

Dinamika Populasi Sistem *Hybrid Semiconductor Quantum Dot – Metal Ellipsoid*

Siti Wildayati^{a*}, Bintoro Siswo Nugroho^a, Yuris Sutanto^a

^aProdi Fisika, FMIPA Universitas Tanjungpura

*Email : stwildayati@gmail.com

Abstrak

Telah dilakukan studi teoretis sistem *hybrid semiconductor quantum dot* (SQD) yang dimodelkan sebagai *two-level system* yang digabungkan dengan *metal nanoparticle* (MNP) berbentuk *ellipsoid*. Studi ini dilakukan untuk melihat perubahan dinamika populasi jika aspek rasio pada MNP *ellipsoid* divariasikan. SQD digambarkan secara kuantum dengan formalisme *density matrix*. MNP digambarkan secara klasik dan dikarakterisasi dari nilai polarisabilitasnya. Dinamika populasi dapat diselesaikan dengan persamaan gerak elemen *density matrix* melalui bantuan metode Runge-Kutta Fehlberg (RKF 45). Hasil penelitian menunjukkan bahwa ketika aspek rasio diperbesar, terjadi penurunan frekuensi osilasi pada dinamika populasi dan osilasi tersebut lebih cepat mencapai *steady state*.

Kata Kunci : *Semiconductor Quantum Dot, Metal Nanoparticle, Sistem Hybrid, Density Matrix, Populasi*

1. Latar Belakang

Memasuki era yang modern ini, nanoteknologi mendapatkan perhatian yang sangat besar di bidang sains maupun industri. Nanoteknologi berkembang pesat dalam penelitian-penelitian di bidang material seperti pengaplikasian *quantum dot* pada teknologi sel surya di generasi ketiga [1], penggunaan nanopartikel emas pada biosensor elektrokimia [2], dan aplikasi nano-tex pada industri tekstil [3]. Nanoteknologi merupakan pembuatan dan penggunaan materi yang berukuran nano [4]. Bahan yang digunakan untuk menyintesis suatu material nano disebut nanopartikel. Terdapat berbagai struktur dasar dari nanopartikel, diantaranya *quantum dot*, nanokristal, nanopartikel logam, dan nanopartikel polimer.

Struktur dasar nanopartikel yang menarik untuk dikaji beberapa dekade belakangan ini ialah *quantum dot* dan *metal nanoparticle* (MNP). *Quantum dot* adalah partikel semikonduktor berukuran kurang dari 10 nanometer. *Semiconductor quantum dot* (SQD) akan berinteraksi dengan cahaya ketika disinari cahaya yang menyebabkan eksitasi dan deeksitasi secara periodik. Proses ini dinamakan osilasi Rabi [5]. MNP adalah nanopartikel yang terbuat dari logam murni seperti emas, perak, dan titanium yang berukuran 1-100 nm. MNP memiliki keunggulan berupa tingginya tampang lintang optik yang dapat merekayasa cahaya pada ukuran nanometer [6].

Respons optik nonlinier terdiri dari SQD yang digabungkan dengan MNP selama dekade terakhir ini telah menyita banyak perhatian. Ketertarikan tersebut muncul dari adanya fakta

bahwa hibridisasi SQD-MNP menunjukkan respons optik seperti *optical bistability* [7], *optical instability* [8], osilasi Rabi termodifikasi [5], efek Fano [9], dan transparansi terinduksi elektromagnetik dengan mediasi plasmon [10]. Respons optik SQD digambarkan secara kuantum dengan formalisme *density matrix* [11] dan respons optik MNP digambarkan secara klasik dari nilai polarisabilitasnya [5].

Penelitian ini menganalisis dinamika populasi SQD yang dipengaruhi oleh keberadaan MNP. SQD dimodelkan sebagai *two-level system* dan berbentuk bola. Model SQD ini cukup baik dalam mendeskripsikan modifikasi respons optik yang muncul akibat hibridisasi. Selain itu, penelitian ini juga meninjau MNP berbentuk *ellipsoid* yang faktor geometrinya (aspek rasio) divariasikan.

