) - \frac{\rho_{22}}{\tau_0} \end{aligned} \quad (4.29)$$

Συνεχίζοντας, αφού θεωρήσαμε ότι $\tilde{\rho}_{12} = A + iB$ και άρα $\tilde{\rho}_{21} = A - iB$ και ορίσαμε την ποσότητα $\Delta = \rho_{11} - \rho_{22}$, μπορούμε να λάβουμε εξισώσεις για τα A, B και Δ . Για το Δ , αρκεί να αφαιρέσουμε την τέταρτη από την πρώτη εξίσωση:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{11} - \dot{\rho}_{22} &= -2i\tilde{\rho}_{12}(\Omega + G\tilde{\rho}_{21}) + 2i\tilde{\rho}_{21}(\Omega^* + G^*\tilde{\rho}_{12}) + \frac{\rho_{22}}{\tau_0} - \frac{\rho_{11} - 1}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_0} \\ &\vdots \end{aligned} \quad (4.30)$$

$$\implies \dot{\Delta} = 4A\Omega_I + 4B\Omega_R + 4(A^2 + B^2)G_I - \frac{\Delta}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_0}$$

Οι αντίστοιχες εξισώσεις για τα A και B μπορούν να ληφθούν από τη δεύτερη και τρίτη εξίσωση. Για το A , αρκεί να τις προσθέσουμε, ενώ για το B τις αφαιρούμε. Μετά από αυτές τις σύντομες πράξεις, έχουμε, τελικά το σύστημα διαφορικών εξισώσεων για τα A, B, Δ :

$$\begin{aligned} \dot{A} &= -\frac{A}{T_{20}} + (\omega - \omega_0)B - (\Omega_I + G_I - G_R B)\Delta \\ \dot{B} &= -\frac{B}{T_{20}} - (\omega - \omega_0)A - (\Omega_R + G_R + G_R B)\Delta \\ \dot{\Delta} &= \frac{1 - \Delta}{\tau_0} + 4A\Omega_I + 4B\Omega_R + 4(A^2 + B^2)G_I \end{aligned} \quad (4.31)$$

Επιλύοντας τις παραπάνω διαφορικές εξισώσεις, μπορούμε να βρούμε – για κάποιες αρχικές συνθήκες $A(0), B(0), \Delta(0)$ – την εξέλιξη των A, B και Δ και εν συνεχεία τη στάσιμη κατάσταση του συστήματος $A(\text{inf}), B(\text{inf}), \Delta(\text{inf})$. Έτσι, μπορούμε να βρούμε την απορρόφηση του συστήματος στη στάσιμη κατάσταση μέσα από τις εξισώσεις που θα γράψουμε στο ακόλουθο τμήμα.

Απορρόφηση του συστήματος

Η συνολική απορρόφηση του συστήματος μπορεί να διαχωριστεί στην απορρόφηση λόγω του SQD και στην απορρόφηση λόγω του TINP. Αυτή η προσέγγιση, φυσικά, δεν έχει ιδιαίτερο νόημα σε ισχυρή σύζευξη (δεδομένης της συμφωνίας της κατάστασης), αλλά και πάλι μπορεί να μας δώσει σχετικά χρήσιμη πληροφορία, όπως θα δούμε στο επόμενο κεφάλαιο.

Για το SQD, η έκφραση για την απορροφούμενη ισχύ είναι αρκετά απλή. Μπορεί να εκτιμηθεί από το γινόμενο της ενέργειας του εξιτονίου επί την πιθανότητα μετάβασης σε εξιτονική διέγερση (κατάληψης της διεγερμένης στάθμης) επί τη συχνότητα με την οποία συμβαίνει αυτή η μετάβαση. Επομένως είναι:

$$Q_{SQD} = \frac{\text{ενέργεια εξιτονίου} * \text{πιθανότητα μετάβασης}}{\text{χαρακτηριστικός χρόνος μετάβασης}}, \text{ οπότε:} \quad (4.32)$$

$$Q_{SQD} = \frac{\hbar\omega_0\rho_{22}}{\tau_0}$$

Απεναντίας, για το TINP, θα χρειαστούμε μια διαφορετική προσέγγιση. Η απορροφούμενη ισχύς του τοπολογικού νανοσωματιδίου μπορεί να εκτιμηθεί από την έκφραση:

$$Q_{TINP} = \int_V j E_{TINP}^{inside} dV \quad (4.33)$$

όπου j είναι η πυκνότητα ρεύματος, ενώ E το ηλεκτρικό πεδίο στο εσωτερικό του νανοσωματιδίου.

Η πυκνότητα ρεύματος μπορεί εύκολα να υπολογιστεί από τη χρονική παράγωγο της πόλωσης του νανοσωματιδίου:

$$j = \frac{dP_{TINP}/dt}{V}, \quad (4.34)$$

Για τον πιο εύκολο υπολογισμό του ολοκληρώματος, γράφουμε, τώρα, την E_{TINP} στη μορφή: $E_{TINP} = E_C \cos(\omega t) - E_S \sin(\omega t)$, ορίζοντας αντίστοιχα τις ποσότητες E_C, E_S . Οι ποσότητες $P_{TINP}, E_{TINP}^{inside}$ μπορούν, τότε να γραφτούν ως:

$$E_{TINP}^{inside} = \frac{1}{\epsilon_{effM}} \left(\frac{E_C - iE_S}{2} \right) e^{-i\omega t} + \frac{1}{\epsilon_{effM}^*} \left(\frac{E_C + iE_S}{2} \right) e^{+i\omega t} \quad (4.35)$$

$$P_{TINP} = 4\pi\epsilon_B\alpha^3 \left[\gamma \left(\frac{E_C - iE_S}{2} \right) e^{-i\omega t} + \gamma^* \left(\frac{E_C + iE_S}{2} \right) e^{+i\omega t} \right]$$

Αντικαθιστώντας τα παραπάνω στην έκφραση για την απορροφούμενη ισχύ, παίρνουμε, μετά από αρκετές εύκολες πράξεις:

$$Q_{TINP} = 2\pi\epsilon_B\omega\alpha^3 \text{Im} \left[\frac{\gamma}{\epsilon_{effM}^*} \right] (E_C^2 + E_S^2) \quad (4.36)$$

Πρέπει σε αυτό το σημείο να προσέξουμε ότι αν η στάσιμη κατάσταση των A, B, Δ δεν είναι ανεξάρτητη από το χρόνο – αν για παράδειγμα έχουμε ταλαντούμενες στάσιμες λύσεις – είναι απαραίτητο να χρησιμοποιήσουμε γενικότερες εκφράσεις για τα Q_{SQD}, Q_{TINP} .

Απομονωμένο σύστημα SQD

Για απομονωμένο SQD σε εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο είναι εύκολο να διαπιστώσουμε ότι το σύστημα διαφορικών εξισώσεων εκφυλίζεται στο:

$$\begin{aligned}\dot{A} &= -\frac{A}{T_{20}} + (\omega - \omega_0)B \\ \dot{B} &= -\frac{B}{T_{20}} - (\omega - \omega_0)A - \frac{E_0\mu}{2\hbar\epsilon_{effS}}\Delta \\ \dot{\Delta} &= \frac{1 - \Delta}{\tau_0} + 4\frac{E_0\mu}{2\hbar\epsilon_{effS}}B\end{aligned}\quad (4.37)$$

Με άλλα λόγια, αρκεί να θέσουμε τον «όρο αλληλεπίδρασης» G ίσο με 0, ενώ για τη συχνότητα Rabi Ω αρκεί να αγνοήσουμε το δεύτερο όρο, ο οποίος προκύπτει από την αλληλεπίδραση με το TINP. Επομένως, οι εξισώσεις αυτές προκύπτουν από τις γενικότερες εξισώσεις που γράψαμε προηγουμένως, θεωρώντας:

$$\begin{aligned}G^{iso} &= 0 \\ \Omega^{iso} &= \frac{E_0\mu}{2\hbar\epsilon_{effS}}\end{aligned}\quad (4.38)$$

Η συνολική απορροφούμενη ισχύς θα δίνεται από την ίδια έκφραση όπως προηγουμένως, με τη διαφορά ότι παίρνουμε τη λύση αυτού του συστήματος διαφορικών εξισώσεων. Είναι, δηλαδή, πάλι:

$$Q_{SQD}^{iso} = \frac{\hbar\omega_0\rho_{22}}{\tau_0}, \quad \rho_{22} = \frac{1 - \Delta}{2}\quad (4.39)$$

Απομονωμένο σύστημα TINP

Στην περίπτωση που έχουμε ένα απομονωμένο νανωσωματίδιο τοπολογικού μονωτή σε εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο, μπορούμε να λάβουμε με την ίδια προσέγγιση την παρακάτω έκφραση για την απορρόφηση:

$$Q_{TINP}^{iso} = 2\pi\epsilon_B\omega\alpha^3 \operatorname{Im} \left[\frac{\gamma}{\epsilon_{effM}^*} \right] E_0^2\quad (4.40)$$

Τα αποτελέσματα από τη σχέση αυτή συγκρίνονται στη συνέχεια και με τα αντίστοιχα από τους Siroki et al.. Οι δύο σχέσεις δίνουν πρακτικά τα ίδια αποτελέσματα.

Κεφάλαιο 5

Αριθμητικοί υπολογισμοί

Σε αυτό το κεφάλαιο θα παρουσιαστούν αποτελέσματα από αριθμητικούς υπολογισμούς για το σύστημά μας. Αρχικά, θα γίνει μία συνοπτική μελέτη της απορρόφησης για ένα απομονωμένο κβαντικό εκπομπό που αλληλεπιδρά με ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Στη συνέχεια, μελετάται η απορρόφηση για ένα απομονωμένο TINP και περιγράφονται-ερμηνεύονται οι διεγέρσεις (συντονισμοί) που παρατηρούνται.

Τέλος, θα γίνει μια σχετικά εκτενής μελέτη της απορρόφησης του αλληλεπιδρώντος συστήματος TINP-SQD. Έχοντας τους συντονισμούς του TINP από το προηγούμενο βήμα, μπορούμε να μελετήσουμε τη συμπεριφορά του συστήματος όταν η συχνότητα μετάβασης του κβαντικού εκπομπό βρίσκεται κοντά στους συντονισμούς του TINP. Διαπιστώνουμε ότι εμφανίζονται διάφορα ενδιαφέροντα φαινόμενα που υποδεικνύουν ότι μπορούμε να πετύχουμε ισχυρή σύζευξη στο σύστημα.

Απομονωμένο σύστημα SQD

As αρχίσουμε τη μελέτη του συστήματος θεωρώντας πρώτα κβαντικό εκπομπό ο οποίος αλληλεπιδρά με ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Θεωρώ χρόνους χαλάρωσης στην ενέργεια $\hbar\omega_0 = 2.5eV$ τους $\tau_0 = 0.8ns$ και $T_{20} = 0.3ns$, όπως έχουν παρθεί και από τους Zhang et al, Artuso and Bryant [12], [1].

Όπως είναι γνωστό, οι χρόνοι χαλάρωσης γενικά αυξάνονται καθώς αυξάνεται η συχνότητα μετάβασης. Έτσι, για κάποια συχνότητα μετάβασης ω'_0 κάνουμε την (απλοϊκή) προσέγγιση:

$$\begin{aligned}\tau'_0 &\approx \left(\frac{\tau_0}{\hbar\omega_0}\right) \times \hbar\omega'_0 \\ T'_{20} &\approx \left(\frac{T_{20}}{\hbar\omega_0}\right) \times \hbar\omega'_0\end{aligned}\tag{5.1}$$

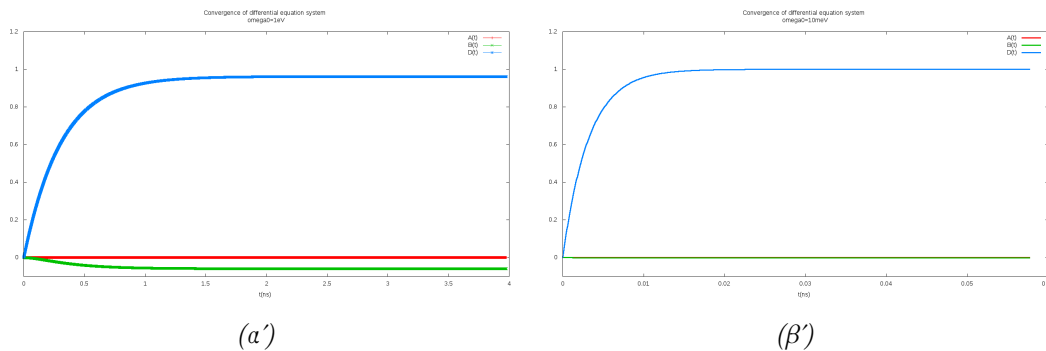
Για ενέργειες στο βαθύ υπέρυθρο, η άνω προσέγγιση θα μας δώσει χρόνους χαλάρωσης στα picoseconds. Χρησιμοποιώντας αυτή την προσέγγιση, λοιπόν, μπορούμε να δούμε πώς συμπεριφέρεται το SQD για διαφορετικές τιμές των σχετικών παραμέτρων.

Πρώτα, όμως, ας δούμε ορισμένα σημεία σχετικά με τη χρονική εξέλιξη του συστήματος, η οποία περιγράφεται από το σύστημα διαφορικών εξισώσεων για τα A, B, Δ που κα-

ταγράφηκαν στο προηγούμενο κεφάλαιο. Για την επίλυση του συστήματος χρησιμοποιήθηκε η κλασική μέθοδος Runge-Kutta. Ως αρχικές συνθήκες του προβλήματος θεωρήσαμε ότι $A(0) = 0, B(0) = 0, \Delta(0) = 0$, δηλαδή το σύστημα βρίσκεται αρχικά σε μία απλή μικτή κατάσταση της θεμελιώδους και της διεγερμένης στάθμης.

Στο Σχήμα 5.1 φαίνεται η εξέλιξη των $A(t), B(t), \Delta(t)$ για δύο διαφορετικά ω_0 , όπου βλέπουμε ότι το σύστημα συγκλίνει μετά την πάροδο αρκετού χρόνου. Έχοντας φτάσει στη στάσιμη κατάσταση, λοιπόν, μπορούμε να βρούμε την απορρόφηση του κβαντικού εκπομπού με τη σχέση που καταγράφηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο.

Μια πρώτη παρατήρηση είναι ότι το σύστημα συγκλίνει ταχύτερα για μικρότερο χρόνο χαλάρωσης (εδώ: μικρότερο ω_0). Αυτή είναι μια εξαιρετικά σημαντική παρατήρηση όταν μας ενδιαφέρει η ταχύτητα των υπολογισμών. Πέραν τούτου, το $|\Delta|$ σύγκλισης φαίνεται να μειώνεται με αύξηση του χρόνου χαλάρωσης (αύξηση του ω_0), κάτι που οδηγεί σε μεγαλύτερη συνολική απορρόφηση, όπως φαίνεται και από τις σχέσεις που εξαγάγαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο.



Σχήμα 5.1: Χρονική εξέλιξη των παραμέτρων $A(t), B(t)$ και $\Delta(t)$, από τις αρχικές συνθήκες $(0,0,0)$ έως τη στάσιμη κατάσταση του συστήματος. (α') $\omega_0 = 1eV$. (β') $\omega_0 = 10meV$

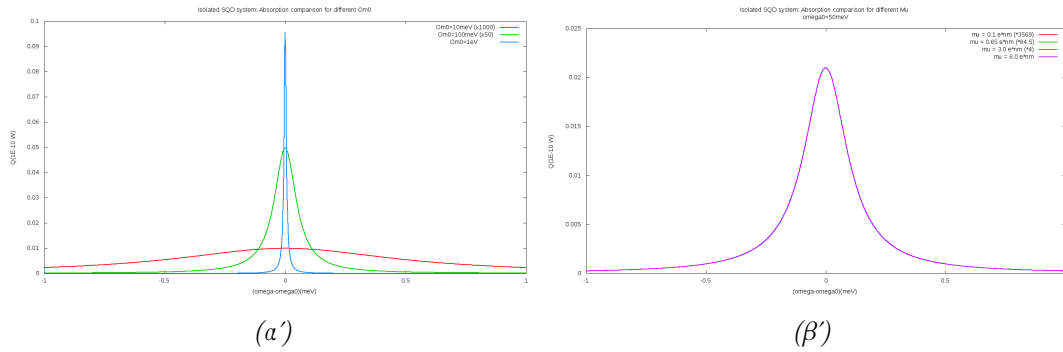
Σε αυτή την εργασία δε θα μελετηθούν τα αποτελέσματα για διαφορετικές αρχικές συνθήκες, αν και ενδέχεται το σύστημα να φτάνει σε διαφορετικές στάσιμες καταστάσεις για διαφορετικές αρχικές συνθήκες, όπως σημειώθηκε και από τους Artuso, Bryant [1] για σύστημα κβαντικού εκπομπού-μεταλλικού νανοσωματιδίου.

Τώρα ας δούμε πώς τροποποιείται η απορρόφηση ανάλογα με κάποιες παραμέτρους του SQD , αρχίζοντας από την τιμή της συχνότητας μετάβασης, ω_0 , του SQD .

Στο Σχήμα 5.2 (α') φαίνεται το φάσμα απορρόφησης για τρεις διαφορετικές συχνότητες μετάβασης: $\omega_0 = 10meV, 100meV$ και $1eV$. Πράγματι, βλέπουμε ότι το εύρος της καμπύλης απορρόφησης αυξάνεται καθώς μειώνεται το ω_0 , πράγμα λογικό, αφού σύμφωνα με την προηγούμενη παραδοχή ο χρόνος χαλάρωσης μειώνεται. Παράλληλα, βλέπουμε ότι με την αύξηση του ω_0 (και άρα αύξηση του χρόνου χαλάρωσης) η μέγιστη απορρόφηση του SQD αυξάνεται. Πρέπει να σημειωθεί ότι η μορφή της καμπύλης είναι στην πραγματικότητα ανεξάρτητη του ω_0 , όπως βλέπουμε άλλωστε και από το σύστημα διαφορικών εξισώσεων για τα A, B, Δ : τα $\tau_{\omega_0}, \tau_{\omega_0}$ (και το μ , όπως σχολιάζεται παρακάτω) είναι που καθορίζουν τη μορφή της καμπύλης. Ο μόνος λόγος που το ω_0 επηρεάζει την απορρόφηση είναι η παραδοχή που έκανα

για το χρόνο χαλάρωσης, καθώς η έκφραση για το χρόνο χαλάρωσης περιέχει τώρα το ω_0 .

Στο ίδιο σχήμα, (β'), φαίνεται η επίδραση της διπολικής ροπής μετάβασης μ στην απορρόφηση του SQD. Παρατηρούμε, πρώτα, ότι αυξάνοντας τη διπολική ροπή μετάβασης αυξάνεται η απορρόφηση του SQD. Όπως, όμως, είναι εύκολο να διαπιστώσουμε, η καμπύλη απορρόφησης έχει το ίδιο εύρος ανεξαρτήτως του μ .



Σχήμα 5.2: Συμπεριφορά της απορρόφησης του απομονωμένου SQD.

(α') Συμπεριφορά για τρεις διαφορετικές τιμές της συχνότητας μετάβασης: $\omega_0 = 1eV, 100meV$ και $10meV$, με σταθερή διπολική ροπή μετάβασης $\mu = 0.65e * nm$. Η απορρόφηση για $10meV$ και $100meV$ είναι μεγεθυμένη για σύγκριση.

(β') Συμπεριφορά για τέσσερις διαφορετικές τιμές της διπολικής ροπής μετάβασης $\mu = 0.1, 0.65, 3.0$ και $6.0e * nm$, για σταθερό $\omega_0 = 50meV$. Οι καμπύλες απορρόφησης κανονικοποιήθηκαν με βάση την καμπύλη μεγαλύτερης απορρόφησης (πολλαπλασιασμός της απορρόφησης επί κάποιο παράγοντα). Έτσι, βλέπουμε ότι με τη διαφορά ενός παράγοντα οι καμπύλες είναι πανομοιότυπες (στο σχήμα όλες πρακτικά ταυτίζονται).

Στο επόμενο τμήμα παρουσιάζεται μια σύντομη μελέτη του απομονωμένου *TINP*, όπου αναγνωρίζονται και ερμηνεύονται βασικές διεγέρσεις-συντονισμοί του *TINP*, δεδομένα τα οποία είναι απαραίτητα για τη μελέτη του αλληλεπιδρώντος συστήματος στη συνέχεια.

Απομονωμένο σύστημα TINP

Σε αυτό το σημείο θα παρουσιαστούν αποτελέσματα από αριθμητικούς υπολογισμούς που αφορούν το απομονωμένο νανοσωματίδιο τοπολογικού μονωτή (*TINP*). Τα αποτελέσματα αυτού του τμήματος, αν και λαμβάνονται με κάπως διαφορετική μεθοδολογία, αποτελούν σε μεγάλο βαθμό αναπαραγωγή (και επιβεβαίωση) των συμπερασμάτων από τη μελέτη των G. Siroki et al., στη δημοσίευσή τους *Single-electron induced surface plasmons on a topological nanoparticle* [9] που αφορά *TINP* από Bi_2Se_3 . Γίνονται, ωστόσο, και ορισμένες πρόσθετες παρατηρήσεις για το σύστημα, αρκετές εκ των οποίων θα αξιοποιηθούν για τη μελέτη του αλληλεπιδρώντος συστήματος *SQD-TINP*, που αποτελεί και το κύριο κομμάτι αυτού του κεφαλαίου.

Πρώτα, περιγράφεται πώς υπολογίζεται η διηλεκτρική συνάρτηση του νανοσωματιδίου, ποσότητα απαραίτητη για τον υπολογισμό της απορρόφησης. Στη συνέχεια, γίνεται μία μελέτη του φάσματος απορρόφησης για δύο διαφορετικές περιπτώσεις ακτίνας του νανοσωματιδίου, $\alpha = 50nm$ και $\alpha = 10nm$, και για δύο διαφορετικές περιπτώσεις του επιπέδου Fermi για την κάθε ακτίνα: κάτω ($E_F = -A/\alpha$) και πάνω ($E_F = +A/\alpha$) από το σημείο Dirac). Στο τέλος, για τις ίδιες περιπτώσεις γίνεται περαιτέρω μελέτη των διεγέρσεων αξιοποιώντας γραφήματα απορρόφησης $(\omega, \alpha) \rightarrow Q$, τα οποία δίνονται με τη μορφή "heatmap". Με βάση όλα αυτά τα γραφήματα αναγνωρίζονται και ερμηνεύονται οι συντονισμοί του *TINP*, δεδομένα τα οποία θα χρησιμοποιηθούν στη μελέτη του αλληλεπιδρώντος συστήματος *SQD-TINP* στη συνέχεια.

Διηλεκτρική συνάρτηση και απορρόφηση

Ας ξεκινήσουμε, λοιπόν, με μερικά λόγια για τη διηλεκτρική συνάρτηση του *TINP*. Για τη διηλεκτρική συνάρτηση του bulk Bi_2Se_3 , χρησιμοποιούμε το ίδιο απλό μοντέλο Lorentz όπως και στην [9], θεωρώντας τρεις διαφορετικές συνεισφορές στη διηλεκτρική συνάρτηση. Ειδικότερα, συμπεριλαμβάνουμε τους ελεύθερους φορείς όγκου (f) και τα εγκάρσια (οπτικά) φωνόνια α και β του πλέγματος. Έτσι, θεωρούμε τη διηλεκτρική συνάρτηση:

$$\epsilon_{in}(\omega) = \sum_{j=\alpha,\beta,f} \frac{\omega_{pj}^2}{\omega_{0j}^2 - \omega^2 - i\gamma_j\omega} \quad (5.2)$$

Οι τιμές των παραμέτρων ω_{pj} , ω_{0j} και γ_j που χρησιμοποιούμε έχουν υπολογιστεί πάλι από τους G. Siroki et al, αξιοποιώντας πειραματικά δεδομένα.

Μέχρι αυτό το σημείο ακόμη δεν έχουμε συμπεριλάβει την επίδραση των επιφανειακών καταστάσεων του *TINP*, κάτι που αναπόφευκτα θα έχει κάποια επίδραση στη διηλεκτρική συνάρτηση του νανοσωματιδίου. Για την εύρεση μιας (προσεγγιστικής) έκφρασης για την πλήρη διηλεκτρική συνάρτηση, θα αξιοποιηθεί μια απλή παρατήρηση. Κατ'αρχάς, προκύπτει [9] ότι η ενεργός διατομή απορρόφησης σ_{abs} σφαιρικού νανοσωματιδίου στο κενό ($\epsilon = 1$) που υπόκειται σε εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο, στην ημιστατική προσέγγιση δίνεται από τη σχέση:

$$\sigma_{abs} = 4\pi\alpha^3 \frac{2\pi}{\lambda} \text{Im} \left[\frac{\epsilon_{in} + \delta_R - 1}{\epsilon_{in} + \delta_R + 2} \right] \quad (5.3)$$

Ο όρος δ_R εμφανίζεται λόγω μεταβάσεων μεταξύ των απεντοπισμένων τοπολογικά προστατευμένων επιφανειακών καταστάσεων, λόγω αλληλεπίδρασης με το εξωτερικό ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Συγκρίνοντας την έκφραση του σ_{abs} με την κλασική σχέση για την ενεργό διατομή διηλεκτρικής σφαίρας, μπορούμε να δούμε μία αντιστοιχία ανάμεσα στη διηλεκτρική συνάρτηση της σφαίρας και στην ποσότητα $\epsilon_{in} + \delta_R$. Επομένως, όταν λαμβάνεται υπόψη η συνεισφορά των επιφανειακών (τοπολογικών) καταστάσεων, τότε μπορούμε να θεωρήσουμε ότι η πλήρης διηλεκτρική συνάρτηση δίνεται από την:

$$\epsilon_{TINP}(\omega) = \epsilon_{in}(\omega) + \delta_R(\omega)$$

Για να βρούμε την απορρόφηση του απομονωμένου TINP, αρκεί να αντικαταστήσουμε στην αντίστοιχη έκφραση που περιγράφηκε και στη θεωρία:

$$Q_{TINP}^{(iso)} = 2\pi\epsilon_B\omega\alpha^3 E_0^2 \text{Im} \left[\frac{\gamma}{\epsilon_{effM}^*} \right]$$

όπου τα γ και ϵ_{effM} περιέχουν τη διηλεκτρική συνάρτηση του TINP. Είναι εύκολο να δείξουμε ότι στο κενό ($\epsilon_B = 1$) η σχέση αυτή είναι ισοδύναμη με τη σχέση για τη σ_{abs} , διαφέροντας μόνο κατά ένα σταθερό παράγοντα (οι παραστάσεις στο $\text{Im}[\cdot]$ είναι ισοδύναμες).

Ο όρος διαταραχής δ_R εξαρτάται όχι μόνο από την ακτίνα του νανοσωματιδίου, α , αλλά και από τη διάταξη των ηλεκτρονίων στις τοπολογικά προστατευμένες επιφανειακές καταστάσεις του νανοσωματιδίου. Σε αυτή την εργασία θεωρούμε δύο διαφορετικές περιπτώσεις για τις ενεργειακές καταστάσεις των ηλεκτρονίων, για δύο διαφορετικές ακτίνες του νανοσωματιδίου, δίνοντας συνολικά τέσσερις διαφορετικές περιπτώσεις προς μελέτη.

Στην πρώτη περίπτωση που θα μελετηθεί, το επίπεδο Fermi βρίσκεται κάτω από το σημείο Dirac, στην ενέργεια $E_F = -A/\alpha$, δηλαδή όλες οι στάθμες μέχρι πριν το σημείο Dirac είναι κατειλημμένες. Τότε ο όρος δ_R δίνεται από τη σχέση:

$$\delta_R^{(E_F^-)} = \frac{e^2}{6\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{2A - \hbar\omega\alpha} + \frac{1}{2A + \hbar\omega\alpha} \right) \quad (5.4)$$

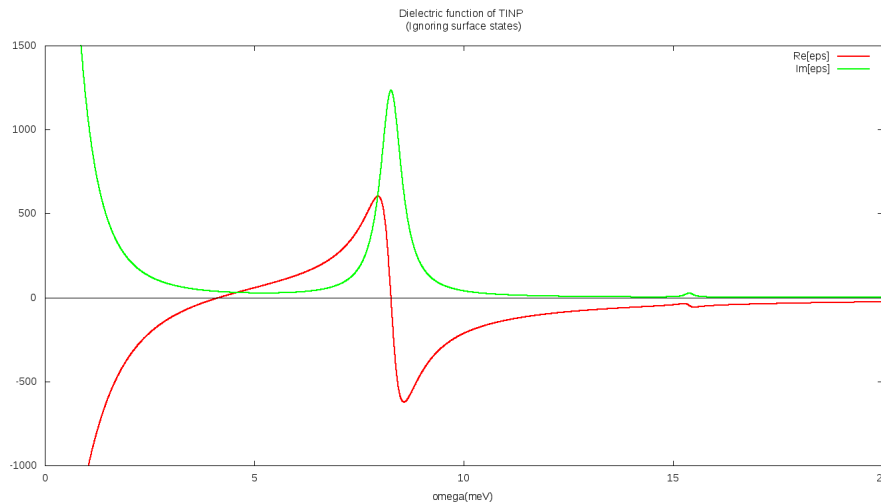
Στη δεύτερη περίπτωση, το επίπεδο Fermi βρίσκεται πάνω από το σημείο Dirac, στην ενέργεια $E_F = +A/R$, δηλαδή είναι τώρα κατειλημμένες και οι πρώτες στάθμες ακριβώς πάνω από το σημείο Dirac. Τώρα η έκφραση για το δ_R γίνεται:

$$\delta_R^{(E_F^+)} = \frac{e^2}{3\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{A - \hbar\omega\alpha} + \frac{1}{A + \hbar\omega\alpha} \right) \quad (5.5)$$

Έχοντας ξεκαθαρίσει αυτά τα πολύ βασικά ζητήματα, μπορούμε να περάσουμε στην ανάλυση των περιπτώσεων που θα μελετηθούν.

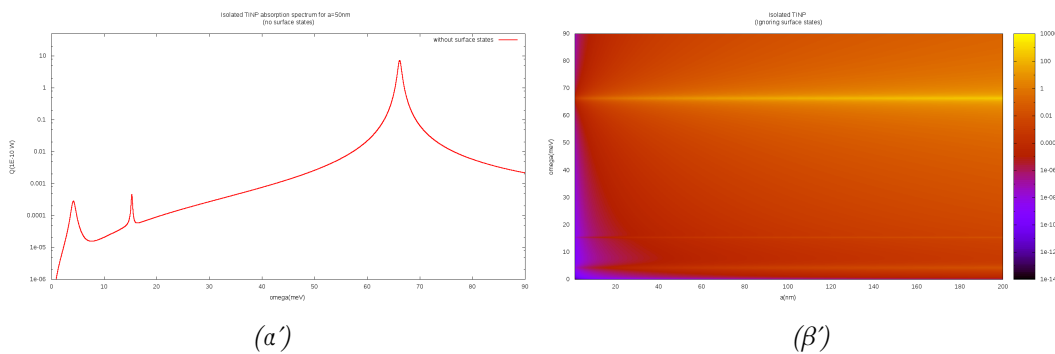
Αγνοώντας τις επιφανειακές καταστάσεις

Ας δούμε πρώτα σύντομα τη συμπεριφορά του συστήματος αγνοώντας τις επιφανειακές καταστάσεις ($\delta_R = 0$). Στο Σχήμα 5.3 φαίνεται η διηλεκτρική συνάρτηση όπως περιγράφεται από την Εξίσωση 5.2. Στη διηλεκτρική συνάρτηση είναι ορατή (από αριστερά προς τα δεξιά) η επίδραση των ελεύθερων φορέων, του α φωνονίου και του β φωνονίου.



Σχήμα 5.3: Διηλεκτρική συνάρτηση (πραγματικό και φανταστικό μέρος) του $TINP$ αγνοώντας τις επιφανειακές καταστάσεις. Από αριστερά προς τα δεξιά, είναι ορατή η επίδραση των ελεύθερων φορέων, του α φωνονίου και του β φωνονίου στη διηλεκτρική συνάρτηση.

Στο Σχήμα 5.4, τώρα, φαίνεται η απορρόφηση του συστήματος όταν αγνοούμε τις επιφανειακές καταστάσεις. Στο (α') φαίνεται το φάσμα απορρόφησης για μια τυχαία ακτίνα νανοσωματιδίου ($\alpha = 50nm$). Αντίστοιχα, στο (β') φαίνεται η απορρόφηση για διαφορετικές ακτίνες, όπου βλέπουμε ότι σε αυτήν την περίπτωση οι διεγέρσεις του $TINP$ είναι ανεξάρτητες της ακτίνας, όπως άλλωστε ήταν αναμενόμενο από το μοντέλο μας. Στο φάσμα βλέπουμε τρεις διαφορετικές κορυφές, για τις οποίες πρέπει να γίνει λίγη συζήτηση.



Σχήμα 5.4: (α') Απορρόφηση του $TINP$, αγνοώντας τις επιφανειακές καταστάσεις (λογαριθμική κλίμακα). Από αριστερά προς τα δεξιά, εμφανίζονται τρεις κορυφές με αυξανόμενο ύψος: στα $4.21meV$, στα $15.315meV$ και $66.19meV$. (β') Απορρόφηση του $TINP$ για μεταβλητή ακτίνα του νανοσωματιδίου, α , αγνοώντας τις επιφανειακές καταστάσεις. Οι διεγέρσεις που εμφανίζονται είναι οι ίδιες με το (α').

Η πρώτη κορυφή που παρατηρείται στα $\sim 4meV$ είναι μια κορυφή εντοπισμένου επιφανειακού πλασμονίου-πολαριτονίου LSPP (Localized Surface Plasmon Polariton) η οποία οφείλεται στους ελεύθερους φορείς στον όγκο του υλικού. Η πρώτη ένδειξη ότι πρόκειται για πλασμονική διέγερση έρχεται από τη θέση της κορυφής: στην κορυφή η διηλεκτρική συνάρτηση έχει την τιμή $Re\{\epsilon_{TINP}\} \approx -2$ και $Im\{\epsilon_{TINP}\} \approx 35$ (σχετικά μικρό). Πρόκειται, λοιπόν, για συντονισμούς Fröhlich, δηλαδή συντονισμούς της πολωσιμότητας του νανοσωματιδίου,

κάτι που υποδεικνύει διέγερση επιφανειακού πλασμονίου.

