



به تنای



دانشکده علوم پایه

تأییدیه اعضای هیأت داوران حاضر در جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

اعضای هیئت داوران نسخه نهایی پایان نامه خانم/آقای مریم افسری رشته فیزیک تحت عنوان: « بررسی اثر محدودیت کوانتومی بر پذیرفتاری اپتیکی غیر خطی روی نانو ذرات سولفید سرب (pbs) » را از نظر فرم و محتوا بررسی نموده و آن را برای اخذ درجه کارشناسی ارشد مورد تأیید قرار دادند.

امضاء	رتبه علمی	نام و نام خانوادگی	اعضای هیأت داوران
	دانشیار	دکتر رسول ملک فر	۱- استاد راهنما
	استادیار	دکتر شاهرخ پرویزی	۲- استاد ناظر داخلی
	دانشیار	دکتر احمد یزدانی	۳- استاد ناظر داخلی
	دانشیار	دکتر محمد حسین مجلس آراء	۴- استاد ناظر خارجی
	استادیار	دکتر شاهرخ پرویزی	۵- نماینده تحصیلات تکمیلی

آیین نامه چاپ پایان نامه (رساله) های دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس

نظر به اینکه چاپ و انتشار پایان نامه (رساله) های تحصیلی دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس، مبین بخشی از فعالیتهای علمی - پژوهشی دانشگاه است بنابراین به منظور آگاهی و رعایت حقوق دانشگاه، دانش آموختگان این دانشگاه نسبت به رعایت موارد ذیل متعهد می شوند:

ماده ۱: در صورت اقدام به چاپ پایان نامه (رساله) ی خود، مراتب را قبلاً به طور کتبی به «دفتر نشر آثار علمی» دانشگاه اطلاع دهد.

ماده ۲: در صفحه سوم کتاب (پس از برگ شناسنامه) عبارت ذیل را چاپ کند:

«کتاب حاضر، حاصل پایان نامه کارشناسی ارشد نگارنده در رشته فیزیک اتمی و مولکولی است که در سال ۱۳۹۰

در دانشکده علوم پایه دانشگاه تربیت مدرس به راهنمایی جناب آقای دکتر رسول ملکفر از آن دفاع شده است.»

ماده ۳: به منظور جبران بخشی از هزینه های انتشارات دانشگاه، تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت چاپ)

را به «دفتر نشر آثار علمی» دانشگاه اهدا کند. دانشگاه می تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر در معرض فروش قرار دهد.

ماده ۴: در صورت عدم رعایت ماده ۳، ۵۰٪ بهای شمارگان چاپ شده را به عنوان خسارت به دانشگاه تربیت مدرس، تأدیه کند.

ماده ۵: دانشجو تعهد و قبول می کند در صورت خودداری از پرداخت بهای خسارت، دانشگاه می تواند خسارت

مذکور را از طریق مراجع قضایی مطالبه و وصول کند؛ به علاوه به دانشگاه حق می دهد به منظور استیفای حقوق خود، از

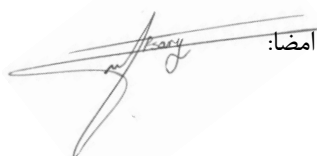
طریق دادگاه، معادل وجه مذکور در ماده ۴ را از محل توقیف کتابهای عرضه شده نگارنده برای فروش، تامین نماید.

ماده ۶: اینجانب مریم افسری دانشجوی رشته فیزیک مقطع کارشناسی ارشد تعهد فوق ضمانت اجرایی آن را

قبول کرده، به آن ملتزم می شوم.

نام و نام خانوادگی: مریم افسری

تاریخ و امضا:





دانشکده: علوم پایه

پایان نامه کارشناسی ارشد رشته: فیزیک
گرایش: اتمی و مولکولی

عنوان پایان نامه:

بررسی اثر محدودیت کوانتومی بر پذیرفتاری پستیکی غیرخطی روی نانوذرات سولفید سرب (PbS)

نام دانشجو:

مریم افسری

استاد راهنما:

دکتر رسول ملک فر

تیرماه ۱۳۹۰

تقدیم بہ

پدرم

کہ ہموارہ راہنمائی ہائش روشنکر راہم بودہ است،

ومادرم

کہ ہموارہ مشوق و ہمراہ من بودہ است.

