



لیف  
پوتوکنیک  
دینگر

بیستمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران  
و ششمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران  
۸ تا ۱۰ بهمن ماه ۱۳۹۲ - دانشگاه صنعتی شیراز



## خواص اپتیکی غیر خطی مرتبه دوم یک اکسیتون در نقاط کوانتمومی نیمکروی

فاطمه محب زاده<sup>۱</sup> و محمود براتی<sup>۱</sup>

<sup>۱</sup>گروه فیزیک، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی، فارس، ایران

<sup>۲</sup>گروه فیزیک، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی، فارس، ایران

چکیده - در این مقاله به بررسی آثار اکسیتونی بر خواص اپتیکی نقاط کوانتمومی نیمه کروی می پردازیم. ویژه مقادیر و توابع انرژی با استفاده از تقریب جرم موثر و روش المان محدود محاسبه شده اند. همچنین خواص اپتیکی سیستم با استفاده از روش اختلال و ماتریس چگالی تا مرتبه دوم بدست می آیند. نتایج با استفاده از نرم افزار کامسول، نشان می دهد که برهمنکنش کولنی الکترون-حفره اثر قابل توجهی بر بیشینه مقدار یکسوسازنوری و تولید هارمونیک مرتبه دوم داشته و آثار اکسیتونی باعث شیفت یکسوسازنوری و تولید هماهنگ مرتبه دوم به سمت انرژی های بیشتر می شود. بعلاوه، هماهنگ مرتبه دوم بسیار ضعیف تر از یکسوساز نوری می باشد. نهایتا، با محاسبه قدرت نوسان نشان دادیم که تبیه گنی ترازها اثر قابل ملاحظه ای روی نتایج دارد.

کلید واژه: آثار اکسیتون، تولید هماهنگ مرتبه دوم، قدرت نوسان، نقاط کوانتمومی نیمه کروی، یکسوساز نوری مرتبه دوم.

## The Second Order Nonlinear Optical Properties of an exciton in a Semispherical Quantum Dot

Fatemeh Mohebzadeh<sup>1</sup> and Mahmood Barati<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Science and Research Branch, Islamic Azad University, Fars, Iran

**Abstract-** In the present paper the excitonic effects on the optical properties of semispherical quantum dots are investigated. By considering semi parabolic confining potential, the energy eigenvalues and corresponding eigenfunctions are calculated by finite element method in the effective mass approximation. The second order optical rectification (OR) and second harmonic generation (SHG) are investigated by density matrix approach. The results show that excitonic effects have a great influence on the maximum values of the OR and SHG and cause a blue shift in OR and SHG. In addition, SHG is always weaker than OR. Ultimately, by calculating the oscillator strength it is shown that the degeneracy of the excited state has appreciable effects on the results.

**Keywords:** Excitonic effects, Oscillator strength, Second harmonic generation, Second order optical rectification, Semispherical quantum dot.

## ۱- مقدمه

مرکز جرم و حرکت نسبی و تکانه‌های متناظر با آنها از طریق روابط زیر تعریف می‌شوند.

$$\vec{R} = (m_e^* \vec{r}_e + m_h^* \vec{r}_h) / M, \quad r = \vec{r}_e - \vec{r}_h, \quad (2)$$

$$\vec{P}_R = \vec{p}_e + \vec{p}_h, \quad P_r = \frac{\mu}{m_e^*} \vec{p}_e + \frac{\mu}{m_h^*} \vec{p}_h$$

در رابطه بالا اندیس‌های  $e$  و  $h$  معرف الکترون و حفره، اندیس‌های  $R$  و  $r$  نشان دهنده حرکت مرکز جرم و حرکت نسبی می‌باشند. با حل معادله شرودینگر با توجه به هامیلتونی تعریف شده در رابطه (۱)، ویژه توابع و ویژه مقادیر انرژی برای یک نقطه کوانتومی نیمه‌کروی بدست می‌آید. از طرف دیگر یکسوساز نوری مرتبه دوم برای یک سیستم دو ترازه و تولید هماهنگ مرتبه دوم برای یک سیستم سه ترازه با استفاده از روش ماتریس چگالی و روش اختلال به ترتیب با روابط زیر به دست می‌آیند [۲].

