К теории линейных и нелинейных восприимчивостей полупроводниковых сферических квантовых точек

К.А. Корабаев[1], О.Б. Исмаилова[*2,3], У.К. Сапаев[1]

[1]Ташкентский государственный технический университет, ул. Университетская 4, 100095, Ташкент, Узбекистан
[2]Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, ул. Дурмон йули 33, 100125, Ташкент, Узбекистан
[3]Узбекско-японский молодёжный центр инноваций, ул. Университетская 2Б, 100195, Ташкент, Узбекистан

Получена 29.10.2021, после рецензирования 28.02.2022

* Corresponding author: e-mail:oismailova56@gmail.com,Phone +99890 9194890

Для изолированных сред, в которых электроны связаны с обратным квадратичным потенциалом Гельмана, с использованием уравнения Шредингера получены аналитические выражения для линейных и нелинейных оптических восприимчивостей сферических квантовых точек. Для решения полученных уравнений использовали метод Никифорова-Уварова. Выведены аналитические выражения для коэффициентов линейного и нелинейного поглощения, а также изменения показателя преломления квантовых точек. При этом элементы матрицы электрического дипольного момента $\Delta l = \pm 1$, а также $\Delta m = 0$ выбраны согласно правилам отбора. Представлены конкретные зависимости характеристик квантовых точек на примере арсенида галлия (GaAs).

Ключевые слова: уравнение Шредингера; квантовые точки; линейная и нелинейная оптическая восприимчивость; матрица плотности; дипольный момент.

The equations for linear and nonlinear optic secceptibilities of spherical quantum dots for isolated media in which electrons connected with Gelman reverse quadratical potential have been obtained. For their solving we used Nikiforov-Uvarov method. The analytical expressions for linear and nonlinear absorption coiffients and also refractive index changes of quantum dots have been derived. In calculations the electric dipole moment matrix elements, $\Delta l = \pm 1$, $\Delta m = 0$, according to the selection rules been chosen. The concrete dependences for quantum dots characteristics in gallium arsenide (GaAs) sample have been presented.

Keywords: Schrödinger equation; quantum dots; linear and nonlinear optical susceptibility; density matrix; dipole moment.

DOI: https//doi.org/10.52304/.v24i1.303

I. Введение

Технология получения полупроводниковых квантовых точек (КТ) на протяжении последних лет привлекает особое внимание научного сообщества. Основная причина этого заключается в том, что размер КТ влияет на его различные физические и химические свойства. В то же время, меняя размер КТ, можно управлять его физическими свойствами.

В наноразмерных полупроводниковых материалах можно ограничить движение в пространстве электронов, находящихся в зоне проводимости, и тем самым можно создать управляемые нелинейные оптические эффекты, необходимые при разработке оптоэлектронных устройств.

На сегодняшний день одной из актуальных задач нанотехнологий является изучение линейных и нелинейных оптических свойств квантовых ям, квантовых проволок и КТ [1, 2].

Как известно, в полупроводниках, состоящих из КТ, уровни энергии свободных электронов в зоне проводимости становятся дискретными. При воздействии внешнего поля на КТ с дискретными

уровнями энергии электронов, находящихся в зоне проводимости, происходит поглощение фотонов, и электроны в них начинают перемещаться с более низкого уровня на более высокий. Если энергия падающего фотона будет равна разности энергий энергетических уровней электрона, то это приводит к значительному изменению диэлектрической проницаемости материала и впоследствии изменятся значения коэффициента поглощения и показателя преломления КТ [3, 4], которое позволяет контролировать размеры КТ.

Целью настоящей работы является теоретическое исследование изменений коэффициента поглощения и показателя преломления сферических КТ. При этом использовали обратный квадратичный потенциал Гельмана и для уравнения Шрёдингера воспользовались методом Никифорова-Уварова (НУ) [5, 6].

