



تأثیر اندازه و موقعیت نقص روی اثر الکترواپتیک مربعی نقطه کوانتومی کروی GaN/AlGaIn

محمد کوهی^{۱*} | علی واحدی^۱ | ابوالفضل اکبرزاده^۲

^۱گروه فیزیک، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران
^۲گروه نانوتکنولوژی پزشکی، دانشکده علوم نوین پزشکی، دانشگاه علوم پزشکی تبریز، تبریز، ایران

چکیده: در این مقاله، یک نقطه کوانتومی کروی جدید برای افزایش و مدیریت پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم اثر الکترواپتیک مربعی پیشنهاد شده است. این نانو ساختار شامل پوسته نقص احاطه شده توسط دو چاه پتانسیل هست. اندازه نقطه کوانتومی، ضخامت، موقعیت و پتانسیل پوسته‌ی نقص تأثیر زیادی روی پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم دارند. با حل عددی معادله شرودینگر در تقریب جرم موثر، پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم محاسبه شد. نتایج نشان می‌دهند با افزایش اندازه نقطه‌ی کوانتومی پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم افزایش می‌یابد. همچنین با افزایش ضخامت پوسته‌ی نقص پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم افزایش و طول موج تشدید انتقال به سرخ پیدا می‌کند. بیشترین مقدار پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم وقتی قابل حصول هست که در وضعیت متقارن موقعیت پوسته‌ی نقص، پتانسیل نقص برابر پتانسیل پله شود.

واژگان کلیدی: اثر الکترواپتیک مربعی، پذیرفتاری نوری، نقص، نقطه کوانتوم.

kouhi@iaut.ac.ir

۱- مقدمه

باریکه مولکولی و رسوبدهی بخار شیمیایی فلز اورگانیک، می‌توان به نانو ساختارهای متعددی از این مواد مانند چاه‌ها و نقاط کوانتومی دست یافت [۹ و ۱۶]. خواص اپتیکی غیرخطی مرتبه سوم در نقطه کوانتومی کروی GaN/AlGaIn توسط نویسندگان مرجع [۱۷] مورد مطالعه قرار گرفته است. پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم و پدیده خودکانونی بصورت تئوری بررسی شده، نتایج نشان می‌دهند اندازه نقطه کوانتومی تأثیر عمده‌ای روی خواص اپتیکی غیرخطی نقطه کوانتومی داشته و اثر خودکانونی با کاهش اندازه نقاط کوانتومی افزایش می‌یابد. نویسندگان مراجع [۱۸ و ۱۹] ایده بدیعی نقص در درون نقطه کوانتومی کروی GaN/AlGaIn را پیشنهاد کرده‌اند. نتایج آنها نشان می‌دهند پذیرفتاری نوری غیر خطی مرتبه سوم اثر الکترواپتیک مربعی و تولید هارمونیک سوم حدود پنج مرتبه‌ی مقداری در مقایسه با نمونه توده ای افزایش

در دهه‌های اخیر تلاش‌های زیادی برای توسعه مواد و قطعات حالت جامد برپایه نیمرساناهای نیتريد دار انجام گرفته است [۱-۱۲]. نیمرساناهای نیتريد دار جزو کلاس نیمرساناهای گاف بزرگ هستند. این نیمرساناها برای کاربردهای دیوده‌های نورگسیل [۲]، لیزرهای نیمرسانا [۷، ۱۳ و ۱۴]، آشکارسازهای ماورای بنفش [۵] و ترانزیستورهای اثر میدان [۱۵] اهمیت ویژه ای دارند. دیوده‌های نورگسیل طول موج کوتاه کاربردهای زیادی در حافظه‌های نوری چگالی بالا، فتوکپی رنگی و ارتباطات زیرآبی دارد [۱۱]. نیتريد گالیم و نیتريد آلومینیوم نیمرساناهای ترکیبی از خانواده گروه ۳-۵ بوده و دارای باند گاف در محدوده ۳/۴۲ تا ۶/۱۳ الکترون ولت هستند. با استفاده از تکنولوژیهای ساخت نیمرسانا از قبیل اپیتاکسی

می‌یابد.

بر نقاط کوانتومی نشان داده شده‌است. در این مقاله مطابق ساختار شکل ۱(b) اندازه و محل نقص تغییر داده می‌شود و پاسخ پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم اثر الکترواپتیک مربعی آن مورد مطالعه قرار می‌گیرد. اندازه انرژی پتانسیل مربوط به ناحیه‌ی چاههای پتانسیل اول و دوم صفر فرض شده و اختلاف باند آفت پتانسیل $\Delta E_c = 0.7 \times [E_g(x) - E_g(0)]$ بعنوان انرژی پتانسیل ناحیه‌های $Al_xGa_{1-x}N$ در نظر گرفته می‌شود. با تغییر کسر مولی آلومینیوم ناحیه‌های نقص و سد پتانسیل می‌توان اندازه انرژی پتانسیل آنها را در درون نقطه کوانتومی تغییر داد. تاثیر میدان الکتریکی درون ساختاری ناشی از پیزوالکتریک و قطبش خودبخودی روی ویژگیهای اپتیکی نقطه کوانتومی $GaN/AlGaN$ با ساختار ورتزایت زیاد بوده اما در نقاط کوانتومی با ساختار زینک-بلند به دلیل تقارن بالا میدان داخلی قوی وجود ندارد [۲۳]. همچنین گاف انرژی ساختارهای نیتريدی زینک-بلند درمقایسه با ورتزایت کمتر بوده و این، در کاربردهای قطعات الکترواپتیکی بر پایه نقاط کوانتومی نیتريدی با ساختار زینک-بلند یک مزیت محسوب می‌شود [۲۴]. امکان رشد نقطه کوانتومی $GaN/AlGaN$ با روش اپیتاکسی قطره‌ای وجود دارد [۲۵]. در این مقاله پذیرفتاری نوری نقطه کوانتومی با ساختار زینک-بلند مورد مطالعه قرار گرفته و لذا از اثرات میدان داخلی صرف نظر شده است. جرم موثر الکترون و پتانسیل در نواحی مختلف نانوساختار مورد مطالعه را می‌توان بصورت زیر نوشت:

