

## امکان جذب تراهرتز توسط چاه پتانسیل کوانتومی دوگانه و پایداری آن

مهدی حسینی

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شیراز، شیراز

پست الکترونیکی: hosseini@sutech.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۴/۲/۲۸؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۴/۳/۶)

### چکیده

در این مقاله خواص اپتیکی چاه پتانسیل کوانتومی دوگانه با پارامترهای مشخص با هدف کار در ناحیه تراهرتز بررسی شده است. معادله شرودینگر حل و با استفاده از توابع موج به دست آمده و کمک گرفتن از روش اختلالی ماتریس چگالی ضریب جذب و ضریب شکست تا مرتبه اول محاسبه و بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که به ازای انتخاب مناسب ضرایب، بیشینه جذب می‌تواند در ناحیه تراهرتز قرار گیرد که جهت استفاده در تراشه‌های تراهرتز مناسب است. علاوه بر این تأثیر اختلال‌های کوچک در پتانسیل بر ضریب جذب و بسامد کاری و در نتیجه پایداری دستگاه مطالعه شده است. نتایج این محاسبات نشان می‌دهد که برای افت و خیزهای کوچک پتانسیل بیشینه جذب در ناحیه تراهرتز می‌ماند اما با زیاد شدن اختلال، این بیشینه به تدریج افزایش می‌یابد و به ناحیه فرسوخ نزدیک می‌شود.

واژه‌های کلیدی: چاه کوانتومی، تراهرتز، خواص اپتیکی

### ۱. مقدمه

میان تمامی ساختارهای کوانتومی چاه‌های کوانتومی به دلیل امکان‌پذیر بودن محاسبات با هزینه محاسباتی کم، و نزدیکی آنها به نمونه‌های واقعی بیشتر مورد توجه بوده و خواص اپتیکی آنها مورد بررسی واقع شده است [۴ و ۵، ۹-۱۱]. از ویژگی‌های مناسب چاه‌های کوانتومی امکان شبیه‌سازی بسیاری از تراشه‌های نیمه‌رساناها است علاوه بر این که می‌توان آنها را به شکل مناسبی به کمک نظریه و محاسبات عددی بررسی کرد. با توجه به ترازهای انرژی مختلف در یک چاه کوانتومی امکان جذب امواج در نوار بسامدی معین که اختلاف ترازهای چاه مشخص می‌کنند وجود دارد. اختلاف ترازهای انرژی در یک چاه پتانسیل معمولی در حدود چند دهم الکترون ولت است که

در سال‌های اخیر ساختارهای کوانتومی و خواص آنها مورد توجه بسیاری بوده است [۱-۵]. با رشد فن‌آوری‌های پیشرفته ساخت نانو مواد مانند رشد هم‌بافته پرتوی مولکولی<sup>۱</sup>، تبخیر لیرزی<sup>۲</sup>، کندوپاش<sup>۳</sup>، دستگاه‌های روبشی<sup>۴</sup> و غیره، امکان ساخت تراشه‌های کوانتومی با کنترل دقیق فراهم آمده است [۶-۸]. با دستکاری جزئیات مواد نیمه‌رسانا امکان تغییر و مهندسی خواص اپتیکی آنها برای کاربردهای دلخواه ممکن می‌شود. در

۱. Molecular Beam Epitaxy (MBE)
۲. Laser ablation
۳. Sputtering
۴. Etching devices

زیر رسید: [۱۷]

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_{n=1}^{\infty} \rho^{(n)} \Rightarrow \left( \frac{\partial \rho^{(n+1)}}{\partial t} \right) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left( \left[ H_0, \rho^{(n+1)} \right] + \left[ -qx E, \rho^{(n)} \right] \right) \\ &\quad - \frac{1}{\tau} \left( \Gamma \rho^{(n+1)} + \rho^{(n+1)} \Gamma \right). \end{aligned} \quad (2)$$

علاوه بر این قطبش الکتریکی را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$P(t) = \varepsilon_0 \tilde{E} \left( \chi(\omega) e^{-i\omega t} + \chi(-\omega) e^{i\omega t} \right) = \frac{1}{V} \text{Tr}(qx\rho). \quad (3)$$

با ضرب عبارت (۲) در ویژه‌حالت‌های  $H_0$  و با توجه به تعریف عملگر چگالی می‌توان به عبارت زیر برای درایه‌های عملگر چگالی در مرتبه اول رسید:

$$\rho_{ij}^{(1)}(\omega) = \frac{\langle \psi_i | qx | \psi_j \rangle}{\hbar\omega - E_{ij} + i\hbar\Gamma_{ij}} \left( \rho_{jj}^{(0)} - \rho_{ii}^{(0)} \right) \quad (4)$$

