



## حل تحلیلی میدان‌های الکتروالاستیک در محیط‌های پیزوالکتریک همسانگرد جانبی با توزیع متناوب نانوساختارهای کوانتومی: بررسی اثر هندسه نانوساختارها

احسان رشیدی نژاد<sup>1</sup>، حسین محمدی شجاع<sup>2\*</sup>

1- دانشجوی دکتری، دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

2- استاد، دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

\* تهران، صندوق پستی 11155-9313، shodja@sharif.edu

### اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 08 شهریور 1394

پذیرش: 01 آبان 1394

ارائه در سایت: 20 آبان 1394

کلید واژگان:

میدان‌های الکتروالاستیک

مواد پیزوالکتریک همسانگرد جانبی

نانوساختارهای کوانتومی

سیم‌های کوانتومی

نقطه‌های کوانتومی

### چکیده

تعیین دقیق میدان‌های الکتروالاستیک در مواد پیزوالکتریک دارای نانوساختارهای کوانتومی به منظور تعیین رفتار و عملکرد دقیق الکترومکانیکی این‌گونه مواد دارای اهمیت فراوان است. در این مقاله دستگاه معادلات دیفرانسیل پارهای حاکم بر محیط پیزوالکتریک در حضور نانوساختارهای کوانتومی تشکیل داده شده و با استفاده از روش سری فوریه، راه حلی تحلیلی، کلی و جامع برای حل و بدست آوردن میدان‌های الکتروالاستیک در مواد پیزوالکتریک همسانگرد جانبی در اثر وجود نانوساختارهای کوانتومی با توزیع متناوب ارائه می‌شود. از ویژگی‌های منحصر بفرد این روش حل، در نظر گرفتن تمام اندرکنش‌های میدان‌های الکتریکی و مکانیکی از یک سو و تمام اندرکنش‌های میان نانوساختارها از سوی دیگر می‌باشد. نشان داده می‌شود که بر خلاف توزیع متناوب نقطه‌های کوانتومی، در حالت توزیع متناوب سیم‌های کوانتومی هیچگونه میدان الکتریکی و پتانسیل الکتریکی در محیط پیزوالکتریک القا نخواهد شد. به علاوه، با استفاده از این روش حل می‌توان میدان‌های الکتروالاستیک را بر اثر وجود نانوساختارهای کوانتومی با شکل‌های دلخواه تعیین نمود. مسائل متنوعی از توزیع متناوب سیم‌های کوانتومی با هندسه‌های مختلف مقاطع آن‌ها و همچنین توزیع متناوب نقطه‌های کوانتومی با هندسه‌های متداول مورد حل و بررسی قرار می‌گیرند و اثر تغییر در هندسه نانوساختارهای کوانتومی تشریح می‌شود. بر اساس نتایج بدست آمده تغییر در هندسه نانوساختارهای کوانتومی می‌تواند تا چندین برابر میدان‌های الکتروالاستیک ایجاد شده در محیط پیزوالکتریک را تحت تأثیر قرار دهد و لذا تعیین هندسه نانوساختارهای کوانتومی و متعاقباً تعیین دقیق میدان‌های الکتروالاستیک ناشی از آن‌ها از اهمیت زیادی در استفاده از این نانوساختارها در زمینه‌های مختلف تحقیقاتی و تکنولوژیکی برخوردار می‌باشد.

## Analytical solutions for electro-elastic fields of periodic quantum nanostructures within transversely isotropic piezoelectric media: studying the geometry effects

Ehsan Rashidinejad, Hossein Mohammadi Shoja\*

Department of Civil Engineering, Sharif University of Technology, Tehran, Iran.

\*P.O.B. 11155-9313 Tehran, Iran, shodja@sharif.edu

### ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper  
Received 30 August 2015  
Accepted 23 October 2015  
Available Online 11 November 2015

#### Keywords:

Electro-elastic fields  
Transversely isotropic piezoelectric media  
Quantum nanostructures  
Quantum wires  
Quantum dots

### ABSTRACT

Accurate determination of the electro-elastic fields of quantum nanostructures within piezoelectric media is an important issue for realizing the electro-mechanical behavior of these nanostructures. In this paper, the governing partial differential equations corresponding to piezoelectric media containing quantum nanostructures are presented and subsequently, generalized analytical solutions based on Fourier series technique are developed for determination of the coupled electro-elastic fields in transversely isotropic piezoelectric barrier due to periodically distributed quantum nanostructures. The electro-elastic couplings of the piezoelectric barrier as well as the interactions between the quantum nanostructures are exhibited within the framework of the presented analytical solution. It is observed that no electric field and no electric potential will be induced anywhere in the medium for periodic distribution of quantum wires. The presented analytical solution is capable of treating different shapes and geometries of quantum wires/quantum dots. The electro-elastic fields of various shapes of sections of quantum wires and different geometries of quantum dots are studied and the effects of the geometry of periodically distributed quantum nanostructures are demonstrated. The results show that geometry of quantum nanostructures may considerably affect the induced electro-elastic fields and therefore, accurate determination of the geometry of quantum nanostructures as well as the induced electro-elastic fields would be essential for employment of these nanostructures in different fields of research and technology.

### ۱- مقدمه

از آنجا که امروزه بطور کلی کاربرد مواد پیزوالکتریک و بطور خاص کاربرد مواد پیزوالکتریک دارای ناخالصی‌ها و نانوساختارهای کوانتومی با خواص مکانیکی و الکتریکی متفاوت در علوم و فناوری‌های گوناگون از جمله علوم و

Please cite this article using:

E. Rashidinejad, H. Mohammadi Shoja, Analytical solutions for electro-elastic fields of periodic quantum nanostructures within transversely isotropic piezoelectric media: studying the geometry effects, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 12, pp. 46-54, 2015 (in Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

بطور مثال گراندمن و همکاران [7] میدان الاستیک در اثر یک نقطه کوانتومی تکی را با در نظر گرفتن محیط ایزوتروپ الاستیک مورد بررسی قرار دادند و یوگای [8] میدان کرنش در اثر وجود تعدادی نقطه کوانتومی را در بدست آورد. همچنین دیویس [9] اثرات ناشی از رفتار پیزوالکتریک نقاط کوانتومی و همچنین محیط پیرامونی را درحالی مورد بررسی قرار داد که رفتار مواد را به صورت ایزوتروپ در نظر گرفت. شجاع و رشیدی نژاد [10] نیز یک چارچوب کلی تحلیلی برای تعیین میدان‌های الکترواستاتیک در محیط‌های پیزوالکتریک تحت اثر نانوساختارهای کوانتومی پوشش‌دار ارائه نمودند و این چارچوب جدید پیشنهادی را با سایر تحقیقات پیشین روی میدان‌های الکترواستاتیک ایجاد شده در اثر حضور نانوساختارها مقایسه و نقاط قوت آن را بیان نمودند. اما تاکنون پژوهشی که از یک روش تحلیلی جامع بهره برده و قابلیت در نظر گرفتن اندرکنش‌های الکتریکی-مکانیکی و اندرکنش‌های بین نانوساختارها را داشته بطور خاص تأثیر هندسه نانوساختارها را بر میدان‌های الکترواستاتیک ایجاد شده بررسی نماید، انجام نگرفته است. از سوی دیگر از آنجا که مواد پیزوالکتریک در ساده‌ترین نوع خود از نوع ایزوتروپ جانبی هستند بایستی غیر ایزوتروپ بودن خواص ماده پیزوالکتریک نیز در تعیین میدان‌های ایجاد شده مد نظر قرار گیرد؛ این درحالیست که در بیشتر پژوهش‌های انجام شده در این حوزه به نوعی از اثرات اندرکنشی الکتریکی-مکانیکی و همچنین اندرکنش‌های بین نانوساختارها و غیر ایزوتروپ بودن محیط پیزوالکتریک جهت ساده‌سازی صرف نظر شده است [7-9]. تنها در مرجع [10] تمام اثرات اندرکنشی الکتریکی-مکانیکی و همچنین اندرکنش‌های بین نانوساختارها و غیر ایزوتروپ بودن محیط پیزوالکتریک در محاسبات لحاظ شده‌اند. در این مقاله با استفاده از مدل‌سازی نانوساختارهای کوانتومی به صورت اینکلوزن‌های دارای میدان کرنش ویژه [1,10,11] و حل تحلیلی میدان‌های الکترومکانیکی، توزیع میدان‌های الکترواستاتیک در محیط پیزوالکتریک همسانگرد جانبی در اثر توزیع متناوب سیم‌های کوانتومی و نقطه‌های کوانتومی به تفکیک ارائه شده و میدان‌های ایجاد شده در اثر هندسه‌های مختلف نانوساختارها بطور دقیق مورد بررسی قرار می‌گیرد و تأثیر هندسه نانوساختارها بر میدان‌های القا شده در محیط پیزوالکتریک مطالعه می‌شود. این میدان کرنش ویژه که برای نانوساختارهای کوانتومی در نظر گرفته می‌شود در حقیقت از تفاوت پارامتر شبکه (پارامتر اتساع) نانوساختار و محیط اطراف نشأت می‌گیرد و بر همین اساس نیز محاسبه می‌شود [1,7,10] که معمولاً به دلیل برابر بودن پارامتر شبکه در جهات مختلف، با وجود غیر ایزوتروپ بودن محیط پیزوالکتریک این میدان کرنش ویژه از نوع انبساطی بوده و در تمامی جهات یکسان خواهد بود [1,10]. برای سیم‌های کوانتومی مقاطع دایروی، مربعی و مثلثی و برای نقطه‌های کوانتومی هندسه‌های کروی، مکعبی، هرم با قاعده مربع و هرم با قاعده شش‌ضلعی مورد بررسی قرار خواهند گرفت. برای استفاده از حل تحلیلی ارائه شده به کمک روش سری فوریه، برای هر یک از هندسه‌های در نظر گرفته شده برای نانوساختارهای دوبعدی و سه‌بعدی، ضرایب فوریه مربوطه برای میدان کرنش ویژه تعیین شده و سپس میدان کرنش مکانیکی ایجاد شده در محیط در اثر هندسه‌های مختلف بطور دقیق محاسبه و با یکدیگر مقایسه خواهند شد. این مقایسه میزان تأثیر هندسه نانوساختارها بر میدان‌های الکترواستاتیک ایجاد شده در محیط پیزوالکتریک را بطور شفاف منعکس نموده و در طراحی اجزای میکروالکترونیکی و سایر کارکردهای این نانوساختارها تأثیرگذار و بسیار حائز اهمیت خواهد بود. از آنجا که از میان میدان‌های ایجاد شده در اثر حضور نانوساختارهای کوانتومی، میدان کرنش مکانیکی بر فرایند