$$V_i(r) = \begin{cases} V_1 = 0 & 0 < r < a1 \\ V_2 = V_{01} & a1 < r < a2 \\ V_3 = 0 & a2 < r < b \\ V_4 = V_{02} & b < r \end{cases} \quad (1)$$

$$m_i^* = \begin{cases} m_1^* = 0.228m_e & 0 < r < a1 \\ m_2^* = (0.252xd + 0.228)m_e & a1 < r < a2 \\ m_3^* = 0.228m_e & a2 < r < b \\ m_4^* = (0.252xb + 0.228)m_e & b < r \end{cases} \quad (2)$$

معرفی نانوساختاری متفاوت از مراجع [۱۸ و ۱۹] با جابجا کردن محل نقص توسط نویسندگان مقاله حاضر [۲۰ و ۲۱] انجام گرفته است. آنها نشان داده اند، ضمن افزایش غیرخطیت اپتیکی با تغییر پهناي چاه و کسر مولی آلومینیوم در نانوساختار جدید پیشنهادی نقطه کوانتومی کروی $GaN/AlGaN$ می‌توان پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم و فرکانس تشدید را کنترل کرد. نویسندگان مرجع [۲۲] برای افزایش غیرخطیت نوری، نقطه کوانتومی مکعبی $GaN/AlGaN$ حاوی نقص مرکزی را پیشنهاد داده اند. آنها نتیجه گرفته اند افزایش غیرخطیت نوری تقریباً مستقل از موقعیت نقص می‌باشد. درحالیکه، نتایج بدست آمده در مقاله حاضر نشان می‌دهند پذیرفتاری نوری غیرخطی نقطه کوانتومی کروی معرفی شده شدیداً به موقعیت نقص وابسته است.

خواص الکترونی نانوساختارها (شامل اندرکنش‌هایی مانند الکترون-الکترون، الکترون-حفره و الکترون-فونون) بطور کیفی به ابعاد و ساختار هندسی (اندازه و شکل) و توزیع اتمهای داخل آنها بستگی دارد. خواص الکترونی رفتارهای اپتیکی خطی و غیرخطی نانوساختارها را تعیین می‌کنند. بنابراین در دنیای نانو، معماری هندسی زمینه‌های وسیعی از طراحی مواد بدیع را فراهم کرده‌است. در این مقاله نقطه کوانتومی کروی $GaN/AlGaN$ شامل یک پوسته‌ی نقص احاطه شده توسط دو چاه پتانسیل برای افزایش اثر الکترواپتیک مربعی پیشنهاد شده است. قصد داریم تاثیر اندازه نقطه کوانتومی، ضخامت پوسته‌ی نقص، موقعیت نقص و پتانسیل ناحیه نقص را روی پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم مورد بررسی قرار دهیم. برای دستیابی به پذیرفتاری نوری مرتبه سوم بالا، مقادیر این پارامترها را تعیین می‌کنیم.

۲- روش تئوری

شمای دو بعدی و توزیع پتانسیل نقطه کوانتومی کروی مورد مطالعه در شکل ۱ نشان داده شده‌است. ساختار شکل ۱(a) توسط نویسندگان مرجع [۱۸] معرفی شده و افزایش پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم نسبت به نیمرسانای توده‌ای مورد بررسی قرار گرفته‌است. ساختار شکل ۱(c) توسط نویسندگان مقاله حاضر [۲۰ و ۲۱] معرفی شده و کارایی آن برای آشکارسازی مادون قرمز مبتنی

تابع موج کل را می توان با ضرب هماهنگیهای کروی و جوابهای معادله بسل بصورت زیر نوشت:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (4)$$

که در آن n, ℓ, m به ترتیب اعداد کوانتومی اصلی، زاویه ای مدار و عدد کوانتومی مغناطیسی مداری هستند. حل های معادله بخش شعاعی (معادله بسل کروی) برای مقادیر مختلف انرژی بصورت ترکیبهایی از توابع بسل کروی هست. برای حالت $E > V_{01}$ جوابها بصورت زیر هستند:

$$R_{nl}(r) = \begin{cases} A_1 j_l(k_1 r) + B_1 n_l(k_1 r) & 0 < r < a1 \\ A_2 j_l(k_2 r) + B_2 n_l(k_2 r) & a1 < r < a2 \\ A_3 j_l(k_3 r) + B_3 n_l(k_3 r) & a2 < r < b \\ A_4 h_l^{(1)}(k_4 r) + B_4 h_l^{(2)}(k_4 r) & b < r \end{cases} \quad (5)$$

