

t.mardani@iaufarsan.ac.ir :

(دریافت مقاله: ۱۳۹۰/۷/۹؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۱/۷/۱۸)

ی

در ابتدای کار توجه ما روی معادله شرودینگر سه بعدی با جرم مؤثر ثابت است که به صورت زیر داده می شود:

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

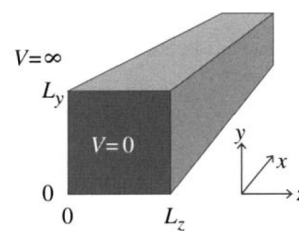
که در آن m^* جرم مؤثر الکترون و $V(x, y, z)$ انرژی پتانسیل است. بسط معادله (۱) با استفاده از جملات اجزای محدود با این اطمینان که طول های δy و δz به گونه ای کوچک هستند که تقریب درست است، به معادله زیر می انجامد:

$$\begin{aligned} & (\delta y)^2 [\psi(y, z + \delta z) + \psi(y, z - \delta z)] \\ & + (\delta z)^2 [\psi(y + \delta y, z) + \psi(y - \delta y, z)] \\ & - \left[\frac{-2m^*}{\hbar^2} (E_{y,z} - V(y, z)) (\delta y \delta z)^2 + 2((\delta y)^2 + (\delta z)^2) \right] \times \psi(y, z) = 0. \end{aligned} \quad (2)$$

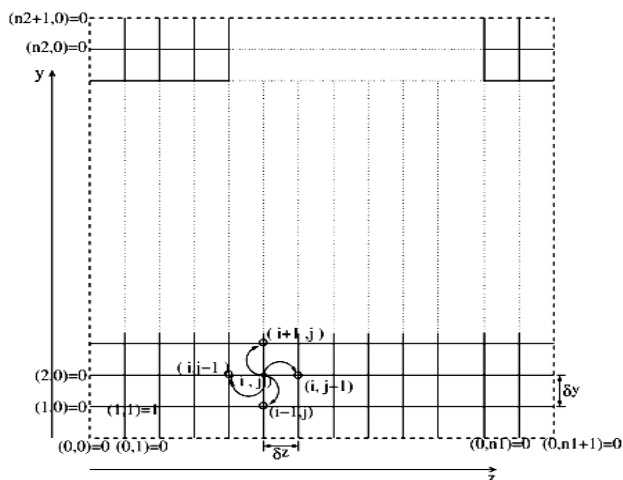
تابع موج بر حسب اجزای دوبعدی یک آرایه و براساس زیر

در این کار روش اجزاء محدود برای حل معادله شرودینگر مستقل از زمان با جرم مؤثر ثابت توسعه داده شده است. علاقه به حل این معادله با این روش توسعه حل عددی است زیرا این روش سریع، راحت و سبک برای رایانه از نظر حافظه است. روش های گوناگون محاسباتی برای محاسبه ویژه مقادیر انرژی به کار می رود. برای نمونه، روش بسط تابع موج بر حسب سری توابع دوره ای متعامد [۱ و ۲]، بسط فوریه [۳ و ۴]، بسط موج تخت [۵]، نظریه $k \cdot p$ [۶] و اجزای محدود [۷]. روش های دیگر در مقایسه با اجزای محدود ملال آور و زمانبر هستند.

سیستم تحت بررسی ساده ترین هندسه را دارد. این یک سیم کوانتمی (QWW) عمیق نامحدود با سطح مقطع مربع است که در شکل ۱ نمایش داده شده است [۸ و ۹].



شکل ۱. سیم کوانتومی نامتناهی با سطح مقطع مربع.



شکل ۲. نمایش سطح مقطع سیم و گام‌های تکرار در محاسبه.

