پژوهش در آموزش علوم تجربی، دوره ۱۲، شماره ۴۲، بهار ۱۴۰۵، صفحات ۹۳-۷۹

"ویژه‌نامه ششمین همایش ملی آموزش فیزیک"

پژوهش در آموزش علوم تجربی

شاپا الکترونیکی: ۸۸۸۹-۳۱۱۵

Home Page: https://basicscience.cfu.ac.ir

از تابناکی تا نورتابناکی: بررسی پدیده‌ی اپتیکی غیرخطی در نقاط کوانتومی با روش نظریه‌ی تابعی چگالی(DFT)

فاطمه شیعه‌زاده*[۱]، رضا آقبلاغی[۲]، علی نوید[۲]

۱. دانشجوی دکتری فوتونیک، دانشگاه بناب، بناب، ایران.

۲. دانشیارگروه علوم پایه. دانشگاه بناب، بناب. ایران.

* نویسنده مسئول: (f.shiehzadeh@student.alzahra.ac.ir)

اطلاعات مقاله

نوع مقاله:
مقاله پژوهشی

تاریخچه مقاله:
تاریخ دریافت: ۱۴۰۵/۰۳/۱۷
تاریخ بازنگری: ۱۴۰۵/۰۳/۱۹
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۵/۰۳/۱۹
تاریخ انتشار: ۱۴۰۵/۰۳/۲۵

کلیدواژه‌ها:
تابناکی،
نورتابناکی،
اپتیک غیرخطی،
نقاط کوانتومی،
نظریه تابعی چگالی.

چکیده

متن چکیده

تابناکی پدیده‌ای است که در آن یک ماده، بدون نیاز به افزایش محسوس دما، انرژی جذب‌شده را به‌صورت تابش نوری آزاد می‌کند و به‌عنوان یکی از پدیده‌های بنیادی در فیزیک نور، بیانگر گسیل فوتون از ماده در اثر برانگیزش غیرحرارتی است. این پدیده در حالت‌های خاصی از تابش نوری شدید، رفتار غیرخطی از خود نشان می‌دهد و از این رو در شاخه‌ی اپتیک غیرخطی مورد توجه ویژه قرار گرفته است. بررسی‌های اخیر نشان داده‌اند که نقاط کوانتومی به‌دلیل ساختار گسسته‌ی ترازهای انرژی و اثرات محصورشدگی کوانتومی، بستر بسیار مناسبی برای مطالعه و کنترل تابناکی هستند. در این مواد، فرآیندهایی چون جذب چندفوتونی، تغییر طیف گسیل و افزایش بازده نورتابناکی با تغییر اندازه و ترکیب نقاط کوانتومی قابل تنظیم است.

در این تحقیق، با مروری بر مبانی نظری تابناکی و بررسی انواع آن، به‌ویژه روابط میان تابناکی، نورتابناکی و رفتارهای غیرخطی در مواد نانوساختار — به‌ویژه نقاط کوانتومی — تحلیل شده است. این تحلیل با هدف شناسایی ویژگی‌های فیزیکی مؤثر بر شدت، بازده و پایداری تابش نوری در میدان‌های قوی انجام گرفت. شبیه سازی های این قسمت از پژوهش با نظریه ی تابعی چگالی انجام شده است .

نورتابناکی، رفتار این پدیده در حضور میدان‌های نوری شدید مورد بررسی قرار گرفته است. تمرکز اصلی این پژوهش، بر تبیین رابطه‌ی بین نورتابناکی و نقاط کوانتومی است تا نقش ساختار الکترونی و اثرات اپتیکی غیرخطی در کنترل تابش نوری روشن شود. نتایج این مطالعه می‌تواند در درک بهتر مکانیزم‌های گسیل نور در مقیاس نانو و طراحی لیزرهای پیشرفته مبتنی بر نقاط کوانتومی مؤثر واقع شود.

استناد: شیعه‌زاده، فاطمه؛ آقبلاغی، رضا؛ و نوید، علی، (۱۴۰۵). از تابناکی تا نورتابناکی: بررسی پدیده‌ی اپتیکی غیرخطی در نقاط کوانتومی با روش نظریه‌ی تابعی چگالی(DFT). پژوهش در آموزش علوم تجربی، ۱۲ (۴۲)، ۹۳-۷۹.

http//doi.org/10.48310/basic.2026.23211.1605

© نویسندگان.

ناشر: دانشگاه فرهنگیان.

۱. مقدمه

تابناکی[1] پدیده‌ای است که در آن یک ماده، بدون نیاز به افزایش محسوس دما، انرژی جذب‌شده را به‌صورت تابش نوری آزاد می‌کند. در این فرآیند، الکترون‌های اتم یا مولکول ماده با جذب انرژی از منبعی بیرونی — نظیر نور، جریان الکتریکی، تابش ذرات یا واکنش شیمیایی — به ترازهای انرژی بالاتر برانگیخته می‌شوند و سپس با بازگشت به حالت پایه، فوتون‌هایی با انرژی مشخص گسیل می‌کنند. این تابش می‌تواند در گستره‌ای از طیف مرئی تا فرابنفش و فروسرخ ظاهر شود و ویژگی‌های آن به ساختار الکترونی و محیط فیزیکی ماده وابسته است (کالسوم و همکاران، ۲۰۲۱).

در حالت کلی، اگر شدت میدان الکترومغناطیسی تابش‌کننده کم باشد، رفتار ماده را می‌توان اپتیک خطی دانست؛ بدین معنا که شدت نور گسیلی متناسب با شدت نور تحریک‌کننده است. اما هنگامی که ماده تحت تابش نوری پرقدرت قرار گیرد، پاسخ نوری آن دیگر خطی نخواهد بود و فرآیندهایی چون جذب دوفوتونی، چندفوتونی یا تغییر طیف گسیل رخ می‌دهند. در چنین شرایطی، تابناکی را می‌توان یک پدیده‌ی اپتیک غیرخطی دانست؛ زیرا شدت تابش گسیلی تابعی غیرخطی از شدت نور تحریک‌کننده است (بلیند و مانچ، ۲۰۲۴). این ویژگی در نقاط کوانتومی۲ و بلورهای غیرمرکزی به‌خوبی مشاهده می‌شود (خیه و همکاران، ۲۰۲۵).

همچنین لازم به تذکر است که مفهوم تابناکی با درخشندگی[3] اشتباه نشود. تابناکی مفهومی فیزیکی است که به هرگونه گسیل نور از ماده اشاره دارد، در حالی که درخشندگی کمیتی تابشی است که کل توان نوری گسیل‌شده از یک جسم را بر توصیف می‌کند؛ و چون از جنس توان است با واحد توان یعنی وات و یا متناسب با موضوع با واحد لومن[4] بیان می‌شود. افزون بر این، تابناکی با فروزندگی[5] نیز تفاوت دارد؛ در فروزندگی، گسیل نور ناشی از گرمایش ماده و برانگیزش حرارتی الکترون‌هاست، در حالی که در تابناکی، برانگیزش از طریق فرایندهای غیرحرارتی مانند جذب فوتون یا واکنش شیمیایی صورت می‌گیرد.

در میان انواع تابناکی می‌توان به زیست‌تابناکی[6]، تابناکی شیمیایی[7]، تابناکی گرمایی[8]، تابناکی الکتریکی[9]، کاتدتابناکی[10]، تابناکی چندفوتونی[11]، و نورتابناکی[12] اشاره کرد. هر یک از این انواع با وجود ساز و کار فیزیکی یا شیمیایی متفاوت دارای مفاهیم پایه‌ی مشابهی هستند که در این کوشش بررسی خواهند شد. در این مقاله پدیده‌ی نورتابناکی و نمود آن در نانوساختارهای نوع نقاط کوانتومی مورد بحث قرار خواهد گرفت و کاربردهای آن در لیزرهای پیشرفته بررسی می‌شود (کالسوم و همکاران، ۲۰۲۱).

۲. روش شناسی پژوهش

در این پژوهش، از روش کتابخانه‌ای به‌منظور بررسی و تحلیل مفهومی پدیده‌ی تابناکی و رفتار غیرخطی آن در نقاط کوانتومی استفاده شده است. روش کتابخانه‌ای، رویکردی نظام‌مند برای گردآوری، تحلیل و تفسیر داده‌های نظری از منابع علمی معتبر است که هدف آن، تبیین و یکپارچه‌سازی یافته‌های پژوهش‌های پیشین در قالب یک چارچوب تحلیلی جدید می‌باشد.