فناوری نانو، ساخت نیمه‌رساناها، ساخت سلول‌های خورشیدی و تحقیقات آزمایشگاهی بسیار زیاد و گسترده شده است، از این رو بررسی و مطالعه‌ی رفتار این گونه مواد و نحوه توزیع میدان‌های مکانیکی و الکتریکی در آنها از اهمیت زیادی برخوردار است. محیط الاستیک غیر پیزوالکتریک به محیطی گفته می‌شود که با یکسری از خواص (ثابت‌های الاستیک) تعریف می‌شود و این خواص در حقیقت رابطه بین تنش و کرنش الاستیک را برقرار می‌کنند. این در حالیست که محیط پیزوالکتریک با ثابت‌های الاستیک و الکتریکی تعریف می‌شود که این ثابت‌ها نیز رابطه بین تنش و کرنش الاستیک و میدان الکتریکی را مشخص می‌کنند. در مواد پیزوالکتریک میدان‌های مکانیکی و الکتریکی با یکدیگر اندرکنش داشته و تغییر در یکی از این دو میدان موجب تغییر در دیگری و به تبع آن، به تعادل رسیدن میدان الکترواستاتیک می‌گردد. نکته قابل توجهی که در بررسی رفتار مواد پیزوالکتریک بایستی مدنظر قرار گیرد، در نظر گرفتن کامل اندرکنش‌های الکتریکی-مکانیکی در این گونه مواد است.

نانوساختارهای کوانتومی که شامل دو گروه عمده سیم‌های کوانتومی و نقطه‌های کوانتومی هستند، به دلیل خواص و ویژگی‌های اپتیکی و فیزیکی منحصر بفرد خود، در شاخه‌های مختلف تحقیقاتی و کاربردی بکار گرفته می‌شوند. بطور مثال می‌توان به کاربرد گسترده آن‌ها به عنوان اجزای نیمه-رسانا در تجهیزات اپتوالکتریک و اپتوالکترونیکی و کاربرد آن‌ها در سلول‌های خورشیدی به عنوان اجزای فوتولتاییک برای تقویت جذب نور و افزایش بهره‌وری این سلول‌ها اشاره کرد. به علاوه، این نانوساختارها در دهه‌های اخیر در زمینه‌های علمی و آزمایشگاهی میان‌رشته‌ای از جمله بیومهندسی و بیوتکنولوژی کاربردهای فراوانی پیدا کرده‌اند که از جمله آن‌ها، می‌توان به کاربرد نانوساختارها در برچسب‌گذاری و پیگیری پروتئین‌ها، ژن‌ها و سلول‌های خاص مثل سلول‌های سرطانی و تشخیص و درمان این سلول‌ها اشاره کرد.

بطور کلی نانوساختارهای کوانتومی در ابعاد و اندازه‌های مختلف در محدوده چند آنگستروم تا چند میکرومتر وجود دارند. همچنین این نانوساختارها می‌توانند توزیع‌های متنوعی داشته و با پراکندگی مورد نظر توسط روش‌های مختلفی از جمله فرایند استرانسکی-کراستونوف و یا روش‌های رونشست باریکه مولکولی ایجاد گردند، اما معمولاً این نانوساختارها با توزیع متناوب و اغلب چگالی نسبتاً بالا ساخته می‌شوند تا بتوانند کارکردهای مورد نظر را داشته باشند [1,2]. از طرف دیگر سیم‌های کوانتومی می‌توانند مقاطع با هندسه‌های مختلف از جمله دایروی، مربعی و مثلثی داشته و نقطه‌های کوانتومی نیز می‌توانند دارای هندسه‌های متفاوتی از جمله هندسه کروی، مکعبی و هرمی باشند [1-3]؛ بطوری که هندسه نانوساختارها عموماً بایستی طی فرایند ساخت و تولید آن‌ها کنترل شده و پس از رشد نانوساختارها، به کمک روش‌های مختلف عکس‌برداری از جمله میکروسکوپ الکترونی عبوری و یا میکروسکوپ الکترونی روبشی می‌توان از هندسه دقیق و ابعاد نانوساختارها اطلاعات دقیقی بدست آورد [1,5,4]. در حقیقت هندسه نانوساختارها تأثیر مستقیمی بر خواص کاربردی آن‌ها در انواع زمینه‌های کاربردی از جمله خواص اپتیکی آن‌ها دارد و توسط محققان علوم فیزیکی همواره مورد بررسی قرار داشته است [5,6].

نانوساختارهای کوانتومی به دلیل تفاوتی که در طول مشخصه شبکه اتمی نسبت به محیط اطراف دارند در کل محیط پیزوالکتریک میدان‌های الکتریکی و الاستیک القا می‌کنند [1]. این میدان‌های القا شده در محیط تاکنون توسط محققان مختلفی در دهه‌های اخیر مورد بررسی قرار گرفته‌اند.

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}(\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^*) - e_{kij}E_k, \quad i, j, k, l = 1, 2, 3, \quad (9)$$

$$D_j = \kappa_{kj}E_k + e_{jkl}\varepsilon_{kl}, \quad j, k, l = 1, 2, 3, \quad (10)$$

که در آن  $\varepsilon_{kl}^*$  معرف درایه‌های تانسور کرنش ویژه می‌باشد. حال با جایگذاری معادلات (3)، (4)، (9) و (10) در معادلات تعادل (5) و (6)، معادلات تعادل حاکم بر محیط پیزوالکتریک در حضور میدان کرنش ویژه دلخواه به صورت معادلات (11) و (12) بدست خواهد آمد:

$$C_{ijkl}u_{k,lj} + e_{kij}\Phi_{,kj} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl,j}^*, \quad (11)$$

$$e_{jkl}u_{k,lj} - \kappa_{kj}\Phi_{,kj} = 0. \quad (12)$$

معادلات (11) و (12) در حقیقت معادلات حاکم بر محیط‌های پیزوالکتریک با ناهمسانگردی دلخواه در تانسور خواص الاستیک، تانسور پیزوالکتریک و تانسور دی‌الکتریک می‌باشند. در ادامه، این معادلات در حالت کلی حل شده و برای محیط پیزوالکتریک همسانگرد جانبی ساده‌سازی خواهند شد. به علاوه تأکید می‌شود که به دلیل وجود اندرکنش میدان‌های مکانیکی و الکتریکی، میدان کرنش ویژه باعث ایجاد هر دو میدان مکانیکی و الکتریکی در یک محیط پیزوالکتریک خواهد شد که به همین سبب بایستی دستگاه معادلات دیفرانسیل پاره‌ای (11) و (12) بطور همزمان برای تعیین میدان‌های مکانیکی و الکتریکی یا به عبارت دیگر چهار تابع مجهول  $u_k$  به ازای  $k = 1, 2, 3$  و  $\Phi$  حل شوند.

