

ویژه مقادیر انرژی حاملها در سیمهای کوانتومی مستطیلی با جرم مؤثر فضایی

ابراهیم صادقی

بخش فیزیک، دانشگاه یاسوج

(دریافت مقاله: ۸۱/۱/۲۱ ؛ دریافت نسخه نهایی: ۸۱/۱۰/۲۵)

چکیده

با استفاده از نظریه جرم مؤثر، ویژه مقادیر انرژی الکترونها و حفرهها در سیمهای کوانتومی با سطح مقطع مستطیلی و مربعی محاسبه شده است. در این تقریب ضمن ارائه شکل خاصی برای وابستگی مکانی جرم مؤثر حاملها، ارتفاع سد پتانسیل نیز محدود در نظر گرفته شده است. با استفاده از داده های موجود برای سیستم های $GaAs / Ga_{0.63}Al_{0.37}As$ و $Ga_{0.47}In_{0.53}As / InP$ ویژه مقادیر انرژی محاسبه و با نتایج به دست آمده از روشهای نظری دیگر مقایسه شده اند. جابه جایی انرژی نیز در سیم کوانتومی $Ga_{0.47}In_{0.53}As / InP$ با روش فوق تعیین شده و با نتایج تجربی موجود مقایسه گردیده است.

واژه های کلیدی: جرم مؤثر، سیم کوانتومی، تابع پوشا، اثرات تحدید کوانتومی

۱. مقدمه

پیشرفتهای اخیر در تکنیک رشد بلور امکان درک ساختارهای نانویی نیمه رساناها را فراهم ساخته است. این سیستمها چنان کوچک اند که خواص الکترونیکی و اپتیکی آنها به مقدار قابل ملاحظه ای از خواص این مواد در حالت کپه ای متفاوت می باشد. ساختارهای نیمه رسانای با ابعاد کوچک همانند: چاههای کوانتومی؛ سیمهای کوانتومی و نقاط کوانتومی نمونه هایی از سیستمهای فوق می باشند. در این ساختارهای فوق العاده کوچک توابع موج حاملها در داخل مواد محبوس بوده و منجر به اثراتی می شوند که آنها را اثرات تحدید کوانتومی گویند. برای مثال در سیمهای کوانتومی الکترونها محبوس شده رفتاری شبه یک - بعدی از خود نشان می دهند، به عبارت دیگر در این سیستمها حرکت الکترونها و حفرهها در دو راستا محدود بوده و فقط در امتداد محور سیم آزادانه حرکت می کنند. ویژگیهای اپتیکی چنین سیستمهایی نخستین بار در

سال ۱۹۷۴ توسط دینگل [۱] بررسی شده و همزمان با آن مطالعات نظری بر روی این ساختارها نیز گزارش شده است [۲].

برای محاسبه ویژه مقادیر انرژی سیمهای کوانتومی می بایست معادله شرودینگر را با توجه به شرایط مرزی مناسب حل کرد. در صورتی که ارتفاع سد پتانسیل نامحدود فرض شود محاسبات به آسانی انجام و ترازهای انرژی مشخص می گردند [۳]. لیکن در سیمهای کوانتومی ارتفاع سد پتانسیل محدود بوده و در نتیجه ویژه مقادیر انرژی نسبت به حالت قبل کاملاً متفاوت خواهند بود. در چنین وضعیتی بجز در حالتی خاص (سیمهای کوانتومی با سطح مقطع دایره ای و بیضوی) معادله شرودینگر جواب تحلیلی ندارد و می بایست به صورت عددی حل گردد [۴، ۵].