که در آن $h_l^{(1)}, n_l(r), j_l(r)$ و $h_l^{(2)}$ به ترتیب تابع بسل کروی، تابع نویمن، توابع هنکل نوع اول و نوع دوم هستند. عدد موج در هر ناحیه عبارت است از:

$$k_i = \sqrt{2m_i^*(E - V_i)/\hbar^2} \quad (6)$$

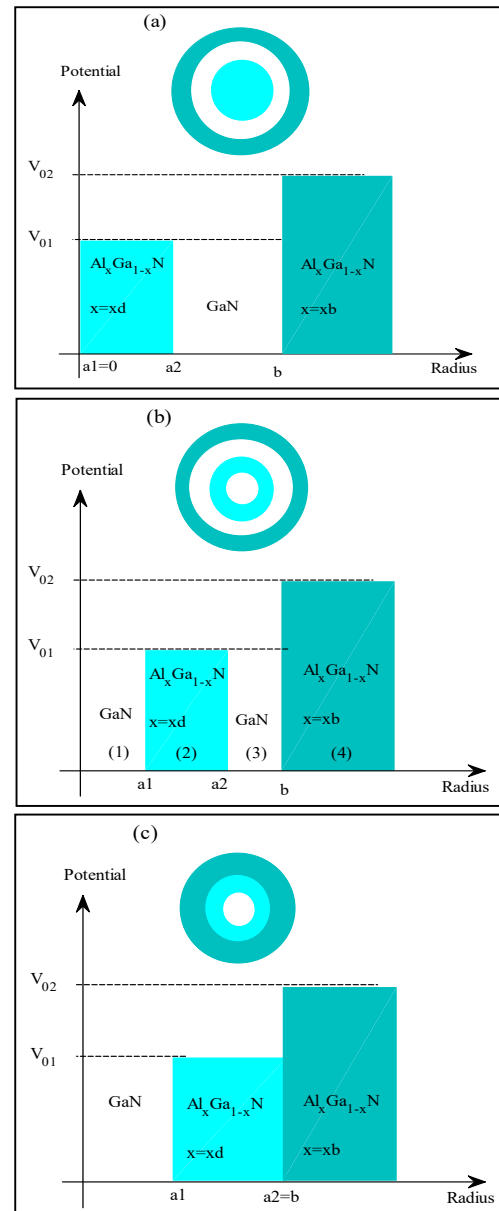
اندیس $i=1,2,3,4$ شماره ناحیه های مختلف داخل نقطه کوانتومی را مطابق شکل ۱ (b) مشخص می کنند. و برای حالت $E < V_{01}$ جوابها بصورت زیر داده می شوند:

$$R_{nl}(r) = \begin{cases} A_1 j_l(k_1 r) + B_1 n_l(k_1 r) & 0 < r < a1 \\ A_2 h_l^{(1)}(k_2 r) + B_2 h_l^{(2)}(k_2 r) & a1 < r < a2 \\ A_3 j_l(k_3 r) + B_3 n_l(k_3 r) & a2 < r < b \\ A_4 h_l^{(1)}(k_4 r) + B_4 h_l^{(2)}(k_4 r) & b < r \end{cases} \quad (7)$$

که اعداد موج در ناحیه های مختلف بصورت زیر تعریف می شوند:

$$\begin{aligned} k_{1,3} &= \sqrt{2m_{1,3}^* E / \hbar^2} \\ k_{2,4} &= \sqrt{2m_{2,4}^* (V_{2,4} - E) / \hbar^2} \end{aligned} \quad (8)$$

در معادلات (5) و (7) ضرایب $A_i (i=1,2,3,4)$ و $B_i (i=1,2,3,4)$ ثابتتهائی هستند که با استفاده از شرایط مرزی و پیوستگی خود تابع موج و مشتق آن در مرزها و شرط نرمالزاسیون تابع موج تعیین می شوند.



شکل ۱: شمای دو بعدی ساختار و پتانسیل نقطه کوانتومی کروی GaN/AlGaIn

حل معادله مستقل از زمان شرودینگر در مختصات کروی با تقریب جرم موثر برای توزیع پتانسیل فوق با استفاده از روش جداسازی متغیرها، انجام می گیرد. حاصلضرب جوابهای دو بخش زاویه ای (قطبی و سمتی) تابع موج، هماهنگیهای کروی است. بخش شعاعی معادله شرودینگر، معادله بسل کروی می باشد:

$$r^2 \frac{d^2 R}{dr^2} + 2r \frac{dR}{dr} + \left\{ \frac{2m_i^*}{\hbar^2} [E - V_i(r)] r^2 - \ell(\ell+1) \right\} R = 0 \quad (9)$$

که در آن چگالی حاملین بار با N ، و بار ویژه با q نشان داده شده است. همچنین $\omega_0 = (E_f - E_g)/\hbar$ و $\Gamma = 1/\tau$ به ترتیب، فرکانس تشدید بین حالت پایه و اولین حالت تحریک و آهنگ واهلش هستند. پذیرفتاری های نوری غیرخطی مرتبه سوم تولید هارمونیک سوم و اثر الکترواپتیک مربعی به ترتیب با قرار دادن $\omega_1 = -\omega_2 = \omega$ و $\omega_2 = -\omega$ و $\omega_1 = 0$ در رابطه ی (۱۳) بدست می آیند [۲۲-۱۸].

$$THG: \chi^{(3)}(-3\omega; \omega, \omega, \omega) = \frac{-2iNq^4 |\alpha_{fg}|^4}{\epsilon_0 \hbar^3} \times \left[\frac{1}{[i(\omega_0 - 3\omega) + \Gamma][\Gamma - 2i\omega]} \right] \times \left[\frac{1}{i(\omega_0 - \omega) + \Gamma} + \frac{1}{\Gamma - i(\omega + \omega_0)} \right] \quad (14)$$

$$QEOE: \chi^{(3)}(-\omega; 0, 0, \omega) = \frac{-2iNq^4 |\alpha_{fg}|^4}{\epsilon_0 \hbar^3} \times \left[\frac{1}{[i(\omega_0 - \omega) + \Gamma][\Gamma - i\omega]} \right] \times \left[\frac{1}{i\omega_0 + \Gamma} + \frac{1}{\Gamma - i(\omega + \omega_0)} \right]$$

پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم اثر الکترواپتیک مربعی دارای یک فرکانس تشدید در $\omega = \omega_0$ است. همچنین اندازه پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم با عکس مکعب ثابت واهلش متناسب می باشد، یعنی با افزایش ثابت واهلش (کاهش زمان واهلش) طیف پذیرفتاری نوری کاهش و پهن می شود. این رفتار سبب شده طراحی ها و ساختارهای نیم رسانای متعددی برای پاسخ به میدانهای فمتوثانیه ارائه شوند. لازم به ذکر است، با توجه به تقارن مرکزی نانوساختار مورد مطالعه، پذیرفتاری نوری مرتبه دوم صفر می باشد.