### ۳- حل کلی معادلات حاکم برای توزیع متناوب نانوساختارهای کوانتومی

برای حل معادلات حاکم بر محیط پیزوالکتریک در حضور نانوساختارهای کوانتومی با توزیع متناوب، توزیع کرنش‌های ویژه در محیط به صورت متناوب به صورت سری فوریه در نظر گرفته می‌شود:

$$\varepsilon_{ij}^*(x) = \sum_{\xi} \bar{\varepsilon}_{ij}^*(\xi) \exp(i\xi \cdot x), \quad (13)$$

بطوریکه  $i = \sqrt{-1}$  و  $\xi$  بردار موج منطبق بر تناوب توزیع نانوساختارهای کوانتومی می‌باشد و:

$$\bar{\varepsilon}_{ij}^*(\xi) = \frac{1}{8L_1L_2L_3} \int_{\Omega} \varepsilon_{ij}^*(x') \exp(-i\xi \cdot x') dx'. \quad (14)$$

در معادله (14)،  $\Omega$  محدوده اینکلوزن در یک تناوب را مشخص می‌کند در حالی که یک تناوب دارای اندازه‌های  $2L_1$ ،  $2L_2$  و  $2L_3$  در راستای محورهای مختصاتی  $x$ ،  $y$  و  $z$  است. به این ترتیب، حل دستگاه معادلات (11) و (12) نیز به صورت متناوب خواهد بود:

$$u_k(x) = \sum_{\xi} \bar{u}_k(\xi) \exp(i\xi \cdot x), \quad (15)$$

$$\Phi(x) = \sum_{\xi} \bar{\Phi}(\xi) \exp(i\xi \cdot x). \quad (16)$$

جایگذاری معادلات (13)، (15) و (16) در دستگاه معادلات (11) و (12) منجر به استخراج دستگاه معادلات جبری زیر برای مجهولات  $\bar{\varepsilon}_{ij}^*(\xi)$  و  $\bar{u}_k(\xi)$  و  $\bar{\Phi}(\xi)$  در فضای فوریه خواهد شد:

$$C_{ijkl}\xi_i\xi_j\bar{u}_k(\xi) + e_{kij}\xi_k\xi_j\bar{\Phi}(\xi) = -iC_{ijkl}\xi_j\bar{\varepsilon}_{kl}^*(\xi), \quad (17)$$

$$e_{jkl}\xi_l\xi_j\bar{u}_k(\xi) - \kappa_{kj}\xi_k\xi_j\bar{\Phi}(\xi) = 0. \quad (18)$$

برای حل دستگاه معادلات فوق، ماتریس ضرایب  $K(\xi)$  تعریف می‌شود:

$$K_{ik}(\xi) = K_{ki}(\xi) = C_{ijkl}\xi_l\xi_j, \quad (19)$$

خودساختگی این نانوساختارها و همچنین ویژگی‌های خاص الکتریکی-اپتیکی آن‌ها مؤثر می‌باشد [10,7,1]، در بخش نتایج میدان کرنش مکانیکی ایجاد شده در اثر حضور سیم‌ها و نقطه‌های کوانتومی با هندسه‌های گوناگون به تفصیل مورد بررسی و تحلیل قرار می‌گیرد.

## ۲- روابط ساختاری و معادلات حاکم

### ۲-۱- روابط ساختاری و معادلات تعادل در محیط‌های پیزوالکتریک

در یک محیط پیزوالکتریک که تانسور مرتبه چهارم خواص الاستیک آن  $C$ ، تانسور مرتبه سوم پیزوالکتریک آن  $e$  و تانسور مرتبه دوم دی‌الکتریک آن  $\kappa$  باشد، روابط ساختاری با استفاده از نمادگذاری اندیسی به صورت معادلات (1) و (2) بیان می‌شوند بطوریکه کلیه اندیس‌ها مقادیر 1، 2 و 3 را می‌توانند اختیار کنند:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl} - e_{kij}E_k, \quad (1)$$

$$D_j = \kappa_{kj}E_k + e_{jkl}\varepsilon_{kl}, \quad (2)$$

که در آن  $\sigma_{ij}$  معرف درایه‌های تانسور تنش،  $\varepsilon_{kl}$  معرف درایه‌های تانسور کرنش،  $D_j$  معرف درایه‌های بردار جابجایی الکتریکی و  $E_k$  معرف درایه‌های بردار میدان الکتریکی می‌باشند. همچنین رابطه میدان کرنش  $\varepsilon_{kl}$  با میدان جابجایی  $u_k$  و رابطه میدان الکتریکی  $E_k$  با پتانسیل الکتریکی  $\Phi$  به صورت معادلات (3) و (4) بیان می‌شوند:

$$\varepsilon_{kl} = \frac{1}{2}(u_{k,l} + u_{l,k}), \quad (3)$$

$$E_k = -\Phi_{,k}. \quad (4)$$

از طرف دیگر در محیط‌های پیزوالکتریک در غیاب نیروهای بدنه‌ای و چگالی جریان الکتریکی آزاد، معادلات تعادل میدان‌های تنش و جابجایی الکتریکی به صورت معادلات (5) و (6) خواهند بود:

$$\sigma_{ij,j} = 0, \quad (5)$$

$$D_{j,j} = 0. \quad (6)$$

با جایگذاری معادلات (3) و (4) در معادلات (1) و (2) و سپس جایگذاری حاصل آن در معادلات (5) و (6)، معادلات تعادل در محیط‌های پیزوالکتریک بر حسب میدان جابجایی مکانیکی  $u_k$  و پتانسیل الکتریکی  $\Phi$  بدست می‌آیند:

$$C_{ijkl}u_{k,lj} + e_{kij}\Phi_{,kj} = 0, \quad (7)$$

$$e_{jkl}u_{k,lj} - \kappa_{kj}\Phi_{,kj} = 0. \quad (8)$$

لازم به توجه است که این دستگاه معادلات دیفرانسیل پاره‌ای در حالت کلی شامل چهار معادله برای یافتن چهار تابع مجهول  $u_k$  به ازای  $k = 1, 2, 3$  و  $\Phi$  می‌باشد و در آن، اندرکنش‌های میدان‌های مکانیکی و الکتریکی لحاظ شده-اند.

### ۲-۲- روابط ساختاری و معادلات تعادل در محیط‌های پیزوالکتریک

#### در حضور نانوساختارهای کوانتومی

نانوساختارهای کوانتومی در محیط‌های پیزوالکتریک به صورت اینکلوزن‌هایی دارای کرنش‌های ویژه محصور شده‌اند. این کرنش‌های ویژه به دلیل تفاوت ابعاد و اندازه‌های شبکه اتمی نانوساختار و محیط پیزوالکتریک اطراف آن در محدوده نانوساختار وجود داشته و از همین طریق نیز محاسبه می‌شود [1]. به این ترتیب به دلیل وجود کرنش‌های ویژه در محیط، نیاز به استفاده از روابط ساختاری در حضور کرنش‌های ویژه خواهد بود. روابط ساختاری حاکم بر محیط پیزوالکتریک در حضور کرنش‌های ویژه به صورت معادلات (9) و (10) نوشته می‌شوند [11,10]:

$$N_{12}(\xi) = \frac{C_{11} + C_{12}}{2} \zeta^4 \alpha_3 \xi_1 \xi_2, \quad (31)$$

$$N_{34}(\xi) = -e_{15} \zeta^6 \alpha_1 \alpha_2, \quad (32)$$

$$N_{44}(\xi) = \zeta^6 \alpha_1 \alpha_2 \alpha_4, \quad (33)$$

$$N_{13}(\xi) = N_{23}(\xi) = N_{14}(\xi) = N_{24}(\xi) = 0, \quad (34)$$

بطوری که:

$$\zeta^2 = \xi_1^2 + \xi_2^2, \quad (35)$$

$$\alpha_1 = C_{11}, \quad (36)$$

$$\alpha_2 = \frac{C_{11} - C_{12}}{2}, \quad (37)$$

$$\alpha_3 = e_{15}^2 + C_{44} \kappa_{11}, \quad (38)$$

$$\alpha_4 = C_{44}. \quad (39)$$

بنابراین معادلات (22) و (23) به صورت معادلات (40) و (41) قابل ساده‌سازی خواهند بود:

$$u_i(x) = -i \sum_{j,k,l,m} C_{jklm} \xi_k \bar{\varepsilon}_{lm}^*(\xi) N_{ij}(\xi) D^{-1}(\xi) \exp(i\xi \cdot x), \quad (40)$$

$$i, j, k, l, m = 1, 2,$$

$$\Phi(x) = 0. \quad (41)$$

همان‌گونه که مشاهده می‌شود یک نتیجه جالب در این حالت اینست که هیچ پتانسیل الکتریکی در محیط به وجود نیامده و بنابراین بر اساس معادله (4) هیچ میدان الکتریکی در محیط پیزوالکتریک بوجود نخواهد آمد. بدین معنی که در حالتی که محور مختصاتی z محور تقارن دورانی خواص الاستیک و محور قطبیدگی الکتریکی باشد، میدان کرنش الاستیک و میدان الکتریکی بطور کامل مجزا از یکدیگر خواهند شد.