که در آن  $i$  و  $j$  اندیس‌های  $n$ ام و  $m$ ام عملگر مربوطه،  $E_{ij} = E_j - E_i$ ،  $E_{ij}$  ویژه انرژی و  $\psi_{ij}$  ویژه موج‌های  $n$ ام و  $m$ ام هامیلتونی  $H_0$  و  $\Gamma_{ij}$  درایه‌های عملگر میرایی هستند. با تکرار عمل فوق مراتب بالاتر عملگر چگالی نیز قابل محاسبه‌اند، که در آنها علاوه بر خواص دستگاه، شدت میدان نیز وجود دارد که به جملات غیرخطی مشهورند. در این محاسبات به علت کوچکی میدان از جملات بالاتر صرف نظر می‌کنیم چون معمولاً در کاربردهای حسگری شدت‌های کم میدان مورد نظر می‌باشند. همچنین با توجه به عبارت (۳) و (۴) می‌توان پذیرفتاری مغناطیسی را در مرتبه اول به صورت زیر محاسبه کرد:

$$\chi^{(1)}(\omega) = \frac{q}{\varepsilon_0 V} \frac{\left| \langle \psi_i | x | \psi_j \rangle \right|^2}{\hbar\omega - E_{ij} + i\hbar\Gamma_{ij}}. \quad (5)$$

با داشتن این رابطه و استفاده از روابط ضریب جذب و شکست بر حسب پذیرفتاری که به شکل زیر می‌باشند می‌توان به عبارتی برای آن دو کمیت رسید:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta n(\omega)}{n} &= \text{Re} \left( \frac{\chi}{\varepsilon_0 n} \right), \quad \alpha(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon_R}} \text{Im}(\varepsilon_0 \chi) \Rightarrow \\ \frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n} &= \frac{1}{\varepsilon_0 n} \frac{\left| \langle \psi_1 | x | \psi_2 \rangle \right|^2 \sigma (\hbar\omega - E_{12})}{(\hbar\omega - E_{12})^2 + (\Gamma_{12})^2} \\ \alpha^{(1)}(\omega) &= \omega \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon_R}} \frac{\left| \langle \psi_1 | x | \psi_2 \rangle \right|^2 \sigma \hbar\Gamma_{12}}{(\hbar\omega - E_{12})^2 + (\Gamma_{12})^2}, \quad \sigma = \frac{q}{V}. \end{aligned} \quad (6)$$

معادل طول موج‌های چند مایکرون هستند که در ناحیه فرسوخ قرار می‌گیرند که مورد بررسی‌های بسیاری بوده است [۴، ۵، ۹-۱۱].

از طرف دیگر محدوده تراهرتز به علت کاربردهای مختلف بسیار زیاد از یک سو و عدم وجود تراشه‌های مناسب با کارایی بالا از سوی دیگر در سال‌های اخیر به شدت مورد تحقیق و بررسی دانشمندان بوده است [۱۲-۱۵]. برای محدوده تراهرتز تعاریف مختلفی در حیطه‌های متفاوت علمی وجود دارد اما به طور معمول به محدوده بین ۰٫۱ تا ۱۰ تراهرتز گفته می‌شود. بسامدهای چند ده تراهرتز و بالاتر در محدوده فرسوخ قرار می‌گیرند و اگرچه دارای کاربردهای بسیاری هستند، اما گزینه‌های مناسبی برای کار در این محدوده وجود دارد، از جمله چاه‌های کوانتومی و نیمه هادی‌ها [۱۶].

در این مقاله خواص چاه کوانتومی دوگانه تحت امواج الکترومغناطیسی مورد بررسی قرار گرفته و ضرایب جذب و شکست آن برای آن محاسبه شده است. در این مقاله امکان قرار گرفتن بیشینه جذب در ناحیه تراهرتز مطالعه شده است. به علت حساسیت ناحیه کار (ناحیه بیشینه جذب) به شکل پتانسیل، تغییرات این ناحیه با اعمال تغییرات شکل پتانسیل به صورت نوفه محاسبه و بررسی شده است.

## ۲. جزئیات محاسبه

چاه کوانتومی تحت میدان الکترومغناطیسی با معادله حرکت زیر قابل توصیف است [۱۷].

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left[ \frac{p^2}{2m^*} + V(x) - qx E, \rho \right] - \frac{1}{2} (\Gamma \rho + \rho \Gamma), \quad (1)$$

که در آن  $\rho$  عملگر چگالی،  $p$  عملگر تکانه،  $m^*$  جرم مؤثر الکترون،  $V$  پتانسیل،  $x$  عملگر مکان،  $q$  بار الکتریکی،  $E$  میدان الکتریکی است که وابستگی زمانی آن به صورت  $\exp(i\omega t)$  در نظر گرفته شده و  $\Gamma$  شکل عملگری میرایی است که در نوشتار ماتریسی معکوس ماتریس زمان واهلش<sup>۱</sup> است. با توسعه بسط اختلالی برای ماتریس چگالی می‌توان به رابطه برگشتی به شکل