در گام نخست، منابع علمی منتشرشده در پایگاه‌های داده‌ی معتبر بین‌المللی شامل Elsevier، Springer، APS، OSA، ACS، Nature، Science، MDPI، IEEE و Frontiers بررسی و مقالات مرتبط با موضوع تابناکی، نورتابناکی، اپتیک

---

[1] Luminescence
[2] Quantum dot
[3] Luminosity
[4] Lumen
[5] Incandescence
[6] Bioluminescence
[7] Chemiluminescence
[8] Thermoluminescence
[9] Electroluminescence
[10] Cathodoluminescence
[11] Multiphoton Luminescence
[12] Photoluminescence

غیرخطی و نقاط کوانتومی استخراج شد. سپس با تحلیل محتوای این مقالات، مفاهیم کلیدی، مدل‌های نظری و یافته‌های تجربی پیشین مورد مقایسه و طبقه‌بندی قرار گرفتند.

در مرحله‌ی بعد، بر اساس چارچوب نظری حاصل از مرور منابع، روابط میان تابناکی، نورتابناکی و رفتارهای غیرخطی در مواد نانوساختار — به‌ویژه نقاط کوانتومی — تحلیل شد. این تحلیل با هدف شناسایی ویژگی‌های فیزیکی مؤثر بر شدت، بازده و پایداری تابش نوری در میدان‌های قوی انجام گرفت. که شبیه سازی‌های این قسمت از پژوهش با نظریه‌ی تابعی چگالی انجام شده‌است.

در نهایت، نتایج حاصل از این مرور نظام‌مند به‌صورت تلفیقی ارائه شد تا ضمن تبیین بنیان‌های نظری، مسیرهای تحقیقاتی آینده در زمینه‌ی کاربرد نورتابناکی نقاط کوانتومی در سامانه‌های لیزری و اپتیک غیرخطی مشخص گردد.

در آخر مشهورترین ماده‌ای که نخستین لیزر از آن ساخته شد ،یاقوت با ترکیب Al_2O_3، را به‌صورت یک کوانتوم‌دات با روش نظریه *تابعی چگالی*[1] شبیه‌سازی کردیم. نظریه‌ی تابعی چگالی به عنوان یکی از روش‌های محاسباتی قدرتمند در فیزیک ماده‌ی چگال شناخته می‌شود که امکان شبیه‌سازی ساختار الکترونیکی، بهینه‌سازی هندسه و تعیین گاف انرژی را با دقت بالا فراهم می‌کند. شبیه‌سازی‌های نظریه *تابعی چگالی*، به‌طور گسترده برای مطالعه‌ی اثر آلایش و تغییر گاف انرژی در مواد اکسیدی و ساختارهای نانومقیاس به کار رفته‌اند و نتایج قابل‌اطمینانی ارائه می‌دهند.

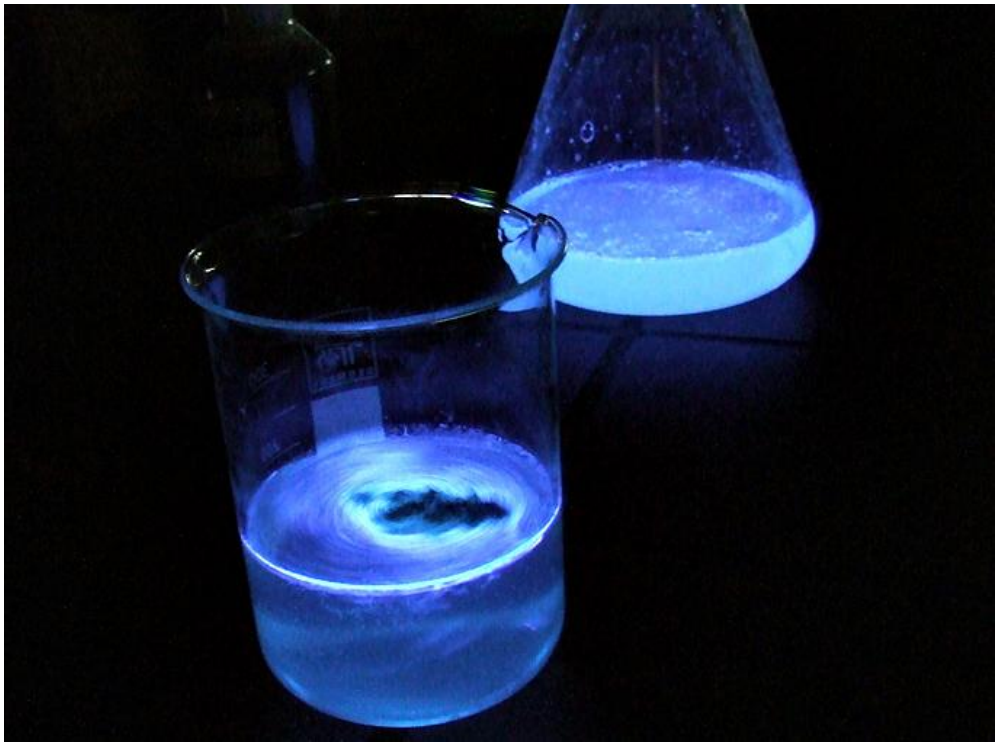
۳. مباحث اصلی و نتایج

مشهودترین پدیده‌ی تابناکی در طبیعت به‌صورت زیست‌تابناکی مشاهده می‌شود، پدیده‌ای شگفت‌انگیز که در آن برخی موجودات زنده مانند باکتری‌ها، جلبک‌ها، قارچ‌ها و جانوران دریایی، نور را به‌طور طبیعی از بدن خود گسیل می‌کنند. این تابش حاصل واکنشی شیمیایی میان مواد آلی ویژه‌ای به نام لوسیفرین و آنزیم لوسیفراز است که در حضور اکسیژن، انرژی شیمیایی را به نور تبدیل می‌کند. زیست‌تابناکی علاوه بر زیبایی بصری، کارکردهای زیستی گوناگونی دارد؛ از جمله جلب طعمه، استتار، برقراری ارتباط یا هشدار به شکارچیان. بررسی این پدیده نه تنها به درک عمیق‌تر از فرآیندهای زیستی منجر می‌شود، بلکه زمینه‌ساز نوآوری‌هایی در حوزه‌های زیست‌فناوری، پزشکی و فناوری‌های نوری پایدار نیز شده است. در ادامه، سایر انواع تابناکی مورد بحث قرار می‌گیرد که بشر به‌صورت تجربی و علمی دامنه‌ی شناخت خود را به آن‌ها گسترش داده است.

۳- ۱ تابناکی شیمیایی

تابناکی شیمیایی نوعی گسیل نور است که در اثر انجام واکنش‌های شیمیایی بدون نیاز به گرما ایجاد می‌شود. در این فرآیند، انرژی حاصل از واکنش شیمیایی مستقیماً به‌صورت نور آزاد می‌شود، نه به شکل حرارت. یکی از شناخته‌شده‌ترین نمونه‌های آن در وسایل شب‌تاب مانند چراغ‌های اضطراری[2] دیده می‌شود که در آن دو محلول با هم واکنش داده و نور ملایمی ساطع می‌کنند. این پدیده در علوم زیستی نیز کاربرد دارد، به‌ویژه در روش‌های تشخیصی و سنجش‌های زیست‌شیمیایی که از تابناکی شیمیایی برای آشکارسازی مواد خاص در مقیاس بسیار کم استفاده می‌شود. در شکل۱ نمونه‌ای از تابناکی شیمیایی توسط لومینول را مشاهده می‌کنید (تورو و رامامورثی، ۲۰۱۰).

