

## GaAs/AlAs

( )

mtalbian@ihu.ac.ir :

(دریافت مقاله: ۱۳۹۰/۵/۲؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۱/۱/۳۰)

GaAs/AlAs

بعدی و حل ساده معادله شرودینگر با متغیر شعاعی می‌شود. تابع موج ناخالصی‌ها در نقاط کوانتومی به شدت وابسته به سد پتانسیل است. با کاهش شعاع نقطه کوانتومی، محدودیت فضایی حامل‌ها بسیار چشمگیر می‌شود. به خصوص در نقاط کوانتومی با سد پتانسیل بی‌نهایت، انرژی جنبشی الکترون افزایش می‌یابد و این باعث افزایش پتانسیل فعال بین الکترون و اتم ناخالصی می‌شود، بنابراین انرژی کل ممکن است در شعاع خاص از منفی به مثبت تغییر کند. علاوه بر این، به خوبی می‌دانیم که کاهش ابعاد، قدرت مؤثر اندرکش کولن را افزایش می‌دهد. از این رو تغییر در انرژی بستگی ممکن است به عنوان عاملی برای تشخیص شعاع مؤثر نقطه کوانتومی کروی به کار گرفته شود. از سوی دیگر، می‌توان با استفاده از اختلال‌های خارجی مانند میدان الکتریکی ثابت بینش خوبی از این مسئله به

نقاط کوانتومی نانو ساختارهای صفر بعدی می‌باشند که اخیراً تحقیقات بر روی ساختارهای آنها به علت کاربرد گسترده‌شان در صنعت، پزشکی، و ... شدت گرفته است. مطالعه تأثیرات میدان الکتریکی بر روی نقاط کوانتومی نیز در راستای همین کاربردهای گسترده و با توجه به استفاده آنها در دستگاه‌های الکترونیکی و اپتیکی انگیزه وافر برای به کارگیری آنها در این ابزارها به وجود آورده است. در تحقیقات، نقاط کوانتومی در شکل‌های مختلف در نظر گرفته شده‌اند [۱-۴].

در نقاط کوانتومی مکعبی شکل متغیرهای فضایی به یکدیگر وابسته‌اند به همین علت محاسبات برای شبیه‌سازی در گام‌های بعدی دشوارتر می‌شود. از این رو در نظر گرفتن پتانسیل بی‌نهایت کروی شکل به دلیل تقارن کروی منجر به مسئله یک

$$R_0 = \begin{cases} A_0 J_0(Kr) & r < a \\ 0 & r > a \end{cases}, \quad (4)$$

$$A_0 = \frac{1}{\sqrt{\int_0^a J_0(Kr) J_0(K'r) r^2 dr}}$$

$$E_{\lambda_{00}} = R^* \left( a^* \frac{\pi}{a} \right)^2. \quad (5)$$

با استفاده از روش اختلال تابع موج مختل شده در حضور میدان الکتریکی به شرح زیر می‌باشد:

$$\psi_n = \phi_n + \sum_{n \neq n'} \frac{\langle \phi_{n'} | H_f | \phi_n \rangle}{E_n - E_{n'}} |\phi_{n'}\rangle, \quad (6)$$

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left( 1 - \sum_{n'=\gamma}^{\infty} \frac{\gamma a^\gamma A_0^\gamma}{a^* \pi^\gamma (1-n'^\gamma)} \int_0^a J_0(K'r) J_0(Kr) r dr \right) \times \right. \\ \left. A_0 |Y_0^\gamma J_0(K'r)\rangle \pm \left( 1 - \sum_{n'=\gamma}^{\infty} \frac{\gamma a^\gamma A_0^\gamma}{a^* \pi^\gamma (1-n'^\gamma)} \int_0^a J_\gamma(K'r) J_\gamma(Kr) r dr \right) \times \right. \\ \left. A_0' |Y_\gamma^\gamma J_\gamma(K'r)\rangle \right\}.$$