۱. Relaxation time

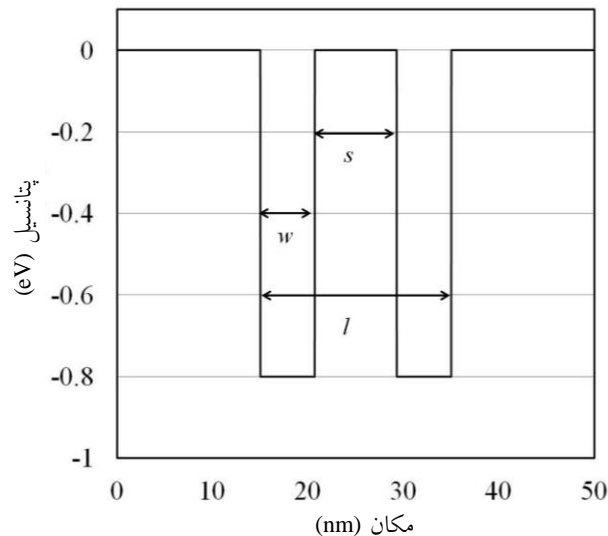
( $10^{20}$  الکترون در سانتی متر مکعب). قابل ذکر است که این مقادیر بر روی بسامد بیشینه تأثیری ندارند و تنها شکل پالس جذب را تغییر می دهند و تنها عامل مؤثر در بسامد بیشینه شکل چاه پتانسیل است.

نمودارهای ضریب جذب و تغییرات ضریب شکست برای طول های مختلف برای چاه دوگانه با نسبت  $r=1/5$  در شکل های ۲ و ۳ آورده شده است.

همان طور که در شکل شماره ۲ دیده می شود برای چاه های با طول حدود  $20$  نانومتر بیشینه جذب در محدوده چند تراهرتز قرار می گیرد. با کاهش طول چاه بیشینه جذب به تدریج افزایش می یابد.

این اتفاق به دلیل آن است که با کمتر شدن فاصله بین دو چاه مستطیلی تقارن مسئله کمتر شده و فاصله بین دو تراز اول افزایش می یابد. واضح است که در حالتی که فاصله این دو بی نهایت بزرگ باشد این دو عملاً مستقل از هم می باشند و از نظریه محض مشخص است که دو تراز انرژی یکسان با انرژی دقیقاً برابر در هر یک از آنها می تواند تشکیل شود. با نزدیک شدن این دو به هم و وجود اثرات برهم کنشی این تبهگنی شکسته شده و هر چه فاصله دو چاه مستطیلی تشکیل دهنده چاه کوانتومی دوگانه نزدیکتر می شود فاصله دو تراز و البته شکل توابع موج دارای تفاوت بیشتری می شوند. در شکل ۳ تغییرات ضریب شکست بر حسب بسامد برای طول های مختلف رسم شده است. همان طور که دیده می شود برای طول های بزرگتر تغییرات ضریب شکست بیشتر (تا حدود ۵ درصد) و بسامد نیز در محدوده زیر  $3$  تراهرتز است که امکان استفاده به عنوان تراشه تراهرتز مبتنی بر تغییرات ضریب شکست را داراست.

در شکل ۴ (الف) نمودار میزان قله جذب بر حسب ضخامت برای نسبت فاصله دو قسمت به ضخامت هر قسمت  $r=1$  و  $r=1/5$  بر حسب طول کل چاه آورده شده است. همان طور که دیده می شود با افزایش طول این میزان کاهش می یابد بنابراین طول های بسیار بلند نیز دارای معایبی می باشند. در شکل ۴ (ب) نمودار بسامدی که در آن بیشینه جذب اتفاق می افتد برای دو نسبت ۱ و  $1/5$  بر حسب طول کل چاه آورده شده



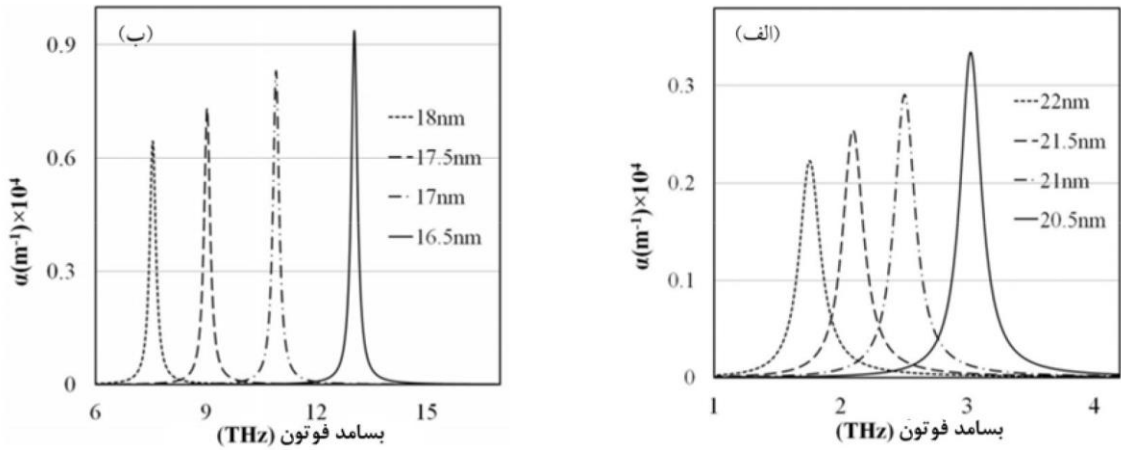
شکل ۱. چاه پتانسیل دوگانه ساده با نسبت فضای بین چاه به طول هر قسمت  $r=s/w=1,5$