[1] DFT: Density Functional Theory.
[2] Glow stick

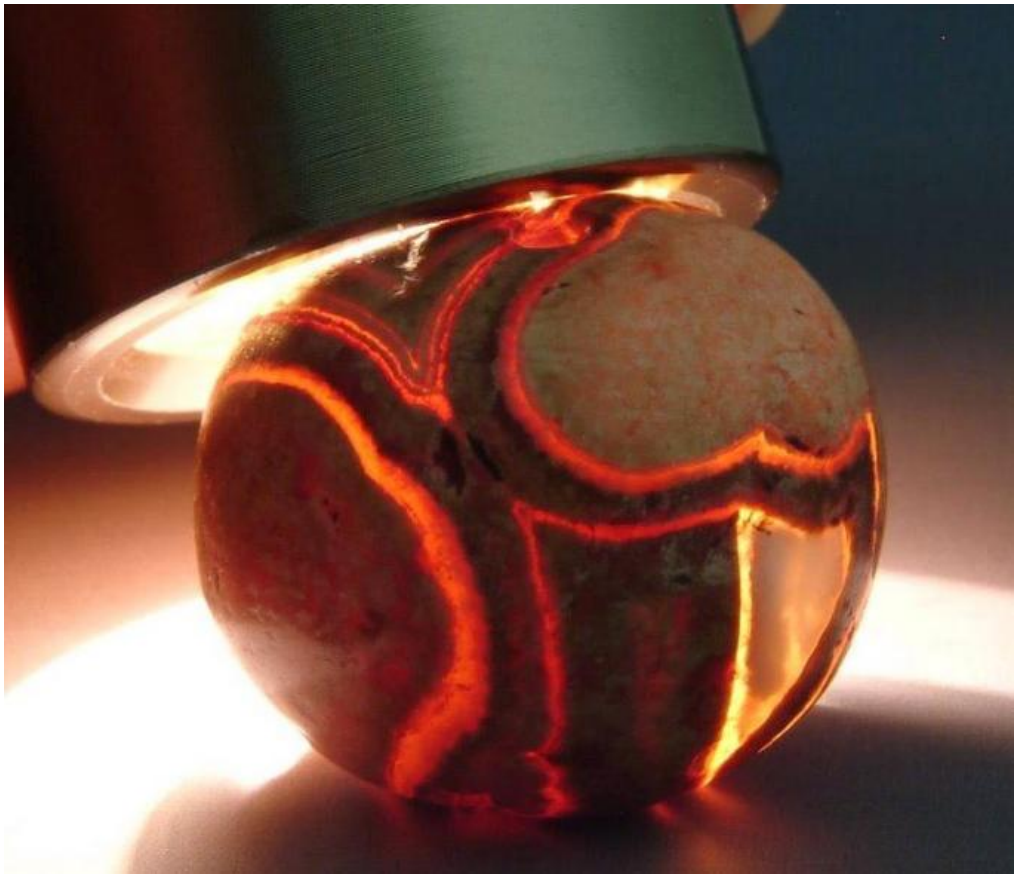


شکل ۱. تابناکی شیمیایی لومینول در محلول قلیایی در حضور آب اکسیژنه و هموگلوبین، که منجر به گسیل نور آبی در اثر واکنش اکسایش می‌شود.

تابناکی شیمیایی لومینول یکی از شناخته‌شده‌ترین مثال‌های تابناکی در آزمایشگاه و کاربردهای عملی است. در محیط قلیایی و در حضور آب اکسیژنه و هموگلوبین، واکنش اکسایش لومینول باعث تولید گونه‌ای برانگیخته می‌شود که هنگام بازگشت به حالت پایه، نور آبی مشخصی گسیل می‌کند. این فرآیند نه تنها نمونه‌ای واضح از تبدیل انرژی شیمیایی به نور است، بلکه نشان‌دهنده نقش کاتالیزوری هموگلوبین در تسریع واکنش‌های اکسیداسیونی است. به دلیل حساسیت بالای این تابناکی، روش‌های مبتنی بر لومینول در شناسایی مقادیر اندک خون در تحقیقات جنایی، مطالعات زیست‌شیمیایی و آزمون‌های تشخیصی کاربرد گسترده‌ای یافته‌اند. همچنین، این پدیده الگویی مناسب برای درک اصول کلی تابناکی شیمیایی فراهم می‌کند و پایه‌ای برای توسعه‌ی سنسورهای شیمیایی و بیوشیمیایی نور–محور به شمار می‌آید.

۳-۲ تابناکی گرمایی

تابناکی گرمایی به تابش نوری گفته می‌شود که در اثر دمای بالا از اجسام گسیل می‌شود. هر جسمی با افزایش دما شروع به تابش نور در طول موج‌های مختلف می‌کند و در دماهای بسیار بالا، نور قابل رؤیت از خود منتشر می‌کند. نمونه‌ی کلاسیک آن رشته‌ی تنگستنی در لامپ‌های رشته‌ای است که بر اثر عبور جریان برق و افزایش دما تا حدود ۲۵۰۰ تا ۳۰۰۰ درجه سانتی‌گراد، نور سفید تولید می‌کند. این نوع تابناکی اساس بسیاری از پدیده‌های طبیعی مانند درخشندگی گدازه‌های آتشفشانی و نور ستارگان نیز هست. شکل ۲. نمونه‌ای از کاربرد این روش برای تعیین قدمت سفال‌ها و سایر مواد حرارت‌دیده در گذشته را نشان می‌دهد.



شکل ۲. تعیین قدمت سفالینه‌ها با روش تابناکی گرمایی.

روش تابناکی گرمایی یکی از شیوه‌های علمی و دقیق برای تعیین سن آثار سفالی و دیگر مواد حرارت‌دیده در باستان‌شناسی است. در این روش، نمونه‌ای کوچک از سفال در آزمایشگاه گرم می‌شود تا انرژی ذخیره‌شده در ساختار بلوری مواد معدنی آن به‌صورت نور آزاد گردد. مقدار این نور نشان‌دهنده‌ی مدت زمانی است که از آخرین باری که سفال تا دمای بالا حرارت دیده گذشته است. به کمک این اطلاعات می‌توان زمان تقریبی ساخت یا آخرین پخت سفال را محاسبه کرد. این روش به پژوهشگران کمک می‌کند تا قدمت آثار باستانی را بدون نیاز به اطلاعات تاریخی مستقیم، با دقت علمی برآورد کنند (چن و همکاران، ۱۹۹۷).

۳-۳ تابناکی الکتریکی

تابناکی الکتریکی زمانی رخ می‌دهد که ماده‌ای در اثر اعمال میدان الکتریکی یا عبور جریان برق، فوتون‌هایی از خود گسیل کند. این پدیده در مواد نیمه‌هادی مانند دیودهای نورافشان (LED) یا در نمایشگرهای OLED[1] دیودهای نوری ارگانیک به‌طور گسترده مورد استفاده قرار گرفته است. در این حالت، الکترون‌ها و حفره‌ها در ناحیه‌ی پیوند p–n ترکیب شده و انرژی آزادشده به‌صورت نور منتشر می‌شود. تابناکی الکتریکی به دلیل بازده بالا، مصرف کم انرژی و قابلیت کنترل دقیق رنگ و شدت، انقلابی در صنعت روشنایی و نمایشگرهای الکترونیکی ایجاد کرده است. درشکل۳. نمونه‌ای از تابناکی الکتریکی را که برای روشنایی یکنواخت در محیط‌های تاریک استفاده می‌شود، مشاهده می‌کنید (شر، ۱۹۹۰).

[1] Organic Light Emitting Diode :OLED

شکل ۳. ساعت دیجیتال LCD کاسیو با نور پس‌زمینه‌ی الکترولومینسنت: نمونه‌ای از نمایشگرهای کریستال مایع که از تابش الکترولومینسنت برای روشنایی یکنواخت در محیط‌های تاریک استفاده می‌کند.

در تصویر، یک ساعت دیجیتال کاسیو با نمایشگر LCD و نور پس‌زمینه‌ی تابناکی الکتریکی (EL) دیده می‌شود. این فناوری با بهره‌گیری از یک لایه نازک از ماده‌ی فسفری، هنگام اعمال ولتاژ متناوب، نور یکنواختی در سراسر صفحه تولید می‌کند. برخلاف نورهای نقطه‌ای LED، تابش الکترولومینسنت تمام سطح نمایشگر را با روشنایی ملایم و همگن پوشش می‌دهد و خوانایی اعداد را در تاریکی افزایش می‌دهد. این ویژگی موجب شده تا ساعت‌های دیجیتال الکترولومینسنت به‌ویژه در محیط‌های کم‌نور، شب‌هنگام یا در فعالیت‌های بیرونی، عملکردی مطمئن و کارآمد داشته باشند. همچنین این فناوری به علت مصرف توان پایین و توزیع همگن نور، هنوز در بسیاری از ابزارهای قابل‌حمل نظیر ماشین‌حساب‌ها و ابزارهای نظامی کاربرد دارد.

