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

خواص اپتیکی خطی وغیر خطی نانوسیم نیمه هادی با ناهمگونی ساختارطولی با رابط مدرج درحضور 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 ابرشبکه با رابط مدرج به صورت تحلیلی مورد بررسی قرارگرفته 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 ومرتبه 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 درضریب شکست وضریب جذب کل در نظر گرفته شود.

کلید واژه- نانوسیم های ابرشبکه ،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.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-05]

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 ارایه نمودند و آنها را نانوسیم های ابرشبکه نامیده‌اند [۱و۲]. کاربردهای بالقوه بسیاری مانند، موجبرها، لیزرها و دیودهای ساطع کننده نور برای این ساختار پیشنهاد شده است [۳و۴]. 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 $20nm\sim$ 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 دهنده‌ی 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 دوماده 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 کوانتمی 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 نااز ازگذار 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 محاسبه‌ی ساختارهای الکترونی نانو سیم استفاده شده است. بنابر اطلاع نویسندگان محاسبه خواص نوری نانو سیم‌های ابر شبکه محاسبه می‌شود.

۲-تئوری ساختارالکترونی

سیستم مورد نظر ما یک سیم کوانتمی استوانه‌ای با ناهمگونی طولی منفرد می‌باشد که تحت تأثیر 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 بوسیله‌ی 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:

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

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

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

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

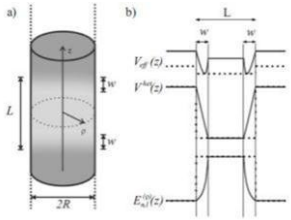
$$V^{het}(z)=Q_e[\varepsilon_1\chi(z)+\varepsilon_2\chi^2(z)] \quad (۲)\text{ ج}$$

ترکیب ماده‌ی دو طرف مرز را به شکل $XP_{\chi}As_{1-\chi}$ ($X=Ga$یاIn) درنظر 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 نظرگرفتن جواب معادله‌ی شرودینگر به شکل زیر

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-05]

$$\psi(R,z,\theta) = R(r)Z(z)e^{-il\theta} \qquad (۳)$$



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

که در ان $l = 0, \pm1, \pm2$، معادله‌ی قسمت شعاعی به صورت زیر بدست می‌آید:

$$\frac{\hbar^2}{2m^{II}(z)}[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}(\rho\frac{\partial}{\partial\rho})] + \frac{\hbar^2 l^2}{2m^{II}(z)\rho^2} + \qquad (۴)$$
$$+\frac{i}{2}\hbar\omega_c\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{8}\omega_c{}^2 m^{II}\rho^2\}R_{n,l}(\rho) = E^{\rho}_{n,l}R_{n,l}(\rho)$$

معادله (۴) مشابه تابع کومر بوده که حل نوع اول آن برای ما قابل پذیرش می باشد. 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 نظرگرفتن $\xi = R^2/2a_c{}^2$ و محاسبه رابطه $F(-x_{n,l},|l|+1,R^2/2a_c{}^2) = 0$، (که درآن $x_{n,l}$ n-امین ریشه از تابع F می‌باشد)، انرژی حبس شعاعی مطابق رابطه زیر بدست می‌آید:

$$E^{\rho}_{n.l} = \hbar\omega_c(x_{n,|l|} + \frac{l}{2} + \frac{|l|}{2} + \frac{1}{2}) \qquad (۵)$$

در این صورت معادله وابسته به z را می‌توان به صورت زیر نوشت: (۶)

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

که در آن $V_{eff}(z) = V^{het}(z) + E^{\rho}_{n,l}(z)$ می‌باشد. معادله‌ی بالا به کمک روش تفاضل متناهی حل شد و ویژه مقدارها و ویژه توابع الکترونی سیستم محاسبه شد. نتایج محاسبه شده در این قسمت در همخوانی کامل با [۶] قرار دارد.

۳-خواص اپتیکی

در این بخش با استفاده از ویژه مقدارها و ویژه تابع‌های محاسبه شده در بخش قبل و به کمک روش ماتریس چگالی و تکرار عبارت تحلیلی برای ضرایب نوری خطی وغیرخطی 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:

$$\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H} - ezE(t),\hat{\rho}] - \Gamma(\hat{\rho} - \hat{\rho}^{(0)}) \qquad (۷)$$

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

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{n=0}^{\infty}\hat{\rho}^{(n)} \qquad (۸)$$

و قرار دادن آن در رابطه (۷) می‌توان به رابطه زیر رسید:

$$\frac{\partial\rho^{(n+1)}_{ij}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[H,\rho^{(n+1)}]_{ij} - i\hbar\Gamma_{ij}\rho^{(n+1)}_{ij} \qquad (۹)$$
$$\frac{1}{i\hbar}[M,\rho^{(n)}]_{ij}E(t)$$

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 درنظرگرفته 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:

$$\varepsilon_0\chi^{(1)} = \frac{\sigma|M_{12}|^2}{E_{21} - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_{21}}, \qquad (۱۰)$$