در رابطه (۶) فرض شده که الکترون تنها دو نوار پایین انرژی از یکی به دیگری گذار کند. در روابط فوق مقادیر چشمداشتی با حل معادله شرودینگر به روش عددی برای چاه دوگانه ساده و همچنین در وجود نوفه های مختلف به دست آمده اند.

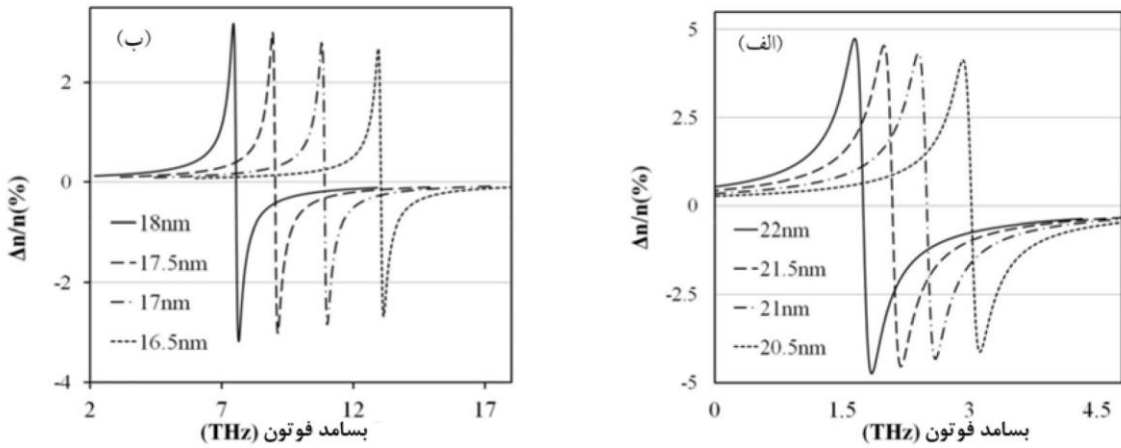
### ۳. نتایج و بحث

برای انجام محاسبات چاه پتانسیل دوگانه ساده به صورت شکل ۱ فرض شده است. مقادیر در نظر گرفته شده برای چاه مقادیر نوعی هستند. در اینجا محاسبات برای مقادیر مختلف طول چاه انجام شده و تأثیر آن بر روی خواص اپتیکی بررسی شده است اما ولتاژ چاه در طول محاسبات ثابت و برابر با  $0,8$  الکترون ولت فرض شده است. در شکل ۱ چاه مورد نظر آورده شده است. در این شکل  $l$  طول کل چاه،  $w$  طول یکی از چاه ها،  $s$  طول فضای بین هر قسمت چاه،  $r$  نسبت دو کمیت اخیر ( $w/s$ ) است. ضریب جذب و تغییرات ضریب شکست برای این چاه به ازای طول های مختلف از  $12$  تا  $22$  نانومتر محاسبه شده است.

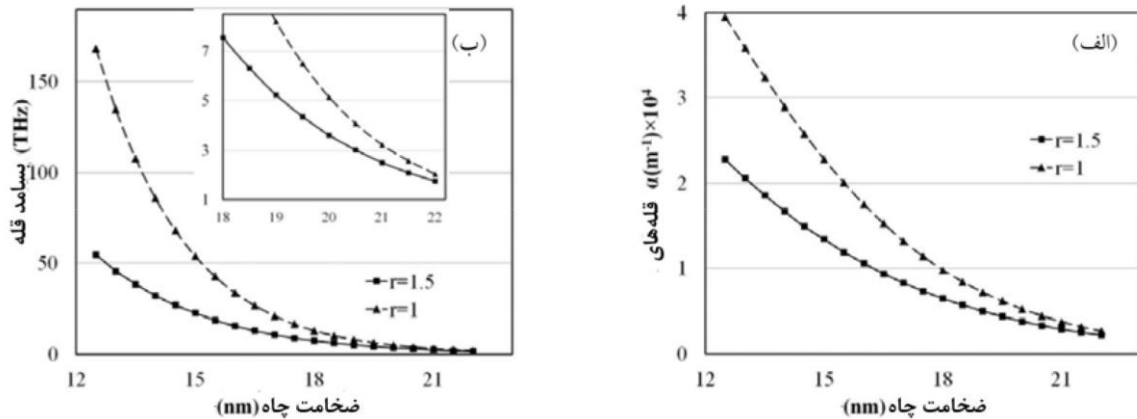
در این محاسبات مقادیر عددی پارامترهای مورد نیاز به این صورت در نظر گرفته شده است: زمان واهلش  $10$  پیکوثانیه، ضریب شکست ۳، جرم مؤثر الکترون  $0,02$  جرم الکترون تراوایی نسبی  $20$  و چگالی بار  $16$  کولن بر سانتی متر مکعب



شکل ۲. نمودار ضریب جذب بر حسب بسامد برای ضخامت‌های مختلف چاه کوانتومی.