Μια επιπλέον ένδειξη είναι ότι αν «σβήσουμε» τεχνητά τους ελεύθερους φορείς (δηλαδή αν θέσουμε $\omega_{pf} = 0$) τότε η συγκεκριμένη κορυφή εξαφανίζεται από το φάσμα απορρόφησης. Ας σημειωθεί ότι αφαιρώντας το α -φωνόνιο η κορυφή πάλι εξαφανίζεται, κάτι που υποδεικνύει ότι η διέγερση αυτή οφείλεται όχι μόνο στους ελεύθερους φορείς, αλλά και στην επίδραση του α -φωνονίου στο υλικό.

Η δεύτερη, ασθενέστερη, κορυφή στα $\sim 15meV$ είναι ένας συντονισμός που οφείλεται στο β -φωνόνιο, όπως μπορούμε εύκολα να διαπιστώσουμε συγκρίνοντας με τη διηλεκτρική συνάρτηση. Επιπρόσθετα, αφαιρώντας είτε τους ελεύθερους φορείς, είτε το α -φωνόνιο, παρουσιάζεται ελάχιστη (αν και μη μηδενική) μετατόπιση στην κορυφή αυτή.

Η τρίτη (και κατά πολύ ισχυρότερη) κορυφή που παρουσιάζεται στα $\sim 66meV$ είναι μάλλον ένα φωνονικό πολαριτόνιο (LSPPhP - Localized Surface Phonon Polariton) του νανοσωματιδίου. Διαφέρει, μάλιστα κατά περίπου τέσσερις τάξεις μεγέθους (~ 20000 φορές) από τις πρώτες δύο κορυφές, διατηρώντας συγκρίσιμο εύρος φασματικής γραμμής ($\sim 0.8meV$ σε $\Phi\Omega HM$). Όπως και με το LSPP, η κορυφή εμφανίζεται σε θέση όπου $Re\{\epsilon_{TINP}\} \approx -2$ και $Im\{\epsilon_{TINP}\} \approx 0$, δηλαδή πάλι πρόκειται για συντονισμό Fröhlich. Στην περίπτωση αυτή, όμως, το φανταστικό μέρος της διηλεκτρικής συνάρτησης είναι πολύ μικρότερο, οδηγώντας σε πολύ πιο έντονο συντονισμό.

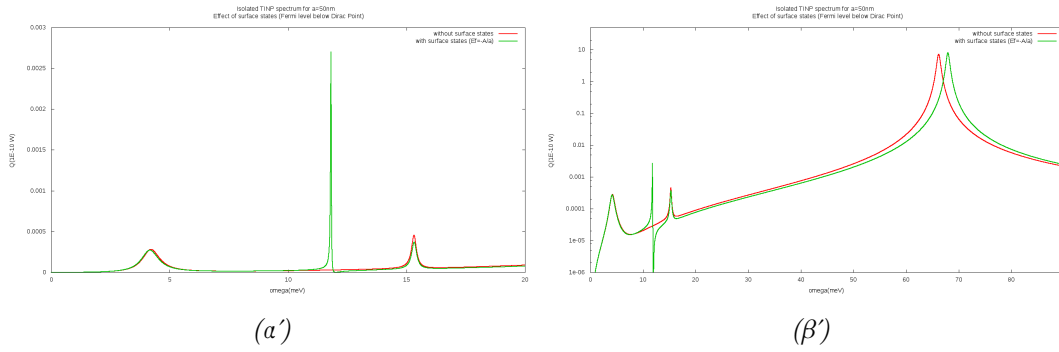
Για να δούμε πού οφείλεται η κορυφή αυτή, μπορούμε πάλι να «σβήσουμε» τεχνητά μία-μια τις διεγέρσεις του υλικού. Όταν αφαιρούμε τα α -φωνόνια η κορυφή μετατοπίζεται στα $\sim 34meV$ και η απορρόφηση μειώνεται στο $\sim 20\%$ της κανονικής τιμής της. Πέραν τούτου, το φασματικό εύρος της κορυφής αυξάνεται ελαφρώς. Απεναντίας, όταν αφαιρούμε τους ελεύθερους φορείς η κορυφή μετατοπίζεται λιγότερο, περίπου στα $57meV$ με μικρότερη επίδραση στην απορρόφηση ($\sim 85\%$ της κανονικής τιμής της), ενώ το φασματικό εύρος φαίνεται να μειώνεται ελαφρώς. Τα β -φωνόνια έχουν ελάχιστη επίδραση στην κορυφή. Από αυτές τις παρατηρήσεις, φαίνεται λοιπόν ότι ο συγκεκριμένος συντονισμός οφείλεται κυρίως στα α -φωνόνια (φωνονικό πολαριτόνιο) με μία μικρότερη συνεισφορά και από τους ελεύθερους φορείς στον όγκο του υλικού, τα οποία αλληλεπιδρούν με τη φωνονική διέγερση.

Περιλαμβάνοντας τις επιφανειακές καταστάσεις

Ακτίνα νανοσωματιδίου 50nm

Όταν περιλαμβάνουμε τις επιφανειακές καταστάσεις στο σύστημα, οι διεγέρσεις του συστήματος τροποποιούνται σημαντικά. Ας μελετήσουμε πρώτα το φάσμα απορρόφησης για ακτίνα νανοσωματιδίου ίση με $50nm$.

Στο Σχήμα 5.5 φαίνεται το φάσμα απορρόφησης συμπεριλαμβάνοντας και τις επιφανειακές καταστάσεις με επίπεδο Fermi ακριβώς κάτω ($E_F = -A/R$) από το σημείο Dirac, για $a = 50nm$. Παρατηρούμε ότι τώρα προκύπτει ένας πρόσθετος συντονισμός, κοντά στα $11.8meV$, ο οποίος παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον. Εφεξής, θα αποκαλούμε αυτή τη διέγερση επιφανειακό τοπολογικό πλασμόνιο, SToP (Surface Topological Plasmon), όπως και στο [9].



Σχήμα 5.5: (α') Απορρόφηση απομονωμένου νανοσωματιδίου τοπολογικού μονωτή, ακτίνας 50nm, αγνοώντας (με κόκκινο χρώμα) και λαμβάνοντας υπόψη (με πράσινο χρώμα) τις επιφανειακές καταστάσεις. Στην περίπτωση όπου συμπεριλήφθηκε η επίδραση των επιφανειακών καταστάσεων, θεωρήθηκε ότι το επίπεδο Fermi βρίσκεται κάτω από τον κώνο Dirac. Στο (β') παρουσιάζεται (σε λογαριθμική κλίμακα) το φάσμα απορρόφησης για μεγαλύτερο εύρος ενεργειών, συμπεριλαμβάνοντας έτσι και τη διέγερση LSPbP.

Η κορυφή *SToP* παρουσιάζει εξαιρετικά στενό φασματικό εύρος, περί τα 0.04meV (FWHM), δηλαδή περίπου μια τάξη μεγέθους λεπτότερο από τις υπόλοιπες διεγέρσεις. Επιπρόσθετα, χαρακτηρίζεται από απορρόφηση περίπου μιας τάξης μεγέθους μεγαλύτερη από τις LSPp και β κορυφές.

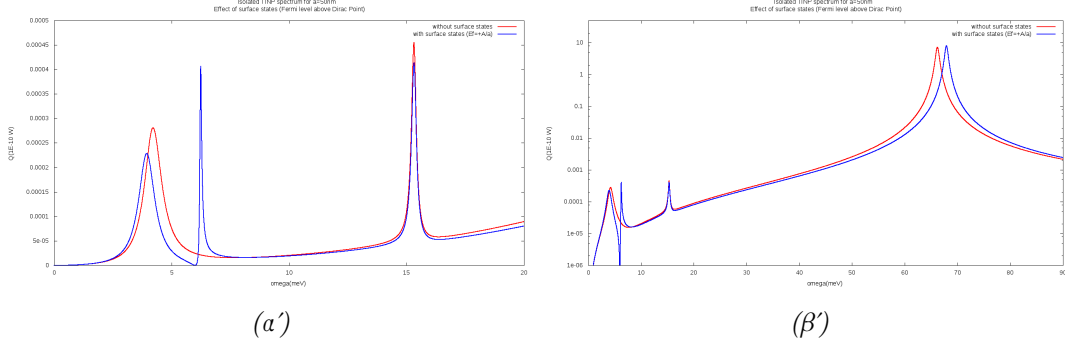
Όπως σημειώνεται και από τους Siroki et al., αυτή η κορυφή οφείλεται στη σύζευξη των επιφανειακών καταστάσεων του TINP με το α -φωνόνιο, το οποίο κανονικά δε συνεισφέρει στην απορρόφηση (όπως φαίνεται συγκρίνοντας τη θέση των κορυφών με τη διηλεκτρική συνάρτηση). Με άλλα λόγια, φαίνεται ότι τα ηλεκτρόνια στις επιφανειακές καταστάσεις δρουν ως μεσολαβητές μεταξύ του φωτός και του α φωνονίου.

Πράγματι, αφαιρώντας το α -φωνόνιο η κορυφή αλλάζει σημαντικά: το εύρος της αυξάνεται περίπου στα 0.22meV , ενώ η απορρόφηση αυξάνεται περίπου κατά πέντε φορές. Από την άλλη, αφαιρώντας τους ελεύθερους φορείς ή το β -φωνόνιο η κορυφή δεν αλλάζει ιδιαίτερα. Αυτό υποδεικνύει ότι όντως υπάρχει σημαντική αλληλεπίδραση ανάμεσα στις επιφανειακές καταστάσεις και το α -φωνόνιο του υλικού.

Παρατηρούμε, ακόμα, ότι κοντά στην κορυφή εμφανίζεται μηδενισμός στην απορρόφηση. Η θέση όπου συμβαίνει αυτός ο μηδενισμός, 12meV , αντιστοιχεί σε απειρισμό του δ_R (και άρα και του πραγματικού μέρους της διηλεκτρικής συνάρτησης) για τη συγκεκριμένη ακτίνα νανοσωματιδίου. Αυτό συμβαίνει όταν ο παρονομαστής στην έκφραση του δ_R μηδενίζεται: $2A - \hbar\omega a = 0$. Όπως περιγράφεται και από τους Siroki et al., μπορούμε να ερμηνεύσουμε το μηδενισμό της απορρόφησης ως αποτέλεσμα του συντονισμού στις επιφανειακές καταστάσεις: σε αυτήν την ενέργεια ο όρος διαταραχής των επιφανειακών καταστάσεων απειρίζεται ($\delta_R \rightarrow \infty$), οπότε πρακτικά η επιφάνεια γίνεται τέλεια αγωγίμη. Κατά συνέπεια, η επιφάνεια «θωρακίζει» το εσωτερικό του νανοσωματιδίου από την ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία, οδηγώντας σε μηδενική απορρόφηση της ακτινοβολίας.

Αξίζει να σημειωθεί ότι παρουσία των επιφανειακών καταστάσεων, παρατηρούνται ελαφρές μετατοπίσεις στις άλλες κορυφές, κάτι που υποδεικνύει ότι υπάρχει μία (μικρή) αλληλεπίδραση των άλλων συντονισμών (LSPp, β , LSPbP) με το τοπολογικό πλασμαόνιο.

Αντίστοιχα αποτελέσματα βρίσκουμε και για επίπεδο Fermi ακριβώς πάνω από το σημείο Dirac. Στο Σχήμα 5.6 φαίνεται η απορρόφηση σε αυτή την περίπτωση. Πάλι εμφανίζεται ένας συντονισμός $SToP$, τώρα περί τα $6.24meV$, με ένα μηδενισμό της απορρόφησης στα $6meV$. Πάλι, ο μηδενισμός συμβαίνει στον απειρισμό του δ_R , όταν δηλαδή: $A - \hbar\omega = 0$.



Σχήμα 5.6: (α') Απορρόφηση απομονωμένου νανοσωματιδίου τοπολογικού μονωτή, ακτίνας $50nm$, αγνοώντας (με κόκκινο χρώμα) και λαμβάνοντας υπόψη (με μπλε χρώμα) τις επιφανειακές καταστάσεις. Στην περίπτωση όπου συμπεριλήφθηκε η επίδραση των επιφανειακών καταστάσεων, θεωρήθηκε ότι το επίπεδο Fermi βρίσκεται πάνω από τον κώνο Dirac. Στο (β') παρουσιάζεται (σε λογαριθμική κλίμακα) το φάσμα απορρόφησης για μεγαλύτερο εύρος ενεργειών, συμπεριλαμβάνοντας έτσι και τη διέγερση $LSPhP$.

Παρατηρούμε ότι και σε αυτή την περίπτωση η κορυφή είναι αρκετά στενή ($0.10meVFWHM$), πάλι στενότερη από τις άλλες κορυφές, αν και έχει αρκετά μικρότερο ύψος. Όπως και πριν, πάλι βλέπουμε μία μικρή μετατόπιση των άλλων κορυφών όταν «ανάβουμε» την αλληλεπίδραση.

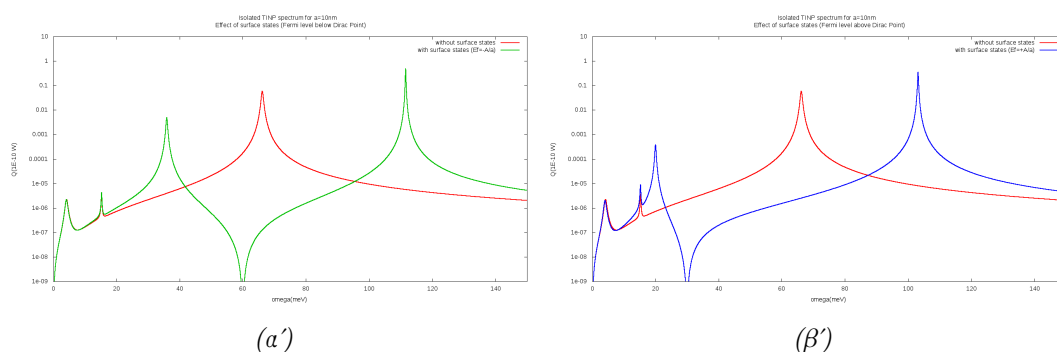
Αξίζει να σημειωθεί ότι οι κορυφές $SToP$ επίσης φαίνεται να συναντώνται σε θέσεις όπου $Re\{\epsilon_{TINP}\} = -2$ και $Im\{\epsilon_{TINP}\} \approx 0$ (ή σχετικά μικρό). Πρόκειται, λοιπόν, πάλι για συντονισμούς Fröhlich, δηλαδή συντονισμούς της πολωσιμότητας του νανοσωματιδίου. Συνολικά, λοιπόν, φαίνεται ότι οι συντονισμοί του $TINP$ που αντιστοιχούν σε συντονισμό Fröhlich είναι οι $LSPP$, $SToP$ και $LSPhP$.

Ακτίνα νανοσωματιδίου 10nm

Αντίστοιχα αποτελέσματα λαμβάνουμε και στην περίπτωση όπου η ακτίνα του νανοσωματιδίου είναι $10nm$. Στο Σχήμα 5.7 (α') φαίνεται το φάσμα απορρόφησης για επίπεδο Fermi κάτω από το σημείο Dirac, ενώ στο (β') για για επίπεδο Fermi πάνω από το σημείο Dirac.

Αυτή τη φορά η κορυφή του τοπολογικού πλασμονίου μετατοπίζεται στα $\hbar\omega \approx 35.94meV$ για $E_F = -A/\alpha$ και στα $\hbar\omega \approx 20.03meV$ για $E_F = +A/\alpha$, επίσης σε συντονισμούς Fröhlich. Οι αντίστοιχες θέσεις μηδενισμού της απορρόφησης είναι τώρα στα $\hbar\omega = 60meV$ και στα $\hbar\omega = 30meV$ αντίστοιχα, στις ενέργειες, πάλι, όπου απειρίζεται το δ_R για αυτή την ακτίνα νανοσωματιδίου.

Παρατηρούμε ότι εδώ η απορρόφηση των κορυφών $SToP$ είναι πολύ ισχυρότερη, αλλά το εύρος τους είναι τώρα αρκετά μεγαλύτερο. Για την περίπτωση $E_F = -A/\alpha$ είναι τώρα περί τα $0.5FWHM$, ενώ για την $E_F = +A/\alpha$ περί τα $0.4meVFWHM$. Ενδεχομένως αυτή η ενίσχυση και διεύρυνση να προκύπτει από την αλληλεπίδραση της διέγερσης με άλλες



Σχήμα 5.7: Απορρόφηση απομονωμένου νανοσωματιδίου τοπολογικού μονωτή, ακτίνας $10nm$, αγνοώντας (με κόκκινο χρώμα) και λαμβάνοντας υπόψη (με μπλε/πράσινο χρώμα) τις επιφανειακές καταστάσεις (α') για επίπεδο Fermi πάνω από τον κώνο Dirac και (β') για επίπεδο Fermi πάνω από τον κώνο Dirac.

διεγέρσεις του νανοσωματιδίου (και πιθανότατα με την LSP_{hP} – βλέπε και την παράγραφο που ακολουθεί).

Έχει ιδιαίτερο ενδιαφέρον ότι συμπεριλαμβάνοντας τις επιφανειακές καταστάσεις για $E_F = \pm A/\alpha$ εμφανίζεται σημαντική μετατόπιση της φωνονικής-πλασμονικής κορυφής (LSP_{hP}). Αυτή η μετατόπιση υποδεικνύει σχετικά έντονη αλληλεπίδραση του φωνονικού πολαριτονίου, LSP_{hP} , με το τοπολογικό πλασμόνιο, $SToP$. Περισσότερα σχετικά με αυτή την παρατήρηση καταγράφονται και στο αμέσως επόμενο τμήμα.

Ας σημειωθεί ότι περιοριζόμαστε σε μελέτη νανοσωματιδίων μικρότερης ακτίνας, καθώς, όπως διαπιστώσαμε, για σχετικά μεγάλες τιμές ακτίνας δεν εμφανίζονται μερικά από τα πιο ενδιαφέροντα φαινόμενα στο αλληλεπιδρών σύστημα $SQD-TINP$. Μάλιστα, η σύζευξη είναι ήδη σχετικά ασθενής για ακτίνα νανοσωματιδίου $a = 50nm$. Οι λόγοι για αυτή την παρατήρηση συζητούνται στο επόμενο τμήμα, στη μελέτη του αλληλεπιδρώντος συστήματος $SQD-TINP$.

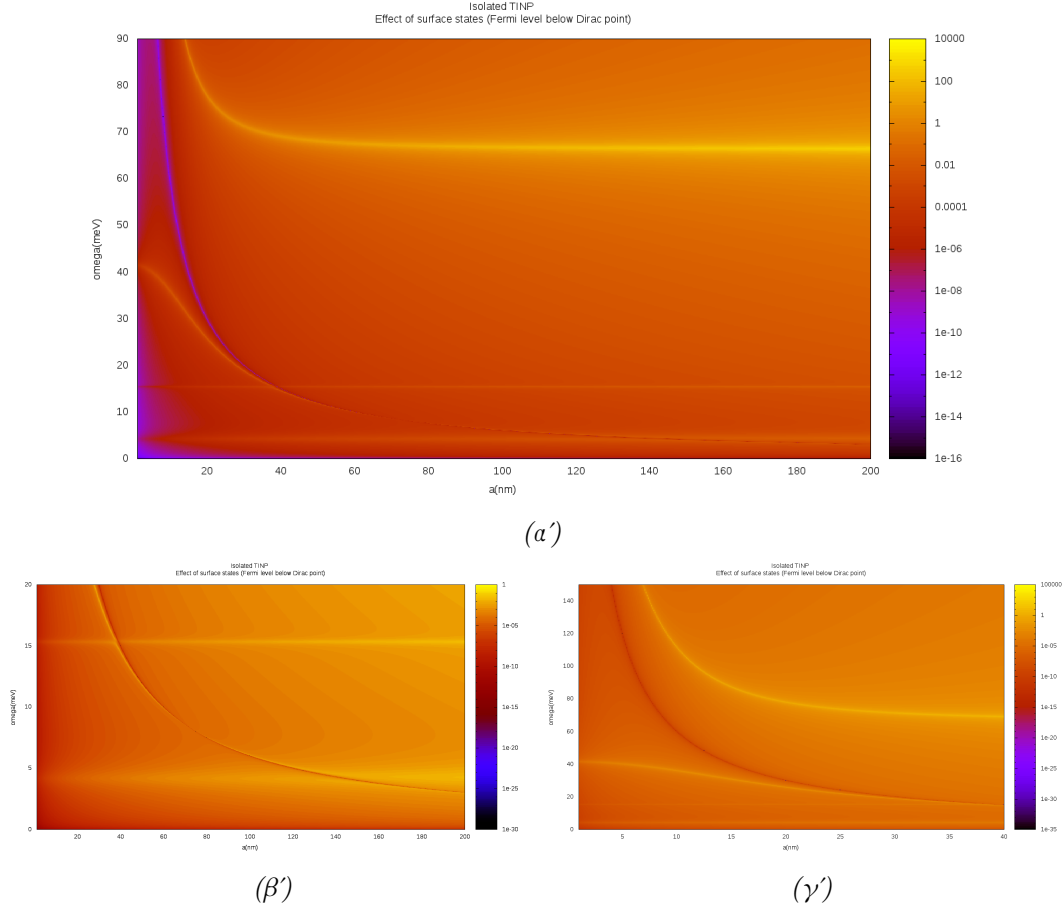
Αλληλεπίδραση των διεγέρσεων: Εμφάνιση Splitting

Για μια καλύτερη εικόνα των διεγέρσεων του νανοσωματιδίων, όπως και του πώς αυτές αλληλεπιδρούν μεταξύ τους, είναι πολύ χρήσιμο να δούμε τη συμπεριφορά της απορρόφησης για μεταβλητή ακτίνα a . Σύμφωνα με υπολογισμούς των G. Siroki et al., τα $10nm$ φαίνεται να είναι το κατώτατο όριο όπου το μοντέλο είναι ακόμα αρκετά αξιόπιστο. Ο ίδιος περιορισμός λήφθηκε υπόψη και στην επιλογή του $a = 10nm$ για τη μελέτη του συστήματος. Ως εκ τούτου, εστιάζουμε στο διάστημα $a \in (10nm, 200nm)$, όπου φαίνεται ξεκάθαρα η αλληλεπίδραση των διαφόρων διεγέρσεων.

Στο Σχήμα 5.8 βλέπουμε τις διεγέρσεις του νανοσωματιδίου για επίπεδο Fermi κάτω από το σημείο Dirac. Για σύγκριση, όταν αγνοούμε τις επιφανειακές καταστάσεις το διάγραμμα έχει τη μορφή όπως στο Σχήμα 5.4 (β'). Οι επιφανειακές καταστάσεις φαίνονται στα γραφήματα ως μία σκοτεινή κόκκινη λωρίδα, όπου έχουμε μηδενισμό της απορρόφησης. Πράγματι, η προσθήκη των επιφανειακών καταστάσεων φαίνεται να επηρεάζει έντονα τις διεγέρσεις του συστήματος.

Όπως σχολιάστηκε και προηγουμένως, η διεγέρση $SToP$ προκύπτει από την αλληλεπίδρα-

ση των επιφανειακών καταστάσεων με το α φωνόνιο. Τώρα, η διεγέρση $SToP$ φαίνεται να αλληλεπιδρά με τις άλλες διεγέρσεις του $TINP$, οδηγώντας σε splittings. Στο (β') φαίνονται splittings από την αλληλεπίδραση του $SToP$ με το $LSPP$ και το β φωνόνιο, ενώ στο (γ') με το $LSPPhP$.

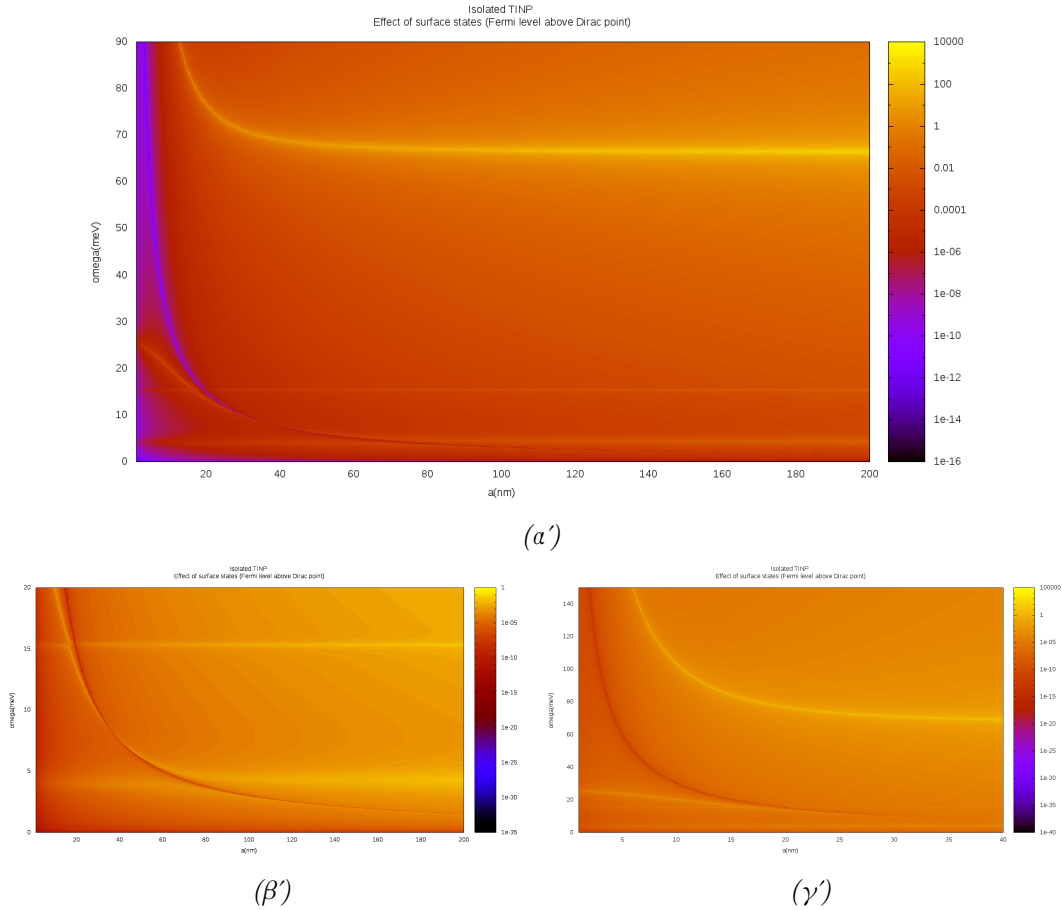


Σχήμα 5.8: Διεγέρσεις του συστήματος όταν «ανάβουμε» τις επιφανειακές καταστάσεις, θεωρώντας επίπεδο Fermi ακριβώς κάτω από το σημείο Dirac. Η επίδραση των επιφανειακών καταστάσεων στις διεγέρσεις είναι ιδιαίτερα εμφανής (βλέπε και Σχήμα 5.4 (β') για σύγκριση).

(α') Στο διάστημα $\alpha \in (1, 200)nm$ και $\omega \in (0, 90)meV$ μπορούμε να δούμε πώς οι επιφανειακές καταστάσεις αλληλεπιδρούν με όλες τις άλλες διεγέρσεις ($LSPP$, β φωνόνιο και $LSPPhP$). (β') Εδώ φαίνεται πιο καθαρά η αλληλεπίδραση με το β -φωνόνιο (άνω) και με το $LSPP$ (κάτω) ($\alpha \in (10, 200)nm$, $\omega \in (0, 20)meV$). (γ') Εδώ φαίνεται πιο καθαρά η αλληλεπίδραση με το $LSPPhP$ ($\alpha \in (1, 40)nm$, $\omega \in (0, 140)meV$).

Όμοια, μπορούμε να δούμε και την περίπτωση για επίπεδο Fermi πάνω από τον κώνο Dirac, όπως φαίνεται στο Σχήμα 5.9. Όπως και πριν, κι εδώ καθίσταται σαφές ότι υπάρχει έντονη αλληλεπίδραση των επιφανειακών καταστάσεων με τις υπόλοιπες διεγέρσεις του $TINP$. Σε αυτή την περίπτωση, ωστόσο, φαίνεται να υπάρχει κάπως εντονότερο splitting με τις άλλες διεγέρσεις.

Έχοντας κάνει αυτή τη σύντομη μελέτη, μπορούμε τώρα να δούμε πώς το $TINP$ αλληλεπι-



Σχήμα 5.9: Διεγέρσεις του συστήματος όταν «ανάβουμε» τις επιφανειακές καταστάσεις, θεωρώντας επίπεδο Fermi ακριβώς πάνω από το σημείο Dirac. Το *splitting* εδώ φαίνεται να είναι κάπως εντονότερο.

(α') Στο διάστημα $\alpha \in (1, 200)nm$ και $\omega \in (0, 90)meV$ μπορούμε να δούμε πώς οι επιφανειακές καταστάσεις αλληλεπιδρούν με όλες τις άλλες διεγέρσεις (*LSP*, β φωνόνιο και *LSPhP*). (β') Εδώ φαίνεται πιο καθαρά η αλληλεπίδραση με το β -φωνόνιο (άνω) και με το *LSP* (κάτω) ($\alpha \in (10, 200)nm$, $\omega \in (0, 20)meV$). (γ') Εδώ φαίνεται πιο καθαρά η αλληλεπίδραση με το *LSPhP* ($\alpha \in (1, 40)nm$, $\omega \in (0, 140)meV$).

δρά με τον κβαντικό εκπομπό. Από τις διεγέρσεις που αναφέρθηκαν, αυτές που αναμένουμε να έχουν την πιο ενδιαφέρουσα συμπεριφορά στο αλληλεπιδρών σύστημα SQD-TINP είναι αυτές που διακρίνονται από τη μεγαλύτερη «οξύτητα», δηλαδή ένα συνδυασμό ισχυρής απορρόφησης και στενού εύρους. Πράγματι, όπως θα δούμε και στη συνέχεια, τα πιο ενδιαφέροντα φαινόμενα που θα παρατηρήσουμε εμφανίζονται κοντά στους συντονισμούς *SToP* και *LSPhP*, οι οποίοι έχουν αυτά τα χαρακτηριστικά.

Αλληλεπιδρών σύστημα SQD-TINP

Έχοντας πραγματοποιήσει μία σύντομη μελέτη των απομονωμένων SQD και TINP, μπορούμε να περάσουμε στο αλληλεπιδρών σύστημα των δύο νανοσωματιδίων. Κατ'άρχας, θα γίνει μια σημείωση για τις διάφορες παραμέτρους του προβλήματος και τις τιμές που επιλέγηκαν για τους διάφορους αριθμητικούς υπολογισμούς. Στη συνέχεια, θα γίνει μία συνοπτική περιγραφή του βασικού τρόπου μελέτης του συστήματος και θα παρουσιαστούν τα βασικά αποτελέσματα από τους υπολογισμούς που πραγματοποιήθηκαν, με ιδιαίτερη έμφαση στην εμφάνιση Rabi splitting στο σύστημα. Τέλος, γίνεται μια αναφορά σε κάποια άλλα φαινόμενα που παρατηρήθηκαν και πραγματοποιείται συζήτηση για ορισμένα πρόσθετα ζητήματα που αφορούν το σύστημα και τη μελέτη του.

Παράμετροι του συστήματος

Για τον χβαντικό εκπομπό, θεωρούμε τις ίδιες παραμέτρους όπως και στο τμήμα που προηγήθηκε. Πρώτα, θεωρούμε ότι οι αρχικές συνθήκες του τελεστή πυκνότητας είναι $A(0) = B(0) = \Delta(0) = 0$, δηλαδή έχουμε μικτή κατάσταση θεμελιώδους και διεγερμένης στάθμης. Έστω επίσης ότι η διηλεκτρική σταθερά του είναι $\epsilon_S = 6\epsilon_0$ και ότι η διπολική ροπή του μ βρίσκεται στο διάστημα $(0.65, 6.0)e \cdot nm$. Κάνουμε, επίσης, την ίδια προσέγγιση για τους ρυθμούς χαλάρωσης τ_0, T_{20} , οπότε έχουμε τιμές στην περιοχή των ps για το εύρος ενεργειών το οποίο μας απασχολεί.

Όσον αφορά το τοπολογικό νανοσωματίδιο, χρησιμοποιούμε πάλι τη διηλεκτρική συνάρτηση που περιγράφηκε στο προηγούμενο τμήμα, συμπεριλαμβάνοντας τις τοπολογικά προστατευμένες επιφανειακές καταστάσεις (όρος διαταραχής δ_R). Η μελέτη πραγματοποιείται για δύο διαφορετικές τιμές ακτίνας $\alpha = 10nm, 50nm$ και για δύο διαφορετικές περιπτώσεις του επιπέδου Fermi ($E_F = \pm A/\alpha$).

Μία βασική παράμετρος του συστήματος είναι η απόσταση R ανάμεσα στα κέντρα των δύο νανοσωματιδίων, η οποία θα παίρνει τιμές μεγαλύτερες (και οριακά κατά προσέγγιση ίσες) της ακτίνας του TI. Όπως θα δούμε, η απόσταση R παίζει καθοριστικό ρόλο – μαζί με τη διπολική ροπή μετάβασης – στην ποιοτική συμπεριφορά του συστήματος. Η ένταση I της ακτινοβολίας, επιλέγεται να είναι $1W/cm^2$, αρκετά μικρή ώστε να ισχύουν οι προσεγγίσεις του μοντέλου μας. Όπως διαπιστώθηκε, η ποιοτική συμπεριφορά του συστήματος δε μεταβάλλεται σημαντικά για αρκετά μεγάλο εύρος τιμών της έντασης (έως και $\sim 100W/cm^2$), κάτι το οποίο μάλλον αποτελεί συνέπεια της γραμμικότητας του μοντέλου μας. Απαιτείται, λοιπόν, προσοχή όταν εξάγουμε συμπεράσματα σχετικά με τη συμπεριφορά του συστήματος για διαφορετικές εντάσεις ακτινοβολίας, καθώς το πραγματικό σύστημα μπορεί να παρουσιάζει έντονες μη γραμμικότητες και, ως εκ τούτου σημαντικές αποκλίσεις από το μοντέλο.