II. Теоретическая часть

В рамках приближения эффективной массы для свободного электрона уравнение Шредингера в сферических координатах может быть выражено как [4]:

Будем исходить из уравнения Шредингера для свободного электрона в рамках приближения эффективной массы, которое в сферических координатах может иметь вид [4]:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\right.$$
$$\left.+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\psi_{nlm}(r,\theta,\phi)+ \quad (1)$$
$$+V(r)\psi_{nlm}(r,\theta,\phi)=E_{nl}\psi_{nlm}(r,\theta,\phi).$$

Здесь μ – эффективная масса электрона, $\hbar$ – постоянная Планка, n, l, m – основные, орбитальные и магнитные квантовые числа соответственно. После интегрирования по угловым координатам θ и ϕ из (1) получим уравнение для радиальнойчасти волновой функции $R(r)$:

$$\frac{d^2R_{nl}(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR_{nl}(r)}{dr}+$$
$$+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E_{nl}-V(r)-\frac{\hbar^2l(l+1)}{2\mu}\frac{1}{r^2}\right]R_{nl}(r)=0. \quad (2)$$

В качестве потенциала $V(r)$ выбираем обратный квадратичный потенциал Гельмана:

$$V(r)=V_0\left[\frac{1}{2}-2\frac{R_0}{r}+\left(\frac{R_0}{r}\right)^2\right], \quad (3)$$

где V_0 – высота потенциального барьера для электрона, R_0 – радиус КТ.

Подставляя выражение (3) в уравнение (2) и используя метод НУ, получим следующее выражение для радиальной части волновой функции $R_{nl}(r)$:

$$R_{nl}(r)=N_{nl}r^{(\chi_l-1)/2}\exp(-C_{nl}r)L_n^{\chi_l}(2C_{nl}r), \quad (4)$$

здесь χ_l и C_{nl} – инвариантные константы; N_{nl} – константа нормировки волновой функции.

Процесс поглощения фотона сопровождается переходом электрона из основного состояния на возбужденное. Будем считать, что падающие фотоны создаются электромагнитным излучением, поляризация которого лежит в направлении оси z. Внешнее электромагнитное поле можно выразить следующим образом:

$$E(t)=E_0\cos(\omega t)=\tilde{E}\exp(i\omega t)+\tilde{E}^*\exp(-i\omega t), \quad (5)$$

где $\tilde{E}$ и ω – амплитуда и циклическая частота электрического поля. Матрица плотности ρ квантовой системы зависит от времени следующим образом[3, 4].

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}\left[H_0-ezE(t),\rho\right]-\Gamma\left(\rho-\rho^{(0)}\right), \quad (6)$$

где H_0 – гамильтониан системы, e – заряд электрона, $\rho^{(0)}$ – невозбуждённая матрица плотности, а функция Г описывает процесс релаксации электрона (соударения, спонтанное излучение и др.), приводящий в целом к затуханию дипольногомомента.

Поляризация $P(t)$, возникающая из-за электрического поля, выражается следующим образом:

$$P(t)=\varepsilon_0\chi(\omega)\tilde{E}\exp(-i\omega t)+\varepsilon_0\chi(-\omega)\tilde{E}^*\exp(i\omega t)=$$
$$=(1/\Omega)Tr(\rho M), \quad (7)$$

здесь M – оператор дипольного момента, $\chi(\omega)$ – линейная оптическая восприимчивость, Ω – емкость системы; ε_0 – электрическая постоянная.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2022 г.

Из выражения (7) можно получить соотношения для коэффициентов линейного и нелинейного поглощения.

Для линейного поглощения имеем:

$$\alpha^{(1)}(\omega)=\omega\sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon}}\,\frac{\delta_v\hbar\Gamma_{12}|M_{21}|^2}{\left(E_{21}-\hbar\omega\right)^2+\left(\hbar\Gamma_{12}\right)^2}. \qquad (8)$$

(μ_0 – вакуумная проницаемость, $\varepsilon = n_r^2\varepsilon_0$ –проницаемость материала, n_r – показатель преломления).

Коэффициент нелинейногопоглощения имеет вид:

$$\alpha^{(3)}(\omega,I)=-\omega\sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon}}\,\frac{I}{2\varepsilon_0 n_r c}\,\frac{\sigma_v\hbar\Gamma_{12}|M_{21}|^2}{\left[(E_{21}-\hbar\omega)^2-(i\hbar\Gamma_{12})^2\right]^2}\times$$

$$\left\{4|M_{21}|^2-\frac{|M_{22}-M_{11}|^2\left[3E_{21}^2-4E_{21}\hbar\omega+\hbar^2(\omega^2-\Gamma_{12})\right]}{E_{21}^2-(i\hbar\Gamma_{12})^2}\right\}, \qquad (9)$$

здесь $M_{ij}=\langle\psi_{n_il_im_i}\left|ez\right|\psi_{n_jl_jm_j}\rangle$ – матричные элементы электродипольных моментов, $E_{ij}=E_i-E_j$ – разность энергий между состояниями, $\hbar\omega$ – энергия фотона, σ_v – плотность потока фотонов.