تقدیر و سپاس‌گزاری

از استاد راهنمای گرامی جناب آقای دکتر رسول ملک‌فر که در طول مدت تحصیل مرا از پشتیبانی‌های خود بی‌نصیب نگذاشته‌اند، کمال قدردانی را دارم.

همچنین از آقای دکتر محمدحسین مجلس‌آرا که از ابتدای این راه با راهنمایی‌های مدبرانه و عالمانه خود همواره مرا مورد لطف قرار داده‌اند، متشکر و سپاس‌گزارم.

از آقایان الله‌آبادی و جعفرزاده که در طول مدت کار ما در آزمایشگاه و در مشکلات در کنار ما بودند، متشکرم.

در انتها از همکاری‌ها و همدلی‌های دلسوزانه دوست عزیزم خانم فریبا خدارحمی و کمک‌های آقایان علیجان‌پور و حسینمردی صمیمانه تشکر می‌کنم و برای این دوستان آرزوی موفقیت دارم.

همچنین قدردانی خود را تقدیم می‌کنم به خانواده‌ی مهربانم، پدر و مادرم و خواهران عزیزم، مرضیه و فرشته، که همراه و هم‌دل من بودند.

چکیده

در این کار، نانوذرات سولفیدسرب PbS به کمک عامل‌های پوششی در محیط آبی رشد داده شدند. مشخصه‌یابی این نانوذرات به کمک الگوی پراش اشعه X و طیف جذبی UV-Vis-NIR صورت گرفت. سپس تلاش شد با تغییر عامل پوششی و pH محیط نانوذراتی با اندازه‌های مختلف تولید شود. تغییر اندازه‌ی نانوذرات به کمک طیف جذبی و با استفاده از رابطه‌ی بروس بررسی شد. همچنین تأثیر متغیرهای محیطی بر پایداری کلئوئید سولفیدسرب مورد بررسی قرار گرفت. در مرحله‌ی بعد به منظور بررسی خواص اپتیکی غیرخطی نانوذرات PbS، با استفاده از روش روبش Z با کمک لیزر پیوسته هلیوم-نئون ($\lambda=632/8 \text{ nm}$) ضریب جذب و ضریب شکست غیرخطی نانوذرات در شدت‌های فرودی مختلف بدست آمد. نتایج حاصل از این بررسی‌ها نشان می‌دهد که ضریب شکست غیرخطی نانوذرات PbS منفی و مقدار آن در شدت‌های موردبررسی در این پژوهش از مرتبه 10^{-7} W/cm^2 و ضریب جذب غیرخطی این ذرات از مرتبه 10^{-3} cm/W است، که نشان می‌دهد نانوذرات PbS پاسخ اپتیکی خوبی دارند. در نهایت با اعمال روش روبش Z بر نمونه‌هایی با اندازه‌های مختلف نانوذرات اثر اندازه بر پذیرفتاری اپتیکی غیرخطی مرتبه‌ی سه مورد بررسی قرار گرفت. نتایج این مطالعات نشان داد با کاهش اندازه‌ی ذرات، پاسخ غیرخطی آنها به میدان اعمالی، قوی‌تر می‌شود.

کلمات کلیدی: نانوذرات، سولفیدسرب، طیف جذبی UV-Vis-NIR، الگوی پراش اشعه X،

روبش Z، ضریب شکست غیرخطی، ضریب جذب غیرخطی.

فهرست

فصل اول	۱
مقدمه‌ای بر فناوری نانو	۱
۱-۱- مقدمه	۲
۲-۱- نانوذرات نیمرسانا	۵
۱-۲-۱- محدودیت کوانتومی قوی	۸
۳-۱- سولفید سرب	۱۰
۴-۱- روش‌های سنتز نانوذرات	۱۲
فصل دوم	۱۹
سنتز و مشخصه‌یابی نانوذرات سولفیدسرب	۱۹
۱-۲- مقدمه	۲۰
۲-۲- روش‌های مشخصه‌یابی نانوذرات	۲۰
۱-۲-۲- پراش اشعه X	۲۰
۲-۱-۲-۲- کاربردهای پراش اشعه X	۲۳
۳-۱-۲-۲- پالایش ریتولد	۲۶
۲-۲-۲- طیف‌سنجی UV-Vis-NIR	۲۷
۲-۲-۲-۲- کاربردهای طیف‌سنجی UV-Vis-NIR	۳۰
۳-۲- تولید نانوذرات سولفید سرب در محیط آبی	۳۲
۱-۳-۲- روش رشد نانوذرات PbS	۳۳
۱-۳-۲-۱- بررسی اثر تغییر عامل پوششی بر خواص نانوذرات سولفیدسرب	۳۳