Υποθέτουμε, ακόμα, ότι το εξωτερικό πεδίο εφαρμόζεται κατά μήκος της ευθείας που ενώνει τα κέντρα των δύο νανοσωματιδίων, δηλαδή κατά τον «άξονα» του συστήματος, οπότε $s_\alpha = 2$. Αυτή η επιλογή γίνεται διότι περιμένουμε η ενίσχυση του πεδίου να είναι ισχυρότερη κατά μήκος του άξονα, δηλαδή του άξονα του συστήματος. Τέλος, για το υλικό υποβάθρου υποθέτουμε ότι $\epsilon = \epsilon_0$, επιλογή που – αν και ίσως μη ρεαλιστική – δεν πρέπει να επηρεάζει τα

ποιοτικά αποτελέσματα των υπολογισμών μας.

Τρόπος μελέτης

Έχοντας αναφερθεί στις παραμέτρους που χρησιμοποιούνται, πρέπει τώρα να γίνει μια σύντομη περιγραφή του τρόπου μελέτης του συστήματος. Η μελέτη περιλαμβάνει αρκετά βήματα και διαφορετικές διαδικασίες, μόνο μερικές εκ των οποίων – αυτές που παράγουν και τα πιο ενδιαφέροντα αποτελέσματα – περιγράφονται στα επόμενα τμήματα με μεγαλύτερη λεπτομέρεια. Στις λιγότερο «εντυπωσιακές» περιπτώσεις, θα γίνεται μόνο μία απλή αναφορά σε κάποια αποτελέσματα, μόνο εάν υπάρχει κάτι ενδιαφέρον ή σχετικό με τη βασική ανάλυση του συστήματος.

Συμπεριφορά κοντά και μακριά από συντονισμό: Το πρώτο βήμα είναι περισσότερο τυπικό, παρά απαραίτητο για τη μελέτη μας. Αρχικά, υπολογίστηκε η απορρόφηση του συστήματος για διαφορετικές τιμές της συχνότητας μετάβασης ω_0 ($\omega_0 \in (0, 200)meV$) του χβαντικού εκπομπού και για ω στην περιοχή του ω_0 , δηλαδή $\omega \in (\omega_0 - d\omega_1, \omega_0 + d\omega_2)$. Έτσι, διαπιστώθηκε ότι τα πιο ενδιαφέροντα φαινόμενα παρουσιάζονται – όπως και αναμενόταν – κοντά στους συντονισμούς του TINP. Στην περιοχή αυτών των συντονισμών, λοιπόν, γίνεται μία ενδελεχέστερη μελέτη της συμπεριφοράς του συστήματος. Πρέπει να υπενθυμίσουμε ότι οι εν λόγω συντονισμοί έχουν καθοριστεί στο προηγούμενο τμήμα «Απομονωμένο σύστημα TINP» για τις δύο περιπτώσεις επιπέδου Fermi που μελετούνται. Η μελέτη πραγματοποιείται ξεχωριστά για κάθε κορυφή, για δύο διαφορετικές περιπτώσεις ακτίνας του τοπολογικού νανοσωματιδίου ($\alpha = 10nm, 50nm$) και για τις δύο περιπτώσεις επιπέδου Fermi.

Γραφήματα $\omega - Q$ - μεταβάλλοντας τα R, μ, I : Στη συνέχεια, λοιπόν, θεωρούμε συχνότητα μετάβασης ω_0 γύρω από τον κάθε συντονισμό του τοπολογικού νανοσωματιδίου και υπολογίζουμε την απορρόφηση Q του συστήματος (ολική Q_{total} και συνιστώσες Q_{SQD}, Q_{TINP} από κάθε σωματίδιο) μεταβάλλοντας κάθε φορά μόνο μία παράμετρο του συστήματος, ώστε να μπορούν να εξαχθούν συμπεράσματα. Για κάθε τιμή της συχνότητας μετάβασης, μελετούνται τα αποτελέσματα που έχει η μεταβολή της έντασης ακτινοβολίας I , της διπολικής ροπής μ του χβαντικού εκπομπού, αλλά και της απόστασης R μεταξύ των δύο νανοσωματιδίων. Έτσι, θα παράγονται γραφήματα της απορρόφησης Q σε ένα διάστημα $\omega \in (\omega_0 - d\omega_1, \omega_0 + d\omega_2)$ για διαφορετικά R, μ, I , από όπου θα μπορούμε να εξάγουμε τα συμπεράσματά μας.

Γραφήματα 3Δ - παρουσίαση *splitting*: Εκτός από το συνήθη τύπο γραφημάτων συναρτήσεων του τύπου $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ όπως αυτές του $\omega - Q$, θα παρουσιαστούν και γραφήματα συναρτήσεων $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, για τα οποία καλό είναι να γίνουν εδώ λίγες επεξηγήσεις. Τα γραφήματα αυτά θα είναι υπό τη μορφή "heatmap" και θα αφορούν κυρίως την εμφάνιση (ή μη) *splitting* στο σύστημα.

Το πρώτο γράφημα τέτοιου τύπου είναι της συνάρτησης της απορρόφησης για διαφορετικές τιμές του ω_0 σε ένα διάστημα του ω , δηλαδή του τύπου $(\omega_0 \times \omega) \rightarrow Q$, με τα ω_0 στον οριζόντιο και τα ω στον κατακόρυφο άξονα. Η ποσότητα Q θα είναι πάντα μία εκ των Q_{total}, Q_{SQD} ή Q_{TINP} και τα γραφήματα θα υπολογίζονται για διαφορετικούς συνδυασμούς τιμών των υπολοίπων παραμέτρων (I, μ, R). Όταν βρισκόμαστε σε ασθενή σύζευξη, θα

βλέπουμε ότι οι συνιστώσες απορρόφησης, θα διακρίνονται από μία μόνο καμπύλη, ενώ στη συνολική απορρόφηση δε θα έχουμε splitting, αλλά τις δύο καμπύλες σε υπέρθεση (σε σχήμα "X"). Απεναντίας, όταν βρισκόμαστε σε ισχυρή σύζευξη, θα εμφανίζεται η οικεία μορφή του γραφήματος σε splitting, όμοιο με τη μορφή της σχέσης διασποράς που συναντήσαμε στη θεωρία (γράφημα $k - \omega$).

Τα άλλα δύο γραφήματα αυτού του τύπου θα είναι για την απορρόφηση για διαφορετικές τιμές του μ ή του R σε ένα διάστημα του ω , δηλαδή της μορφής $(\mu \times \omega) \rightarrow Q$ ή $(R \times \omega) \rightarrow Q$, με τα μ ή R στον οριζόντιο και τα ω στον κατακόρυφο άξονα, με την απορρόφηση Q να αποδίδεται πάλι με χρωματικό κώδικα. Τώρα, για σταθερό ω_0 κοντά στον υπό μελέτη συντονισμό του TINP, και με σταθερές τις υπόλοιπες παραμέτρους, μεταβάλλουμε το μ ή το R και παρατηρούμε αν εμφανίζεται splitting. Στην τετριμμένη περίπτωση (ασθενή σύζευξη) θα βλέπουμε μόνο μία καμπύλη για την απορρόφηση (ολική και συνιστώσες), αντίστοιχα με τα προηγούμενα γραφήματα. Σε ισχυρή σύζευξη θα παρατηρείται διαχωρισμός τόσο στις συνιστώσες της απορρόφησης, όσο και στην ολική απορρόφηση του συστήματος.

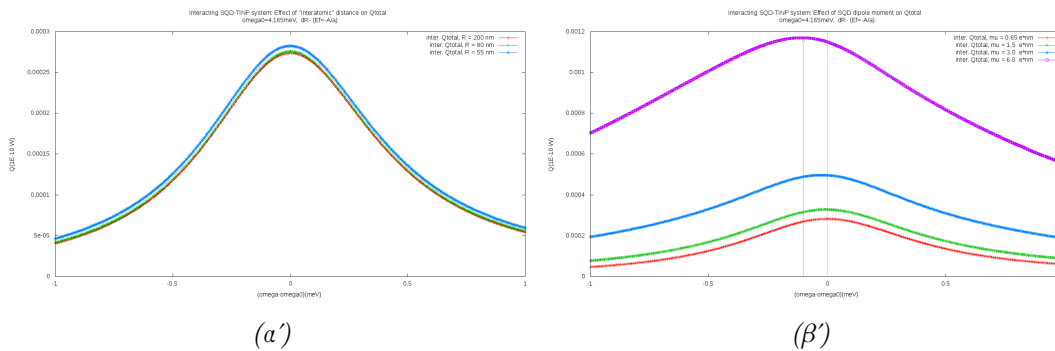
Συνολικά, αξιοποιώντας τα γραφήματα που περιγράφηκαν εδώ, η μελέτη θα εστιάζεται στην επίδραση των παραμέτρων ω_0 , R και μ (με κάποιες αναφορές στην ένταση I) στη συμπεριφορά του συστήματος κοντά στους διάφορους τύπους διεγέρσεων του TINP. Στο τέλος του κεφαλαίου θα συζητηθεί και η επίδραση κάποιων άλλων παραμέτρων, όπως των χρόνων χαλάρωσης του τελεστή πυκνότητας του SQD (τ_0, T_{20}) αλλά και η διεύθυνση πόλωσης του διεγείροντος φωτός, αν και ο βασικός τρόπος μελέτης είναι όμοιος, οπότε δεν έχει ιδιαίτερο νόημα να επεκταθούμε περισσότερο σε αυτό το σημείο.

Έχοντας ξεκαθαρίσει τη βασική μεθοδολογία που χρησιμοποιήθηκε, μπορούμε να περάσουμε τώρα στα αποτελέσματα που λήφθηκαν από τους αριθμητικούς υπολογισμούς.

Κορυφή LSPP και β φωνονίου

Πρώτα, ως εισαγωγή και χάριν πληρότητας (όπως και για σύγκριση αργότερα), θα παρουσιαστεί μία συνοπτική μελέτη των κορυφών LSPP (εντοπισμένου επιφανειακού πλασμονικού πολαριτονίου) και β φωνονίου, όπου δεν παρατηρείται splitting. Θα εστιάσουμε στην κορυφή LSPP, καθώς τα αποτελέσματα για την κορυφή του β φωνονίου είναι όμοια και δεν έχει νόημα να επαναληφθούν. Ας σημειωθεί ότι επιλέγουμε αυθαίρετα την περίπτωση επιπέδου Fermi κάτω από το σημείο Dirac, καθώς τα αποτελέσματα είναι ποιοτικά τα ίδια και στις δύο περιπτώσεις.

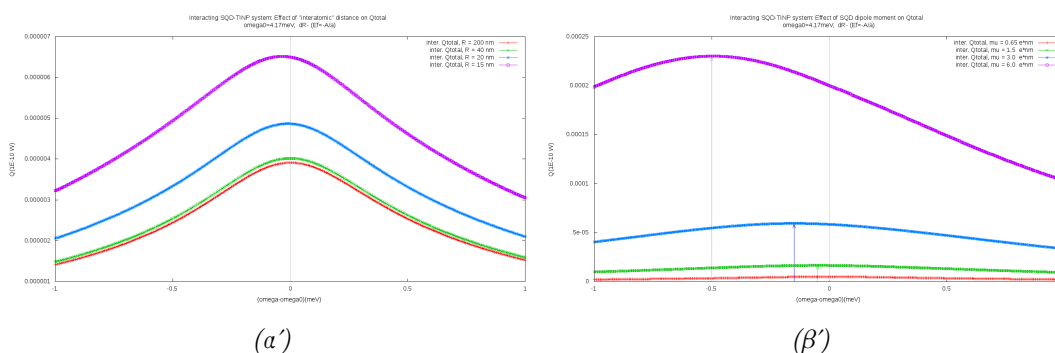
Ας δούμε λοιπόν τη συμπεριφορά του συστήματος γύρω από την κορυφή LSPP όταν η ακτίνα του νανοσωματιδίου είναι $a = 50nm$. Όπως φαίνεται και στο Σχήμα 5.10 (α'), μειώνοντας την απόσταση R με σταθερή διπολική ροπή μ του SQD, εμφανίζεται μια μικρή αύξηση στην απορρόφηση όπως και μία ανεπαίσθητη μετατόπιση προς το ερυθρό. Μπορούμε να αποδώσουμε την ενίσχυση αυτή στην ισχυρότερη σύζευξη των σωματιδίων, λόγω της μικρότερης απόστασης μεταξύ τους. Από την άλλη, στο (β'), βλέπουμε ότι αυξάνοντας το μ με σταθερό R η κορυφή μετατοπίζεται προς το ερυθρό, ενώ ταυτόχρονα παρουσιάζει μία ενίσχυση στην απορρόφηση.



Σχήμα 5.10: Κορυφή $LSPP$ για ακτίνα νανοσωματιδίου $50nm$. (α') Επίδραση της απόστασης R μεταξύ των σωματιδίων στην απορρόφηση. Επιλέγηκε διπολική ροπή για το SQD : $\mu = 0.65e * nm$. (β') Επίδραση της διπολικής ροπής μ του SQD στην απορρόφηση. Η απόσταση μεταξύ των σωματιδίων επιλέγηκε να είναι $R = 55nm$.

Προτού, όμως, συζητηθούν αυτά τα φαινόμενα, ας δούμε και την περίπτωση όπου η ακτίνα του νανοσωματιδίου είναι $a = 10nm$. Αναμένουμε εδώ τα φαινόμενα να είναι εντονότερα, καθώς τα δύο σωματίδια μπορούν τώρα να πλησιάσουν ακόμα περισσότερο και έτσι η σύζευξη μεταξύ των διεγέρσεών τους (εξιτόνιο του SQD και $LSPP$ στο $TINP$) πρέπει να είναι ισχυρότερη (τουλάχιστον σύμφωνα με το μοντέλο μας). Πράγματι, όπως φαίνεται και στο Σχήμα 5.11 (α'), για την ίδια σταθερή τιμή του μ είναι δυνατόν να πετύχουμε μεγαλύτερες μετατοπίσεις της κορυφής μειώνοντας το R . Αντίστοιχα, στο (β') βλέπουμε ότι για σταθερή τιμή του R , μπορούμε εύκολα να πετύχουμε μεγαλύτερες μετατοπίσεις με την αύξηση του μ .

Καταλαβαίνουμε, λοιπόν, ότι η μείωση του R αλλά και η αύξηση του μ φαίνεται να οδηγούν σε ισχυρότερη σύζευξη των καταστάσεων στο σύστημα. Πράγματι, το ίδιο θα διαπιστώσουμε και στις άλλες κορυφές που μας απασχολούν, όπου μπορεί να εμφανίζεται splitting όταν η σύζευξη είναι αρκετά ισχυρή, ή αντίστοιχα σε επαρκώς μεγάλα μ ή/και μικρά R για την κάθε περίπτωση.

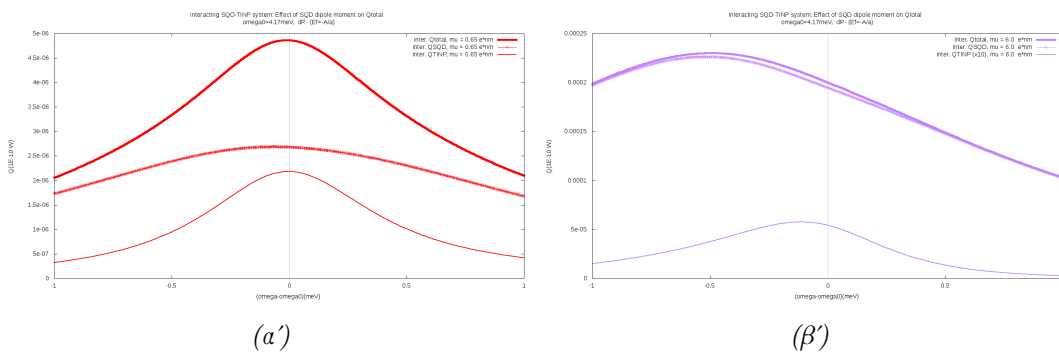


Σχήμα 5.11: Κορυφή $LSPP$ για ακτίνα νανοσωματιδίου $10nm$. (α') Επίδραση της απόστασης R μεταξύ των σωματιδίων στην απορρόφηση. Επιλέγηκε διπολική ροπή για το SQD : $\mu = 0.65e * nm$. (β') Επίδραση της διπολικής ροπής μ του SQD στην απορρόφηση. Η απόσταση μεταξύ των σωματιδίων επιλέγηκε να είναι $R = 20nm$.

Έχει ενδιαφέρον να δούμε και πώς συνεισφέρει το κάθε σωματίδιο ξεχωριστά στη συνο-

λική απορρόφηση. Όπως είδαμε στη θεωρία, θεωρήσαμε ότι η απορρόφηση του συστήματος δίνεται απλά από ένα άθροισμα $Q_{total} = Q_{SQD} + Q_{TINP}$, όπου οι συνιστώσες Q_{SQD} και Q_{TINP} υπολογίζονται σύμφωνα με το απλό μοντέλο μας. Ας δούμε, λοιπόν, τις συνιστώσες απορρόφησης για τις δύο ακραίες καμπύλες στο προηγούμενο σχήμα (5.11 (β')). Στο Σχήμα 5.12 (α') φαίνονται οι συνιστώσες απορρόφησης για $R = 20nm, \mu = 0.65e * nm$ ενώ στο (β') οι συνιστώσες απορρόφησης για $R = 20nm, \mu = 6.0e * nm$. Κατ'αρχάς, παρατηρούμε ότι με την αύξηση του μ ενισχύεται σημαντικά η απορρόφηση του SQD σε σχέση με του TINP. Επιπλέον, μπορούμε να δούμε ότι η μετατόπιση της κορυφής φαίνεται να οφείλεται κυρίως σε μετατόπιση της διέγερσης του εξιτονίου (SQD), παρά στο LSPP (TINP).

Ακόμα, πρέπει να παρατηρήσουμε ότι οι δύο κορυφές φαίνεται σαν να δρουν σχετικά «ανεξάρτητα», κάτι το οποίο δε θα ισχύει όταν βρεθούμε σε ισχυρή σύζευξη στη συνέχεια, όπου αμφότερες οι κορυφές θα παρουσιάζουν splitting. Από την άλλη, η εμφάνιση redshift υποδεικνύει ότι η σύζευξη παρουσιάζει ένα βαθμό συμφωνίας – σίγουρα όμως μικρότερο από την κατάσταση splitting. Θα μπορούσε, ίσως, να γίνει λόγος για το σχηματισμό μιας υβριδικής κατάστασης, ενός υβριδικού εξιτονίου, η οποία είναι μετατοπισμένη ως προς την ενεργειακή της εξιτονικής διέγερσης του μη αλληλεπιδρώντος SQD, δηλαδή την ω_0 .



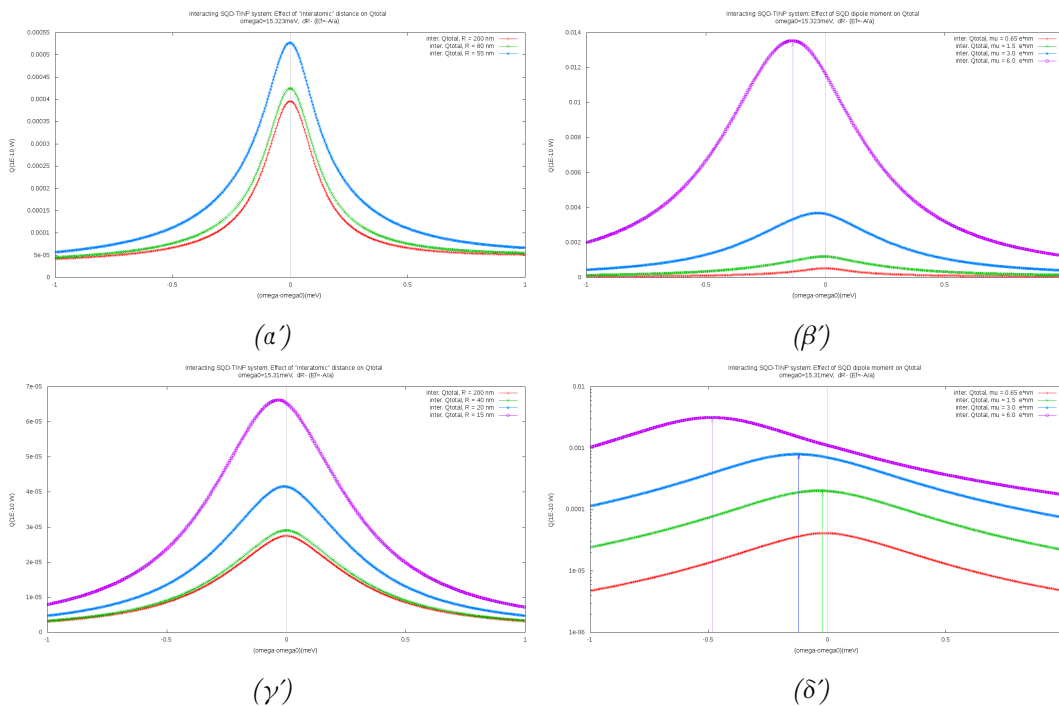
Σχήμα 5.12: Κορυφή LSPP για ακτίνα νανοσωματιδίου $10nm$ και $R = 20nm$ – Συνιστώσες απορρόφησης για δύο διαφορετικές τιμές της διπολικής ροπής μετάβασης μ : (α') Για $\mu = 0.65e * nm$ και (β') Για $\mu = 6.0e * nm$. Η απορρόφηση του TINP είναι μεγεθυμένη επί 10 για σύγκριση.

Γενικά, για μικρά μ και μεγάλα R , η κορυφή μένει πρακτικά ανεπηρέαστη. Καθώς όμως ενισχύουμε τη διπολική ροπή του SQD ή/και μειώνουμε την απόσταση R , παρατηρούνται μετατοπίσεις (προς το ερυθρό) των κορυφών. Έχει ενδιαφέρον ότι η μείωση του R και η αύξηση του μ φαίνεται να οδηγούν σε αύξηση της απορρόφησης του συστήματος, με τη δεύτερη να συνεισφέρει κυρίως μέσω αύξησης της απορρόφησης του SQD. Έχει, ακόμα, ενδιαφέρον ότι η εξιτονική διέγερση φαίνεται να μετατοπίζεται πολύ περισσότερο από τη διέγερση του TINP.

Παραλείπουμε εδώ να παραθέσουμε γραφήματα για την επίδραση της έντασης I του φωτός στην κορυφή, καθώς φαίνεται να επηρεάζει μόνο το σχετικό μέγεθος της, και όχι τα ποιοτικά αποτελέσματα (εδώ: την τιμή της μετατόπισης). Όμοια και για τις άλλες κορυφές, η ένταση φαίνεται να μην επηρεάζει ποιοτικά τα αποτελέσματα για σχετικά μεγάλο εύρος τιμών της έντασης $I \in (0, 100)W/cm^2$, πάντα σχετικά μικρές ώστε να ισχύει η προσέγγισή μας

(ιδιαίτερα στην τιμή του δ_R). Όπως σημειώθηκε και προηγουμένως, αυτό μπορεί να είναι απλά μια συνέπεια της προσέγγισής μας ($P \sim E$), η οποία καθιστά γραμμική την απόκριση του συστήματος. Ενδεχομένως στην πράξη να εμφανίζεται σημαντική μεταβολή στη συμπεριφορά του συστήματος, ιδιαίτερα αν το σύστημα χαρακτηρίζεται από έντονες μη γραμμικότητες.

Όπως σημειώθηκε και προηγουμένως, οι παρατηρήσεις για την κορυφή του β φωνονίου είναι όμοιες με αυτές που κάναμε για την κορυφή του LSP. Πάλι εμφανίζονται μετατοπίσεις προς το ερυθρό οι οποίες είναι εντονότερες για μικρότερα R και μεγαλύτερα μ , με μια παράλληλη αύξηση στην απορρόφηση του συστήματος. Όπως και στην κορυφή LSP, οι μετατοπίσεις είναι μεγαλύτερες για την περίπτωση μικρότερης ακτίνας TINP. Τα αντίστοιχα αποτελέσματα φαίνονται συνοπτικά στο Σχήμα 5.13.



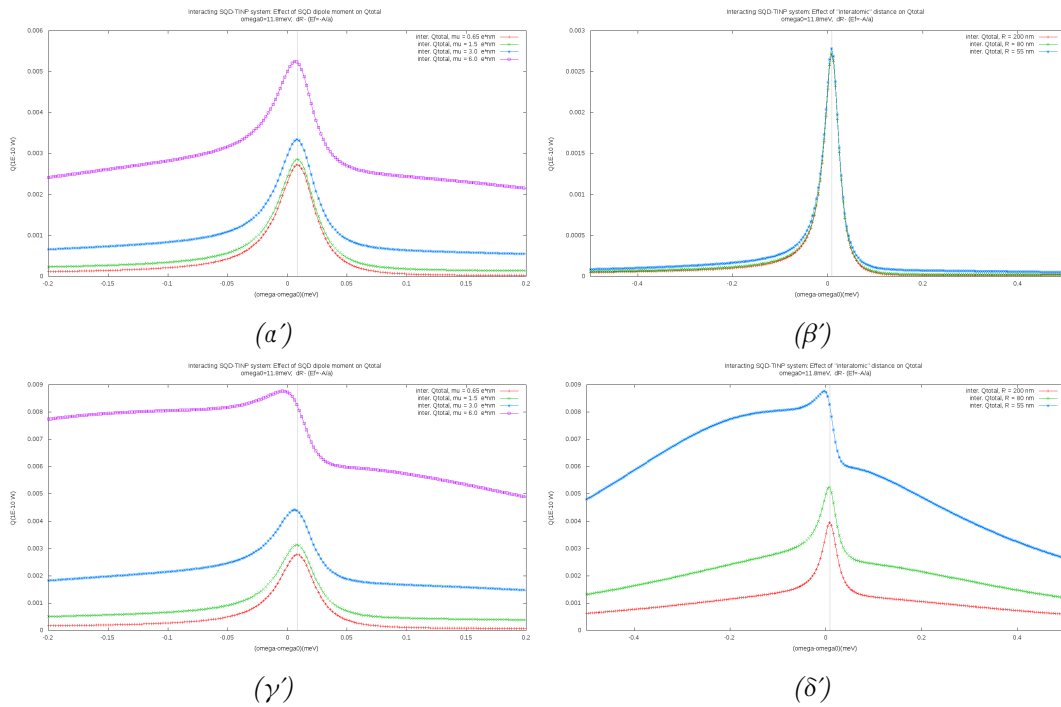
Σχήμα 5.13: Απορρόφηση κοντά στο συντονισμό beta φωνονίου. Στην πρώτη σειρά για ακτίνα $\alpha = 50\text{nm}$, ενώ στη δεύτερη για $\alpha = 10\text{nm}$. (α') Επίδραση της απόστασης R μεταξύ των σωματιδίων στην απορρόφηση, $\mu = 0.65e * \text{nm}$. (β') Επίδραση της διπολικής ροπής μ του SQD στην απορρόφηση, $R = 55\text{nm}$. (γ') Επίδραση της απόστασης R , $\mu = 0.65e * \text{nm}$. (δ') Επίδραση της διπολικής ροπής μ , $R = 20\text{nm}$

Κορυφή τοπολογικού πλάσμονίου

Αφού έχουμε δει ως εισαγωγή τη συμπεριφορά για ω γύρω από τις κορυφές $LSPP$ και β φωνονίου, μπορούμε να περάσουμε στην κορυφή τοπολογικού πλάσμονίου, $SToP$, όπου συναντούμε και τα πιο ενδιαφέροντα φαινόμενα. Προς το παρόν θα εστιάσουμε στο splitting που μπορεί να εμφανιστεί και στο πώς οι διάφορες παράμετροι του συστήματος μπορεί να το επηρεάζουν. Πρώτα, θα παρουσιάσουμε την περίπτωση επιπέδου Fermi κάτω από το σημείο Dirac και για τις δύο περιπτώσεις ακτίνας νανοσωματιδίου που μελετούνται ($\alpha = 50nm, 10nm$).

Επίπεδο Fermi κάτω από το σημείο Dirac ($E_F = -A/\alpha$), $\alpha = 50nm$

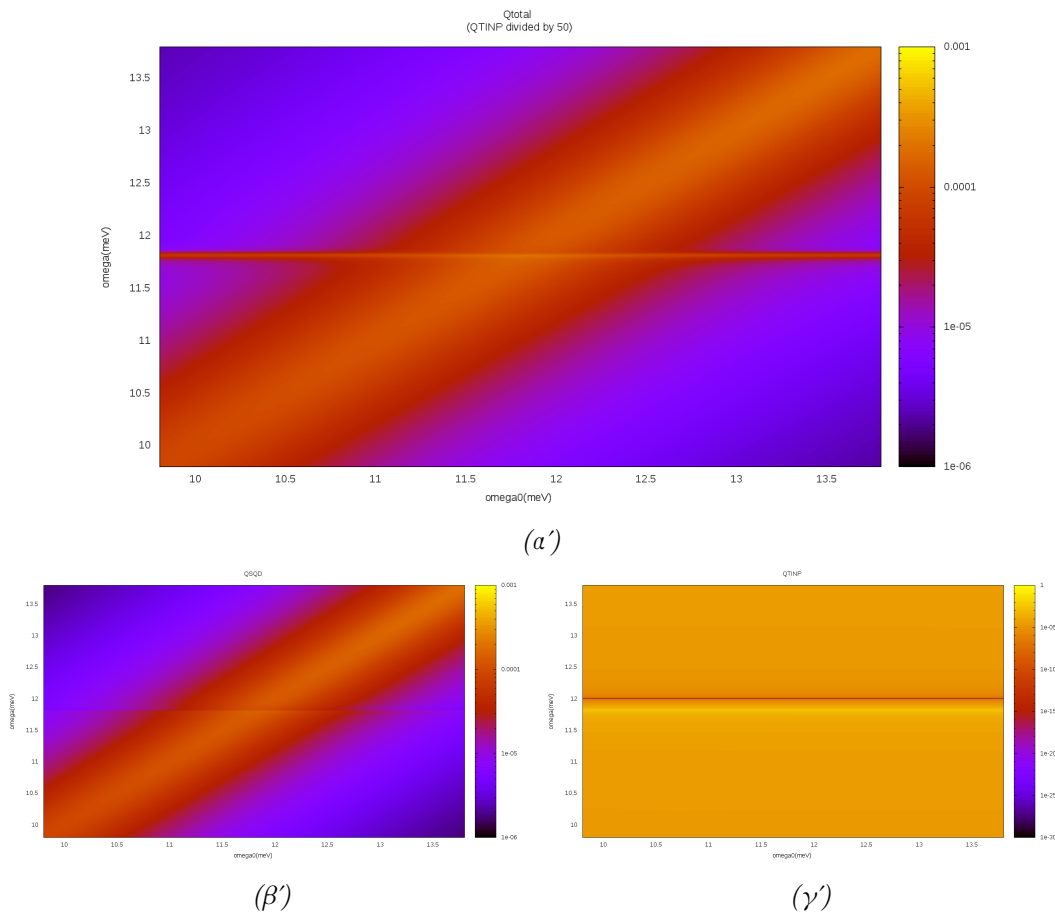
Ας πάρουμε, πρώτα, ακτίνα νανοσωματιδίου $a = 50nm$. Έχουμε δει ότι σε αυτήν την περίπτωση η διέγερση $SToP$ εμφανίζεται περί τα $11.8meV$ (στο συντονισμό Fröhlich), με μηδενισμό της απορρόφησης στο συντονισμό των επιφανειακών καταστάσεων, στα $12meV$. Όπως και με τις κορυφές $LSPP, \beta$ ας δούμε πρώτα την επίδραση του μ και του R στην απορρόφηση. Στο Σχήμα 5.14 (α'), (γ') βλέπουμε την επίδραση του μ για δύο διαφορετικές τιμές του R (πάνω: $200nm$, κάτω: $55nm$). Αντίστοιχα, στα (β') και (δ') φαίνεται η επίδραση του R για δύο διαφορετικές τιμές του μ (πάνω: $0.65e * nm$, κάτω: $6.0e * nm$).



Σχήμα 5.14: Απορρόφηση κοντά στο συντονισμό $SToP$ του $TINP$, $\alpha = 50nm$, $E_F = -A/\alpha$. Στην πρώτη στήλη φαίνεται η επίδραση του μ για δύο διαφορετικές τιμές του R : (α') $R = 80nm$, (γ') $R = 55nm$. Στη δεύτερη στήλη φαίνεται η επίδραση του R για δύο διαφορετικά μ : (β') $\mu = 0.65e * nm$, (δ') $\mu = 6.0e * nm$.

Άλλη μια φορά, τα πιο ενδιαφέροντα φαινόμενα μοιάζουν να εμφανίζονται όταν έχουμε αρκετά μικρά R και αρκετά μεγάλα μ , υποστηρίζοντας και πάλι την υπόθεση ότι για να ενισχύσουμε τη σύζευξη αρκεί να μειώσουμε το R ή/και να αυξήσουμε το μ . Όπως θα σχο-

λιάσουμε αργότερα, στο τμήμα «Άλλα φαινόμενα και περαιτέρω μελέτη» αν και σε αυτά τα γραφήματα δε συναντούμε μετατοπίσεις, σε κάποια από αυτά (και τουλάχιστον σε κάποια από τις συνιστώσες απορρόφησης) διαπιστώνουμε ότι εμφανίζονται συντονισμοί τύπου Fano.

