بیستمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و ششمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۸ تا ۱۰ بهمن ماه۱۳۹۲ - دانشگاه صنعتی شیراز

خواص اپتیکی غیر خطی مرتبه دوم یک اکسیتون درنقاط کوانتومی نیمکروی

فاطمه محب زاده[۱] و محمود براتی[۱]

[۱]گروه فیزیک، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی، فارس، ایران

[۲]گروه فیزیک، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی، فارس، ایران

چکیده - در این مقاله به بررسی آثار اکسیتونی برخواص اپتیکی نقاط کوانتومی نیمه‌کروی می‌پردازیم. ویژه مقادیر و توابع انرژی با استفاده از تقریب جرم موثر و روش المان محدود محاسبه شده‌اند. همچنین خواص اپتیکی سیستم با استفاده از روش اختلال و ماتریس چگالی تا مرتبه دوم بدست می‌آیند. نتایج با استفاده از نرم‌افزار کامسول، نشان می‌دهد که برهمکنش 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 انرژی‌های بیشتر می‌شود. بعلاوه، هماهنگ مرتبه دوم بسیار ضعیف‌تر از یکسوساز نوری می‌باشد. نهایتا، با محاسبه قدرت نوسان نشان دادیم که تبهگنی ترازها اثر قابل ملاحظه‌ای روی نتایج دارد.

کلید واژه: آثار اکسیتون، تولید هماهنگ مرتبه دوم، قدرت نوسان، نقاط کوانتومی نیمه‌کروی، یکسوساز نوری مرتبه دوم.

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

Fatemeh Mohebzadeh [1] and Mahmood Barati [1]

[1] 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.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-12-08]

۱- مقدمه

طی سال‌های اخیر خواص اپتیکی غیرخطی نقاط کوانتومی توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده است[1]. از بین خواص اپتیکی غیرخطی تولید هماهنگ‌های مرتبه دوم و یکسوساز نوری مرتبه دوم از جمله ویژگی های فیزیکی هستند که بطور گسترده از نظر تجربی مورد مطالعه قرار گرفته‌اند [2,3]. 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 برهمکنش 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 [4]. 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 بردارنده اطلاعات سودمندی در مورد تاثیر یک میدان الکترومغناطیسی خارجی بر خواص اپتیکی سیستم‌های با بعد محدود است [5]. 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 برهمکنش 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 [2].

$$H = \frac{P_R^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega_0^2 R^2 + \frac{P_r^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega_0^2 r^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0\left|\vec{r}\right|} \qquad (۱)$$

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 ، ω_0 فرکانس پتانسیل هارمونیک و ε ثابت گذر دهی نسبی نقطه کوانتومی می‌باشند. مختصات مرکز جرم و حرکت نسبی و تکانه‌های متناظر با آنها از طریق روابط زیر تعریف می‌شوند.

$$\vec{R} = (m_e^* \vec{r}_e + m_h^* \vec{r}_h)/M,\ \vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_h, \qquad (۲)$$
$$\vec{P}_R = \vec{p}_e + \vec{p}_h, \vec{P}_r = \frac{\mu}{m_e^*}\vec{p}_e + \frac{\mu}{m_h^*}\vec{p}_h$$

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 می‌آیند. 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[2].

$$\chi_0^{(2)} = \frac{4e^3\sigma_s}{\varepsilon_0\hbar^2}\mu_{01}{}^2\delta_{01} \times \frac{\omega_{01}^2(1+T_1/T_2) + (\omega^2 + 1/T_2^2)(T_1/T_2 - 1)}{((\omega_{01}-\omega)^2 + 1/T_2^2)((\omega_{01}+\omega)^2 + 1/T_2^2)} \qquad (۳)$$

$$\chi_{2\omega}^{(2)} = \frac{e^3 N}{\varepsilon_0} \times \frac{\mu_{01}\mu_{12}\mu_{20}}{(\hbar\omega - E_{10} - i\hbar\Gamma_{10})(2\hbar\omega - E_{20} - i\hbar\Gamma_{20})} \qquad (۴)$$