2. Metodologi

2.1 Model dan Formalisme

Sistem yang ditinjau adalah sistem *hybrid SQD two-level system* dengan konstanta dielektirk ϵ_s dan MNP berbentuk *ellipsoid* dengan semimayor a dan semiminor b dengan konstanta dielektrik ϵ_m . Sistem terpisah sejauh jarak d dan terletak pada medium konstanta dielektrik ϵ_b . Sistem dieksitasi oleh cahaya monokromatis yang dimodelkan sebagai medan listrik berbentuk $E = E_0 \cos \omega_0 t$ (diilustrasikan pada Gambar 1(a)). SQD dimodelkan sebagai *two-level system* yang terdiri dari keadaan dasar $|1\rangle$ dan keadaan tereksitasi $|2\rangle$. Energi masing-masing keadaan adalah $\epsilon_1 = 0$ dan $\epsilon_2 = \hbar\omega$. Eksitasi medan eksternal adalah $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$ dengan momen dipol transisi $\mu_{12} = \mu_{21} = \mu$. Diagram



energi MNP *ellipsoid* menunjukkan ketika MNP disinari cahaya yang frekuensinya sama dengan frekuensi LSP (frekuensi pada plasmon), maka MNP akan menyerap energi maksimum (diilustrasikan pada Gambar 1(b)).

Eksitasi pada MNP *ellipsoid* adalah *localized surface plasmon plasmon* (LSP) yang merupakan osilasi kolektif elektron bebas pada logam. Secara klasik, karakteristik dari LSP digambarkan oleh polarisabilitas MNP ($\alpha(\omega)$) dalam bentuk [10]:

$$\alpha(\omega) = 4\pi ab^2 \frac{\epsilon_m(\omega) - \epsilon_b}{3\epsilon_b + 3k(\epsilon_m(\omega) - \epsilon_b)} \quad (1)$$

Pada persamaan (1), k merupakan faktor depolarisasi yang mendeskripsikan pengaruh geometri MNP [12]

$$k = \frac{1 - e^2}{e^2} \left[\frac{1}{2e} \ln \left(1 + \frac{1 + e}{1 - e} \right) - 1 \right], \quad (2)$$

dengan $e = \sqrt{1 - 1/q^2}$, $q = a/b$, q merupakan aspek rasio dari MNP *ellipsoid*.

2.2 Sistem Hybrid SQD-MNP

Repons optik dari SQD dihitung secara teoretis menggunakan formalisme *density matrix* yang elemen-elemennya diperoleh dari persamaan Liouville-von Neumann berbentuk

$$\dot{\rho}_{mn} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]_{mn} - \gamma_{mn} \rho_{mn}. \quad (3)$$

ρ_{mn} merupakan elemen gerak *density matrix*, γ_{mn} merupakan konstanta *damping* antara keadaan dasar dan keadaan eksitasi, dan \hat{H} merupakan operator Hamiltonian dari sistem. Operator Hamiltonian mendeskripsikan bentuk energi pada sistem. Hamiltonian total sistem adalah

$$\hat{H} = \epsilon_1 |1\rangle\langle 1| + \epsilon_2 |2\rangle\langle 2| - \mu E_{SQD} (|2\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 2|). \quad (4)$$

Suku-suku pada persamaan (4) mendeskripsikan energi internal sistem dan energi interaksi sistem dengan medan pengekspitasi.

E_{SQD} dapat dituliskan dalam bentuk [7]

$$E_{SQD} = \frac{1}{\epsilon'_s} \left[1 + \frac{\alpha(\omega)}{2\pi d^3} \right] E_0 + \frac{\alpha(\omega) p_{SQD}}{4\pi^2 \epsilon_0 \epsilon_b \epsilon'_s d^6} \quad (5)$$

dengan ϵ_0 merupakan konstanta dielektrik vakum, $\epsilon'_s = (\epsilon_s + 2\epsilon_b)/3\epsilon_b$, dan $p_{SQD} = -i\mu R$ merupakan momen dipol SQD.