Электрический дипольный момент матричных элементов рассчитывается как

$$M_{ij}=e\int\psi^*_{n_il_im_i}(r,\theta,\phi)z\psi_{n_jl_jm_j}(r,\vartheta,\phi)r^2dr\sin\theta d\theta d\phi \qquad (10)$$

Здесь $z = r\cos\theta$.

В таком случае волновая функция принимает вид:

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi)=N_{nl}r^{(\chi_l-1)/2}e^{-C_{nl}}L_n^{\chi_l}(2C_{nl}r). \qquad (11)$$

Элементыматрицыэлектрическогодипольного момента отличны от нуля только в случае $\Delta l = \pm1$ по правилам отбора Δm=0 [8, 9]. Здесь из-за сферической симметрии системы при j=iM_{ii}=0 нелинейное оптическое поглощение третьего порядка $\alpha^{(3)}(\omega)$ является отрицательным и пропорциональным интенсивности [10, 11]. Таким образом, коэффициент поглощения может быть представлен как сумма линейного и нелинейного коэффициентов поглощения.

Из (8) получим выражение для изменения линейной части показателя преломления:

$$\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r}=\frac{\delta_v|M_{21}|^2}{2n_r^2\varepsilon_0}\,\frac{E_{21}-\hbar\omega}{\left(E_{21}-\hbar\omega\right)^2+\left(\hbar\Gamma_{12}\right)^2}, \qquad (12)$$

Выражение для изменения нелинейного показателя преломления КТ можно получить из соотношения (9):

$$\frac{\Delta n^{(3)}(\omega)}{n_r}=-\frac{\delta_v|M_{21}|^2}{4n_r^2\varepsilon_0}\,\frac{\mu_0 cI}{\left[(E_{21}-\hbar\omega)^2+(\hbar\Gamma_{12})^2\right]^2}\times\left\{4(E_{21}-\hbar\omega)|M_{21}|^2-\frac{|M_{22}-M_{11}|^2}{(E_{21}-\hbar\omega)^2+(\hbar\Gamma_{12})^2}\left[(E_{21}-\hbar\omega)\times\right.\right.$$

$$\left.\left.\times\left[E_{21}(E_{21}-\hbar\omega)-(\hbar\Gamma_{12})^2\right]-(\hbar\Gamma_{12})^2(2E_{21}-\hbar\omega)\right]\right\}. \qquad (13)$$

Из этого выражения становится очевидным, что изменение показателя преломления является отрицательным и прямо пропорциональным интенсивности падающего поля.

III. Обсуждение результатов для КТ арсенида галлия

Будем использовать параметры, соответствующие арсениду галлия: μ = 0.067 m_e, σ_v =5×10^{22} м$^{-3}$, n_r = 3.2 и $\Gamma_{12} = 1/T_{12}$, T_{12} = 0.14 пс [6, 7] и рассмотрим случаи n = 0, l = 0 и n = 0, l = 1. Для простоты общий ограничивающий потенциал выбираем в виде квадрата.

На рис. 1 представлено изменение потенциала связи электрона в КТ от расстояния r (см. уравнение (3)) при фиксированном значении

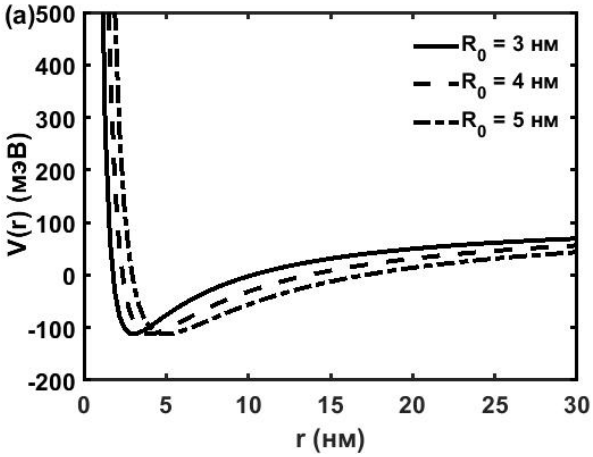


Рисунок 1а. Зависимость потенциала связи электрона $V(r)$ в КТ от расстояния r при фиксированном значении V_0=224.46 мэВ.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2022 г.