$$\chi_0^{(2)} = \frac{4e^3 \sigma_s}{\varepsilon_0 \hbar^2} \mu_{01}^2 \delta_{01} \times \quad (3)$$

$$\frac{\omega_{01}^2 (1 + T_1/T_2) + (\omega^2 + 1/T_2^2)(T_1/T_2 - 1)}{((\omega_{01} - \omega)^2 + 1/T_2^2)((\omega_{01} + \omega)^2 + 1/T_2^2)}$$

$$\chi_{2\omega}^{(2)} = \frac{e^3 N}{\varepsilon_0} \times \quad (4)$$

$$\frac{\mu_{01} \mu_{12} \mu_{20}}{(\hbar\omega - E_{10} - i\hbar\Gamma_{10})(2\hbar\omega - E_{20} - i\hbar\Gamma_{20})}$$

که در این روابط  $e$  بار الکترون،  $\sigma_s$  چگالی الکترون در نقطه کوانتومی  $N$  چگالی اکسیتون در نقطه کوانتومی،  $T_1$  و  $T_2$  زمان واهلش عرضی و طولی،  $\hbar\omega$  انرژی فوتون و  $E_{20} = E_2 - E_0$ ،  $E_{10} = E_1 - E_0$  و تابشی،  $\Gamma_{10} = \Gamma_{20} = \Gamma_0$  و  $\Gamma_0 = \Gamma_{20} = \Gamma_{10}$  آهنگ واهلش می‌باشند. اندیس‌های  $\cdot$  و  $\cdot$  نشان دهنده حالت پایه، اولین و دومین حالت برانگیخته می‌باشند. همچنین  $\langle \Psi_i | \vec{r} | \Psi_j \rangle = \langle \Psi_i | \vec{r} | \Psi_j \rangle - \delta_{ij}$ . با توجه به اینکه سیستم مورد نظر ما دارای تقارن سمتی می‌باشد اولین و دومین حالت برانگیختگی دارای تبهمگنی دوگانه و سه‌گانه هستند که این تبهمگنی‌ها برای محاسبه یکسوساز نوری در گذار از حالت پایه به اولین حالت و محاسبه تولید هماهنگ مرتبه دوم در نظر گرفته شوند.

## ۳- محاسبات عددی و نتایج

در این مقاله به محاسبه خواص الکترونی و اپتیکی مرتبه دوم برای یک نانوساختار نیمه‌کروی از جنس

طی سال‌های اخیر خواص اپتیکی غیرخطی نقاط کوانتومی توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده است [۱]. از بین خواص اپتیکی غیرخطی تولید هماهنگ‌های مرتبه دوم و یکسوساز نوری مرتبه دوم از جمله ویژگی‌های فیزیکی هستند که بطور گسترده از نظر تجربی مورد مطالعه قرار گرفته‌اند [۲,۳]. از طرف دیگر بررسی خواص اپتیکی نانوساختارها و به ویژه در نظر گرفتن پتانسیل کولنی بین الکترون و حفره از مسایل جدی در نانوالکترونیک به حساب می‌آیند. در بیشتر کارهای پژوهشی محققان از برهمنکش کولنی الکترون و حفره صرفنظر کرده و با در نظر گرفتن سیستم در محدودیت قوی به بررسی ساختار الکترونی و اپتیکی جفت الکترون-حفره به صورت ذرات شامل یک الکترون و یک حفره بدون بر همکنش کولنی پرداخته اند [۴]. نتایج بدست آمده در این تقریب در بیشتر موارد با نتایج تجربی هماهنگی ندارند. بعلاوه، یکی دیگر از کمیت‌هایی کلیدی در بررسی خواص اپتیکی نانوساختارها، محاسبه قدرت نوسان می‌باشد که در بردارانده اطلاعات سودمندی در مورد تاثیر یک میدان الکترومغناطیسی خارجی بر خواص اپتیکی سیستم‌های با بعد محدود است [۵]. در این مقاله به بررسی تولید هماهنگ مرتبه دوم، یکسوساز نوری مرتبه دوم و قدرت نوسان یک جفت الکترون-حفره محدود شده در یک نقطه کوانتومی نیمه‌کروی با در نظر گرفتن برهمنکش کولنی و همچنین عدم حضور آثار اکسیتونی می‌پردازیم.