۴۵ بررسی اثر تغییر pH بر خواص نانوذرات PbS
۴۸ بحث و نتیجه گیری
۵۰ فصل سوم
۵۰ اپتیک غیرخطی
۵۱ ۱-۳- مقدمه
۵۱ ۲-۳- تاریخچه
۵۴ ۳-۳- اپتیک غیرخطی
۵۷ ۱-۳-۳- اثر اپتیکی کر
۵۸ ۱-۱-۳-۳- ضریب جذب غیرخطی و ضریب شکست غیرخطی
۵۹ ۲-۳-۳- آثار اپتیکی غیرخطی
۵۹ ۱-۲-۳-۳- اثرات خودکنش
۶۱ ۲-۲-۳-۳- جذب اشباع پذیر
۶۳ ۳-۲-۳-۳- جذب دو فوتون
۶۳ ۴-۳- اندازه گیری پاسخ غیرخطی مواد: روش روبش Z
۶۴ ۱-۴-۳- روبش Z با روزنه بسته
۷۲ ۵-۳- بهبود روش روبش Z
۸۵ فصل چهارم
۸۵ خواص اپتیکی غیرخطی نانوذرات سولفیدسرب
۸۶ ۱-۴- مقدمه
۸۶ ۲-۴- بررسی خواص اپتیکی غیرخطی نانوذرات PbS

۸۶ روش روبش لبه
۹۲ بررسی اثر محدودکنندگی اپتیکی (OL)
۹۲ بررسی اثر شدت فرودی بر ضریب شکست غیرخطی نانوذرات سولفیدسرب
۹۵ بحث و نتیجه‌گیری
۹۶ بررسی اثر اندازه ذرات بر پاسخ اپتیکی غیرخطی
۹۷ اثر اندازه بر ضریب شکست غیر خطی
۹۷ اثر اندازه بر ضریب جذب غیرخطی
۱۰۰ بحث و نتیجه‌گیری
۱۰۰ پذیرفتاری اپتیکی غیرخطی مرتبه‌ی سه
۱۰۲ فصل پنجم
۱۰۲ نتیجه‌گیری و پیشنهادات
۱۰۳ ۱-۵- نتیجه‌گیری
۱۰۴ ۲-۵- پیشنهادات
۱۰۶ مراجع

فهرست شکل‌ها

- شکل ۱-۱: معیاری از ابعاد نانو ۳
- شکل ۲-۱: گذار از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته (جفت الکترون-حفره آزاد) که در نتیجه‌ی جذب یک فوتون و پایستگی تکانه و انرژی روی می‌دهد. چون تکانه فوتون بسیار کوچک است، گذار به صورت عمودی صورت گرفته است. ۶
- شکل ۳-۱: طرح شماتیک چیدمان سنتز نانوذرات به وسیله تبخیر لیزری فلزات [۱۰] ۱۴
- شکل ۴-۱: طرح شماتیک چیدمان آزمایشگاهی سنتز نانوذرات PbS [۱۵] ۱۶
- شکل ۵-۱: نانوذرات سولفیدسرب کروی توخالی که با تابش اشعه γ سنتز شده‌اند. ۱۷
- شکل ۱-۲: صفحات اتمی نمک طعام، راست: صفحه (۲۲۰)، چپ: صفحه (۲۰۰) ۲۱
- شکل ۲-۲: پراش اشعه X، الف) از یک تک بلور، ب) از یک بس بلور ۲۲
- شکل ۳-۲: حلقه‌های پراش دبای در آشکارسازی دوبعدی پراش پرتوهای X [31] ۲۲
- شکل ۴-۲: چیدمان شماتیک دستگاه پراش اشعه X ۲۵
- شکل ۵-۲: دستگاه XRD به کار گرفته شده در این پژوهش (Unisuntis XMD 300) ۲۵
- شکل ۶-۲: ترازهای انرژی یک مولکول ۲۸
- شکل ۷-۲: چیدمان شماتیک یک طیف‌سنج UV-Vis-NIR [36] ۳۰
- شکل ۸-۲: تغییر رنگ محلول با تشکیل نانوذرات سولفیدسرب ۳۴
- شکل ۹-۲: الگوی پراش اشعه X نمونه تهیه شده با استفاده از TGA که به کمک برنامه‌ی MAUD تحلیل شده است. ۳۶
- شکل ۱۰-۲: نتیجه‌ی حاصل از شبیه‌سازی ساختار نمونه تهیه شده با عامل پوششی TGA. واضح است که شکل بلورک حاصله مکعبی می‌باشد. ۳۷
- شکل ۱۱-۲: شکل شبیه‌سازی شده‌ی بلورک نمونه سنتز شده با استفاده از TG-DTG ۳۹

