

جذب نور در نانوبلورهای مندلبرات

سلیمانی، مهدی^۱؛ رسولی کناری، عبدالرضا^۲

^۱گروه فیزیک دانشگاه صنعتی قم، بلوار شهید خداکرم، قم

^۲گروه مهندسی کامپیوتر دانشگاه صنعتی قم، بلوار شهید خداکرم، قم

چکیده

معمولاً در مقالات محاسباتی که اثر اندازه نانوبلورهای نیمرسانا روی ویژگی‌های فیزیکی آن‌ها بررسی می‌شود، بلورک‌ها دارای اشکال خوش‌تعریف نظیر دایره و ... فرض می‌شوند. در این کار، برای اولین بار با کمک فراکتال‌های مندلبرات اثر سیستم‌های فراکتال شکل غیر دایروی بررسی شده است که هدف اصلی این مطالعه می‌باشد. این کار برای شبیه سازی اثر شکل بی‌نظم بلورک‌ها در حین رشد به کار برده شده است. در این بررسی، اثر مرتبه فراکتال بودن نانوبلورها روی جذب نور در نانوبلورهای دوبعدی مطالعه شده است. برای این منظور از روش ماتریس چگالی برای محاسبه ضریب جذب نوری استفاده شده است. در این مسیر، معادله شرودینگر حاصله با کمک روش تفاضل محدود حل شده و الگوریتم مربوطه مورد استفاده شرح داده شده است. همچنین الگوریتم به کار گرفته شده برای تولید نانوبلورهای مندلبرات داده شده است.

واژه‌های کلیدی: جذب نور، نانوبلورهای نیمرسانا، فراکتال‌های مندلبرات.

Optical Absorption in Mandelbrot Nanocrystals

Solaimani, Mehdi¹; Rasouli Kenari, Abdolreza²

¹ Department of Physics, Qom University of Technology, Qom

² Department of Computer Engineering, Qom University of Technology, Qom

Abstract

In computational papers within which the effect of semiconductor nanocrystal size on its physical properties is considered, the nanocrystals are assumed to have well-defined shapes such as circular, etc. In this work, for the first time the effect of non-circular fractal-shaped systems are investigated using the Mandelbrot nanocrystals that is the main aim of this work. This work is employed to simulate the effect of the disorder in the nanocrystal shapes during the crystal growth process. In this study, the effect of the nanocrystals fractality order on the optical absorption in two-dimensional nanocrystals is investigated. For this purpose, the density matrix approach is utilized to calculate the absorption coefficient. In this way, the resulting Schrodinger equation is solved using the finite difference method and the corresponding algorithm is described. Also, the employed algorithm to create the Mandelbrot nanocrystals is given.

Keywords: Optical Absorption, Semiconductor Nanocrystals, Mandelbrot Fractals

PACS No. 78

مقدمه

توابع موج، تغییر در ویژه مقادیر انرژی، بهبود ویژگی‌های الکترونی و نوری و غیره ازجمله پیامدهای این محصورسازی به شمار می‌آیند. نحوه و میزان این تغییرات که می‌تواند به نوبه خود چشمگیر باشد، توجه بسیاری از دانشمندان فیزیک و مهندسی را به خود جلب کرده است. در نانوبلورها محصورسازی در سه بعد رخ می‌دهد.

محصورسازی الکترون در فضایی با ابعاد نانو، که معمولاً محصورسازی کوانتومی^۱ نامیده می‌شود، می‌تواند منجر به خواص متفاوت نسبت به حالت الکترون آزاد شود. مواردی نظیر اصلاح

¹ Quantum confinement

$$f''(x) \simeq \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f''''(x) \quad (3)$$

که در آن $-\frac{h^2}{6} f'''(x)$ و $-\frac{h^2}{12} f''''(x)$ خطاهای برشی هستند. با استفاده از این تقریب عملگرهای مشتق به یک معادله ماتریسی ویژه‌مقداری تبدیل می‌شوند. اگر N_x و N_y تعداد برش‌ها در راستاهای محوره‌های x و y باشند معادله (۱) به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$-\alpha \left(\frac{\psi(x_n + \Delta x, y_m) - 2\psi(x_n, y_m) + \psi(x_n - \Delta x, y_m)}{\Delta x^2} + \frac{\psi(x_n, y_m + \Delta y) - 2\psi(x_n, y_m) + \psi(x_n, y_m - \Delta y)}{\Delta y^2} \right) + V(x_n, y_m) \psi(x_n, y_m) = E \psi(x_n, y_m) \quad (4)$$