۳-۴ کاتدتابناکی

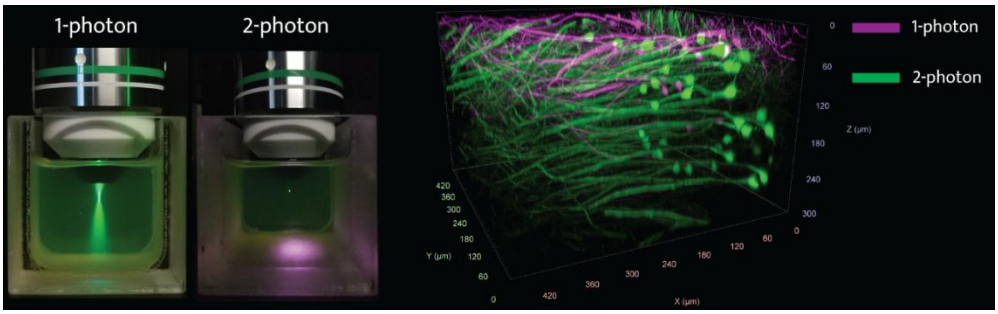
کاتدتابناکی نوعی تابش نوری است که در اثر برخورد الکترون‌های پرانرژی با سطح مواد ایجاد می‌شود. زمانی که این الکترون‌ها به ماده برخورد می‌کنند، انرژی خود را به الکترون‌های درونی‌تر منتقل کرده و آن‌ها را به ترازهای انرژی بالاتر می‌فرستند؛ سپس با بازگشت به حالت پایه، نور گسیل می‌شود. این پدیده کاربرد گسترده‌ای در میکروسکوپ‌های الکترونی دارد، زیرا می‌تواند ویژگی‌های بلوری، ترکیب شیمیایی و عیوب ساختاری مواد معدنی و نیمه‌هادی‌ها را آشکار کند. کاتدتابناکی یکی از ابزارهای کلیدی در زمین‌شناسی و علم مواد محسوب می‌شود. شکل ۴. نمونه‌ای از پدیده‌ی کاتد تابناکی در یک الماس تراش‌خورده است (ویلیام و کارتر، ۲۰۰۹).

شکل ۴. نمایش پدیده‌ی کاتدتابناکی در الماس تراش‌خورده، ثبت‌شده توسط میکروسکوپ الکترونی با میدان دید ۳/۴۵ میلی‌متر که نواحی تابناک ناشی از برانگیختگی الکترونی را نشان می‌دهد.

در این تصویر، نمونه‌ای از پدیده‌ی کاتدتابناکی در یک الماس تراش‌خورده دیده می‌شود. در این روش، پرتوهای الکترونی به سطح الماس تابانده می‌شوند و باعث تحریک اتم‌ها و برخی نواحی درون بلور می‌شوند. این نواحی هنگام بازگشت به حالت طبیعی خود، نور مرئی گسیل می‌کنند و در تصویر به شکل نقاط یا نوارهای درخشان دیده می‌شوند. رنگ و شدت این تابش‌ها می‌تواند اطلاعاتی درباره‌ی ناخالصی‌ها و ویژگی‌های درونی الماس در اختیار پژوهشگران بگذارد. بررسی چنین تصاویری به دانشمندان کمک می‌کند تا ساختار بلور و شرایط شکل‌گیری آن را بهتر بشناسند و برای مطالعه‌ی سایر مواد معدنی و سنگ‌های قیمتی نیز استفاده می‌شود علاوه برموارد گفته شده، این روش ابزاری قدرتمند برای شناسایی منشاء رشد، تاریخچه‌ی زمین‌شناسی، کیفیت اپتیکی و در مطالعات مربوط به نیمه‌رساناها، مواد فوتونیکی و بلورهای معدنی به‌طور گسترده به کار گرفته می‌شود.

۳-۵ تابناکی چندفوتونی

تابناکی چندفوتونی پدیده‌ای کوانتومی است که در آن ماده با جذب هم‌زمان دو یا چند فوتون کم‌انرژی، به حالت برانگیخته می‌رسد و سپس نوری با طول موج کوتاه‌تر (انرژی بالاتر) گسیل می‌کند. این فرآیند تنها در شدت‌های نوری بالا، مانند لیزرهای پالسی، قابل مشاهده است. تابناکی چندفوتونی در میکروسکوپ‌های پیشرفته برای تصویربرداری از بافت‌های زنده بدون آسیب‌رسانی به سلول‌ها استفاده می‌شود و به دلیل وضوح بالا و نفوذ بیشتر در عمق نمونه، کاربرد گسترده‌ای در زیست‌پزشکی و نانوفوتونیک دارد. در شکل۵. تصویربرداری میکروسکوپ چند فوتونی را مشاهده می‌کنید.



شکل ۵. میکروسکوپی چندفوتونی: روشی نوری که از دهه‌ی ۱۹۹۰ به کار گرفته شده و با استفاده از برانگیختگی چندفوتونی، امکان دیدن ساختارهای زنده را در عمق بافت‌ها فراهم می‌کند، بدون آن‌که تصویر دچار نور پس‌زمینه یا تاری شود.

در این تصویر، از روش میکروسکوپی چندفوتونی برای مشاهده‌ی بافت زنده استفاده شده است. در این روش، پرتو لیزر تنها در نقطه‌ی خاصی از نمونه باعث تابش نور فلورسانس می‌شود، بنابراین تصویر نهایی روشن، دقیق و بدون نور اضافی است. به کمک این فناوری می‌توان ساختارها و فرآیندهای زیستی را در عمق بافت‌ها بررسی کرد، بدون آن‌که به سلول‌ها آسیب زیادی برسد. به همین دلیل، میکروسکوپی چندفوتونی یکی از ابزارهای مهم در پژوهش‌های زیست‌پزشکی و علوم اعصاب به شمار می‌رود (دنکو استریکلر، ۱۹۹۰).

۳-۶ نورتابناکی

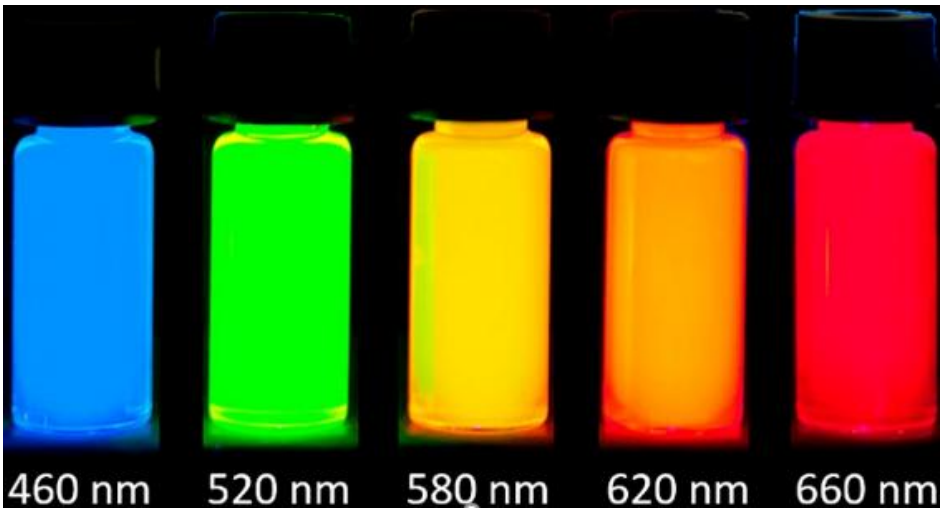
نورتابناکی زمانی رخ می‌دهد که ماده‌ای پس از جذب فوتون‌های نوری، انرژی دریافتی را به‌صورت نور بازگسیل کند. این فرآیند شامل دو نوع اصلی است: فلورسانس که در آن تابش تقریباً بلافاصله پس از جذب رخ می‌دهد و فسفرسانس که در آن تابش با تأخیر زمانی بیشتر ادامه می‌یابد. نورتابناکی ابزاری بسیار حساس برای مطالعه‌ی ساختار الکترونی مواد، نیمه‌هادی‌ها و نقاط کوانتومی است. همچنین در حسگرهای نوری، لیزرها و فناوری‌های تصویربرداری زیستی کاربرد فراوانی دارد و از مهم‌ترین انواع تابناکی در پژوهش‌های فیزیکی و شیمیایی محسوب می‌شود (تورو و رامورثی، ۲۰۱۰). در شکل۶. درخشش محلول‌های فلورسنت هنگام تابش نور فرابنفش را مشاهده می‌کنید.

شکل ۶. درخشش محلول‌های فلورسنت هنگام تابش نور فرابنفش(UV) .