Medan total yang dirasakan SQD dapat direpresentasikan dalam bentuk $\Omega = \frac{\mu E_{SQD}}{\hbar}$, maka bentuk persamaan gerak elemen *density matrix* pada *two-level system* dari persamaan (3) dapat ditulis

$$\dot{\rho}_{11} = i\Omega(\rho_{21} - \rho_{12}) + \gamma\rho_{22}, \quad (6)$$

$$\dot{\rho}_{12} = i\Omega(\rho_{22} - \rho_{11}) + i\omega\rho_{12} - \Gamma\rho_{12}. \quad (7)$$

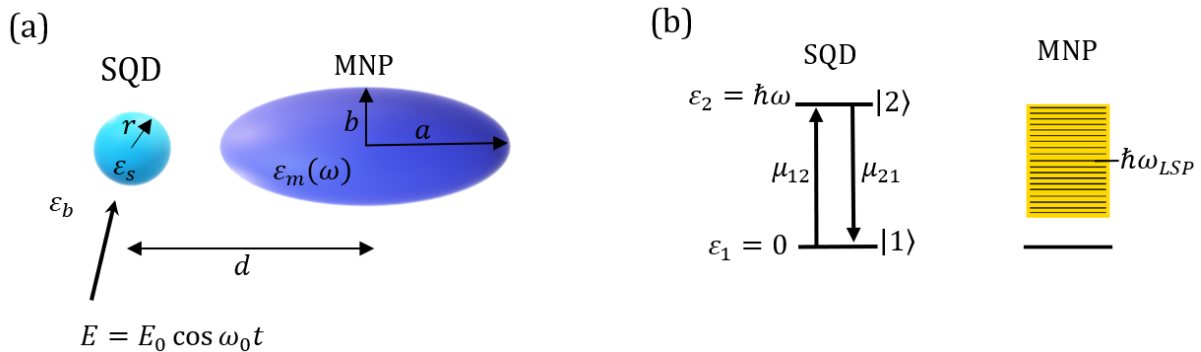
Karena *density matrix* bersifat Hermitian, maka $\dot{\rho}_{12} = \dot{\rho}_{21}^*$ dan normalisasi populasi terhadap waktu $\dot{\rho}_{11} = -\dot{\rho}_{22}$.

Pada kasus resonansi ($\omega \approx \omega_0$), *rotating wave approximation* (RWA) dapat digunakan dalam menyederhanakan persamaan gerak *density matrix*. Metode pendekatan RWA dilakukan dengan mengabaikan suku-suku yang berisolasi cepat karena nilai rata-ratanya adalah nol dalam interval waktu yang pendek. Untuk menyederhanakan bentuk persamaan (6) dan (7), maka didefinisikan Z yang merupakan selisih dari persamaan gerak elemen *density matrix* $\dot{\rho}_{22}$ dengan $\dot{\rho}_{11}$ dan R merupakan amplitudo dari *off-diagonal* gerak elemen *density matrix* yaitu $\dot{\rho}_{21}$, sehingga diperoleh

$$\dot{Z} = -\frac{1}{2}(\Omega R^* + \Omega^* R) - (Z + 1)\gamma, \quad (8)$$

$$\dot{R} = \Omega Z - (i\Delta + \Gamma)R. \quad (9)$$

$\Delta = \omega - \omega_0$ merupakan *detuning* yang menunjukkan selisih frekuensi transisi terhadap frekuensi medan pengekspitasi.



Gambar 1. (a) skematik sistem *hybrid* SQD-MNP yang dieksitasi oleh cahaya monokromatis dan (b) tingkat keadaan elektronik SQD dan MNP.