- شکل ۲-۱۲: الگوی پراش اشعه X نمونه تهیه شده به کمک TG-DTG که به کمک برنامه‌ی MAUD تحلیل شده است. ۴۰
- شکل ۲-۱۳: طیف جذبی و منحنی تغییرات ضریب جذب نانوذرات سولفید سرب، الف) TGA، ب) TG- DTG، ج) DTG. ۴۳
- شکل ۲-۱۴: مقایسه اثر تغییر عامل پوششی بر روی نانوذرات سولفید سرب با استفاده از طیف جذبی. ۴۴
- شکل ۲-۱۵: مقایسه طیف جذبی نانوذرات سولفید سرب در pHهای مختلف ۴۶
- شکل ۲-۱۶: طیف جذبی و منحنی ضریب جذب نانوذرات سولفید سرب: الف) pH=۷/۲، ب) pH= ۹/۲ ۴۷
- شکل ۳-۱: اعوجاج یک پرتو لیزری باعث خودکانونی آن در محیط غیر خطی می شود. ۵۹
- شکل ۳-۲: خوددومی پرتوی لیزر در محیط غیرخطی ۶۰
- شکل ۳-۳: الف) خود کانونی پرتو گاوسی (ب) ناخودکانونی یک پرتو. پرتو بیش از حد پراش خطی گسترش می یابد. ۶۱
- شکل ۳-۴: اشباع جذب در سیستم دو ترازی ۶۲
- شکل ۳-۵: الف: جذب دو فوتون ب: جذب پله ای ۶۳
- شکل ۳-۶: چیدمان آزمایشگاهی روش روبش Z ۶۵
- شکل ۳-۷: نمایش تغییر اندازه‌ی لکه یک پرتوی گاوسی در نتیجه‌ی برهم‌کنش با یک ماده با ضریب شکست غیرخطی مثبت (a) قبل از کمره‌ی پرتو، کانون القایی موجب پراکندگی نور در محل آشکارساز شده است. (b) بعد از کمره‌ی پرتو، نور در محل آشکارساز متمرکز شده است. (c) نمودار عبور حاصله ۶۶
- شکل ۳-۸: منحنی گذار آزمایش روبش Z با روزنه‌ی بسته برای حالت غیرخطی مرتبه سه ۶۶

- شکل ۳-۹: ΔT_{p-v} محاسبه شده به صورت یک تابع از تغییر فاز در کانون ($\Delta \varphi_0$)، همان طور که از شیب خطها پیداست، میزان حساسیت با افزایش اندازه‌ی روزنه کاهش می‌یابد. ۷۱
- شکل ۳-۱۰: الگوی پرتوی عبوری از لبه قرص در چیدمان روبش Z کسوفی ۷۵
- شکل ۳-۱۱: طرح شماتیک چیدمان روبش Z کسوفی ۷۶
- شکل ۳-۱۲: طرح شماتیک روبش Z غیرمحموری ۷۷
- شکل ۳-۱۳: اختلاف گذار قله-دره بر حسب فاصله از محور. خط چین روبش Z غیرمحموری و خط پر روبش Z کسوفی را نشان می‌دهند. ۷۸
- شکل ۳-۱۴: مقایسه نتایج حاصل از روبش Z با استفاده از پرتوهای گاوسی (خط‌چین) و پرتوهای مسطح (خط توپر) ۷۹
- شکل ۳-۱۵: شکل خط پرتوی مسطح که در فاصله ۷/ متری اندازه‌گیری شده است. ۸۰
- شکل ۳-۱۶: شکل خط پرتوی دایروی به کار گرفته شده توسط ژائو و همکارش ۸۱
- شکل ۳-۱۷: چیدمان شماتیک روبش Z برای اندازه‌گیری شعاع پرتو ۸۲
- شکل ۳-۱۸: چیدمان شماتیک روبش Z برای بررسی خواص اپتیکی غیرخطی سطوح ۸۲
- شکل ۴-۱: منحنی خط پر تابع خطا را نشان می‌دهد که از آشکار ساز بدست می‌آید. منحنی خط چین مشتق تابع خطاست که به شکل تابع گاوسی خواهد بود. از روی تابع برازش شده پهنای باریکه بدست می‌آید. ۸۸
- شکل ۴-۲: چیدمان آزمایش روبش لبه ۸۸
- شکل ۴-۳: چیدمان آزمایشگاهی روبش لبه ۸۹
- شکل ۴-۴: نتایج حاصل از روبش لبه بر حسب گام‌های تیغه ۹۰
- شکل ۴-۵: مشتق منحنی برازش شده شکل (۴-۴) و تابع گاوسی متناسب با آن ۹۰
- شکل ۴-۶: چیدمان مربوط به بررسی اثر محدودکنندگی اپتیکی ۹۱