۳- نتایج و بحث

در این بخش نتایج محاسبات عددی تاثیر اندازه، موقعیت و پتانسیل نقص روی پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم اثر الکترواپتیک مربعی ارائه و مورد بحث قرار می گیرد. مقادیر عددی پارامترهای

$$R_{nl,1}(r)|_{r=a1} = R_{nl,2}(r)|_{r=a1} \quad (9)$$

$$\frac{1}{m_1^*} \frac{dR_{nl,1}(r)}{dr} \Big|_{r=a1} = \frac{1}{m_2^*} \frac{dR_{nl,2}(r)}{dr} \Big|_{r=a1}$$

$$R_{nl,2}(r)|_{r=a2} = R_{nl,3}(r)|_{r=a2} \quad (10)$$

$$\frac{1}{m_2^*} \frac{dR_{nl,2}(r)}{dr} \Big|_{r=a2} = \frac{1}{m_3^*} \frac{dR_{nl,3}(r)}{dr} \Big|_{r=a2}$$

$$R_{nl,3}(r)|_{r=b} = R_{nl,4}(r)|_{r=b} \quad (11)$$

$$\frac{1}{m_3^*} \frac{dR_{nl,3}(r)}{dr} \Big|_{r=b} = \frac{1}{m_4^*} \frac{dR_{nl,4}(r)}{dr} \Big|_{r=b}$$

$$\int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = 1 \quad (12)$$

از آنجائیکه تابع نویمن در مبدأ دارای تکینگی است بنابراین ضریب B_1 باید صفر باشد. همچنین تابع هنکل نوع دوم تابع موج کروی رونده به طرف بیرون را نشان می دهد، بایستی ضریب B_4 هم صفر باشد. معادلات (۹) تا (۱۲) تشکیل دستگاه معادلات خطی با هفت معادله و هفت مجهول $A_1, A_2, A_3, B_2, A_4, B_3$ و E را می دهند. برای حل این دستگاه معادلات روشهای متعددی وجود دارد. به عنوان نمونه در مرجع [۲۶] روش ماتریس هدف معرفی شده و نویسندگان مرجع [۲۷] برای محاسبه پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم این روش را بکار برده اند. یک روش مستقیم دیگر مدل ماتریس انتقال هست که توسط نویسندگان مرجع [۲۸] معرفی شده است. در این مقاله از روش عددی شوپتینگ [۲۹ و ۳۰] برای حل بخش شعاعی تابع موج استفاده شده است.

توابع موج و ترازهای انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته، با حل عددی معادله شرودینگر تعیین و سپس عناصر ماتریس گذار دوقطبی از رابطه $\alpha_{fg} = \langle \psi_f | r | \psi_g \rangle$ محاسبه می شوند. با استفاده از تئوری ماتریس چگالی، پذیرفتاری نوری مرتبه سوم مربوط به گذارهای حالت پایه و اولین حالت برانگیخته از رابطه زیر محاسبه می شود [۱۸، ۲۰، ۲۱، ۳۱ و ۳۲]:

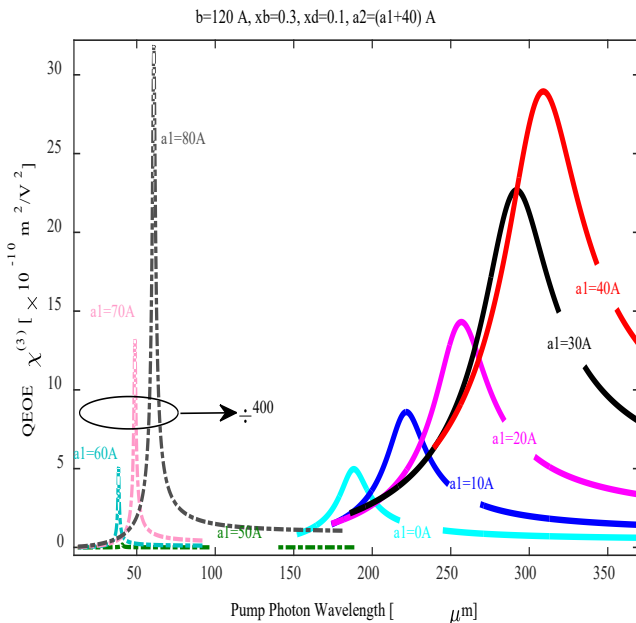
$$\chi^{(3)}(-2\omega_1 + \omega_2; \omega_1, \omega_1, -\omega_2) = \frac{-2iNq^4 |\alpha_{fg}|^4}{\epsilon_0 \hbar^3} \times \left[\frac{1}{[i(\omega_0 - 2\omega_1 + \omega_2) + \Gamma][i(\omega_2 - \omega_1) + \Gamma]} \right] \times \left[\frac{1}{i(\omega_0 - \omega_1) + \Gamma} + \frac{1}{i(\omega_2 - \omega_0) + \Gamma} \right] \quad (13)$$

در شکل ۲ مشهود نیست. با افزایش بیشتر شعاع چاه اول، دوباره انتقال به سرخ طول موج تشدید و افزایش اندازه پذیرفتاری نوری اتفاق می‌افتد.

ماده مورد استفاده نقطه کوانتومی کروی برای انجام محاسبات عددی در جدول ۱ نشان داده شده‌است.