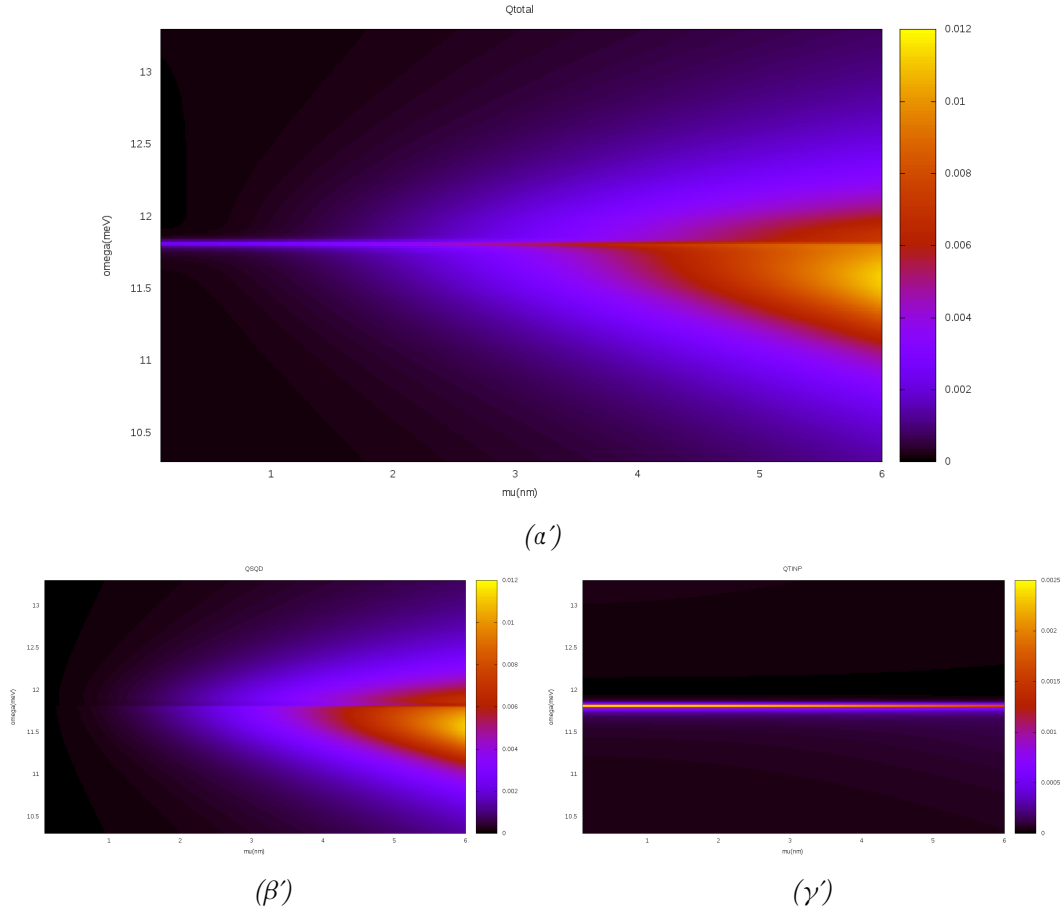


Σχήμα 5.15: Εξάρτηση της απορρόφησης από την ω_0 , για τιμές γύρω από τη διέγερση $SToP$ ($\sim 11.8 meV$) και θεωρώντας $\alpha = 50 nm$, $R = 50 nm$ και $\mu = 0.65e * nm$. Στον οριζόντιο άξονα φαίνεται η ω_0 , ενώ στον κατακόρυφο άξονα η συχνότητα του διεγείροντος φωτός, ω . Παρατηρούμε ότι δεν εμφανίζεται *splitting* ούτε στη συνολική απορρόφηση, ούτε και στις συνιστώσες της. (α') Συνολική απορρόφηση του συστήματος. (β') Συνιστώσα απορρόφησης του SQD (ευθεία $\omega \approx \omega_0$). (γ') Συνιστώσα απορρόφησης του TNP .

Μπορούμε να επιβεβαιώσουμε την απουσία *splitting* καταφεύγοντας και σε γραφήματα 3D, όπως αυτά που περιγράφηκαν στην εισαγωγή. Πρώτα, στο Σχήμα 5.15 βλέπουμε την απορρόφηση του συστήματος (ολική και συνιστώσες) σε σχέση με τη συχνότητα μετάβασης ω_0 του SQD , για $R = 50 nm$, $\mu = 0.65e * nm$. Όπως είδαμε και από τα προηγούμενα γραφήματα, δεν εμφανίζεται *splitting* για αυτές τις παραμέτρους. Αξίζει να επισημάνουμε, πάλι, ότι οι συνιστώσες μοιάζουν να δρουν «ανεξάρτητα», υποδεικνύοντας ασθενή σύζευξη και κατάσταση χαμηλής συμφωνίας.

Έχει, ακόμα, ενδιαφέρον να προσέξουμε ότι στην απορρόφηση του SQD , στο (β'), εμφανίζεται μια καταστολή της απορρόφησης γύρω από το ω του συντονισμού $SToP$ ($\sim 11.8 meV$). Θα μπορούσαμε να ερμηνεύσουμε αυτή την καταστολή ως αποτέλεσμα καταστροφικής συμβολής ανάμεσα στις δύο καταστάσεις, δηλαδή της εξιτονικής διέγερσης του SQD και της

κατάστασης *SToP* του *TINP*. Στην πραγματικότητα, η πτώση που παρατηρείται στην απορρόφηση του *SQD* αντιστοιχεί πάλι σε ένα συντονισμό τύπου Fano. Στην απορρόφηση του *TINP*, στο (γ') αξίζει να προσέξουμε ότι εκτός από την κατάσταση *SToP*, βλέπουμε πάλι το μηδενισμό της απορρόφησης στα $12meV$, όπου συμβαίνει συντονισμός της διεγείρουσας ακτινοβολίας ω με την ενέργεια διέγερσης των τοπολογικά προστατευμένων επιφανειακών καταστάσεων (συχνότητα διέγερσης=χάσμα μεταξύ των καταστάσεων στον κώνο Dirac, $\Delta E = 2A/\alpha$).



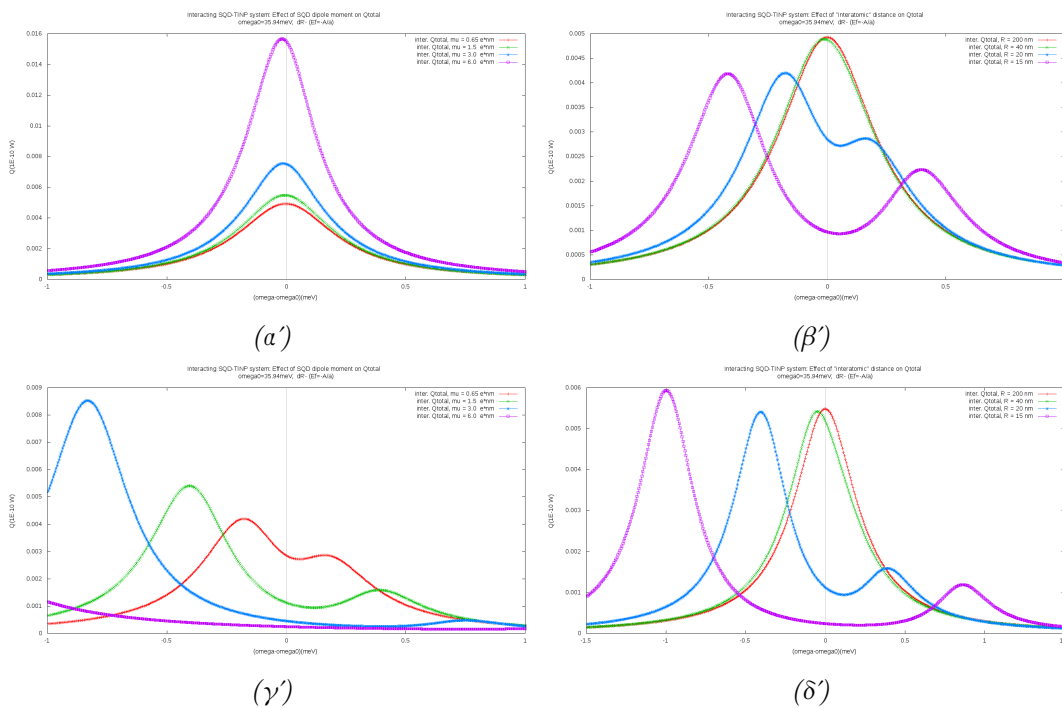
Σχήμα 5.16: Εξάρτηση της απορρόφησης από το μ , στο διάστημα $(0,6)e * nm$ και θεωρώντας $\omega_0 = 11.8meV, \alpha = 50nm$ και $R = 50nm$. Στον οριζόντιο άξονα φαίνεται το μ , ενώ στον κατακόρυφο άξονα η συχνότητα του διεγείροντος φωτός, ω . Παρατηρούμε ότι δεν εμφανίζεται *splitting* ούτε στη συνολική απορρόφηση, ούτε και στις συνιστώσες της. (α') Συνολική απορρόφηση του συστήματος. (β') Συνιστώσα απορρόφησης του *SQD*. (γ') Συνιστώσα απορρόφησης του *TINP*.

Είναι, επίσης, χρήσιμο να δούμε σε 3D διάγραμμα πώς μεταβάλλεται η απορρόφηση καθώς αυξάνουμε τη διπολική ροπή του *SQD*, όπως φαίνεται στο Σχήμα 5.16. Εδώ, επιλέγουμε η οριακή περίπτωση όπου $R = \alpha = 50nm$ για να δούμε τη συμπεριφορά του συστήματος στην ισχυρότερη δυνατή σύζευξη. Όπως βλέπουμε, δεν εμφανίζεται *splitting* σε αυτό το διάστημα του μ , όμοια με το προηγούμενο γράφημα. Όπως και πριν, στην απορρόφηση του *SQD*, στο (β'), μπορούμε να δούμε ότι υπάρχει κάποια καταστολή της απορρόφησης κοντά στα $11.8meV$, αν και δεν βλέπουμε μόνο αυτό. Τώρα φαίνεται ξεκάθαρα ότι η εξιτονική διέγερση

μετατοπίζεται προς το ερυθρό, ιδιαίτερα σε μεγαλύτερα μ , αντίθετα από τη διέγερση *SToP*, που μοιάζει να μην επηρεάζεται πολύ.

Επίπεδο Fermi κάτω από το σημείο Dirac ($E_F = -A/\alpha$), $\alpha = 10\text{nm}$

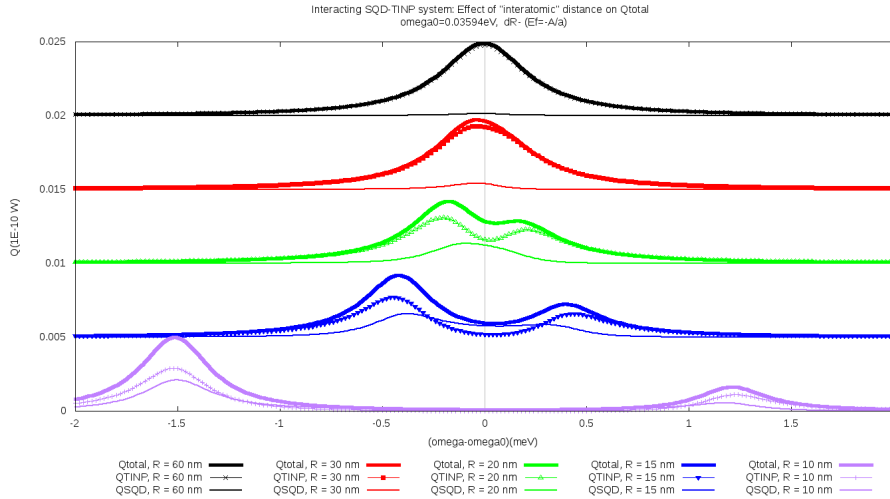
Τώρα, ας θεωρήσουμε την περίπτωση όπου η ακτίνα του νανοσωματιδίου είναι 10nm . Όταν το επίπεδο Fermi βρίσκεται κάτω από τον κώνο Dirac, όπως είδαμε και στο προηγούμενο τμήμα του κεφαλαίου, η διέγερση *SToP* εμφανίζεται περί τα 35.94meV (συντονισμός Fröhlich), με μηδενισμό της απορρόφησης στο συντονισμό των επιφανειακών καταστάσεων στα 60meV . Στο Σχήμα 5.17 φαίνεται πάλι η επίδραση των μ, R σε ορισμένες διαφορετικές περιπτώσεις. Το συναρπαστικό είναι ότι εδώ μπορούμε να πετύχουμε ισχυρή σύζευξη, και απ'ότι φαίνεται σχετικά εύκολα.



Σχήμα 5.17: Απορρόφηση κοντά στο συντονισμό *SToP* του *TINP*, $\alpha = 10\text{nm}$, $E_F = -A/\alpha$. Στην πρώτη στήλη φαίνεται η επίδραση του μ για δύο διαφορετικές τιμές του R : (α') $R = 80\text{nm}$, (γ') $R = 20\text{nm}$. Στη δεύτερη στήλη φαίνεται η επίδραση του R για δύο διαφορετικά μ : (β') $\mu = 0.65 \text{ nm}$, (δ') $\mu = 1.5 \text{ nm}$.

Άλλη μια φορά, παρατηρούμε ότι για αρκετά μικρά R και αρκετά μεγάλα μ μπορούμε να πετύχουμε ισχυρή σύζευξη στο σύστημα. Αυτό, όμως, που παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον είναι αυτό που φαίνεται να συμβαίνει καθώς μεταβαίνουμε από την ασθενή στην ισχυρή σύζευξη – όπως αρκετά ξεκάθαρα φαίνεται στα διαγράμματα (β') και (δ'). Για αρκετά μεγάλα R και αρκετά μικρά μ , όπου βρισκόμαστε σε ασθενή σύζευξη, η κορυφή μένει πρακτικά ανεπηρέαστη, με την εξαίρεση ίσως κάποιου βαθμού ενίσχυσης ή καταστολής της απορρόφησης. Ενισχύοντας σταδιακά τη σύζευξη, αρχίζουμε να βλέπουμε μία μετατόπιση προς το ερυθρό, όμοια με αυτή που σχολιάστηκε στη κορυφή *LSPP* προηγουμένως. Στη συνέχεια, εμφανίζεται ένα «καρούμπαλο», το οποίο είναι μετατοπισμένο προς το κυανό μέρος του φάσματος –

τα πρώτα σημάδια ισχυρής σύζευξης. Στην πραγματικότητα, εάν είμαστε αυστηροί, σε αυτό το στάδιο δεν βρισκόμαστε ακόμα σε κατάσταση Rabi splitting, καθώς, όπως θα δούμε, ο διαχωρισμός δεν εμφανίζεται και στις δύο συνιστώσες απορρόφησης. Σταδιακά, όμως, ο διαχωρισμός εντείνεται και η σύζευξη γίνεται ολοένα και πιο ισχυρή. Η διαδικασία αυτή φαίνεται πιο καθαρά και στο Σχήμα 5.18. Τονίζεται ότι σταδιακά το splitting εμφανίζεται και στις δύο συνιστώσες, υποδεικνύοντας ιδιαίτερα ισχυρή σύζευξη.



Σχήμα 5.18: Από ασθενή σε ισχυρή σύζευξη: μειώνοντας το R , για σταθερό $\mu = 0.65e * nm$. Από πάνω προς τα κάτω φαίνονται τα R : 60nm, 30nm, 20nm, 15nm και 10nm. Στο κάθε γράφημα η άνω καμπύλη αντιστοιχεί στην Q_{total} , η λεπτή καμπύλη στην Q_{SQD} και η «σπαστή» καμπύλη στην Q_{TINP} .

Για την τελευταία περίπτωση ($R = 10nm$, $\mu = 0.65e * nm$) αξίζει να δούμε και ένα διάγραμμα σε 3Δ (Σχήμα 5.19, δεύτερη στήλη) για τη συμπεριφορά με μεταβλητό ω_0 , όπου καθίσταται ακόμα πιο σαφές ότι έχουμε να κάνουμε με Rabi splitting. Η διαφορά από τα προηγούμενα γραφήματα είναι εμφανής: υπάρχει ξεκάθαρο splitting στην απορρόφηση του συστήματος, ορατό όχι μόνο στη συνολική, αλλά και στις δύο συνιστώσες απορρόφησης. Στην πρώτη στήλη του ίδιου σχήματος φαίνεται η συμπεριφορά με το ω_0 για $R = 20nm$, όπου το splitting μοιάζει να έχει εμφανιστεί μόνο οριακά στη συνολική απορρόφηση, όπως και στις συνιστώσες της.

Ας δούμε, όμως, πιο προσεκτικά την περίπτωση $R = 10nm$. Στη συνιστώσα απορρόφησης του SQD, (δ'), έχει ενδιαφέρον ότι εμφανίζεται κάτι σαν σκοτεινή κατάσταση (dark mode) περί τα $40meV$. Έχει επίσης ενδιαφέρον να παρατηρήσουμε ότι η σκοτεινή κατάσταση για $R = 10nm$ φαίνεται μετατοπισμένη προς το κυανό σε σχέση με την αντίστοιχη για $R = 20nm$ (σύγκρισε το (δ') με το ($\gamma'\gamma'$), φαίνεται να διακρίνεται από «βαθύτερο» χάσμα, ιδιαίτερα γύρω από τη συχνότητα μετάβασης του SQD (σκοτεινή λωρίδα που φαίνεται). Αξίζει να σημειωθεί ότι ο μηδενισμός της απορρόφησης λόγω συντονισμού με τις επιφανειακές καταστάσεις συμβαίνει στα $\omega \approx 60meV$ και έτσι δεν είναι ορατός στα σχήματα αυτά.

Όμοια και με την προηγούμενη περίπτωση, παραθέτω και 3Δ γραφήματα που παρουσιάζουν την εξάρτηση της απορρόφησης από το R και το μ , Σχήμα 5.20. Στην πρώτη στήλη

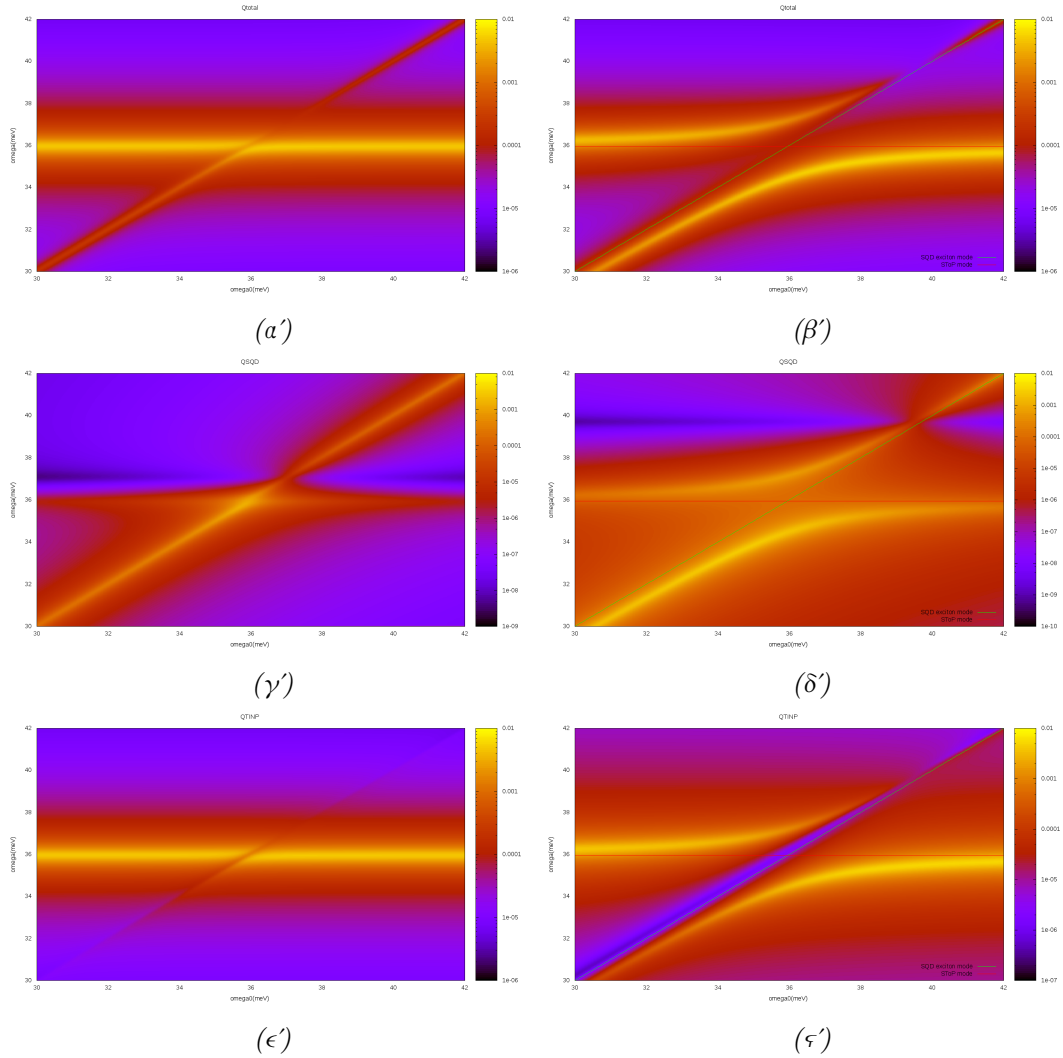
φαίνεται η συμπεριφορά της απορρόφησης μεταβάλλοντας το R , για σταθερό $\mu = 0.65e * nm$. Παρατηρούμε ότι το splitting αρχίζει να εμφανίζεται περί τα $R = 20nm$, ενώ ο διαχωρισμός φαίνεται πρώτα στη συνιστώσα του $TINP$. Από την άλλη, στη δεύτερη στήλη φαίνεται η συμπεριφορά μεταβάλλοντας το μ , με $R = \alpha = 10nm$, που αντιστοιχεί και στην οριακή διάταξη του συστήματος. Σε αυτή τη διάταξη βλέπουμε εντονότατο splitting, το οποίο εμφανίζεται από πολύ μικρές, ακόμα, τιμές της διπολικής ροπής. Ήδη, όταν $\mu \approx 0.7e * nm$ παρατηρείται ένας διαχωρισμός περί τα $3meV$, περίπου $3meV/36meV \approx 8\%$ της μέσης ενέργειας των δύο κορυφών (κατά προσέγγιση) και συνεχίζει να αυξάνεται με το μ . Μαζί με την εμφάνιση splitting στη συνολική απορρόφηση και στις συνιστώσες της, το σχετικό μέγεθος του splitting ($\sim 8\%$) επίσης υποδεικνύει ότι βρισκόμαστε σε κατάσταση ισχυρής σύζευξης.

Πέραν της προηγούμενης μελέτης, έχει ενδιαφέρον να δούμε την αλληλεπίδραση των δύο διεγέρσεων και σε 3D γραφήματα με μεταβλητή την ακτίνα του $TINP$, όπως φαίνεται στο Σχήμα 5.21. Τα συγκεκριμένα γραφήματα είναι αντίστοιχα με αυτά που παρουσιάστηκαν και στο τμήμα «Απομονωμένο σύστημα $TINP$ », συμπεριλαμβάνοντας όμως και την επίδραση του εξιτονίου στη διέγερση $SToP$ του $TINP$. Στην αριστερή στήλη, για μια (μεγάλη) απόσταση $R = 200nm$, βλέπουμε ότι οι δύο διεγέρσεις δρουν πρακτικά ανεξάρτητα, οπότε βρισκόμαστε σε κατάσταση ασθενούς σύζευξης. Στη δεξιά στήλη, όμως, όπου έχουμε θεωρήσει $R = 15nm$ εμφανίζεται splitting στη συνολική απορρόφηση, αλλά και στις συνιστώσες της. Πέραν τούτου, αξίζει να προσέξουμε ότι όπως και σε προηγούμενα γραφήματα, είναι ορατή μια σκοτεινή κατάσταση (dark mode) στη συνιστώσα απορρόφησης του εξιτονίου.

Σε αυτό το γράφημα φαίνεται ακόμα πιο ξεκάθαρα ότι το «επίκεντρο» του splitting βρίσκεται στην περιοχή όπου η συχνότητα του διεγείροντος φωτός ω είναι και κοντά στη συχνότητα μετάβασης του SQD , ω_0 , μαζί με τη διέγερση του $TINP$. Με άλλα λόγια, ο διαχωρισμός τείνει να είναι μέγιστος κοντά στο σημείο τομής των δύο (ανεξάρτητων) διεγέρσεων. Στην πράξη, παρατηρήσαμε ότι το «επίκεντρο» του splitting μπορεί να μετατοπίζεται κάπως, ιδιαίτερα όταν έχουμε σχετικά μεγάλες τιμές διπολικής ροπής μ . Σύμφωνα με τη μελέτη που πραγματοποιήθηκε, θα μπορούσαμε, ίσως, να αποδώσουμε αυτή τη μετατόπιση κυρίως στο redshift που υπόκειται η διέγερση του εξιτονίου στο σύστημα – είναι δηλαδή σαν να αλληλεπιδρά ένα μετατοπισμένο προς το ερυθρό εξιτόνιο με τη διέγερση του $TINP$.

Όλα τα παραπάνω συνιστούν καλές ενδείξεις για την παρουσία splitting στο σύστημά μας.

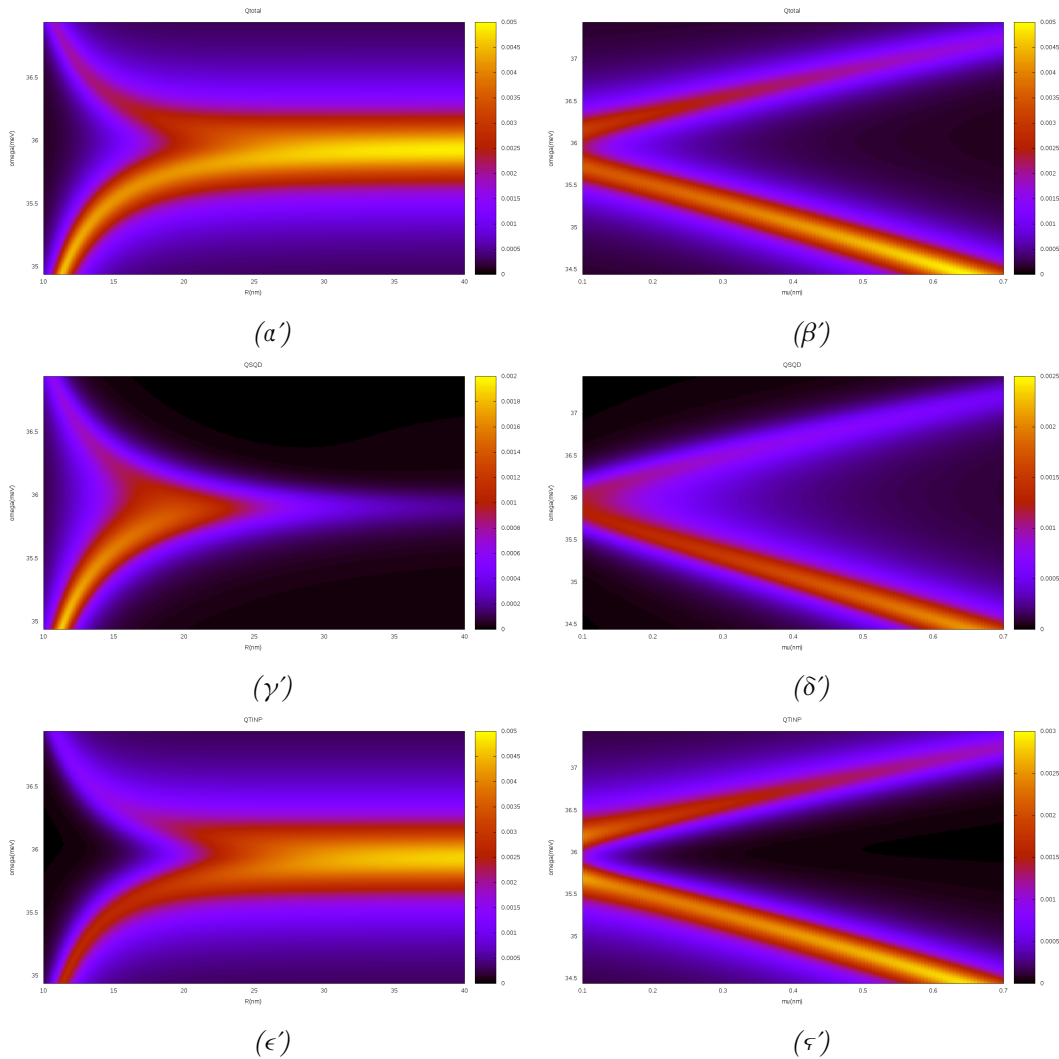
Έχοντας συζητήσει, λοιπόν, εκτενώς για την περίπτωση όπου το επίπεδο Fermi βρίσκεται κάτω από το σημείο Dirac, μπορούμε να περάσουμε στην επίσης ενδιαφέρουσα περίπτωση όπου το επίπεδο Fermi βρίσκεται πάνω από το σημείο Dirac. Η σύγκριση, αργότερα, με την παρούσα περίπτωση θα μας οδηγήσει σε μερικά ενδιαφέροντα συμπεράσματα για την εμφάνιση splitting.



Σχήμα 5.19: Εξάρτηση της απορρόφησης από την ω_0 , για τιμές γύρω από τη διέγερση *SToP* ($\sim 35.94\text{meV}$) και θεωρώντας $\alpha = 10\text{nm}$, $\mu = 0.65e * \text{nm}$ και R : 20nm (πρώτη στήλη), 10nm (δεύτερη στήλη). Στον οριζόντιο άξονα φαίνεται η ω_0 , ενώ στον κατακόρυφο άξονα η συχνότητα του διεγείροντος φωτός, ω .

Πρώτη στήλη: Στην περίπτωση $R = 20\text{nm}$ ακόμη δεν έχει εμφανιστεί το *splitting*, παρά μόνο οριακά στην Q_{total} (β') και στην Q_{TINP} (δ') και λιγότερο στην Q_{SQD} , (c').

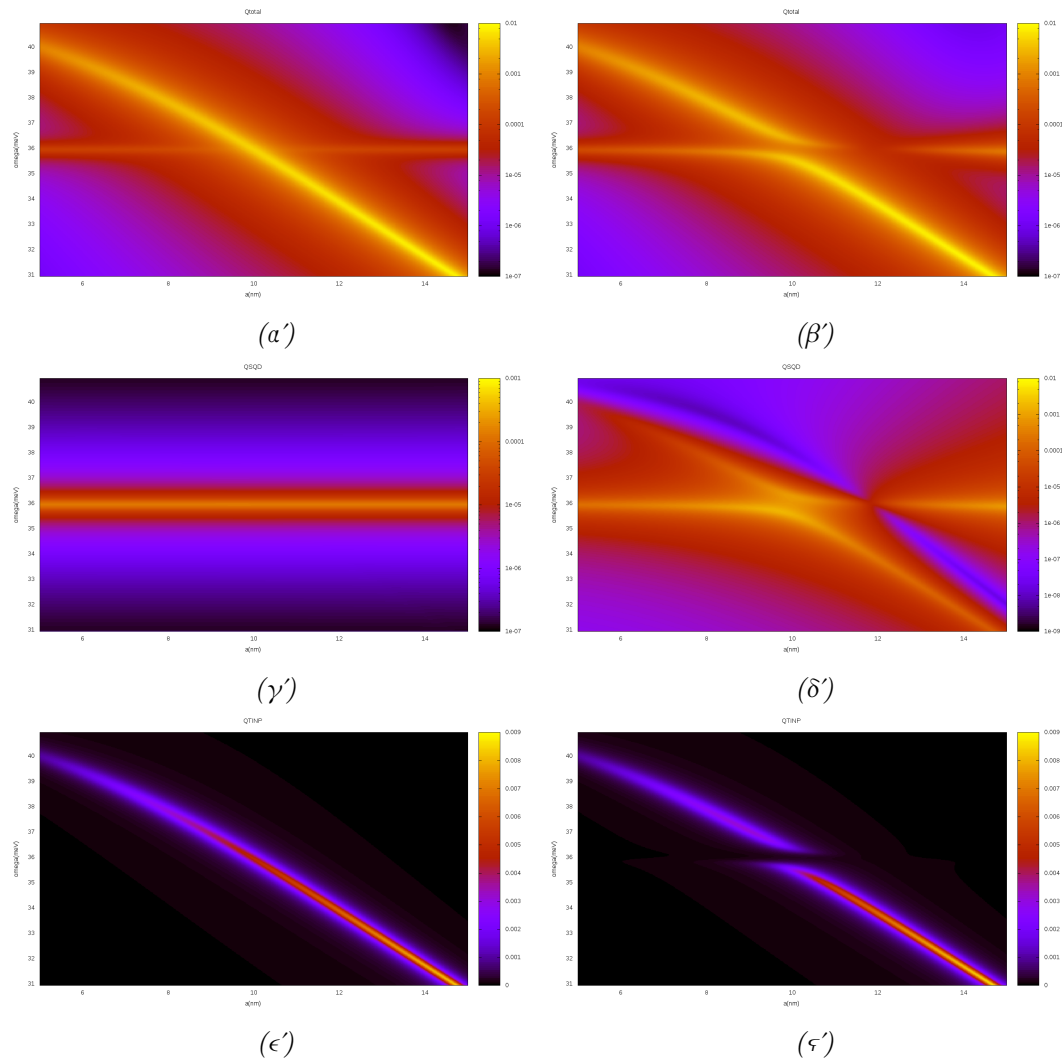
Δεύτερη στήλη: Στην περίπτωση $R = 10\text{nm}$ παρατηρούμε ότι εμφανίζεται αρκετά έντονο *splitting*, ορατό τόσο στη συνολική απορρόφηση (α') Q_{total} , όσο και στις συνιστώσες της (γ') Q_{SQD} και (ε') Q_{TINP} .



Σχήμα 5.20: Εξάρτηση της απορρόφησης από το R , για $\mu = 0.65$ (πρώτη στήλη) και το μ , για $R = 10\text{nm}$ (δεύτερη στήλη), για ω γύρω από τη διέγερση $SToP$ ($\sim 35.94\text{meV}$) και για ακτίνα του $TINP$ $\alpha = 10\text{nm}$. Στον οριζόντιο άξονα φαίνεται το R/μ , ενώ στον κατακόρυφο άξονα η συχνότητα του διεγείροντος φωτός, ω .

Πρώτη στήλη: Συμπεριφορά με τη μεταβολή του R όταν $\mu = 0.65 \cdot \text{nm}$. Διαπιστώνουμε ότι εμφανίζεται *splitting*, το οποίο αυξάνεται με τη μείωση του R , και το οποίο είναι ορατό τόσο στη συνολική απορρόφηση, όσο και στις δύο συνιστώσες απορρόφησης, κάτι το οποίο υποδεικνύει αρκετά ισχυρή σύζευξη. (α') Συνολική απορρόφηση του συστήματος. (γ') Συνιστώσα απορρόφησης του SQD . (ε') Συνιστώσα απορρόφησης του $TINP$.