انرژی حالت پایه تابع مختل شده در حضور میدان الکتریکی بدون در نظر گرفتن ناخالصی هیدروژنی از معادله زیر به دست می‌آید:

$$E_{\lambda_{00c}} = E_{\lambda_{00}} + E_c, \quad (7)$$

که در آن

$$E_c = -\gamma a^\gamma a^* R^* \int_0^a J_0(K'r) J_0(Kr) r dr. \quad (8)$$

در حالی که انرژی تابع مختل شده در حضور میدان الکتریکی بدون در نظر گرفتن ناخالصی هیدروژنی از معادله زیر به دست می‌آید:

$$E_{\lambda_{0f}} = \Delta E^{(1)} + E_{\lambda_{00}}, \quad (9)$$

که در آن  $\Delta E^{(1)}$  تغییر انرژی مرتبه اول از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\Delta E^{(1)} = \frac{\alpha R^* A_0 A_0'}{a^* \sqrt{2}} \int_0^a J_0(K'r) J_\gamma(Kr) r^\gamma dr, \quad (10)$$

که مربوط به هامیلتونی بدون ناخالصی هیدروژنی به صورت زیر می‌باشد:

$$H = -\nabla^2 + \alpha r \cos \theta + \frac{V(r)}{R^*}. \quad (11)$$

دست آورد [۵ و ۶]. برای دستیابی به تغییرات بیشتر در انرژی بستگی، انرژی بستگی بهنجار به عنوان نسبت انرژی بستگی به انرژی حالت پایه نقاط کوانتومی کروی بدون ناخالصی در نظر گرفته می‌شود.

در تقریب جرم مؤثر، هامیلتونی ناخالصی جایگزیده در مرکز نقطه کوانتومی کروی، در حضور میدان الکتریکی را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$H = \frac{p^2}{2m^*} - \frac{e^2}{\epsilon r} + e \vec{F} \cdot \vec{r} + V(r) \quad (1)$$

که در آن  $m^*$  جرم مؤثر همسانگرد الکترون،  $\epsilon$  ثابت دی‌الکتریک مؤثر ماده داخل نقطه کوانتومی،  $e$  بار الکترون و  $\vec{r}$  بردار مکان می‌باشد. نیروی اسپین-مدار باعث می‌شود ترازهای انرژی از یکدیگر جدا شده و تبهگنی آنها از میان برود. به عبارت دیگر در نظریه تک ذره‌ای دیراک تبهگنی ترازها با اثرات الکتروپدینامیک کوانتومی (جابه جایی لمب) از میان می‌رود. اما از آنجا که عناصر ماتریس اختلال در مقایسه با جداسدگی ناشی از جابه‌جایی لمب بسیار بزرگ است، بنابراین جابه‌جایی انرژی نسبت به میدان الکتریکی  $|\vec{F}|$  خطی و فرمول‌بندی نظریه اختلال تبهگن قابل اعمال است [۷].

با در نظر گرفتن پتانسیل به صورت:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < a \\ \infty & r > a \end{cases}, \quad (2)$$

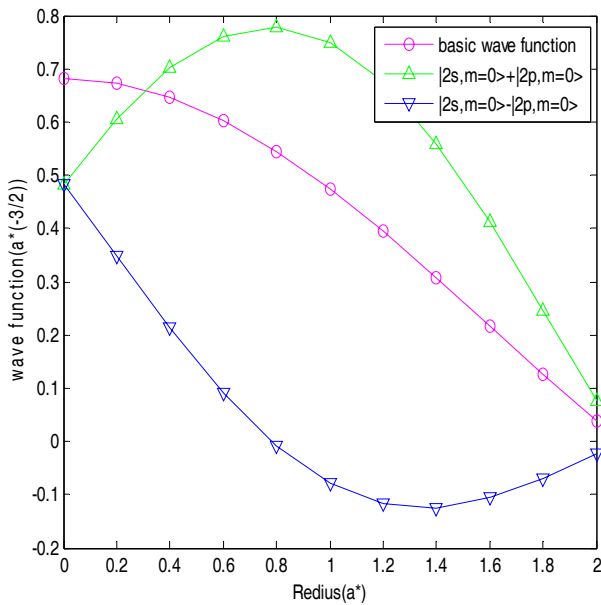
و با استفاده از  $a^* = \frac{\epsilon \hbar^2}{\mu e^2}$  به عنوان واحد طول، ثابت ریدبرگ

