



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 خطی و غیر خطی نانوسیم نیمه هادی با ناهمگونی ساختار طولی با رابط مدرج در حضور میدان مغناطیسی خارجی

حمیده باقریان^۱ و محمدرضا کارزانی وحدانی^۲

^۱ دانشگاه آزاد واحد علوم و تحقیقات فارس

^۲ مرکز تحقیقات هوایی دریایی شیراز

چکیده - در این مقاله خواص نوری یک نانوسیم ابر شبکه با رابط مدرج به صورت تحلیلی مورد بررسی قرار گرفته است. برای این از تقریب جرم موثر برای محاسبه ویژه مقادیر و ویژه توابع انرژی استفاده شده است. در ادامه از روش ماتریس چگالی و همچنین روش تکرار برای محاسبه ضریب جذب (AC) و تغییر در ضریب شکست (RI) (خطی و مرتبه سوم غیر خطی) استفاده شده است. اثر اندازه، میدان مغناطیسی و همچنین تغییر در عرض رابط بر روی این کمیت‌ها مورد بررسی قرار گرفته است. یافته‌ها نشان می‌دهد قسمت غیر خطی (RI) و (AC) مقدار قابل توجهی داشته و باید در ضریب شکست و ضریب جذب کل در نظر گرفته شود.

کلید واژه - نانوسیم های ابر شبکه، جرم موثر، ماتریس چگالی، ضریب جذب، ضریب شکست.

Linear and nonlinear optical properties of semiconductor nanowire with longitudinal hetrostructures with garadual interface under magnetic feild

H. Bagheriyan and M. R. K. Vahdani

Abstract- Intersubband optical transitions in superlattice nanowires with graded interface are investigated analytically. In this way the effective mass approximation is used to calculate the electronic wave function and energies numerically. Density matrix approach in addition with iterative method is used to obtain the (linear and third order nonlinear) change in the refractive indices (RI) and absorption coefficient (AC) analytically. The effect of size, magnetic field and the interface width are investigated. It is found that nonlinear parts of RI and RA have large contribution and must be considered in calculation of the total RI and AC.

۱- مقدمه

با توجه به خصوصیات الکترونی و نوری ویژه‌شان، در سال‌های اخیر نانوسیم‌های نیمه هادی توجه زیادی را به خود جلب نموده‌اند. به تازگی بسیاری از گروه‌های تحقیقاتی گزارش‌هایی را مبنی بر رشد نانوسیم‌های نیمه هادی با ناهمگونی ساختار طولی ارائه نمودند و آنها را نانوسیم‌های ابرشبکه نامیده‌اند [۱ و ۲]. کاربردهای بالقوه بسیاری مانند، موجبرها، لیزرها و دیودهای ساطع کننده نور برای این ساختار پیشنهاد شده است [۳ و ۴]. به همین دلیل بسیاری از گروه‌ها مطالعات نظری و تجربی خود را بر روی این نوع از ساختارها متمرکز نمودند. به عنوان مثال نانو سیم ابرشبکه‌ای متشکل از PbS، PbSe و PbTe توسط Y.M Lin و همکاران ساخته شده است [۵]. Gudiksen و همکارانش با تجزیه و تحلیل تصاویر با وضوح بالای میکروسکپ الکترونی (TEM) از ترکیب نانو سیم ابر شبکه (GaAs/GaP) با قطر $\sim 20\text{nm}$ نشان دادند که گذار بین لایه‌های GaAs و GaP به صورت تند و اتمی نیست، بلکه یک رابط مدرج 15-20nm در بین آنها وجود دارد [۳]. برخلاف شواهد تجربی بالا، در اغلب تحقیقات نظری، انتقال بین دو ماده تشکیل دهنده سیم به صورت تند و ناگهانی در نظر گرفته می‌شود. به منظور حل این مشکل Chaves و همکاران [۶] با استفاده از تقریب جرم موثر زیر باندهای رسانش نانو سیم ابرشبکه (GaAs/GaP) را با در نظر گرفتن انتقال مدرج در رابط بین دو ماده GaAs و GaP محاسبه و نشان دادند که در بعضی از موارد حبس سطحی در بین دو ماده رخ می‌دهد.