Δεύτερη στήλη: Συμπεριφορά με τη μεταβολή του μ στην οριακή κατάσταση $R = \alpha = 10\text{nm}$. Παρατηρούμε αυξανόμενο *splitting* με την αύξηση του μ , ορατό στη συνολική απορρόφηση, όπως και στις συνιστώσες της. Όπως βλέπουμε, έχουμε αρκετά ισχυρό *splitting* για ιδιαίτερα μικρές τιμές της διπολικής ροπής. (β') Συνολική απορρόφηση του συστήματος. (δ') Συνιστώσα απορρόφησης του SQD . (ζ') Συνιστώσα απορρόφησης του $TINP$.



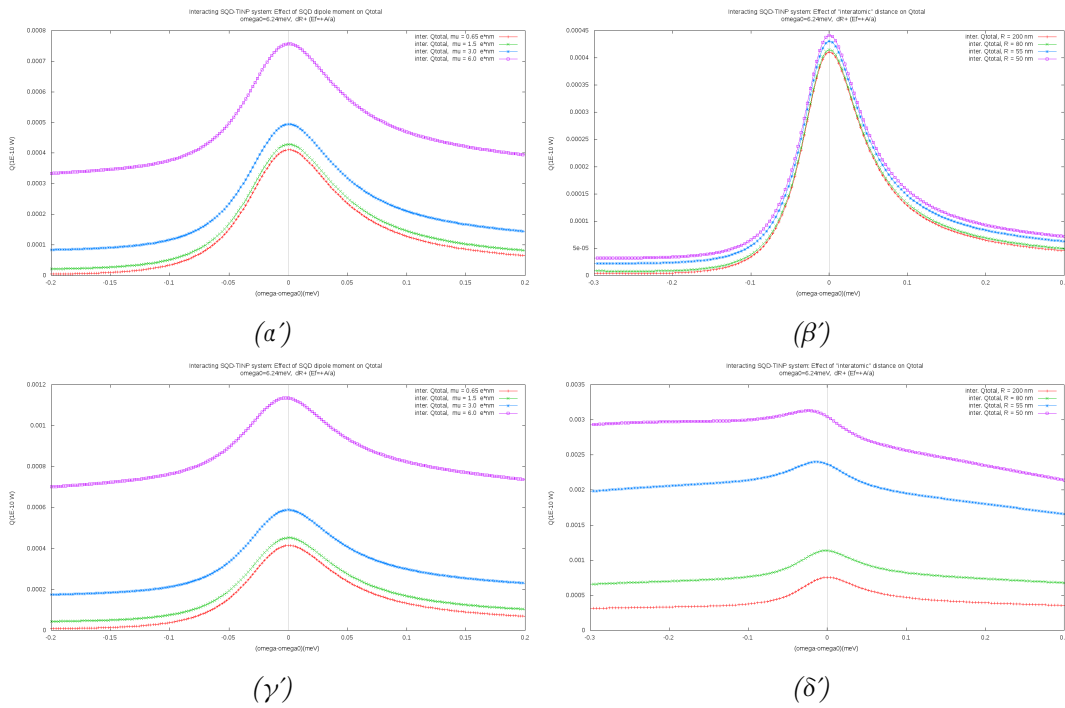
Σχήμα 5.21: Διεγέρσεις του αλληλεπιδρώντος συστήματος SQD – TINP: αλληλεπίδραση του εξιτονίου με τη διέγερση $SToP$ του TINP. Εδώ θεωρήσαμε συχνότητα μετάβασης $\omega_0 = 35.94meV$ (κοντά στη διέγερση $SToP$) και διπολική ροπή του SQD $\mu = 0.65e \cdot nm$. Στην πρώτη στήλη φαίνεται η απορρόφηση για $R = 200nm$ (ασθενής σύζευξη), ενώ στη δεύτερη για $R = 15nm$, όπου έχει επιτευχθεί ισχυρή σύζευξη, ορατή ως ένα *splitting* στις κορυφές απορρόφησης.

Πρώτη στήλη: ($R = 200nm$) Παρατηρούμε ότι εδώ οι δύο διεγέρσεις δρουν ανεξάρτητα, οπότε βρισκόμαστε σε κατάσταση ασθενούς σύζευξης. Μάλιστα η σύζευξη είναι τόσο ασθενής, που η απορρόφηση του SQD στο (γ') και του TINP στο (ϵ') σχεδόν ταυτίζονται με αυτήν των αντίστοιχων απομονωμένων συστημάτων.

Δεύτερη στήλη: ($R = 15nm$) Σε αυτήν την περίπτωση έχουμε εμφάνιση *splitting* τόσο στη συνολική απορρόφηση (β'), όσο και στις συνιστώσες απορρόφησης (δ') και (ζ'), κάτι το οποίο πάλι υποδεικνύει ότι βρισκόμαστε σε κατάσταση ισχυρής σύζευξης.

Επίπεδο Fermi πάνω από το σημείο Dirac ($E_F = +A/\alpha$), $\alpha = 50nm$

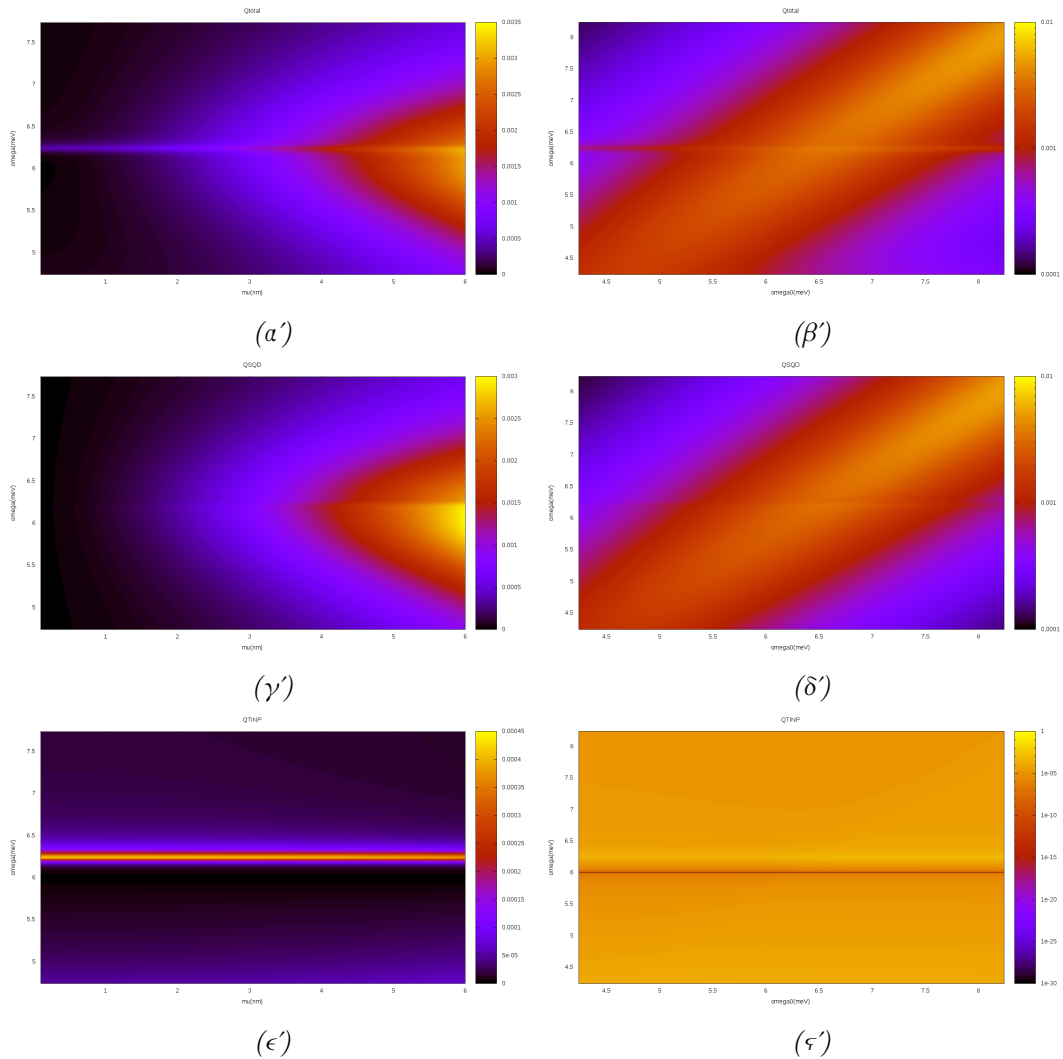
Σε αυτήν την περίπτωση, έχουμε δει ότι η διεγέρση SToP εμφανίζεται περί τα $6.24meV$ (συντονισμός Fröhlich), με αντίστοιχο μηδενισμό της απορρόφησης (συντονισμός των επιφανειακών καταστάσεων) στα $6meV$. Πρώτα, μπορούμε να δούμε πάλι συνοπτικά την επίδραση του R και του μ στην απορρόφηση του συστήματος, όπως φαίνεται στο Σχήμα 5.22. Τα αποτελέσματα φαίνονται όμοια με αυτά που λάβαμε για την αντίστοιχη περίπτωση α με επίπεδο Fermi κάτω από το σημείο Dirac. Σε αυτή την περίπτωση, ωστόσο, τα φαινόμενα μοιάζουν να είναι κάπως λιγότερο έντονα. Όπως και προηγουμένως, μπορούν να εμφανίζονται καμπύλες τύπου Fano, αν και ασθενέστερες, αλλά και πάλι καθόλου splitting.



Σχήμα 5.22: Απορρόφηση κοντά στο συντονισμό SToP του TNP, $\alpha = 50nm$, $E_F = -A/\alpha$. Στην πρώτη στήλη φαίνεται η επίδραση του μ για δύο διαφορετικές τιμές του R : (α') $R = 200nm$, (γ') $R = 55nm$. Στη δεύτερη στήλη φαίνεται η επίδραση του R για δύο διαφορετικά μ : (β') $\mu = 0.65e \cdot nm$, (δ') $\mu = 6.0e \cdot nm$.

Η απουσία splitting μπορεί να επιβεβαιωθεί και από τα 3Δ γραφήματα που φαίνονται στο Σχήμα 5.23. Στην πρώτη στήλη φαίνεται η επίδραση του μ στην κορυφή, για $R = \alpha = 50nm$, δηλαδή στην οριακή διάταξη του συστήματος. Παρατηρούμε ότι δεν εμφανίζεται splitting, όπως είδαμε και από τα προηγούμενα γραφήματα. Στη συνιστώσα απορρόφησης του SQD, στο (γ'), ωστόσο, είναι ορατή μια ελαφρά μετατόπιση προς το ερυθρό, μεγαλύτερη όσο αυξάνεται το μ . Στο ίδιο γράφημα είναι επίσης ορατή μια καταστολή της απορρόφησης, όμοια με προηγουμένως, η οποία τελικά αποδίδεται σε φαινόμενο τύπου Fano. Στη δεξιά στήλη φαίνεται η επίδραση του ω_0 στην απορρόφηση, όταν η διπολική ροπή παίρνει τη (μεγάλη) τιμή $6.0e \cdot nm$. Πάλι, δε φαίνεται να εμφανίζεται splitting στο σύστημα, αν και στη συνιστώσα απορρόφησης του SQD, στο (δ'), είναι ακόμη μια φορά ορατή η καταστολή από το φαινόμενο τύπου Fano.

Στη συνέχεια περιγράφουμε συνοπτικά τα αποτελέσματα για ακτίνα νανοσωματιδίου $\alpha = 10nm$, όπου πάλι παρατηρείται splitting.



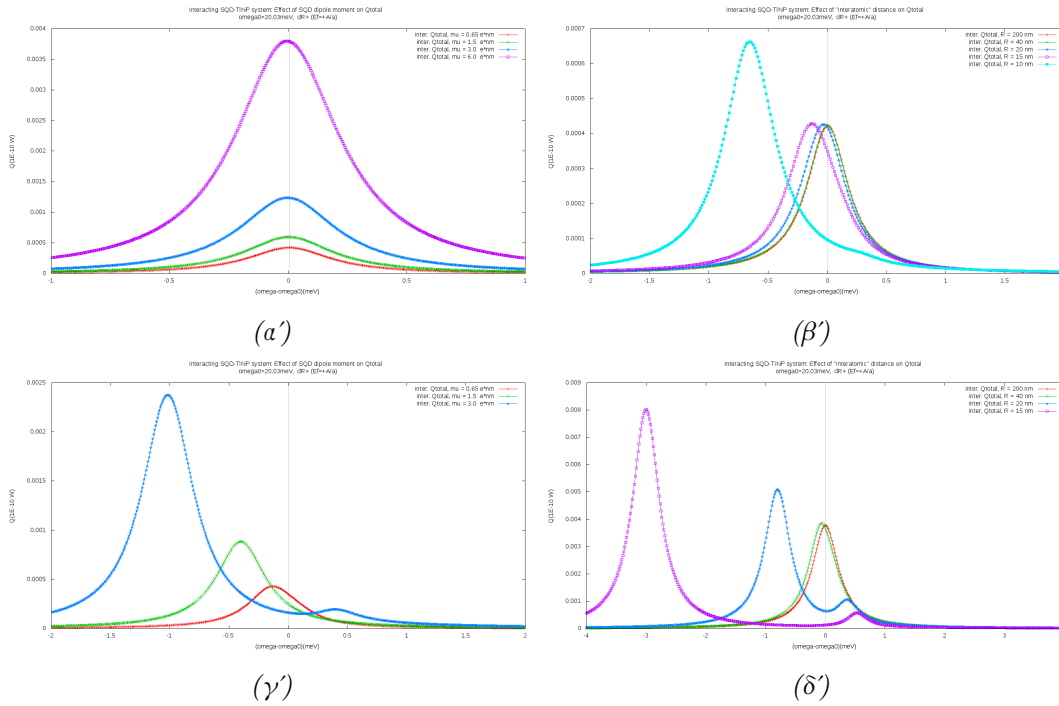
Σχήμα 5.23: Συμπεριφορά της απορρόφησης στην κορυφή SToP, για $\alpha = 50nm$, $R = 50nm$ με επίπεδο Fermi πάνω από το σημείο Dirac.

Πρώτη στήλη: Εξάρτηση από τη διπολική ροπή μετάβασης μ . (a') Συνολική απορρόφηση. (γ') Συνιστώσα απορρόφησης του SQD. (ε') Συνιστώσα απορρόφησης του TINP.

Δεύτερη στήλη: Συμπεριφορά μεταβάλλοντας το ω_0 στην περιοχή της διέγερσης SToP, όταν $\mu = 6.0e * nm$. (β') Συνολική απορρόφηση Q_{total} . (δ') Συνιστώσα Q_{SQD} . (ζ') Συνιστώσα Q_{TINP} .

Επίπεδο Fermi πάνω από το σημείο Dirac ($E_F = +A/\alpha$), $\alpha = 10nm$

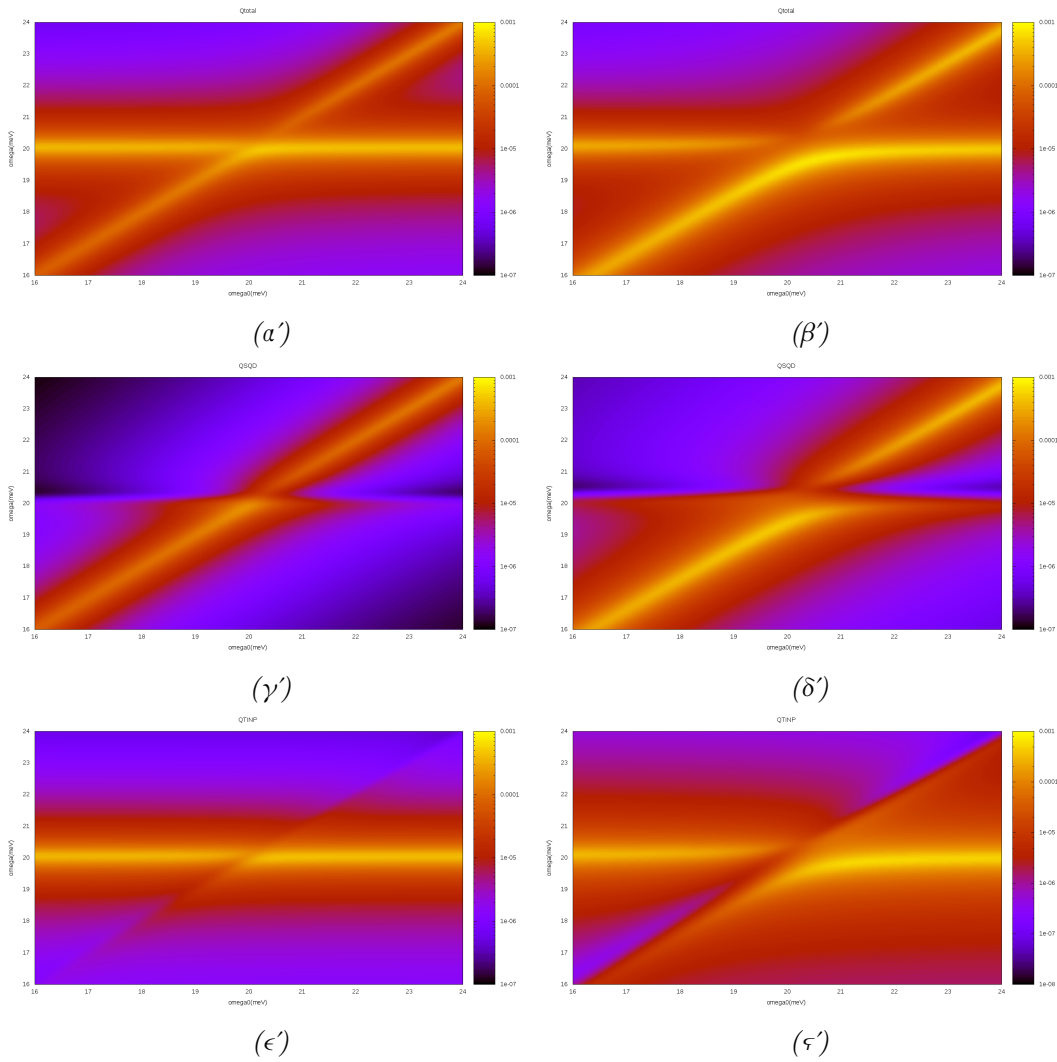
Η διέγερση SToP εμφανίζεται τώρα κοντά στα $20.03meV$, με μηδενισμό της απορρόφησης στα $30meV$. Στο Σχήμα 5.24 φαίνεται η επίδραση του μ (πρώτη στήλη) και του R (δεύτερη στήλη) στην απορρόφηση του συστήματος. Όπως παρατηρήσαμε και στην αντίστοιχη περίπτωση για επίπεδο Fermi κατω από το σημείο Dirac, και εδώ εμφανίζεται splitting για αρκετά μικρά R και αρκετά μεγάλα μ . Γενικά, ωστόσο, τα αποτελέσματα σε αυτά τα γραφήματα φαίνονται λιγότερο εντυπωσιακά.



Σχήμα 5.24: Απορρόφηση κοντά στο συντονισμό SToP του TINP, $\alpha = 10nm$, $E_F = +A/\alpha$. Στην πρώτη στήλη φαίνεται η επίδραση του μ για δύο διαφορετικές τιμές του R : (α') $R = 80nm$, (γ') $R = 15nm$. Στη δεύτερη στήλη φαίνεται η επίδραση του R για δύο διαφορετικά μ : (β') $\mu = 0.65e * nm$, (δ') $\mu = 6.0e * nm$.

Βλέποντας, όμως, σε γράφημα 3Δ την εξάρτηση της απορρόφησης από τη συχνότητα μετάβασης του χβαντικού εκπομπού, καθίσταται σαφές ότι σε αυτήν την περίπτωση τα προηγούμενα γραφήματα μπορούν να μας εξαπατήσουν. Ειδικότερα, στα $20.03meV$ η κορυφή μπορεί να «κρύβεται» από μία σκοτεινή κατάσταση που εμφανίζεται από την αλληλεπίδραση των διεγέρσεων (βλέπε πχ Σχήμα 5.25), και έτσι η δεύτερη κορυφή στο splitting μπορεί να κρύβεται ή τουλάχιστον να καταστέλλεται. Και εδώ, όμως, το σύστημα παρουσιάζει αρκετά έντονο splitting, ακόμη και αν κάποια από τα αντίστοιχα 2Δ γραφήματα δεν το μαρτυρούν, ή τουλάχιστον το υποβαθμίζουν. Όμοια, και τα γραφήματα 3Δ για την εξάρτηση από το R ή το μ στα $20.03meV$ επίσης μπορούν να μας εξαπατήσουν για ακριβώς τον ίδιο λόγο. Απαιτείται, λοιπόν, ιδιαίτερη προσοχή όταν εξάγουμε συμπεράσματα για το σύστημα και καλό είναι να χρησιμοποιούνται αρκετές διαφορετικές τεχνικές για την περιγραφή της συμπεριφοράς του. Στην προκειμένη περίπτωση θα εστιάσω σε γραφήματα όπως στο Σχήμα 5.25, όπου φαίνεται καθαρότερα η συμπεριφορά του συστήματος.

Στο Σχήμα 5.25 φαίνεται η εξάρτηση από το ω_0 για $R = \alpha = 10nm$ και με $\mu = 0.65e * nm$, για δύο διαφορετικές περιπτώσεις της απόστασης R . Στην πρώτη στήλη, για $R = 15nm$ βλέπουμε ότι το splitting έχει οριακά εμφανιστεί, τόσο στη συνολική απορρόφηση, όσο και στις συνιστώσες της. Παράλληλα, αρχίζει να φαίνεται πιο καθαρά και η οικεία σκοτεινή κατάσταση στη συνιστώσα του SQD. Στη δεύτερη στήλη, για $R = 10nm$, βλέπουμε ότι έχουμε πια περάσει σε κατάσταση ισχυρής σύζευξης, με το splitting να είναι ορατό όχι μόνο στη συνολική απορρόφηση, αλλά και στις δύο συνιστώσες απορρόφησης. Σε αυτή τη διάταξη, πέραν της σκοτεινής κατάστασης στην Q_{SQD} , μπορούμε να δούμε και μια καταστολή στην απορρόφηση του TINP κοντά στην ω_0 .

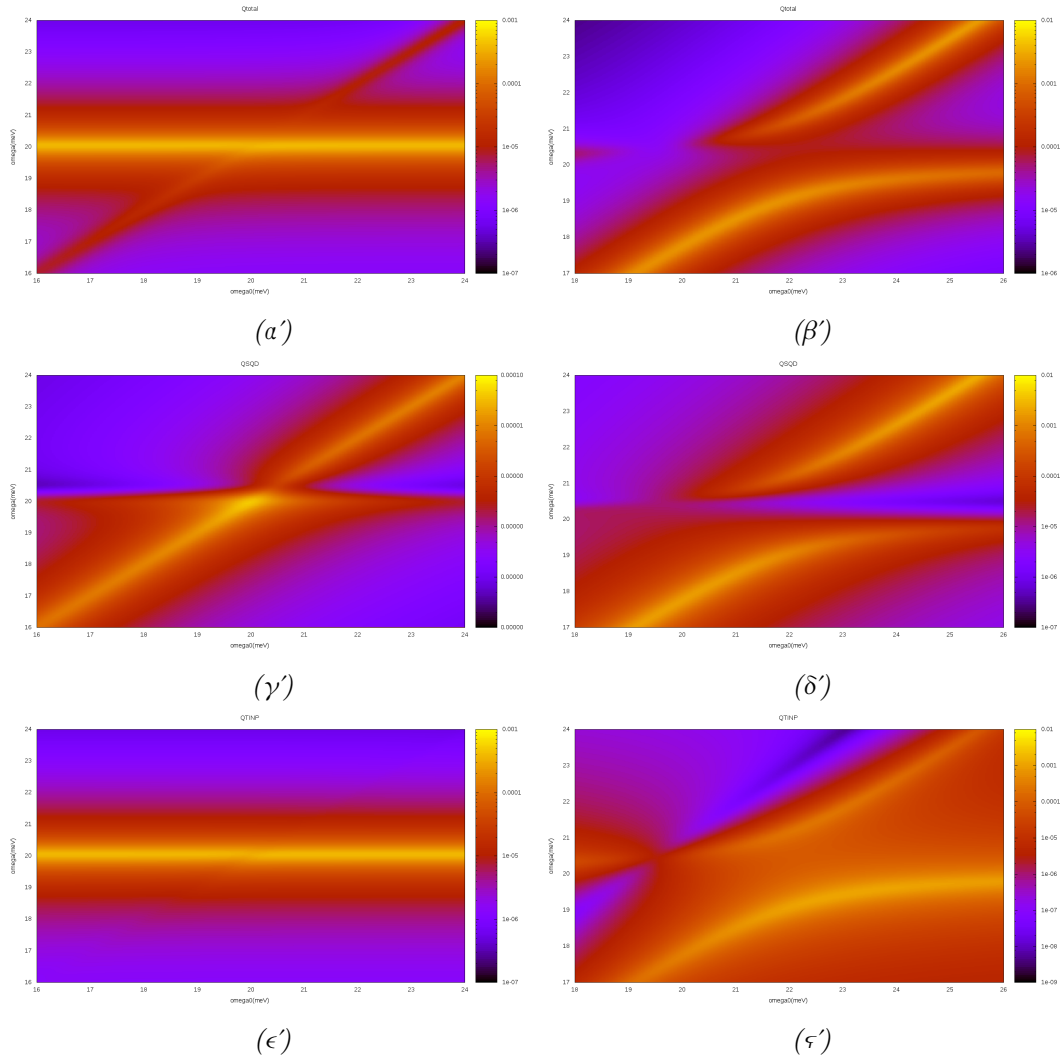


Σχήμα 5.25: Επίδραση του ω_0 στην απορρόφηση γύρω από την κορυφή $SToP$, με επίπεδο Fermi πάνω από το σημείο Dirac, για $\alpha = 10nm$ και για $\mu = 0.65e * nm$, για δύο διαφορετικές τιμές του R ($R = 40nm, 10nm$). **Πρώτη στήλη:** Συμπεριφορά μεταβάλλοντας το ω_0 στην περιοχή της διέγερσης $SToP$, όταν $R = 15nm$. (α') Συνολική απορρόφηση Q_{total} . (γ') Συνιστώσα Q_{SQD} . (ε') Συνιστώσα Q_{TINP} . **Δεύτερη στήλη:** Συμπεριφορά μεταβάλλοντας το ω_0 στην περιοχή της διέγερσης $SToP$, όταν $R = 10nm$. (α') Συνολική απορρόφηση Q_{total} . (γ') Συνιστώσα Q_{SQD} . (ε') Συνιστώσα Q_{TINP} .

Στα επόμενα γραφήματα, Σχήμα 5.26, παρατίθενται όμοια 3D διαγράμματα για την εξάρ-

τηση από το ω_0 , αλλά για σταθερό $R = a = 10nm$ και για δύο διαφορετικά μ , όπου φαίνεται η τάση αύξησης του splitting παράλληλα με την αύξηση του μ . Στην πρώτη στήλη, όπου βλέπουμε τη συμπεριφορά για $\mu = 0.1e * nm$, παρατηρούμε ότι το splitting ακόμη δεν έχει εμφανιστεί. Απεναντίας, στη δεύτερη, για $\mu = 1.5e * nm$, φαίνεται αρκετά ευρύς διαχωρισμός των καταστάσεων. Έχει ενδιαφέρον να παρατηρήσουμε ότι η καταστολή στην απορρόφηση στη συνιστώσα του *TINP* (η σκοτεινή λωρίδα) έχει μετατοπιστεί προς το κυανό (σύγκρινε τα σχήματα 5.25 (ζ') και 5.26 (ζ')). Αντίστοιχη παρατήρηση κάναμε και για τη σκοτεινή κατάσταση στην *QSQD* για την προηγούμενη περίπτωση επιπέδου Fermi. Φαίνεται, λοιπόν, ότι ισχυροποιώντας τη σύζευξη στο σύστημα αυτές οι καταστάσεις τείνουν να μετατοπίζονται προς το κυανό.

Σύμφωνα με όσα είδαμε μέχρι τώρα, όντως φαίνεται να έχουμε ασθενέστερο splitting (και σύζευξη, γενικότερα) σε αυτή την περίπτωση επιπέδου *Fermi*. Ειδικότερα, διαπιστώσαμε ότι σε αυτή την περίπτωση απαιτούνται μικρότερα R και μεγαλύτερα μ για το ίδιο μέγεθος splitting – οδηγώντας μας στο συμπέρασμα ότι εδώ η σύζευξη είναι γενικά ασθενέστερη. Σε τμήμα που ακολουθεί πραγματοποιείται συζήτηση για πιθανούς λόγους για την διαφορά που παρατηρείται στην ισχύ της σύζευξης. Προτού, όμως, γίνει αυτό, καλό είναι να δούμε σύντομα και τη συμπεριφορά της τελευταίας διέγερσης, αυτής του *LSPPhP*, όταν αλληλεπιδρά με το εξιτόνιο.



Σχήμα 5.26: Επίδραση του ω_0 στην απορρόφηση γύρω από την κορυφή $SToP$, για $\alpha = 10nm$, στην οριακή διάταξη $R = 10nm$, με επίπεδο $Fermi$ πάνω από το σημείο $Dirac$.

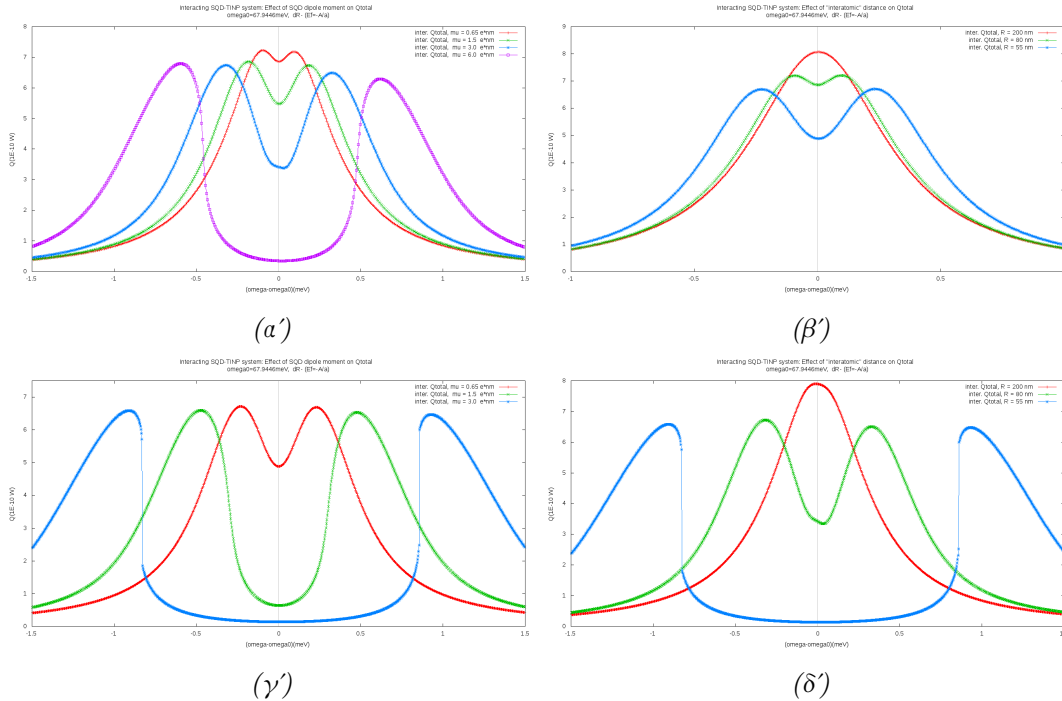
Πρώτη στήλη: Συμπεριφορά μεταβάλλοντας το ω_0 στην περιοχή της διέγερσης $SToP$, όταν $\mu = 0.1e * nm$. (α') Συνολική απορρόφηση Q_{total} . (γ') Συνιστώσα Q_{SQD} . (ε') Συνιστώσα Q_{TINP} .

Δεύτερη στήλη: Συμπεριφορά μεταβάλλοντας το ω_0 στην περιοχή της διέγερσης $SToP$, όταν $\mu = 1.5e * nm$. (β') Συνολική απορρόφηση Q_{total} . (δ') Συνιστώσα Q_{SQD} . (ζ') Συνιστώσα Q_{TINP} .

Κορυφή LSPhP

Όπως και για τις κορυφές του LSPP αλλά και του β -φωνονίου, δεν εμφανίζονται σημαντικές (ποιοτικές) διαφορές όταν θεωρούμε επίπεδο Fermi πάνω ή κάτω από τον κώνο Dirac, πέραν μιας μικρότερης ή μεγαλύτερης μετατόπισης της κορυφής στις δύο περιπτώσεις. Καθώς τα αποτελέσματα που προκύπτουν είναι όμοια, περιοριζόμαστε στην παρουσίαση μόνο της μίας περίπτωσης – αυτής όπου το επίπεδο Fermi βρίσκεται κάτω από τον κώνο Dirac.