Pada kasus sistem *hybrid* SQD-MNP, Ω dapat dituliskan secara eksplisit dalam bentuk [7]

$$\Omega = \tilde{\Omega}_0 - iGR, \quad (10)$$

dengan G dinyatakan dalam bentuk

$$G = \frac{\mu^2 \alpha(\omega)}{4\pi^2 \hbar \epsilon_0 \epsilon_b \epsilon_s' d^6}. \quad (11)$$

Persamaan gerak elemen *density matrix* untuk sistem *hybrid* SQD-MNP adalah

$$\begin{aligned} \dot{Z} = & -\frac{1}{2} \left((\tilde{\Omega}_0 - iG_R R + G_I R) R^* \right. \\ & \left. + (\tilde{\Omega}_0^* + iG_R R^* + G_I R^*) R \right) \\ & - (Z + 1)\gamma, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \dot{R} = & -(\Gamma - G_I Z) + i(\Delta + G_R Z) \\ & + \tilde{\Omega}_0 Z, \end{aligned} \quad (13)$$

dengan $G = G_R + iG_I$.

Parameter G mendeskripsikan seberapa besar SQD dan MNP saling terkopel. Dari persamaan (13), dapat disimpulkan bahwa semakin besar nilai polarisabilitas $\alpha(\omega)$ maka nilai parameter G akan semakin besar. Nilai $\alpha(\omega)$ dipengaruhi oleh aspek rasio. Semakin besar nilai aspek rasio, maka nilai $\alpha(\omega)$ akan semakin besar. Dapat dilihat bahwa, akibat dari hibridisasi terjadi perubahan nilai *detuning* dan nilai *dephasing*. Nilai *detuning* menjadi $\Delta + G_R Z$ dan nilai *dephasing* menjadi $\Gamma - G_I Z$. Dua perubahan ini menyebabkan modifikasi yang signifikan pada sistem *hybrid* SQD-MNP.

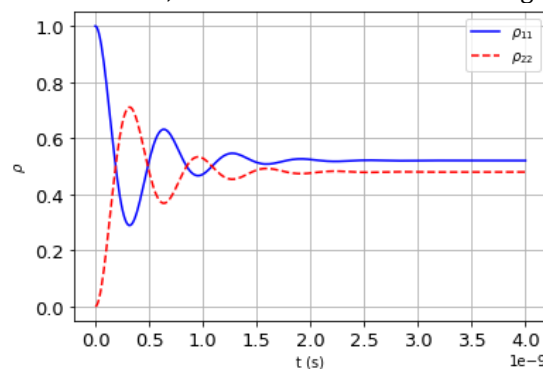
3 Hasil dan Pembahasan

SQD yang digunakan merupakan SQD *two-level system* dengan $\hbar\omega$ (frekuensi resonansi) bernilai 2,36 eV. Konstanta peluruhan *relaxation rate* $\gamma = 1,25 \text{ ns}^{-1}$ dan *dephasing rate* $\Gamma = 3,33 \text{ ns}^{-1}$. Radius SQD berukuran 3 nm, konstanta dielektrik SQD berukuran 6,2, konstanta dielektrik *background* $\epsilon_b = 1$ (untuk *glass*). MNP yang digunakan berbentuk *ellipsoid* dan berbahan emas dengan konstanta dielektrik $\epsilon_m(\omega)$ yang diambil dari konstanta optik dari hasil eksperimen [13], dan sumbu semiminor b bernilai $7 \times 10^9 \text{ nm}$.

Dinamika populasi dianalisis dengan menyelesaikan persamaan (12) dan (13) menggunakan metode Runge-Kutta Fehlberg (RKF 45). Elemen diagonal *density matrix* ρ_{11} dan ρ_{22} merupakan populasi keadaan dasar dan keadaan eksitasi. Nilai populasi menunjukkan peluang untuk menemukan sistem dikeadaan dasar dan keadaan eksitasi.