به دلیل بزرگی گشتاور دو قطبی ناشی از گذار بین زیر نوارها و کوچکی اختلاف انرژی بین آنها در سیستم‌های کوانتومی سهم بخش غیرخطی ثابت دی الکتریک و دیگر خواص نوری به طور قابل توجهی نسبت به حالت کپه‌ای بیشتر می‌باشد. از آنجایی که بخش غیرخطی به طور مستقیم به شدت پرتو نور بستگی دارد، با افزایش شدت نور بخش غیرخطی به سرعت افزایش پیدا می کند [۷]. بنابراین لازم است اثرات غیرخطی به ویژه هنگامی که شدت نوری بالا اعمال می شود در نظر گرفته شود.

در این مطالعه از تقریب ماتریس چگالی و همچنین نظریه اختلال برای توصیف خواص نوری غیرخطی ناز از گذار

بین زیر نوارها در یک نانو سیم ابرشبکه (GaAs/GaP)، تحت تاثیر میدان مغناطیسی در راستای محور سیم، استفاده شده است. به این منظور از روش Chaves و همکاران برای محاسبه ساختارهای الکترونی نانو سیم استفاده شده است. بنابر اطلاع نویسندگان محاسبه خواص نوری نانو سیم‌های ابر شبکه محاسبه می‌شود.

۲- تئوری ساختار الکترونی

سیستم مورد نظر ما یک سیم کوانتومی استوانه‌ای با ناهمگونی طولی منفرد می‌باشد که تحت تاثیر یک پتانسیل محدودشدگی شعاعی بینهایت قرار دارد، شکل (۱). اگر فرض کنیم که این سیستم تحت تاثیر یک میدان مغناطیسی خارجی در راستای محور سیم $\vec{B} = B\hat{z}$ قرار داشته باشد، این میدان را می‌توان بوسیله پتانسیل برداری $\vec{A} = \frac{1}{2}B\rho\hat{\theta}$ نمایش داد. در این حالت معادله شرودینگر برای این سیستم با در نظر گرفتن تقریب جرم موثر به شکل زیر خواهد بود:

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m^{\parallel}(z)} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] - \hbar^2 \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^{\perp}} \frac{\partial}{\partial z} \right) + \frac{i}{2} \hbar \omega_c \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{8} \omega_c^2 m^{\parallel} \rho^2 + V(\rho, z) \right\} \psi(\rho, \theta, z) = E \psi(\rho, \theta, z) \quad (1)$$

که در آن $\omega_c = \frac{eB}{m^{\parallel}}$ بسامد زاویه‌ای سیکلوترونی می‌باشد و به منظور مطابقت با شرایط واقعی جرم موثر در الکترون در راستای سیم ($m^{\parallel}$) و عمود بر آن ($m^{\perp}$) متفاوت در نظر گرفته شده است. در سیم کوانتومی مورد نظر برای $\rho \leq R$ ، پتانسیل محدودشدگی $V(\rho, z) = V^{\text{het}}(z)$ و برای $\rho > R$ برابر $V(\rho, z) = \infty$ می‌باشد. مقدار $V^{\text{het}}(z)$ چاه پتانسیل ناهمگون و جرم‌های موثر $m^{\perp}$ و $m^{\parallel}$ با در نظر گرفتن مقادیر ϵ_1 و ϵ_2 پارامترهای درونیایی و Q_e اختلاف لبه نوار رسانش و محیط، برابر است با [۶]:

$$m^{\perp} = m_{xp}^{\perp} \chi(z) + m_{xAs}^{\perp} [1 - \chi(z)] \quad \text{الف (۲)}$$

$$m^{\parallel} = m_{xp}^{\parallel} \chi(z) + m_{xAs}^{\parallel} [1 - \chi(z)] \quad \text{ب (۲)}$$

$$V^{\text{het}}(z) = Q_e [\epsilon_1 \chi(z) + \epsilon_2 \chi^2(z)] \quad \text{ج (۲)}$$

ترکیب ماده‌ی دو طرف مرز را به شکل XP_xAs_{1-x} ($X = \text{Ga یا In}$) در نظر می‌گیریم. در این صورت مقدار χ وابسته به محور z بوده و از مقدار 0 (برای GaP) تا ۱ (برای GaAs) تغییر می‌کند.