جدول ۱: پارامترهای $Al_xGa_{1-x}N$ [۱۵]

پارامتر	مقدار (واحد)
$0.252x + 0.228 (m_0)$	جرم موثر الکترون m^*
$6.13x + (1-x) \times 3.42 - x(1-x)(eV)$	گاف انرژی $E_g(x)$
$0.7 \times [E_g(x) - E_g(0)](eV)$	باند آفست $\Delta E_c(x)$
N چگالی حاملین بار	$1 \times 10^{24} (m^{-3})$
$\hbar\Gamma$ ثابت واهلش	$0.3 (meV)$
ثابت گذردهی الکتریکی	$(-0.3x + 10.4)\epsilon_0$



شکل ۲: پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم برای ضخامت پوسته ی نقص 40A با تغییر موقعیت نقص بعنوان پارامتر

مشخص است، به ازای $a1=0$ نتایج مرجع [۱۸] بدست آمده، و همچنین نتایج مراجع [۲۰، ۲۱ و ۳۳] وقتی بدست می آیند که پوسته نقص به دیواره پله پتانسیل می رسد یعنی پهنای چاه دوم صفر می شود ($a2=120A$). تنظیم پذیر بودن موقعیت طول موج تشدید و اندازه پذیرفتاری نوری مرتبه سوم نقطه کوانتومی مورد مطالعه با تغییر موقعیت پوسته ی نقص نتیجه مهمی است. با تغییر موقعیت نقص در داخل نقطه کوانتومی محل محصورشدگی الکترونها تغییر کرده و باعث تغییر اختلاف انرژی ترازهای حالت پایه و اولین حالت تحریک می شود. و به تبع آن توابع موج نیز تغییر کرده و موجب تغییر عناصر ماتریس گذار دوقطبی شده و نهایتاً طول موج تشدید و اندازه پذیرفتاری نوری تغییر می کنند.

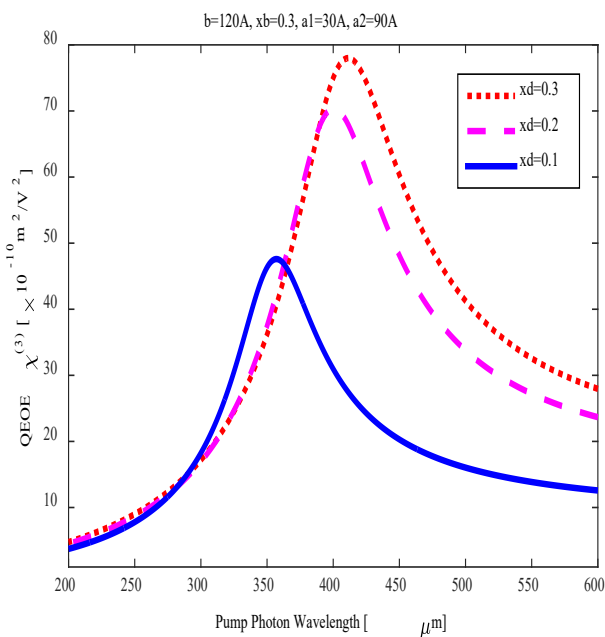
برای بررسی تاثیر پتانسیل پوسته ی نقص روی پذیرفتاری نوری غیرخطی اثر الکترواپتیک مربعی، برای شرایط هندسی شکل ۲ در وضعیت متقارن بودن موقعیت نقص، پتانسیل آنرا تغییر داده و نتایج را در شکل ۳ نشان داده ایم. با افزایش ارتفاع پتانسیل نقص، اندازه پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم افزایش و طول موج تشدید

شکل ۲ تغییرات اثر الکترواپتیک مربعی برحسب طول موج فوتون پمپ برای نقطه کوانتومی با شعاع $b=120A$ را نشان می‌دهد. در این شکل پهنای نقص $a2-a1=40A$ ، کسر مولی آلومینیوم برای سد پتانسیل $xb=0.3$ و برای نقص $xd=0.1$ انتخاب شده‌است. با تغییر دادن شعاع چاه پتانسیل اول، تا رسیدن موقعیت پوسته ی نقص به وضعیت تقارن نمودارها با خط ممتد و برای شعاعهای چاه اول بزرگتر از $a1=40A$ بصورت خط بریده-بریده نشان داده شده‌اند. برای اینکه بتوانیم پیک نمودارهای مربوط به شعاعهای چاه اول بزرگتر از $a1=40A$ را در شکل ببینیم پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم مربوطه را چهارصد برابر کرده‌ایم.

با افزایش شعاع چاه اول یعنی تغییر موقعیت نقص طول موج تشدید اثر الکترواپتیک مربعی به سمت طول موجهای بزرگتر انتقال می‌یابد. و اندازه پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم اثر الکترواپتیک مربعی نیز افزایش می‌یابد. وقتی مقدار شعاع چاه اول به $a1=40A$ می‌رسد (وضعیت متقارن پوسته ی نقص)، انتقال به سرخ متوقف شده و اندازه پذیرفتاری نوری غیرخطی به حداکثر مقدار خود ($30 \times 10^{-10} m^2/V^2$) می‌رسد. بعد از اینکه موقعیت

نقص از وضعیت متقارن گذشت، طول موج تشدید و اندازه پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم به مقدار خیلی زیادی کاهش می‌یابد. بطوریکه برای $a1=50A$ اندازه پیک پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم به $4.541 \times 10^{-14} m^2/V^2$ کاهش می‌یابد و لذا