همچنین چنانچه تنها کرنش‌های ویژه انبساطی در محدوده نانوساختار مخالف صفر و با یکدیگر برابر در نظر گرفته شوند [10,8] خواهیم داشت:

$$\varepsilon_{ij}^*(x) = \delta_{ij} \varepsilon^*(x), \quad i, j = 1, 2, \quad (42)$$

و بنابراین مؤلفه‌های غیر صفر کرنش ویژه در فضای فوری به صورت زیر بدست خواهند آمد:

$$\bar{\varepsilon}_{11}^*(\xi) = \bar{\varepsilon}_{22}^*(\xi) = \bar{\varepsilon}^*(\xi) = \frac{1}{4L_1 L_2} \int_{\Omega} \varepsilon^*(x') \exp(-i\xi \cdot x') dx', \quad (43)$$

که در آن  $L_1$  و  $L_2$  نصف اندازه تناوب سیم‌های کوانتومی در راستای محورهای مختصاتی x و y می‌باشند. بدین ترتیب میدان‌های الکترواستاتیک بدست آمده در معادلات (40) و (41) به این شکل ساده‌سازی خواهند شد:

$$u_i(x) = -i \sum_{\xi} \bar{\varepsilon}^*(\xi) (C_{11} + C_{12}) [\xi_1 N_{i1}(\xi) + \xi_2 N_{i2}(\xi)] \times D^{-1}(\xi) \exp(i\xi \cdot x), \quad (44)$$

$$\Phi(x) = 0. \quad (45)$$

#### ۴-۲- توزیع متناوب نقطه‌های کوانتومی

برای توزیع متناوب نقطه‌های کوانتومی سه‌بعدی در حالتی که محور مختصاتی z محور تقارن دورانی خواص الاستیک و محور قطبیدگی الکتریکی باشد، دترمینان  $D(\xi)$  و عناصر ماتریس کوفاکتور  $N(\xi)$  مربوط به ماتریس ضرایب  $K(\xi)$  که در معادلات (22) و (23) ظاهر می‌شوند به صورت معادلات (46) تا (56) بدست می‌آیند:

$$D(\xi) = -\frac{1}{2} ((C_{11} - C_{12})(\xi_1^2 + \xi_2^2) + 2C_{44}\xi_3^2) \times [C_{11}(e_{15}^2 + C_{44}\kappa_{11})(\xi_1^2 + \xi_2^2)^3$$

$$K_{i4}(\xi) = K_{4i}(\xi) = e_{kij} \xi_k \xi_j, \quad (20)$$

$$K_{44}(\xi) = -\kappa_{kj} \xi_k \xi_j. \quad (21)$$

به این ترتیب ماتریس  $K(\xi)$  یک ماتریس  $4 \times 4$  و متقارن می‌باشد. بنابراین با حل دستگاه معادلات (17) و (18) حل نهایی دستگاه معادلات (11) و (12) به صورت معادلات (22) و (23) خواهد بود:

$$u_i(x) = -i \sum_{\xi} C_{jklm} \xi_k \bar{\varepsilon}_{lm}^*(\xi) N_{ij}(\xi) D^{-1}(\xi) \exp(i\xi \cdot x) \quad (22)$$

$$\Phi(x) = -i \sum_{\xi} C_{jklm} \xi_k \bar{\varepsilon}_{lm}^*(\xi) N_{4j}(\xi) D^{-1}(\xi) \exp(i\xi \cdot x) \quad (23)$$

که در آن،  $N(\xi)$  و  $D(\xi)$  به ترتیب ماتریس کوفاکتور و دترمینان ماتریس  $K(\xi)$  می‌باشند.

#### ۴- میدان‌های الکترواستاتیک در محیط پیزوالکتریک همسانگرد جانبی با توزیع متناوب نانوساختارهای کوانتومی

در یک محیط پیزوالکتریک همسانگرد جانبی که محور مختصاتی z به عنوان محور تقارن دورانی خواص الاستیک و محور قطبیدگی الکتریکی باشد، تانسور خواص الاستیک C، تانسور پیزوالکتریک e و تانسور دی‌الکتریک K به شکل زیر خواهند بود:

$$C = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{C_{11} - C_{12}}{2} \end{bmatrix}, \quad (24)$$

$$e = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (25)$$

$$\kappa = \begin{bmatrix} \kappa_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \kappa_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \kappa_{33} \end{bmatrix}. \quad (26)$$

در ادامه این بخش، میدان‌های الکترواستاتیک اراده شده در روابط (22) و (23) برای محیط پیزوالکتریک همسانگرد جانبی با توزیع متناوب نانوساختارهای کوانتومی دوبعدی و سه‌بعدی شامل سیم‌های کوانتومی و نقطه‌های کوانتومی ساده‌سازی خواهند شد.

#### ۴-۱- توزیع متناوب سیم‌های کوانتومی

برای توزیع متناوب سیم‌های کوانتومی دوبعدی در حالتی که محور مختصاتی z محور تقارن دورانی خواص الاستیک و محور قطبیدگی الکتریکی باشد دترمینان  $D(\xi)$  و عناصر ماتریس کوفاکتور  $N(\xi)$  مربوط به ماتریس ضرایب  $K(\xi)$  که در معادلات (22) و (23) ظاهر می‌شوند به صورت زیر بدست می‌آیند [10]:

$$D(\xi) = -\zeta^8 \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3, \quad (27)$$

$$N_{11}(\xi) = -\zeta^4 \alpha_3 (\alpha_2 \xi_1^2 + \alpha_1 \xi_2^2), \quad (28)$$

$$N_{22}(\xi) = -\zeta^4 \alpha_3 (\alpha_1 \xi_1^2 + \alpha_2 \xi_2^2), \quad (29)$$

$$N_{33}(\xi) = -\kappa_{11} \zeta^6 \alpha_1 \alpha_2, \quad (30)$$

$$\begin{aligned}
& + [(C_{11} + C_{12})C_{44}(\xi_1^2 + \xi_2^2) + ((C_{11} + C_{12})C_{33} \\
& - 2(C_{13} + C_{44})^2)\xi_3^2](\kappa_{11}(\xi_1^2 + \xi_2^2) + \kappa_{33}\xi_3^2)\}, \\
N_{14}(\xi) &= \frac{1}{2}\xi_1\xi_3((C_{11} - C_{12})(\xi_1^2 + \xi_2^2) + 2C_{44}\xi_3^2) \\
& \times [(C_{13}e_{15} - C_{44}e_{31})(\xi_1^2 + \xi_2^2) \\
& + (-C_{33}(e_{15} + e_{31}) + (C_{13} + C_{44})e_{33})\xi_3^2], \quad (53)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
N_{24}(\xi) &= \frac{1}{2}\xi_2\xi_3((C_{11} - C_{12})(\xi_1^2 + \xi_2^2) + 2C_{44}\xi_3^2) \\
& \times [(C_{13}e_{15} - C_{44}e_{31})(\xi_1^2 + \xi_2^2) \\
& + (-C_{33}(e_{15} + e_{31}) + (C_{13} + C_{44})e_{33})\xi_3^2], \quad (54)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
N_{34}(\xi) &= -\frac{1}{2}((C_{11} - C_{12})(\xi_1^2 + \xi_2^2) + 2C_{44}\xi_3^2) \\
& \times [C_{11}e_{15}(\xi_1^2 + \xi_2^2)^2 - (C_{44}e_{31} + C_{13}(e_{15} + e_{31}) \\
& - C_{11}e_{33})(\xi_1^2 + \xi_2^2)\xi_3^2 + C_{44}e_{33}\xi_3^4], \quad (55)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
N_{44}(\xi) &= \frac{1}{2}((C_{11} - C_{12})(\xi_1^2 + \xi_2^2) + 2C_{44}\xi_3^2) \\
& \times [C_{11}C_{44}(\xi_1^2 + \xi_2^2)^2 - (C_{13}^2 - C_{11}C_{33} + 2C_{13}C_{44}) \\
& \times (\xi_1^2 + \xi_2^2)\xi_3^2 + C_{33}C_{44}\xi_3^4]. \quad (56)
\end{aligned}$$

در نتیجه با جایگذاری معادلات فوق و همچنین روابط (24)، (25) و (26) در معادلات (22) و (23)، میدان‌های جابجایی مکانیکی و پتانسیل الکتریکی در محیط پیزوالکتریک همسانگرد جانبی با توزیع متناوب نقطه‌های کوانتومی سه‌بعدی قابل دستیابی خواهد بود. همان‌طور که مشاهده می‌شود برخلاف توزیع متناوب سیم‌های کوانتومی، در حالت توزیع متناوب نقطه‌های کوانتومی معادلات (22) و (23) قابل ساده‌سازی نمی‌باشند، زیرا تمام مؤلفه‌های ماتریس کوفاکتور غیر صفرند.