به طور ساده‌تر:

$$-\alpha \left(\frac{\psi_{n+1,m} - 2\psi_{n,m} + \psi_{n-1,m}}{\Delta x^2} + \frac{\psi_{n,m+1} - 2\psi_{n,m} + \psi_{n,m-1}}{\Delta y^2} \right) + V_{n,m} \psi_{n,m} = E \psi_{n,m} \quad (5)$$

که در آن $n = 0, 1, \dots, N_x$ و $m = 0, 1, \dots, N_y$. اکنون داریم:

$$(\hat{H} - E\hat{I})\psi_n = 0 \quad (6)$$

که در آن \hat{H} و \hat{I} به ترتیب ماتریس‌های هامیلتونی و همانی با ابعاد $(N_x \times N_y) \times (N_x \times N_y)$ می‌باشند. در معادله (۶) E مجهول است که با استفاده از روش‌های جبر خطی عددی محاسبه می‌شود. اگر دامنه $\Omega = [a_x, b_x] \times [a_y, b_y]$ را به $N_x \times N_y$ نقطه در جهات x و y برش بزنیم دو مجموعه نقطه زیر به دست می‌آید:

$$X = \{x_i | x_i = a_x + \frac{i}{N_x}(b_x - a_x), i = 0, 1, 2, \dots, N_x\} \quad (7)$$

$$Y = \{y_i | y_i = a_y + \frac{i}{N_y}(b_y - a_y), i = 0, 1, 2, \dots, N_y\}$$

پتانسیل $V(x, y)$ برای $(x, y) \in X \times Y$ می‌شود:

$$V(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{if } (c = x + iy) \in \text{Mandelbrot_Set}_f \\ 0 & \text{if } (c = x + iy) \notin \text{Mandelbrot_Set}_f \end{cases} \quad (8)$$

که $c = x + iy$ یک عدد مختلط است. Mandelbrot_Set_f مجموعه‌ای از نقاط مختلط است که با فراکتال مندلبرات با f تکرار تعریف می‌شود. M_Sf فراکتال مختلط روی تابع مختلط

تاکنون نانوبلورهای با شکل‌های مختلفی من جمله گنبدی شکل [۱]، استخوان شکل [۲]، ستاره شکل [۳]، میله‌ای شکل [۴]، اکتاهدرون شکل [۵]، تتراهدرال شکل [۶]، منشور پنج‌وجهی شکل [۷] و غیره بررسی شده است. ولی در مقالاتی محاسباتی که اثر اندازه نانوبلورها روی ویژگی‌های نوری آن‌ها بررسی می‌شود، معمولاً نانوبلورها دارای اشکال خوش‌تعریف نظیر دایره و ... فرض می‌شوند.

در اینجا، برای اولین بار با کمک هندسه مندلبرات اثر این شکل فراکتالی برای شبیه‌سازی بی‌نظمی در شکل نانوبلورک‌ها استفاده است. انگیزه ما برای این تحقیق ساختارهایی با اشکال هندسی پیچیده‌تر نظیر نانوجل‌ها [۱۱] که معمولاً در آزمایشات دیده می‌شوند بوده است. در ادامه، اثر این شکل فراکتالی روی جذب نور در نانوبلورهای دوبعدی نیم‌رسانای AlGaAs بررسی شده است. معمولاً اگر محصور سازی در دو بعد باشد و آزادی تحرک در بعد سوم داشته باشیم نانو سیم بوجود می‌آید. ولی در اینجا در بعد سوم نیز محصور سازی وجود دارد. در این کار بدلیل تقارن در راستای مجور Z، مساله با کمک جداسازی متغیرها به دوبعد تقلیل داده شده است.