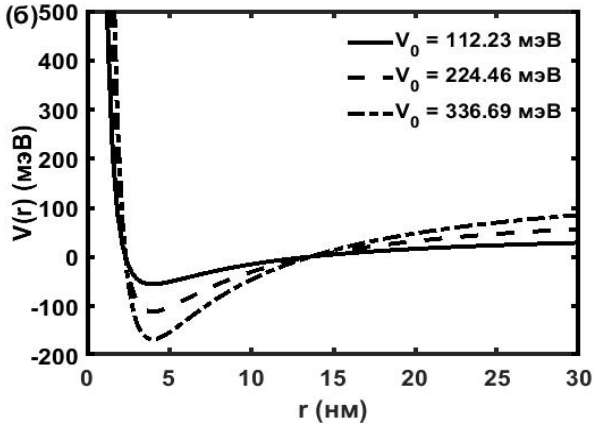


Рисунок 1б. Зависимость потенциала связи электрона $V(r)$ в КТ от расстояния r при фиксированном значении R_0=4 нм.

высоты потенциального барьера, но с различными значениями радиуса КТ (рис. 1а), а также при фиксированном размере КТ, но с различными значениями параметра V_0 (рис. 1б). Видно, что потенциал можно представить в виде непрерывной функции, определяющейся радиусом КТ и шириной потенциального барьера.

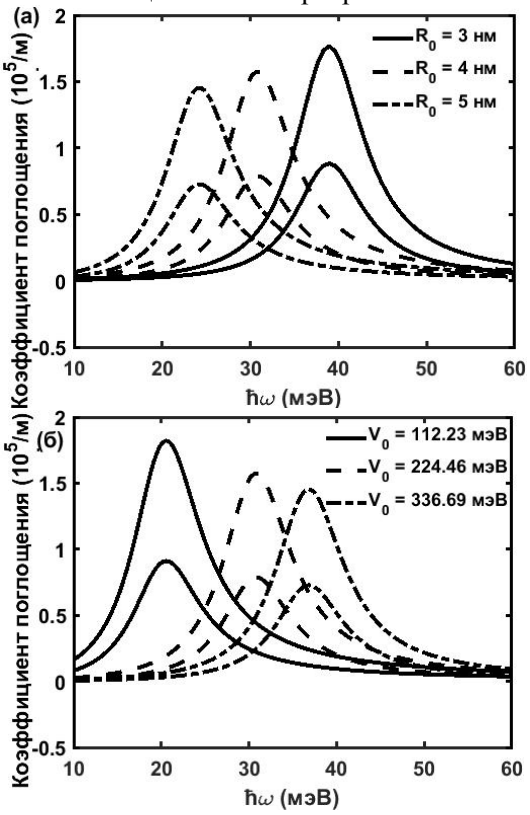


Рисунок 2. Коэффициенты линейного (верхние кривые) и суммарного поглощения (нижние кривые) для различных значений радиуса R_0.(а) и потенциала V_0 (б) от энергии фотона. $I = 0.8\times10^9$ Вт/м^2.

На рис. 2 представлено влияние радиуса и потенциала КТ на коэффициенты линейного и полного поглощения. Когда энергия фотона $\hbar\omega$ совпадает с разностью энергий основного и возбужденного уровней коэффициенты поглощения имеют максимальное значение. С увеличением высоты потенциала пики коэффициентов поглощения смещаются в сторону более высоких энергий. Уменьшение матричного элемента M_{21} приводит к уменьшению амплитуды коэффициента нелинейно-оптического поглощения третьего порядка.