وقتی محلول‌های حاوی مواد فلورسنت در معرض نور فرابنفش قرار می‌گیرند، شروع به درخشیدن با رنگ‌های زیبا و متفاوت می‌کنند. این پدیده به دلیل آن است که مولکول‌های موجود در محلول، انرژی نور فرابنفش را جذب کرده و سپس بخشی از آن را به صورت نور مرئی بازتاب می‌دهند. به این رفتار «فلورسانس» گفته می‌شود. رنگ و شدت این درخشش به نوع ماده‌ی فلورسنت و مقدار آن در محلول بستگی دارد. از این ویژگی در آموزش علوم، آزمایش‌های شیمی و زیست‌شناسی، و حتی در صنایع مختلف مانند تولید رنگ‌ها و نشانگرهای ایمنی استفاده می‌شود.

کاربرد نورتابناکی در نقاط کوانتومی

نقاط کوانتومی نانوذرات نیمه‌رسانایی هستند که به دلیل ابعاد بسیار کوچک خود (در حد چند نانومتر) رفتارهای کوانتومی منحصربه‌فردی نشان می‌دهند. یکی از مهم‌ترین ویژگی‌های نقاط کوانتومی، نورتابناکی قابل‌تنظیم است؛ به این معنا که با تغییر اندازه‌ی نقاط کوانتومی، می‌توان طول موج (و در نتیجه رنگ) نور تابشی را به‌صورت دقیق کنترل کرد. در شکل۷. نقاط کوانتومی را مشاهده می‌کنید.



شکل ۷- نقاط کوانتومی: ذرات نانو نیمه‌هادی با خواص نوری و الکترونیکی وابسته به اندازه.

همانطور که مشاهده می‌شود هرچقدر نقاط کوانتومی کوچکتر شود انرژی ذره بالاتر رفته و رنگ آن آبی‌تر می‌شود و برعکس هرچقدر بزرگتر شوند انرژی ذره پایین‌تر می‌آید و رنگ آن قرمزتر می‌شود.

این پدیده به خاطر اثر محصورسازی کوانتومی رخ می‌دهد. محصورسازی کوانتومی[1] پدیده‌ای است که وقتی اندازه‌ی یک ماده‌ی نیمه‌هادی در مقیاس نانومتر (معمولاً کمتر از ۱۰ نانومتر) کاهش می‌یابد، خواص الکترونیکی و نوری آن تغییر می‌کند (لاکوویز، ۲۰۰۶). در این حالت، الکترون‌ها و حفره‌ها دیگر آزادانه حرکت نمی‌کنند، بلکه در یک فضای بسیار کوچک محبوس می‌شوند و انرژی آن‌ها به صورت گسسته خواهد بود. علت به وجود آمدن محدودیت کوانتومی این است که در مواد معمولی، الکترون‌ها می‌توانند در یک نوار انرژی تقریباً پیوسته حرکت کنند. اما وقتی اندازه‌ی ماده نزدیک به طول موج الکترون‌ها یا شعاع باند انرژی شود، حرکت الکترون محدود می‌شود. این محدودیت باعث می‌شود انرژی‌های مجاز برای الکترون‌ها گسسته شود و تفاوت انرژی بین سطوح افزایش یابد. این پدیده در نهایت منجر به تغییر خواص نوری و الکترونیکی می‌شود. این خاصیت موجب شده است که نقاط کوانتومی در فناوری‌های نمایشگرهای دیود نورافشان نقطه کوانتومی[2]، سنسورهای زیستی نوری، نشان‌دارسازی سلولی و تصویربرداری فلورسانسی کاربرد فراوانی داشته باشند. در زیست‌پزشکی، نقاط کوانتومی با تابش نورتابناک قوی و پایداری بالا، جایگزینی برتر برای رنگ‌های فلورسانس سنتی به‌شمار می‌آیند، زیرا در برابر نور و زمان مقاومت بیشتری دارند. همچنین در پژوهش‌های فوتونیکی، از این ویژگی نورتابناکی برای طراحی لیزرهای نانومقیاس، آشکارسازهای نوری سریع و ذخیره‌سازی اطلاعات نوری استفاده می‌شود. بنابراین، نورتابناکی نقاط کوانتومی پلی میان علم نانو و فناوری‌های نوین نوری ایجاد کرده است که آینده‌ی بسیاری از سامانه‌های تصویربرداری و روشنایی را دگرگون خواهد کرد.

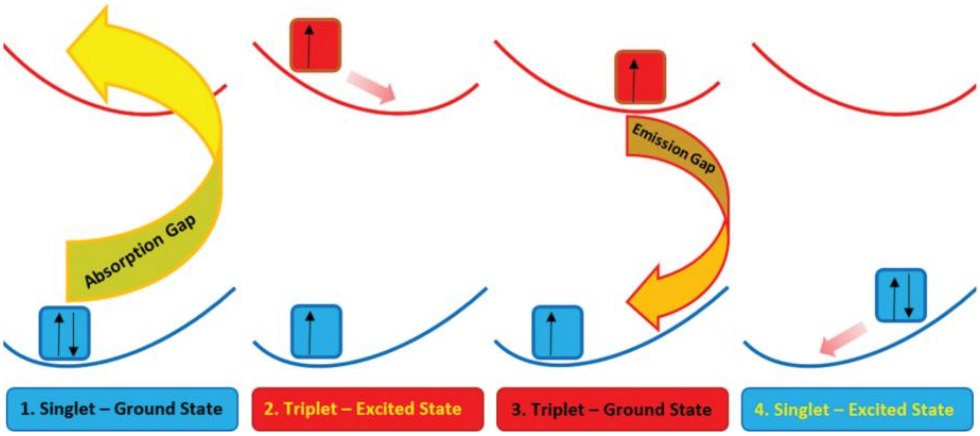
این تغییرات را می‌توان با استفاده از قوانین حصر ذره در جعبه نیز توجیه کرد. طبق رابطه‌ی (۱)، برای بررسی رابطه طول پیوند و گاف انرژی می‌توان از رابطه‌ی زیر برای چاه پتانسیل به عرض L استفاده کرد:

$$E_n = \hbar\omega_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2mL^2}, n = 1,2,3,... \quad (۱)$$

همانطور که مشاهده می‌شود طول جعبه با انرژی رابطه‌ی عکس دارد؛ یعنی با بزرگ‌تر شدن ابعاد جعبه، گاف انرژی کاهش می‌یابد. این عامل باعث می‌شود که با کوچک شدن ابعاد جعبه، انرژی ذره افزایش یافته و رنگ آن آبی‌تر می‌شود و با بزرگ‌شدن ابعاد جعبه، انرژی آن کاهش یافته و رنگ آن قرمزتر می‌شود.

این پدیده را می‌توان با نموداری تحت عنوان نمودار جابلنوسکی[3] نیز توجیه کرد. این نمودار یک نمودار انرژی در شیمی‌فیزیک و طیف‌سنجی نوری است که فرایندهای جذب، گسیل و انتقال‌های غیرتابشی در مولکول‌ها را به‌صورت ساده نشان می‌دهد. این نمودار کمک می‌کند بفهمیم یک مولکول پس از جذب نور چه مسیرهایی را می‌تواند طی کند. همچنین این نمودار پایه و اساس فهم، فلورسانس و سنجش آن، لیزرهای رنگینه، فوتوشیمی، مواد حساس به نور و طیف‌سنجی نوری است.