حل‌ها مطابق با زیر است:

$$\psi(y, z) \rightarrow 0 \text{ برای } z \rightarrow \pm\infty, \tag{۷}$$

$$\psi(y, z) \rightarrow 0 \text{ برای } y \rightarrow \pm\infty. \tag{۸}$$

با استفاده از این شرایط مرزی تابع موج را در تمامی نقاط خارج از سطح مقطع سیم صفر در نظر می‌گیریم (همان‌طور که در شکل ۲ به وسیله خط چین‌ها مشخص شده است). برای سادگی مسأله $\delta z = \delta y$ فرض می‌شود.

بردار ستونی ψ شامل $n = [n_1 \times n_2] - 1$ درایه خواهد بود، که شامل تمام درایه‌های مجهول است و توسط معادله (۹) داده می‌شود. این شامل n_2 بلوک که هر کدام n_1 درایه دارند می‌باشد، به غیر از بلوک اول که شامل $n_1 - 1$ درایه است، زیرا $\psi_{1,1} = 1$ معلوم است:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_{1,2} \\ \psi_{1,3} \\ \vdots \\ \psi_{1,n_1} \\ \psi_{2,1} \\ \vdots \\ \psi_{n_2,n_1} \end{pmatrix}. \tag{۹}$$

ماتریس A یک ماتریس پراکنده کم درایه ($n \times n$) خواهد بود. بهترین روش برای نمایش این ماتریس، استفاده از زیرماتریس‌ها خواهد بود. اینجا n_2 بلوک از زیر ماتریس‌ها وجود خواهد داشت، که به صورت زیر نوشته می‌شود:

نویس‌های i و j به صورت $\psi_{i,j}$ ترسیم می‌شود. مقدار δz و δy بر حسب مقادیر ابعاد سطح مقطع سیم L_y و L_z انتخاب می‌شوند. تقسیم ابعاد سطح مقطع به وسیله δz و δy به ترتیب تعداد $n_1 + 2$ و $n_2 + 2$ ستون و سطر را مانند شکل ۲ مشخص می‌کند. بازنویسی معادله (۲) بر حسب زیر نویس‌های i و j به معادله زیر می‌انجامد:

$$(\delta y)^2 [\psi_{i,j+1} + \psi_{i,j-1}] + (\delta z)^2 [\psi_{i-1,j} + \psi_{i+1,j}] - k\psi_{i,j} = 0, \tag{۳}$$

به طوری که

$$k = \frac{-2m^*}{\hbar^2} (E_{y,z} - V(y, z)) (\delta y \delta z)^2 + 2((\delta y)^2 + (\delta z)^2) \tag{۴}$$

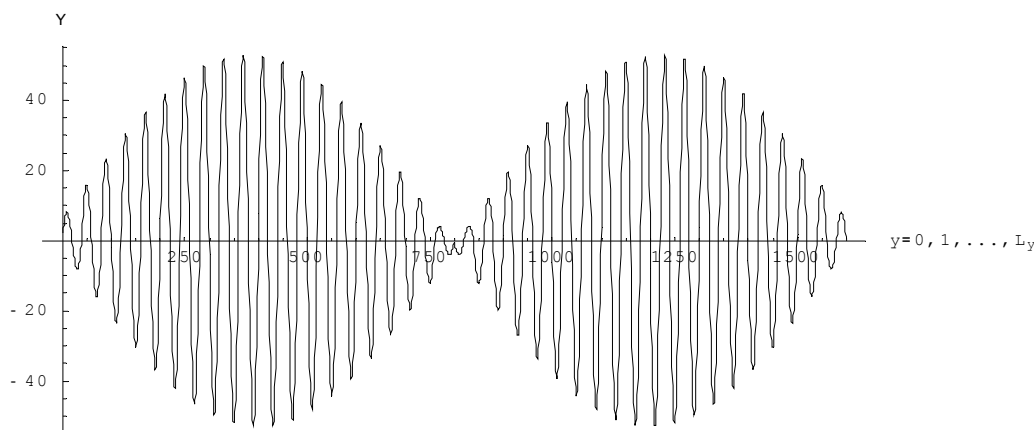
معادله (۳) نشان می‌دهد که مقدار تابع موج در هر نقطه، به چهار نقطه از شبکه که آن را احاطه کرده‌اند، بستگی دارد. برای این منظور انتخاب یک مقدار اولیه برای حل معادلات ضروری است. به دلیل آنکه با تابع موج بهنجار نشده کار خواهیم کرد مقدار اولیه می‌تواند هر مقدار غیر صفر باشد. مقدار زیر را برای سادگی انتخاب می‌کنیم:

$$\psi_{1,1} = 1. \tag{۵}$$

می‌توان دسته معادلات همگن به دست آمده را در یک معادله ماتریسی به صورت زیر خلاصه کرد [۸]

$$A\psi = S, \tag{۶}$$

به طوری که A ماتریسی از ضرایب تابع موج است و ψ یک بردار ستونی از نقاط تابع موج است. S بردار ستونی شامل جملات چشمه می‌باشد. شرایط مرزی استاندارد اولیه در تمامی



شکل ۳. مقدار صحیح انرژی در این تابع موج متقارن رخ می‌دهد و مقدار آن $28.05/8$ (meV) است.

درست فیزیکی با استفاده از ترسیم برش‌های متوالی از تابع موج در صفحه است. این برش‌ها را می‌توان از نظر ریاضی در مختصاتی که اختیار کرده‌ایم صفحات $y=0, y=1, \dots$ و $y=L_y$ در نظر گرفت. در این روش عددی می‌یابیم، تابع موجی که شکل کاملاً متقارن دارد در انرژی صحیح اتفاق می‌افتد و سایر انرژی‌ها در همسایگی انرژی صحیح، تابع موجی نامتقارن به دست می‌دهند، یک آشفتگی ناشی از مقدار اولیه که به صورت اختیاری انتخاب می‌شود، در تابع موج ظاهر می‌گردد. این آشفتگی در مقدار صحیح انرژی پدیدار نمی‌شود. در شکل‌های ۳ تا ۶ این واقعیت را برای یک سیم کوانتومی $40 \text{ \AA} \times 40 \text{ \AA}$ در دومین حالت برانگیخته و همچنین در جدول ۱ ویژه مقادیر انرژی حاصل از این روش عددی را برای سایر حالت‌ها آورده‌ایم. از مقایسه جواب‌ها در می‌یابیم که روش ما در این محاسبه دارای دقت خوبی است و می‌توان این روش را برای سایر سیستم‌ها شامل سیم کوانتومی با مقطع مثلث و حتی تعمیم به سه بعد یعنی برای نقاط کوانتومی (QDs) نیز به کار گرفت. در این محاسبه مقدار $\delta y = \delta z = 1 \text{ \AA}$ و $m^* = 0.067m_0$ که جرم سکون الکترون است، اختیار شده‌اند. رایانه‌ای که محاسبات به وسیله آن انجام شده، یک رایانه شخصی شامل پردازنده ۲GHz و حافظه ۵۱۲MB است. اگر بعد سیستم تحت مطالعه (QD یا QWW) به طور خطی افزایش یابد زمان محاسبه ویژه مقادیر نیز به طور خطی افزایش می‌یابد.

$$A = \begin{matrix} \overbrace{\hspace{10em}}^{n_y \text{ بلوک}} \\ \begin{pmatrix} \beta_1 & I_1 & \circ & \dots & \dots & \circ \\ I_1 & \beta & I & \circ & \dots & \circ \\ \circ & I & \beta & I & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \circ \\ \circ & \ddots & \circ & I & \beta & I \\ \circ & \dots & \dots & \circ & I & \beta \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (10)$$