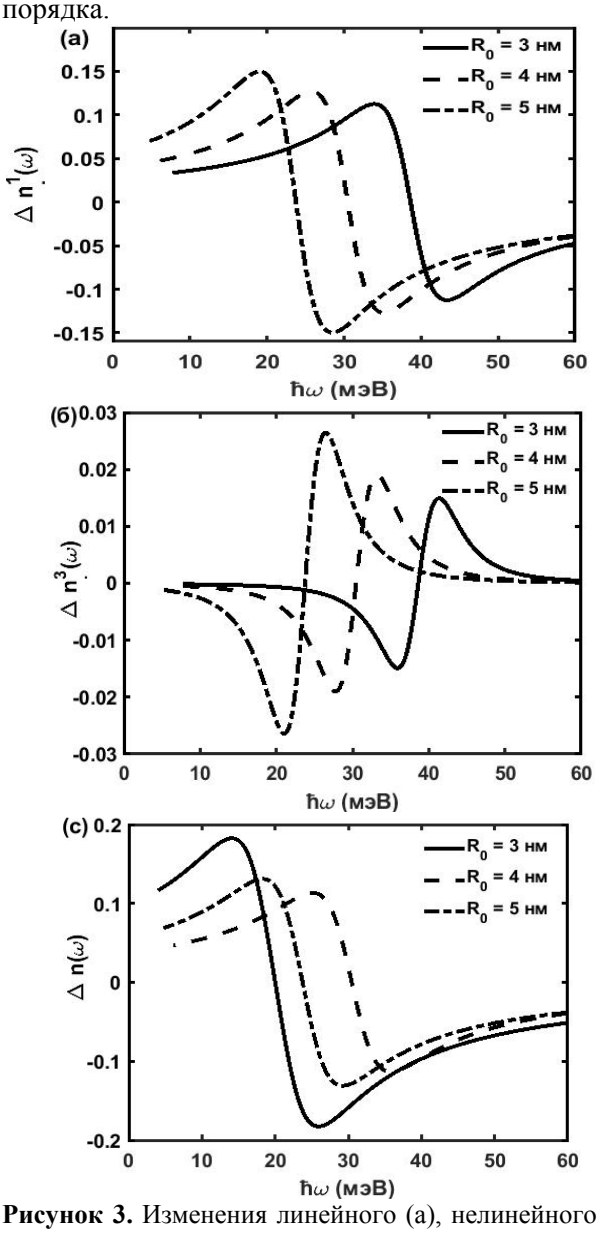


Рисунок 3. Изменения линейного (а), нелинейного (б) и полного (с) показателя преломления света от энергии фотона для различных значений радиуса КТ. V_0=224.46 мэВ и $I = 0.8\times10^9$ Вт/м^2.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2022 г.

На рис. 3 показаны изменения линейного, нелинейного и полного показателя преломления света от энергии падающего фотона для различных значений радиуса КТ. Здесь наблюдаются нули изменения показателя преломления, которые соответствуют нулям потенциала связи по мере уменьшения размера КТ. Изменения показателей преломления при различных значениях высоты потенциального барьера при фиксированном значении радиуса КТ представлены на рис. 4.