فرمالیزم ریاضی

در این مطالعه به منظور بررسی ویژگی‌های نوری خطی چاه-های کوانتومی AlGaAs از تقریب جرم مؤثر با استفاده از تقریب توابع پوش استفاده شده است. بنابراین برای شروع این بررسی بایستی معادله شرودینگر مؤثر زیر را حل نماییم:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_{eff}(x, y) \right) \psi(x, y) = E \psi(x, y) \quad (9)$$

ویژه‌مقادیر و ویژه‌توابع وابسته به این هامیلتونی را می‌توان با کمک روش برش‌زنی عددی به دست آورد [۸]. برای حل معادله (۱) با کمک روش تفاضل محدود می‌توان از تقریب‌های زیادی برای مشتقات استفاده کرد، برای مثال برای مشتق مرتبه اول:

$$f'(x) \simeq \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{3!} f'''(x) - \dots \quad (10)$$

و برای مشتق مرتبه دوم:

11. Else
12. $V(x, y) = 0$

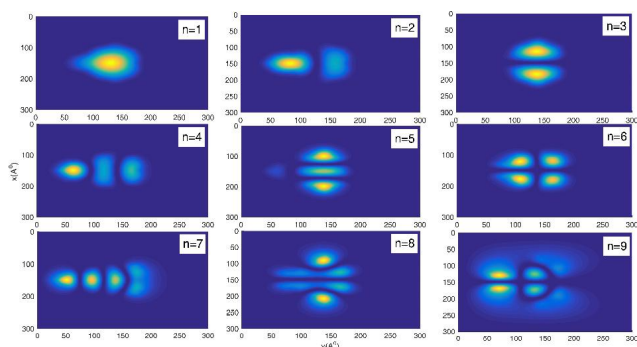
سپس با استفاده از تقریب مرتبه اول جذب $\alpha^{(1)}(\omega)$ می‌توان جذب بین زیر-نواری را به کمک روابط زیر بررسی نمود [۹]:

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_r}} \times \frac{\sigma_s e^2 |M_{fi}|^2 \hbar \Gamma_{fi}}{(\hbar \omega - \Delta E_{fi})^2 + (\hbar \Gamma_{fi})^2} \quad (11)$$

در رابطه بالا، فرکانس میدان الکترومغناطیسی تحریکی با ω نشان داده شده است. همچنین، $\Delta E_{fi} = E_f - E_i$ که E_f و E_i به ترتیب معرف ترازهای انرژی کوانتیده ابتدایی و نهایی می‌باشند. پارامترهای μ ، ϵ_r ، σ_s و τ_{in} به ترتیب نفوذپذیری، سرعت نور، ضریب شکست و زمان واهلش بین زیر ترازهای برابر 0.14ps در نظر گرفته شده است [۱۰] می‌باشند. در این معادله ضرایب M_{fi} عناصر ماتریس دوقطبی هستند.

نتایج و بحث

در این مقاله، با کمک روش تفاضل محدود ویژه مقادیر و ویژه توابع معادله شرودینگر دوبعدی مربوط به یک نانوبلور مندلبرات شکل محاسبه شده است. شکل (۲) نه چگالی احتمال وابسته به نه کمترین ویژه مقادیر انرژی را نشان می‌دهد. از آنجاکه در شکل (۱) یک تقارن نسبت به محور $x=150$ وجود دارد، تقارن مشابهی در چگالی‌های احتمال ارائه شده در شکل ۲ نیز دیده می‌شود. نکته دیگر آنکه بیشترین احتمال برای یافتن الکترون در منطقه چاه کوانتومی (مناطق آبی در شکل ۱) وجود دارد.



شکل ۲: نه چگالی احتمال وابسته به نه کمترین ویژه مقادیر انرژی

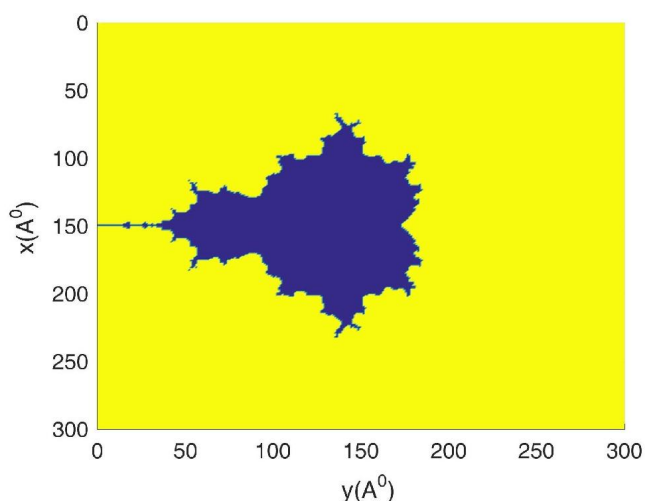
$f(z) = z^m + c$ است. برای هر نقطه مختلط c ، یک سری از نقاط z_i به دست می‌آید.

$$z_{i+1} = z_i^m + c, \quad i = 0, 1, 2, \dots, \quad z_0 = 0 \quad (9)$$

M_{-S_f} با f تکرار شامل همه نقاط c می‌شود بطوریکه $|z_n| \leq 2$:

$$M_{-S_f} = \{c \in \mathbb{C} \mid |z_f| \leq 2, z_{i+1} = z_i^m, z_0 = 0\} \quad (10)$$

$V_{eff}(x, y)$ نمایه پتانسیل یک نانوبلور دوبعدی را نشان می‌دهد. در شکل (۱) طرح‌واره یک نانوبلور دوبعدی مندلبرات مرتبه ۹ آورده شده است.