## ۲- فرمول‌بندی مسئله

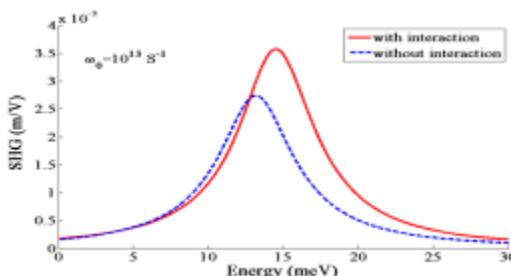
در تقریب جرم موثر، در مختصات مرکز جرم و حرکت نسبی، هامیلتونی یک جفت الکترون-حفره در پتانسیل سهموی با رابطه زیر مشخص می‌شود [۲].

$$H = \frac{P_R^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega_0^2 R^2 + \frac{P_r^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu \omega_0^2 r^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}|} \quad (1)$$

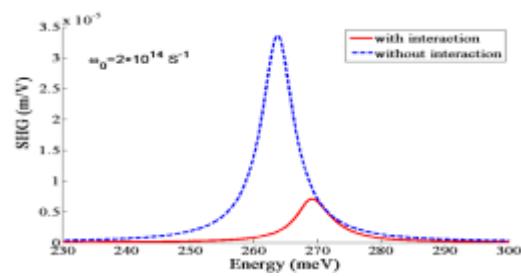
که در این رابطه  $M = m_e^* + m_h^*$  جرم کل،  $\mu = m_e^* m_h^* / M$  جرم کاهش یافته،  $m_e^*$  و  $m_h^*$  جرم موثر الکترون و حفره،  $\omega_0$  فرکانس پتانسیل هارمونیک و  $\epsilon$  ثابت گذر دهی نسبی نقطه کوانتومی می‌باشند. مختصات

شکل (2): نمودار یکسوزان نوری در حضور و عدم حضور آثار اکسیتونی به ازای  $\omega_0 = 20 \times 10^{13} s^{-1}$

در شکل های (3) و (4) نمودارهای تولید هماهنگ مرتبه دوم برای دو فرکانس مختلف  $\omega_0 = 1 \times 10^{13} s^{-1}$  و  $\omega_0 = 20 \times 10^{13} s^{-1}$  در حضور و عدم حضور برهمکنش کولنی بین الکترون-حفره رسم شده اند. همانطور که مشاهده می کنیم، شبیه به نتایج به دست آمده برای یکسوساز نوری، در حضور برهمکنش کولنی یک جابجایی به سمت انرژی های بیشتر ظاهر می گردد. همچنین در فرکانس های کوچک و بزرگ پتانسیل هارمونیک، حضور و عدم حضور برهمکنش کولنی باعث رخدادن رفتار مشابهی با یکسوساز نوری در بزرگی تولید هماهنگ مرتبه دوم می شود.



شکل (3): نمودار تولید هماهنگ مرتبه دوم در حضور و عدم حضور آثار اکسیتونی به ازای  $\omega_0 = 1 \times 10^{13} s^{-1}$



شکل (4): نمودار تولید هماهنگ مرتبه دوم در حضور و عدم حضور آثار اکسیتونی به ازای  $\omega_0 = 20 \times 10^{13} s^{-1}$