$$R^* = \frac{e^2}{2\epsilon a^*}$$

و به عنوان واحد انرژی و  $\alpha = \frac{ea^* F}{R^*}$  به عنوان واحد بدون بعد میدان الکتریکی، هامیلتونی به صورت زیر در می‌آید:

$$H = -\nabla^2 - \frac{\gamma}{r} + \alpha r \cos \theta + \frac{V(r)}{R^*}. \quad (3)$$

تابع موج و انرژی حالت پایه یک الکترون محدود در شعاع نقطه کوانتومی کروی غیر مختل شده، به ترتیب توسط معادلات زیر بیان می‌شود:

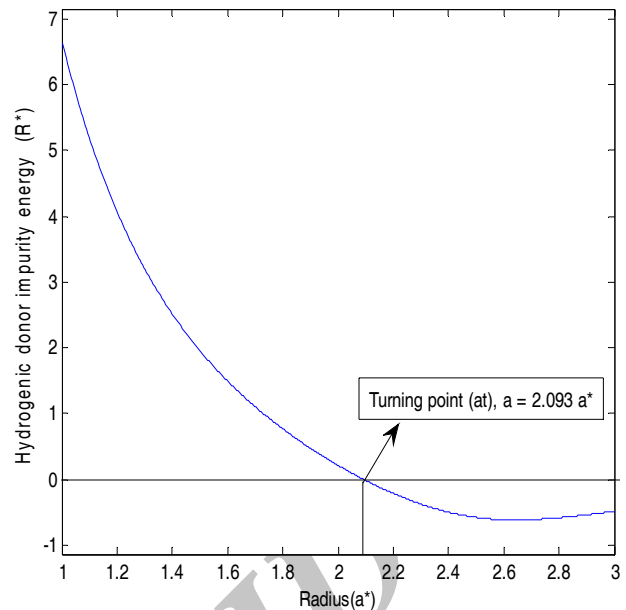


شکل ۲. توابع موج حالت پایه و مختل شده تحت تأثیر میدان الکتریکی.

محاسبات عددی،  $m^* = 0.067m_0$ ،  $\epsilon = 13.1$ ، می‌باشند که در نتیجه ثابت مؤثر ریدبرگ  $R^* = 5.31 \text{ MeV}$  و شعاع مؤثر بوهر  $103.43$  آنگستروم به دست می‌آیند.

شکل ۱ تغییرات انرژی ناخالصی هیدروژنی  $E_{n'}$  بدون حضور میدان الکتریکی را نشان می‌دهد. وقتی که شعاع بزرگتر از  $2.093a^*$  می‌شود این انرژی منفی می‌گردد. این مقدار از شعاع نقطه که انرژی از مقدار مثبت به منفی تغییر می‌کند را به عنوان نقطه تغییر اثر<sup>۱</sup> می‌شناسیم. تفاوت کوچکی در نقطه تغییر اثر نسبت به کارهای قبلی به وجود آمده است [۸=۱۰] که این تفاوت به خاطر روش متفاوتی است که ما در این کار تحقیقاتی استفاده کرده‌ایم.

شکل ۲ تابع موج حالت پایه و مختل شده با میدان الکتریکی با در نظر گرفتن اندرکنش کولمب به عنوان تابعی از شعاع نقطه کوانتومی را نشان می‌دهد. با توجه به شکل می‌بینیم که با اعمال میدان الکتریکی تابع موج مختل شده  $\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{200} + \varphi_{210})$  به دلیل اثرات میدان الکتریکی اختلالی کمی بالاتر از تابع موج حالت پایه و تابع موج مختل شده  $\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{200} - \varphi_{210})$  کمی پایین‌تر از تابع موج حالت پایه قرار



شکل ۱. انرژی ناخالصی هیدروژنی بدون حضور میدان الکتریکی.