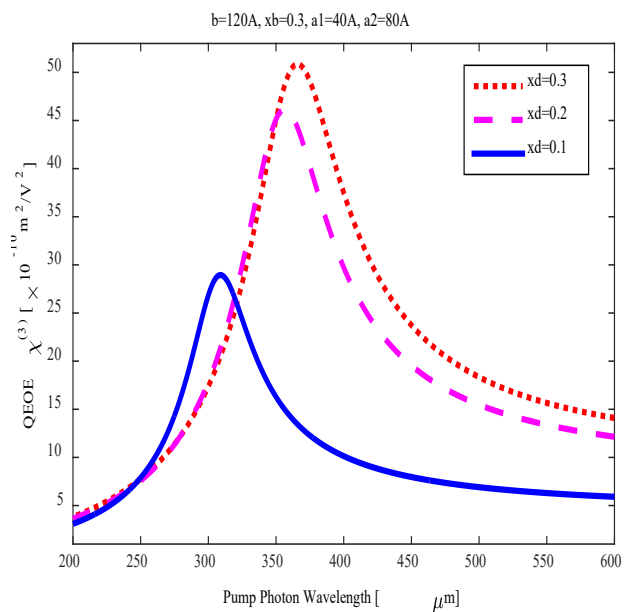
داده‌ایم. در اینجا نیز برای وضعیت متقارن موقعیت پوسته‌ی نقص، وقتی پتانسیل آن با پتانسیل سد محصورکننده برابر می‌شود بیشترین مقدار اثر الکترواپتیک مربعی بدست می‌آید. در ضمن با افزایش ضخامت پوسته‌ی نقص اندازه پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم افزایش می‌یابد.



شکل ۴: پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم برای ضخامت پوسته‌ی نقص 60A در حالت موقعیت متقارن نقص به ازای های متغیر

مقایسه نتایج پذیرفتاری نوری غیرخطی نقطه کوانتومی با شعاع 120A و 150A نشان می‌دهد با افزایش شعاع نقطه کوانتومی طول موج تشدید و پذیرفتاری نوری غیرخطی افزایش می‌یابد. با افزایش شعاع نقطه کوانتومی مطابق با اصول اولیه مکانیک کوانتومی انرژی ترازها کاهش و در نتیجه طول موج تشدید افزایش می‌یابد. همچنین عناصر ماتریس گذار دوقطبی افزایش یافته و موجب افزایش اندازه پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم اثر الکترواپتیک مربعی می‌شود.

به سمت طول موجهای بزرگتر انتقال یافته‌است. در شرایط وضعیت متقارن موقعیت پوسته‌ی نقص، بیشترین مقدار پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم وقتی قابل حصول هست که ارتفاع پتانسیل نقص برابر ارتفاع سد پتانسیل باشد.



شکل ۳: پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم برای ضخامت پوسته‌ی نقص 40A در حالت موقعیت متقارن نقص به ازای های متغیر

در شکل ۴ تغییرات پذیرفتاری نوری غیرخطی اثر الکترواپتیک مربعی نقطه کوانتومی برحسب طول موج فوتون پمپ برای ضخامت پوسته نقص برابر با 60A و در وضعیت متقارن موقعیت پوسته‌ی نقص نشان داده شده‌است. در این مورد نیز، بیشترین مقدار پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم اثر الکترواپتیک مربعی وقتی بدست آمده که ارتفاع پتانسیل نقص و سد پتانسیل محصورکننده با هم برابر باشند. وقتی نتایج بدست آمده در این شکل را با شکل‌های ۲ و ۳ مقایسه می‌کنیم متوجه می‌شویم افزایش ضخامت پوسته‌ی نقص باعث افزایش چشمگیر پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم می‌شود.

برای بررسی تاثیر اندازه نقطه کوانتومی روی خواص غیرخطی اپتیکی نانوساختار مورد مطالعه در این مقاله، شعاع نقطه کوانتومی را به $b=150A$ افزایش دادیم و به ازای دو مقدار متفاوت ضخامت پوسته‌ی نقص (50A و 70A) پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم اثر الکترواپتیک مربعی را محاسبه و نتایج را شکل ۵ نشان

اپتیک مربعی بررسی شد.

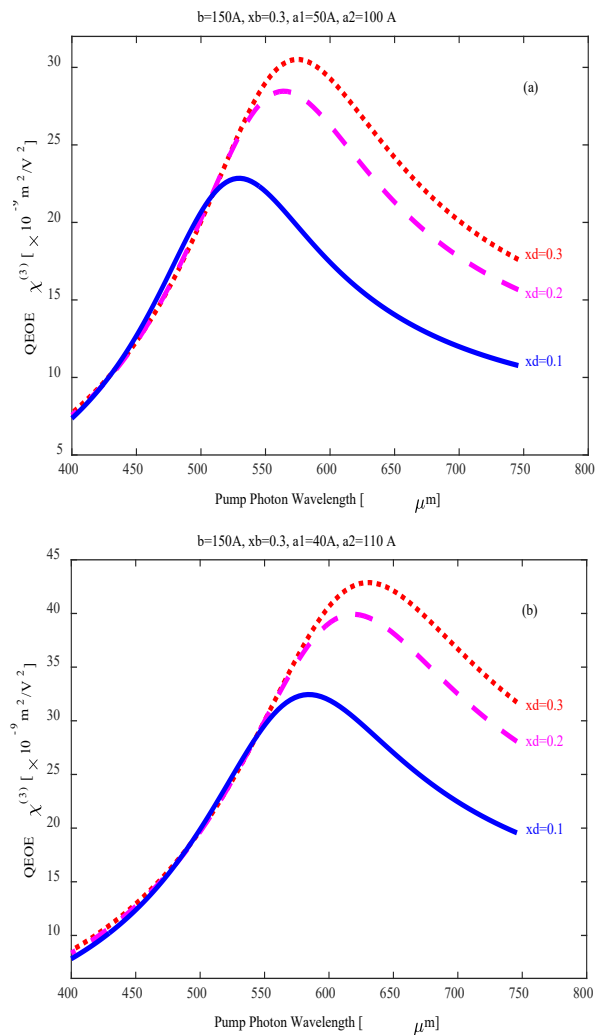
نتایج نشان می‌دهند با افزایش شعاع نقطه کوانتومی از 120A به 150A اندازه پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم حدود پنج برابر افزایش می‌یابد. طبق اصول اولیه مکانیک کوانتومی با افزایش پهنای چاه انرژی ترازها کاهش می‌یابد. بنابراین، طول موج تشدید و اندازه پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم اثر الکترواپتیک مربعی افزایش می‌یابند. با افزایش ضخامت و ارتفاع پوسته‌ی نقص، پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم افزایش و موقعیت پیک آن به طول موج های بالاتر (سرخ) انتقال پیدا می‌کند. یک نتیجه مهم حاصل از این کار پژوهشی تغییر اندازه پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم اثر الکترواپتیک مربعی با موقعیت نقص است. تغییر موقعیت نقص باعث تغییر شعاع چاهها می‌شود. وقتی پوسته نقص در موقعیت متقارن قرار دارد بیشترین مقدار پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم قابل حصول هست. دستیابی به اثر الکترواپتیک مربعی از مرتبه $10^{-9} \text{ m}^2/\text{V}^2$ می‌تواند اهمیت زیادی از نقطه نظر طراحی آشکارسازهای مادون قرمز مبتنی بر نقاط کوانتومی داشته باشد.