از طرف دیگر به دلیل اینکه اینگونه ساختارهای نیمه رسانا از دو ناحیه چاه و سد تشکیل شده اند و جرم مؤثر حاملها

در رابطه فوق $V, F, m^*(x, y)$ و E به ترتیب جرم مؤثر حاملها، تابع موج، ارتفاع سد پتانسیل و ویژه مقدار انرژی می‌باشند. جرم مؤثر، m^* ، برای حاملهای داخل ناحیه چاه، m_w ، و برای حاملهای خارج ناحیه چاه، m_b ، در نظر گرفته می‌شود. برای تعیین پتانسیل $V(x, y)$ ، ابعاد ناحیه چاه را $\frac{L_x}{2} \times \frac{L_y}{2}$ در نظر گرفته و فرض می‌کنیم که مرکز چاه بر روی محور سیم قرار داشته باشد. بنابراین برای ناحیه داخل چاه $|x| \leq \frac{L_x}{4}$ و $|y| \leq \frac{L_y}{4}$ ، و برای نقاط خارج از چاه $V(x, y) = 0$ است.

از آنجایی که معادله (۱) برای سیم کوانتومی مستطیلی جواب تحلیلی ندارد، برای حل آن می‌بایست از تقریبهای عددی استفاده نمود. یکی از روشهای مورد استفاده بسط تابع موج، F ، بر حسب مجموعه‌ای از توابع متناوب و متعامد می‌باشد.

$$F(x, y) = \sum_{lm} a_{lm} \Phi_{lm} \quad (2)$$

Φ_{lm} های رابطه فوق را ویژه توابع ذره در جعبه در نظر می‌گیریم. بنابراین برای جعبه‌ای با ابعاد $L_x \times L_y$ می‌توان نوشت:

$$\Phi_{lm}(x, y) = \Phi_l(x) \Phi_m(y) \quad (3)$$

که در آن Φ_i ها عبارتند از:

$$\Phi_l(x) = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin l\pi \left(\frac{1}{2} - \frac{x}{L_x} \right) \quad (4)$$

و

$$\Phi_m(y) = \sqrt{\frac{2}{L_y}} \sin m\pi \left(\frac{1}{2} - \frac{y}{L_y} \right) \quad (5)$$

$$l, m = 1, 2, \dots \quad (6)$$

معادله (۲) را در معادله (۱) جایگزین کرده و طرفین معادله حاصل را در $\Phi_{l'm'}$ ضرب می‌کنیم، با انتگرال‌گیری از آن بر روی سطح مقطع سیم رابطه زیر به دست می‌آید.

$$\int \Phi_{l'm'} H \Phi_{lm} dA = E \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (7)$$

طرف اول معادله (۷) را می‌توان به صورت زیر بسط داد:

$$\int \Phi_{l'm'} H \Phi_{lm} dA = \langle T_m \rangle + \langle V \rangle \quad (8)$$

عبارتهای رابطه فوق بشکل زیر بیان می‌گردند:

در این نواحی متفاوت می‌باشد، برای محاسبه ویژه مقادیر انرژی می‌توان از معادله شرودینگر در تقریب جرم مؤثر استفاده کرد. در این تقریب پیچیدگیهای ناشی از پتانسیل دوره‌ای بلور در تانسور جرم مؤثر بیان می‌گردد. برای این منظور نخست تابع موج (تابع پوشای) مناسبی که در شرایط مرزی مسئله صدق کند به عنوان پایه انتخاب شده و آنگاه نحوه تغییر جرم حاملها در مناطق چاه و سد تعیین می‌گردد. در پژوهشهای انجام شده توسط گروههای مختلف، این تغییر جرم حاملها در مرز در نظر گرفته نشده است [۵ و ۶]، و یا به صورت تابع پله‌ای فرض شده‌اند [۷ و ۸]. از آنجایی که در دنیای واقعی تغییر جرم مؤثر حاملها به صورت پیوسته صورت می‌گیرد [۹]، در این مقاله این تغییرات به شکل توابع هایپربولیکی مناسبی در نظر گرفته شده‌اند و بر اساس آن ویژه مقادیر انرژی محاسبه گردیده‌اند. در بخش ۲ این مقاله روش محاسباتی بیان شده است و در قسمت آخر مقادیر به دست آمده از این روش با نتایج روشهای دیگر و همچنین با مقادیر تجربی مقایسه شده‌اند.