در حالی که انرژی حالت پایه تابع مختل شده با در نظر گرفتن ناخالصی هیدروژنی در حضور میدان الکتریکی از معادله زیر پیروی می‌کند:

$$E_{n'} = \Delta E^{(1)} + E_{100c} \quad (12)$$

که در آن  $\Delta E^{(1)}$  تغییر انرژی مرتبه اول میدان الکتریکی است، و

$$\Delta E^{(1)} = \frac{\alpha R^* A_0 A_0'}{a^* \sqrt{3}} \left( 1 - \sum_{n'=2}^{\infty} \frac{\nu a^{\nu} A_0^{\nu}}{a^* \pi^{\nu} (1-n'^2)} \int_0^a J_0(K'r) J_0(Kr) r dr \right) \times \left( 1 - \sum_{n'=2}^{\infty} \frac{\nu a^{\nu} A_0^{\nu}}{a^* \pi^{\nu} (1-n'^2)} \int_0^a J_1(K'r) J_1(Kr) r dr \right) \int_0^a J_0(k'r) J_1(Kr) r^2 dr \quad (13)$$

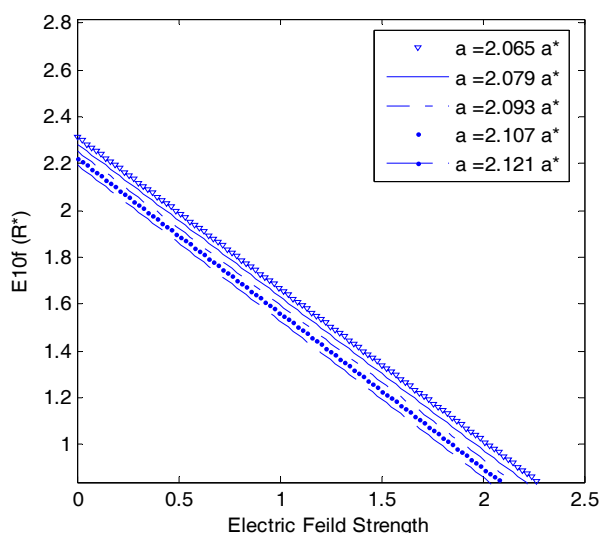
در نتیجه انرژی بستگی بهنجار به صورت زیر است:

$$NE_f = \frac{E_{100c}}{E_{n'}} - 1 \quad (14)$$

که در آن  $E_{100c}$  انرژی حالت پایه با در نظر گرفتن اندرکنش کولن می‌باشد.

در اینجا سلسله محاسبات و بررسی‌هایی را بر روی انرژی بستگی ناخالصی هیدروژنی نقطه کوانتومی کروی شکل GaAs/AlAs انجام دادیم. پارامترهای مورد استفاده در

۱. Turning point (at)

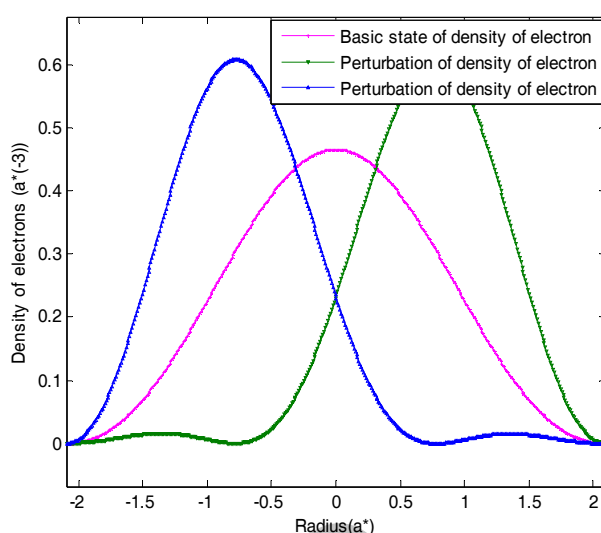


شکل ۴. سطوح انرژی حالت پایه بدون ناخالصی به عنوان تابعی از قدرت میدان الکتریکی.