- شکل ۷-۴: چیدمان روش روبش Z روزنه بسته ۹۲
- شکل ۸-۴: منحنی توان خروجی برحسب توان ورودی مربوط به اندازه‌گیری ضریب جذب نانوذرات PbS
..... ۹۲
- شکل ۹-۴: نمودار روزنه بسته نانوذرات سولفیدسرب برحسب شدت ۹۳
- شکل ۱۰-۴: نمودار روزنه بسته نانوذرات سولفیدسرب با سه اندازه مختلف ۹۶
- شکل ۱۱-۴: طرح شماتیک چیدمان روزنه باز ۹۷
- شکل ۱۲-۴: چیدمان آزمایشگاهی روش روبش Z دریچه باز ۹۷
- شکل ۱۳-۴: نمودار روزنه باز نانوذرات سولفیدسرب، ۹۸

فهرست جدول‌ها

- جدول ۱-۲: نتایج حاصل از اعمال پالایش ریتولد به کمک برنامه MAUD مربوط به نمونه سنتز شده با عامل پوششی TGA ۳۶
- جدول ۲-۲: نتایج حاصل از پراش اشعه X که به صورت تجربی حاصل شده‌اند. ۳۸
- جدول ۳-۲: مقایسه ضریب اطمینان نمونه‌های آماده شده برای دو حالت همسانگرد و غیرهمسانگرد .. ۳۸
- جدول ۴-۲: نتایج حاصل از اعمال پالایش ریتولد به کمک برنامه MAUD مربوط به نمونه سنتز شده با عامل پوششی TGA ۴۰
- جدول ۵-۲: نتایج حاصل از پراش اشعه X که به صورت تجربی حاصل شده‌اند. ۴۱
- جدول ۶-۲: تغییر خواص اپتیکی نانوذرات سولفیدسرب با تغییر عامل پوششی ۴۴
- جدول ۷-۲: بررسی اثر pH بر خواص اپتیکی نانوذرات PbS ۴۷
- جدول ۱-۴: مقادیر مختلف ضریب شکست غیرخطی بر حسب شدت‌های مختلف ۹۵
- جدول ۲-۴: مقادیر محاسبه شده ضریب شکست و ضریب جذب غیرخطی نانوذرات با اندازه‌های مختلف ۱۰۰
- جدول ۳-۴: مقادیر محاسبه شده بخش حقیقی و موهومی پذیرفتاری اپتیکی مرتبه‌ی سه نانوذرات با اندازه‌های مختلف ۱۰۱