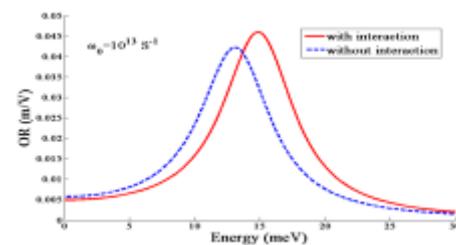
یکی دیگر از کمیت های مهم در محاسبات خواص اپتیکی سیستم های با بعد محدود قدرت نوسان است. در گذار اپتیکی از حالت اولیه  $|i\rangle$  به حالت نهایی  $|f\rangle$  قدرت نوسان به صورت زیر تعریف می شود:

$$P_{fi} = \frac{2em^*}{\hbar^2} E_{fi} |\mu_{fi}| \quad (5)$$

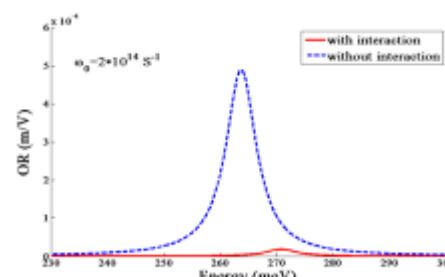
GaAs/AlGaAs پرداخته شده است. مقادیر پارامترهای استفاده شده در محاسبات عبارتند از [2]:

$$T_2 = 0.2 ps, T_1 = 1 ps, m_h^* = 0.09 m_0, m_e^* = 0.067 m_0, \sigma_s = 5 \times 10^{24} m^{-3}, \Gamma_0 = 1/0.14 ps^{-1}, \epsilon = 12.53, N = 3 \times 10^{24} m^{-3}$$

در شکل های (1) و (2) نمودارهای یکسوساز نوری برای دو فرکانس مختلف  $\omega_0 = 20 \times 10^{13} s^{-1}$  و  $\omega_0 = 1 \times 10^{13} s^{-1}$  در حضور عدم حضور برهمکنش کولنی بین الکترون-حفره رسم شده اند. همانطور که مشاهده می شود در حضور برهمکنش کولنی یک جابجایی آبی (جابجایی به سمت انرژی های بالاتر) قابل توجه ای در بیشینه مقدار یکسوساز نوری دیده می شود. دلیل فیزیکی این پدیده این است که هر چند با در نظر گرفتن برهمکنش کولنی بین الکترون و حفره انرژی حالت های مختلف کاهش پیدا کرده ولی اختلاف انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته و همچنین اولین و دومین حالت بر انگیخته زیادتر شده (در مقایسه با عدم حضور برهمکنش کولنی) که این امر منجر به یک جابجایی در یکسوساز نوری به سمت انرژی های بیشتر می شود. همچنین برهمکنش الکترون-حفره باعث افزایش (کاهش) شدت پیک یکسوساز نوری در فرکانس های پائین (بالا) می شود.



شکل (1): نمودار یکسوساز نوری در حضور و عدم حضور آثار اکسیتونی به ازای  $\omega_0 = 1 \times 10^{13} s^{-1}$



شکل (6): نمودار قدرت نوسان بر حسب فرکانس پتانسیل هارمونیک و برای گذار  $\Psi_0^{(2)} \rightarrow \Psi_1^{(1)}$