۲. روش محاسبه

عملگر هامیلتونی \hat{H} شامل عملگر انرژی جنبشی \hat{T} و عملگر انرژی پتانسیل \hat{V} است. عملگر انرژی جنبشی خود شامل عملگر تکانه و جرم، $\frac{1}{2m} \hat{p}^2$ ، است و به دلیل وابستگی m^* به مکان، هرمیتی نمی‌باشد. بنابراین قبل از استفاده از آن می‌بایست توسط یک عملگر هرمیتی جایگزین گردد. عملگرهای هرمیتی متعددی برای نمایش عملگر انرژی جنبشی وجود دارد که از بین آنها می‌توان به عملگر پیشنهاد شده توسط بن دانیل، $\hat{T} = \frac{1}{2} \hat{p} \frac{1}{m} \hat{p}$ ، اشاره کرد [۱۰]. با اعمال این تصحیح، معادله شرودینگر به شکل معادله (۱) بیان می‌گردد.

سیم کوانتومی دو بعدی با سطح مقطع مستطیلی و ابعاد $L_x \times L_y$ که تحت تأثیر هیچ نیروی خارجی قرار ندارد را در نظر بگیرید. در چنین سیستمی حرکت حاملها در صفحه xy محدود است، اما در امتداد محور سیم به آزادی صورت می‌گیرد. معادله شرودینگر در تقریب جرم مؤثر به صورت زیر بیان می‌گردد [۹، ۶]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \psi + V(x, y) \psi = E \psi \quad (1)$$

در معادله (۱۴) عبارتهای $B[l', l]$ و $B[m', m]$ به شکل زیر می‌باشند:

$$B[l', l] = \int_{-\frac{L_x}{2}}^{\frac{L_x}{2}} \sin l' \pi \left(\frac{1}{2} - \frac{x}{L_x} \right) \frac{m_x^{*'}}{m_x^{*2}} \cos l \pi \left(\frac{1}{2} - \frac{x}{L_x} \right) dx, \quad (15)$$

$$B[m', m] = \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \sin m' \pi \left(\frac{1}{2} - \frac{y}{L_y} \right) \frac{m_y^{*'}}{m_y^{*2}} \cos m \pi \left(\frac{1}{2} - \frac{y}{L_y} \right) dy. \quad (16)$$

انرژی حالت پایه سیستم با استفاده از معادله (۸) و به صورت عددی محاسبه می‌گردد. به منظور به دست آوردن مقادیر دقیق انرژیها می‌بایست تعداد جملات در معادله (۲) نامحدود فرض شود، ولی در صورتی که برای سیم کوانتومی مستطیلی هر کدام از متغیرهای m, l', m' و l برابر ۱۵ در نظر گرفته شود عدم دقتی کمتر از ۰/۱٪ در انرژی نتیجه خواهد شد.

۳. نتایج

در محاسبه انرژی حاملها به پارامترهایی نظیر جرم مؤثر الکترونها و حفره‌ها در نواحی چاه و سد و همچنین ارتفاع سد پتانسیل نیاز می‌باشد. این مقادیر برای سیستمهای $GaAs/Ga_{0.63}Al_{0.37}As$ و $Ga_{0.47}In_{0.53}As/InP$ در جدول ۱ آورده شده اند [۱۱].

برای تعیین انرژی حالت پایه در ابتدا تابع موج را مشخص می‌کنیم، آنگاه با استفاده از رابطه (۸) ماتریس هامیلتونی را تشکیل می‌دهیم و سپس با قطری کردن این ماتریس و انتخاب کوچکترین ویژه مقدار آن، انرژی حالت پایه سیستم به دست می‌آید. با استفاده از روش فوق، انرژی حالت پایه حاملها برای سیمهای کوانتومی دو بعدی $GaAs/Ga_{0.63}Al_{0.37}As$ و $Ga_{0.47}In_{0.53}As/InP$ محاسبه و بر حسب سطح مقطعهای مختلف در جدولهای ۲ و ۳ آورده شده اند. در این جدولها انرژی حالت پایه الکترونها، حفره‌های سبک و حفره‌های سنگین با در نظر گرفتن اثرات جرم مؤثر در نواحی مرزی (E)، مدل ذکر شده در قسمت قبل، و همچنین برای مقایسه مقادیر محاسبه شده توسط Gangopadhyay (E_G) نیز آورده شده است [۶].