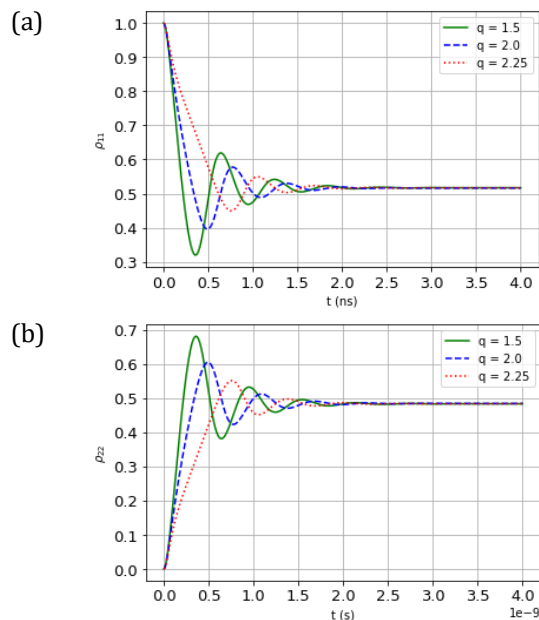
Pertama akan ditinjau dinamika populasi keadaan dasar (ρ_{11}) dan keadaan eksitasi (ρ_{22}) pada sistem *hybrid* SQD-MNP dengan jarak antara SQD dan MNP adalah $d = 100 \text{ nm}$ dan MNP menggunakan aspek rasio $q = 1,5$. Pada jarak pisah yang cukup jauh ini, sistem *hybrid* SQD-MNP menunjukkan osilasi seperti pada

kasus SQD tunggal. Pada awalnya, ρ_{11} bernilai 1 dan elemen lainnya bernilai 0. karena sebelum SQD disinari cahaya, sistem pada SQD hanya berada di keadaan dasar. Setelah SQD berinteraksi dengan cahaya, sistem tersebut tereksitasi ke keadaan eksitasi. Sehingga populasi pada keadaan dasar berkurang dan populasi pada keadaan eksitasi meningkat. Proses ini terjadi terus menerus hingga mencapai *steady*. Proses ini dinamakan osilasi Rabi (diilustrasikan pada Gambar 2). Osilasi Rabi ini muncul ketika SQD disinari cahaya, sistem yang berada pada keadaan dasar menyerap energi cahaya dan menyimpan energi tersebut. Secara keseluruhan, SQD tereksitasi ke keadaan eksitasi. Ketika sudah berada di keadaan eksitasi, SQD mengalami kondisi *stimulated emission*. Kondisi *stimulated emission* merupakan kondisi ketika sistem diberikan gangguan, maka SQD mengalami deeksitasi. Karena SQD masih disinari cahaya, SQD tersebut tereksitasi kembali ke keadaan eksitasi dan hal ini terjadi secara berulang hingga mencapai *steady state*. Proses ini juga disebut relaksasi. Relaksasi tidak sepenuhnya mengembalikan elektron ke keadaan dasar, maka elektron terus berkurang.



Gambar 2. Grafik dinamika waktu populasi SQD tunggal dengan intensitas $I = 100 \text{ W/cm}^2$.

Untuk melihat adanya modifikasi pada osilasi, maka ditinjau kasus sistem *hybrid* SQD-MNP dengan memvariasikan aspek rasio dari MNP *ellipsoid* yaitu 1,5, 2,0, dan 2,25 pada jarak $d = 25 \text{ nm}$ (diilustrasikan pada Gambar 3). Pada $q = 2,25$ bentuk osilasi yang dihasilkan lebih kecil dan lebih cepat mencapai *steady state* daripada $q = 2,0$ dan $q = 1,5$. Hal ini terjadi karena renormalisasi nilai *detuning* Δ menjadi $\Delta + G_R Z$ dan pada nilai *dephasing* Γ menjadi $\Gamma - G_I Z$. Renormalisasi ini terjadi karena SQD dipengaruhi oleh keberadaan MNP *ellipsoid* dengan memvariasikan nilai aspek rasio. Renormalisasi pada nilai *detuning* menyebabkan penurunan frekuensi osilasi pada populasi disertai dengan pengurangan amplitudo osilasi. Selain itu, renormalisasi nilai *dephasing* menyebabkan perubahan waktu osilasi pada populasi menuju *steady state*.



Gambar 3. Grafik dinamika waktu populasi pada sistem *hybrid* SQD-MNP variasi aspek rasio dengan intensitas $I = 100 \text{ W/cm}^2$ (a) keadaan dasar (b) keadaan eksitasi.