شکل ۱: طرح‌واره یک نانوبلور دوبعدی مندلبرات مرتبه ۹.

الگوریتم برای تولید پتانسیل محصورسازی $V_n(x, y)$

ورودی‌ها: $\Omega = [a_x, b_x] \times [a_y, b_y]$

N_x و N_y : تعداد نقاط برش در راستاهای x و y

f : تعداد تکرار

خروجی‌ها: ماتریس $V_{N_x \times N_y}$ با عناصر ۰ و ۱

1. $z=0$
2. For $x = a_x$ To b_x Step by $(b_x - a_x) / N_x$
3. For $y = a_y$ To b_y Step by $(b_y - a_y) / N_y$
4. Let $c = x + iy$
5. If $f \sim 1$
6. Let $z = 0$
7. For $i = 1$ To f
8. $z = z^m + c$
9. If $(|z| \leq 2)$
10. $V(x, y) = 1$

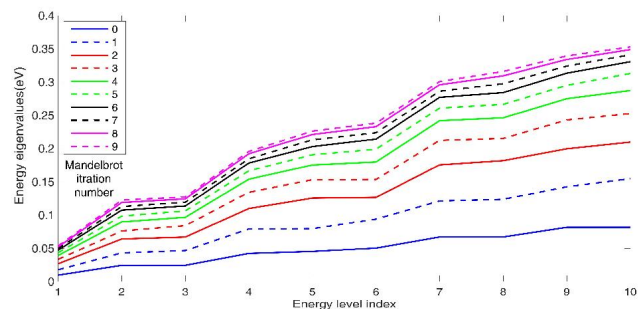
نتیجه‌گیری

در این پژوهش، با کمک حل معادله شرودینگر خطی غیر وابسته به زمان به روش تفاضل محدود به بررسی ویژگی‌های جذب نور در نانوبلورهای نیمرسانای مندلبرات پرداخته‌ایم. مشاهده شد که با افزایش مرتبه تکرار مندلبرات ارتفاع جذب کمی کاهش می‌یابد. همچنین با افزایش مرتبه مندلبرات موقعیت قله‌های جذبی انتقال به آبی پیدا می‌کند.