همچنان که از نتایج فوق مشاهده می‌شود انرژی حالت پایه

$$\langle T_m \rangle = \frac{-\hbar^2}{2m_0} \int_{-\frac{L_x}{2}}^{\frac{L_x}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \phi_{l'}(x) \phi_{m'}(y) \left[\nabla \left(\frac{1}{m^*} \right) \cdot \nabla (\phi_l(x) \phi_m(y)) \right] dx dy, \quad (9)$$

$$\langle T \rangle = \frac{-\hbar^2}{2m_0} \int_{-\frac{L_x}{2}}^{\frac{L_x}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \phi_{l'}(x) \phi_{m'}(y) \left(\frac{1}{m^*} \right) \nabla^2 (\phi_l(x) \phi_m(y)) dx dy, \quad (10)$$

$$\langle V \rangle = \int_{-\frac{L_x}{2}}^{\frac{L_x}{2}} \int_{-\frac{L_y}{2}}^{\frac{L_y}{2}} \phi_{l'm'}(x, y) V \phi_{lm}(x, y) dx dy. \quad (11)$$

برای محاسبه عبارت (۹) می‌بایست نحوه تغییرات جرم مؤثر حاملها تعیین گردد. در سیستمهای چندگانه، همانند چاه کوانتومی و سیم کوانتومی، ساختار هر لایه توسط دو ویژگی، یکی جرم مؤثر حاملها و دیگری انرژی لبه نوار مشخص می‌گردد. حضور لایه‌های مختلف سیستم را می‌توان در رفتار الکترونها منعکس کرد به این صورت که الکترونها را در محیطی پیوسته با جرم مؤثر و متغیر $m^*(x, y)$ و تحت پتانسیل $V(x, y)$ در نظر گرفت. بنابراین با توجه به شکل سیستم مورد نظر مدلهای مختلفی را می‌توان برای تغییرات جرم ارائه کرد اما از آنجایی که تابع \tanh دارای رفتار همواری می‌باشد، در اینجا تغییرات جرم مؤثر را به صورت زیر در نظر گرفته‌ایم:

$$m_v^* = m_w + \frac{1}{2} (m_b - m_w) \left[\nu + \tanh \left(\nu - \frac{L_v}{4} \right) + \tanh \left(-\nu - \frac{L_v}{4} \right) \right], \quad (12)$$

که در آن $\nu = x, y$ است. بر طبق رابطه فوق، مشتق m^* به صورت زیر بیان می‌گردد:

$$m_v^{*'} = \frac{1}{2} (m_b - m_w) \left[\tanh \left(\nu + \frac{L_v}{4} \right) - \tanh \left(\nu - \frac{L_v}{4} \right) \right]. \quad (13)$$

با استفاده از عبارت فوق، شیب m^* محاسبه می‌گردد و با جایگزینی آن در معادله (۹) رابطه زیر به دست خواهد آمد:

$$\langle T_m \rangle = \frac{-\hbar^2 \pi}{m_0} \left\{ \left(\frac{1}{L_x} \delta_{mm'} \right) B[l', l] + \left(\frac{m}{L_y} \delta_{ll'} \right) B[m', m] \right\}. \quad (14)$$

جدول ۱. ثابتهای فیزیکی مواد، m_w جرم مؤثر حاملها در ناحیه چاه، m_b جرم مؤثر در ناحیه سد و V_o ارتفاع سد پتانسیل است.

مواد	الکترون			حفره سنگین			حفره سبک		
	m_w	m_b	V_o (meV)	m_w	m_b	V_o (meV)	m_w	m_b	V_o (meV)
Ga. _{۰.۴۷} In. _{۰.۵۳} As / InP	۰/۰۴۲	۰/۰۷۹	۲۴۰/۰	۰/۴۷	۰/۶۱	۳۷۰/۶	۰/۰۳۸	۰/۱۲	۳۷۰/۶
GaAs / Ga. _{۰.۶۳} Al. _{۰.۳۷} As	۰/۰۶۶۵	۰/۰۸۵۸	۲۷۶/۰	۰/۳۷۷۴	۰/۳۸۶۵	۱۸۴/۰	۰/۰۹۰۵	۰/۱۱۰۷	۱۸۴/۰

جدول ۲. ویژه مقادیر انرژی حاملها در سیم کوانتومی GaAs / Ga._{۰.۶۳}Al._{۰.۳۷}As. E انرژی محاسبه شده در این مقاله E_G انرژی محاسبه شده توسط Gangopadhyay بر حسب (meV) است.