تشکر و قدردانی

این مقاله حاصل طرح تحقیقاتی با قرارداد شماره ۱۳-۱۱-۵-۶۴۳۱ است که با بودجه پژوهشی و حمایت مالی دانشگاه آزاد اسلامی واحد تبریز به انجام رسیده است. لذا نویسندگان مقاله از معاونت محترم پژوهش و فناوری دانشگاه آزاد اسلامی واحد تبریز تشکر و قدردانی می‌کنند.

مراجع

- [1] A. Rahmani, A. Rostami, H. Rasooli-Saghai, and M. Moravvej-Farshi, "Ultrafast GaN/AlN modulator based on quantum dot for terabit all-optical communication," *Optik*, 125, 3844-3851, 2014.
- [2] G. F. Yang, Q. Zhang, J. Wang, Y. N. Lu, P. Chen, Z.L. Wu, S.M. Gao, and G.Q. Chen, "InGaN/GaN multiple quantum wells on selectively grown GaN microfacets and the applications for phosphor-free white light-emitting diodes,"



شکل ۵: پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم نقطه کوانتومی با شعاع 150A برای موقعیت متقارن نقص به ازای xd های متفاوت و ضخامت پوسته‌ی نقص 50A(a) , 70A(b)

۴- نتیجه گیری

در این مقاله برای مدیریت و افزایش اندازه پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم اثر الکترواپتیک مربعی نقطه کوانتومی کروی GaN/AlGaIn یک نانو ساختار جدیدی حاوی پوسته‌ی نقص دار معرفی شد. معادله شرودینگر با تقریب جرم موثر حل و بعد از تعیین توابع موج و انرژی ترازهای حالت پایه و تحریکی اول، عناصر ماتریس گذار دوقطبی و پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم اثر الکترواپتیک مربعی بصورت تابعی از طول موج فوتون پمپ محاسبه شدند. تاثیر پارامترهای ساختاری مانند اندازه نقطه کوانتومی، ضخامت، پتانسیل و موقعیت پوسته‌ی نقص روی طول موج تشدید و اندازه پذیرفتاری نوری غیرخطی مرتبه سوم اثر الکترو

GaN/Al_{0.5}Ga_{0.5}N quantum dot based light emitting diodes,” Journal of Crystal Growth, 363, 282-286, 2013.

[13] P. Navaeipour, and A. Asgari, “Fully numerical analysis of III-Nitride based quantum dot lasers considering the quantum dots size distribution,” Optik, 126, 119-122, 2015.

[14] S. Li, Q. Gong, C. Cao, X. Wang, J. Yan, Y. Wang, and H. Wang, “The developments of InP-Based quantum dot lasers,” Infrared Physics & Technology, 60, 216-224, 2013.

[15] A. Asgari, M. Kalafi, and L. Faraone, “The effects of GaN capping layer thickness on two-dimensional electron mobility in GaN/AlGaIn/GaN heterostructures,” Physica E, 25, 431-437, 2005.

[16] Y. Jiao, X. Gao, J. Lu, Y. Chen, J. Zhou, and X. Li, “A novel method for PbS quantum dot synthesis,” Materials letters, 72, 116-118, 2012.

[17] S. M. Hosseini, and A. Vahedi, “Simulation of nonlinear optical and self-focusing effects in AlGaIn/GaN spherical quantum dot,” Optik, 130, 1222-1228, 2017.

[18] A. Rostami, and H. Rasooli-Saghai, “A novel proposal for ultra-high optical nonlinearity in GaN/AlGaIn spherical centered defect quantum dot(SCDQD),” Microelectronics Journal, 38, 342-351, 2007.

[19] H. Rasooli-Saghai, N. Sadoogi, A. Rostami, and H. Baghban, “Ultra-high detectivity room temperature THz-Ir photodetector based on resonant tunneling spherical centered defect quantum dot (Rt-SCDQD),” Optics Communications, 282, 3499-3508, 2009.

[20] M. Kouhi, A. Vahedi, A. Akbarzadeh, Y. Hanifehpour, S.W. Joo, “Investigation of quadratic electro-optic effects and electro-absorption process in GaN/AlGaIn spherical quantum dot,” Nanoscale research letters, 9, 1-6, 2014.

[21] A. Vahedi, M. Koohi, and A. Rostami, “Third order susceptibility enhancement using GaN based composite nanoparticle,” Optik, 124, 6669-6675, 2013.

[22] A. Rostami, H. Rasooli-Saghai, and H. Baghban, “A proposal for enhancement of optical

Reviews in Physics, 1, 101-119, 2016.