[1] Quantum Confinement
[2] Quantum dot display
[3] **Jablonski diagram**



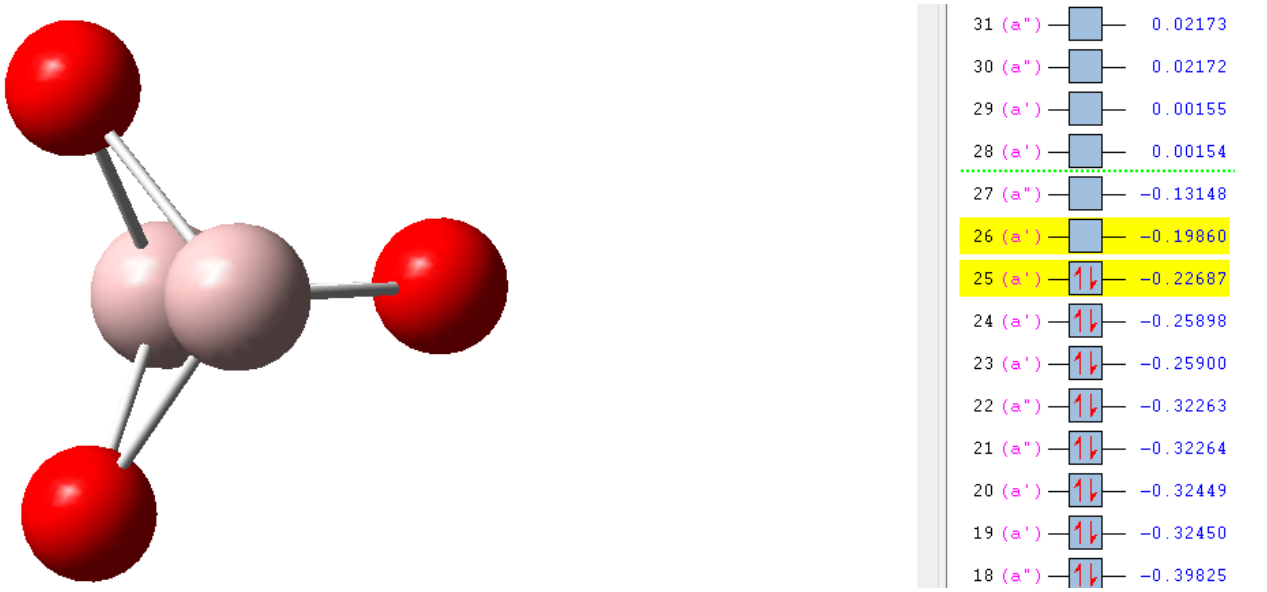
شکل ۸. نمودار جابلنوسکی (ساز و کار طیف جذبی و گسیلی) (قاسم‌نژند وقائمی، ۲۰۲۵).

نمودار جابلونسکی، که بیانگر سازوکارهای طیف‌های جذبی و گسیلی در سامانه‌های مولکولی است، تبیینی ساختاری از ترازهای انرژی الکترونی و مسیرهای گذار مجاز و غیرمجاز میان آن‌ها ارائه می‌دهد. این نمودار امکان تحلیل فرآیندهای فوتوفیزیکی نظیر جذب، ارتعاش، تبدیل درون‌سامانه‌ای(IC)، تبدیل بین‌سامانه‌ای(ISC)، و گسیل‌های تابشی از قبیل فلورسانس و فسفرسانس را با دقت و از منظر دینامیک حالت‌های برانگیخته فراهم می‌سازد.

می‌توان گفت هنگامی‌که یک تابش نور مرئی به شیشه‌های حاوی نقاط کوانتومی برخورد می‌کند، نورخاصی نخواهند داشت و خاکستری رنگ خواهند بود. مطلب حائز اهمیت، این است که اگر نوری با شدت بالا مانند نور فرابنفش به آن‌ها برخوردکند، رفتاری غیرعادی رخ می‌دهد که در اصطلاح به آن «اپتیک غیرخطی» گفته می‌شود که در آن رفتار مواد در شدت‌های بالا به صورت متفاوتی دیده می‌شود. با این نمودار نیز می‌توان این تغییر رنگ را به این صورت توضیح داد. با برخورد نوری با شدت بالا مانند نور فرابنفش به نقاط کوانتومی موردنظر، الکترون از حالت پایه برانگیخته شده و به تراز تحریکی می‌رود(مرحله۱ نمودار شکل۸). در تراز تحریکی، مقداری از انرژی الکترون به صورت گرما(مادون قرمز) آزاد می‌شود(مرحله۲ نمودار شکل۸). با برگشت الکترون به حالت پایه نوری مرئی ساطع می‌شود(مرحله۳ نمودار شکل۸.). بعد از ساطع شدن نور مرئی، مجدد آزاد شدن انرژی خواهیم داشت که این آزاد شدن انرژی، با تولید گرما همراه است(مرحله۴ نمودار شکل۸.). به همین علت این شیشه‌ها بعد از ساطع کردن نور، به علت آزاد شدن انرژی، کمی هم گرم خواهند شد.

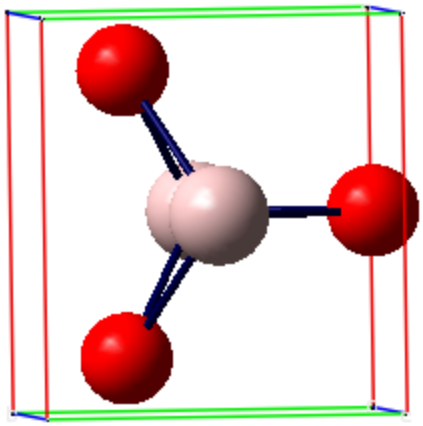
در ادامه برای نمونه، مؤلفهٔ اصلی و مشهورترین ماده‌ای که نخستین لیزر از آن ساخته شد ،یاقوت با ترکیب Al_2O_3، را در ابعاد نانویی و به‌صورت یک کوانتوم‌دات با روش *تابعی چگالی* شبیه‌سازی کردیم. نتایج به‌دست‌آمده نشان می‌دهد که گاف انرژی HOMO–LUMOاین ساختار حدود ۰٫۸ الکترون‌ولت پیش‌بینی می‌شود. این مقدار، به‌دلیل اثر محدودیت کوانتومی، بیشترین گاف قابل انتظار برای این ترکیب است و نشان می‌دهد که این ماده حتی در ابعاد بسیار کوچک نیز همچنان یک نیمه‌رسانا باقی می‌ماند. در شکل ۹، ترازهای HOMO[1] و LUMO[2] مشخص‌شده با رنگ زرد و همچنین ترازهای انرژی اطراف آن‌ها قابل مشاهده است.

[1] HOMO: highest occupied molecular orbital
[2] LUMO: lowest unoccupied molecular orbital



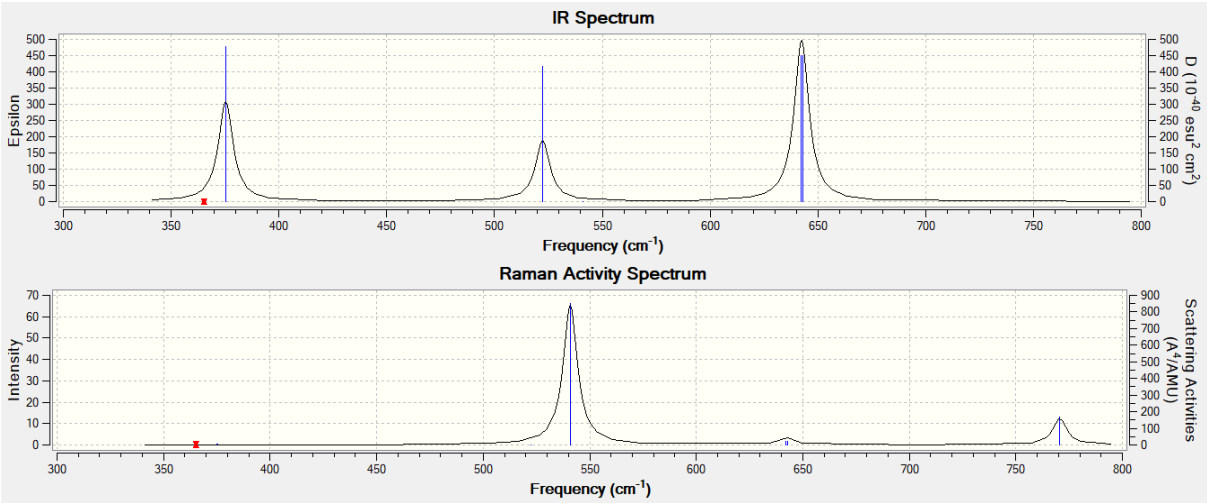
شکل ۹. برای کوانتوم دات یاقوت با ترکیب Al_2O_3 ترازهای HOMO و LUMO مشخص‌شده با رنگ زرد و همچنین ترازهای انرژی اطراف آن‌ها قابل مشاهده است.

کوانتوم دات یاقوت با ترکیب Al_2O_3، کوچکترین کوانتوم دات یاقوت است که به علت کوچک بودن بیشترین اثر محصورسازی کوانتومی را خواهد داشت. جعبه‌ای که این کوانتوم دات در آن قرارمی‌گیرد به ابعاد ۳.۵۷ در ۳.۲۳ در ۳.۱۰ آنگستروم است. در شکل ۱۰. کوانتوم دات یاقوت که در جعبه محصور شده، قابل مشاهده است.