#### 5- حل تحلیلی برای نانوساختارهای کوانتومی با هندسه‌های مختلف در محیط پیزوالکتریک همسانگرد جانبی

در این بخش با استفاده از معادلات ارائه شده در بخش‌های قبل، میدان‌های الکترواستاتیک برای نانوساختارهای کوانتومی شامل سیم‌های کوانتومی و نقطه‌های کوانتومی با هندسه‌های مختلف ارائه می‌شود. بدین منظور سیم‌های کوانتومی و نقطه‌های کوانتومی در دو بخش بطور مجزا مورد بررسی قرار می‌گیرند. همچنین بدون کاستن از کلیت و جامعیت حل، توزیع میدان کرنش ویژه در محدوده نانوساختارها به صورت کرنش ویژه انبساطی با اندازه واحد در نظر گرفته می‌شود، به این معنی که تنها مؤلفه‌های محوری کرنش ویژه برابر یا یک و مؤلفه‌های غیر محوری آن صفر در نظر گرفته می‌شوند [10]:

$$\varepsilon_{ij}^*(x) = \delta_{ij}. \quad (57)$$

علت در نظر گرفتن میدان کرنش ویژه به صورت انبساطی و برابر در کلیه جهات این است که با اینکه محیط پیزوالکتریک غیر ایزوتروپ می‌باشد، لیکن مبنای محاسبه مؤلفه‌های میدان کرنش ویژه تفاوت پارامتر شبکه نانوساختار و محیط اطراف آن بوده و از اینرو مؤلفه‌های محوری کرنش ویژه غیر صفر و برابر در نظر گرفته شده و مؤلفه‌های غیر محوری آن صفر در نظر گرفته می‌شوند [10،1]. محیط پیزوالکتریک همسانگرد جانبی نیز از جنس آلومینیوم نیتراید (AlN) با مشخصات رفتاری مکانیکی و الکتریکی ارائه شده در جدول 1 در نظر گرفته می‌شود [10].

$$\begin{aligned}
& - (C_{13}^2\kappa_{11} - C_{11}(2e_{15}e_{33} + C_{33}\kappa_{11}) \\
& + 2C_{13}(e_{15}(e_{15} + e_{31}) + C_{44}\kappa_{11}) \\
& - C_{44}(e_{31}^2 + C_{11}\kappa_{33}))(\xi_1^2 + \xi_2^2)^2\xi_3^2 \\
& + (e_{33}(-2C_{44}e_{31} - 2C_{13}(e_{15} + e_{31}) + C_{11}e_{33}) \\
& - C_{13}(C_{13} + 2C_{44})\kappa_{33} + C_{33}((e_{15} + e_{31})^2 + C_{44}\kappa_{11} \\
& + C_{11}\kappa_{33}))(\xi_1^2 + \xi_2^2)\xi_3^4 + C_{44}(e_{33}^2 + C_{33}\kappa_{33})\xi_3^6], \quad (46)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
N_{11}(\xi) &= (e_{15} + e_{31})\xi_2^2\xi_3^2 \\
& \times [(C_{13}e_{15} - C_{44}e_{31})(\xi_1^2 + \xi_2^2) \\
& + (-C_{33}(e_{15} + e_{31}) + (C_{13} + C_{44})e_{33})\xi_3^2] \\
& + (-\kappa_{11}(\xi_1^2 + \xi_2^2) - \kappa_{33}\xi_3^2) \\
& \times [-(C_{13} + C_{44})^2\xi_2^2\xi_3^2 + \frac{1}{2}(C_{44}(\xi_1^2 + \xi_2^2) + C_{33}\xi_3^2) \\
& \times ((C_{11} - C_{12})\xi_1^2 + 2C_{11}\xi_2^2 + 2C_{44}\xi_3^2)] \\
& - (e_{15}(\xi_1^2 + \xi_2^2) + e_{33}\xi_3^2) \\
& \times [-(C_{13} + C_{44})(e_{15} + e_{31})\xi_2^2\xi_3^2 \\
& + \frac{1}{2}((C_{11} - C_{12})\xi_1^2 + 2C_{11}\xi_2^2 + 2C_{44}\xi_3^2) \\
& \times (e_{15}(\xi_1^2 + \xi_2^2) + e_{33}\xi_3^2)], \quad (47)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
N_{22}(\xi) &= (e_{15} + e_{31})\xi_1^2\xi_3^2 \\
& \times [(C_{13}e_{15} - C_{44}e_{31})(\xi_1^2 + \xi_2^2) \\
& + (-C_{33}(e_{15} + e_{31}) + (C_{13} + C_{44})e_{33})\xi_3^2] \\
& + (-\kappa_{11}(\xi_1^2 + \xi_2^2) - \kappa_{33}\xi_3^2) \\
& \times [-(C_{13} + C_{44})^2\xi_1^2\xi_3^2 + \frac{1}{2}(C_{44}(\xi_1^2 + \xi_2^2) + C_{33}\xi_3^2) \\
& \times (2C_{11}\xi_1^2 + (C_{11} - C_{12})\xi_2^2 + 2C_{44}\xi_3^2)] \\
& - (e_{15}(\xi_1^2 + \xi_2^2) + e_{33}\xi_3^2) \\
& \times [-(C_{13} + C_{44})(e_{15} + e_{31})\xi_1^2\xi_3^2 \\
& + \frac{1}{2}(2C_{11}\xi_1^2 + (C_{11} - C_{12})\xi_2^2 + 2C_{44}\xi_3^2) \\
& \times (e_{15}(\xi_1^2 + \xi_2^2) + e_{33}\xi_3^2)], \quad (48)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
N_{33}(\xi) &= -\frac{1}{2}((C_{11} - C_{12})(\xi_1^2 + \xi_2^2) + 2C_{44}\xi_3^2) \\
& \times [C_{11}\kappa_{11}(\xi_1^2 + \xi_2^2)^2 + (e_{15} + e_{31})^2 \\
& + C_{44}\kappa_{11} + C_{11}\kappa_{33})(\xi_1^2 + \xi_2^2)\xi_3^2 + C_{44}\kappa_{33}\xi_3^4], \quad (49)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
N_{23}(\xi) &= \frac{1}{2}\xi_2\xi_3((C_{11} - C_{12})(\xi_1^2 + \xi_2^2) + 2C_{44}\xi_3^2) \\
& \times [(e_{15}(e_{15} + e_{31}) + (C_{13} + C_{44})\kappa_{11})(\xi_1^2 + \xi_2^2) \\
& + ((e_{15} + e_{31})e_{33} + (C_{13} + C_{44})\kappa_{33})\xi_3^2], \quad (50)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
N_{13}(\xi) &= \frac{1}{2}\xi_1\xi_3((C_{11} - C_{12})(\xi_1^2 + \xi_2^2) + 2C_{44}\xi_3^2) \\
& \times [(e_{15}(e_{15} + e_{31}) + (C_{13} + C_{44})\kappa_{11})(\xi_1^2 + \xi_2^2) \\
& + ((e_{15} + e_{31})e_{33} + (C_{13} + C_{44})\kappa_{33})\xi_3^2], \quad (51)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
N_{12}(\xi) &= \frac{1}{2}\xi_1\xi_2\{(e_{15}(\xi_1^2 + \xi_2^2) + e_{33}\xi_3^2) \\
& \times [(C_{11} + C_{12})e_{15}(\xi_1^2 + \xi_2^2) \\
& + (-2(C_{13} + C_{44})(e_{15} + e_{31}) + (C_{11} + C_{12})e_{33})\xi_3^2] \\
& - 2(e_{15} + e_{31})\xi_3^2[(C_{13}e_{15} - C_{44}e_{31})(\xi_1^2 + \xi_2^2) \\
& + (-C_{33}(e_{15} + e_{31}) + (C_{13} + C_{44})e_{33})\xi_3^2] \quad (52)
\end{aligned}$$



با قرار دادن این رابطه در معادلات (22) و (23) و استفاده از روابط (46) تا (56) و همچنین مشخصات رفتاری مکانیکی و الکتریکی محیط پیزوالکتریک همسانگرد جانبی آلومینیوم نیتراید که در جدول 1 ارائه شده است، میدان جابجایی مکانیکی و پتانسیل الکتریکی قابل تعیین خواهند بود. در نتیجه با استفاده از معادلات (3) و (4) میدان کرنش و میدان الکتریکی ایجاد شده در محیط پیزوالکتریک نیز قابل دستیابی می‌باشند. در شکل 2 تغییرات مؤلفه کرنش  $\varepsilon_{11}$  روی محور  $x$  (به ازای  $y = z = 0$ ) در یک تناوب نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل 2 مشخص است، مؤلفه کرنش  $\varepsilon_{11}$  برای محدوده داخل نقطه‌های کوانتومی دارای مقادیر مثبت و برای محدوده خارج آن‌ها دارای مقادیر منفی می‌باشد و مقادیر حداکثر نسبی برای اندازه این مؤلفه کرنش، در مجاورت مرز نقطه‌های کوانتومی اتفاق می‌افتد. همچنین کمترین مقدار اندازه این مؤلفه کرنش در مرکز نقطه‌های کوانتومی اتفاق می‌افتد. لازم به توجه است که به دلیل وجود کرنش ویژه در محدوده داخل نقطه‌های کوانتومی، در مرز آن‌ها با محیط اطراف تغییر ناگهانی در مقدار کرنش کل به وجود می‌آید.