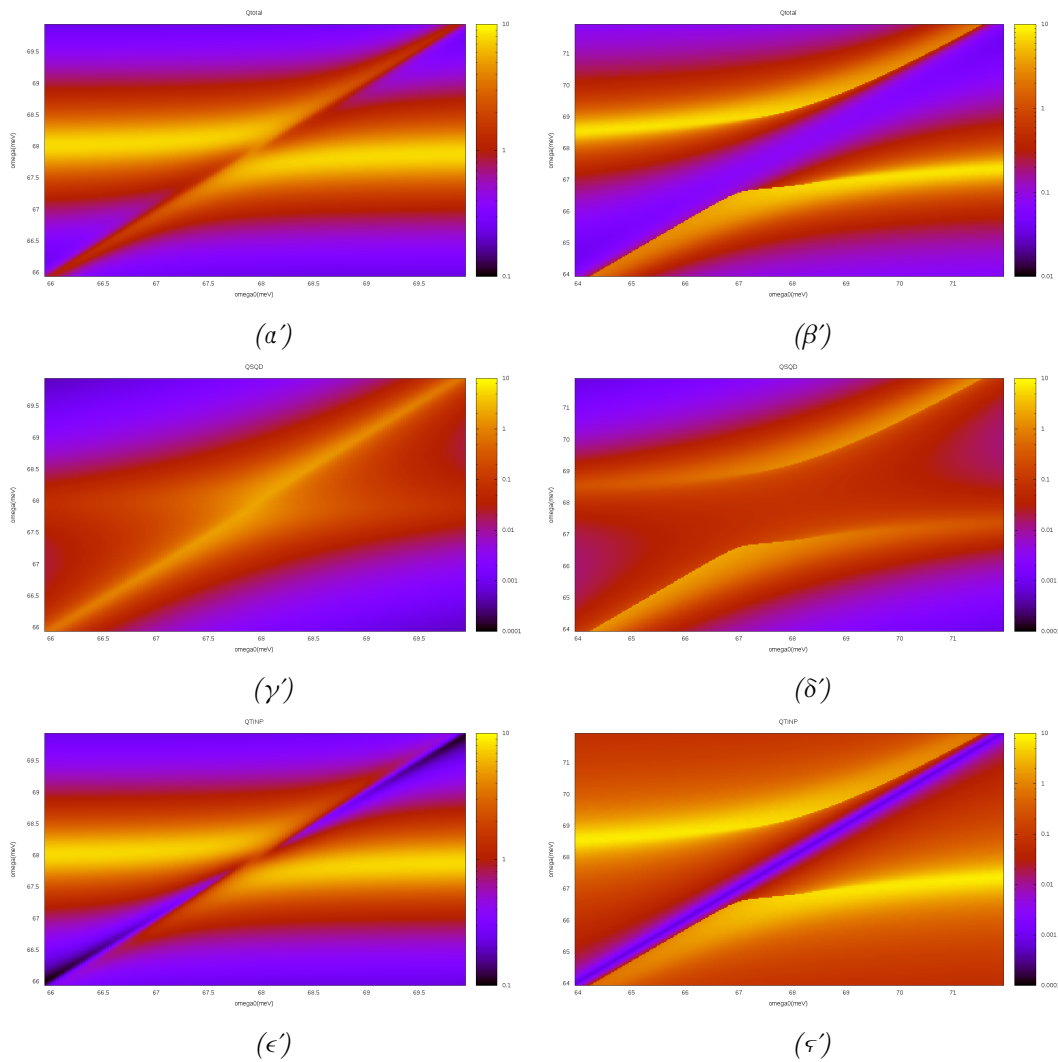
Πρώτα, ας δούμε τη συμπεριφορά για ακτίνα νανοσωματιδίου $50nm$, όπου η κορυφή του LSPhP εμφανίζεται περί τα $111.58meV$ για τη συγκεκριμένη επιλογή επιπέδου Fermi. Στο Σχήμα 5.27 φαίνεται η επίδραση του μ (στην πρώτη στήλη) και του R (στη δεύτερη στήλη) στην απορρόφηση. Παρατηρούμε ότι τα φαινόμενα είναι πολύ πιο έντονα σε αυτήν την κορυφή σε σχέση με τις άλλες κορυφές που μελετήσαμε. Ειδικότερα, για σταθερό $\mu = 0.65e*nm$ φαίνεται να εμφανίζονται τα πρώτα σημάδια splitting για σχετικά μεγάλα R (βύθισμα απορρόφησης στην Q_{total}), αν και ακόμη και για $R = 50nm$ δεν επιτυγχάνεται διαχωρισμός και στις δύο συνιστώσες απορρόφησης, αλλά μόνο στην Q_{TINP} . Αντίστοιχα, επίσης εντυπωσιακή είναι και η συμπεριφορά με τα μ , για σταθερό R . Όταν, για παράδειγμα, $R = 80nm$, βλέπουμε ήδη από το $\mu = 0.65e * nm$ ένα βύθισμα απορρόφησης (splitting μόνο στην Q_{TINP}) που σταδιακά μετατρέπεται σε «πραγματικό» splitting (δηλαδή ορατό και στις δύο συνιστώσες) καθώς κινούμαστε προς το $\mu = 6.0e * nm$. Με άλλα λόγια, η διαδικασία φαίνεται να είναι όμοια με αυτήν που περιγράφεται στο διάγραμμα 5.18 για την κορυφή $SToP$.



Σχήμα 5.27: Απορρόφηση κοντά στο συντονισμό LSPhP του TINP, $\alpha = 50nm$, $E_F = -A/\alpha$. Στην πρώτη στήλη φαίνεται η επίδραση του μ για δύο διαφορετικές τιμές του R : (α') $R = 80nm$, (γ') $R = 55nm$. Στη δεύτερη στήλη φαίνεται η επίδραση του R για δύο διαφορετικά μ : (β') $\mu = 0.65e * nm$, (δ') $\mu = 3.0e * nm$.

Στο Σχήμα 5.28 φαίνεται η εξάρτηση της απορρόφησης από το ω_0 , για $R = \alpha = 50nm$ και

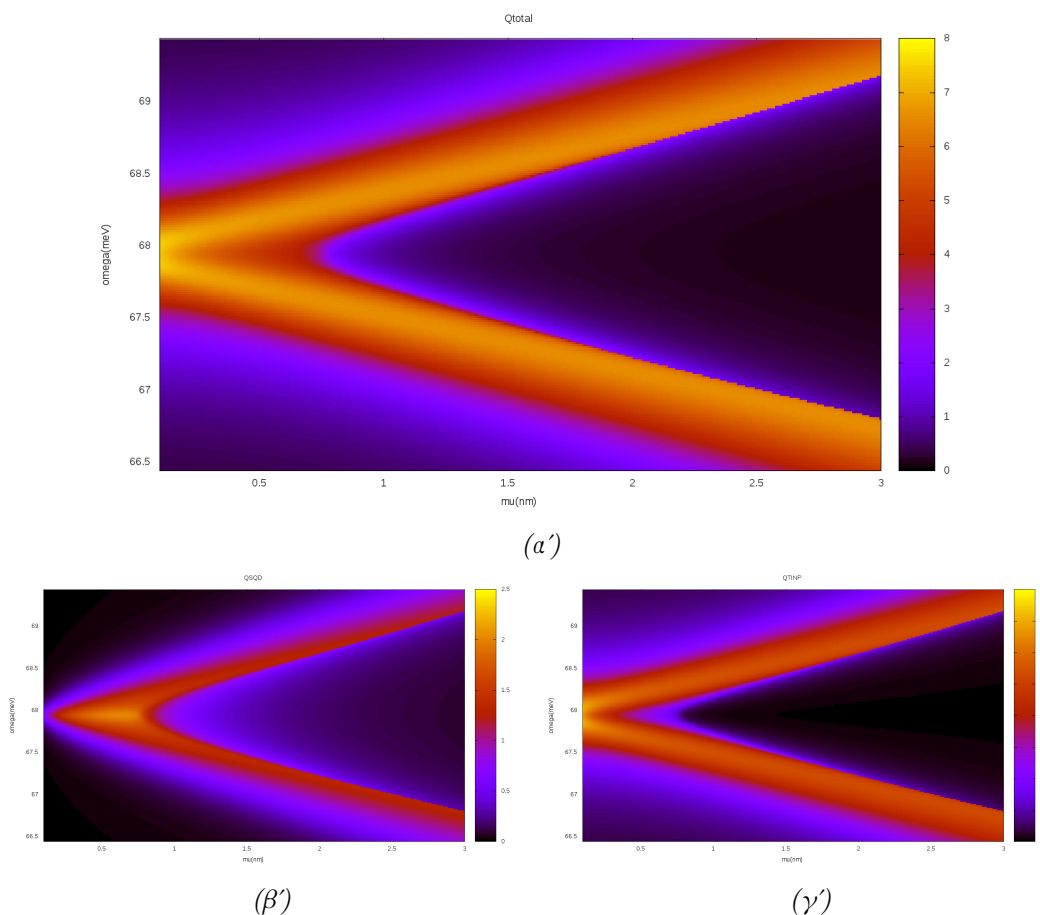
για δύο διαφορετικές τιμές του μ : $0.65e * nm$ (πρώτη στήλη) και $3.0e * nm$ (δεύτερη στήλη). Είναι εμφανές ότι στην πρώτη περίπτωση ακόμη δεν έχουμε πετύχει splitting, ενώ στη δεύτερη έχουμε αρκετά ευρύ διαχωρισμό των καταστάσεων. Στο επόμενο σχήμα, 5.29, βλέπουμε τη συμπεριφορά του splitting καθώς αυξάνουμε το μ , για σταθερή απόσταση $R = \alpha = 50nm$. Παρατηρούμε ότι από το $\mu = 1e * nm$ επιτυγχάνεται ήδη ένας διαχωρισμός περί το $0.5meV$.



Σχήμα 5.28: Εξάρτηση από τη συχνότητα μετάβασης του SQD, ω_0 , για $R = \alpha = 50nm$ και για δύο διαφορετικές τιμές του μ : $0.65e * nm$ (πρώτη στήλη) και $3.0e * nm$ (δεύτερη στήλη), γύρω από τη διέγερση LSPPhP του TINP. Στον οριζόντιο άξονα φαίνεται η συχνότητα διεγερσης του SQD, ω_0 , ενώ στον κατακόρυφο άξονα η συχνότητα του διεγείροντος φωτός, ω .

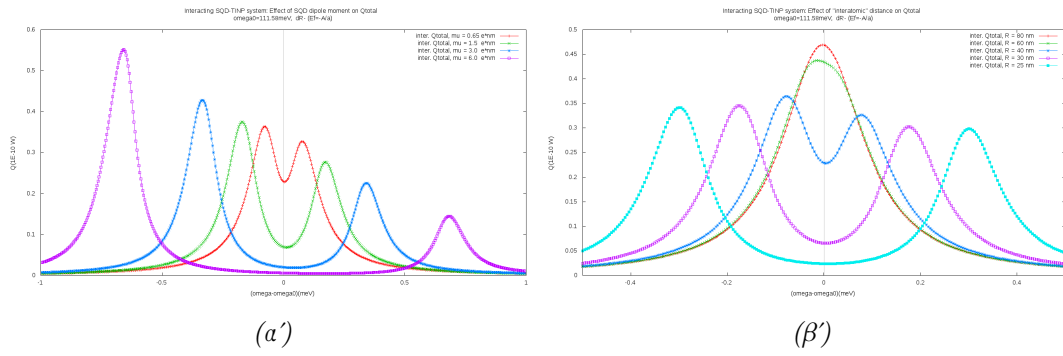
Πρώτη στήλη: Συμπεριφορά για ω_0 γύρω από τη διέγερση LSPPhP, για $R = \alpha = 50nm$ και $\mu = 0.65e * nm$. (α') Q_{total} . (γ') Q_{SQD} . (ε') Q_{TINP} .

Δεύτερη στήλη: Συμπεριφορά για ω_0 γύρω από τη διέγερση LSPPhP, για $R = \alpha = 50nm$ και $\mu = 3.0e * nm$. (β') Q_{total} . (δ') Q_{SQD} . (ζ') Q_{TINP} .

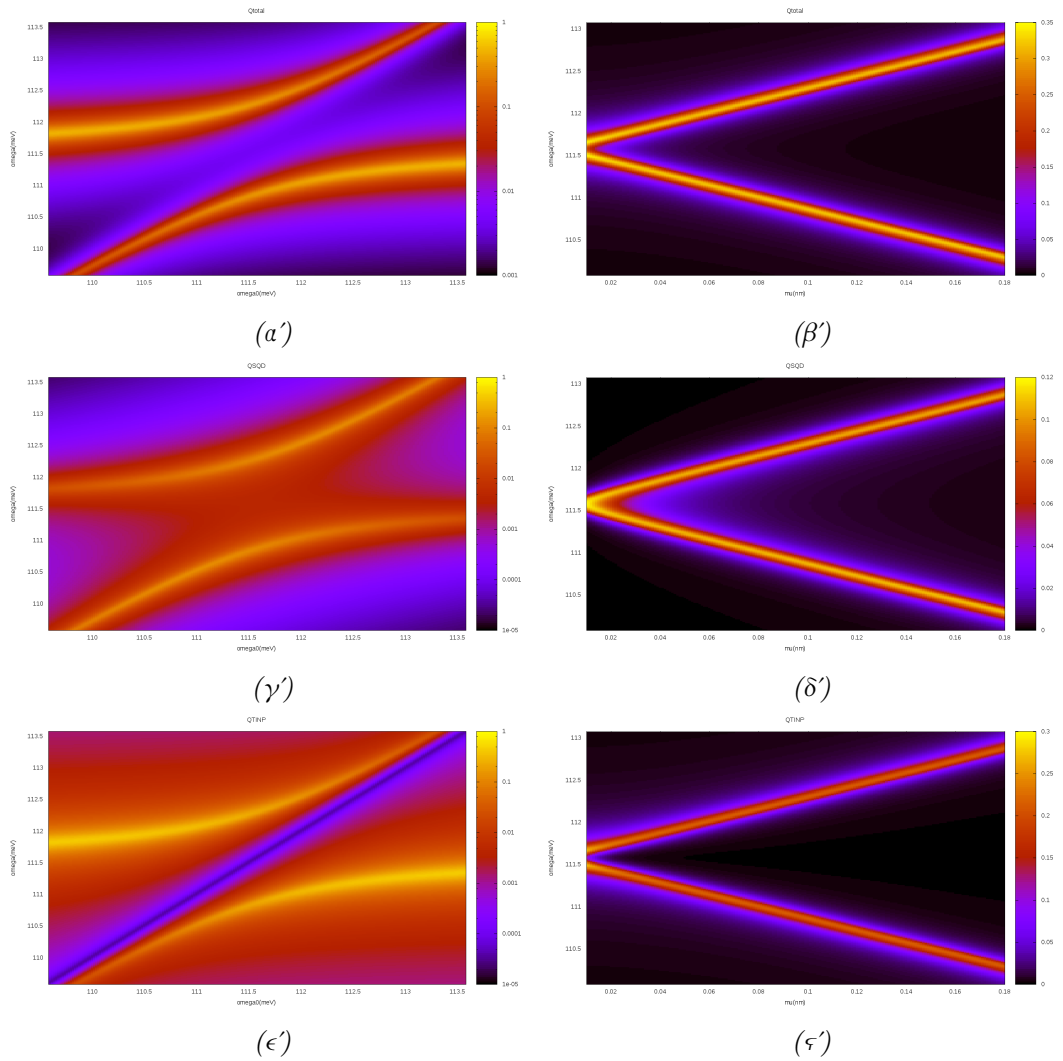


Σχήμα 5.29: Εξάρτηση της απορρόφησης από τη διπολική ροπή του SQD , μ , όταν $R = \alpha = 50nm$. Στον οριζόντιο άξονα φαίνεται το μ , ενώ στον κατακόρυφο άξονα η συχνότητα του διεγείροντος φωτός, ω . Επιλέχθηκε η οριακή περίπτωση $R = \alpha = 50nm$ για να δούμε τη συμπεριφορά του συστήματος στην ισχυρότερη δυνατή σύζευξη. (α') Q_{total} . (β') Q_{SQD} . (γ') Q_{TINP} .

Για ακτίνα νανοσωματιδίου $10nm$, η κορυφή του LSPPhP εμφανίζεται περί τα $111.58meV$ για τη συγκεκριμένη επιλογή επιπέδου Fermi. Στα ενδεικτικά διαγράμματα που παρατίθενται στο Σχήμα 5.30 καθίσταται ήδη σαφές ότι κι εδώ τα φαινόμενα είναι αρκετά έντονα. Για μια καλύτερη σύγκριση, ωστόσο, με την προηγούμενη περίπτωση, παραθέτω και τα γραφήματα στο Σχήμα 5.31, που αφορούν την οριακή διάταξη του συστήματος ($R = \alpha = 10nm$). Στην πρώτη στήλη φαίνεται το splitting όταν $\mu = 0.1e * nm$, ενώ στη δεύτερη βλέπουμε πώς αυτό μεταβάλλεται όταν το μ κυμαίνεται στο διάστημα $(0, 0.18)e * nm$. Παρατηρούμε ότι για όμοιες τιμές μ , το splitting σε αυτήν την κορυφή είναι μεγαλύτερο από το αντίστοιχο που παρατηρείται στις κορυφές του τοπολογικού πλασμονίου, $SToP$.



Σχήμα 5.30: Απορρόφηση κοντά στο συντονισμό LSP_{hP} του TINP, $\alpha = 10\text{nm}$, $E_F = -A/\alpha$. (α) Επίδραση του μ , για σταθερό $R = 40\text{nm}$. (β) Επίδραση του R , για σταθερό $\mu = 0.65e * \text{nm}$.



Σχήμα 5.31: Συμπεριφορά του splitting μεταβάλλοντας το ω_0 (πρώτη στήλη) και το μ (δεύτερη στήλη) στην οριακή διάταξη $R = \alpha = 10\text{nm}$.

Πρώτη στήλη: Συμπεριφορά μεταβάλλοντας το ω_0 γύρω από τη διέγερση LSP_{hP}, για $R = \alpha = 10\text{nm}$ και $\mu = 0.1e * \text{nm}$. (α') Q_{total} . (γ') Q_{SQD} . (ε') Q_{TINP} .

Δεύτερη στήλη: Συμπεριφορά του splitting μεταβάλλοντας το μ γύρω από τη διέγερση LSP_{hP}, για $R = \alpha = 10\text{nm}$. (β') Q_{total} . (δ') Q_{SQD} . (ζ') Q_{TINP} .

Σύνοψη αποτελεσμάτων και συμπεράσματα

Σε αυτό το σημείο θα αναφερθώ μόνο στα αποτελέσματα που έχουν αμεσότερη σχέση με το *splitting*, για τα οποία πραγματοποιείται συζήτηση και εξάγονται ορισμένα συμπεράσματα.

Κατ' αρχάς, διαπιστώθηκε ότι η ισχύς της διεγείρουσας ακτινοβολίας I δε φαίνεται να επηρεάζει ποιοτικά τη συμπεριφορά του συστήματος, τουλάχιστον σε ένα διάστημα $(0, 100)W/cm^2$, προσπαθώντας πάντα να βρισκόμαστε σε αρκετά μικρά I ώστε να ισχύει η προσέγγισή μας. Από την άλλη, όπως παρουσιάστηκε και εκτενώς στα προηγούμενα τμήματα, η απόσταση R μεταξύ των νανοσωματιδίων, αλλά και η διπολική ροπή μ του *SQD* παίζουν καθοριστικό ρόλο στη συμπεριφορά του συστήματος. Ειδικότερα, παρατηρούμε ότι η ισχύς αλληλεπίδρασης ενισχύεται για μικρότερα R , όπως και για μεγαλύτερα μ , ενδεχομένως οδηγώντας σε *splitting*. Δικαιολογούνται, όμως, αυτές οι παρατηρήσεις μέσω των εξισώσεων και της θεωρίας μας.

Πράγματι, διαισθητικά θα αναμέναμε μεγαλύτερη διπολική ροπή μ να οδηγεί σε ισχυρότερη αλληλεπίδραση, αφού έτσι ισχυρότερο πεδίο θα επάγεται από *SQD* στο *TINP* και άρα (ως αποτέλεσμα) επίσης από το *TINP* στο *SQD*. Αντίστοιχα, μικρότερες τιμές της απόστασης R θα οδηγούν σε ισχυρότερα επαγόμενα πεδία από το ένα σωματίδιο στο άλλο, λόγω της αυξημένης εγγύτητάς τους. Όταν όμως αυξάνουμε την ένταση του πεδίου, θα αναμέναμε, πάλι, μια ενίσχυση της σύζευξης, κάτι το οποίο δεν παρατηρήθηκε – γεγονός το οποίο αποδώσαμε στη γραμμική συμπεριφορά του μοντέλου.

Τα συμπεράσματα αυτά αντικατοπτρίζονται εν μέρει στις ποσότητες G και Ω που ορίσαμε κατά την εξαγωγή των εξισώσεών μας:

$$\Omega = \frac{E_0}{2\hbar\epsilon_{effS}} \left(1 + \frac{\gamma\alpha^3 s_\alpha}{R^3} \right), \quad G = \frac{s_\alpha \gamma \alpha^3 \mu^2}{4\pi\epsilon_B \hbar \epsilon_{effS}^2 R^6}$$

Πρέπει να σημειωθεί ότι οι ποσότητες αυτές συναντώνται στο πεδίο του *SQD*, E_{SQD} . Η ποσότητα G , όπως είδαμε, περιγράφει την «αυτο-αλληλεπίδραση» του *SQD*, ενώ η Ω περιλαμβάνει ένα όρο για την αλληλεπίδραση με το εξωτερικό πεδίο και ένα δεύτερο όρο για το επαγόμενο πεδίο από το *TINP*. Στο πεδίο του *TINP* επίσης εμφανίζονται αντίστοιχοι όροι με το E_0 , αλλά και με το λόγο μ/R^3 . Η μορφή των εκφράσεων αυτών υποδεικνύει πάλι ενισχυμένη αλληλεπίδραση για αυξανόμενο μ (και ίσως I) και μειούμενο R .

Παρατηρήσαμε, ακόμα, ότι η (οριακή, $R = \alpha$) σύζευξη ήταν ισχυρότερη στην περίπτωση μικρότερου α . Αυτό ίσως μοιάζει κάπως περίεργο, καθώς η διπολική ροπή του *TINP* πρέπει να είναι ισχυρότερη όταν έχει μεγαλύτερη ακτίνα, και άρα θα αναμέναμε ισχυρότερη αλληλεπίδραση τότε. Φαίνεται, όμως, ότι στο σύστημά μας είναι η συνδυασμένη επίδραση του α με το R που έχει ως αποτέλεσμα αυτή τη συμπεριφορά. Ειδικότερα, βλέπουμε το λόγο α^3/R^6 στο G , που φαίνεται να ευθύνεται για την ισχυρότερη σύζευξη στην περίπτωση $\alpha = 10nm$ (σε σχέση με την $\alpha = 50nm$): όταν $\alpha = R$, είναι εμφανές ότι στην περίπτωση μικρότερου α ο όρος G θα είναι μεγαλύτερος, οπότε θα αναμέναμε (ενδεχομένως) ισχυρότερη σύζευξη.

Όσον αφορά το ω_0 , όπως φάνηκε και από τα διαγράμματα 3Δ που παρατέθηκαν, η συμπεριφορά που είδαμε ήταν αρκετά λογική. Σε κατάσταση ασθενούς σύζευξης, οι δύο διεγέρσεις δρούσαν ουσιαστικά ανεξάρτητα, ανεξαρτήτως του ω_0 . Σε ισχυρή σύζευξη, για τιμές του ω_0

αρκετά μακριά από συντονισμό του *TINP*, η συνολική απορρόφηση συμπεριφέρεται σαν να απαρτίζεται από τις ανεξάρτητες διεγέρσεις των *SQD, TINP*. Καθώς πλησιάζουμε το συντονισμό, όμως, η συμπεριφορά αποκλίνει σημαντικά από αυτήν των ανεξάρτητων συστημάτων, γεγονός το οποίο είναι ορατό με τη μορφή του διαχωρισμού των κορυφών. Ακόμα, είδαμε ότι το χαρακτηριστικό splitting όντως γίνεται μέγιστο όταν βρισκόμαστε κοντά στο συντονισμό, δηλαδή τότε οι δύο διεγέρσεις απέχουν στο μέγιστο βαθμό από αυτές του ανεξάρτητου συστήματος.

Σε αυτά τα γραφήματα φαίνεται επίσης η αυξημένη συμφωνία σε κατάσταση ισχυρής σύζευξης: αφενός από τη μορφή της συνολικής απορρόφησης κοντά στο συντονισμό, όπου δεν ξεχωρίζουμε το «χαρακτήρα» των διεγέρσεων λόγω του splitting, και αφετέρου από την εμφάνιση της ίδιας συμπεριφοράς και στις δύο συνιστώσες απορρόφησης. Το τελευταίο παρατηρήθηκε και στους υπόλοιπους τύπους γραφημάτων και, μαζί με την εμφάνιση splitting, ήταν ένα βασικό κριτήριο για να βρισκόμαστε σε κατάσταση ισχυρής σύζευξης.

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσίαζε και η διαδικασία σχηματισμού του splitting, καθώς οδηγούμαστε από ασθενή σε ισχυρή σύζευξη. Σε πολύ ασθενή σύζευξη, οι δύο διεγέρσεις δρουν πρακτικά ανεξάρτητα. Για ισχυρότερη σύζευξη, αρχίζουν να εμφανίζονται φαινόμενα τύπου Fano, ή και ένα βύθισμα στην απορρόφηση, από το φαίνεται κάτι που εξαρτάται και από τα σχετικά εύρη των δύο διεγέρσεων (βλέπε και τμήμα «Άλλα φαινόμενα και περαιτέρω μελέτη» στη συνέχεια). Σε αυτή τη φάση ο διαχωρισμός είναι ορατός μόνο στη μία συνιστώσα απορρόφησης. Σταδιακά, ο διαχωρισμός διευρύνεται και εμφανίζεται και στις δύο διεγέρσεις (συνιστώσες), οδηγώντας τελικά και στη γνώριμη μορφή των 3Δ διαγραμμάτων για το ω_0 , όπου έχουμε κατάσταση ισχυρής σύζευξης.

Μελετώντας τη συμπεριφορά γύρω από τις διεγέρσεις του *TINP* για σταθερό α , είδαμε ότι η σύζευξη που μπορούσαμε να επιτύχουμε ήταν ισχυρότερη ή ασθενέστερη ανάλογα με την περίπτωση. Ειδικότερα, και για τις δύο περιπτώσεις ακτίνας του *TINP* που μελετήθηκαν, παρατηρήσαμε ότι ισχυρότερη σύζευξη παρουσίασε η κορυφή *LSPPhP*, ακολουθούμενη από τη διέγερση *SToP* για επίπεδο Fermi $E_F = -A/\alpha$ και μετά από τη διέγερση *SToP* για επίπεδο Fermi $E_F = +A/\alpha$. Στηριζόμενοι στη θεωρία, και σύμφωνα με ορισμένες παρατηρήσεις σχετικά με τα χαρακτηριστικά των διεγέρσεων, μπορούμε να εξηγήσουμε πού οφείλεται η διαφορά που παρατηρείται.

Για να εξηγήσουμε αυτές τις διαφορές, καταφεύγω πάλι στη μελέτη των απομονωμένων συστημάτων του *SQD* και του *TINP*. Στο Σχήμα 5.32 φαίνονται δεδομένα σχετικά με το εύρος και το ύψος των κορυφών για τις διεγέρσεις των απομονωμένων *TINP* και *SQD*, για $\alpha = 50nm$ και $\alpha = 10nm$. Με βάση τα δεδομένα αυτά, είναι εύκολο να υποθέσουμε γιατί η σύζευξη διαφέρει από περίπτωση σε περίπτωση.

Μπορούμε, λοιπόν, να δούμε δύο παραμέτρους οι οποίες συνεισφέρουν με αρκετά διαφορετικό τρόπο. Αφενός, έχουμε το ύψος της κορυφής, δηλαδή τη μέγιστη απορρόφηση της κορυφής. Μεγαλύτερη απορρόφηση υποδεικνύει ισχυρότερη διπολική ροπή του νανοσωματιδίου, οδηγώντας, ενδεχομένως, σε ισχυρότερη σύζευξη. Αφετέρου, έχουμε το εύρος της κορυφής, που καταγράφεται στον πίνακα ως *FWHM* (πλήρες εύρος στο ήμισυ του μεγίστου). Μεγάλο εύρος, που αντιστοιχεί σε μικρότερο χρόνο χαλάρωσης, σημαίνει μεγαλύτερες απώλειες

Ακτίνα TINP $\alpha=50nm$

A/A	Ενέργεια (meV)	Απομονωμένο TINP			Απομονωμένο SQD	
		Κορυφή	FWHM (meV)	Ύψος ($1e-10W/cm^2$)	FWHM (meV)	Ύψος ($1e-10W/cm^2$)
1	4.17	LSPP	0.91	2.7E-04	2.63	1.7E-06
2	6.24	SToP ($E_F = +A/\alpha$)	0.10	4.1E-04	1.76	3.9E-06
3	11.8	SToP ($E_F = -A/\alpha$)	0.04	2.7E-03	0.93	1.4E-05
4	15.31	β φωνόνιο	0.28	3.7E-04	0.72	2.3E-05
5	67.94	LSPhP	0.68	8.1E+00	0.16	4.6E-04

(για $\mu=0.65 e^*nm$)**Ακτίνα TINP $\alpha=10nm$**

A/A	Ενέργεια (meV)	Απομονωμένο TINP			Απομονωμένο SQD	
		Κορυφή	FWHM (meV)	Ύψος ($1e-10W/cm^2$)	FWHM (meV)	Ύψος ($1e-10W/cm^2$)
6	4.165	LSPP	0.90	2.2E-06	2.65	1.7E-06
7	15.323	β φωνόνιο	0.29	4.2E-06	0.72	2.3E-05
8	20.03	SToP ($E_F = +A/\alpha$)	0.41	3.8E-04	0.55	4.0E-05
9	35.94	SToP ($E_F = -A/\alpha$)	0.51	4.8E-03	0.30	1.3E-04
10	111.58	LSPhP	0.20	4.8E-01	0.10	1.2E-03

(για $\mu=0.65 e^*nm$)

Σχήμα 5.32: Στοιχεία για το εύρος των κορυφών στα απομονωμένα συστήματα TINP και SQD.

στο σύστημα για τη συγκεκριμένη διέγερση (απώλειες με τη μορφή θερμότητας, φωτεινές και σκοτεινές μεταβάσεις, κ.ά.). Όταν οι κορυφές είναι πιο «πλατιές», οι διεγέρσεις γίνονται ευρύτερες και έτσι είναι πιο δύσκολο να διακρίνουμε το splitting στο σύστημα. Ιδανικά, λοιπόν, φαίνεται να θέλουμε ισχυρή απορρόφηση με σχετικά μικρό εύρος για να έχουμε τα καλύτερα αποτελέσματα.

Πράγματι, όταν $\alpha = 50nm$, παρατηρούμε ότι η κορυφή *LSPhP*, όπου είδαμε και την ισχυρότερη σύζευξη, χαρακτηρίζεται από τη μεγαλύτερη απορρόφηση και μάλιστα κατά αρκετές τάξεις μεγέθους. Γενικότερα, φαίνεται ότι όντως την ισχυρότερη σύζευξη έχουν οι κορυφές με την ισχυρότερη απορρόφηση. Αξίζει να σημειωθεί ότι με βάση τις παραδοχές για το *SQD*, και η εξιτονική κορυφή είναι αρκετά ισχυρότερη και στενότερη κοντά στη διέγερση *LSPhP*, σε σχέση με τις άλλες κορυφές. Μεταξύ των δύο περιπτώσεων *SToP*, βλέπουμε ότι για επίπεδο Fermi κάτω από το σημείο Dirac έχουμε την ισχυρότερη απορρόφηση αλλά και τη στενότερη κορυφή.

Αντίστοιχα, όταν $\alpha = 10nm$, πάλι βλέπουμε ότι η *LSPhP* διακρίνεται από την ισχυρότερη απορρόφηση, αλλά και από το μικρότερο εύρος – και πράγματι εδώ είδαμε το καθαρότερο splitting. Για τη διέγερση *SToP*, μάλλον μπορούμε να αποδώσουμε τα ισχυρότερα φαινόμενα στην περίπτωση $E_F = -A/\alpha$ κυρίως στην πολύ μεγαλύτερη απορρόφηση σε σχέση με την $E_F = +A/\alpha$. Όμοια, θα μπορούσαμε να αποδώσουμε την απουσία splitting στις κορυφές *LSPP* και β φωνονίου κυρίως στην πολύ μικρότερη απορρόφηση που τις χαρακτηρίζει.

Διαπιστώσαμε, λοιπόν, ότι στο σύστημα φαίνεται να μπορούν να προκύψουν σύμφωνες συζευγμένες καταστάσεις τόσο από τα τοπολογικά πλασμόνια (αλληλεπίδραση διέγερσης *SToP* και εξιτονίου) όσο και από τα φωνονικά πολαριτόνια (αλληλεπίδραση διέγερσης *LSPhP* και εξιτονίου) του τοπολογικού νανοσωματιδίου. Στην πρώτη περίπτωση μπορεί να γίνει λόγος για «τοπολογικά πλεξιτόνια» ενώ στη δεύτερη για «φωνονικά-εξιτονικά πολαριτόνια». Αν και το φαινόμενο είναι όμοιο και στις δύο περιπτώσεις, μπορούμε να περιμένουμε ότι οι δύο σύνθετες διεγέρσεις θα έχουν αρκετά διαφορετικές ιδιότητες, καθώς το *SToP* και το *LSPhP* είναι φύσει διαφορετικά. Η διέγερση του τοπολογικού πλασμονίου (*SToP*) φαίνεται να προκύπτει,

όπως σχολιάστηκε, από την αλληλεπίδραση των τοπολογικά προστατευμένων επιφανειακών καταστάσεων με το α φωνόνιο του Bi_2Se_3 . Από την άλλη, η διέγερση LSP_{hP} προκύπτει ως ένας συντονισμός της πολωσιμότητας του νανοσωματιδίου, που φαίνεται να οφείλεται κυρίως στην επίδραση του α φωνονίου και λιγότερο στους ελεύθερους φορείς του υλικού, που ωστόσο φαίνεται επίσης να αλληλεπιδρά έντονα με τη διέγερση $SToP$ (και ίσως και με τις τοπολογικά προστατευμένες καταστάσεις του $TINP$). Στην πράξη, οι δύο διεγέρσεις μάλλον προσφέρουν διαφορετικές δυνατότητες εντοπισμού και ενίσχυσης του πεδίου και ενδεχομένως χαρακτηρίζονται από διαφορετικό βαθμό απωλειών, όλα χαρακτηριστικά που πολύ πιθανόν θα πρέπει να ληφθούν υπόψη σε μελλοντικές εφαρμογές στο βαθύ-μέσο υπέρυθρο.