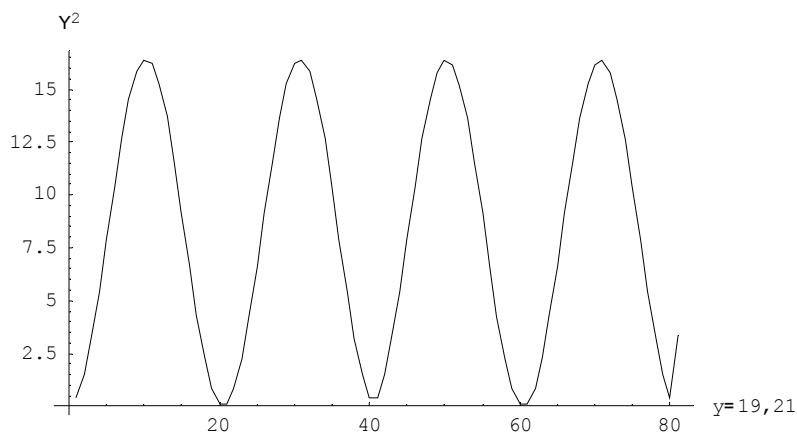
زیر ماتریس‌های I, I_1, I_1, β و β را می‌توان در مرجع [۹] یافت.

ماتریس S یک بردار ستونی شامل n درایه‌ای و به شکل زیر است:

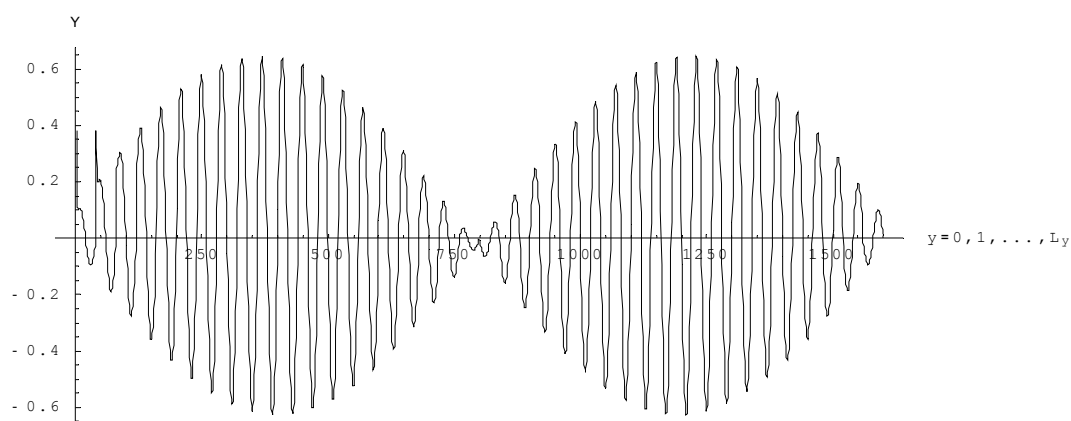
$$S = \begin{pmatrix} -\psi_{1,1} \\ \circ \\ \vdots \\ \circ \\ -\psi_{1,1} \\ \circ \\ \vdots \\ \circ \end{pmatrix} \quad (11)$$

بخش عمده مطالعه را نوشتن برنامه رایانه‌ای تشکیل می‌دهد. با داشتن شکل کلی این ماتریس‌ها چندین نرم افزار محاسباتی برای حل این معادلات وجود دارد که در اینجا ما از MATHEMATICA استفاده کرده‌ایم.

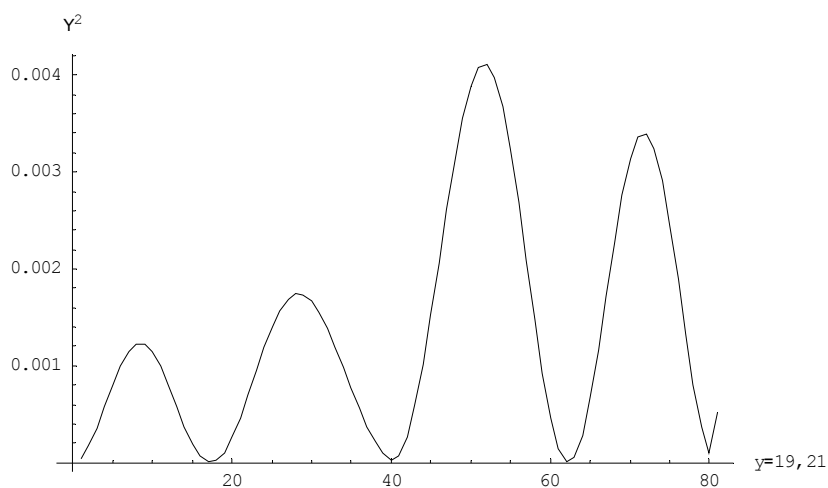
نگاه جدید ما که در این کار معرفی شده است، یافتن انرژی‌های