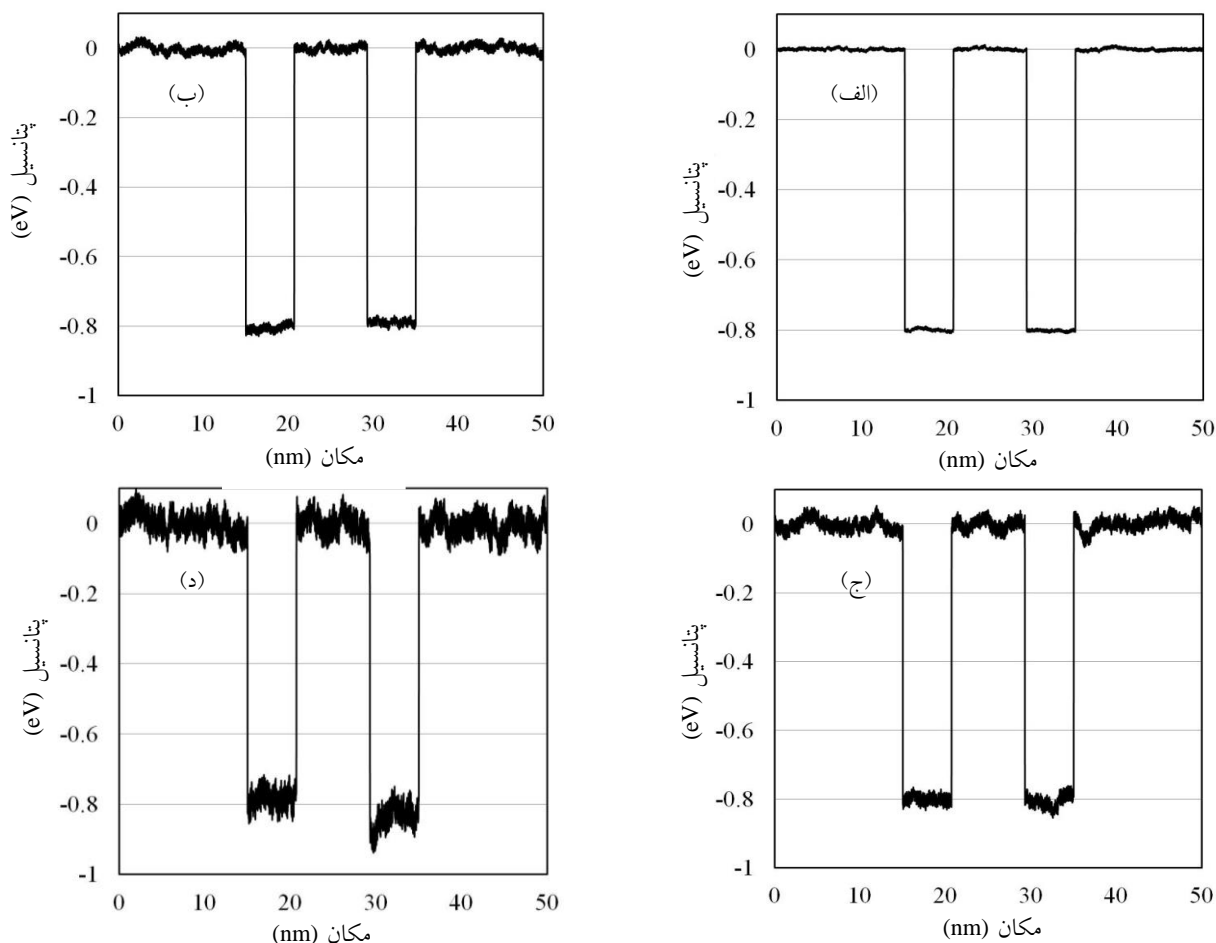
شکل ۳. نمودار تغییرات ضریب شکست بر حسب بسامد برای ضخامت‌های مختلف چاه کوانتومی.



شکل ۴. نمودار (الف) میزان قله ضریب جذب و (ب) بسامد مربوطه برای قله ضریب جذب بر حسب ضخامت چاه کوانتومی برای دو حالت  $r = 1$  و  $r = 1.5$ .