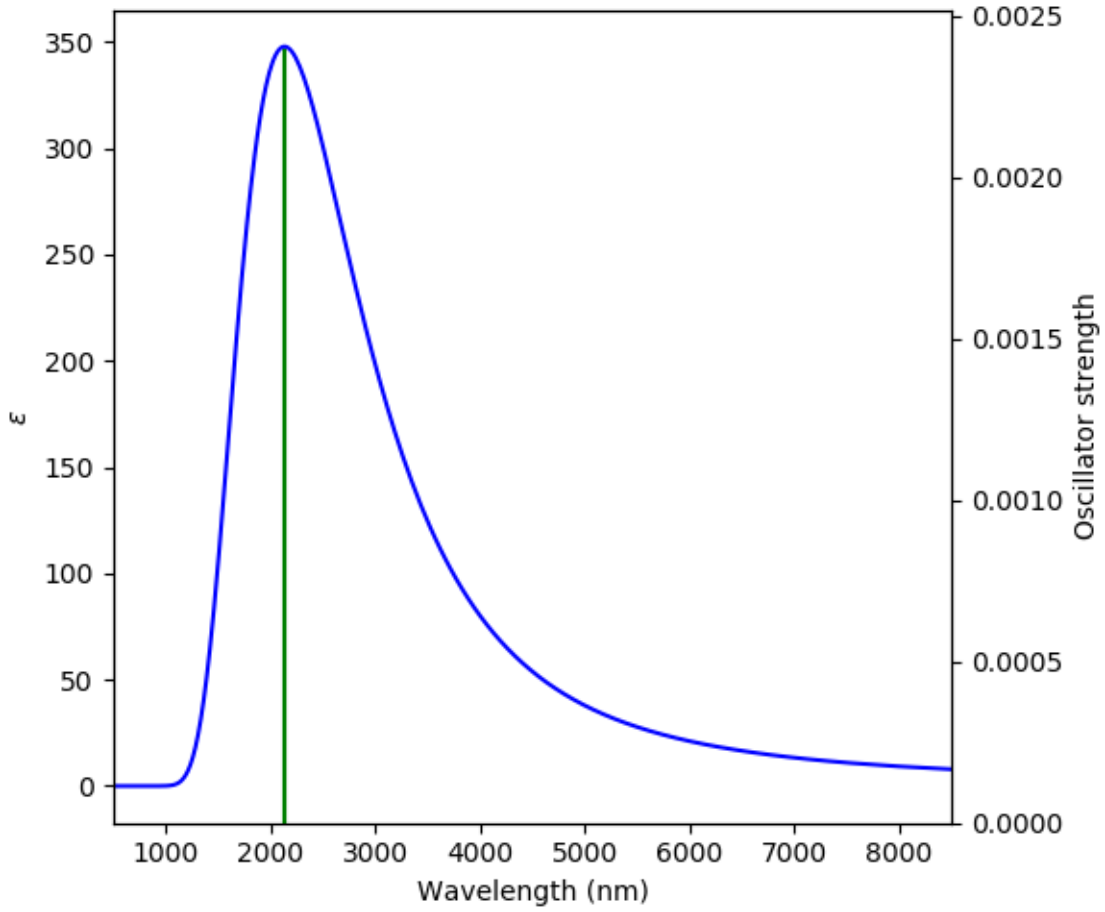
شکل ۱۰. کوانتوم دات یاقوت با ترکیب Al_2O_3 در جعبه محصور شده‌است.

برای بررسی پایداری دینامیکی این ساختار، طیف‌های فروسرخ (IR) و رامان آن محاسبه شد. در هر دو طیف هیچ فرکانس منفی‌ای مشاهده نمی‌شود؛ بنابراین ساختار از نظر دینامیکی کاملاً پایدار است. علاوه بر این، تحلیل این دو طیف امکان شناسایی مدهای ارتعاشی فعال، بررسی تقارن ساختار و ارزیابی برهم‌کنش‌های پیوندی در کوانتوم‌دات را فراهم می‌کند. طیف رامان برای شناسایی مدهای غیرفعال در IR و بررسی سختی یا نرمی پیوندها کاربرد دارد. شکل ۱۱. طیف‌های فروسرخ و رامان محاسبه‌شده را نشان می‌دهد.



شکل ۱۱. برای کوانتوم دات با ترکیب Al_2O_3 طیف‌های فروسرخ و رامان محاسبه‌شده است، و نبود فرکانس موهومی نشان از پایداری آن دارد.

حال طیف جذب فرابنفش–مرئی (UV–Vis) این ساختار نیز به‌منظور بررسی رفتار نوری و انتقالات الکترونی آن محاسبه شد. تحلیل این طیف امکان شناسایی انتقالات الکترونی مجاز، تخمین انرژی برانگیختگی و بررسی شدت و موقعیت پیک‌های جذبی را فراهم می‌کند که برای تعیین ویژگی‌های اپتوالکترونیکی کوانتوم‌دات اهمیت دارد. شکل ۱۲. طیف UV–Vis محاسبه‌شده را نشان می‌دهد.



شکل ۱۲. برای کوانتوم دات یاقوت با ترکیب Al_2O_3 طیف UV–Vis محاسبه‌شده را نشان می‌دهد.

با توجه به نتایج طیف UV–Vis، از آنجا که گاف انرژی ساختار کمتر از ۱ الکترون‌ولت است، این کوانتوم‌دات توانایی جذب امواج با طول‌موج بلندتر از ناحیه‌ی فروسرخ را دارد و بنابراین نسبت به این امواج رفتار کدر از خود نشان می‌دهد. برای انتقال پاسخ نوری این ساختار به محدوده‌ی مرئی، دیگر مهندسی ابعادی امکان‌پذیر نیست؛ زیرا کوچک‌ترین اندازه‌ای که می‌توان برای این سیستم شبیه‌سازی کرد پیش‌تر بررسی شده و کاهش بیشتر اندازه منجر به ساختار غیرفیزیکی یا ناپایدار می‌شود. بنابراین راهکار مناسب، انجام مهندسی نوار انرژی از طریق آلایش شیمیایی است. از جمله گزینه‌های مناسب برای آلایش می‌توان به فلزات واسطه‌ای مانند کروم و همچنین برخی عناصر گروه‌های ۲ و ۱۳ اشاره کرد. بررسی دقیق این آلایش‌ها و اثر آن‌ها بر ویژگی‌های نوری و الکترونیکی ساختار، از موضوعات قابل مطالعه در کارهای آینده خواهد بود.

اگر بخواهیم به طور خلاصه‌تر کاربرد نورتابناکی را برای نقاط کوانتومی بیان کنیم می‌توان گفت که نورتابناکی در نقاط کوانتومی ابزاری کلیدی برای مطالعه ویژگی‌های نوری و الکترونیکی آن‌هاست و امکان تعیین شکاف انرژی، ارزیابی کیفیت ساختاری و شناسایی نقص‌ها را فراهم می‌کند. تحلیل طیف و شدت PL، اطلاعات دقیقی درباره‌ی بازده کوانتومی، رفتار بازترکیب تابشی و غیرتابشی، و دینامیک حامل‌ها ارائه می‌دهد. همچنین نورتابناکی زمان‌حل در بررسی طول‌عمر حالت‌های برانگیخته و فرایندهایی مانند انتقال انرژی بسیار مؤثر است. به‌دلیل شدت بالای گسیل، پایداری فوتونی و قابلیت تنظیم طول‌موج، نقاط کوانتومی در تصویربرداری زیستی و نیز در کاربردهای اپتوالکترونیکی همچونLEDها، لیزرها و سلول‌های خورشیدی به‌طور گسترده مورد استفاده قرار می‌گیرند.

لیزرهای نانومقیاس[1]، نسل جدیدی از منابع نوری هستند که در ابعادی بسیار کوچک‌تر از طول موج نور کار می‌کنند و قادرند تابش منسجم[2]، تولید کنند. برخلاف لیزرهای مرسوم که در مقیاس میکرومتری یا بزرگ‌تر ساخته می‌شوند، لیزرهای نانومقیاس از ساختارهای نانویی مانند رزوناتورهای پلاسمونیکی، حفره‌های فوتونی نانویی و نقاط کوانتومی به‌عنوان محیط فعال استفاده می‌کنند.