4 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian ini, dapat disimpulkan bahwa dinamika populasi sistem *hybrid* SQD-MNP menunjukkan bentuk osilasi yang lebih kecil dan lebih cepat mencapai *steady state* ketika aspek rasio dari MNP *ellipsoid* diperbesar. Hal ini terjadi karena renormalisasi nilai *detuning* dan nilai *dephasing*. Renormalisasi pada nilai *detuning* menyebabkan penurunan frekuensi osilasi disertai dengan pengurangan amplitudo osilasi sedangkan renormalisasi nilai *dephasing* menyebabkan perubahan waktu osilasi pada populasi menuju *steady state*.

Daftar Pustaka

- [1] Z. Abdin *et al.*, "Solar energy harvesting with the application of nanotechnology," *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 26, pp. 837–852, 2013.
- [2] E. I. Fazrin, A. I. Naviardianti, S. Wyantuti, S. Gaffar, and Y. W. Hartati, "Review: Sintesis Dan Karakterisasi Nanopartikel Emas (AuNP) Serta Konjugasi AuNP Dengan DNA Dalam Aplikasi Biosensor Elektrokimia," *PENDIPA J. Sci. Educ.*, vol. 4, no. 2, pp. 21–39, 2020.
- [3] Y. W. H. Wong, C. W. M. Yuen, M. Y. S. Leung, S. K. A. Ku, and H. L. I. Lam, "Selected applications of nanotechnology in textiles," *Autex Res. J.*, vol. 6, no. 1, pp. 1–8, 2006.
- [4] M. Rasid and Mardiana, "Inovasi Perawatan Automotive Menuju Nano Teknologi," *Austenit*, vol. 3, no. 1, pp. 38–45, 2011.
- [5] B. S. Nugroho and Y. Arman, "Modifikasi Osilasi Rabi Pada Nanoparticle Heterodimer: Pengaruh Jarak antar Partikel dan Intensitas Medan Iluminasi," *Positron*, vol. 8, no. 2, pp. 7–13, 2018.
- [6] D. A. R. Barkhouse, O. Gunawan, T. Gokmen, T. K. Todorov, and D. B. Mitzi, "Yield predictions for photovoltaic power plants: empirical validation, recent advances and remaining uncertainties," *Prog. Photovoltaics Res. Appl.*, vol. 20, no. 1, pp. 6–11, 2015.
- [7] B. S. Nugroho, A. A. Iskandar, V. A. Malyshev, and J. Knoester, "Bistable Optical Response of a Nanoparticle Heterodimer: Mechanism, Phase Diagram, and Switching Time," *Chem. Phys.*, vol. 139, no. 1, pp. 1–8, 2013.
- [8] B. S. Nugroho, A. A. Iskandar, V. A. Malyshev, and J. Knoester, "Instabilities in the Optical Response of a Semiconductor Quantum Dot – Metal Nanoparticle Heterodimer: Self-Oscillations and Chaos," pp. 1–20, 2016.
- [9] Y. He and K. Di Zhu, "Fano Effect and Quantum Entanglement in Hybrid Semiconductor Quantum Dot-Metal Nanoparticle System," *Sensors*, vol. 17, no. 6, pp. 2–26, 2017.
- [10] A. Hafez, S. M. Sadeghi, and M. R. Singh, "Plasmonic Electromagnetically Induced Transparency in Metallic Nanoparticle-Quantum Dot Hybrid Systems," *Nanotechnology*, vol. 23, no. 6, pp. 1–9, 2012.
- [11] Y. Yulyanto and B. S. Nugroho, "Analisis Respons Optik Semiconductor Quantum Dot Sistem Three-Level Bertipe V," *Positron*, vol. 8, no. 1, pp. 1–7, 2018.
- [12] S. Link and M. A. El-Sayed, "Erratum: Simulation of the optical absorption spectra of gold nanorods as a function of their aspect ratio and the effect of the medium dielectric constant (Journal of Physical Chemistry B (1999) 103B)," *J. Phys. Chem. B*, vol. 109, no. 20, pp. 10531–10532, 2005.
- [13] P. B. Johnson and R. W. Christy, "Optical Constant of the Nobel Metals," *Phys. Rev. B*, vol. 6, no. 12, pp. 4370–4379, 1972.