که در این روابط e بار الکترون، σ_s چگالی الکترون در نقطه کوانتمی، N چگالی اکسیتون در نقطه کوانتمی، T_1 و T_2 زمان واهلش عرضی و طولی، $\hbar\omega$ انرژی فوتون تابشی، $E_{10} = E_1 - E_0$، $E_{20} = E_2 - E_0$ و $\Gamma_{10} = \Gamma_{20} = \Gamma_0$ آهنگ واهلش می‌باشند. اندیس های ۰ و ۱ و ۲ نشان دهنده حالت پایه، اولین و دومین حالت برانگیخته می‌باشند. همچنین $\mu_{ij} = \langle\Psi_i|\vec{r}|\Psi_j\rangle$ و $\delta_{ij} = \left|\langle\Psi_j|\vec{r}|\Psi_j\rangle - \langle\Psi_i|\vec{r}|\Psi_i\rangle\right|$. با توجه به اینکه سیستم مورد نظر ما دارای تقارن سمتی می‌باشد اولین و دومین حالت برانگیختگی دارای تبهگنی دوگانه و سه‌گانه هستند که این تبهگنی‌ها 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

[Downloaded from opsi.ir on 2025-12-08]

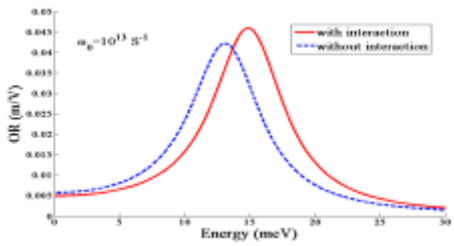
GaAs/AlGaAs پرداخته شده است. مقادیر پارامترهای استفاده شده در محاسبات عبارتند از [2]:

$$T_2 = 0.2\,ps \text{ ،} T_1 = 1\,ps \text{ ،} m_h^* = 0.09 m_0 \text{ ،} m_e^* = 0.067 m_0$$

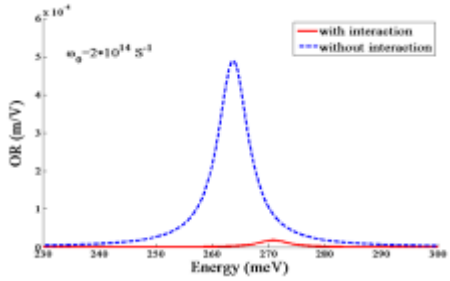
$$\text{،} \sigma_s = 5\times10^{24}\,m^{-3} \qquad \text{،} \Gamma_0 = 1/0.14\,ps^{-1}$$

$$.\varepsilon = 12.53 \text{ ،} N = 3\times10^{24}\,m^{-3}$$

در شکل‌های (1) و (2) نمودارهای یکسوسازی نوری (OR) برای دو فرکانس مختلف $\omega_0 = 1\times10^{13}s^{-1}$ ،$\omega_0 = 20\times10^{13}s^{-1}$ در حضور عدم حضور برهمکنش کولنی بین الکترون-حفره رسم شده‌اند. همانطور که مشاهده می‌شود در حضور برهمکنش کولنی یک جابجایی آبی (جابجایی به سمت انرژی‌های بالاتر) قابل توجه‌ای در بیشینه مقدار یکسوساز نوری دیده می‌شود. دلیل فیزیکی این پدیده این است که هر چند با در نظر گرفتن برهمکنش کولنی بین الکترون و حفره انرژی حالت‌های 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 انرژی‌های بیشتر می‌شود. همچنین برهمکنش الکترون-حفره باعث افزایش (کاهش) شدت پیک یکسوساز نوری در فرکانسهای پائین(بالا) می‌شود.

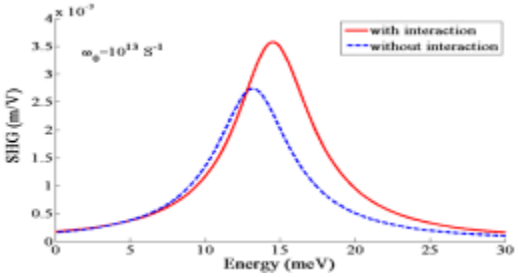


شکل (1): نمودار یکسوساز نوری در حضور و عدم حضور آثار اکسیتونی به ازای $\omega_0 = 1\times10^{13}s^{-1}$

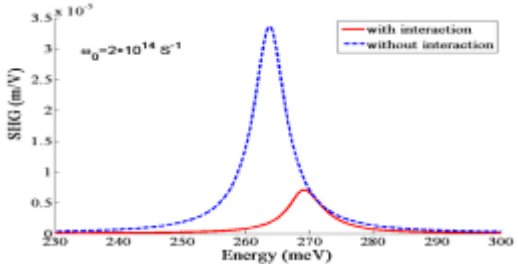


شکل (2): نمودار یکسو ساز نوری در حضور و عدم حضور آثار اکسیتونی به ازای $\omega_0 = 20\times10^{13}s^{-1}$