شکل ۴. از نظر هندسی این قسمت از تابع احتمال در برش، در قسمت وسط سطح مقطع سیم اتفاق افتاده است. تقارن موجود در این شکل بیان کننده مقدار صحیح انرژی است.



شکل ۵. کمتر از مقدار صحیح شکل تابع موج را نامتقارن ساخته است. اثر مقدار اختیاری اولیه در ابتدای تابع موج بصورت آشفتگی دیده می‌شود.



شکل ۶. از نظر هندسی این قسمت از تابع احتمال در برش، در قسمت وسط سطح مقطع سیم اتفاق افتاده است. عدم تقارن موجود در این شکل بیان کننده اختلاف انرژی به مقدار ۱ (meV) و کمتر از مقدار صحیح است.

جدول ۱. مقایسه نتایج حاصل از روش عددی و تحلیلی برای یک QWW $40\text{\AA} \times 40\text{\AA}$ نامحدود.

حالت	مقادیر عددی (meV)	مقادیر تحلیلی (meV)
پایه	۷۰۰/۹	۷۰۱/۵
اول	۱۷۵۳/۱	۱۷۵۳/۸
دوم	۲۸۰۵/۸	۲۸۰۶/۲
سوم	۴۵۵۹/۶	۴۵۶۰/۰
چهارم	۵۹۶۱/۸	۵۹۶۳/۲
پنجم	۶۳۱۳/۱	۶۳۱۳/۹

جدول ۲. مقایسه زمان محاسبه برای QWW و QD با ابعاد مشابه بر حسب ثانیه.

QWW	$12\text{\AA} \times 12\text{\AA}$	$n = 143$	$\tau = 3/1$ (s)
QD	$12\text{\AA} \times 12\text{\AA} \times 12\text{\AA}$	$n = 1727$	$\tau = 296/6$ (s)

مقایسه ساده در این مورد در جدول ۲ آمده است. در این جدول $n_x = n_y = n_z = 12$ و t زمان اجرای برنامه به ثانیه است.

اما زمان محاسبه برای نقطه کوانتمی در مقایسه با سیم کوانتمی بسیار زیاد است، زیرا ماتریس محاسبه برای QD در سه بعد به دست می‌آید $(n = (n_x * n_y * n_z) - 1)$ در صورتی که برای QWW در دو بعد $(n = (n_x * n_y) - 1)$ محاسبه می‌شود. یک

7726.

7. A Endoh, S Sasa, H Arimoto, and S Muto, *J. Appl. Phys.* **86** (1999) 6249.
8. P Harrison, "Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics", John Wiley & Sons (2000).
9. D El-Moghraby, R G Johnson, and P Harrison. *Computer Physics Communications* **150** (2003) 235.

1. S Gangopadhyay and B R Nag, *J. Appl. Phys.* **81** (12) (1997) 7885.
2. S Gangopadhyay and B R Nag, *Nanotechnology* **8** (1997) 14.
3. M Tadić and Z Ikonić, *Phys. Rev. B* **50** (11) (1994).
4. M Tadić, Z Ikonić, and V Milanovic, *Superlatt. Micro* **23** (1998) 369.
5. S Li and J Xia, *J. Appl. Phys.* **89** (2001) 3434.
6. O Stier and D Bimberg, *Phys. Rev. B* **55** (1997)