تراهترت و برای  $r = 1.5$  برای طول‌های کمتر از ۱۵ نانومتر این اتفاق رخ می‌دهد، بنابراین برای استفاده از این تراشه در محدوده تراهترت

است. همان‌طور که در این شکل دیده می‌شود برای  $r = 1$  طول‌های کمتر از ۱۷ نانومتر دارای بسامد بیشینه جذب بالاتر از ۲۰



شکل ۵. نمودارهای چاه دوگانه در حضور پتانسیل اتفاقی با طول همبستگی ۱ نانومتر برای دامنه‌های (الف) ۰٫۰۱، (ب) ۰٫۰۳، (ج) ۰٫۰۵ و (د) ۰٫۱ الکترون ولت، تأثیر طول همبستگی در نمودارها واضح است.

مختلف در نظر گرفته شده است. دلیل عدم استفاده از طول همبستگی صفر (نوفه سفید)<sup>۲</sup> برای پتانسیل نزدیکی آن به دستگاه‌های واقعی است، طول همبستگی برای این پتانسیل اتفاقی ۱ نانومتر در نظر گرفته شده است.

در شکل ۵ نمودار پتانسیل برای چاه دوگانه در حضور تأثیر این اتفاقی شدگی<sup>۳</sup> برای دامنه‌های ۰٫۰۱، ۰٫۰۳، ۰٫۰۵ و ۰٫۱ الکترون ولت آورده شده است. در شکل به راحتی تفاوت با حالت طول همبستگی صفر یا نوفه سفید دیده می‌شود، چرا در حالت نوفه سفید تنها افت و خیزهای محلی<sup>۴</sup> در هر نقطه وجود دارد و افت و خیزهای غیرمحلی وجود نخواهد داشت،

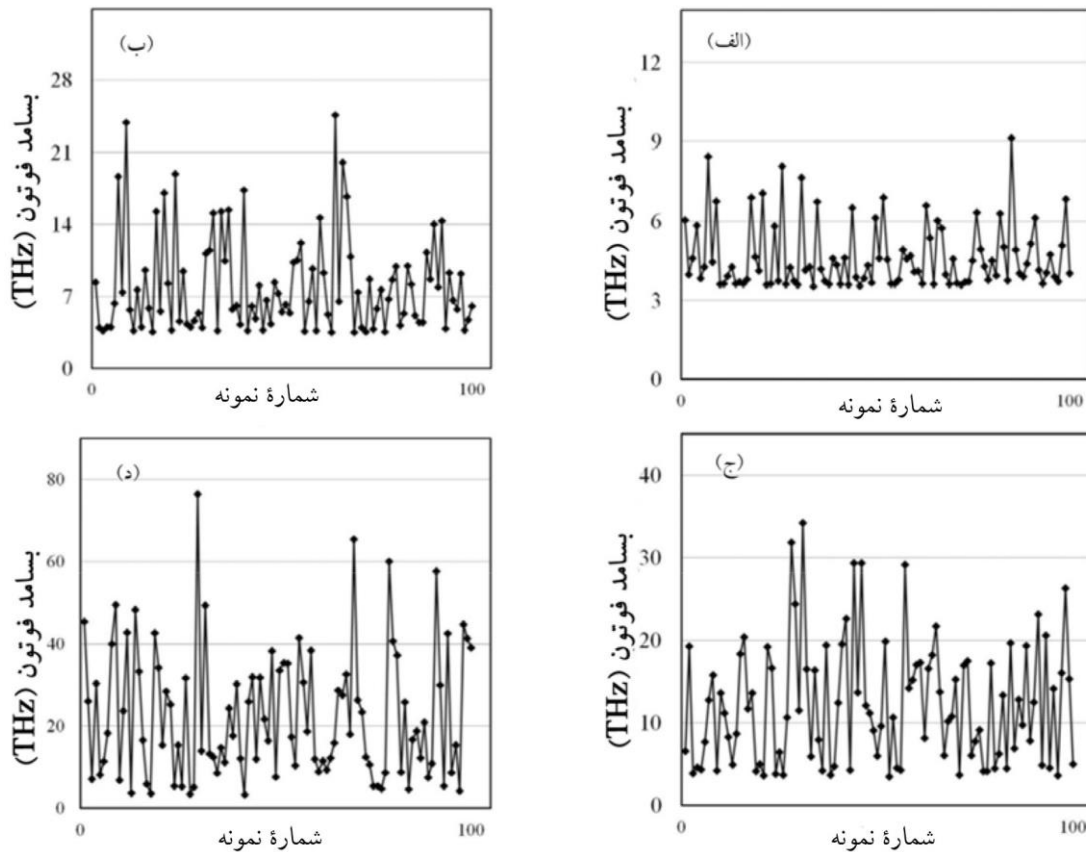
یافتن طول بهینه اهمیت می‌یابد. در شکل کوچک داخل شکل ۴ (ب) نمودار برای بسامدهای کمتر از ۱۰ تراهرتز آورده شده است. همان طور که در بالا توضیح داده شد دلیل وجود بسامد کاری این ساختار در محدوده تراهرتز، تقارن بالای آن است که باعث می‌شود اختلاف انرژی بین دو تراز اول آن نسبت به ساختاری با عدم تقارن تا ۵۰ یا حتی ۱۰۰ برابر کاهش پیدا کند. به این دلیل وجود عوامل برهم‌زننده این تقارن در این ساختارها اهمیت بسیاری پیدا می‌کند، در حالی که در ساختاری با محدوده کاری ۱۰۰ تراهرتز یا بیشتر عوامل برهم‌زننده پتانسیل تأثیر زیادی در جابه‌جایی محدوده بسامدی ندارند. به همین منظور عامل برهم‌زننده پتانسیل برای چنین ساختاری را یک پتانسیل اتفاقی<sup>۱</sup> با طول همبستگی مشخص و دامنه‌های