فصل اول

مقدمه‌ای بر فناوری نانو

۱-۱- مقدمه

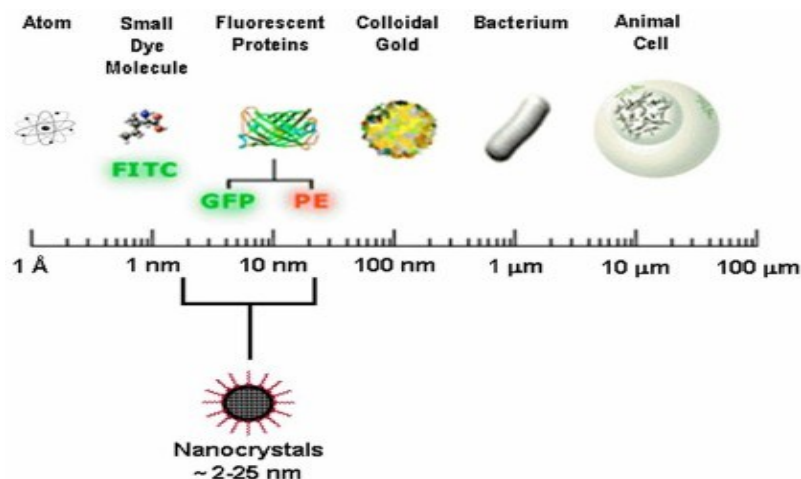
نانو کلمه‌ای یونانی معادل Dwarf به معنای کوتوله است و فناوری نانو هنر دستکاری مواد در مقیاس اتمی یا مولکولی با اندازه تقریبی ۱ تا ۱۰۰ نانومتر و بخصوص ساخت قطعات و لوازم میکروسکوپی است. در واقع ذرات جدیدی که از آرایش فشرده اتم‌ها و مولکول‌ها تشکیل می‌شوند و ابعادی در حدود ۱ تا ۱۰۰ نانومتر دارند، را نانوذره می‌نامند. از ابتدای پیدایش علم نانو، اصطلاحات دیگری نیز برای این ذرات به کار رفته، از جمله نانوخوشه^۱، نانوبلور^۲ و هنگامی که ذرات کروی باشند، نقطه کوانتومی^۳[۱]. همچنین چون در ویژگی‌های اپتیکی و الکتریکی این ذرات، ساختار گسسته بروز پیدا می‌کند، گاهی اوقات عنوان اتم‌های مصنوعی هم به آنها اطلاق می‌شود، هرچند از دیدگاه یک شیمیدان، نانوذرات، مولکول‌هایی بزرگ و پیچیده هستند!

در مقیاس نانو مواد شروع به تغییر رفتار می‌کنند و بعضی از روابط فیزیکی که در حالت توده برای ماده به کار می‌رود، در این مقیاس نقض می‌شود. در این ابعاد قوانین فیزیک کوانتوم وارد صحنه می‌شوند.

¹ Nanocluster

² Nanocrystal

³ Quantum dot



شکل ۱-۱: معیاری از ابعاد نانو

این تغییر رفتار مواد را می توان ناشی از افزایش نسبت سطح به حجم، که باعث غلبه خواص سطحی بر خواص توده می شود، دانست. در این ابعاد درصد اتم‌های موجود در سطح افزایش می یابد که این منجر به سست شدن پیوندها و افزایش واکنش پذیری ماده می شود. به این ترتیب خواص فیزیکی و شیمیایی مواد نانوساختار از جمله جذب، فلورسانس، دمای ذوب، هدایت الکتریکی و حرارتی و ... قابل کنترل و بهبود می باشند. اما مهمترین تغییراتی که در گذار ماده از حالت توده به ابعاد نانو در خواص آن بروز پیدا می کنند را می توان در سه گروه کلی دسته بندی کرد:

- تغییر در خواص مکانیکی: با تولید فلزات و آلیاژهایی با اندازه دانه‌ای در ابعاد نانو به موادی با استحکام فوق العاده زیاد دست خواهیم یافت. البته تغییر شکل و خواص مکانیکی مواد نانو علاوه بر متوسط اندازه دانه‌ها به شدت به توزیع اندازه و ساختار مرز دانه‌ها وابسته است.
- تغییر در خواص مغناطیسی: خواص فرومغناطیسی تمام مواد با تغییر فاصله بین اتم‌ها تغییر می کند، به همین دلیل ضریب مغناطش اشباع و دمای انتقال مواد فرومغناطیس مواد نانوساختار در مقایسه با مواد معمولی به میزان قابل توجهی کمتر است. مشخصه مغناطیسی دیگر نانومواد اثر مگنتو کالریک است.

• تغییر در خواص اپتیکی: با نزدیک شدن به ابعاد نانو، بروز محدودشدگی کوانتومی و تشکیل پلاسمون سطحی باعث بروز خواص اپتیکی غیرخطی به ترتیب در نانوذرات نیم‌رسانا و رسانا می‌شود.