با در نظر گرفتن جواب معادله‌ی شرودینگر به شکل زیر

چگالی و تکرار عبارت تحلیلی برای ضرایب نوری خطی و غیرخطی جذب محاسبه می‌نماییم. به همین منظور ما میدان الکترومغناطیسی تک رنگ $E = Ee^{i\omega t} + c.c$ را قطبش آن در راستای محور z -ها قرار دارد را در نظر می‌گیریم. تغییرات زمانی ماتریس چگالی با استفاده از رابطه‌ی زیر محاسبه می‌شود:

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H} - eZe(t), \hat{\rho}] - \Gamma(\hat{\rho} - \hat{\rho}^{(0)}) \quad (7)$$

که در آن $\hat{H}$ هامیلتونی سیستم در غیاب میدان الکترومغناطیسی، e بار الکترون، $\hat{\rho}^{(0)}$ عملگر چگالی مختل نشده و Γ عملگر واهلش ناشی از برخورد الکترون-الکترون و الکترون-فونون می‌باشد. بادر نظر گرفتن

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{\rho}^{(n)} \quad (8)$$

و قرار دادن آن در رابطه (7) می‌توان به رابطه زیر رسید:

$$\frac{\partial \rho_{ij}^{(n+1)}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [H, \rho^{(n+1)}]_{ij} - i\hbar \Gamma_{ij} \rho_{ij}^{(n+1)} \quad (9)$$

$$\frac{1}{i\hbar} [M, \rho^{(n)}]_{ij} E(t)$$

در این حالت قطبش الکتریکی سیستم برابر است با $p(t) = Tr(ez\hat{\rho}) = \chi E$ ، که در آن Tr نماد رد ماتریس می‌باشد. اگر نانو سیم مورد نظر به عنوان یک سیستم دو ترازه در نظر گرفته شود، قطبیدگی مرتبه دوم برای این سیستم به علت داشتن مرکز تقارن انعکاسی برابر با صفر بوده و پذیرفتاری مرتبه دوم این سیستم‌ها صفر خواهد شد. در این صورت پذیرفتاری خطی مرتبه اول و غیرخطی مرتبه سوم برابر خواهد بود با:

$$\varepsilon_0 \chi^{(1)} = \frac{\sigma |M_{12}|^2}{E_{21} - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{21}}, \quad (10)$$

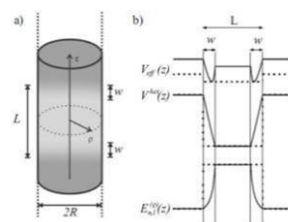
$$\varepsilon_0 \chi^{(3)}(\omega) = \varepsilon_0 I \chi^{(3)}(\omega) \left[\frac{4|M_{21}|^2}{(E_{21} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{21})^2} + \frac{(M_{22} - M_{11})^2}{(E_{21} - i\hbar\Gamma_{21})^2 + (E_{21} - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{21})^2} \right] \quad (11)$$

که σ چگالی حامل‌های بار در سیستم مورد نظر می‌باشد. باتوجه به روابط (10) و (11)، ضریب جذب و شکست از رابطه‌های زیر محاسبه می‌شود:

$$\Delta n^{(1)}(\omega) = \text{Re}(\varepsilon_0 \chi^{(1)}(\omega)) / 2n\varepsilon_0 \quad (12)$$

$$\Delta n^{(3)}(\omega, I) = \text{Re}(\varepsilon_0 \chi^{(3)}(\omega)) / 2n\varepsilon_0 \quad (13)$$

$$\psi(R, z, \theta) = R(r)Z(z)e^{-il\theta} \quad (3)$$



شکل ۱: (a) تصویر شماتیک از یک استوانه آزاد ایستاده با شعاع R ، با در نظر گرفتن چاه کوانتومی منفرد به طول L و ضخامت رابط w . (b) برش عمودی از پتانسیل در طول محور z برای بدون حضور رابط (نقطه چین) در حضور رابط مدرج (خط)