و

$$\varepsilon_0\chi^{(3)}(\omega) = \varepsilon_0 I\chi^{(3)}(\omega)[\frac{4|M_{21}|^2}{(E_{21}-\hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{21})^2} +$$
$$\frac{(M_{22}-M_{11})^2}{(E_{21}-i\hbar\Gamma_{21})^2 + (E_{21}-\hbar\omega-i\hbar\Gamma_{21})^2}] \qquad (۱۱)$$

که σ چگالی حاملهای بار در سیستم مورد نظر می باشد. باتوجه به روابط (۱۰) و (۱۱)، ضریب جذب و شکست از رابطه‌های زیر محاسبه می‌شود:

$$\Delta n^{(1)}(\omega) = \mathrm{Re}(\varepsilon_0\chi^{(1)}(\omega))/2n\varepsilon_0) \qquad (۱۲)$$

$$\Delta n^{(3)}(\omega, I) = \mathrm{Re}(\varepsilon_0\chi^{(3)}(\omega))/2n\varepsilon_0 \qquad (۱۳)$$

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-05]

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \omega \mathrm{Im}(\varepsilon_0 \chi^{(1)}(\omega))/cn\,\varepsilon_0, \qquad (۱۴)$$

$$\alpha^{(3)}(\omega, I) = \omega \mathrm{Im}(\varepsilon_0 \chi^{(3)}(\omega))/cn\,\varepsilon_0, \qquad (۱۵)$$

دررابط بالا cسرعت نور وn ضریب شکست محیط پیرامون سیم کوانتمی 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:

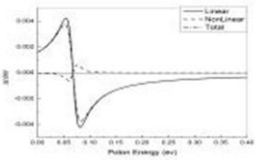
$$\Delta n(\omega, I) = \Delta n^{(1)}(\omega) + \Delta n^{(3)}(\omega) \qquad (۱۶)$$

$$\alpha(\omega) = \alpha^{(1)}(\omega) + \alpha^{(3)}(\omega) \qquad (۱۷)$$

درروابطی که در بالا بیان شد E_{21}اختلاف انرژی بین دوتراز ωوIافرکانس وشدت نورفرودی و $M_{ij} = \langle \varphi_i | ez | \varphi_j \rangle$ که در آن φ_{ij}تابع موج سیستم در حالت i, jمی باشد

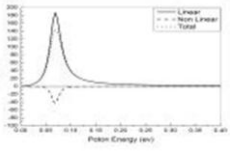
۴-نتایج ومحاسبات

به ازای شدت پرتو فرودی مختلف برای نانو سیم ابرشبکه (GaAs/GaP) با تراکم الکترونی $3\times10^{16} cm^{-3}$ محاسبات انجام شد. شکل(۲)، نمودار تغییرات ضریب شکست خطی غیرخطی مرتبه سوم و کل به ازای شعاع $R = 42\mathrm{A}^0$ و شدت نورفرودی $I = 4\times10^{11} erg/cm^2 s$ را نمایش می‌دهد. با توجه به اینکه بخش غیرخطی کوچکتر و علامتی مخالف با قسمت خطی دارد، حضور جمله غیرخطی باعث کاهش ضریب شکست می شود



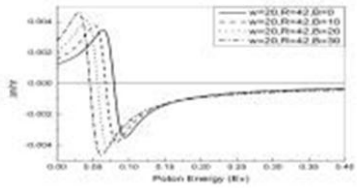
شکل ۲: تغییرات ضریب شکست خطی،غیرخطی مرتبه سوم و کل به ازای $R = 42A^0, w = 20A^0, B = 10T$ براساس انرژی فوتون ورودی

تغییرات ضریب جذب خطی وغیرخطی مرتبه سوم وکل 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 می‌شود.



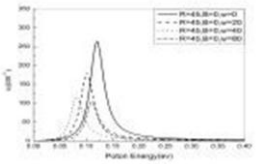
شکل۳: تغییرات ضریب جذب خطی،غیرخطی مرتبه سوم و کل براساس انرژی فوتون ورودی به ازای $R = 42A^0, w = 20A^0, B = 10T$

متفاوت میدان مغناطیسی در شکل (۴) نمایش داده شده است. تغییرات ضریب شکست کل به ازای افزایش میدان ،کاهش یافته واین امر به خاطر انرژی جدایی بین 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 کندواین بدان دلیل است که، افزایش ضخامت رابط ها سبب کاهش ممان دوقطبی ودرنتیجه 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 ابرشبکه (GaAs/GaP) با در نظر گرفتن رابط مدرج پرداختیم .نتایج ما نشان دادکه ،RIوAC به شدت وابسته به اندازه بوده وممکن است یک شیفت قرمز با افزایش اندازه پیدا کنند. اغلب با افزایش میدان مغناطیسی به نیزهمین 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. Walllennberrg and l.samuellson,, 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

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-05]