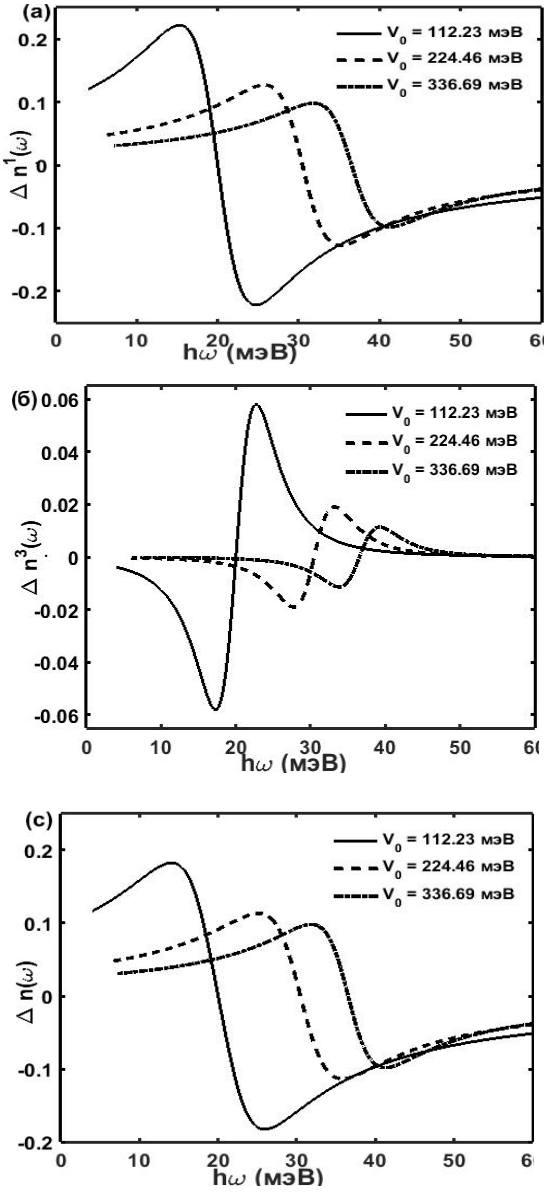


Рисунок 4. Изменения линейного (а), нелинейного (б) и полного (с)показателя преломления КТ от энергии падающего фотона для различных значений потенциала при фиксированном значении радиуса КТ (4 нм) и интенсивности $I = 0.8\times10^9$ Вт/м^2.

На рис. 4 сплошные кривые соответствуют V_0=112.23 мэВ, пунктирные – V_0=224.46 мэВ, точечные – V_0=336.69 мэВ. Из этого рисунка видно, что по мере увеличения высоты потенциального барьера V_0 изменения полного показателя преломления света уменьшаются и их положение смещается в сторону более высоких энергий. Это объясняется тем, что с увеличением высоты потенциала увеличивается и разность между дискретными уровнями электрона.

Также исследовано влияние интенсивности падающего излучения на изменение полного показателя преломления КТ при фиксированных значениях R_0 = 4 нм и V_0 = 224.46 мэВ. Результаты показаны на рис. 5. Видно, что показатель нелинейного преломления света третьего порядка зависит от интенсивности, и по мере увеличения интенсивности величина полного показателя преломления меняется. Изменение линейного показателя преломления среды преобладает при более низкой интенсивности (сплошная кривая), а изменение нелинейного показателя преломления среды начинает преобладать при увеличении интенсивности (пунктирная и точечная линии) лазерного излучения

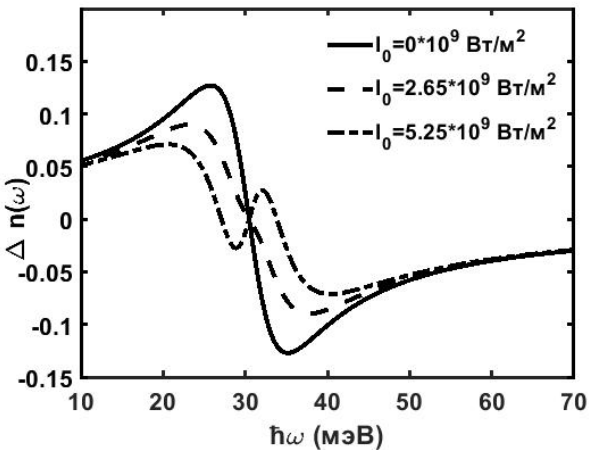


Рисунок 5. Зависимость полного показателя преломления от энергии падающего фотона для различных значений интенсивности падающего излучения. Радиус КТ и высота потенциального барьера выбраны следующими R_0 = 4 нм и V_0 = 224,46 мэВ.

IV. Заключение

Таким образом, в работе теоретически исследовано изменение линейной и нелинейной восприимчивостей сферических КТ. Получено решение уравнения Шредингера с использованием метода Никифорова-Уварова. В качестве

©Академия наук Республики Узбекистан, 2022 г.

потенциала выбран обратно квадратичный потенциал Геллмана. Изменяя радиус КТ и глубину потенциала выявлены максимальные значения коэффициентов поглощения и интервал изменений показателя преломления.

Также показано, что состояние точки резонанса коэффициентов поглощения не меняется при изменении интенсивности, а показатель преломления среды зависит только от амплитуды.

Благодарности. Работа выполнена при частичной поддержке грантов Uzb-Ind-96-2021 и Uzb-Ind-83-2021.