[3] A. Valizadeh, H. Mikaeili, M. Samiei, S.M. Farkhani, N. Zarghami, M. Kouhi, A. Akbarzadeh, and S. Davaran, “Quantum dots: synthesis, bioapplications, and toxicity,” Nanoscale research letters, 7, 1-14, 2012.

[4] S. Strite, and H. Morkoç, “GaN, AlN, and InN: A Review,” Journal of Vacuum Science & Technology B, 10, 1237-1266, 1992.

[5] F. Sizov, and A. Rogalski, “Thz Detectors,” Progress in Quantum Electronics, 34, 278-347, 2010.

[6] J. Sheu, P. C. Chen, C. L. Shin, M.L.Lee, P.H. Liao, and W.C. Lai, “Manganese-doped AlGaIn/GaN heterojunction solar cells with intermediate band absorption,” Solar Energy Materials and Solar Cells, 157, 727-732, 2016.

[7] F. Qian, Y. Li, S. Gradečak, H.G. Park, Y. Dong, Y. Ding, Z.L. Wang, and C.M. Lieber, “Multi-quantum-well nanowire heterostructures for wavelength-controlled lasers,” Nature materials, 7, 701-706, 2008.

[8] S. Nakamura, T. Mukai, and M. Senoh, “High-power GaN PN junction blue-light-emitting diodes,” Japanese Journal of Applied Physics, 30, 1998-2001, 1991.

[9] E. Monroy, F. Guillot, S. Leconte, L. Nevou, L. Doyennette, M. Tchernycheva, F.H. Julien, E. Baumann, F.R. Giorgetta, and D. Hofstetter, “Latest developments in GaN-based quantum devices for infrared optoelectronics,” Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 19, 821-827, 2008.

[10] Y. Li, F. Qian, J. Xiang, and C.M. Lieber, “Nanowire electronic and optoelectronic devices,” Materials today, 9, 18-27, 2006.

[11] T. Frost, A. Banerjee, K. Sun, S.L. Chuang, and P. Bhattacharya, “InGaIn/GaN quantum dot red laser,” IEEE Journal of Quantum Electronics, 49, 923-931, 2013.

[12] J. Brault, B. Damilano, A. Kahouli, S. Chenot, M. Leroux, B. Vinter, and J. Massies, “Ultra-Violet

- [33] M. Kouhi, "Electric field effect on the quadratic electro optic effects and electro absorption in GaN/AlGaIn spherical quantum dot," *Optik*, 127, 3379-3382, 2016.
- nonlinearity in GaN/AlGaIn centered defect quantum box (CDQB) nanocrystal," *Solid-State Electronics*, 52, 1075-1081, 2008.
- [23] S. Sergent, S. Kako, M. Bürger, T. Schupp, D. J. As, and Y. Arakawa, "Optical properties of wurtzite and zinc-blende GaN/AlN quantum dots," *Journal of Vacuum Science & Technology B*, 22, 2190-2194, 2004.
- [24] C. Xia, Z. Zeng, and S. Wei, "Electric field effects on optical properties in zinc-blende InGaIn/GaN quantum dot," *Journal of Luminescence*, 131, 623-627, 2011.
- [25] S. Sergent, S. Kako, M. Burger, T. Schupp, D. J. As, and Y. Arakawa, "Excitonic complexes in single zinc-blende GaN/AlN quantum dots grown by droplet epitaxy," *Applied Physics Letters*, 105, 141112, 2014.
- [26] Y. Fang, M. Xiao, and D. Yao, "Quantum size dependent optical nutation in CdSe/ZnS/CdSe quantum dot quantum well," *Physica E*, 42, 2178-2183, 2010.
- [27] A. Bahari, and F. R. Moghadam, "Quadratic electro-optic effect and electro-absorption process in CdSe-ZnS-CdSe structure," *Physica E*, 44, 782-785, 2012.
- [28] P. Harrison, and A. Valavanis. "Quantum wells, wires and dots: Theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures" John Wiley & Sons; 2016.
- [29] P. Harrison. "Computational methods in physics, chemistry and biology: An introduction" John Wiley & Sons; 2001.
- [30] J. P. Killingbeck, and G. Jolicard, "Two simple eigenvalue shooting algorithms," *Physics Letters A*, 172, 313-315, 1993.
- [31] R. W. Boyd, "Nonlinear Optics" Academic press; 2003.
- [32] M. Cristea, A. Radu, and E. Niculescu, "Electric field effect on the third-order nonlinear optical susceptibility in inverted core-shell nanodots with dielectric confinement," *Journal of Luminescence*, 143, 592-599, 2013.

Influence of Size and Position of Defect on Quadratic Electro Optic Effect of GaN/AlGaIn Spherical Quantum Dot

M. Kouhi^{1*}, A. Vahedi¹, A. Akbarzadeh²

¹Department of Physics, Tabriz Branch, Islamic Azad University, Tabriz, Iran.

²Department of Medical Nanotechnology, Faculty of Advanced Medical Science, Tabriz University of Medical Sciences, Tabriz, Iran.

Abstract: In this paper, a new spherical quantum dot is proposed to management and enhancement of third order nonlinear optical susceptibility of quadratic electro optic effect. This nanostructure is containing defective shell surrounding with two well. The size of quantum dot, thickness, position and potential of defect have a significant effect on third order optical susceptibility. By numerically solving of Schrödinger equation in the effective mass approximation the third order nonlinear optical susceptibility were calculated. The results are shown that with increasing of dot size the third order nonlinear optical susceptibility is increased. Also, with increasing of defect shell thickness the third order nonlinear optical susceptibility is increased and resonance wavelength is red shifted. The most value of third order optical susceptibility is available when in the symmetric condition of defect position, the defect potential becomes equal to the barrier potential.

Keywords: Quadratic electro-optic effect, Optical susceptibility, Defect, quantum dot