

NONLINEAR OPTICAL RESPONSES IN HYDROGENATED GRAPHENE STRUCTURES

Reinaldo Zapata-Peña¹, Sean M. Anderson¹, Bernardo S. Mendoza¹, Anatoli I. Shkrebtii²

¹*Centro de Investigaciones en Óptica, León, Guanajuato 37150, México*

²*University of Ontario, Institute of Technology, Oshawa, ON, L1H 7L7, Canada*

e-mail: a.bxc@cio.mx, bms@cio.mx

We present a theoretical study of the optical spin injection, optical current injection, and second harmonic generation of two 50% hydrogenated graphene structures: C₁₆H₈-alt and C₁₆H₈-up. Optical spin injection, under the incidence of circularly polarized light onto nonmagnetic semiconductors, creates spin-polarized electrons in the conduction bands [1]. Optical current injection[2] and second-harmonic generation[3, 4] are nonlinear second-order effects that are allowed in materials without inversion symmetry. The results are calculated in a full electronic band structure scheme within DFT in the LDA approximation. Our results show an anisotropic behavior in the optical responses of the spin injection, the current injection and second harmonic generation. We obtained maximum absolute magnitudes of the degree of spin polarization of 61% and 64% for the *alt* and *up* structures, respectively, and it is also possible to optically generate an injection current coming mainly from the carbon layer on both *alt* and *up* systems. Besides, we found that both structures are excellent candidates for second harmonic generation.

Presentamos un estudio teórico de inyección óptica de spin, inyección óptica de corriente y generación de segundo armónico de dos estructuras de grafeno hidrogenado al 50%: C₁₆H₈-alt and C₁₆H₈-up. La inyección óptica de spin, bajo la incidencia de luz circularmente polarizada sobre semiconductores no magnéticos, crea electrones con spin polarizado en las bandas de conducción[1]. La inyección óptica de corriente[2] y la generación de segundo armónico [3, 4] son efectos no lineales de segundo orden que se presentan en materiales sin inversión de simetría. Los resultados fueron calculados usando un esquema de estructura de bandas electrónica completa usando DFT con una aproximación LDA. Nuestros resultados muestran un comportamiento anisotrópico en las respuestas ópticas de inyección de spin, inyección de corriente y generación de segundo armónico. Obtuvimos magnitudes absolutas máximas del grado de polarización de spin de 61% y 64% para las estructuras *alt* y *up*, respectivamente, y además es posible generar inyección de corriente que proviene principalmente de la capa de carbonos de ambos sistemas. También encontramos que ambas estructuras son excelentes candidatos para la generación de segundo armónico.

Keywords: graphene; spin polarization; current injection; second-harmonic.

OCIS CODES: (XXX.OOO1)

References

- [1] M. I. Dyakonov, V. I. Perel, Theory of optical spin orientation of electrons and nuclei in semiconductors, Chapter 2, Elsevier, NY, 1984.
- [2] N. Arzate, R.A. Vázquez-Nava, B.S. Mendoza, Physical Review B **90**(20), 205310 (2014).
- [3] R. Loudon, The Quantum Theory of Light, Oxford University Press, Oxford, 2000.
- [4] S.M. Anderson, N. Tancogne-Dejean, B.S. Mendoza, V. Vénier, Physical Review B **91**(7), 075302 (2015).