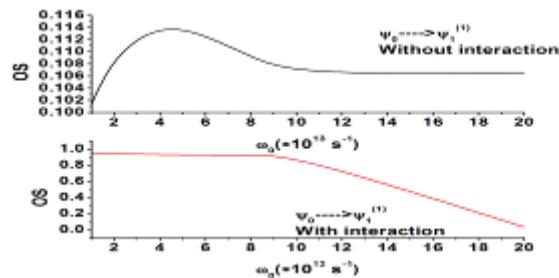
#### ۴- نتیجه‌گیری

در این مقاله اثرات اکسیتونی بر روی خواص الکترونی و خواص اپتیکی غیر خطی یک نقطه کوانتومی نیمه کروی از جنس GaAs که در یک محیط از جنس AlGaAs قرار دارد، مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین با استفاده از روش ماتریس چگالی به بررسی خواص اپتیکی که شامل قدرت نوسان، تولید هماهنگ مرتبه دوم و یکسوساز نوری مرتبه دوم می‌باشد، پرداختیم. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که (۱) در نظر گرفتن آثار اکسیتونی باعث جابجائی یکسوساز نوری و تولید هماهنگ مرتبه دوم به سمت انرژی‌های بیشتر می‌شود. (۲) تولید هارمونیک مرتبه دوم بسیار کوچکتر از یکسوساز نوری است. (۳) افزایش فرکانس پتانسیل نیمه سهمی باعث کاهش یکسوساز نوری و تولید هماهنگ مرتبه دوم می‌شود. (۴) در فرکانس‌های کوچک پتانسیل هارمونیک، در نظر گرفتن آثار اکسیتونی باعث افزایش یکسوساز نوری و تولید هماهنگ مرتبه دوم شده و با افزایش فرکانس این رفتار بر عکس می‌شود. با بررسی قدرت نوسان به این نتیجه رسیدیم که آثار اکسیتونی و همچنین تبهگنی اولین حالت برانگیختگی باید در نظر گرفته شود.

#### مراجع

- [1] Fu, Y., Hellström, S., Ågren, H., Nonlinear optical properties of quantum dots:excitons in nanostructures, *J Nonlinear Opt. Phys. Mater.*, Vol. 18, pp. 195, 2009.
- [2] Flórez, J., Camacho, Á., Excitonic effects on the second-order nonlinear optical properties of semi-spherical quantum dots, *Nanoscale Res Lett*, Vol. 6, pp. 268, 2011.
- [3] Rezaei, G., Vaseghi, B., Sadri, M., External electric field effect on the optical rectification coefficient of an exciton in a spherical parabolic quantum dot, *Physica B*, Vol. 406, pp. 4596, 2011.
- [4] Safarpour, Gh., Barati, M., Vahdani, M.R.K., Electron-hole transition energy for a spherical quantum dot confined in a nano-cylindrical wire, *Phys E*, Vol. 44, pp. 728-732, 2011.
- [5] Wenfang, Xie., Impurity effects on optical property of a spherical quantum dot in the presence of an electric field. *Physica B*, Vol. 405, pp. 3436-3440, 2010.

که  $m^*$  جرم ذره،  $E_{fi} = E_f - E_i$  می‌باشد. با توجه به اینکه تولید هماهنگ مرتبه دوم (سیستم سه ترازه) در مقایسه با یکسو ساز نوری مرتبه دوم (سیستم دو ترازه) بسیار کوچکتر است، پس می‌توان با تقریب خوبی قدرت نوسان را برای یک سیستم دو ترازه بررسی کرد. در شکل (5) و (6) نمودارهای قدرت نوسان بر حسب فرکانس پتانسیل هارمونیک در حضور و عدم حضور برهمنکش کولنی بین الکترون-حفره، برای گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته و با در نظر گرفتن تبهگنی اولین حالت برانگیخته رسم شده‌اند. همانطور که مشاهده می‌شود در نظر گرفتن بر همکنش کولنی باعث افزایش قدرت نوسان در گذار  $\Psi_0^{(1)} \rightarrow \Psi_1^{(1)}$  و کاهش قدرت نوسان در گذار  $\Psi_0^{(2)} \rightarrow \Psi_1^{(2)}$  می‌شود. از طرف دیگر بدون حضور بر همکنش کولنی قدرت نوسان برای گذار  $\Psi_1^{(2)} \rightarrow \Psi_0^{(1)}$  بیشتر از گذار  $\Psi_1^{(1)} \rightarrow \Psi_0^{(1)}$  می‌باشد. به علاوه در حضور بر همکنش کولنی یک رفتار معکوس در قدرت نوسان دیده می‌شود و قدرت نوسان برای گذار  $\Psi_1^{(2)} \rightarrow \Psi_0^{(1)}$  قابل صرف نظر کردن می‌باشد. نهایتاً با مقایسه شکل (5) با شکل (6) به این نتیجه می‌رسیم که در محاسبه خواص اپتیکی سیستم مورد نظر، تبهگنی اولین حالت برانگیخته باید حتماً در محاسبات در نظر گرفته شود.



شکل (5): نمودار قدرت نوسان بر حسب فرکانس پتانسیل هارمونیک و برای گذار  $\Psi_0^{(1)} \rightarrow \Psi_1^{(1)}$