با افزایش میدان الکتریکی فاصله بین سطوح انرژی تغییرات بسیار کمی می‌کند. از سوی دیگر، به عنوان یک نتیجه از میدان الکتریکی، الکترون در نزدیکی سطح نقطه کوانتومی متمرکز می‌شود (شکل ۳). این جابجایی توزیع بار به شدت بر روی انرژی  $E_{10^4}$  با هر شعاعی از نقطه کوانتومی اثر می‌گذارد و در نتیجه با افزایش میدان الکتریکی انرژی  $E_{10^4}$  به سمت صفر میل می‌کند.

علاوه بر این، ما در شکل ۵ و ۶، برای مقادیر مختلفی از شعاع نقطه کوانتومی نشان دادیم که انرژی‌های ناخالصی  $E_{10^4}$  و  $NE_f$  تابعی از قدرت میدان الکتریکی، هستند. مشاهدات نشان می‌دهد که برای هر مقدار از شعاع نقطه کوانتومی، انرژی ناخالصی  $E_{10^4}$  با افزایش قدرت میدان الکتریکی کاهش یابد، و انرژی  $NE_f$  با افزایش قدرت میدان الکتریکی افزایش یابد، برای  $\alpha < \alpha_0$  انرژی بستگی بهنجار مثبت و در مجاورت  $\alpha_0$ ، این انرژی به طور چشمگیری بزرگ می‌شود. در این حالت، فاصله بین سطوح انرژی با افزایش میدان افزایش می‌یابد.

انتخاب مناسب شعاع نقطه و میدان الکتریکی تا حد زیادی می‌تواند انرژی بستگی بهنجار  $NE_f$  را تغییر داده که این اثر

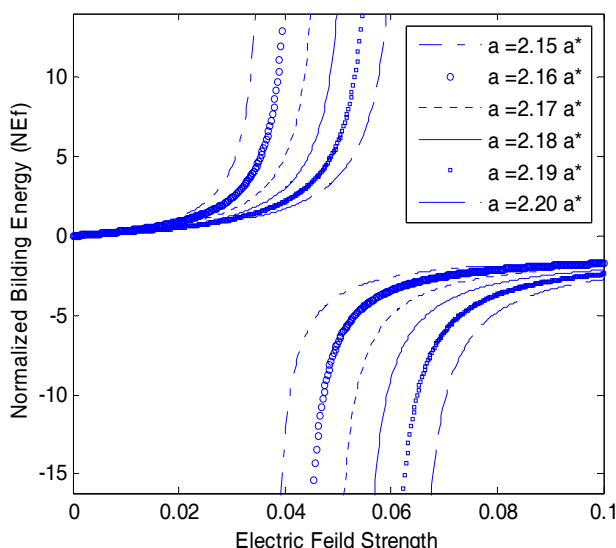


شکل ۳. احتمال حضور الکترون در درون نقطه کوانتومی به عنوان تابعی از شعاع نقطه.

می‌گیرد. همانطور که از شکل مشاهده می‌شود، توابع موج در هر سه حالت در مرکز نقطه کوانتومی به دلیل شکل پتانسیل در نظر گرفته شده به سمت صفر میل می‌کنند.