۲. White noise

۳. Randomness

۴. Local

۱. Random



شکل 6. نمودار بسامد بیشینه جذب برای 100 نمونه مختلف دامنه‌های پتانسیل اتفاقی (الف) 0.1 eV، (ب) 0.03 eV، (ج) 0.05 eV و (د) 0.1 eV الکترون ولت.

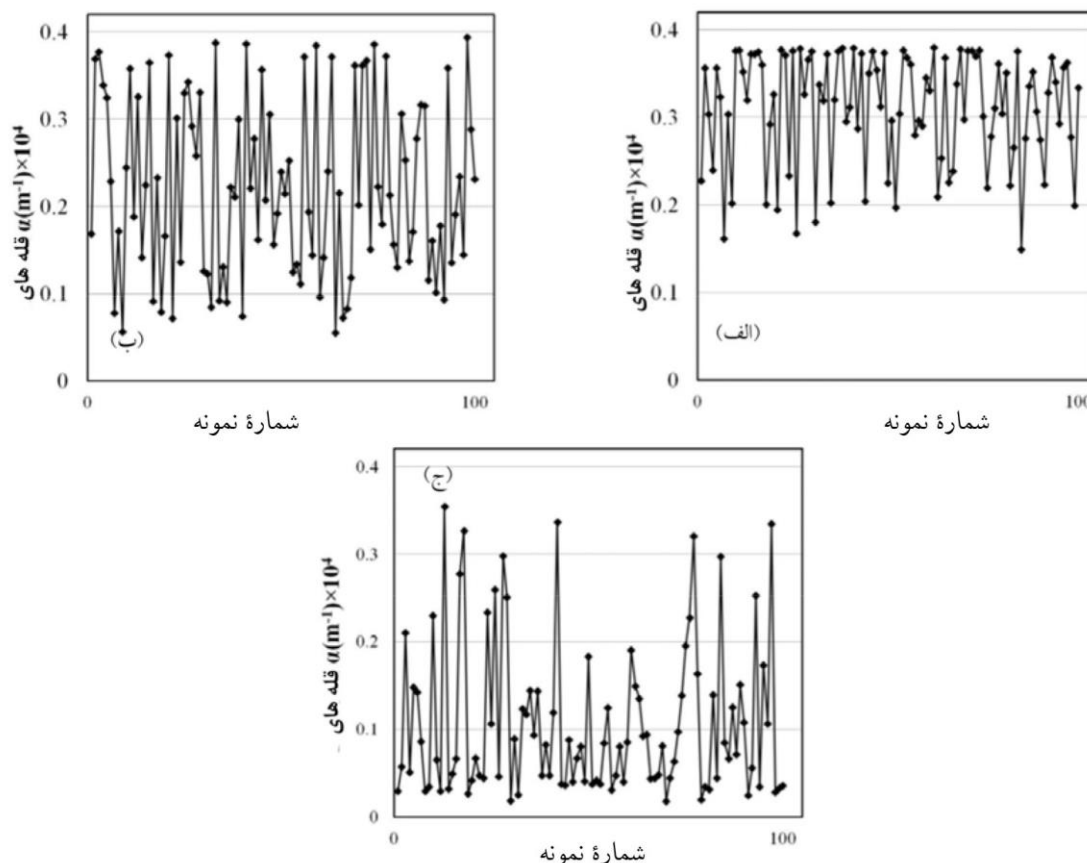
0.1 eV و 0.05 eV الکترون ولت که در شکل‌های 6 (ج) و (د) آمده است. پتانسیل از محدوده قابل کاربرد تراهرتز خارج می‌شود. بنابراین کنترل عوامل بیرونی و تأثیر گذار بر روی چاه از جمله ناخالصی‌های مواد بر روی بسامد کاری تراشه‌های تراهرتز از این نوع بسیار مهم است.

همچنین نمودار بیشینه جذب برای همان 100 نمونه فوق در شکل 7 آورده شده است. همان طور که در این شکل‌ها دیده می‌شود ضریب جذب با افزایش میزان پتانسیل اتفاقی به طور قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌یابد به طوری که از کاهش حدود 10٪ برای دامنه 0.1 eV الکترون ولت شکل 6 (الف) و به حدود 80٪ برای دامنه 0.1 eV الکترون ولت می‌رسد.