که در آن $l = 0, \pm 1, \pm 2$ ، معادله‌ی قسمت شعاعی به صورت زیر بدست می‌آید:

$$\frac{\hbar^2}{2m^{\text{II}}(z)} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) \right] + \frac{\hbar^2 l^2}{2m^{\text{II}}(z) \rho^2} + \frac{i}{2} \hbar \omega_c \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{8} \omega_c^2 m^{\text{II}} \rho^2 \} R_{n,l}(\rho) = E_{n,l}^{\rho} R_{n,l}(\rho) \quad (4)$$

معادله (4) مشابه تابع کومر بوده که حل نوع اول آن برای ما قابل پذیرش می‌باشد. اگر جواب این معادله، $R_{n,l}(\rho)$ را به صورت

$R_{n,l}(\rho) = \alpha \xi^{|l|/2} \exp(-\xi/2) F(-x_{n,l}, |l|+1, R^2/2a_c^2)$ در نظر بگیریم (که در آن F تابع فوق هندسی همشار نوع یک می‌باشد)، همچنین با در نظر گرفتن $\xi = R^2/2a_c^2$ و محاسبه رابطه $F(-x_{n,l}, |l|+1, R^2/2a_c^2) = 0$ (که در آن $x_{n,l}$ n-امین ریشه از تابع F می‌باشد)، انرژی حبس شعاعی مطابق رابطه زیر بدست می‌آید:

$$E_{n,l}^{\rho} = \hbar\omega_c (x_{n,l}|l| + \frac{l}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}) \quad (5)$$

در این صورت معادله وابسته به z را می‌توان به صورت زیر نوشت:

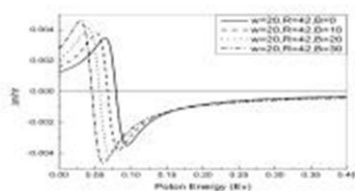
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^{\perp}(z)} \frac{\partial}{\partial z} \right) + V_{\text{eff}}(z) \right] Z_m(z) = E_{n,l,m} Z_m(z)$$

که در آن $V_{\text{eff}}(z) = V^{\text{het}}(z) + E_{n,l}^{\rho}(z)$ می‌باشد. معادله‌ی بالا به کمک روش تفاضل متناهی حل شد و ویژه مقادارها و ویژه توابع الکترونی سیستم محاسبه شد. نتایج محاسبه شده در این قسمت در همخوانی کامل با [6] قرار دارد.

۳- خواص اپتیکی

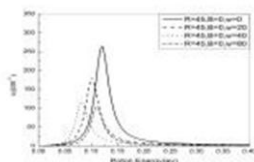
در این بخش با استفاده از ویژه مقادارها و ویژه تابع‌های محاسبه شده در بخش قبل و به کمک روش ماتریس

زیرباند‌ها ودوقطبی مغناطیسی که با افزایش میدان کاهش، پیدا می کنند.



شکل ۴: تغییرات ضریب شکست کل براساس انرژی فوتون ورودی به ازای مقادیر متفاوت میدان مغناطیسی و $R = 42A^0$, $w = 20A^0$

تغییرات ضریب جذب کل (AC) در غیاب میدان مغناطیسی در شکل (۵) نمایش داده شده است. به ازای افزایش ضخامت رابط های بین دوماده کاهش پیدا می کند و این بدان دلیل است که، افزایش ضخامت رابط ها سبب کاهش ممان دوقطبی و در نتیجه کاهش ضریب جذب می شود.



شکل ۵: تغییرات ضریب جذب کل براساس انرژی فوتون ورودی به ازای چهار مقدار متفاوت ضخامت رابط ها و $R = 45A^0$, $B = 0$ می باشد

۵- نتیجه گیری

ما با استفاده از ماتریس چگالی به بررسی خواص نوری ابرشیکه (GaAs/GaP) با در نظر گرفتن رابط مدرج پرداختیم. نتایج ما نشان داد که، RI و AC به شدت وابسته به اندازه بوده و ممکن است یک شیفت قرمز با افزایش اندازه پیدا کنند. اغلب با افزایش میدان مغناطیسی به نیز همین اتفاق رخ می دهد.