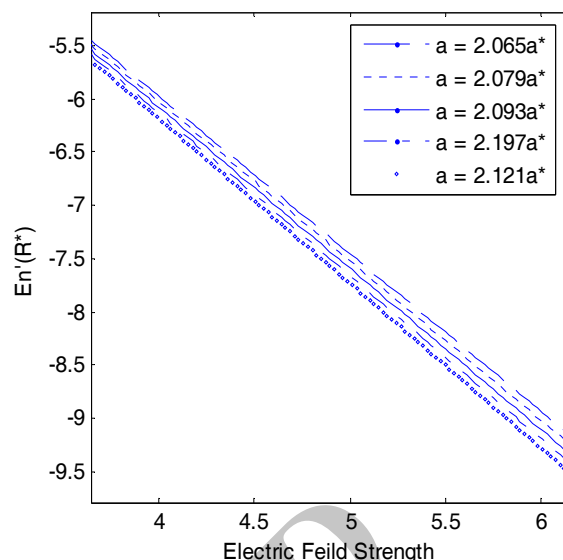
شکل ۳ احتمال حضور الکترون در درون نقطه کوانتومی به عنوان تابعی از شعاع نقطه در حالت پایه و حالت‌های مختل شده توسط میدان الکتریکی را نشان می‌دهد. نمودار وسط احتمال حضور الکترون در حالت پایه، نموداری که قله آن در سمت چپ نمودار حالت پایه قرار دارد احتمال حضور الکترون در حالت  $\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{200} - \varphi_{100})$  و نموداری که قله آن در سمت راست نمودار حالت پایه قرار دارد احتمال حضور الکترون در حالت  $\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{200} + \varphi_{100})$  را نشان می‌دهد. همانطور که در شکل مشاهده می‌شود احتمال حضور الکترون در حالت پایه در مرکز نقطه کوانتومی بیشترین مقدار و برای هر سه حالت در مرزها به سمت صفر میل می‌کند.

در شکل ۴ انرژی حالت پایه  $E_{10^4}$ ، بدون ناخالصی، به عنوان تابعی از شدت میدان الکتریکی  $\alpha$  برای پنج مقدار مختلف از شعاع نقطه کوانتومی رسم شده است. از این ارقام ما به راحتی می‌توانیم ببینیم که کاهش انرژی  $E_{10^4}$  با افزایش میدان الکتریکی یا ازدیاد اندازه نقطه کوانتومی حاصل می‌گردد.



شکل ۶. سطوح انرژی بستگی بهنجار به عنوان تابعی از شدت میدان الکتریکی در شش شعاع مختلف از نقطه کوانتومی

تحقیقات استفاده از میدان الکتریکی کوچکتر به منظور رسیدن به نتایج مطلوبتر می‌باشد. از طرفی استفاده از نتایج موج واقعی در نظریه اختلال باعث شده است نتایج ما نسبت به مقالاتی که از نتایج موج حدسی در نظریه وردشی استفاده کرده‌اند مطلوبتر باشد [۱۱].



شکل ۵. سطوح انرژی ناخالصی دهنده هیدروژنی به عنوان تابعی از قدرت میدان الکتریکی.

می‌تواند برای محسوس کردن تغییرات کوچک شعاع نقطه مورد استفاده قرار گیرد. به عبارت دیگر، در مجاورت شدت میدان الکتریکی  $\alpha$  تغییرات چشمگیری در انرژی  $NE_f$  به وجود می‌آید که ممکن است به عنوان نتیجه روشنی برای تنوع ابعاد مؤثر نقطه کوانتومی باشد. تفاوت کار ما با سایر

7. J J Sakurai, "Modern Quantum Mechanics", Pearson Education (1994).
8. C Bose, and C K Sarkar, *Czech. J. Phys.* **52** (2002) 877.
9. A J Peter, *Physica E* **28** (2005) 225.
10. A K Manaselyan, *Physica E* **28** (2005) 462.
11. C Dane, H Akbas, S Minez, and A Guleroglu, *Physica E* **42** (2010) 1901.

1. F J Ribeiro, and A Latgé, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 4913.
2. A Montes, C A Duque, and N Porrás-Montenegro, *Phys. Stat. Sol. (b)* **220** (2000) 181.
3. H Akbas, C Dane, K Kasapoglu, and N Talip, *Physica E* **40** (2008) 627.
4. H N Spector, and J Lee, *Physica B* **393** (2007) 94.
5. C Bose, *Indian J. Phys.* **71A** (1997) 293.
6. E C Niculescu, *Mod. Phys. Lett. B* **15** (2001) 545.