سطح مقطع (Å ^۲)	الکترون		حفره سنگین		حفره سبک	
	E	E_G	E	E_G	E	E_G
۵۰×۵۰	۱۶۵/۰۹	۱۵۵/۲	۴۶/۶۰	۴۶/۵۷	۱۲۰/۰۸	۱۱۰/۶۳
۱۰۰×۵۰	۱۱۵/۲۵	۱۱۱/۲	۳۱/۰۲	۳۱/۰	۸۳/۷۰	۷۹/۷۷
۱۰۰×۱۰۰	۶۳/۶۷	۶۳/۴۷	۱۵/۰۵	۱۵/۰۳	۴۶/۱۵	۴۶/۰۲

جدول ۳. ویژه مقادیر انرژی حاملها در سیم کوانتومی Ga._{۰.۴۷}In._{۰.۵۳}As / InP. E انرژی محاسبه شده در این مقاله E_G انرژی محاسبه شده توسط Gangopadhyay بر حسب (meV) است.

سطح مقطع (Å ^۲)	الکترون		حفره سنگین		حفره سبک	
	E	E_G	E	E_G	E	E_G
۵۰×۵۰	۱۸۰/۷	۱۶۲/۴	۴۳/۵	۴۳/۴	۱۸۷/۸	
۱۰۰×۵۰	۱۲۹/۷	۱۲۱/۵	۲۸/۴	۲۸/۳	۱۳۶/۸	
۱۰۰×۱۰۰	۷۶/۶	۷۶/۰	۱۳/۲	۱۳/۱	۸۴/۶	

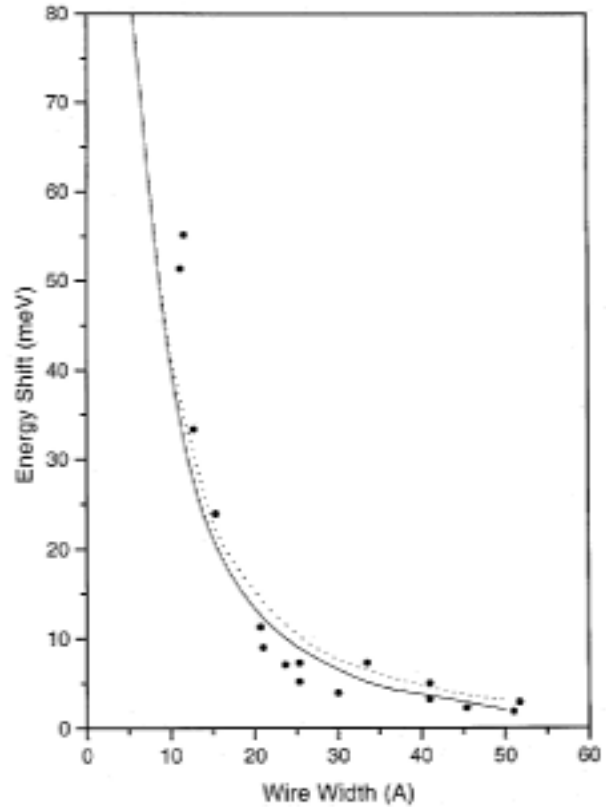
حفره‌های سنگین به ترتیب حدود ۹/۰ meV و ۱ meV می‌باشد. همچنان که از جدولهای فوق دیده می‌شود با افزایش سطح مقطع سیم، تفاوت انرژیها کاهش می‌یابد. از طرف دیگر انرژی حالت پایه حاملها به ازای ابعاد مختلف سیم متفاوت است و با مقدار کپه ای آن نیز تفاوت دارد، به همین منظور جابه جایی در انرژی الکترونها به دلیل کوچک شدن ابعاد سیم نیز مشخص گردیده است. جابه جایی