در این سامانه‌ها، نقاط کوانتومی به‌عنوان منبع نورتابناکی عمل کرده و با تحریک نوری یا الکتریکی، فوتون‌هایی را گسیل می‌کنند که درون حفره‌ی نانومقیاس چندین بار بازتاب می‌یابد. این بازتاب‌ها منجر به تقویت نور[3] شده و در نهایت تابشی لیزری با شدت بالا و اندازه‌ای بسیار کوچک تولید می‌شود. یکی از مزایای کلیدی لیزرهای نانومقیاس، آستانه‌ی تحریک بسیار پایین و پاسخ‌دهی سریع آن‌هاست که آن‌ها را برای مدارهای نوری مجتمع[4] و سامانه‌های محاسبات نوری ایده‌آل می‌سازد.

همچنین به دلیل امکان تنظیم دقیق طول موج تابش بر اساس اندازه و ترکیب نقاط کوانتومی، این لیزرها قابلیت تولید نور در گستره‌ی وسیعی از رنگ‌ها را دارند. چنین ویژگی‌هایی باعث شده است که لیزرهای نانومقیاس در حوزه‌هایی مانند ارتباطات نوری پرسرعت، حسگرهای زیستی فوق‌حساس، تصویربرداری سلولی در مقیاس نانو و حتی رایانش کوانتومی نوری نقش بسیار مهمی ایفا کنند.

به‌طور خلاصه، نورتابناکی نقاط کوانتومی اساس عملکرد بسیاری از لیزرهای نانومقیاس مدرن است و این فناوری، پیوندی میان نانوفناوری، اپتوالکترونیک و فوتونیک پیشرفته برقرار کرده است که افق‌های تازه‌ای را در علم و صنعت گشوده است.

[1] Nanolasers
[2] Coherent
[3] Optical Gain
[4] Integrated Photonics

۴. منابع

Ganeev, R. A., Zvyagin, A. I., Shuklov, I. A., Spirin, M. G., Ovchinnikov, O. V., & Razumov, V. F. (2021). Nonlinear Optical Characterization of InP@ZnS Core-Shell Colloidal Quantum Dots Using 532 nm, 10 ns Pulses. *Nanomaterials, 11*(6), 1366. https://doi.org/10.3390/nano11061366

Kalsoom, U. e., Yi, R., Qu, J., Liu, L., & al. (2021). Nonlinear Optical Properties of CdSe and CdTe Core-Shell Quantum Dots and Their Applications. *Frontiers in Physics, 9*, 612070. https://doi.org/10.3389/fphy.2021.612070

Lv, M., Zhao, J., Guo, L., Zhang, Y., Zhao, Q., Teng, L., Wang, M., Zhang, S., & Wang, X. (2024). Nonlinear Optical Response of Au/$CsPbI_3$ Quantum Dots and Its Laser Modulation Characteristics at 2.7 μm. *Micromachines, 15*(8), 1043. https://doi.org/10.3390/mi15081043

Loskutova, A., Seitkali, A., Aliyev, D., & Bukasov, R. (2025). Quantum Dot-Based Luminescent Sensors: Review from Analytical Perspective. *International Journal of Molecular Sciences, 26*(14), 6674. https://doi.org/10.3390/ijms26146674

Pan, L., Ishikawa, A., & Tamai, N. (2007). Detection of optical trapping of CdTe quantum dots by two-photon-induced luminescence. *Physical Review B, 75*(16), 161305. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.161305

Münch, S., Reitzenstein, S., Franeck, P., Löffler, A., Heindel, T., Höfling, S., Worschech, L., & Forchel, A. (2010). Nonlinear photoluminescence spectra from a quantum-dot–cavity system: Interplay of pump-induced stimulated emission and anharmonic cavity QED. *Physical Review B, 81*, 033309. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.033309

Turro, N. J., Ramamurthy, V., & Scaiano, J. C. (2010). *Modern molecular photochemistry of organic molecules.*

Chen, R., & McKeever, S. W. S. (1997). *Thermoluminescence dosimetry materials: properties and applications.* Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B, 123(1–4), 93–116.

Shur, M. (1990). *Electroluminescence in semiconductors.* Cambridge University Press.

Williams, D. B., & Carter, C. B. (2009). *Transmission electron microscopy: A textbook for materials science.*

Denk, W., Strickler, J. H., & Webb, W. W. (1990). *Two-photon laser scanning fluorescence microscopy.* Science, 248(4951), 73–76.

Turro, N. J., Ramamurthy, V., & Scaiano, J. C. (2010). *Modern molecular photochemistry of organic molecules.*

Lakowicz, J. R. (2006). *Principles of fluorescence spectroscopy* (3rd ed.).

Qasemnazhand, M., & Ghaemi, A. (2025). 12 Surface-functionalized nanomaterials for electrochemical sensing of pollutants. Surface-Functionalized Nanomaterials: Environmental, Energy Storage, Energy Conversion Applications, 213.

Research in Empirical Science Education, Vol. 12, No. 42, PP. 79-93.

Special Issue of the 6th National Conference on Physics Education

Research in Empirical Science Education

Online ISSN: 3115-8889

Home Page: https://basicscience.cfu.ac.ir

Farhangian University

From luminescence to photoluminescence: Studying nonlinear optical phenomena in quantum dots using density functional theory (DFT)

Fatemeh Shiehzadeh[1*], Reza Aghbolaghi[2], and Ali Navid[2]

1. PhD student in photonics, University of Bonab, Bonab, Iran
2. Associate Professor department of Basic Sciences, University of Bonab, Bonab, Iran.

* Corresponding author: (f.shiehzadeh@student.alzahra.ac.ir)

Article Info

Article type
Research Article

Article history:

Received:
2026/06/07
Received in revised form:
2026/06/09
Accepted:
2026/06/09
Available online:
2026/06/15

Keywords:
Density Functional Theory (DFT), Luminescence, Nonlinear Optics, Photoluminescence, Quantum Dots.

ABSTRACT

Objective: Luminescence is a phenomenon in which a material, without the need for a significant increase in temperature, releases absorbed energy in the form of light radiation and, as one of the fundamental phenomena in the physics of light, represents the emission of photons from a material due to non-thermal excitation. This phenomenon exhibits nonlinear behavior in certain cases of intense light radiation and has therefore received special attention in the field of nonlinear optics. Recent studies have shown that quantum dots, due to the discrete structure of energy levels and quantum confinement effects, are a very suitable platform for studying and controlling luminescence. In these materials, processes such as multi-photon absorption, changing the emission spectrum and increasing the luminous efficiency can be tuned by changing the size and composition of quantum dots.

Regarding the application of photoluminescence to quantum dots, it is a key tool for studying their optical and electronic properties, allowing the determination of the energy gap, the assessment of structural quality, and the identification of defects. Analysis of the PL spectrum and intensity provides detailed information about the quantum efficiency, radiative and non-radiative recombination behavior, and carrier dynamics. Time-resolved photoluminescence is also very effective in investigating the lifetime of excited states and processes such as energy transfer.

Method: In this research, by reviewing the theoretical foundations of luminescence and examining its types, especially the relationships between luminescence, photoluminescence, and nonlinear behaviors in nanostructured materials—especially quantum dots—are analyzed. This analysis was conducted with the aim of identifying the physical properties affecting the intensity, efficiency, and stability of light radiation in strong fields. The simulations in this part of the research have been performed with Density Functional Theory (DFT).

Results: In photoluminescence, the behavior of this phenomenon in the presence of intense optical fields has been investigated. The main focus of this research is to explain the relationship between photoluminescence and quantum dots to clarify the role of electronic structure and nonlinear optical effects in controlling light emission. The results of this study can be effective in better understanding the mechanisms of light emission at the nanoscale and the design of advanced lasers based on quantum dots.

Because the wavelength of radiation can be precisely tuned based on the size and composition of the quantum dots, these lasers are capable of producing light in a wide range of colors. Such properties have made nanoscale lasers play a very important role in areas such as high-speed optical communications, ultrasensitive biosensors, nanoscale cellular imaging, and even optical quantum computing.

In short, quantum dot luminescence is the basis for the operation of many modern nanoscale lasers, and this technology has established a link between nanotechnology, optoelectronics, and advanced photonics that has opened new horizons in science and industry.

Cite this article: Shiehzadeh, Fatemeh., Aghbolaghi, Reza., Navid, Ali. (2026). From luminescence to photoluminescence: Studying nonlinear optical phenomena in quantum dots using density functional theory (DFT). *Research in Empirical Science Education*, 12 (42), 79-93.

http//doi.org/10.48310/basic.2026.23211.1605

© Author(s) retain the copyright and full publishing rights.

Publisher: Farhangian University.