#### 4. نتیجه‌گیری

محاسبات خواص اپتیکی برای چاه پتانسیل دوگانه نشان می‌دهد که با انتخاب پارامترهای مناسب، امکان قرار گرفتن

در حالی که در این شکل‌ها افت و خیزهای غیرمحللی به راحتی دیده می‌شود. برای بررسی تأثیر پتانسیل اتفاقی در بیشینه جذب و بسامد آن یکصد نمونه اتفاقی در نظر گرفته شده و برای تمامی آنها نمودارهای جذب بر حسب بسامد به دست آورده شده است. چاه دوگانه اولیه در تمامی آنها دارای طول کل 20 نانومتر و  $r=1/5$  است. نمودار بسامد بیشینه جذب برای 100 نمونه اتفاقی و دامنه‌های پتانسیل ذکر شده در شکل 6 آمده است. بسامد بیشینه جذب برای چاه پتانسیل اولیه 3/5 تراهرتز است. همان طور که در شکل 6 (الف) دیده می‌شود برای دامنه پتانسیل اتفاقی 0.1 eV الکترون ولت این دامنه می‌تواند تا 9 تراهرتز هم افزایش یابد. البته به طور میانگین بسامد بیشینه جذب حدود 4 تراهرتز است. با افزایش دامنه این بسامد به شدت افزایش می‌یابد به طوری که برای دامنه 0.03 eV شکل 6 (ب) الکترون ولت به 25 تراهرتز هم می‌تواند برسد هرچند به طور میانگین هنوز کمتر از 10 تراهرتز است. برای دامنه‌های



شکل ۷. نمودار بیشینه جذب برای ۱۰۰ نمونه مختلف و دامنه‌های (الف) ۰٫۰۱، (ب) ۰٫۰۳ و (د) ۰٫۱ الکترون ولت.

روی پتانسیل چاه تأثیر بگذارد مانند ناخالصی و اثرات دما و فشار و غیره بر روی بسامد کاری این دستگاه تأثیر گذار است. همان طور که دیده شده تأثیر عاملی که معادل پتانسیل اتفاقی با دامنه چند درصد دامنه چاه باشد بسامد بیشینه جذب را افزایش داده و بیشینه جذب را کاهش می‌دهد که اثر نامطلوبی است و باید از آن اجتناب شود.

بیشینه جذب در محدوده بسامدی تراهرتز وجود دارد. برای چاه با پهنای کل ۲۰ نانومتر و پارامترهای آمده دیده شده که بیشینه جذب و بیشینه تغییرات ضریب شکست در بسامد ۳/۵ تراهرتز رخ می‌دهد، که این بسامد جزو بسامدهای پرکاربرد است بسیاری از حسگرها امکان کار در این ناحیه را ندارند. البته با کاهش طول چاه بسامد کاری به تدریج از محدوده تراهرتز خارج می‌شود. علاوه بر این وجود هرگونه عامل اضافی که بر

## مراجع

1. E Fortunato, P Barquinha, and R Martins, *Advanced Materials* **24**, 22 (2012) 2945.
2. B K. Hughes, J M Luther, and M C Beard, *ACS Nano* **6**, 6 (2012) 4573.
3. D Mocatta, G Cohen, J Schattner, O Millo, E Rabani, and U Banin, *Science* **332**, 6025 (2011) 77.
4. G Liu, K Guo, and C Wang, *Physica B: Condensed Matter* **407**, 12 (2012) 2334.
5. M J Karimi, A Keshavarz, and A Poostforush, *Superlattices and Microstructures* **49**, 4 (2011) 441.
6. M A Herman, and H Sitter, *"Molecular Beam Epitaxy: Fundamentals and Current Status"*, Springer Science & Business Media **7** (2012).
7. C E Morosanu, *"Thin Films by Chemical Vapour Deposition"*, Elsevier (2013).
8. B Çakır, Y Yakar, and A Özmen, *Physica B: Condensed Matter* **458** (2015) 138.
9. A Keshavarz, and M J Karimi, *Physics Letters A* **374**, 26 (2010) 2675.
10. V Prasad, and P Silotia, *Physics Letters A* **375**, 44

14. J B Baxter, and G W Guglietta, *Analytical Chemistry* **83**, 12 (2011) 4342.
15. J L Hughes, and T Jeon. *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves* **33**, 9 (2012) 871.
16. S Law, L Yu, A Rosenberg, and D Wasserman, *Nano Letters* **13**, 9 (2013) 4569.
17. S L Chuang, and D Ahn, *Journal of Applied Physics* **65**, 7 (1989) 2822.
11. B Vaseghi, G Rezaei, and T Sajadi, *Physica B: Condensed Matter* **456** (2015) 171.
12. R Ulbricht, E Hendry, J Shan, T F Heinz, and M Bonn, *Reviews of Modern Physics* **83**, 2 (2011) 543.
13. S Li, R Matsubara, T Matsusue, M Sakai, K Kudo, and M Nakamura, *Organic Electronics* **14**, 4 (2013) 1157.