مراجع

- [1] M. T. Björk, B. J. Ohsson, T. Sass, A. I. Persson, c. Thelander, M. H. Manusoon, K. Deppert, L. R. Wallenberrg and I. Samuelsson, nano Lett. 2 (2002) 87.
- [2] R. solanki, J. Hou, J. L. freeouf and B. Miner, appl. phys. Lett. 81 (2002) 3864.
- [3] M. S. Gudiksen, L. J. Lauhon, J. Wang, D. C. smith and C. M. Lieber, Nature, 415 (2002) 617.
- [4] D. Li, Y. Wu, R. Fan, P. Yang and A. majumdar, Appl. Phys. Lett. 83 (2003) 3186.
- [5] Y. M. Lin and M. S. Dresselhaus, Phys. Rev. B. 68 (2003) 075304.
- [6] A. Chaves, J. A. K. freire and G. A. Farias. Arxiv (2011) 1096.
- [7] M. R. K. Vahdani, G. Rezaei, Phys. Lett. A, 374 (2010) 637

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \omega \text{Im}(\epsilon_0 \chi^{(1)}(\omega)) / cn \epsilon_0, \quad (14)$$

$$\alpha^{(3)}(\omega, I) = \omega \text{Im}(\epsilon_0 \chi^{(3)}(\omega)) / cn \epsilon_0, \quad (15)$$

در رابط بالا سرعت نور n و ضریب شکست محیط پیرامون سیم کوانتومی است که در اینجا خلا در نظر گرفته شده است. همچنین مقدار کل ضریب جذب (AC) و شکست (RI) به صورت زیر محاسبه خواهد شد:

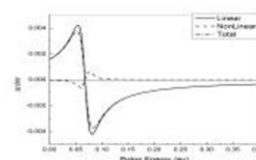
$$\Delta n(\omega, I) = \Delta n^{(1)}(\omega) + \Delta n^{(3)}(\omega) \quad (16)$$

$$\alpha(\omega) = \alpha^{(1)}(\omega) + \alpha^{(3)}(\omega) \quad (17)$$

در روابطی که در بالا بیان شد E_{21} اختلاف انرژی بین دوتراز w و ϕ کانس و شدت نور فرودی و $M_{ij} = \langle \phi_i | e z | \phi_j \rangle$ که در آن ϕ_{ij} تابع موج سیستم در حالت i, j می باشد

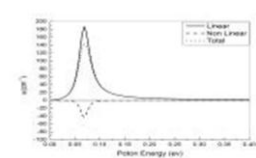
۴- نتایج و محاسبات

به ازای شدت پرتو فرودی مختلف برای نانو سیم ابرشیکه (GaAs/GaP) با تراکم الکترونی $3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ محاسبات انجام شد. شکل (۲)، نمودار تغییرات ضریب شکست خطی غیرخطی مرتبه سوم و کل به ازای شعاع $R = 42A^0$ و شدت نور فرودی $I = 4 \times 10^{11} \text{ erg/cm}^2 \text{ s}$ را نمایش می دهد. با توجه به اینکه بخش غیرخطی کوچکتر و علامتی مخالف با قسمت خطی دارد، حضور جمله غیرخطی باعث کاهش ضریب شکست می شود



شکل ۲: تغییرات ضریب شکست خطی، غیرخطی مرتبه سوم و کل به ازای $R = 42A^0$, $w = 20A^0$, $B = 10T$ فوتون، انرژی، فوتون، و

تغییرات ضریب جذب خطی و غیرخطی مرتبه سوم و کل در شکل (۳) نمایش داده شده است. در این حالت نیز قسمت غیرخطی علامتی مخالف با قسمت خطی داشته و همین امر سبب کاهش ضریب شکست می شود.



شکل ۳: تغییرات ضریب جذب خطی، غیرخطی مرتبه سوم و کل براساس انرژی

فوتون، و ازای $R = 42A^0$, $w = 20A^0$, $B = 10T$ متفاوت میدان مغناطیسی در شکل (۴) نمایش داده شده است. تغییرات ضریب شکست کل به ازای افزایش میدان، کاهش یافته و این امر به خاطر انرژی جدایی بین