Στο επόμενο τμήμα, αναφέρονται συνοπτικά κάποια άλλα φαινόμενα τα οποία παρατηρήθηκαν κατά τη μελέτη του συστήματος, μαζί με σύντομες ερμηνείες. Στο τελευταίο τμήμα γίνονται ορισμένες επιπλέον παρατηρήσεις για το σύστημα και για τον τρόπο μελέτης του.

Άλλα φαινόμενα και περαιτέρω μελέτη

Πέρα από την εμφάνιση *splitting*, κατά τη μελέτη του συστήματος παρατηρήθηκαν και μερικά άλλα ενδιαφέροντα φαινόμενα, τα οποία, αν και πέρα από τους σκοπούς αυτής της διπλωματικής, αξίζει να σχολιαστούν εν συντομία.

Ενίσχυση και καταστολή της απορρόφησης. Μία σχετικά απλή παρατήρηση που μπορούμε να κάνουμε μελετώντας το σύστημα είναι ότι η απορρόφηση των *SQD* και *TINP* (σε μια περιοχή συχνοτήτων) μπορεί να ενισχύεται ή να καταστέλλεται από την αλληλεπίδραση. Με άλλα λόγια, η απορρόφηση τους στο αλληλεπιδρών σύστημα μπορεί να είναι αυξημένη ή μειωμένη σε σχέση με την αντίστοιχη του απομονωμένου *SQD* ή *TINP*. Θα είχε ενδιαφέρον να διερευνηθεί πότε συμβαίνει ενίσχυση και πότε καταστολή στα *SQD*, *TINP*, και να αναζητηθεί μια εξήγηση για αυτή τη συμπεριφορά.

Μετατοπίσεις προς το ερυθρό. Όπως σχολιάστηκε και σε προηγούμενα σημεία, συχνά εμφανίζονται μετατοπίσεις των κορυφών προς το ερυθρό (*Redshifts*) κατά την αλληλεπίδραση. Φαίνεται ότι αυτές οι μετατοπίσεις αντιστοιχούν στο σχηματισμό υβριδικών καταστάσεων με μερική συμφωνία, οι οποίες είναι μετατοπισμένες ως προς τις ανεξάρτητες διεγέρσεις. Θα είχε ενδιαφέρον να διερευνηθεί ο μηχανισμός πίσω από τη μετατόπιση, όπως και τα χαρακτηριστικά αυτών των μετατοπισμένων διεγέρσεων.

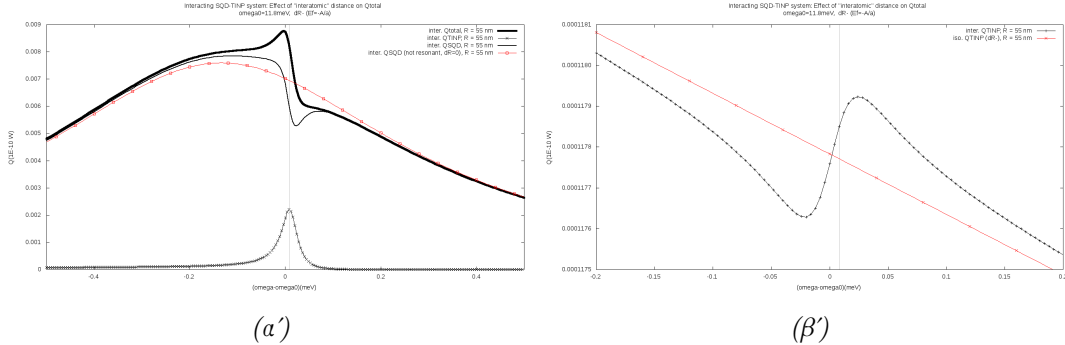
Σκοτεινές καταστάσεις. Σε ορισμένες περιπτώσεις είδαμε ότι εμφανίζονται σκοτεινές καταστάσεις στο φάσμα απορρόφησης, οι οποίες φαίνεται να σχετίζονται άμεσα με τις ανεξάρτητες διεγέρσεις του *SQD* και του *TINP*. Όπως υποθέσαμε προηγουμένως, μπορεί να προκύπτουν από μια καταστροφική συμβολή των δύο διεγέρσεων κατά την αλληλεπίδραση των σωματιδίων. Θα είχε ενδιαφέρον να εξακριβωθεί η φύση και ο μηχανισμός αυτών των καταστάσεων.

Συντονισμοί τύπου Fano και βυθίσματα απορρόφησης. Ένα άλλο ενδιαφέρον φαινόμενο που συνάντησα, και το οποίο σχολιάστηκε σύντομα στην προηγούμενη μελέτη, είναι οι συντονισμοί τύπου Fano. Ο συντονισμός Fano είναι ένα γνωστό φαινόμενο, όπου εμφανίζεται μια χαρακτηριστική ασύμμετρη καμπύλη απορρόφησης, που προκύπτει από την αλληλεπίδραση μιας (διακριτής) διέγερσης σε κάποια συχνότητα συντονισμού ω_r *resonance* και μιας συνεχούς διέγερσης «υποβάθρου» σε ένα εύρος ενεργειών. Στην πράξη, φαινόμενα αυτού του τύπου μπορούν να παρατηρηθούν και όταν έχουμε μία πολύ στενή διέγερση, η οποία αλληλεπιδρά με μία αρκετά ευρύτερη διέγερση.

Πράγματι, κάτι τέτοιο φαίνεται να συμβαίνει στις περιπτώσεις όπου παρατηρήσαμε καμπύλες απορρόφησης αυτού του τύπου. Ένα καλό παράδειγμα θα ήταν στη διέγερση *SToP*, για $\alpha = 50nm$, όπου το εύρος της κορυφής ήταν πολύ στενότερο από της εξιτονικής διέγερσης (βλέπε και πίνακα 5.32). Στο Σχήμα 5.33 (α') φαίνεται ενδεικτικά η απορρόφηση κοντά στην *SToP*, με $\alpha = 50nm$ και για επίπεδο Fermi $E_F = -A/\alpha$. Παρατηρούμε ότι η μορφή Fano εμφανίζεται τόσο στη συνιστώσα του *SQD* (στην ευρύτερη κορυφή), όσο και στη συνολική απορρόφηση.

Σε ορισμένες περιπτώσεις, όπου το φαινόμενο Fano είναι πολύ ασθενές, η καμπύλη μπορεί να μην είναι ορατή στη συνολική απορρόφηση. Τέτοια περίπτωση είναι αυτή που φαίνεται στο

(β'), για ω_0 μακριά από συντονισμούς του *TINP*. Για το $\omega_0 = 200\text{meV}$ που επιλέγηκε, ο χρόνος χαλάρωσης του εξιτονίου είναι αρκετά μεγάλος, οπότε η κορυφή είναι αρκετά στενή. Έτσι στη συνιστώσα απορρόφησης του *TINP* (πάλι η ευρύτερη κορυφή) εμφανίζεται ένα ιδιαίτερα ασθενές φαινόμενο τύπου Fano, το οποίο δεν είναι ορατό στη συνολική απορρόφηση.

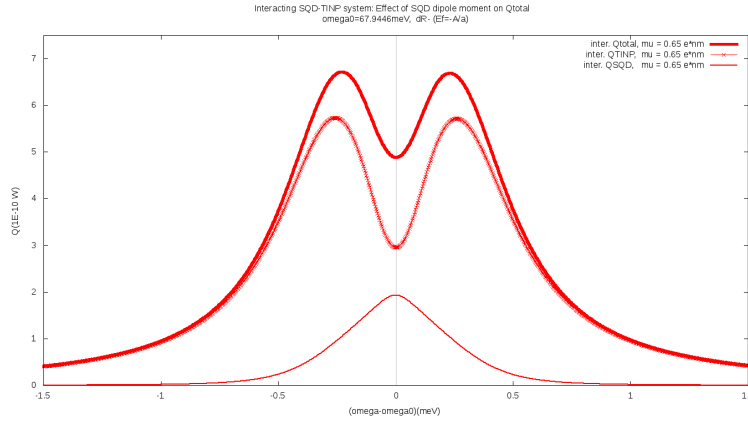


Σχήμα 5.33: (α) Φαινόμενο τύπου Fano κοντά στη διέγερση *SToP*, για $\alpha = 50\text{nm}$, $E_F = -A/\alpha$, όπου η κορυφή είναι ιδιαίτερα στενή σε σχέση με αυτήν του εξιτονίου. Η μορφή Fano είναι ορατή στη συνιστώσα του *SQD*, αλλά και στη συνολική απορρόφηση. Η κόκκινη καμπύλη είναι το $Q_{SQD} \approx Q_{total}$ απουσία επιφανειακών καταστάσεων, δηλαδή απουσία της κορυφής του *TINP*, για σύγκριση. Εδώ $R = 55\text{nm}$ και $\mu = 0.65e * \text{nm}$. (β) Φαινόμενο τύπου Fano στη συνιστώσα απορρόφησης του *TINP* μακριά από συντονισμό του *TINP*. Το φαινόμενο είναι πολύ ασθενές και δεν είναι ορατό στη συνολική απορρόφηση (το Q_{total} οφείλεται κυρίως στο Q_{SQD}). Η κόκκινη καμπύλη είναι το Q_{TINP} για το απομονωμένο *TINP*, για σύγκριση. Εδώ $R = 55\text{nm}$ και $\mu = 6.0e * \text{nm}$.

Ένα όμοιο φαινόμενο είναι τα βυθίσματα απορρόφησης, τα οποία παρουσιάζουν γενικά περισσότερη συμμετρία στη μορφή τους. Όπως είδαμε στην κύρια μελέτη, το βύθισμα τείνει σταδιακά να «βυθιάζει» και να ανοίγει καθώς οδηγούμαστε σε ολοένα και ισχυρότερη σύζευξη. Μια χαρακτηριστική περίπτωση είναι αυτή που συναντήσαμε στην κορυφή *LSPHP*, για $\alpha = 50\text{nm}$, όπως φαίνεται στο Σχήμα 5.34. Γενικά, βύθισμα απορρόφησης φαίνεται να συμβαίνει σε αρκετά ισχυρή σύζευξη, και φαίνεται να είναι εντονότερο (βαθύτερο) όταν υπάρχει αρκετή διαφορά στα εύρη των κορυφών (βλέπε και «Διαφορετικοί χρόνοι χαλάρωσης του *SQD*»).

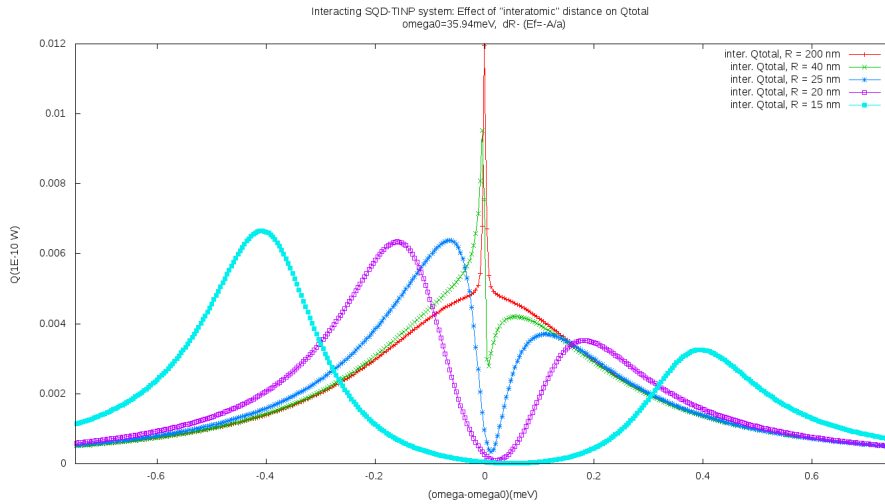
Διαφορετικοί χρόνοι χαλάρωσης του *SQD*. Σε όλη την προηγούμενη μελέτη, θεωρήσαμε ότι οι χρόνοι χαλάρωσης του τελεστή πυκνότητας του *SQD* βρίσκονται περίπου στα *ps* (βλ. Κεφάλαιο 7: Αριθμητικοί υπολογισμοί: Απομονωμένο σύστημα *SQD*). Στην πράξη, ωστόσο, μπορούν να βρεθούν διεγέρσεις στο βαθύ υπέρυθρο οι οποίες είναι πιο βραχύβιες ή ίσως και μακροβιότερες. Για παράδειγμα, στο [Λονγρελαξαρτιςλε] περιγράφονται διεγέρσεις που κυμαίνονται από *ps* έως και $\sim ns$, ανάλογα με τη διαφορά ενέργειας μεταξύ των σχετικών ενεργειακών επιπέδων.

Σε αυτό το τμήμα θα παρουσιαστεί συνοπτικά και ποιοτικά ότι η συμπεριφορά του συστήματος μπορεί να αλλάξει σημαντικά μεταβάλλοντας το ρυθμό χαλάρωσης της εξιτονικής διέγερσης. Για παράδειγμα, ας δούμε πάλι την κορυφή *SToP* για $\alpha = 10\text{nm}$ και για επίπεδο Fermi κάτω από το σημείο Dirac, αλλά με μεγαλύτερους χρόνους χαλάρωσης αυτή τη φορά. Στο Σχήμα 5.35 φαίνεται η επίδραση του R για σταθερή διπολική ροπή $\mu = 0.65e * \text{nm}$ και για χρόνους χαλάρωσης περίπου 70 φορές μεγαλύτερους από αυτούς που θεωρήσαμε προη-



Σχήμα 5.34: Βύθισμα απορρόφησης στην κορυφή *LSPnP*, $\alpha = 50nm$, για $R = 55nm$, $\mu = 0.65e * nm$. Το βύθισμα απορρόφησης είναι ορατό στη συνιστώσα του *SQD*, αλλά και στη συνολική απορρόφηση.

γυμμένως ($\tau_0 = 0.8ns$, $T_{20} = 0.3ns$).



Σχήμα 5.35: Η κορυφή *SToP*, $\alpha = 10nm$, $E_F = -A/\alpha$, για διαφορετικές τιμές της «διατομικής» απόστασης R , θεωρώντας μεγαλύτερο χρόνο χαλάρωσης των καταστάσεων του *SQD* - $\tau_0 = 0.8ns$ και $T_{20} = 0.3ns$, αντί για $\tau_0 = 0.8ns * \frac{(35.94 * 10^{-3})eV}{2.5eV} \approx 11.5ps$ και $T_{20} = 0.3ns * \frac{(35.94 * 10^{-3})eV}{2.5eV} \approx 4.3ps$.

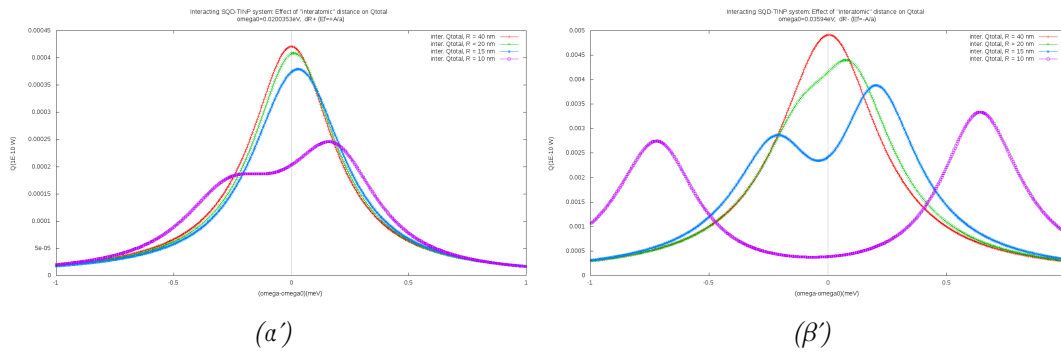
Η διαφορά εδώ είναι ότι η κορυφή του εξιτονίου είναι αρκετά στενότερη σε σχέση με αυτή της διέγερσης *SToP*. Παρατηρούμε, πάλι, ότι για μεγάλα R οι δύο διεγέρσεις φαίνεται να δρουν ανεξάρτητα, καθώς είναι ορατές και οι δύο κορυφές ($R = 200nm$ στο σχήμα). Σταδιακά, καθώς ενισχύεται η σύζευξη οδηγούμαστε σε φαινόμενα τύπου Fano ($R = 40nm$), κάτι το οποίο θα αναμέναμε από τη μεγάλη διαφορά στα εύρη των δύο κορυφών. Στη συνέχεια η μορφή Fano μετατρέπεται σε ένα βύθισμα απορρόφησης ($R = 25$ και $20nm$ στο σχήμα), προτού περάσουμε σε κατάσταση ισχυρής σύζευξης για αρκετά μικρές αποστάσεις ($R = 15nm$). Αξίζει να παρατηρήσουμε ότι στο βύθισμα απορρόφησης φαίνεται το σύστημα να μπορεί να αποκτήσει μηδενική απορρόφηση, δηλαδή να καταστεί διαφανές.

Αν και η βασική ιδέα παραμένει η ίδια, είναι εμφανές ότι το σύστημα συμπεριφέρεται αρκετά διαφορετικά σε αυτήν την περίπτωση. Κατ'αρχάς, εμφανίζεται φαινόμενο τύπου Fano, και το

οποίο ήταν από την προηγούμενη περίπτωση. Παράλληλα, το βύθισμα απορρόφησης, το οποίο αν και εμφανίστηκε και στην προηγούμενη περίπτωση, φαίνεται να είναι εντονότερο εδώ. Πέραν τούτου, το splitting επίσης φαίνεται να είναι κάπως «καθαρότερο», μάλλον κυρίως λόγω του στενότερου εύρους της κορυφής του SQD. Πρέπει, ωστόσο, να σημειωθεί ότι αυξάνοντας το χρόνο χαλάρωσης, η κορυφή του εξιτονίου δεν έγινε μόνο στενότερη: έγινε και πιο ισχυρή, όπως είδαμε από το τμήμα «Απομονωμένο σύστημα SQD».

Φαίνεται, λοιπόν, ότι ο χρόνος χαλάρωσης του εξιτονίου, πέρα από τη διακρισιμότητα των κορυφών στο splitting, μπορεί να έχει και συνέπειες στη γενικότερη ποιοτική συμπεριφορά του συστήματος. Θα είχε, λοιπόν, ενδιαφέρον να διερευνηθεί περαιτέρω η συμπεριφορά του συστήματος ανάλογα με το ρυθμό χαλάρωσης του εξιτονίου.

Εγκάρσια πόλωση. Έχει επίσης ενδιαφέρον να δούμε σύντομα και ορισμένα αποτελέσματα για εγκάρσια πόλωση, δηλαδή κάθετη στον άξονα του συστήματος. Στο Σχήμα 5.36 που ακολουθεί, παραθέτω διαγράμματα της απορρόφησης μεταβάλλοντας το R ($\mu = 0.65e * nm$) για την κορυφή SToP, για $\alpha = 10nm$, με $E_F = +A/\alpha$ (αριστερά) και με $E_F = -A/\alpha$ (δεξιά).



Σχήμα 5.36: Απορρόφηση κοντά στο συντονισμό SToP του TINP, μεταβάλλοντας το R με σταθερό $\mu = 0.65e * nm$, και με $\alpha = 10nm$. (α') Επίπεδο Fermi $E_F = +A/\alpha$. (β') Επίπεδο Fermi $E_F = -A/\alpha$.

Κατ' αρχάς, μια ενδιαφέρουσα συμπεριφορά που παρατηρούμε εδώ είναι ότι πρώτα εμφανίζονται μετατοπίσεις προς το κυανό, αντί προς το ερυθρό, προτού εμφανιστεί το splitting. Αντίστοιχα, μάλιστα, με την παράλληλη πόλωση, η μετατόπιση φαίνεται να αυξάνεται αυξάνοντας τη διπολική ροπή και μειώνοντας το R (ενισχύοντας, δηλαδή την ισχύ της σύζευξης).

Παρατηρούμε, ακόμα, ότι όντως η σύζευξη είναι ασθενέστερη σε αυτήν την περίπτωση. Ειδικότερα, στην οριακή κατάσταση $R = \alpha = 10nm$ στο (α') δεν έχουμε πια splitting, ενώ στην παράλληλη πόλωση είχαμε διαχωρισμό περίπου $1meV$. Αντίστοιχα, στο (β') ο διαχωρισμός είναι μικρότερος, τώρα περί το $1meV$ αντί για $2meV$.

Πιθανές εφαρμογές

Γενικά, η παρουσία ισχυρής σύζευξης στο σύστημα υποδεικνύει ότι μπορεί να είναι χρήσιμο σε εφαρμογές όπου χρειαζόμαστε αυξημένη συμφωνία ή σημαντική ενίσχυση πεδίου. Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα όπου η αυξημένη συμφωνία θα ήταν χρήσιμη είναι εφαρμογές που αφορούν lasing και επίτευξη thresholdless lasing [11]. Θα μπορούσαμε, για παράδειγμα, να

περιβάλλουμε το TINP με ένα σύνολο από χβαντικούς εκπομπούς και να υλοποιήσουμε ένα τύπο spaser [3] στο βαθύ-μέσο υπέρυθρο. Από την άλλη, η ενίσχυση πεδίου σε συνδυασμό με τη συμφωνία της κατάστασης και την τοπολογική προστασία μπορεί να το καθιστούν χρήσιμο για εφαρμογές στην χβαντική πληροφορική, αλλά και σε άλλες εφαρμογές που απαιτούν διάδοση πληροφορίας με μικρές απώλειες. Δεδομένης της χειραλικότητας των καταστάσεων στο TINP, το συγκεκριμένο σύστημα μπορεί να έχει και ενδιαφέρον για μελλοντικές εφαρμογές στον τομέα της σπιντρονικής. Ακόμη, ενδεχομένως η σύζευξη, όπως και η γενικότερη συμπεριφορά του συστήματος, να επηρεάζεται σημαντικά από το περιβάλλον υλικό, παρέχοντας, ίσως, μια ενδιαφέρουσα δυνατότητα για υλοποίηση ανιχνευτών και (βιο)αισθητήρων. Μια συναφής ιδέα θα ήταν να παίρνουμε πληροφορία για το περιβάλλον ανάλογα με αλλαγές στη διατομική απόσταση R των νανοσωματιδίων που προκαλούνται, για παράδειγμα, από μηχανικές παραμορφώσεις. Τέλος, μπορεί το σύστημα να έχει ενδιαφέρον και για άλλες, γενικότερες, μελλοντικές εφαρμογές στο βαθύ και μέσο υπέρυθρο.

Συμπεράσματα

Σε αυτή την εργασία μελετήσαμε την ηλεκτρομαγνητική αλληλεπίδραση ενός συστήματος νανοσωματιδίου τοπολογικού μονωτή (*TINP*) από Bi_2Se_3 και ενός απλού κβαντικού εκπομπού (κβαντικό σύστημα δύο επιπέδων). Μελετώντας την απορρόφηση του συστήματος μεταβάλλοντας κατάλληλα παραμέτρους προς ενίσχυση της σύζευξης, διαπιστώνουμε ότι είναι τελικά δυνατόν να επιτευχθεί ισχυρή σύζευξη ανάμεσα σε συντονισμούς του *TINP* και την εξιτονική διέγερση του κβαντικού εκπομπού, δημιουργώντας έτσι σύμφωνες συζευγμένες καταστάσεις.

Το πιο ενδιαφέρον αποτέλεσμα που παρατηρήσαμε ήταν μια νέα σύμφωνη κατάσταση «τοπολογικού πλεξιτονίου», η οποία προκύπτει από την ισχυρή σύζευξη μεταξύ του συντονισμού επιφανειακού τοπολογικού πλασμονίου (SToP) στο *TINP* και της εξιτονικής διέγερσης στον κβαντικό εκπομπό. Ο τοπολογικός χαρακτήρας της διέγερσης αυτής, όπως και η συμφωνία της την καθιστά ιδιαίτερα ενδιαφέρουσα. Ενδιαφέρον είχε, ακόμα, η εμφάνιση ισχυρής σύζευξης ανάμεσα στο επιφανειακό φωνόνιο-πολαριτόνιο του *TINP* και στο εξιτόνιο του εκπομπού. Η διέγερση αυτή επίσης μοιάζει να φέρει κάποιο «τοπολογικό» χαρακτήρα, καθώς φαίνεται να υπάρχει έντονη σύζευξη με τις επιφανειακές καταστάσεις του νανοσωματιδίου. Πέραν τούτου, παρατηρήθηκε και ένα πλήθος από άλλα ενδιαφέροντα φαινόμενα, όπως συντονισμοί Fano, βυθίσματα απορρόφησης, και μετατοπίσεις κορυφών προς το ερυθρό και το κυανό.

Όπως αναμενόταν και από τη θεωρία, είδαμε ότι η σύζευξη ενισχύεται όταν μειώνουμε την απόσταση R μεταξύ των σωματιδίων, ή όταν αυξάνουμε τη διπολική ροπή μ του κβαντικού εκπομπού. Διαπιστώσαμε, ακόμα, ότι το ύψος και το εύρος των κορυφών παίζουν πολύ σημαντικό ρόλο στην εμφάνιση και στο μέγεθος του splitting. Πέραν τούτου, φαίνεται ότι η διαφορά ανάμεσα στους χρόνους χαλάρωσης του συστήματος επίσης μπορούν να επηρεάσουν την ποιοτική συμπεριφορά του. Αξίζει, ακόμα να σημειωθεί ότι σε κατάσταση ισχυρής σύζευξης, πέραν του ότι βλέπαμε το διαχωρισμό στο φάσμα απορρόφησης (σε συμφωνία με τη θεωρία), ο διαχωρισμός αυτός ήταν ορατός και στις δύο συνιστώσες απορρόφησης (του *TINP* και του κβαντικού εκπομπού), κάτι που επιβεβαιώνει και την υψηλή συμφωνία της κατάστασης που αναμέναμε από τη θεωρία.

Τα φαινόμενα που παρατηρήθηκαν μπορεί να είναι χρήσιμα στην έρευνα και εφαρμογές στην κβαντική πληροφορική, στη σπιντρονική, και στη νανοτεχνολογία, γενικότερα.

Παράρτημα

Παράρτημα Α: Κώδικας

Ενδεικτικά, παραθέτω τον βασικό κώδικα (Fortran) που χρησιμοποιήθηκε σε αυτή την εργασία. Δημιουργήθηκαν τρία διαφορετικά αρχεία: rk4.f90, rk4funcs.f90 και rkdynamicfunc.f90. Το πρώτο περιλαμβάνει τον ορισμό και αρχικοποιήσεις των μεταβλητών και την υπολογιστική μέθοδο. Το δεύτερο περιέχει συναρτήσεις που χρησιμοποιούνται για τις διάφορες ποσότητες που χρειαζόμαστε για τους υπολογισμούς, ενώ το τρίτο συναρτήσεις που σχετίζονται άμεσα με την υπολογιστική μέθοδο Runge-Kutta.

Ας σημειωθεί ότι για την παραγωγή των γραφημάτων χρησιμοποιήθηκαν αρκετά διαφορετικά bash scripts και το λογισμικό gnuplot. Ας σημειωθεί ότι και ο κώδικας δέχτηκε ορισμένες μικρές τροποποιήσεις για διαφορετικούς τύπους γραφημάτων.

Κώδικας Fortran

Κυρίως πρόγραμμα – rk4.f90

```
1 program rk4
2   ! A program which solves the dynamical system of three (nonlinear)
3   ! Ordinary Differential Equations.
4   ! We will solve a system for three variables  $x_i(t)$ ,  $i=1,2,3$ ,
5   ! in a system of the form:
6   !  $dx_1/dt = f_1(x_1, x_2, x_3, t)$ 
7   !  $dx_2/dt = f_2(x_1, x_2, x_3, t)$ 
8   !  $dx_3/dt = f_3(x_1, x_2, x_3, t)$ 
9   ! The derivatives (i.e. the functions  $f_1, f_2, f_3$ ) are supplied in
10  ! rk4dynamicfunc.f90
11  ! as real(8) functions.
12  ! Output is written in a file rk4.dat
13  ! the program also calculates values related to the absorption rate of
14  ! three different systems:
15  ! (1). An interacting SQD-TINP system
16  ! (2). An isolated SQD system
17  ! (3). An isolated TINP system
18  !
```

```

19
20 implicit none
21
22 !relevant for Runge Kutta
23 real(8), dimension(1200000) :: t, x1, x2, x3      ! t, x1=A, x2=B, x3=D, in
      vector form.
24 real(8)      :: Ti,      x10,      x20,      x30      ! initial conditions
      for time(t), A,B and D.
25 real(8)      :: Tinit, x1init, x2init, x3init
26 integer      :: i, totaliterations
27
28
29 real(8)      :: Alfa, Beta, Delta      ! the final solutions of
      the systems after several RK iterations
30
31 !"choice" parameters; Used in choosing which procedures to run
32 integer      :: choicedR      ! if=1, then dR for Ef=-A/R, if=2 then for
      Ef=+A/R, else dR=0.
33 integer      :: choiceSystem ! If=1, then calculate absorption values for
      interacting SQD-TINP system for a range of omega values.
34                                     ! If=2, then calculate absorption values for
      isolated SQD, TINP systems for a range
      of omega values.
35                                     ! If=3, then calculate for both, but for
      only one omega (used for debugging and to
      check convergence behaviour in RK4).
36
37 !Omega "scanning" variables
38 real(8)      :: domegal, domega2      ! used to loop omega in the range (
      om0-domega1, om0+domega2)=(omegamin,omegamax)
39 real(8)      :: omegamin, omegamax   ! min/max values of omega; see
      comment above.
40 integer      :: Nomegasteps          ! number of steps when scanning (
      omegamin, omegamax)
41 real(8)      :: omegapstep          ! omegapstep=(domega1+domega2)/
      Nomegasteps
42
43
44 !problem parameters
45 !SQD parameters
46 real(8)      :: rSQD                ! radius of SQD (nm), mostly important for
      distance R considerations
47 real(8)      :: epss                 ! relative diel. constant of SQD
48 real(8)      :: om0                 ! transition frequency, in eV/(hbar) units
49 real(8)      :: mu                   ! transition dipole moment, nm*e units
50 real(8)      :: tau0                 ! lifetime of rho11 and rho22, in ns units
51 real(8)      :: Tau20                ! lifetime of rho12 and rho21, in ns units
52
53 !TINP parameters

```



```

54 real(8)      :: alpha          ! radius of TINP, nm units.
55 complex(16) :: epsm           ! TINP diel. function, dimensionless. epsm =
    dielfuncTI(omega)+deltaR(omega) for the TINP. '+ deltaR' only if we
    include the effects of surface states. Set to zero in rk4funcs.f90.
56
57 !Background material
58 real(8)      :: epsb           !relative diel. constant of background
    material sometimes units will be necessary!
59
60 !Other parameters
61 real(8)      :: R              ! internanoparticle distance, in nm
62 real(8)      :: s_a           ! s_a, value differs depending on
    polarization direction
63 real(8)      :: omega         ! light frequency
64 real(8)      :: Intens        ! light intensity, in units of W/cm^2
65 real(8)      :: E0            ! electric field amplitude, E=E0*cos(omega*t
    ), in V/cm - for I=1, E0=27.45 V/cm.
66
67
68
69 !Several useful functions
70 complex(16) :: dielfuncTI
71 complex(16) :: dielfuncMetal
72 real(8)     :: deltaR
73
74 complex(16) :: G              , Gcom
75 complex(16) :: Omegaeff, Omegaeffcom !*com refers to common block.
76 real(8)     :: Omega0
77
78 real(8)     :: EfieldC , EfieldS
79 real(8)     :: QSQD, QTINP
80 real(8)     :: Qtotal          ! total absorption rate, in (1E-10)
    units
81
82 real(8)     :: QTINPiso1, QTINPiso2, QTINPiso0
83 complex(16) :: epsm1, epsm2, epsm0
84
85
86
87 !Common blocks for some frequently used parameters and values.
88 common/params1/ tau0, Tau20, omega, om0
89 common/params2/ s_a, alpha, mu, R, E0
90 common/params3/ epsb, epss, epsm
91 common/params4/ Omegaeffcom, Gcom
92
93
94 !

```

```

96
97  !User Input; initialization of parameters
98
99  !"choice" parameters:
100 read *,    choiceSystem, choicedR
101
102 !Initial conditions: time(ns), A(t0),B(t0),D(t0):
103 read *,    Ti, x10, x20, x30
104
105 !SQD parameters:
106 read *,    rSQD, epss, om0, mu    !tau0 and Tau20 are set below.
107
108 !TINP parameters:
109 read *,    alpha                !epsm == epsTINP is calculated below, for
    each case.
110
111 !Background material:
112 read *,    epsb
113
114 !Other parameters:
115 read *,    R, Intens, omega
116
117 !Omega "scanning" variables:
118 read *,    domega1, domega2, Nomegasteps
119
120
121 s_a    = 2.0
122 Ti     = Ti*1E4                !time converted from ns units to (1E-4)
    ns units, usable by our RK4 algorithm.
123 E0     = sqrt(2*376.7303*Intens) !Field value, calculated from given
    field intensity. Units: V/cm — for I=1, E0=27.45 V/cm.
124 tau0   = 0.8/2.5*om0          !normalized value for rho11, rho22
    lifetimes
125 Tau20 = 0.3/2.5*om0          !normalized value for rho12, rho21
    lifetimes
126
127
128
129 !