#### 5-2-2- توزیع متناوب نقطه‌های کوانتومی کروی

در این بخش بدون کاستن از کلیت توزیع متناوب نقطه‌های کوانتومی با هندسه کروی با اندازه قطر واحد (به صورت بی بعد شده) و با دوره تناوب بی بعد شده 2 در هر جهت در نظر گرفته می‌شود. چنانچه مبدا مختصاتی را در مرکز کره در نظر بگیریم مؤلفه‌های غیر صفر کرنش ویژه در فضای فوری به صورت معادله (62) بدست می‌آیند:

$$\bar{\varepsilon}_{11}^*(\xi) = \bar{\varepsilon}_{22}^*(\xi) = \bar{\varepsilon}_{33}^*(\xi) = \frac{1}{8} \frac{(\pi)^{3/2} J_{3/2} \left( \frac{1}{2} (\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2)^{1/2} \right)}{(\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2)^{3/4}} \quad (62)$$

با قرار دادن این رابطه در معادلات (22) و (23) و استفاده از روابط (46) تا (56)، میدان جابجایی مکانیکی و پتانسیل الکتریکی بدست آمده و متعاقباً با استفاده از معادلات (3) و (4) میدان کرنش و میدان الکتریکی ایجاد شده در محیط پیزوالکتریک نیز قابل دستیابی می‌باشند. در شکل 2 تغییرات مؤلفه کرنش  $\varepsilon_{11}$  روی محور  $x$  (به ازای  $y = z = 0$ ) برای توزیع متناوب نقطه‌های کوانتومی کروی در یک تناوب نشان داده شده و با نتایج مربوط به نقطه‌های کوانتومی مکعبی مقایسه شده است. بر اساس نتایج بدست آمده مشاهده می‌شود که مقدار مؤلفه کرنش  $\varepsilon_{11}$  با در نظر گرفتن علامت آن، برای توزیع

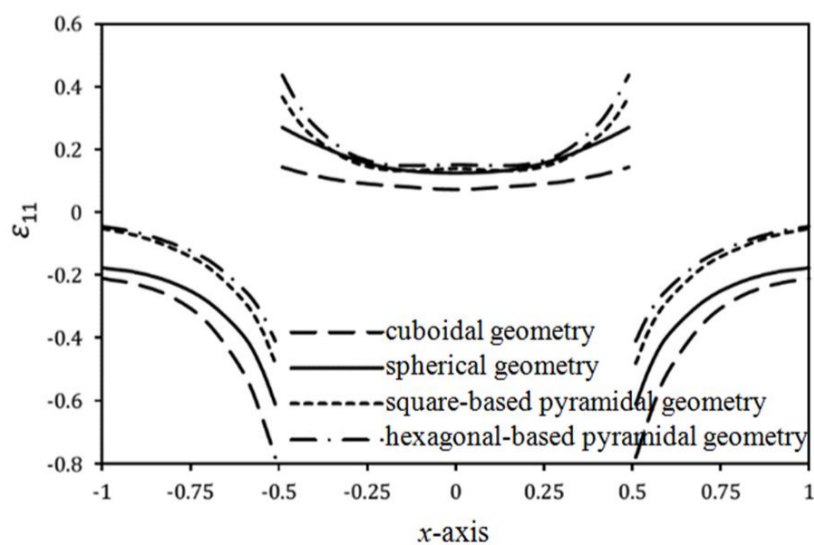


Fig. 2 Variations of the strain component  $\varepsilon_{11}$  along the  $x$ -axis for quantum dots with cuboidal, spherical, square-based pyramidal, and hexagonal-based pyramidal geometries

شکل 2 تغییرات مؤلفه کرنش  $\varepsilon_{11}$  روی محور  $x$  برای نقطه‌های کوانتومی با هندسه‌های مکعبی، کروی، هرم با قاعده مربع و هرم با قاعده شش ضلعی

ارتفاع واحد (به صورت بی بعد شده) بطوری که ارتفاع مثلث‌ها در راستای محور  $y$  قرار گیرند در نظر گرفته می‌شود. با فرض اینکه دوره تناوب بی بعد شده برابر با 2 در هر جهت در نظر گرفته شود و مبدا مختصاتی بر نقطه میانی ارتفاع مثلث منطبق گردد مؤلفه‌های غیر صفر کرنش ویژه در فضای فوری به صورت معادله (60) بدست می‌آیند:

$$\bar{\varepsilon}_{11}^*(\xi) = \bar{\varepsilon}_{22}^*(\xi) = \frac{e^{-i\xi_2/2} \left( \xi_1 + e^{i\xi_2} \left( -\cos\left(\frac{\xi_1}{2}\right) \xi_1 + 2i \sin\left(\frac{\xi_1}{2}\right) \xi_2 \right) \right)}{\xi_1^3 - 4\xi_1\xi_2^2} \quad (60)$$

با جایگذاری این رابطه در معادلات (44) و (45) میدان جابجایی مکانیکی و پتانسیل الکتریکی قابل دستیابی بوده و به تبع آن با استفاده از معادلات (3) و (4) میدان کرنش و میدان الکتریکی ایجاد شده در محیط پیزوالکتریک نیز قابل تعیین خواهند بود. در شکل 1 تغییرات مؤلفه کرنش  $\varepsilon_{11}$  بر حسب  $x$  به ازای  $y = 0$  برای توزیع متناوب سیم‌های کوانتومی با مقطع مثلثی در یک تناوب نشان داده شده و با نتایج مشابه برای سیم‌های کوانتومی با مقطع مربعی و دایروی مقایسه شده است. همان‌طور که از نتایج برمی‌آید اندازه کرنش کل در محدوده داخل سیم‌های کوانتومی با مقطع مثلثی بطور قابل ملاحظه‌ای بیش از اندازه آن در سیم‌های کوانتومی با مقطع مربعی و دایروی می‌باشد، در حالی که اندازه کرنش کل در محدوده خارج از سیم‌های کوانتومی با مقطع مثلثی، کمتر از اندازه آن در سیم‌های کوانتومی با مقطع مربعی و دایروی می‌باشد. همچنین بطور کلی مؤلفه کرنش  $\varepsilon_{11}$  برای محدوده داخل سیم‌های کوانتومی دارای مقادیر مثبت و برای محدوده خارج آن‌ها دارای مقادیر منفی است و مقادیر حداکثر نسبی برای اندازه این مؤلفه کرنش، در مجاورت مرز سیم‌های کوانتومی اتفاق می‌افتد. به علاوه کمترین مقدار اندازه این مؤلفه کرنش در مرز دو تناوب مجاور اتفاق خواهد افتاد. همان‌طور که مشاهده می‌شود مقدار مؤلفه کرنش در محدوده خارج از سیم‌های کوانتومی با مقطع مربعی و دایروی در حدود 2.5 برابر مقدار این مؤلفه کرنش در اثر وجود سیم‌های کوانتومی با مقطع مثلثی خواهد بود.

#### 5-2- نقطه‌های کوانتومی با هندسه‌های مختلف

از آنجا که نانوساختارهای کوانتومی سه بعدی نیز مانند نانوساختارهای کوانتومی دو بعدی ممکن است هندسه‌های متفاوتی داشته باشند [1-3] در این بخش چهار هندسه متداول برای نقطه‌های کوانتومی شامل مکعب، کره، هرم با قاعده مربع و هرم با قاعده شش ضلعی منتظم مورد بررسی قرار می‌گیرند. برای انجام مقایسه بین میدان‌های الکترواستاتیک ایجاد شده در اثر هندسه‌های متفاوت برای نقطه‌های کوانتومی، برای کلیه هندسه‌ها اندازه دوره تناوب نقطه‌های کوانتومی در هر سه جهت  $x$ ،  $y$  و  $z$  به صورت بی بعد شده برابر با 2 فرض می‌شود.

#### 5-2-1- توزیع متناوب نقطه‌های کوانتومی مکعبی

بدون کاستن از کلیت، توزیع متناوب نقطه‌های کوانتومی با هندسه مکعبی با ابعاد  $1 \times 1 \times 1$  با دوره تناوب بی بعد شده 2 در هر جهت در نظر گرفته می‌شود. چنانچه مبدا مختصاتی در مرکز مکعب در نظر گرفته شود مؤلفه‌های غیر صفر کرنش ویژه در فضای فوری به صورت معادله (61) بدست می‌آیند:

$$\bar{\varepsilon}_{11}^*(\xi) = \bar{\varepsilon}_{22}^*(\xi) = \bar{\varepsilon}_{33}^*(\xi) = \frac{1}{\xi_1\xi_2\xi_3} \sin\left(\frac{\xi_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\xi_2}{2}\right) \sin\left(\frac{\xi_3}{2}\right) \quad (61)$$

۴-۲-۵- توزیع متناوب نقطه‌های کوانتومی هرمی با قاعده شش ضلعی منتظم در این بخش، توزیع متناوب نقطه‌های کوانتومی هرمی شکل با قاعده شش ضلعی منتظم با دوره تناوب بی‌بعد شده 2 در هر جهت در نظر گرفته می‌شود و میدان الاستیک حاصل از آن با میدان الاستیک ناشی از حضور نقطه‌های کوانتومی مکعبی، کره‌ای و هرمی با قاعده مربعی مقایسه می‌شود. نحوه قرار-گیری این هرم‌ها که قاعده شش ضلعی منتظم دارند بطوری است که قاعده شش ضلعی هرم که در صفحه  $xy$  قرار دارد به‌صورت بی‌بعد شده اضلاعی به طول 0.5 داشته و یک قطر آن بر محور  $x$  منطبق می‌باشد و اندازه ارتفاع هرم که در راستای  $z$  قرار دارد نیز برابر با 0.5 است. با فرض اینکه مبدا مختصاتی در مرکز قاعده شش ضلعی هرم در نظر گرفته شود، مؤلفه‌های غیر صفر کرنش ویژه در فضای فوریه به‌صورت معادله (64) بدست می‌آیند:

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon}_{11}^*(\xi) = \bar{\varepsilon}_{22}^*(\xi) = \bar{\varepsilon}_{33}^*(\xi) &= \frac{\sin\left(\frac{1}{4}(\xi_1 - 2\xi_2)\right)(\xi_1 - 2\xi_2)}{2\xi_1\xi_2((\xi_1 - 2\xi_2)^2 - 4\xi_3^2)} \\ &+ \frac{i \cos\left(\frac{1}{4}(\xi_1 - 2\xi_2)\right)\xi_3}{\xi_1\xi_2((\xi_1 - 2\xi_2)^2 - 4\xi_3^2)} - \frac{2\sin\left(\frac{1}{4}(\xi_1 + 2\xi_2)\right)(\xi_1 + 2\xi_2)}{4\xi_1\xi_2((\xi_1 + 2\xi_2)^2 - 4\xi_3^2)} \\ &- \frac{i \cos\left(\frac{1}{4}(\xi_1 + 2\xi_2)\right)\xi_3}{\xi_1\xi_2((\xi_1 + 2\xi_2)^2 - 4\xi_3^2)} \\ &- \frac{8ie^{-\frac{i\xi_3}{2}}\xi_3}{(\xi_1^4 + 16(\xi_2^2 - \xi_3^2)^2 - 8\xi_1^2(\xi_2^2 + \xi_3^2))} \\ &- \frac{ie^{-\frac{i\xi_1}{2}}(2\xi_1 - \xi_3)}{\xi_1^4 + 16(\xi_2^2 - \xi_3^2)^2 - 8\xi_1^2(\xi_2^2 + \xi_3^2)} \\ &- \frac{2(-4\xi_2^2 + (\xi_1 - \xi_3)^2)(\xi_1^2 - 4\xi_2^2)}{2ie^{-\frac{i\xi_1}{4}}\cos\left(\frac{\xi_2}{2}\right)(\xi_1 - \xi_3)} \\ &+ \frac{(-4\xi_2^2 + (\xi_1 - 2\xi_3)^2)(\xi_1^2 - 4\xi_2^2)}{e^{-\frac{i\xi_1}{4}}\sin\left(\frac{\xi_2}{2}\right)(\xi_1^2 + 4\xi_2^2 - 2\xi_1\xi_3)} \\ &+ \frac{2\xi_2(-4\xi_2^2 + (\xi_1 - 2\xi_3)^2)(\xi_1^2 - 4\xi_2^2)}{ie^{-\frac{i\xi_3}{2}}\cos(\xi_2)(2\xi_1 - 3\xi_3)} \\ &- \frac{2(-4\xi_2^2 + (\xi_1 - 2\xi_3)^2)(-4\xi_2^2 + (\xi_1 - \xi_3)^2)}{e^{-\frac{i\xi_3}{2}}\sin(\xi_2)(\xi_1^2 + 4\xi_2^2 - 3\xi_1\xi_3 + 2\xi_3^2)} \\ &- \frac{4\xi_2(-4\xi_2^2 + (\xi_1 - 2\xi_3)^2)(-4\xi_2^2 + (\xi_1 - \xi_3)^2)}{ie^{-\frac{i\xi_3}{2}}\cos(\xi_2)(2\xi_1 + 3\xi_3)} \\ &+ \frac{2(-4\xi_2^2 + (\xi_1 + 2\xi_3)^2)(-4\xi_2^2 + (\xi_1 + \xi_3)^2)}{e^{-\frac{i\xi_3}{2}}\sin(\xi_2)(4\xi_2^2 + (\xi_1 + \xi_3)(\xi_1 + 2\xi_3))} \\ &- \frac{4\xi_2(-4\xi_2^2 + (\xi_1 + 2\xi_3)^2)(-4\xi_2^2 + (\xi_1 + \xi_3)^2)}{ie^{\frac{i\xi_3}{2}}(2\xi_1 + \xi_3)} \\ &+ \frac{2(\xi_1^2 - 4\xi_2^2)(\xi_1^2 - 4\xi_2^2 + 2\xi_1\xi_3 + \xi_3^2)}{2ie^{\frac{i\xi_1}{4}}\cos\left(\frac{\xi_2}{2}\right)(\xi_1 + \xi_3)} \\ &- \frac{(\xi_1^2 - 4\xi_2^2)(-4\xi_2^2 + (\xi_1 + 2\xi_3)^2)}{e^{\frac{i\xi_1}{4}}\sin\left(\frac{\xi_2}{2}\right)(\xi_1^2 + 4\xi_2^2 + 2\xi_1\xi_3)} \\ &+ \frac{2\xi_2(\xi_1^2 - 4\xi_2^2)(-4\xi_2^2 + (\xi_1 + 2\xi_3)^2)}{2\xi_2(\xi_1^2 - 4\xi_2^2)(-4\xi_2^2 + (\xi_1 + 2\xi_3)^2)} \end{aligned} \quad (64)$$

با قرار دادن این رابطه در معادلات (22) و (23) و استفاده از روابط (46) تا (56) و همچنین مشخصات رفتاری مکانیکی و الکتریکی محیط پیزوالکتریک همسانگرد جانبی آلومینیوم نیتراید که در جدول 1 ارائه شده است، میدان جابجایی مکانیکی و پتانسیل الکتریکی قابل دستیابی بوده و متعاقباً با استفاده از معادلات (3) و (4)، میدان کرنش و میدان الکتریکی ایجاد شده در محیط نیز بدست می‌آید. در شکل 2 تغییرات مؤلفه کرنش  $\varepsilon_{11}$  روی محور  $x$  (به ازای  $y = z = 0$ ) برای توزیع متناوب نقطه‌های کوانتومی هرمی شکل با قاعده شش ضلعی منتظم در یک تناوب نشان داده شده و با نتایج مربوط به

متناوب نقطه‌های کوانتومی کره‌ای همواره بیشتر از مقدار این مؤلفه کرنش برای توزیع متناوب نقطه‌های کوانتومی مکعبی می‌باشد. به علاوه مشاهده می‌شود که تغییر هندسه نانوساختار سه بعدی از حالت مکعبی به کره‌ای باعث افزایش نرخ تغییرات مؤلفه کرنش در محدوده داخل نانو ساختار می‌گردد درحالی که نرخ تغییرات مؤلفه کرنش در محدوده خارجی نانوساختار تغییر چندانی نمی‌کند.

### ۴-۲-۵- توزیع متناوب نقطه‌های کوانتومی هرمی با قاعده مربع

در این بخش نیز بدون کاستن از کلیت، توزیع متناوب نقطه‌های کوانتومی هرمی شکل با قاعده مربع با دوره تناوب بی‌بعد شده 2 در هر جهت در نظر گرفته می‌شود، بطوری که قاعده مربعی هرم که در صفحه  $xy$  قرار دارد به‌صورت بی‌بعد شده ابعاد  $1 \times 1$  داشته و اندازه ارتفاع هرم که در راستای  $z$  قرار دارد برابر با 0.5 می‌باشد. با فرض اینکه مبدا مختصاتی در مرکز قاعده مربعی هرم در نظر گرفته شود، مؤلفه‌های غیر صفر کرنش ویژه در فضای فوریه به‌صورت معادله (63) بدست می‌آیند:

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon}_{11}^*(\xi) = \bar{\varepsilon}_{22}^*(\xi) = \bar{\varepsilon}_{33}^*(\xi) &= -\frac{\sin\left(\frac{1}{2}(\xi_1 + \xi_2)\right)(\xi_1 + \xi_2)}{4\xi_1\xi_2(\xi_1 + \xi_2 - \xi_3)(\xi_1 + \xi_2 + \xi_3)} \\ &+ \frac{i \cos\left(\frac{1}{2}(\xi_1 + \xi_2)\right)\xi_3}{4\xi_1\xi_2(\xi_1 + \xi_2 - \xi_3)(\xi_1 + \xi_2 + \xi_3)} + \frac{\sin\left(\frac{1}{2}(\xi_1 - \xi_2)\right)(\xi_1 - \xi_2)}{4\xi_1\xi_2(\xi_1^2 - 2\xi_1\xi_2 + \xi_2^2 - \xi_3^2)} \\ &+ \frac{i \cos\left(\frac{1}{2}(\xi_1 - \xi_2)\right)\xi_3}{4\xi_1\xi_2(\xi_1^2 - 2\xi_1\xi_2 + \xi_2^2 - \xi_3^2)} \\ &- \frac{4ie^{-\frac{i\xi_3}{2}}\xi_1\xi_2\xi_3}{4\xi_1\xi_2(\xi_1^4 + (\xi_2^2 - \xi_3^2)^2 - 2\xi_1^2(\xi_2^2 + \xi_3^2))} \end{aligned} \quad (63)$$