بخشی از علم مواد که به بررسی خواص اساسی مواد به صورت تابعی از اندازه‌ی ذرات از ابعاد تک اتمی یا مولکولی تا مواد در حالت توده می‌پردازد، برای بررسی همبستگی و وابستگی در نانوذرات هم به کار می‌رود [۲]. در نانوذرات، تفاوت در اندازه‌ی ذرات به معنای اختلاف در گاف انرژی، جذب و گسیل ذرات می‌باشد، در واقع تنظیم خواص مختلف این ذرات از جمله خواص الکترونی، ساختاری، اپتیکی و مغناطیسی با کنترل اندازه‌ی ذرات امکان‌پذیر است [۱].

وابستگی خواص اپتیکی و الکتریکی اساسی به اندازه ذرات، تنها زمانی مشاهده می‌شود که فاصله‌ی ترازهای الکترونی بیشتر از دما باشد ($E_g > kT$). در یک دمای مشخص، این گذار برای نیم‌رساناها در ابعاد بزرگتری نسبت به فلزات یا نارساها رخ می‌دهد، که علت این امر این است که نوارهای انرژی یک جامد در حوالی ترازهای انرژی اتمی قرار گرفته اند و پهنای نوار به برهم‌کنش با نزدیک‌ترین همسایه بستگی دارد، در حالت وان‌دروالس یا در مورد بلورهای مولکولی (که برهم‌کنش با نزدیک‌ترین همسایه ضعیف است)، نوارها بسیار باریک هستند و در نتیجه با تغییر اندازه، تغییر چشمگیری در خواص ماده مشاهده نمی‌شود. با افزایش اندازه‌ی ذرات، ابتدا مرکز نوار و سپس لبه‌ها جابجا می‌شوند. بنابراین در فلزات که ترازهای فرمی در مرکز نوار قرار دارند، فاصله ترازهای انرژی مربوطه کم است و حتی برای ذرات نسبتاً کوچک خواص اپتیکی و الکتریکی به صورت پیوسته می‌باشند. اما در مورد نیم‌رساناها تراز فرمی بین دو نوار قرار دارد، به گونه‌ای که لبه‌های نوارها رفتارهای اپتیکی و الکتریکی را تحت تأثیر قرار می‌دهند [۲].

این دلایل و بسیاری دلایل دیگر باعث شده نانوذرات نیمرسانا به صورت گسترده‌ای مورد بررسی قرار بگیرند. در این کار نیز یک نیمرسانا برای بررسی خواص اپتیکی مواد در ابعاد نانو در نظر گرفته شده است و از این پس روی این گروه از مواد متمرکز می‌شویم.

۱-۲- نانوذرات نیمرسانا

در یک نیمرسانا در حالت توده، الکترون‌های رسانش آزادانه در ماده حرکت می‌کنند، بنابراین طیف انرژی آنها تقریباً پیوسته است و چگالی حالت‌های الکترونی مجاز در واحد انرژی یک تابع درجه دو از انرژی خواهد بود [۳]. در این حالت، نوارهای انرژی به وسیله گاف انرژی که برای الکترون ممنوع است، جدا می‌شوند. پراکندگی ترازهای انرژی، به عدم‌موج پیوسته‌ی k بستگی دارد. با در نظر گرفتن تقریب جرم مؤثر، رابطه پراکندگی ترازها به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*(k)} \quad (1-1)$$

که در آن $m^*(k)$ جرم مؤثر الکترون یا حفره می‌باشد. $m^*(k)$ تابعی است که اثر تناوب بلور روی حامل‌ها را نشان می‌دهد و در یک ماده واقعی تابعی از بردار موج است. اما اگر نوار انرژی ماده سهموی در نظر گرفته شود، برای بیشتر نیمرساناها در نزدیکی $k=0$ [۴]، یک ثابت است. $m^*(k)$ رابطه مستقیمی با جرم واقعی حامل بار ندارد و معمولاً کوچکتر است [۴].

در حالت پایه نیمرسانا، نوار ظرفیت پر و نوار رسانش خالی است. با جذب فوتون، الکترون‌ها می‌توانند از نوار ظرفیت به نوار رسانش بروند. برای حفظ پایستگی انرژی و تکانه، حفره‌ها به حالت‌های متناظر در نوار ظرفیت می‌روند. گاف انرژی (E_g) ، که انرژی آستانه برای یک گذار الکترونی از نوار ظرفیت به نوار رسانش می‌باشد [۴] را می‌توان به صورت حداقل انرژی لازم برای تولید یک جفت الکترون-حفره آزاد نیز تعریف کرد. شکل (۱-۲) نمایش گذار بین نوار ظرفیت و رسانش است.