هنگامی که اثرات مرز در نظر گرفته شود افزایش می‌یابد. میزان افزایش انرژی در سیمهای مختلف، متفاوت بوده و بستگی به عوامل مختلفی از قبیل جرم مؤثر حاملها، ابعاد سیم و ارتفاع سد پتانسیل دارد. برای سیم کوانتومی GaAs / Ga._{۰.۶۳}Al._{۰.۳۷}As این افزایش برای الکترونها، حفره‌های سنگین و حفره‌های سبک به طور میانگین حدود ۴/۷ meV، ۰/۰۳ meV و ۴/۵ meV و در سیم کوانتومی Ga._{۰.۴۷}In._{۰.۵۳}As / InP برای الکترونها و

انرژی الکترون در سیم کوانتومی $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}/\text{InP}$ با ضخامت ۵ nm بر حسب پهناي سیم در شکل ۱ نشان داده شده است.

همچنان که از شکل فوق دیده می شود با افزایش پهناي سیم، جابه جایی انرژی کاهش می یابد. برای مقایسه، مقادیر محاسبه شده توسط Gangopadhyay [۶]، منحنی نقطه چین، و نتایج تجربی Notomi [۱۲]، دایره های توپر، نیز در شکل ۱ آورده شده است. Gangopadhyay و همکارش با استفاده از روش تابع پوشا، اما بدون در نظر گرفتن تغییرات جرم مؤثر در مرز، جابه جایی انرژی را محاسبه کرده اند. برای پهناي بزرگ، خطای آزمایش نسبتاً بزرگ می باشد هر چند نتیجه به دست آمده از این روش از میان نقاط تجربی پراکنده عبور کرده و به انرژیهای پایتتر متمایل می باشد.

در این مقاله اثر تغییرات پیوسته جرم مؤثر حاملها در مرز بر روی ترازهای انرژی سیمهای کوانتومی $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.63}\text{Al}_{0.37}\text{As}$ و $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}/\text{InP}$ بررسی گردید. نتایج نشان می دهند که ترازهای انرژی، بالاتر از مقادیر محاسبه شده بدون اثر مرز می باشند، و ویژه مقادیر انرژی الکترونها و حفره های سبک نسبت به حفره های سنگین دارای تفاوت بیشتری هستند.



شکل ۱. جابه جایی انرژی الکترون برای سیم کوانتومی $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}/\text{InP}$ با ضخامت ۵ nm بر حسب پهناي سیم. نقاط توپر کار تجربی Notomi، خط چین کار انجام شده توسط Gangopadhyay و منحنی ممتد نتایج محاسبات حاضر با توجه به اثر مرز است.

مراجع

1. R Dingle, W Wiegmann, C H Henry, *Phys. Rev. Lett.*, **33** (1974) 827.
2. H Sakaki, *Jap. J. Appl. Phys.*, **19** (1980) L735.
3. J Lee, *J. Appl. Phys.*, **37** (1994) 523.
4. B R Nag and S Gangopadhyay, *Phys. Stat. Sol. (a)*, **179** (1993) 463.
5. D Gershoni, H Temkin and G J Dolan, et al., *Appl. Phys. Lett.*, **53** (1988) 995.
6. S Gangopadhyay and B R Nag, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **195** (1996) 123.
7. B Gerlach, J Wusthoff and M O Dzero, et al., *Phys. Rev. B* **58** (1998) 10586.
8. M Barati and E Sadeghi, *Ir. J. Sci. & Tech. (A)*, **24**, No. 4 (2000) 385.
9. L Li Tsung, J Kuhn Kelin, *Phys. Rev. B* **47** (1993) 12760.
10. D J BenDaniel, C B Duke, *Phys. Rev.* **152** (1966) 683.
11. S Gangopadhyay, B R Nag, *Nanotechnology*, **8**, No.1 (1997) 14.
12. M Notomi, M Naganuma, T Nishida, et al., *Appl. Phys. Lett.*, **58** (1991) 720.