با قرار دادن این رابطه در معادلات (22) و (23) و استفاده از روابط (46) تا (56) و همچنین مشخصات رفتاری مکانیکی و الکتریکی محیط پیزوالکتریک همسانگرد جانبی آلومینیوم نیتراید که در جدول 1 ارائه شده است، میدان جابجایی مکانیکی و پتانسیل الکتریکی بدست آمده و در نتیجه با استفاده از معادلات (3) و (4) میدان کرنش و میدان الکتریکی ایجاد شده در محیط پیزوالکتریک نیز تعیین می‌شود. همان‌گونه که در شکل 2 نشان داده شده است، تغییرات مؤلفه کرنش  $\varepsilon_{11}$  روی محور  $x$  (به ازای  $y = z = 0$ ) برای توزیع متناوب نقطه‌های کوانتومی هرمی شکل با قاعده مربعی در یک تناوب به گونه‌ای است که اندازه این مؤلفه میدان کرنش در محدوده خارجی نانوساختار همواره کمتر از اندازه همین مؤلفه کرنش در اثر حضور نقطه‌های کوانتومی کره‌ای و مکعبی می‌باشد. این در حالیست که در محدوده داخلی نانوساختار هرمی با قاعده مربعی، مقدار مؤلفه کرنش  $\varepsilon_{11}$  همواره بیشتر از مقدار همین مؤلفه کرنش در اثر حضور نقطه‌های کوانتومی مکعبی بوده و در عین حال، در نزدیکی مرز نانوساختار با محیط پیزوالکتریک اطراف آن، مقدار این مؤلفه کرنش بیشتر از مقدار آن در اثر حضور نقطه‌های کوانتومی کره‌ای نیز می‌باشد. در شکل 2 دیده می‌شود که مقدار مؤلفه کرنش  $\varepsilon_{11}$  برای توزیع متناوب نقطه‌های کوانتومی هرمی با قاعده مربعی، در دو نقطه در محدوده داخلی نانوساختار (تقریباً در  $x = \pm 0.3$ )، تقریباً برابر با مقدار این مؤلفه کرنش در اثر وجود نانوساختارهای کره‌ای می‌باشد و در محدوده بین این دو نقطه، مقدار مؤلفه کرنش برای توزیع متناوب نانوساختارهای هرمی با قاعده مربعی تقریباً ثابت خواهد بود. این در حالیست که در محدوده بین این دو نقطه ( $x = \pm 0.3$ ) و مرز نانوساختار هرمی مربع القاعده با محیط اطراف، نرخ تغییرات مؤلفه کرنش  $\varepsilon_{11}$  بیش از نرخ تغییرات آن در اثر حضور وجود نانوساختارهای مکعبی یا کره‌ای می‌باشد.



میدان‌های الکترواستاتیک در محیط ماده خواهد داشت و از آنجا که نانوساختارهای کوانتومی می‌توانند هندسه‌های متفاوتی داشته باشند و از سوی دیگر توزیع میدان‌های الکترواستاتیک در این مواد از اهمیت فراوانی برخوردار است، لازم است برای تعیین رفتار دقیق این نانوساختارها ابتدا هندسه آن‌ها به کمک روش‌های عکس‌برداری ویژه از جمله میکروسکوپ الکترونی عبوری و یا میکروسکوپ الکترونی روبشی مشخص شده و سپس با استفاده از روش‌های تحلیلی دقیق، میدان‌های الکترومکانیکی ایجاد شده در محیط بواسطه حضور نانوساختارها تعیین شود. همان‌طور که در تحلیل نتایج بدست آمده در اثر توزیع متناوب سیم‌ها و نقطه‌های کوانتومی شرح داده شد هندسه نانوساختار می‌تواند تا 5 برابر مقدار مؤلفه کرنش ایجاد شده در محیط را تغییر دهد. همچنین در بخش 4-1 نشان داده شد که در حالت توزیع متناوب سیم‌های کوانتومی در محیط پیزوالکتریک هیچگونه پتانسیل و میدان الکتریکی در محیط القا نخواهد شد.

#### ۷- مراجع

- [1] D. Bimberg, M. Grundmann, N. N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures*, pp. 1-197, New York: Wiley, 1999.
- [2] B. Gil, *Low-dimensional Nitride Semiconductors*, pp. 151-190, New York: Oxford, 2002.
- [3] G. Iadonisi, G. Cantele, M. L. Chiofalo, *Introduction to Solid State Physics and Crystalline Nanostructures*, pp. 1-96, Verlag Italia: Springer, 2014.
- [4] X. Peng, L. Manna, W. Yang, J. Wickham, E. Scher, A. Kadavanich, A. P. Alivisatos, Shape control of CdSe nanocrystals, *Nature*, Vol. 404, No. 6773, pp. 59-61, 2000.
- [5] J. Stangl, V. Holy, G. Bauer, Structural properties of self-organized semiconductor nanostructures, *Review of Modern Physics*, Vol. 76, No. 3, pp. 725-783, 2004.
- [6] X. F. Yang, X. S. Chen, W. Lu, Y. Fu, Effects of shape and strain distribution of quantum dots on optical transition in the quantum dot infrared photodetectors, *Nanoscale Research Letters*, Vol. 3, No. 12, pp. 534-539, 2008.
- [7] M. Grundmann, O. Stier, D. Bimberg, InAs/GaAs pyramidal quantum dots: Strain distribution, optical phonons, and electronic structure, *Physical Review B*, Vol. 52, No. 16, pp. 11969-11982, 1995.
- [8] B. Jogai, Three-dimensional strain field calculations in multiple InN/AlN wurtzite quantum dots, *Journal of Applied Physics*, Vol. 90, No. 2, pp. 699-704, 2001.
- [9] J. H. Davies, Elastic and piezoelectric fields around a buried quantum dot: a simple picture, *Journal of Applied Physics*, Vol. 84, No. 3, pp. 1358-1365, 1998.
- [10] H. M. Shodja, E. Rashidinejad, Interacting functionally graded quantum wires/quantum dots with arbitrary shapes and general anisotropy within a distinct piezoelectric matrix, *Journal of the Mechanical Behavior of Materials*, Vol. 23, No. 1-2, pp. 1-14, 2014.
- [11] T. Mura, *Micromechanics of Defects in Solids*, pp. 1-37, Dordrecht: Martinus Nijhoff, 1987.

نقطه‌های کوانتومی مکعبی، کروی و هرمی با قاعده مربعی مقایسه شده است. بر اساس نتایج بدست آمده مشاهده می‌شود که مقدار مؤلفه کرنش  $\epsilon_{11}$  با در نظر گرفتن علامت آن، برای نانوساختار هرمی با قاعده شش ضلعی همواره بیشتر از این مؤلفه کرنش برای نانوساختار هرمی با قاعده مربعی خواهد بود. همچنین با مقایسه دقیق مؤلفه کرنش به ازای نانوساختارها با هندسه‌های متفاوت، می‌توان دریافت که نرخ تغییرات و همچنین مقدار مؤلفه کرنش به شدت تحت تأثیر هندسه نانوساختار بوده و با تغییر هندسه نانوساختار، مقدار مؤلفه کرنش تا 5 برابر می‌تواند تغییر کند. به علاوه نکته جالب توجه این است که بیشترین تغییرات در مؤلفه کرنش به واسطه تغییر در هندسه نانوساختار، در محدوده مرز نانوساختار با محیط اطراف و همچنین بیرون از مرز نانوساختار رخ می‌دهد. از سوی دیگر مقدار مؤلفه کرنش در محدوده مرکزی نانوساختارهای کروی و هرمی با قاعده مربعی یا شش ضلعی (در بازه  $|x| \leq \pm 0.3$ ) تقریباً برابر خواهد بود. همچنین نرخ تغییرات مؤلفه کرنش در محدوده مرز نقطه‌های کوانتومی چه در داخل و چه در خارج محدوده نقطه‌های کوانتومی، برای نانوساختارها با هندسه هرم با قاعده مربع یا شش ضلعی بطور قابل توجهی بیش از این نرخ تغییرات مربوط به نقطه‌های کوانتومی مکعبی و کروی می‌باشد. از مقایسه توزیع کرنش ناشی از نقطه‌های کوانتومی با این چهار هندسه مختلف، مشاهده می‌شود که در محدوده داخلی نانوساختارها، مؤلفه کرنش  $\epsilon_{11}$  ایجاد شده در اثر نانوساختارهای هرمی با قاعده مربعی یا شش ضلعی دارای سه نقطه اکسترمم نسبی یکی در مرکز نانوساختار و دوتای دیگر در دو سمت مرکز آن می‌باشد در حالی که این مؤلفه کرنش به ازای توزیع نانوساختارهای مکعبی و کروی دارای تنها یک مینیمم نسبی در مرکز نانوساختار خواهد بود.

#### ۶- نتیجه‌گیری

در این مقاله روشی تحلیلی برای دستیابی به میدان‌های الکترواستاتیک ایجاد شده در اثر توزیع متناوب نانوساختارهای کوانتومی دوبعدی و سه‌بعدی در محیط‌های پیزوالکتریک همسانگرد جانبی ارائه شده است و با استفاده از این روش، میدان‌های الکترواستاتیک در محیط همسانگرد جانبی آلومینیوم نیتراید در اثر توزیع متناوب سیم‌های کوانتومی و نقطه‌های کوانتومی با هندسه‌های متداول مورد بررسی و مقایسه قرار گرفته‌اند. همان‌طور که در در این مقاله نشان داده شده است هندسه نانوساختار تأثیر چشمگیری بر توزیع