```

```

130
131
132 !Calculate absorption rate values for SQD-TINP interacting system, at
    multiple omegas.
133     !choicedR = 1 : calculate including effect of surface states,
    when Ef=-A/R
134     !choicedR = 2 : calculate including effect of surface states,
    when Ef=+A/R
135     !choicedR = 0 : ignore effect of surface states

```

```

136
137
138 if (choiceSystem .eq. 1) then
139
140   omegamin = om0 - domega1
141   omegamax = om0 + domega2
142   omegastep = (domega1+domega2)/real(Nomegasteps)
143
144   omega = omegamin
145
146   print *, '#_Multiple-omega_results_for_interacting_SQD-TINP_system: '
147   print *, '#_choiceSystem=_', choiceSystem
148   print *, '#(choiceSystem:_[1=_SQD-TINP, multi-omega], ', &
149         '[2=_isoSQD, isoTINP(dR-,dR+,dR=0), multi-omega], ', &
150         '[3=_SQD-TINP, isoSQD, isoTINP, single_omega]) '
151   print *, '#_choicedR=_', choicedR, ',_(choicedR:_[1=_dR-,_2=_dR+,_0=_dR=0]) '
152   print *, '#_SQD_parameters: '
153   print *, '#_rSQD=', rSQD, ',_epss=', epss, ',_om0=', om0, ',_mu=', mu, ',_
        relaxation_times:_tau0=', tau0, ',_Tau20=', Tau20
154   print *, '#_TINP_parameters: '
155   print *, '#_alpha=', alpha
156   print *, '#_Background_dielectric: '
157   print *, '#_epsb=', epsb
158   print *, '#_Other_parameters: '
159   print *, '#_R=', R, ',_Intens=', Intens, ',_E0=', E0
160   print *, '#_Scanning_parameters: '
161   print *, '#_omegastep=', omegastep, ',_om0=', om0, ',_domega1=', domega1, ',_
        domega2=', domega2
162   print *, '#_Nomegasteps=', Nomegasteps, ',_(omegamin,_omegamax)=_( ', omegamin
        ', ', omegamax, ') '
163   print *, '#_-----'
164   print *, '#_omega, _____A, _____B, _____D, _____QSQD, _____QTINP, _____Qtotal '
165   do while (omega .le. omegamax)
166
167     epsm = dielfuncTI(omega) + deltaR(omega, choicedR)
168     Omegaeffcom = Omegaeff(1) !in 1/ns units
169     Gcom = G(1) !in 1/attosecond units
170
171     !The Calculation:
172     call RK(t,x1,x2,x3, Ti, x10,x20,x30, totaliterations) !this
        subroutine will return values of t,x1,x2,x3, ie values of t, A(t), B(
        t) and D(t)
173
174     Alfa = x10 !these have been set to have the final value of x1,x2,x3
175     Bita = x20
176     Delta = x30
177
178     !print results; may need to modify to also print eg R, a, mu, etc,
        depending on type of investigation/ script used (eg changing mu -->
        also print mu.).

```

```

179     print *, omega, Alfa, Bita, Delta, QSQD(Delta), QTINP(Alfa, Bita, Delta,
180           1), Qtotal(Alfa, Bita, Delta, 1)
181     omega = omega + omegastep
182
183 end do
184
185 end if
186
187
188 !

```

```

189
190
191 !Calculate absorption rate values for the isolated SQD and TINP systems, at
192     multiple omegas.
193 !For the SQD, we simply set G=0 and Omegaeff=Omega0() and use the same
194     function QSQD()
195 !For the TINP, we use a modified equation for QTINP, QTINPiso().
196
197 if (choiceSystem .eq. 2 ) then
198     omegamin = om0 - domegal
199     omegamax = om0 + domega2
200     omegastep = (domegal+domega2)/real(Nomegasteps)
201
202     omega = omegamin
203
204
205     print *, '#_Multiple-omega_results_for_isolated_SQD_and_TINP_systems:'
206     print *, '#_choiceSystem=_', choiceSystem
207     print *, '#(choiceSystem:_[1=_SQD-TINP,multi-omega],', '&
208           '[2=_isoSQD,isoTINP(dR-,dR+,dR=0),multi-omega],', '&
209           '[3=_SQD-TINP,isoSQD,isoTINP,single_omega])'
210     print *, '#_choicedR=_', choicedR, '(choicedR:_[1=_dR-,_2=_dR+,_0=_dR=0)
211     print *, '#_SQD_parameters:'
212     print *, '#_rSQD=', rSQD, ', _epss=', epss, ', _om0=', om0, ', _mu=', mu, ', _
213           relaxation_times:_[tau0=_', tau0, ', _Tau20=', Tau20
214     print *, '#_TINP_parameters:'
215     print *, '#_alpha=', alpha
216     print *, '#_Background_dielectric:'
217     print *, '#_epsb=', epsb
218     print *, '#_Other_parameters:'
219     print *, '#_R=', R, ', _Intens=', Intens, ', _E0=', E0
220     print *, '#_Scanning_parameters:'
221     print *, '#_omegastep=', omegastep, ', _om0=', om0, ', _domegal=', domegal, ', _
222           domega2=', domega2
223     print *, '#_Nomegasteps=', Nomegasteps, ', _(omegamin, _omegamax)=_( ', omegamin

```



```

261         real(epsm1), real(epsm2), real(epsm0), aimag(epsm0), deltaR(
                omega,1), deltaR(omega,2)
262     !print *, alpha, omega, Alfa, Beta, Delta, QSQD(Delta), QTINPiso1,
                QTINPiso2, QTINPiso0      !only used for Siroki omega-R^-1 graph
263     !print *, alpha, omega, Alfa, Beta, Delta, QSQD(Delta), QTINPiso1, real
                (epsm1), aimag(epsm1), E
264     !QTINPiso2, real(epsm2), aimag(epsm2), QTINPiso0, real(epsm0), aimag(
                epsm0)      !only used for Siroki Q abs (Q vs omega)
                graph
265
266     omega = omega + omegastep
267
268 end do
269
270 end if
271
272
273 !

```

```

274
275
276 !Calculate absorption rate values at a single omega for:
277 ! (1) SQD-TINP interacting system
278     !choicedR = 1 : calculate including effect of surface
                states, when Ef=-A/R
279     !choicedR = 2 : calculate including effect of surface
                states, when Ef=+A/R
280     !choicedR = 0 : ignore effect of surface states
281
282 ! (2) Isolated SQD and TINP systems
283     !For the SQD, we simply set G=0 and Omegaeff=Omega0() and use
                the same function QSQD()
284     !For the TINP, we use a modified equation for QTINP, QTINPiso
                ().
285
286
287 if (choiceSystem .eq. 3) then
288     !Calculate absorption rate values for the interacting SQD-TINP system.
289
290     Tinit = Ti
291     x1init = x10
292     x2init = x20
293     x3init = x30
294
295     epsm = dielfuncTI(omega) + deltaR(omega, choicedR)
296     Omegaeffcom = Omegaeff(1)      !in 1/ns units
297     Gcom = G(1)      !in 1/attosecond units
298
299     !The Calculation:

```

```

300  call RK(t,x1,x2,x3, Ti, x10,x20,x30, totaliterations)    !this
      subroutine will return values of t,x1,x2,x3, ie values of t, A(t), B(
      t) and D(t)
301
302  Alfa   = x10    !these have been set to have the final value of x1,x2,x3
303  Bita   = x20
304  Delta  = x30
305
306  !write RK4 iterations in a text file
307  open(unit=11, file='rk4SQDTINP.dat') !this opens a new file. If NOT
      CLOSED HERE, other write functions can continue writing in this file.
      (now working as intended)
308  write (11,*) '#_Omega_used_here_was_(in_eV/hbar):_', omega
309  write (11,*) '#_time, _Alfa(t), _Bita(t), _Delta(t)'
310  do i=1, totaliterations ! print ALL values from the arrays t,x1,x2,x3,
      ie 1..kcounter
311      write(11,*) t(i)/1E4, x1(i),x2(i),x3(i) ! Time is converted back to
          ns.
312  end do
313  close(11)
314
315  !print results; may need to modify to also print eg R, a, mu, etc,
      depending on type of investigation/ script used (eg changing mu —>
      also print mu.).
316
317  print *, 'Single_omega_run_for_the_systems: _SQD-TINP(given_dR), _isolated_
      SQD, _isolated_TINP(dR-,dR+,dR=0)'
318
319
320  print *, '#_choiceSystem=_', choiceSystem
321  print *, '#(choiceSystem:_[1=_SQD-TINP, multi-omega], ', &
322  '[2=_isoSQD, isoTINP(dR-,dR+,dR=0), multi-omega], ', &
323  '[3=_SQD-TINP, isoSQD, isoTINP, single_omega])'
324  print *, '====='
325  print *, 'Results_for_interacting_SQD-TINP_system:'
326  print *, '#_choicedR=_', choicedR, '(choicedR:_[1=_dR-, _2=_dR+, _0=_dR=0)
      ,
327  print *, '#_SQD_parameters:'
328  print *, '#_rSQD=', rSQD, ', _epss=', epss, ', _om0=', om0, ', _mu=', mu, ',
      relaxation_times:_[tau0=_', tau0, ', _Tau20=', Tau20
329  print *, '#_TINP_parameters:'
330  print *, '#_alpha=', alpha, ', _epsm=', epsm
331  print *, '#_Background_dielectric:'
332  print *, '#_epsb=', epsb
333  print *, '#_Other_parameters:'
334  print *, '#_R=', R, ', _Intens=', Intens, ', _E0=', E0
335  print *, '#_Scanning_parameters:'
336  print *, '#_omega=', omega
337  print *, '-----'
338  print *, 'omega, _A, _B, _D, _SQD, _TINP, '

```

```

      Qtotal'
339  print *, omega, Alfa, Bita, Delta, QSQD(Delta), QTINP(Alfa, Bita, Delta,
      1), Qtotal(Alfa, Bita, Delta, 1)
340
341
342  !Calculate absorption rate values for an isolated SQD surrounded by a
      dielectric medium.
343
344  Omegaeffcom = Omegaeff(2)           !in 1/ns units
345  Gcom        = G(2)                 !in 1/attosecond units
346
347
348
349  !The Calculation:
350  call RK(t,x1,x2,x3, Tinit, x1init,x2init,x3init, totaliterations) !
      this subroutine will return values of t,x1,x2,x3, ie values of t, A(t
      ), B(t) and D(t)
351
352  Alfa  = x1init  !these have been set to have the final value of x1,x2
      ,x3
353  Bita  = x2init
354  Delta = x3init
355
356  !write RK4 iterations in a text file
357  open(unit=11, file='rk4isoSQD.dat') !this opens a new file. If NOT
      CLOSED HERE, other write functions can continue writing in this file.
      (now working as intended)
358  write (11,*) '#_Omega_used_here_was_(in_eV/hbar):_', omega
359  write (11,*) '#_time, _Alfa(t), _Bita(t), _Delta(t) '
360  do i=1, totaliterations ! print ALL values from the arrays t,x1,x2,x3,
      ie 1..kcounter
361      write(11,*) t(i)/1E4, x1(i),x2(i),x3(i) ! Time is converted back to
      ns.
362  end do
363  close(11)
364
365
366  !Calculate absorption rate values for an isolated TINP surrounded by a
      dielectric medium.
367
368  !Case dR-, Ef=-A/R
369  epsm      = dielfuncTI(omega) + deltaR(omega, 1)
370  QTINPiso1 = QTINP(0,0,0, 2)
371
372  !Case dR+, Ef=+A/R
373  epsm      = dielfuncTI(omega) + deltaR(omega, 2)
374  QTINPiso2 = QTINP(0,0,0, 2)
375
376  !Case dR=0
377  epsm      = dielfuncTI(omega)

```



```

378     QTINPiso0 = QTINP(0,0,0, 2)
379
380
381     !print results; may need to modify to also print eg R, a, mu, etc,
           depending on type of investigation/ script used (eg changing mu -->
           also print mu.).
382     print *, '_ '
383     print *, '===== '
384     print *, 'Results for isolated SQD and TINP systems: '
385     print *, '#SQD parameters: '
386     print *, '#rSQD= ', rSQD, ', ,epss= ', epss, ', ,om0= ', om0, ', ,mu= ', mu, ', ,
           relaxation times: tau0= ', tau0, ', ,Tau20= ', Tau20
387     print *, '#TINP parameters: '
388     print *, '#alpha= ', alpha, ', ,epsm= ', epsm
389     print *, '#Background dielectric: '
390     print *, '#epsb= ', epsb
391     print *, '#Other parameters: '
392     print *, '#R= ', R, ', ,Intens= ', Intens, ', ,E0= ', E0
393     print *, '#Scanning parameters: '
394     print *, '#omega= ', omega
395     print *, '----- '
396     print *, 'omega, A, B, D, QSQDiso, QTINPdR-, QTINPdR+,
           QTINPdR0'
397     print *, omega, Alfa, Bita, Delta, QSQD(Delta), QTINPiso1, QTINPiso2,
           QTINPiso0
398
399
400     end if
401
402
403
404     end program rk4
405
406
407
408     !

```

```

409
410     !

```

```

411
412
413
414     subroutine RK(t,x1,x2,x3, Ti, x10,x20,x30, totaliterations)
415     implicit none
416     real(8), dimension(1200000) :: t,x1,x2,x3
417     real(8) :: Ti
418     real(8) :: x10,x20,x30

```

```

419  real(8) :: dt
420  real(8) :: TS,X1S,X2S,X3S !values of time and X1,X2 at given step
421  integer :: i, totaliterations
422
423  !the following variables will be used in the loop for RK4 iterations.
424  integer :: j,jbreak !when 10 consecutive iterations of RK4 give the same
      result within an arbitrary error margin, we break the loop and get the
      final approximate solutions A,B,D
425  integer :: kcounter,maxiter !maximum allowed iterations for rk4, we then
      break the loop for RK and move on to the next omega.
426  real(8) :: epsil !arbitrary allowed error margin.
427
428  !for integral and average value numerical calculation
429  integer :: m !yet another counter
430  real(8) :: sum1, sum2, sum3 !used in the calculation of x1,x2,x3 average
      values.
431  real(8) :: timeinterval !total time interval for average calculation
432  integer :: intervals !number of intervals (points are=intervals+1).
      I chose 50000.
433
434
435  !Initialize variables:
436  dt = 1.0 !of the order of 20*1E4/100000 ~ 1 and smaller, preferrably
      , in order for RK to have adequate accuracy. !Also tried 0.1, among
      others. A value of 1 seems best.
437  t(1) = Ti
438  x1(1) = x10
439  x2(1) = x20
440  x3(1) = x30
441
442  TS = Ti
443  X1S = x10
444  X2S = x20
445  X3S = x30
446
447  epsil=1E-9 !used to be 1E-9. probably too small, causing slow "
      convergence" and thus causing more errors to accumulate.
448  jbreak=10
449  j=0
450  maxiter=500000 !500000 !used to be 1000000. It was far too heavy.
451  kcounter=1 !first iteration completed//currently on first iteration
452  do while ( (j .lt. jbreak) .AND. (kcounter .lt. maxiter) ) ! ( (kcounter .
      le. maxiter) .and. (j .lt. jbreak) )
453
454      call RKSTEP(TS,X1S,X2S,X3S,dt)
455
456      if ( (abs((X1S-x1(kcounter)))/(x1(kcounter)+1E-9)) .le. epsil ) &
457          .and.(abs((X2S-x2(kcounter)))/(x2(kcounter)+1E-9)) .le. epsil ) &
458          .and.(abs((X3S-x3(kcounter)))/(x3(kcounter)+1E-9)) .le. epsil ) ) then
      !relative error given by(my definition): abs{(currentvalue-

```

```

        previousone)/(previousone+1E-9)}
459     j=j+1
460     else
461         j=0
462     end if
463
464     kcounter=kcounter+1
465
466     t (kcounter) = TS
467     x1(kcounter) = X1S
468     x2(kcounter) = X2S
469     x3(kcounter) = X3S
470
471     enddo
472
473     totaliterations = kcounter
474
475     Ti = TS
476     x10 = X1S
477     x20 = X2S
478     x30 = X3S  !values to return with the subroutine back to main program,
                !which correspond to convergence values of x1,x2,x3 (A,B,D) at time t(
                !final).
479
480     end subroutine RK
481
482     !=====
483     !Subroutine RKSTEP(t,x1,x2,dt)
484     !Runge-Kutta Integration routine of ODE
485     !dx1/dt=f1(t,x1,x2,x3,x4) dx2/dt=f2(t,x1,x2,x3,x4)
486     !dx3/dt=f3(t,x1,x2,x3,x4) dx4/dt=f4(t,x1,x2,x3,x4)
487     !User must supply derivative functions:
488     !real function f1(t,x1,x2,x3)
489     !real function f2(t,x1,x2,x3)
490     !real function f3(t,x1,x2,x3)
491     !Given initial point (t,x1,x2) the routine advances it
492     !by time dt.
493     !Input : Initial time t and function values x1,x2,x3,x4
494     !Output: Final time t+dt and function values x1,x2,x3,x4
495     !Careful!: values of t,x1,x2,x3,x4 are overwritten...
496     !=====
497
498     subroutine RKSTEP(t,x1,x2,x3,dt)
499     implicit none
500     real(8) :: t,x1,x2,x3,dt
501     real(8) :: f1,f2,f3
502     real(8) :: k11,k12,k13,k14
503     real(8) :: k21,k22,k23,k24
504     real(8) :: k31,k32,k33,k34
505     real(8) :: h,h2,h6

```

```
506
507 h =dt          !h =dt, integration step
508 h2=0.5D0*h    !h2=h/2
509 h6=h/6.0D0   !h6=h/6
510
511 k11=f1 ( t , x1 , x2 , x3 )
512 k21=f2 ( t , x1 , x2 , x3 )
513 k31=f3 ( t , x1 , x2 , x3 )
514
515 k12=f1 ( t+h2 , x1+h2*k11 , x2+h2*k21 , x3+h2*k31 )
516 k22=f2 ( t+h2 , x1+h2*k11 , x2+h2*k21 , x3+h2*k31 )
517 k32=f3 ( t+h2 , x1+h2*k11 , x2+h2*k21 , x3+h2*k31 )
518
519 k13=f1 ( t+h2 , x1+h2*k12 , x2+h2*k22 , x3+h2*k32 )
520 k23=f2 ( t+h2 , x1+h2*k12 , x2+h2*k22 , x3+h2*k32 )
521 k33=f3 ( t+h2 , x1+h2*k12 , x2+h2*k22 , x3+h2*k32 )
522
523 k14=f1 ( t+h , x1+h *k13 , x2+h *k23 , x3+h *k33 )
524 k24=f2 ( t+h , x1+h *k13 , x2+h *k23 , x3+h *k33 )
525 k34=f3 ( t+h , x1+h *k13 , x2+h *k23 , x3+h *k33 )
526
527 t =t+h
528
529 x1=x1+h6*( k11+2.0D0*( k12+k13)+k14 )
530 x2=x2+h6*( k21+2.0D0*( k22+k23)+k24 )
531 x3=x3+h6*( k31+2.0D0*( k32+k33)+k34 )
532
533 end subroutine RKSTEP
534
535 !—————
```

Συναρτήσεις για τη Runge-Kutta – rk4dynamicfunc.f90

```

1
2 !-----
3 !-----Functions for use in RK4-----
4 !-----
5
6 ! possibly add most variables and functions in common blocks
7
8
9 real(8) function f1(t,A,B,D)          !dA/dt=f1(t,A,B,D),    units: 1/(10-4 ns
   )
10 implicit none
11 real(8)      :: t,A,B,D
12
13 complex(16) :: Omegaeffcom, Gcom
14 real(8)      :: OmI, OmR
15 real(8)      :: GI, GR
16 real(8)      :: tau0, Tau20, omega, om0
17 common/params1/tau0, Tau20, omega, om0
18 common/params4/Omegaeffcom, Gcom
19
20 real(8)      :: hbar
21
22 OmR = real (Omegaeffcom)
23 OmI = aimag(Omegaeffcom)
24 GR  = real (Gcom)
25 GI  = aimag(Gcom)
26
27 hbar = 6.582*1E-3
28
29 !The following is from Artuso 2008. Correct version is below, from Artuso,
   Bryant 2010.
30 !f1 = -A*(1E-4)/Tau20 + (omega-om0)/hbar*B + (OmI*(1E-4) + GI*(1E5)*A +
   GR*(1E5)*B)*D
31
32 !Correct version from Artuso, Bryant 2010.
33 f1 = -A*(1E-4)/Tau20 + (omega-om0)/hbar*B - (OmI*(1E-4) + GI*(1E5)*A - GR
   *(1E5)*B)*D
34
35 end function f1
36
37 !-----
38
39
40 real(8) function f2(t,A,B,D)          !dB/dt=f2(t,A,B,D),    units: 1/(10-4 ns
   )
41 implicit none
42 real(8)      :: t,A,B,D
43

```

```

44  complex(16)  :: Omegaeffcom , Gcom
45  real(8)      :: OmI, OmR
46  real(8)      :: GI, GR
47  real(8)      :: tau0 , Tau20 , omega , om0
48  common/params1/tau0 , Tau20 , omega , om0
49  common/params4/Omegaeffcom , Gcom
50
51  real(8)      :: hbar
52
53  OmR = real (Omegaeffcom)
54  OmI = aimag(Omegaeffcom)
55  GR  = real (Gcom)
56  GI  = aimag(Gcom)
57
58  hbar = 6.582*1E-3
59
60  !The following is from Artuso 2008. Correct version is below, from Artuso ,
61      Bryant 2010.
62  !f2  = -B*(1E-4)/Tau20 - (omega-om0)/hbar*A - (OmR*(1E-4) + GR*(1E5)*A -
63      GI*(1E5)*B)*D
64
65  !Correct version from Artuso , Bryant 2010.
66  f2  = -B*(1E-4)/Tau20 - (omega-om0)/hbar*A - (OmR*(1E-4) + GR*(1E5)*A + GI
67      *(1E5)*B)*D
68
69  end function f2
70
71  !-----
72  real(8) function f3(t,A,B,D)          !dD/dt=f3(t,A,B,D),    units: 1/(10^-4 ns
73      )
74  implicit none
75  real(8)  :: t,A,B,D
76
77  complex(16)  :: Omegaeffcom , Gcom
78  real(8)      :: OmI, OmR
79  real(8)      :: GI, GR
80
81  real(8)      :: tau0 , Tau20 , omega , om0
82  common/params1/tau0 , Tau20 , omega , om0
83  common/params4/Omegaeffcom , Gcom
84
85  real(8)      :: hbar
86
87  OmR = real (Omegaeffcom)
88  OmI = aimag(Omegaeffcom)
89  GR  = real (Gcom)
90  GI  = aimag(Gcom)

```

```
90
91  !The following is from Artuso 2008. Correct version is below, from Artuso,
    Bryant 2010.
92  !f3 = (1-D)*(1E-4)/tau0 - 4*OmI*(1E-4)*A + 4*OmR*(1E-4)*B - 4*GI*(1E5)*(A
    *A + B*B)
93
94  !Correct version from Artuso, Bryant 2010.
95  f3 = (1-D)*(1E-4)/tau0 + 4*OmI*(1E-4)*A + 4*OmR*(1E-4)*B + 4*GI*(1E5)*(A*
    A + B*B)
96
97  end function f3
98
99  !

---


```

Άλλες συναρτήσεις – rk4.funcsf90

```

1  !-----
2  !-----Functions; Several parameters etc-----
3  !-----
4
5
6  !=====
7  !For use in main only, in the first lines of main program, to calculate the
   dielectric function of the metal or the TI for a specific omega.
8  !Also calculate effS, effM, gamm and other important variables in the main
   program to avoid unnecessary function calls.
9
10 !

```

```

11
12 real(8) function deltaR (omegavalue, choicedR)
13   implicit none
14   real(8) :: omegavalue           ! given in units of eV(/hbar)
15   integer :: choicedR             ! if=1, then for Ef=-A/R, if=2
   then for Ef=+A/R, else dR=0. (three cases total)
16   real(8) :: Aleph                ! in eV*Angstroms
17   real(8) :: pi, aconst
18   real(8) :: aux1, aux2
19   real(8) :: s_a, alpha, mu, R, E0 !alpha = radius of TINP
20   common/params2/ s_a, alpha, mu, R, E0
21
22   Aleph    = 3.0 !eV*Anstroms
23   pi       = 3.141592654
24   aconst   = 1.60218/8.854*1E3
25
26   if (choicedR .eq. 1) then
27
28     aux1 = aconst/(6.0*pi) !also *eps0 (of background dielectric) ? to
   be correct for TINP in dielectric, instead of free space
29     aux2 = 1.0/(2.0*Aleph - omegavalue*alpha*10.0) + 1.0/(2.0*Aleph +
   omegavalue*alpha*10.0)
30     deltaR = aux1*aux2
31
32   else if (choicedR .eq. 2) then
33
34     aux1 = aconst/(3.0*pi) !also *eps0 (of background dielectric) ? to
   be correct for TINP in dielectric, instead of free space
35     aux2 = 1.0/(Aleph + omegavalue*alpha*10.0) + 1.0/(Aleph - omegavalue*
   alpha*10.0)
36     deltaR = aux1*aux2
37
38   else
39

```



```

40     deltaR = 0.0
41
42   end if
43
44
45 end function deltaR
46
47
48
49 complex(16) function dielfuncTI(omegavalue)  !dielectric function of bulk
      topological insulator (Bi2Se3)
50   implicit none
51   real(8)                :: omegavalue      !omega at which to calculate
52   real(8), dimension(3) :: omegp, omeg0, gama !parameters
53   integer                :: i              !just a counter
54   integer                :: N              !number of polarization
      mechanisms
55   real(8)                :: h              !not hbar! all values omegap,
      omeg0, gama below are given for f, not omega=2pif!
56   real(8)                :: f              !frequency in THz
57
58   N=3
59
60   !the following are given in THz, measured at a temperature of 4K.
61   omegp(1) = 19.2; omeg0(1) = 2.0; gama(1) = 0.15;
62   omegp(2) = 2.3; omeg0(2) = 3.72; gama(2) = 0.06;
63   omegp(3) = 11.5; omeg0(3) = 0.0; gama(3) = 0.24;
64
65   h = 4.13566766*1E-3 !in eV*ps units, to convert "omega"=f to THz
66   f = omegavalue/h   !now in THz units, omegavalue=f(THz)
67
68   dielfuncTI = CMPLX(0.0,0.0)
69   do i=1,N
70     dielfuncTI = dielfuncTI + omegp(i)**2/(omeg0(i)**2-f**2-cmplx(0.0,1.0)*
      gama(i)*f)
71   end do
72
73 end function dielfuncTI
74
75
76
77 real(8) function eeffS ()
78   implicit none
79   real(8)      :: epsb, epss
80   complex(16) ::          epsm
81   common/params3/epsb, epss, epsm
82
83   eeffS = (2.0*epsb+epss)/(3.0*epsb)
84
85 end function eeffS

```

```

86
87
88 complex(16) function eeffM() !=eeffs !even though I calculate eeff2 as a
    unitless quantity, the actual quantity is defined as eeff2*eps0 (diel.
    permit. vacuum)!!!
89 implicit none
90 real(8) :: epsb, epss
91 complex(16) :: epsm
92 common/params3/epsb, epss, epsm
93
94 eeffM = (2.0*epsb+epsm)/(3.0*epsb) !eps0 in denominator was absent.
    Sometimes we will need to multiply with eps0 to get right units.
95
96 end function eeffM
97
98
99 complex(16) function gamm()
100 implicit none
101 real(8) :: epsb, epss
102 complex(16) :: epsm
103 common/params3/epsb, epss, epsm
104
105 gamm = (epsm - epsb)/(2.0*epsb + epsm)
106
107 end function gamm
108
109
110 =====
111
112
113 complex(16) function G(choiceSystem) !units: 1/attosecond
114 implicit none
115 integer :: choiceSystem !if 1, then interacting SQD-
    TINP system. Else isolated SQD.
116 complex(16) :: gamm
117 real(8) :: eeffS
118
119 real(8) :: hbar
120 real(8) :: s_a, alpha, mu, R, E0
121 real(8) :: epsb, epss
122 complex(16) :: epsm
123 common/params2/ s_a, alpha, mu, R, E0
124 common/params3/ epsb, epss, epsm
125
126 if (choiceSystem .eq. 1) then
127     hbar = 4.0*3.141592654*8.854*6.582/1.602
128     G = ( s_a**2 * gamm() * alpha**3 * mu**2 ) / ( hbar * epsb * eeffS()**2
        * R**6 )
129 else
130     G = 0.0

```

```

131  end if
132
133  end function G
134
135
136
137  complex(16) function Omegaeff(choiceSystem)  !in 1/ns units
138  implicit none
139  integer      :: choiceSystem          !if 1, then interacting SQD-TINP
      system. Else isolated SQD.
140  real(8)      :: s_a, alpha, mu, R, E0
141  common/params2/s_a, alpha, mu, R, E0
142  real(8)      :: Omega0
143  complex(16) :: gamm
144
145  if (choiceSystem .eq. 1) then
146      Omegaeff = Omega0()*(1.0+s_a*gamm()*( (alpha/R)**3) )
147  else
148      Omegaeff = Omega0()
149  end if
150
151  end function Omegaeff
152
153
154
155  real(8) function Omega0()  !in 1/ns units
156  implicit none
157  real(8) :: s_a, alpha, mu, R, E0
158  common/params2/s_a, alpha, mu, R, E0
159  real(8) :: eeffS
160  real(8) :: hbar
161
162  hbar = 6.582  !"hbar" in eV*ns ( with E0 converted to V/nm )
163
164  Omega0 = mu*E0/( 2.0*hbar*eeffS() )
165
166  end function Omega0
167
168
169
170  !=====
171
172  real(8) function QSQD(Delta)  ! 1E-10W units
173  implicit none
174  real(8) :: Delta
175  real(8) :: tau0, Tau20, omega, om0
176  common/params1/ tau0, Tau20, omega, om0
177  real(8) :: rho22
178
179  rho22 = (1.0-Delta)/2.0

```

```

180
181   QSQD = om0*rho22/tau0 * 1.60218
182
183 end function QSQD
184
185
186
187
188 real(8) function QTINP(Alfa , Bita , Delta , choiceSystem)  ! 1E-10W units
189   implicit none
190   real(8)      :: Alfa , Bita , Delta
191   integer     :: choiceSystem           ! If=1, then calculates for
      interacting SQD-TINP system. Else for isolated TINP.
192   complex(16) :: gamm, eeffm
193   real(8)     :: EfieldC , EfieldS
194   real(8)     :: aconst
195   real(8)     :: tau0 , Tau20 , omega , om0
196   real(8)     :: s_a , alpha , mu , R , E0
197   real(8)     :: epsb , epss
198   complex(16) ::          epsm
199   common/params1/ tau0 , Tau20 , omega , om0
200   common/params2/ s_a , alpha , mu , R , E0
201   common/params3/ epsb , epss , epsm
202
203   aconst= 2.0*3.141592654*8.854188 / (6.582 * 1E9)
204
205   if (choiceSystem .eq. 1) then
206     QTINP = aconst*epsb*omega*alpha**3 *aimag(gamm()/conjg( eeffm() ))*(
      EfieldC (Alfa)**2+EfieldS (Bita)**2)
207   else
208     QTINP = aconst*epsb*omega*alpha**3 * E0**2 * aimag( gamm()/conjg(eeffm
      ())) ) !/alpha**2
209   end if
210
211
212 end function QTINP
213
214
215
216 real(8) function EfieldC(Alfa)  !V/cm units
217   implicit none
218   real(8)      :: Alfa
219   real(8)      :: s_a , alpha , mu , R , E0
220   real(8)      :: eeffS
221   real(8)      :: epsb , epss
222   complex(16)  ::          epsm
223   real(8)      :: aconst
224
225   common/params2/s_a , alpha , mu , R , E0
226   common/params3/ epsb , epss , epsm

```

```

227
228   aconst= 2.0*3.141592654*8.854188 / (1.60218 * 1E9)
229
230   EfieldC = E0 + s_a*mu/(aconst*epsb*eeffS()*R**3)*Alfa
231
232 end function EfieldC
233
234
235 real(8) function EfieldS(Bita) !V/cm units
236   implicit none
237   real(8)      :: Bita
238   real(8)      :: s_a , alpha , mu, R, E0
239   real(8)      :: epsb , epss
240   complex(16) ::          epsm
241   real(8)      :: eeffS
242   real(8)      :: aconst
243
244   common/params2/s_a , alpha , mu, R, E0
245   common/params3/ epsb , epss , epsm
246
247   aconst= 2.0*3.141592654*8.854188 / (1.60218 * 1E9)
248
249   EfieldS = s_a*mu/(aconst*epsb*eeffS()*R**3)*Bita
250
251 end function EfieldS
252
253
254
255
256 real(8) function Qtotal(Alfa , Bita , Delta) ! 1E-10W units
257   implicit none
258   real(8) :: Alfa , Bita , Delta
259   real(8) :: QSQD, QTINP
260
261   Qtotal = QSQD(Delta) + QTINP(Alfa , Bita , Delta ,1)
262
263 end function Qtotal
264
265
266 !=====

```


Βιβλιογραφία

- [1] Ryan D. Artuso and Garnett W. Bryant. “Strongly coupled quantum dot-metal nanoparticle systems: Exciton induced transparency, discontinuous response, and suppression as driven quantum oscillator effects”. In: *Physical Review B* 82 (Nov. 2010).
- [2] Harry A. Atwater. “The Promise of Plasmonics”. In: *Scientific American* 296 (Apr. 2007).
- [3] Mark I. Bergman David J.; Stockman. “Surface Plasmon Amplification by Stimulated Emission of Radiation: Quantum Generation of Coherent Surface Plasmons in Nanosystems”. In: *Phys. Rev. Lett.* 90 (Feb. 2003).
- [4] B. Andrei Bernevig and Taylor L. Hughes. *Topological Insulators and Topological Superconductors*. Princeton University Press, 41 William Street, Princeton, New Jersey 08540: Princeton University Press, 2013.
- [5] M. Z. Hasan and C. L. Kane. “Topological Insulators”. In: *Rev. Mod. Phys.* 82 (Nov. 2010).
- [6] Andreas Karch. “Surface Plasmons and Topological Insulators”. In: *Physical review. B, Condensed matter* 83 (2011).
- [7] Stefan A. Maier. *Plasmonics: Fundamentals and Applications*. Centre for Photonics and Photonic Materials, Department of Physics, University of Bath, Bath BA2 7AY, United Kingdom: Springer, 2007.
- [8] Xiao-Liang Qi and Shou-Cheng Zhang. “Topological Insulators and Superconductors”. In: *Rev. Mod. Phys.* 83 (Oct. 2011).
- [9] G. Siroki et al. “Single-electron induced surface plasmons on a topological nanoparticle”. In: *Nature Communications* 7 (Aug. 2016).
- [10] M. S. Tame et al. “Quantum Plasmonics”. In: *Nature Physics* 9 (June 2013).
- [11] P. Törmä and W. L. Barnes. “Strong Coupling between surface plasmon polaritons and emitters: a review”. In: *Reports on Progress in Physics* 78 (2015).
- [12] Wei Zhang, Alexander O. Govorov, and Garnett W. Bryant. “Semiconductor-Metal Nanoparticle Molecules: Hybrid Excitons and The Nonlinear Fano Effect”. In: *Physical Review Letters* 97 (Oct. 2006).