در شکل‌های (3) و (4) نمودارهای تولید هماهنگ مرتبه دوم برای دو فرکانس مختلف $\omega_0 = 1\times10^{13}s^{-1}$ و $\omega_0 = 20\times10^{13}s^{-1}$ در حضور و عدم حضور برهمکنش کولنی بین الکترون-حفره رسم شده‌اند. همانطور که مشاهده می‌کنیم، شبیه به نتایج به دست آمده برای یکسوساز نوری، در حضور برهمکنش کولنی یک جابجائی به سمت انرژی‌های بیشتر ظاهر می‌گردد. همچنین در فرکانس های کوچک و بزگ پتانسیل هارمونیک، حضور و عدم حضور برهمکنش کولنی باعث رخ دادن رفتار مشابهی با یکسوساز نوری در بزرگی تولید هماهنگ مرتبه دوم می‌شود.



شکل (3): نمودار تولید هماهنگ مرتبه دوم در حضور و عدم حضور آثار اکسیتونی به ازای $\omega_0 = 1\times10^{13}s^{-1}$



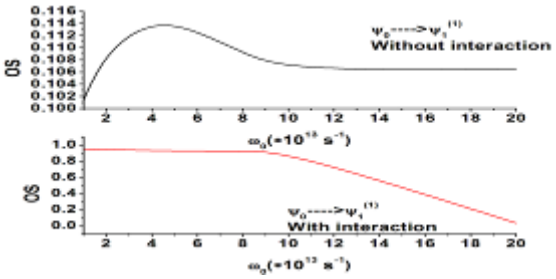
شکل (4): نمودار تولید هماهنگ مرتبه دوم در حضور و عدم حضور آثار اکسیتونی به ازای $\omega_0 = 20\times10^{13}s^{-1}$

یکی دیگر ازکمیت‌های مهم در محاسبات خواص اپتیکی سیستم‌های با بعد محدود قدرت نوسان است. در گذار اپتیکی از حالت اولیه $|\mathbf{i}>$ به حالت نهایی $|\mathbf{f}>$ قدرت نوسان به صورت زیر تعریف می شود:

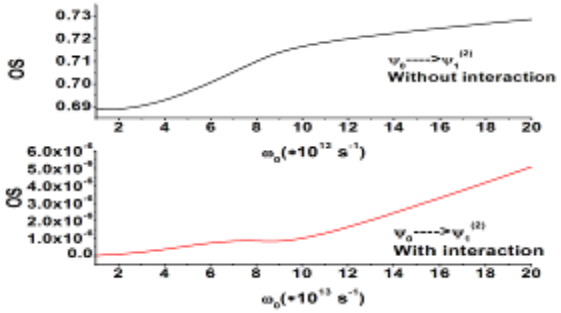
$$P_{fi} = \frac{2em^*}{\hbar^2} E_{fi} \left|\mu_{fi}\right| \qquad (5)$$

[Downloaded from opsi.ir on 2025-12-08]

که m^* جرم ذره ، $E_{fi} = E_f - E_i$ می‌باشند. 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 برهمکنش 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 $\Psi_0 \longrightarrow \Psi_1^{(1)}$ و کاهش قدرت نوسان در گذار $\Psi_0 \longrightarrow \Psi_1^{(2)}$ می‌شود. از طرف دیگر بدون حضور بر همکنش کولنی قدرت نوسان برای گذار $\Psi_0 \longrightarrow \Psi_1^{(2)}$ بیشتر از گذار $\Psi_0 \longrightarrow \Psi_1^{(1)}$ می‌باشد. به علاوه در حضور برهمکنش کولنی یک رفتار معکوس در قدرت نوسان دیده می‌شود و قدرت نوسان برای گذار $\Psi_0 \longrightarrow \Psi_1^{(2)}$ قابل صرف نظر کردن می‌باشد. نهایتا با مقایسه شکل (5) با شکل (6) به این نتیجه می‌رسیم که در محاسبه خواص اپتیکی سیستم مورد نظر، تبهگنی اولین حالت برانگیخته باید حتما در محاسبات در نظر گرفته شود.



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



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

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 می‌باشند، 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 سهموی باعث کاهش یکسوساز نوری و تولید هماهنگ مرتبه دوم می‌شود. (۴) در فرکانس های 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.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-12-08]