مرجع‌ها

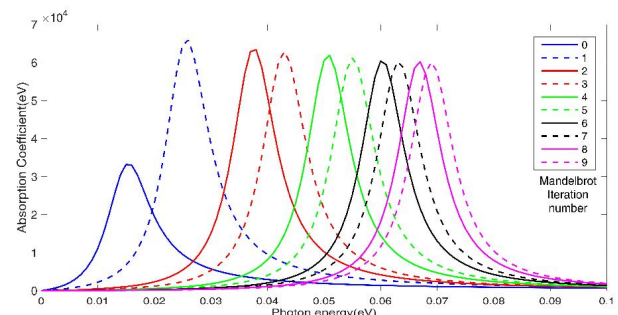
- [۱] M. R. Neupane, R. Rahman and R. K. Lake; "Effect of strain on the electronic and optical properties of Ge-Si dome shaped nanocrystals"; *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** (2015) 2484-2493.
- [۲] A. Castelli, B. Dhanabalan, A. Polovitsyn, V. Caligiuri, F. Di, A. Scarpellini, R. Brescia, M. Palei, B. Martín-García, M. Prato, L. Manna, I. Moreels, R. Krahne, M. P. Arciniegas; "Core/Shell CdSe/CdS Bone-Shaped Nanocrystals with a Thick and Anisotropic Shell as Optical Emitters"; *Adv. Opt. Mater.* **8** (2020) 1901463.
- [۳] S. M. Lee, Y. W. Jun, S. N. Cho, and J. Cheon; "Single-crystalline star-shaped nanocrystals and their evolution: programming the geometry of nano-building blocks"; *J. America. Chem. Soc.* **124**, No. 38 (2002) 11244-11245.
- [۴] M. Guo, Q. Fu, Wu, C., Z. Guo, M. Li, J. Sun, Z. He, and L. Yang; "Rod shaped nanocrystals exhibit superior in vitro dissolution and in vivo bioavailability over spherical like nanocrystals: a case study of lovastatin"; *Coll. Surf. B: Biointerfaces* **128** (2015) 410-418.
- [۵] B. Rivas-Murias, and V. Salgueiriño; "Thermodynamic CoO-Co3O4 crossover using Raman spectroscopy in magnetic octahedron-shaped nanocrystals"; *J. Raman Spectroscop.* **48**, No. 6 (2017) 837-841.
- [۶] Z. Deng, O. Schulz, S. Lin, B. Ding, X. Liu, X. Wei, R. Ros, H. Yan, and Y. Liu; "Aqueous synthesis of zinc blende CdTe/CdS magic-core/thick-shell tetrahedral-shaped nanocrystals with emission tunable to near-infrared"; *J. America. Chem. Soc.* **132**, No. 16 (2010) 5592-5593.
- [۷] V. S. Harutyunyan; "Inhomogeneity, anisotropy, and size effect in the interfacial energy of Ca (OH) 2 hexagonal-prism shaped nanocrystals in water"; *Mater. Chem. Phys.*, **147**, No. 3 (2014) 410-422.
- [۸] M. Sabsevar, M. E. Ehsani, M. Solaimani, M. Ghorbani; "Optical properties of a few semiconducting heterostructures in the presence of Rashba spin-orbit interactions: a two-dimensional finite-difference numerical approach"; *J. Opt. Soc. America B* **36**, No. 7 (2019) 1774-1782.
- [۹] D. Ahn and S. L. Chuang Ahn; "Intersubband optical absorption in a quantum well with an applied electric field"; *Phys. Rev. B* **35** (1987) 4149.
- [۱۰] D. Ahn, S. L. Chuang; "Calculation of linear and nonlinear intersubband optical absorptions in a quantum well model with an applied electric field"; *IEEE J. Quant. Elec.* **23** (1987) 2196.
- [۱۱] W.-T. Yao, S.-H. Yu, S.-J. Liu, J.-P. Chen, X.-M. Liu, and F.-Q. Li; "Architectural Control Syntheses of CdS and CdSe Nanoflowers, Branched Nanowires, and Nanotrees via a Solvothermal Approach in a Mixed Solution and Their Photocatalytic Property"; *J. Phys. Chem. B* **110** (2006) 11704.

شکل ۳ نمودار ترازهای انرژی تعدادی نانوبلور مندلبرات با مرتبه‌های مختلف تکرار را نشان می‌دهد. همان‌طور که این نمودار نشان می‌دهد با افزایش مرتبه تکرار مندلبرات میزان تغییرات در ویژه مقادیر انرژی کمتر می‌شود که دلیل آن تغییرات اندک در پتانسیل نانوبلور در مراتب بالاتر تکرار مندلبرات می‌باشد. نکته دیگر آنکه فاصله بین ترازهای انرژی با افزایش مرتبه تکرار مندلبرات افزایش می‌یابد.



شکل ۳: نمودار ترازهای انرژی تعدادی نانوبلور مندلبرات با مرتبه‌های مختلف تکرار

در شکل (۴) نیز نمودار ضریب جذب نوری برحسب انرژی فوتون فرودی برای تعدادی نانوبلور با مرتبه‌های مختلف تکرار مندلبرات نشان داده شده است. در ابتدا مشاهده می‌شود که بزرگی جذب در نانوبلور مندلبرات مرتبه صفر به‌طور قابل‌ملاحظه‌ای از دیگر مراتب آن کوچک‌تر است. اگر این مورد را کنار بگذاریم با افزایش مرتبه تکرار مندلبرات ارتفاع جذب کمی کاهش می‌یابد. نکته دیگر آنکه با افزایش مرتبه مندلبرات موقعیت قله‌های جذبی انتقال به آبی پیدا می‌کنند یعنی به سمت انرژی‌های بیشتر سوق می‌یابند. دلیل این موضوع نیز آن است که فاصله بین ترازهای انرژی با افزایش مرتبه تکرار مندلبرات افزایش می‌یابد (شکل ۳).



شکل ۴: نمودار ضریب جذب برحسب انرژی فوتون فرودی برای تعدادی نانوبلور با مرتبه‌های مختلف تکرار مندلبرات