Метаданные

On theory of linear and nonlinear susceptibilities of semiconductor spherical quantum dots

K.A. Korabaev[1], O.B. Ismailova[2,3], У.К. Сапаев[1]

[1]Tashkent State Technical University, Universitetskaya st., 4, 100095, Tashkent, Uzbekistan
[2]Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Durmon Yuli st.,33, 100125, Tashkent, Uzbekistan
[3]Uzbek-Japanese Youth Innovation Center, Universitetskaya st., 2B, 100195, Tashkent, Uzbekistan

The equations for linear and nonlinear optic secceptibilities of spherical quantum dots for isolated media in which electrons connected with Gelman reverse quadratical potential have been obtained. For their solving we used Nikiforov-Uvarov method. The analytical expressions for linear and nonlinear absorption coiffients and also refractive index changes of quantum dots have been derived. In calculations the electric dipole moment matrix elements, $\Delta l = \pm 1$, $\Delta m = 0$, according to the selection rules been chosen. The concrete dependences for quantum dots characteristics in gallium arsenide (GaAs) sample have been presented.

Keywords: Schrödinger equation; quantum dots; linear and nonlinear optical susceptibility; density matrix; dipole moment

Литература (References)

[1] D. Bera, L. Qian, T.K. Tseng, P.H. Holloway. Materials **3**, 2260 (2010).
[2] Y. Pu, F.Cai, D. Wang, J.X. Wang, J.F. Chen. Industrial & Engineering Chemistry Research **57**, 1790 (2018).
[3] D. Huber, M. Reindl, J. Aberl, A. Rastelli, R. Trotta. Journal of Optics **20**, 073002 (2018).
[4] R.W. Boyd. Nonlinear Optics (London, Academic press, 2020).
[5] P. Begjonov, B. Akhmadkhodjaev. Atomnaya fizika (Tashkent, Uchitel', . 1979.
[6] B.I. Ita, C.O. Ehi-Eromosele, A. Edobor-Osoh, A.I. Ikeuba. AIP Conf. Proc. **1629**, 360 (2014).
[7] B.I. Ita, A.I. Ikeuba. J. At. Mol. Phys. **13**, 1 (2013).
[8] H.E. Ghazi, A. Jorio, I. Zorkani. Opt. Commun. **331**, 73 (2014).
[9] Y. Yakar, B. Çakır, A. Özmen. Comput. Phys. Commun. **188**, 88 (2015).
[10] M.C. Onyeaju, J.O.A. Idiodi, A.N. Ikot, M. Solaimani, H. Hassanabadi. J. Opt. **46**, 254 (2017).
[11] D. Ahn, S.L. Chuang. IEEE J. Quantum Electron. **23**, 2196 (1987).

Яримўтказгичли сферик квант нуқталарнинг чизиқли ва ночизиқли киритувчанликлари назарияси

К.А. Қорабоев[1], О.Б. Исмоилова[2,3], У.К. Сапаев[1]

[1]Тошкент давлат техника университети, Университет кўч., 4, 100095, Тошкент, Ўзбекистон
[2]Ўзбекистон Республикаси Фанлар академияси Ион-плазма ва лазер технологиялари институти, Дурмон йўли кўч., 33, 100125, Тошкент, Ўзбекистон
[3]Ўзбекистон-Япония ёшлар инновация маркази, Университет кўч., 2Б, 100195, Тошкент, Ўзбекистон

Сферик симметрияга эга бўлган квант системалари учун Шредингер тенгламаси ёрдамида шарсимон квант нуқталарининг (КН) чизиқли ва ночизиқли оптик киритувчанликлари аналитик кўринишдаги ифодаси олинди. Шредингер тенгламасини ечиш учун муҳитда изолиясияланган электронлар тескари квадратик Гелман потенциали билан бўгланган деб қараб Никифоров-Уваров усули ёрдамида ечилди. Зичлик матрица формализими ёрдамида чизиқли ва ночизиқли ютилиш коэффицентлари ва муҳитнинг синдириш кўрсаткичи ўзгаришлари ҳисоблаб топилди. Электр дипол моментининг матрица элементлари $\Delta l = \pm 1$ ва $\Delta m = 0$ танлаш қоидалари бўйича ҳисобланди. Мисол сифатида галлий арсениддан (GaAs) яратилган квант нуқталар учун ҳисоблашлар олиб борилди.

Калит сўзлар: Шредингер тенгламаси, квант нуқта, потенциал тўсиқ, чизиқли ва ночизиқли оптик киритувчанлик, зичлик матрица формализими, дипол моменти.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2022 г.